

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Тольяттинский государственный университет»

**Автор-составитель**

**Нагорнов Ю.С.**

## **101 вопрос о нанотехнологиях**

учебное пособие

**Тольятти**

**2012**

**УДК 620.3**

**ББК 22.3**

**Н 16**

**Печатается по решению научно-методического  
совета ФГБОУ ВПО «ТГУ»**

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг.

Рецензент: Остапенко Г.И. – доктор химических наук, профессор кафедры «Химия и химические технологии» ФГБОУ ВПО «ТГУ»

Рецензент: Дышловенко П.Е. – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем автоматизированного проектирования ФГБОУ ВПО «УлГТУ»

**Н 16** Нагорнов Ю.С. 101 вопрос о нанотехнологиях. Тольятти: ТГУ, 2012. 110 с.

**ISBN 978-5-88504-087-7**

В учебном пособии представлена современная научная информация о достижениях нанотехнологий в области инструментария и материаловедения. Приводится систематизация материалов нанотехнологий и технологий их получения. Достаточно подробно описываются принципы работы атомно-силового и электронного микроскопов, а также их технические особенности. Описаны основные квантовые эффекты, которые находят свое применение в нанотехнологиях. Кроме этого большое внимание уделяется вопросам будущего применения нанотехнологий в быту и технике. В последних вопросах освещаются достижения российской науки и техники, а также вопросы создания собственного нанотехнологического производства.

**УДК 620.3**

**ББК 22.3**



© Нагорнов Ю.С.

© ФГБОУ ВПО «ТГУ»

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Вопрос 1.</b> Почему автор решил писать эту книгу?	6
<b>Вопрос 2.</b> Когда возникли нанотехнологии?	6
<b>Вопрос 3.</b> Что означает приставка «нано»?	7
<b>Вопрос 4.</b> Что означает термин «нанотехнологии»?	7
<b>Вопрос 5.</b> Что такое «квантовая» физика?	8
<b>Вопрос 6.</b> Что такое квантовая точка, яма, нить?	8
<b>Вопрос 7.</b> Что такое фотон?	9
<b>Вопрос 8.</b> Что такое волна де Бройля?	10
<b>Вопрос 9.</b> Что такое корпускулярно-волновой дуализм?	11
<b>Вопрос 10.</b> Что такое волновая функция?	11
<b>Вопрос 11.</b> Что такое принцип неопределенности Гейзенберга?	12
<b>Вопрос 12.</b> Что такое атом по Бору?	13
<b>Вопрос 13.</b> Что такое энергия электрона в атоме?	14
<b>Вопрос 14.</b> Что такое принцип Паули?	15
<b>Вопрос 15.</b> Как возникают энергетические зоны в кристаллах?	15
<b>Вопрос 16.</b> Что такое валентная зона и зона проводимости?	17
<b>Вопрос 17.</b> Как отличаются энергетические зоны у диэлектриков, металлов и полупроводников?	17
<b>Вопрос 18.</b> Как проводит ток полупроводник?	18
<b>Вопрос 19.</b> Что такое потенциальная яма?	19
<b>Вопрос 20.</b> Почему энергия в потенциальной яме квантуется?	20
<b>Вопрос 21.</b> Что такое потенциальный барьер?	21
<b>Вопрос 22.</b> Что такое туннелирование?	22
<b>Вопрос 23.</b> Как создать потенциальный барьер и яму?	24
<b>Вопрос 24.</b> Что такое «эффект бабочки»?	24
<b>Вопрос 25.</b> Какие наноматериалы существуют?	25
<b>Вопрос 26.</b> Что такое наночастицы?	26
<b>Вопрос 27.</b> Что такое фуллерен?	27
<b>Вопрос 28.</b> Что такое нанотрубки?	27
<b>Вопрос 29.</b> Что такое нанопористые вещества?	28
<b>Вопрос 30.</b> Что такое нанодисперсии?	29
<b>Вопрос 31.</b> Что такое наноструктурированные поверхности и пленки?	29
<b>Вопрос 32.</b> Что такое гетероструктура?	30
<b>Вопрос 33.</b> Какие технологии существуют для создания наноматериалов и наноструктур?	30
<b>Вопрос 34.</b> Что такое эпитаксия?	31
<b>Вопрос 35.</b> Что такое литография?	32
<b>Вопрос 36.</b> Какие наноматериалы самые перспективные?	32
<b>Вопрос 37.</b> Какие углеродные материалы существуют?	33
<b>Вопрос 38.</b> Как получают углеродные нанотрубки и родственные материалы?	37

<b>Вопрос 39.</b> Каков механизм роста углеродных нанотрубок?	37
<b>Вопрос 40.</b> Как будут применяться углеродные нанотрубки?	39
<b>Вопрос 41.</b> Как передвигаются многостенные углеродные нанотрубки?	41
<b>Вопрос 42.</b> Как в химии могут применяться углеродные нанотрубки?	42
<b>Вопрос 43.</b> Могут ли углеродные нанотрубки проводить ток?	43
<b>Вопрос 44.</b> Как использовать высокую проводимость углеродных нанотрубок?	45
<b>Вопрос 45.</b> Что такое просвечивающий электронный микроскоп?	45
<b>Вопрос 46.</b> Что такое растровый электронный микроскоп?	47
<b>Вопрос 47.</b> Что такое сканирующий атомно-силовой микроскоп?	49
<b>Вопрос 48.</b> Как измеряется сила взаимодействия зонда с поверхностью в атомно-силовом микроскопе?	50
<b>Вопрос 49.</b> Как организован процесс измерения в атомно-силовом микроскопе?	51
<b>Вопрос 50.</b> Что такое зонд в атомно-силовом микроскопе?	53
<b>Вопрос 51.</b> Что такое контактные методы в атомно-силовом микроскопе?	56
<b>Вопрос 52.</b> Что такое полуконтактные методы в атомно-силовом микроскопе?	57
<b>Вопрос 53.</b> Что такое методы постоянной высоты и постоянной силы?	58
<b>Вопрос 54.</b> Что такое контактный метод рассогласования?	59
<b>Вопрос 55.</b> Что такое метод латеральных сил?	60
<b>Вопрос 56.</b> Что такое метод отображения фазы?	61
<b>Вопрос 57.</b> Что такое метод Кельнина?	62
<b>Вопрос 58.</b> Что такое наноэлектроника?	64
<b>Вопрос 59.</b> Что такое закон Мура?	64
<b>Вопрос 60.</b> Что такое транзистор на одноэлектронном туннелировании?	66
<b>Вопрос 61.</b> Что такое приборы на резонансном туннелировании?	67
<b>Вопрос 62.</b> Что такое квантовый компьютер?	68
<b>Вопрос 63.</b> Что такое квантовая оптоэлектроника?	69
<b>Вопрос 64.</b> Как работает светодиод?	70
<b>Вопрос 65.</b> Как работает лазер?	71
<b>Вопрос 66.</b> Что такое индуцированное излучение?	73
<b>Вопрос 67.</b> Что такое МЭМС?	73
<b>Вопрос 68.</b> Что такое силовые элементы МЭМС?	74
<b>Вопрос 69.</b> Что такое сенсоры, наносенсоры?	76
<b>Вопрос 70.</b> Что такое Молекулярный Сортирующий Ротор?	76
<b>Вопрос 71.</b> Применяются ли в МЭМС углеродные нанотрубки?	77
<b>Вопрос 72.</b> Что такое проект «Умная пыль»?	79
<b>Вопрос 73.</b> Каковы области применения «умной пыли»?	80
<b>Вопрос 74.</b> Что такое проект «электронный нос»?	80
<b>Вопрос 75.</b> Каковы области применения «электронного носа»?	81
<b>Вопрос 76.</b> Что такое проект «электронный язык»?	82
<b>Вопрос 77.</b> Что такое проект «видеоочки»?	82
<b>Вопрос 78.</b> Какие источники энергии могут применяться в нанотехнологиях?	83

<b>Вопрос 79.</b> Что такое нановискер?	83
<b>Вопрос 80.</b> Как работает генератор энергии на нановискерах?	84
<b>Вопрос 81.</b> Что такое радиационно-стимулированный источник питания?	86
<b>Вопрос 82.</b> Применяются ли в обычных батарейках наночастицы?	86
<b>Вопрос 83.</b> Какие методы моделирования существуют в нанотехнологиях?	88
<b>Вопрос 84.</b> Что такое визуальное моделирование?	89
<b>Вопрос 85.</b> Что такое численное моделирование?	89
<b>Вопрос 86.</b> Что такое молекулярная механика?	89
<b>Вопрос 87.</b> Что такое молекулярная динамика?	90
<b>Вопрос 88.</b> Что такое квантовая химия?	92
<b>Вопрос 89.</b> Какие вычислительные методы используют в квантовой химии?	93
<b>Вопрос 90.</b> Что такое приближение Борна-Оппенгеймера в квантовой химии?	93
<b>Вопрос 91.</b> Что такое приближение Хартри-Фока в квантовой химии?	94
<b>Вопрос 92.</b> Что такое приближение Молекулярных орбиталей в квантовой химии?	95
<b>Вопрос 93.</b> Что такое метод Монте-Карло?	97
<b>Вопрос 94.</b> Для чего применяется метод Монте-Карло?	97
<b>Вопрос 95.</b> Кто занимается нанотехнологиями в России?	98
<b>Вопрос 96.</b> Кто стоял у истоков нанотехнологий в России?	99
<b>Вопрос 97.</b> Какие критерии используются при создании производств в области нанотехнологий?	99
<b>Вопрос 98.</b> Какие производства запущены в России в области нанотехнологий?	100
<b>Вопрос 99.</b> Как создать производство в области нанотехнологий?	102
<b>Вопрос 100.</b> Какие перспективы у нанотехнологий?	104
<b>Вопрос 101.</b> Существует ли современная история нанотехнологий?	106

## **Вопрос 1. Почему автор решил писать эту книгу?**

В области нанотехнологий существует десятки научно-технических направлений, по которым написаны сотни книг, десятки тысяч научных статей, вместить все это разнообразие знаний, точек зрения и технических приемов в одно издание не возможно. Единственное, что объединяет эти знания – отношение к объектам менее 100 нанометров.

Все научно-популярные издания о нанотехнологиях стремились последовательно рассказать наиболее важные и существенные факты, объясняя их сущность и давая наиболее популярные в научной среде термины. В любом случае происходили «терминологические коллапсы», когда для объяснения одного термина прибегали к другому, пока еще не известному читателю.

Необходимо сразу объяснить, что для искушенного исследователя эта книга будет очевидной, так как научно-популярный стиль издания рассчитан исключительно на человека, начинающего свой путь в научной сфере или просто интересующегося нанотехнологиями.

Таким образом, стиль и форма подачи научно-популярного материала выбраны таким образом, чтобы каждый мог узнать что-то для себя новое и раскрыть необходимые понятия в той последовательности, которая ему будет наиболее близка и понятна. В случае, если читатель заинтересуется какой-либо научной проблемой или направлением после знакомства с основами нанотехнологий в рамках настоящего пособия, он может продолжить свои исследования в более узкой области.

## **Вопрос 2. Когда возникли нанотехнологии?**

Рассматривая нанотехнологию прежде всего как возможность манипуляций с веществом в масштабах от 100 нм и «ниже», историю нанотехнологий часто начинают отсчитывать от знаменитой речи Р.Фейнмана (получившей в последствие название «Внизу полным полно места. Приглашение в новый мир физики»). В этой своей речи, произнесенной в 1959 году на заседании американского физического общества Р.Фейнман указал на то, что фундаментальные законы физики не запрещают создавать «конструкции» из отдельных атомов. «Насколько я вижу, принципы физики не запрещают манипулировать отдельными атомами». Великое пророчество великого исследователя положившее начало современной эпохи нанотехнологий. Дальнейшая стремительная хронология развития нанотехнологии (в исключительно поверхностном и неполном варианте) может быть представлена приблизительно в следующей последовательности:

В 1966 г. Р. Янг разрабатывает пьезодвигатель, обеспечивающий перемещение подложки под острием туннельного зонда микроскопа и нанотехнологического оборудования с точностью до 0,001 нанометра.

1961-1967 г. Открытие американскими биологами (Р.Холли, Х. Кораной и М. Ниренбергом) структуры генетического кода.

1971 г. Компаниями Bell и IBM (США) получены первые одноатомные полупроводниковые пленки – «квантовые ямы». Началась эпоха нанотехнологии т.е. практической физики и технологии низкоразмерных или кванторазмерных структур.

В 1974 году японский профессор Норио Танигучи впервые применил термин «Нанотехнология» в докладе получившем название «Основные принципы нанотехнологий».

1982 год. Г.Биннинг и Г. Рорер (сотрудники австрийского филиала компании IBM) создают сканирующей туннельный микроскоп (СТМ). Действие СТМ основано на туннелировании электронов через вакуумный барьер. Сканирующий электронный микроскоп позволяет исследовать только проводящие объекты. Четырьмя годами позже, в 1986 г. появился сканирующий атомно-силовой микроскоп. В отличие от СТМ атомно-силовой микроскоп позволяет изучать непроводящие (диэлектрические) материалы.

### **Вопрос 3. Что означает приставка «нано»?**

Приставка нано (от греч. «nannos» – «карлик») означает одну миллиардную ( $10^{-9}$ ) долю какой-либо единицы. Например, нанометр – одна миллиардная доля метра. Атомы и мельчайшие молекулы имеют размер порядка 1 нанометра. Для сравнения, человеческий волос приблизительно в шестьдесят тысяч раз толще одной молекулы. На этом уровне стираются границы не только между ветвями науки физика, химия, биология, но даже и между их разделами, такими как материаловедение, механика, электроника, генетика и другие. Сегодня нанотехнология объединяет в себе самые разнообразные науки и междисциплинарные исследования. Сама приставка «нано» указывает лишь на малый размер, с которого начинают проявляться квантовые эффекты.

### **Вопрос 4. Что означает термин «нанотехнологии»?**

Термин «Нанотехнология» является русским эквивалентом английского словосочетания Nanotechnology. Само название говорит, что нанотехнологии имеют дело с материалами размером менее 100 нм в каком-либо направлении  $x$ ,  $y$ ,  $z$  или во всех сразу. В мире объектов нанометрового диапазона законы обычной физики не действуют. Поэтому законы квантового мира подчиняются квантовой физике. В квантовой физике энергия частиц часто принимает только дискретные значения. При чем это верно не только для атомов, но и для наночастиц – квантовых точек, нитей и ям. Как следствие у таких наночастиц все свойства отличаются от обычных материалов. Температура плавления наночастиц значительно меньше. Упругие свойства также сильно меняются с уменьшением размеров до нанометровых. Меняется спектр излучения и поглощения материалов и многое, многое другое. Если научиться управлять структурой наночастиц, можно получить практически любой набор свойств. Как заявил известный американский физик Э.Теллер «Тот, кто раньше других овладеет нанотехнологией, займет ведущее место в техносфере 21 века».

Развитие нанотехнологий обещает огромные перспективы в технике. К ним относятся создание очень легких и сверхпрочных материалов, сверхбыстродействующей памяти терабитных объемов, полностью автономных нанороботов и многое другое.

## Вопрос 5. Что такое «квантовая» физика?

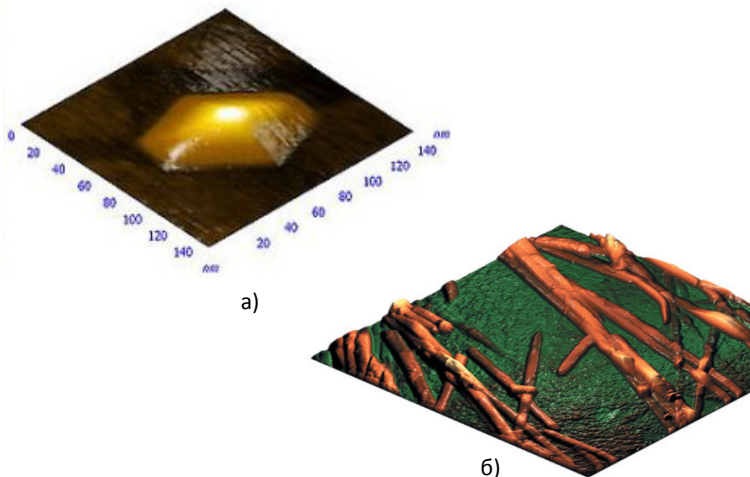
Уникальность нанообъектов во многом определяется тем, что при размерах 100 нм и менее становятся существенными их волновые свойства, которые следуют из квантовых представлений о поведении частиц. Классическая физика рассматривает частицы и волны как различные компоненты «физической реальности», воспринимаемой нашими органами чувств. Механика частиц и волновая оптика традиционно считаются самостоятельными и не перекрывающимися разделами физики, основанными на своих фундаментальных законах. Но воспринимаемая нами в повседневности физическая реальность обусловлена явлениями, которые происходят в макромире. Так, прохождение электромагнитных волн через препятствия объясняется интерференцией и дифракцией, хорошо изученными волновыми явлениями. Электроны мы считаем частицами, поскольку они обладают зарядом и массой, их поведение в электронно-лучевой трубке, кинескопе телевизора и других электронно-вакуумных приборах достаточно хорошо описывается законами классической механики. Между тем, физическая реальность в микромире электронов и ядер, атомов и молекул входит в противоречие с нашим повседневным опытом восприятия и объяснения физических процессов и явлений. По мере развития физики микромира появляется все большее количество фактов, указывающих на то, что электромагнитные волны ведут себя как поток частиц, а движущиеся электроны проявляют волновые свойства.

Днем рождения квантовой физики можно считать 14 декабря 1900 года, когда Макс Планк в докладе, посвященном проблеме излучения нагретых тел, сообщил, что ему удалось решить эту проблему на основе довольно необычного с точки зрения классической физики предположения о квантовом характере излучения. Планк предположил, что нагретое тело представляет собой систему одинаковых атомных **осцилляторов** (колеблющихся атомов), которые излучает энергию не непрерывно, а конечными порциями – **квантами**. Хотя выведенная Планком формула удивила и поразила его коллег – физиков, принятые им квантовые допущения долгое время для многих оставались непонятными, так как противоречили классической физике. Тем не менее, именно слово «квант» дало название новому ее разделу – **квантовой механике**, которая стала основой развивающихся атомной и ядерной физики, микро- и наноэлектроники.

## Вопрос 6. Что такое квантовая точка, яма, нить?

Нанотехнологии имеют дело с материалами размером менее 100 нм в каком-либо направлении  $x$ ,  $y$ ,  $z$  или во всех сразу. Если ограничение по размерам происходит во всех направлениях, такой объект называют квантовой точкой (рис.1). Если только в двух направлениях – квантовой нитью, проволокой, трубкой или ленточкой. Если только в одном направлении, то квантовой ямой. Как видно, из названий «квантовая точка», «квантовая нить», «квантовая яма» самым важным является квантовый характер этих объектов. Сама приставка «нано» указывает лишь на малый размер, с которого начинают проявляться квантовые эффекты.





**Рис. 1.** Квантовая точка InAs размером 80 на 80 нм (а) и квантовые ленточки (б) на изображении размером 8 на 8 мкм. Изображения взяты с сайта [www.ntmdt.ru](http://www.ntmdt.ru)

## Вопрос 7. Что такое фотон?

В 1905 году основываясь на выдвинутой Планком идее квантования, Альберт Эйнштейн предположил, что квантовые свойства света проявляются не только при испускании, но и в процессе его распространения и поглощения веществом. Согласно этой гипотезе, свет можно представить в виде потока частиц, получивших название **фотонов**. Фотоны не могут находиться в состоянии покоя и движутся со скоростью света, которая в вакууме равна величине  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с. При этом фотоны обладают энергией, которая дается выражением

$$\varepsilon_{\phi} = \hbar \omega = 2\pi \hbar c / \lambda,$$

где  $\hbar = h / 2\pi$ , величина  $h = 6,62 \times 10^{-34}$  Дж·с получила название постоянной Планка,

$\omega$  - частота, равная  $2\pi c / \lambda$ .

Для фотона, как и для любой материальной частицы, можно определить массу. Так как фотон имеет скорость  $c$ , то масса покоя фотона должна быть равна нулю. Используя известную формулу Эйнштейна  $E = mc^2$ , определяющую связь полной энергии частицы с ее массой, для фотона можно записать  $m_{\phi} c^2 = \hbar \omega$ , откуда  $m_{\phi} = \hbar \omega / c^2$ . Фотон, обладая массой и скоростью, должен иметь и импульс, величина которого для частицы с нулевой массой покоя определяется соотношением

$$p_{\phi} = m_{\phi} c = \hbar \omega / c = 2\pi \hbar / \lambda$$

Наличие импульса у фотонов приводит к тому, что свет, аналогично газу молекул, оказывает давление на поверхность, на которую он падает.

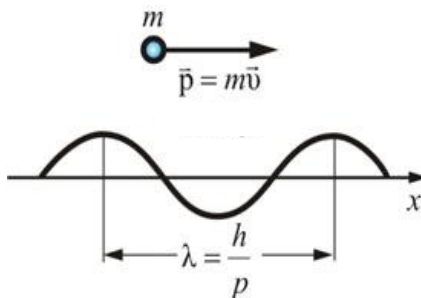
Излучение нагретого тела также может быть представлено в виде потока фотонов, т.е. **фотонного газа**. Однако фотонный газ не может быть описан как классический газ, состоящий из молекул. В отличие от газа молекул, фотоны не имеют распределения по скоростям, так как при любой температуре имеют одну и ту же скорость  $c$ . Поведение фотонного газа в полной мере описывается лишь законами квантовой физики.

## Вопрос 8. Что такое волна де Бройля?

Двойственная природа электромагнитного излучения, понимание которой сформировалось в начале двадцатого века, позволило объяснить многие явления на основе корпускулярного подхода, согласно которому электромагнитное излучение представляет собой поток фотонов – частиц, с массой покоя равной нулю. Успехи такого описания электромагнитного излучения сформировали интерес к **корпускулярно-волновым** представлениям и привели к их переносу на частицы, обладающие массой покоя. Первым это сделал в 1924 году Луи де Бройль, высказав идею об универсальности соотношения  $p = 2\pi\hbar / \lambda$ , связывающего импульс фотона с его длиной волны. Любая частица, обладающей импульсом  $p$ , соответствует волна, для которой справедливо соотношение

$$\lambda_{\text{Бр}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p}$$

Эта величина получила название **длины волны де Бройля**. Из соотношения следует, что с импульсом частицы связана важная характеристика волны – ее волновое число  $k = p / \hbar$ . Вторым основным соотношением, объединяющим параметры частицы и волны де Бройля, является формула  $\omega_{\text{Бр}} = E / \hbar$ , выражающая связь частоты волны с энергией частицы. Отметим, что волны де Бройля не являются электромагнитными волнами, а имеют особую (вероятностную) природу (рис 2).



**Рис. 2.** Схематичное изображение волны де Бройля.

## Вопрос 9. Что такое корпускулярно-волновой дуализм?

Уникальность нанообъектов во многом определяется тем, что при размерах 100 нм и менее становятся существенными их волновые свойства, которые следуют из квантовых представлений о поведении частиц. Классическая физика рассматривает частицы и волны как различные компоненты «физической реальности», воспринимаемой нашими органами чувств. Механика частиц и волновая оптика традиционно считаются самостоятельными и не перекрывающимися разделами физики, основанными на своих фундаментальных законах. Но воспринимаемая нами в повседневности физическая реальность обусловлена явлениями, которые происходят в макром мире. Так, прохождение электромагнитных волн через препятствия объясняется интерференцией и дифракцией, хорошо изученными волновыми явлениями. Электроны мы считаем частицами, поскольку они обладают зарядом и массой, их поведение в электронно-лучевой трубке, кинескопе телевизора и других электронно-вакуумных приборах достаточно хорошо описывается законами классической механики. Между тем, физическая реальность в микромире электронов и ядер, атомов и молекул входит в противоречие с нашим повседневным опытом восприятия и объяснения физических процессов и явлений. Один и тот же объект, например электрон, может быть частицей и волной, что и раскрывает понятие корпускулярно-волнового дуализма.

Так как принципиального различия между микро- и макрообъектами не существует, то возникает вопрос: в каких случаях проявляются волновые свойства, а в каких – корпускулярные. Проведем аналогию с оптикой. Волновая природа света максимально проявляется при длинах волн, соизмеримых с характерными размерами препятствий, т.е.  $\lambda \sim L$  (например, интерференция и дифракция). Если же  $\lambda \ll L$ , то волновые свойства становятся несущественными и можно пользоваться геометрической оптикой (прямолинейное распространение лучей). Если перенести указанные рассуждения на волны материи, то волновые свойства частиц будут проявляться в том случае, когда размеры области, в которой они двигаются, меньше или порядка  $\lambda_{Бр}$ . Если же размеры этой области намного больше  $\lambda_{Бр}$ , то волновые свойства проявляются слабо и их можно не учитывать. Первая ситуация ( $L \leq \lambda_{Бр}$ ) имеет место для электронов в металле и атоме. Вторая ситуация – для электрона в электронно-лучевой трубке, для иона меди в металле и для пылинки.

## Вопрос 10. Что такое волновая функция?

В соответствии с гипотезой де Бройля, с движущейся вдоль оси  $x$  свободной частицей связана волна, которая описывается так называемой *волновой функцией*

$$\Psi(t, x) = A \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]$$

Введенная здесь функция  $\exp(iu)$  широко используется в различных разделах физики и является обычной показательной функцией  $e^{iu}$  с основанием натурального логарифма  $e \cong 2.718...$ . Волновая функция является комплексной величиной. Принципиальное отличие волны де Бройля от электромагнитной волны заключено в ее

физическом смысле, которое состоит в том, что квадрат ее модуля  $|\Psi(t, x, y, z)|^2$  является мерой вероятности нахождения частицы в момент времени  $t$  в точке с координатами  $x, y, z$ .

В некотором смысле волны де Бройля являются «*волнами вероятности*», связанными с движущейся частицей. Именно вероятностная трактовка волн де Бройля явилась ключиком к пониманию многочисленных квантовых эффектов, имеющих место в микромире. Волновая функция  $\Psi(t, x, y, z)$  является основной характеристикой состояния частицы в квантовой физике. Для определения этой функции в 1926 году Эрвин Шредингер предложил уравнение, которое в настоящее время называется *уравнением Шредингера* и которое в квантовой физике играет такую же важную роль, как второй закон Ньютона в классической физике.

### Вопрос 11. Что такое принцип неопределённости Гейзенберга?

В классической физике полное описание состояния частицы определяется динамическими параметрами (координаты, импульс, момент импульса, энергия и др.). Однако реальное поведение микрочастиц показывает, что существует принципиальный предел точности, с которой указанные параметры могут быть измерены. Пределы применимости классического способа описания поведения микрочастиц устанавливаются *соотношениями неопределенностей*, полученными Вернером Гейзенбергом в 1927 году.

Наиболее важными являются два соотношения. Первое соотношение связывает между собой неопределенности в значениях координат частиц и соответствующих компонент импульса в один и тот же момент времени:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar.$$

Второе соотношение связывает неопределенность в изменении энергии частицы и неопределенность в моменте времени, когда это изменение произошло:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

Не существует одновременного точного задания величин, входящих в соотношения неопределенностей. Этот факт есть проявление двойственной корпускулярно-волновой природы микрообъектов. Применение соотношений неопределенностей к конкретным физическим системам позволяет не только установить границы применимости классической теории, но и без сложного математического анализа провести численные оценки значений параметров исследуемых систем.

Используя соотношения неопределенностей, можно связать неопределенность координаты частицы и длину волны де Бройля, а также определить условия, при которых можно пренебречь квантовыми эффектами. Предположим, что частица занимает область с линейным размером  $L$ . Согласно соотношению для неопределенности координаты  $X$  имеем

$$\Delta x \geq \hbar / \Delta p_x \approx \hbar / p.$$

Здесь мы учли, что для частицы, движущейся в ограниченной области пространства, неопределенность импульса имеет значение, равное самому импульсу или близкое к

нему. Учитывая связь импульса с длиной волны де Бройля, получаем  $\Delta x \geq \lambda_{\text{Бр}} / 2\pi$ .

Понятие траектории частицы можно использовать только в том случае, если неопределенность ее координаты мала по сравнению с характерным размером области движения, т.е.  $\Delta x \ll L$ . Следовательно, условием корректности классического описания поведения частицы является  $\lambda_{\text{Бр}} \ll L$ . Полученное соотношение нарушается для электронов в атоме, или когда размер области движения соизмерим с атомными размерами.

## Вопрос 12. Что такое атом по Бору?

Длина волны де Бройля электрона в атоме сравнима с размером атома. В этих условиях нельзя пренебрегать волновыми свойствами электрона и описание его поведения в атоме необходимо проводить на основе квантовых представлений. Первым такие представления в теорию атома водорода в 1913 году ввел Нильс Бор. Атом водорода представляет собой связанный электрон, движущийся в электростатическом поле протона (ядра) с зарядом  $+e$ . Так как масса электрона  $m_e$  составляет всего лишь

1/1836 часть массы протона, в простейшем случае можно считать электрон вращающимся вокруг неподвижного ядра по круговым орбитам. В соответствии со вторым законом Ньютона движение электрона по круговой орбите при наличии кулоновской силы, действующей на него со стороны протона, описывается уравнением

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{k_e e^2}{r^2}$$

Это уравнение классической механики было дополнено Бором квантовым уравнением (условием квантования важной физической величины – момента импульса  $L = pr = m_e v r$ ):

$$m_e v r = n \hbar,$$

где величина  $n$  может принимать значения 1, 2, 3, ... и называется **главным квантовым числом**. В боровской модели она определяет номер электронной орбиты в атоме. Решая эти уравнения совместно, получаем выражение для радиуса  $n$ -ой орбиты:

$$r_n = n^2 r_1, \quad r_1 = \hbar^2 / k_e m_e e^2 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

где  $r_1$  - является в атоме водорода радиусом **первой боровской орбиты**.

Главное квантовое число  $n$  определяет также энергетическое состояние электрона в атоме. Важнейшим результатом теории Бора явился тот факт, что полная энергия электрона в атоме является квантованной (зависящей от  $n$ ) и равной

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad E_1 = -\frac{k_e^2 m_e e^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ эВ}$$

Здесь  $E_1$  – энергия электрона в основном (невозбужденном) состоянии в атоме водорода (энергия на первой «боровской» орбите). Величина  $E_i = |E_1| = 13,6 \text{ эВ}$

является энергией ионизации атома водорода. Именно такую минимальную энергию необходимо затратить для удаления электрона из атома водорода, находящегося в основном энергетическом состоянии.

### Вопрос 13. Что такое энергия электрона в атоме?

На рис. 3 приведены схема энергетических уровней и электронные орбиты в атоме водорода. Для наглядности уровни  $E_n$  нанесены на кривую потенциальной энергии электрона  $U = -k_e e^2 / r$ . Самый низкий уровень энергии  $E_1$  соответствует ближайшему расположению электрона от ядра и характеризует *основное состояние* атомов. Такую энергию имеет атом, если он не получает энергию извне.

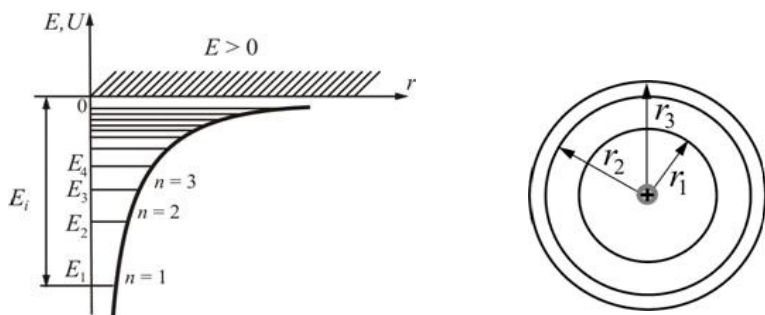
В основном состоянии изолированный атом может пребывать сколь угодно долго. Все энергетические уровни, начиная со второго, соответствуют *возбуждённым* состояниям атома. Эти значения энергии электрон в атоме может иметь, если он приобретает дополнительную энергию за счёт воздействия каких-либо внешних факторов. Находясь в возбуждённом состоянии электрон долгое время не может, поэтому он самопроизвольно переходит в нормальное состояние, отдавая при этом излишек энергии в виде электромагнитного излучения, например света. Обратим также внимание на то, что энергия электрона в атоме имеет отрицательное значение. Это означает, что нулевая энергия соответствует состоянию электрона, удалённого на бесконечно большое расстояние от ядра и не взаимодействующего с ним.

Зная структуру энергетических уровней можно определить и структуру оптического спектра излучения атома водорода. При переходе электрона с  $m$ -го энергетического уровня  $E_m$  на  $n$ -ый уровень  $E_n$  в случае  $m > n$  и  $E_m > E_n$  электрон теряет энергию  $E_m - E_n$ , излучая фотон с частотой

$$\omega_{nm} = (E_m - E_n) / \hbar$$

Набор частот, отвечающих различным переходам в атоме водорода, определяет спектр излучения атома водорода. Наряду со спектрами излучения, могут наблюдаться и спектры поглощения. Наличие спектров поглощения связано с тем, что каждому переходу электрона с вышележащего уровня на нижележащий с излучением фотона соответствует обратный переход ( $m < n$  и  $E_m < E_n$ ) с поглощением фотона той же частоты.

Таким образом, излучение и поглощение квантов энергии в виде фотонов происходит в результате перехода электрона с одного энергетического уровня на другой. При рассмотрении энергетического спектра атома следует обратить внимание также и на то, что при увеличении главного квантового числа  $n$  происходит сближение уровней энергии. При достаточно большом  $n$  можно считать, что энергия атома практически не квантуется, а изменяется непрерывно.



**Рис. 3.** Схема энергетических уровней в атоме водорода и электронные орбиты.

### Вопрос 14. Что такое принцип Паули?

Принцип Паули один из важнейших принципов квантовой физики. Как уже отмечалось, из возбуждённого состояния электрон, испуская фотон, переходит в основное, невозбуждённое состояние с наименьшей из всех возможных значений энергией. Состояние с наименьшей энергией – устойчивое. Очевидно, что стремление перейти в энергетически более устойчивое состояние, характерно не только для электрона в атоме водорода, но и для электронов многоэлектронных атомов. Означает ли это, что все электроны в устойчивом состоянии имеют одно значение энергии, т.е. занимают один и тот же энергетический уровень?

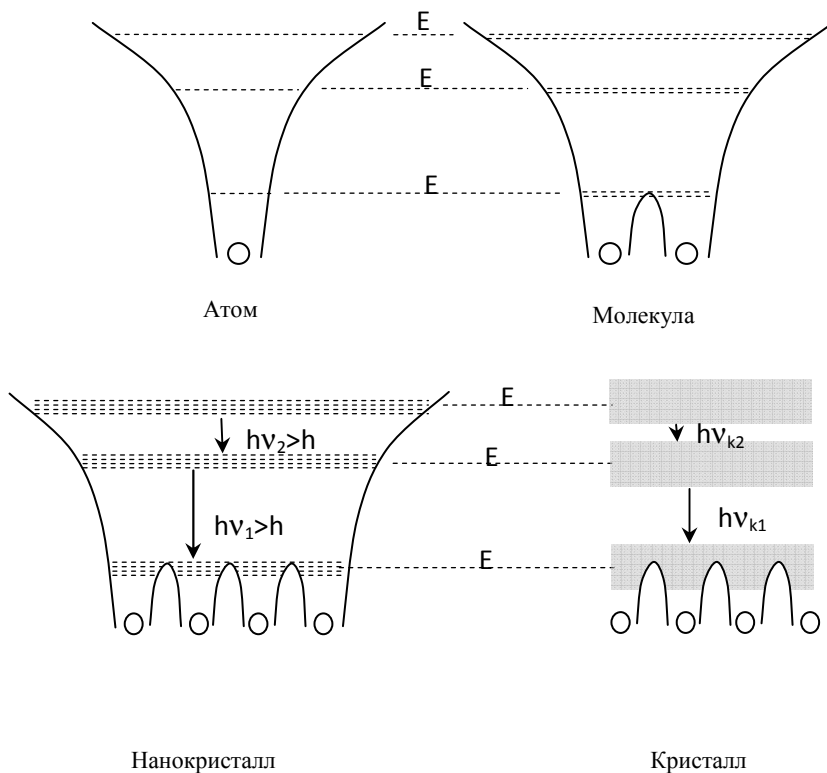
Ответить на этот вопрос позволяет **принцип Паули**, в соответствии с которым в любой системе взаимодействующих частиц в одном энергетическом состоянии могут находиться не более двух электронов с противоположными **спинами**. Поэтому невозможно «скопление» электронов на одном энергетическом уровне. В соответствии с принципом Паули электроны занимают попарно все уровни, начиная с самого нижнего. Принцип Паули регулирует распределение электронов по энергиям в любой системе, содержащей большое число электронов.

### Вопрос 15. Как возникают энергетические зоны в кристаллах?

После объяснения на основе квантовых представлений энергетического спектра отдельных атомов эти представления стали широко использоваться в физике кристаллов. Эта область физики изучает закономерности при формировании многочисленных кристаллических структур и их энергетических спектров. Основные эффекты, широко используемые в нанотехнологиях, связаны с **зонной структурой** энергетических спектров кристаллов. Кратко рассмотрим природу возникновения **энергетических зон** в кристаллах.

Как изменится энергетическая структура каждого из двух отдельных атомов, если из них образуется молекула? По мере сближения на каждый атом (его электроны и ядро) увеличивается силовое воздействие со стороны электрических полей электронов и ядра другого атома. Подобное взаимодействие между атомами приводит к тому, что вместо

каждого одиночного атомного уровня, определяемого главным квантовым числом  $n$  и одинакового для всех одинаковых изолированных атомов, возникают два близко расположенных, но не совпадающих **подуровня** (рис. 4). В таких случаях говорят, что происходит **расщепление** энергетических уровней.



**Рис.4.** Формирование энергетических уровней.

Если теперь сближать  $N$  одинаковых атомов, то в результате их взаимодействия вместо соответствующего энергетического уровня, одинакового для всех изолированных атомов, появятся  $N$  близких подуровней, которые и образуют энергетическую зону разрешённых значений энергии. Таким образом, разрешённая энергетическая зона кристалла состоит из  $N$  подуровней, на которых может разместиться, согласно принципу Паули, не более  $2N$  электронов. В кристалле объёмом  $1\text{см}^3$  имеется порядка  $10^{22}$  атомов. Такой же порядок величины имеет и число подуровней в каждой энергетической зоне. Величина расщепления, т.е. расстояние между ближайшими подуровнями и, следовательно, ширина разрешенной зоны в целом различны для атомных уровней с разными значениями главного квантового числа  $n$ . Уровни энергии с большим главным квантовым числом дают разрешённые зоны большей ширины. Объясняется это тем, что при сближении атомов их электрические поля наиболее сильно воздействуют на



валентные (внешние) электроны, которые слабее внутренних связаны с ядрами своих атомов. Поэтому расщепление уровней валентных электронов наибольшее, ширина образующейся при этом зоны разрешённых значений энергии равна нескольким электрон-вольтам.

Влияние электрических полей взаимодействующих атомов на внутренние электроны намного слабее и поэтому в кристалле малыми оказываются расщепление энергетических уровней внутренних электронов и ширина отвечающих им разрешённых зон. Разрешённые энергетические зоны в кристалле разделены **запрещёнными зонами**. Ширина запрещённых зон соизмерима по величине с шириной разрешённых зон. С ростом энергии ширина разрешённых зон увеличивается, а ширина запрещённых зон уменьшается.

## Вопрос 16. Что такое валентная зона и зона проводимости?

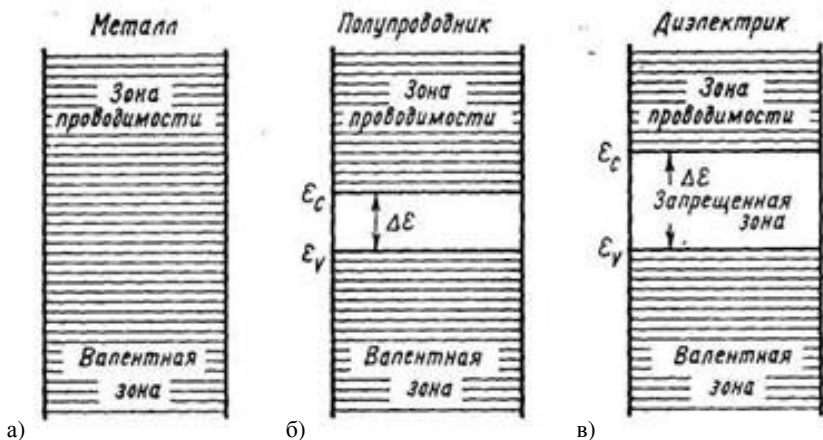
Многие физические свойства кристалла определяются характером заполнения электронами соответствующих энергетических зон. Что произойдёт, если кристалл подвергнуть нагреванию, облучению или просто создать внутри него электрическое поле? Так как в этом случае кристалл получает энергию извне, то и энергия электронов должна увеличиваться. С позиции квантовой механики это означает, что электроны получают возможность перейти в новое состояние, соответствующее более высокому энергетическому уровню, если порция энергии, получаемая извне, достаточна для перевода электронов на один из возбуждённых уровней энергии.

Такая возможность представляется в первую очередь электронам последней заполненной зоны, так как для перехода электронов из заполненных зон, лежащих еще ниже, нужна слишком большая энергия возбуждения. Многие процессы в кристаллах объясняются состоянием именно валентных электронов. Поэтому на упрощенной схеме энергетических зон изображают только три зоны – последнюю, полностью заполненную при абсолютном нуле температур, запрещенную зону и следующую за ней зону, которая может быть либо полностью свободной, либо частично заполненной. Полностью заполненную зону называют **валентной зоной**, а следующую за ней – **зоной проводимости**. Такое название эта зона получила потому, что находящиеся в ней электроны, получив энергию от внешнего электрического поля, могут переходить на свободные подуровни (так как зона не полностью заполнена) и таким образом принимать участие в направленном переносе заряда.

## Вопрос 17. Как отличаются энергетические зоны у диэлектриков, металлов и полупроводников?

В зависимости от характера заполнения зоны проводимости и ширины запрещенной зоны возможны три случая, представленных на рис.5. Если зона проводимости полностью незаполнена, а ширина запрещенной зоны составляет величину в несколько электронвольт, то такой кристалл принято относить к **диэлектрикам** (рис.5в). Если зона проводимости полностью незаполнена, а ширина запрещенной зоны имеет величину порядка одного электронвольта, то такой кристалл относится к **полупроводникам**

(рис.5б). Если зона проводимости заполнена не полностью, то кристалл является **проводником** (рис.5а). Последний занятый электронами энергетический уровень в зоне проводимости (при  $T=0$  К) называют **уровнем Ферми**. Уровень Ферми и соответствующая ему **энергия Ферми**  $E_F$  играют большую роль в современных квантовых представлениях о кристаллах. С энергией Ферми, например, связана величина средней энергии электронов в металле  $\langle E \rangle = (3/5)E_F$ . Так как  $E_F \approx 5$  эВ намного превышает тепловую энергию электронов в металле  $k_B T \approx 3 \cdot 10^{-2}$  эВ при  $T=300$  К), то и средняя энергия намного превышает их тепловую энергию, что также является проявлением квантовых законов.

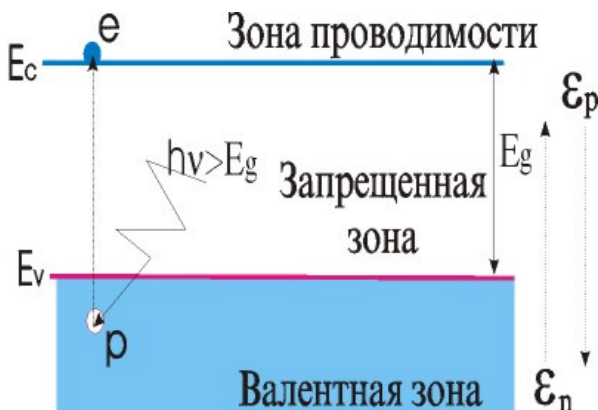


**Рис. 5.** Расположение энергетических зон в металле (а), диэлектрике (в) и полупроводнике (б).

### Вопрос 18. Как проводит ток полупроводник?

Так как для полупроводников ширина запрещённой зоны сравнительно мала, то энергия теплового движения  $k_B T$  оказывается достаточной для «заброса» части электронов из валентной зоны в свободную зону проводимости. При этом электроны, попавшие в свободную зону, и электроны в валентной зоне получают возможность переходить на более высокие незанятые уровни энергии. С переходом электронов из валентной зоны в зону проводимости создаются условия для перемещения электронов в самой валентной зоне. При этом оказывается, что движение в такой почти полностью заполненной зоне может быть описано движением «пустых» мест – «дырок», если им приписать положительный знак (рис. 6). Направление движения дырок противоположно направлению движения электронов, поэтому под действием электрического поля в полупроводнике возникает суммарный ток электронов и дырок. Таким образом, в

качестве носителей заряда в любой среде могут выступать, способные перемещаться под действием электрического поля, электроны и дырки.



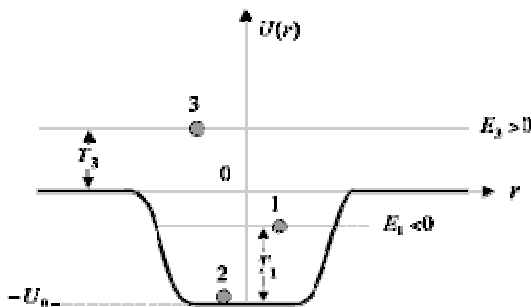
**Рис. 6.** Энергетическая диаграмма, поясняющая возникновение электрона и дырки в совершенном кристалле.

## Вопрос 19. Что такое потенциальная яма?

Если частица движется в ограниченной области, где ее **потенциальная энергия** меньше, чем вне этой области, то говорят, что частица находится в **потенциальной яме**. Термин «потенциальная яма» происходит от вида графика, изображающего зависимость потенциальной энергии частицы, находящейся в силовом поле, от её положения в пространстве. Основное свойство потенциальной ямы – способность удерживать частицу, полная энергия которой меньше ее потенциальной энергии, т.е. глубины ямы. Говорят, что такая частица находится в **связанном состоянии**, при этом ее полная энергия принимает одно из дискретных значений. Потенциальные ямы могут быть одно-, двух- и трехмерными в зависимости от того, сколько из трех независимых направлений движения имеет частица, находящаяся в потенциальной яме.

На рис.7 схематически представлен вид одномерной потенциальной ямы и энергетических уровней частицы в этой яме. Полная энергия частицы  $E$  является суммой её кинетической энергии, которая всегда положительна  $T \geq 0$ , и потенциальной  $U$ , которая может быть как положительной, так и отрицательной. Если частица находится внутри ямы, то её кинетическая энергия  $T_1$  меньше глубины ямы  $U_0$ . В этом случае полная энергия частицы в яме отрицательна ( $E_1 = T_1 + U_1 = T_1 - U_0 < 0$ ) и частица не может покинуть яму, т.е. находится в связанном состоянии. Она движется в яме с кинетической энергией  $T_1$ , отражаясь от ее «стенок». В квантовой физике энергия частицы не изменяется без внешних причин. Наоборот, в классическом случае частица, двигаясь от одной «стенки» к другой, принимает любое значение энергии, в зависимости от сообщенного ей импульса и это одно из важнейших отличий квантовой и классической механики! Если кинетическая энергия частицы  $T_2 = 0$ , то её полная энергия  $E_2 = -U_0 < 0$  и

частица находится на «дне» ямы. Это положение частицы наиболее устойчиво, но оно возможно только в рамках классической физики. Если кинетическая энергия частицы  $T_3$  больше глубины потенциальной ямы  $U_0$  и полная энергия частицы положительна ( $E_3 = T_3 + U_0 > 0$ ), то она уходит за пределы ямы.



**Рис. 7.** Энергетическая диаграмма потенциальной ямы. 1 – квантовая частица в яме, 2 – классическая частица в яме, 3 – частица вне ямы.

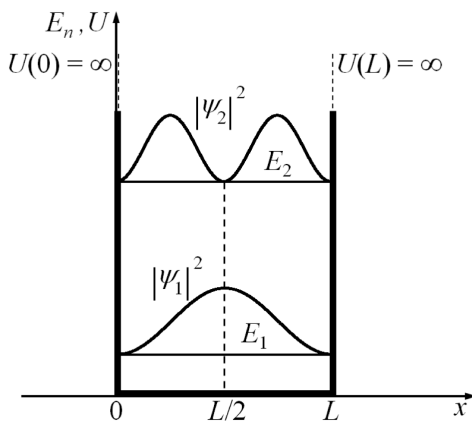
## Вопрос 20. Почему энергия в потенциальной яме квантуется?

Согласно квантовым представлениям, если движение частицы происходит в ограниченной области пространства, т.е. частица находится в связанном состоянии, то ее полная энергия может принимать лишь определённые дискретные значения. Это означает, что в потенциальной яме существуют дискретные уровни энергии, на одном из которых частица находится. На примере движения частицы в одномерной прямоугольной яме с бесконечно высокими (непроницаемыми) стенками рассмотрим, как могут быть получены значения энергии, отвечающие различным квантовым состояниям (уровням). На рис.8 представлен вид такой ямы, причем «дно» ямы имеет значение  $U_0 = 0$ . Для этого воспользуемся правилом квантования Бора, согласно которому разрешены лишь те квантовые состояния, на которых импульс частицы  $p_n$  и ширина ямы  $L$  связаны соотношением  $p_n L = \pi \hbar n$ , где  $n$  – квантовое число, определяющее номер энергетического уровня. Тогда разрешенные значения импульса частицы в яме даются выражением  $p_n = \pi \hbar n / L$ , с учетом которого для полной энергии частицы на соответствующем уровне получаем:

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} = \frac{p_n^2}{2m_e} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_e L^2}$$

Обратим внимание на тот факт, что минимальная энергия частицы в яме не может быть равной нулю. Всегда существует так называемая энергия нулевых колебаний, которая, согласно приведенной формуле, равна  $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 2m_e L^2$ . В рассматриваемой потенциальной яме шириной  $L = 0.5$  мкм значение энергии первого уровня  $E_1 = 2 \cdot 10^{-6}$

эВ, расстояние между первым и вторым уровнями энергии  $\Delta E_{21} = E_2 - E_1 = 6 \cdot 10^{-6}$  эВ, что значительно меньше энергии теплового возбуждения ( $k_B T \approx 3 \cdot 10^{-2}$  эВ при  $T = 300$  К). На рис. 8 также приведен вид соответствующих квадратов модулей волновых функций  $|\Psi_i|^2$ , определяющих вероятность обнаружить частицу с энергией  $E_i$  в том или ином месте потенциальной ямы. Видно, что в основном энергетическом состоянии  $E_1$  вероятность обнаружить частицу наибольшая в центре ямы. Это означает, что частица в средней части ямы проводит значительно больше времени, чем у краев ямы. В возбужденном состоянии с энергией  $E_2$  частица большую часть времени пребывает в областях, примыкающих к координатам  $x = L/4$  и  $x = 3L/4$ .

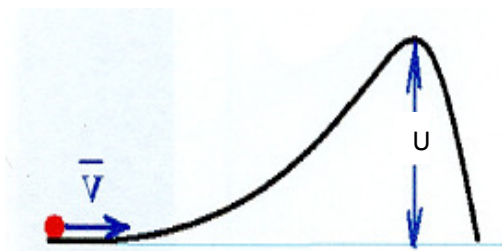


**Рис. 8.** Форма квадрата волновых функций в бесконечной прямоугольной потенциальной яме.

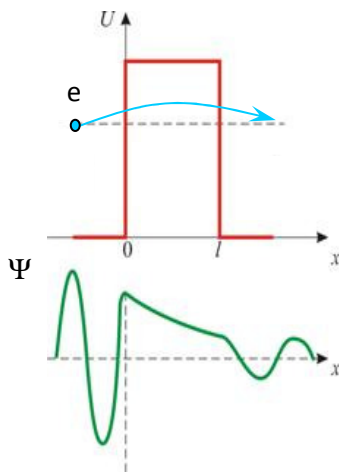
## Вопрос 21. Что такое потенциальный барьер?

Если частица налетает на область пространства, в которой ее потенциальная энергия  $U$  больше, чем в области, из которой она налетает, то такая область для частицы представляет **потенциальный барьер**. Рассмотрим вначале простой пример классического потенциального барьера, полем силы тяжести. Пусть шайба без трения скользит в направлении горки, изображенной на рис. 9. Профиль горки, определяемый видом потенциальной энергии шайбы на ней  $U(x) = m g h(x)$  может считаться потенциальным барьером (здесь  $m$  – масса частицы,  $g$  – ускорение свободного падения). Так как движение шайбы происходит без потери полной энергии, с высотой подъема потенциальная энергия шайбы должна возрастать, а кинетическая энергия падать. Если кинетическая энергия  $T$  больше максимальной высоты потенциального барьера, то шайба преодолет горку. Если же  $T$  меньше высоты горки, то шайба вкатится только на часть «склона горки» и покатится назад, т.е. она отразится от барьера.

Потенциальный барьер может соответствовать любому другому виду потенциальной энергии. Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы шириной  $a$  и высотой  $U_0$  (рис. 9). Полная энергия частицы  $E$  равна сумме её кинетической энергии  $T$  и потенциальной  $U$ . Вне барьера потенциальная энергия частицы равна нулю, поэтому ее полная энергия равна кинетической  $E=T$ . Частица с полной энергией  $E=T < U_0$ , налетающая на барьер слева, с точки зрения классической физики не может преодолеть его и должна от него отразиться. В квантовой физике возможен процесс перехода через потенциальный барьер даже если энергии частицы не достаточно для этого, такой процесс называется туннелированием.



**Рис. 9.** Пример потенциального барьера для скользящей шайбы и потенциальный барьер в квантовой физике с соответствующей волновой функцией.



## Вопрос 22. Что такое туннелирование?

С точки зрения квантовой физики частица с  $E < U_0$  может с некоторой вероятностью пройти сквозь потенциальный барьер (рис.10). Это явление носит название **туннельного эффекта** или **туннелирования**, смысл которого заключается в квантовом переходе частицы через область движения, запрещённую классической механикой. В этом случае определяемый из соотношения  $E = p^2 / 2m + U$  импульс частицы  $p = \sqrt{2m(E - U_0)}$ , был бы внутри барьера мнимой величиной.

В квантовой механике движение частицы сквозь потенциальный барьер оказывается возможным ввиду справедливости соотношения неопределенностей. Действительно, чтобы кинетическая энергия частицы внутри барьера не была отрицательной, необходимо, чтобы ее неопределенность  $\Delta T$  была больше величины  $U_0 - E$ . Так как неопределенность кинетической энергии связана с неопределенностью импульса  $\Delta T = (\Delta p)^2 / 2m$ , то  $\Delta p > \sqrt{2m(U_0 - E)}$ . Для частицы, находящейся внутри барьера

неопределенность координаты  $\Delta x = a$ . С учетом соотношения неопределенностей  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$  условием просачивания частицы через барьер можно считать неравенство

$$a \cdot \sqrt{2m(U_0 - E)} \leq \hbar.$$

Поэтому чем «тоньше» барьер геометрически и чем меньше разность между высотой барьера  $U_0$  и полной энергией  $E$ , тем больше вероятность у частицы пройти этот барьер и продолжать движение за его пределами.

Возьмем задачу потока электронов, налетающих на потенциальный барьер. Пусть на барьер падает поток частиц 1 с интенсивностью  $I_0$ . Часть потока 2 отражается от него, а часть потока 3 с интенсивностью  $I(a)$  проходит через него (рис. 10). Величина прошедшего потока определяется выражением  $I(a) = D \cdot I_0$ . Здесь коэффициент прозрачности барьера (или вероятность туннельного перехода), равный отношению интенсивностей прошедшего и падающего потоков, дается выражением

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right],$$

где величина  $D_0$  сравнима с единицей. С ростом толщины барьера и его высоты вероятность просачивания частиц через барьер падает, но не обращается в ноль.

Туннельный эффект объясняет ряд важных физических явлений: холодную эмиссию электронов из металла, контактную разность потенциалов и т.д. Кроме того, он находит очень широкое применение в технических приложениях. В частности, на его основе был создан **сканирующий туннельный микроскоп**, который произвел подлинную революцию в физике и технике поверхности и имеет широкие перспективы в связи с развитием нанотехнологий

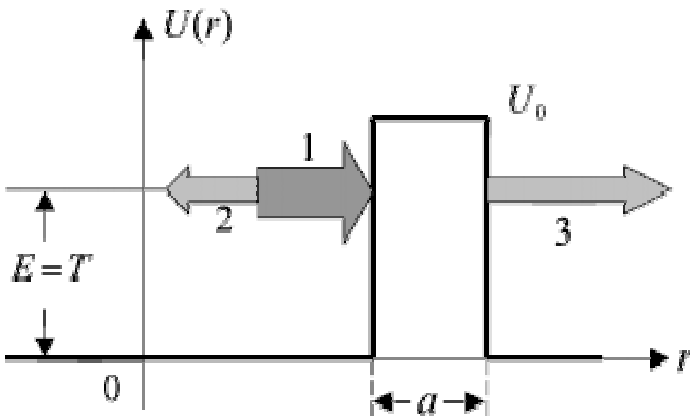
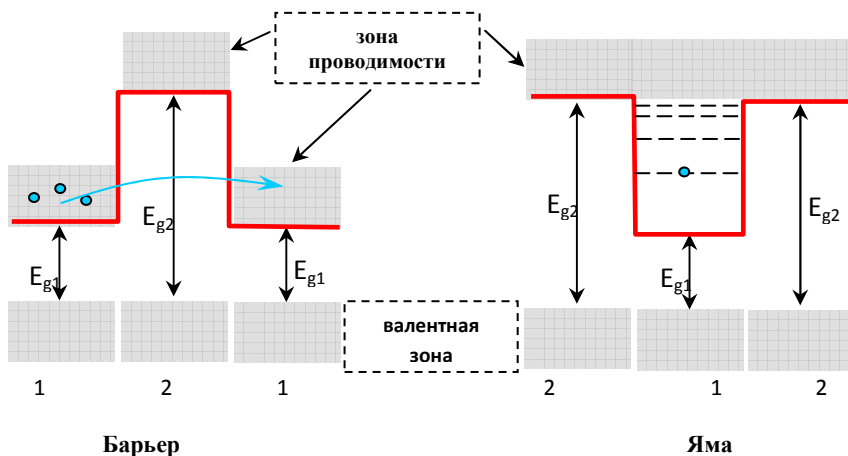


Рис. 10. Поток электронов, налетающий на потенциальный барьер.

## Вопрос 23. Как создать потенциальный барьер и яму?

Комбинируя два типа полупроводников с различной шириной запрещенных зон (например,  $E_{g1} < E_{g2}$ ) можно получить либо потенциальный барьер, либо потенциальную яму (рис. 11). Чтобы приготовить структуру, содержащую потенциальный барьер, следует поместить слой полупроводника с широкой запрещенной зоной между двумя полупроводниками с узкой запрещенной зоной. При этом электроны, находящиеся в полупроводнике 1 слева от барьера, имеют недостаточную энергию для его преодоления. Внутри полупроводника 2 эти электроны попасть не могут, поскольку значения их энергий внутри барьера запрещены – они попадают в запрещенную зону. Несмотря на это, если размер барьера составляет несколько атомных слоев, часть электронов способна преодолеть барьер. Чтобы приготовить структуру, содержащую потенциальную яму, следует поместить слой полупроводника с узкой запрещенной зоной между двумя полупроводниками с широкой запрещенной зоной. При этом электроны, находящиеся в полупроводнике 1, т.е. внутри ямы, имеют недостаточную энергию для того, чтобы покинуть яму, т.е. перейти в полупроводник 2.



**Рис. 11.** Пример создания потенциального барьера и ямы при помощи полупроводниковых гетероструктур.

## Вопрос 24. Что такое «эффект бабочки»?

В хаотическом мире трудно предсказать, какие вариации возникнут в данное время и в данном месте, ошибки и неопределённость нарастают экспоненциально с течением времени. Лоренц Эдвард Нортон назвал это явление эффектом бабочки: бабочка, взмахивающая крыльями в Айове, может вызвать лавину эффектов, которые могут достигнуть высшей точки в дождливый сезон в Индонезии. В 1952 г. Р. Брэдбери написал рассказ «И грянул гром», где случайная гибель бабочки в далёком прошлом изменяет мир будущего кардинально. «Небольшие различия в начальных условиях рожают огромные



различия в конечном явлении... Предсказание становится невозможным», - сказал однажды известный математик А. Пуанкаре.

Эффект бабочки влияет на науку, а затем и на общество в целом. Незаметное появление «вчера» новых наноматериалов для электродов в аккумуляторах позволяет «сегодня» создавать батареи с уникальными характеристиками, а «завтра» это кардинально изменит облик мирового автопрома. И это только один небольшой пример «*эффекта бабочки*» в нашей жизни, созданный нанотехнологией.

Ведущие американские, немецкие и японские автопроизводители – General Motors, Chrysler, Ford, Mercedes-Benz, Volkswagen, BMW, Toyota, Mitsubishi, Honda, Subaru, альянс Renault-Nissan – рассматривают именно электромобиль как наиболее перспективное направление дальнейшего развития автомобильной промышленности и лишь ожидают массового появления эффективных аккумуляторных технологий. Как показывает анализ – в этом направлении именно нанотехнологии скажут свое решающее слово.

## **Вопрос 25. Какие наноматериалы существуют?**

Развитие человеческой цивилизации связано с освоением новых материалов и технологий их получения. На смену каменному, бронзовому и железному векам пришел век наноструктурных материалов. Под структурой понимают особенности в строении, форме, размере материала. В природе встречаются материалы, имеющие структуру шара, иглы, диска, снежинки, дерева, нити, ракушки и т.д. Наноструктурными материалами (или просто наноматериалами) называют материалы, обладающие структурой нанометрового размера.

При переходе вещества от макро размеров к наноразмерам происходит резкое изменение их свойств. Изменения связаны с двумя основными причинами – увеличение доли поверхности и изменение электронной структуры в силу квантовых эффектов.

Свойства атомов, находящихся вблизи поверхности отличаются от свойств атомов, находящихся в объеме материала, поэтому поверхность материала можно рассматривать как особое состояние вещества. Чем больше доля атомов, находящихся на поверхности, тем сильнее эффекты, связанные с поверхностью.

Особенности в электронной структуре нанообъектов объясняются усилением квантовых свойств с уменьшением размеров. Известно, что наночастицы некоторых веществ обладают неплохими каталитическими и адсорбционными свойствами. Некоторые наноматериалы обладают уникальными оптическими свойствами, в частности, сверхтонкие пленки органических веществ используют при изготовлении солнечных батарей.

В настоящее время технологи научились получать достаточно большое число разнообразных наноматериалов. Современная наука классифицирует следующие виды наноматериалов: *наночастицы; нанопористые структуры; нанотрубки и нановолокна; нанодисперсии; наноструктурированные поверхности и пленки; нанокристаллические материалы.*

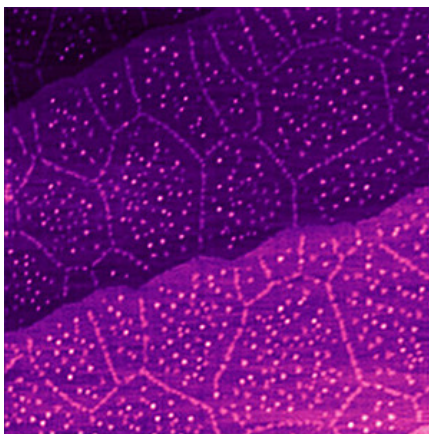
## Вопрос 26. Что такое наночастицы?

Наночастицами называют частицы, размер которых меньше 100 нм. Наночастицы состоят из  $10^8$  или меньшего количества атомов, и их свойства отличаются от свойств объемного вещества, состоящего из таких же атомов. Наночастицы, размер которых меньше 5-10 нм называют нанокластерами. Слово кластер произошло от английского «cluster» – скопление, гроздь. Обычно, в нанокластере содержится до 1000 атомов.

В качестве примера можно привести наночастицы серебра, которые обладают уникальными антибактерицидными свойствами. То, что ионы серебра способны нейтрализовать вредные бактерии и микроорганизмы известно достаточно давно. Установлено, что наночастицы серебра в тысячи раз эффективнее борются с бактериями и вирусами, чем отдельные бактерии. Как показали эксперименты, ничтожные количества наночастиц серебра уничтожают все известные микроорганизмы.

Наночастицы серебра активно используются в косметике, зубной пасте, дезинфицирующих средствах и т.д. Уникальные свойства наночастиц серебра объясняются особыми свойствами поверхности.

Другим интересным примером являются наночастицы золота. Наночастицы при определенных условиях обладают свойством самоорганизации и выстраиваются на поверхности кремния вдоль энергетически выгодных направлений (рис.12). Еще в 19 веке ученый Майкл Фарадей, впервые создав наночастицы золота, обнаружил, что их цвет менялся на фиолетовый. Изменение цвета наночастиц связано с уменьшением их размеров и объясняется законами квантовой механики.



**Рис.12.** Самоорганизация nanoостровков золота (высотой 0,3-0,6 нм) на ступенчатой поверхности Si(111). Изображение размером 3,2X3.2 мкм предоставлены Родякиной Е.Е., Косолюбовым С.С., Щегловым Д.В., Латышевым А.В. Институт физики полупроводников СО РАН, Россия. С сайта [ntmdt.ru/scan-galler](http://ntmdt.ru/scan-galler).

## Вопрос 27. Что такое фуллерен?

Значение углерода в нанохимии, связанное с открытием фуллеренов и нанотрубок очень велико. **Фуллерены** – кластеры из более, чем 40 атомов углерода, по форме представляющие шароподобные каркасные структуры, напоминающие по форме футбольный мяч. Фуллерены получили свое название в честь архитектора Фуллера, который придумал подобные структуры для использования их в архитектуре.

Наиболее устойчивого 27анотехн  $C_{60}$ , которая была впервые обнаружен Крото с сотрудниками в 1985 г. (рис.13). По мере исследования фуллеренов были получены кластеры, содержащие различное число атомов углерода – от 36 до 540.

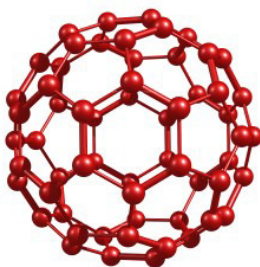


Рис.13. Вид фуллерена.

## Вопрос 28. Что такое нанотрубки?

В 1991 году японский ученый Сумио Иидзима обнаружил длинные углеродные структуры, получившие название **нанотрубок**. Фуллерены и нанотрубки наиболее исследуемые объекты нанотехнологий, обладающие рядок удивительных свойств. Данные объекты нашли широкое применение в науке и технике.

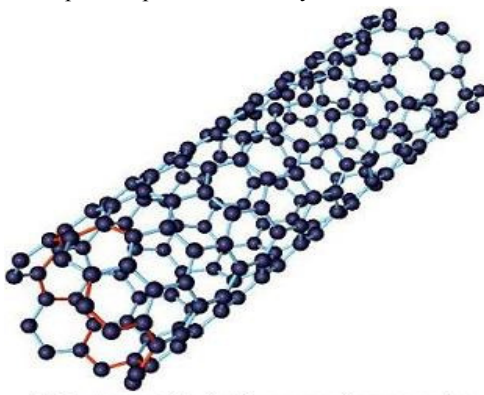


Рис.14. Модель углеродной нанотрубки.

## Вопрос 29. Что такое нанопористые вещества?

Вспомните, как выглядит губка или мочалка в вашей ванне. Это пример **пористых** (от греч. Porus – проход, канал) материалов. Мхи, лишайники, водоросли также являются пористыми материалами. Пористые материалы характеризуются наличием большого количества пустоты в своем объеме. Эту пустоту называют порами. Численной характеристикой пористых веществ является пористость  $\rho$  :

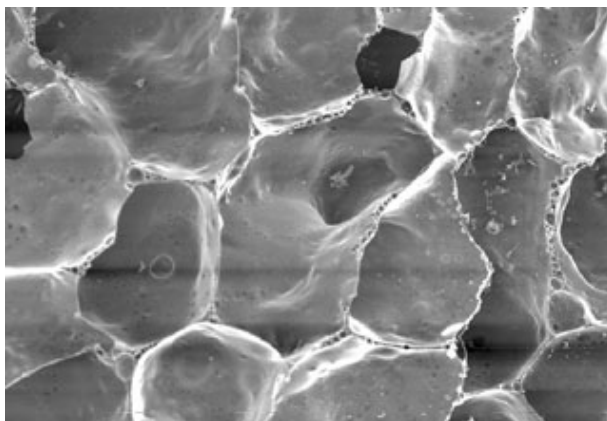
$$\rho = \frac{V_{por}}{V} \cdot 100\% ,$$

где  $V_{por}$  – объем пор,  $V$  – объем материала. Для некоторых пористых материалов пористость может достигать 80-90%.

Вспомните губку. Пористые материалы могут заполнять свои пустоты в объеме водой, другой жидкостью или газом. Поэтому пористые материалы применяют в качестве фильтров, сит, сорбентов. Сорбенты – вещества, которые используются для поглощения различных химических элементов. Примером сорбента является активированный уголь, который вы не раз употребляли при расстройстве желудка.

**Нанопористые вещества** представляют собой пористые вещества с нанометровым размером пор. Размеры нанопор находятся в пределах 1-100 нм. Выделяют также **микро-мезо- и макропористые** материалы с размерами пор более 100 нм. При уменьшении размеров пор у наноматериалов появляются новые способности к фильтрации, и сорбции различных химических элементов (рис.15).

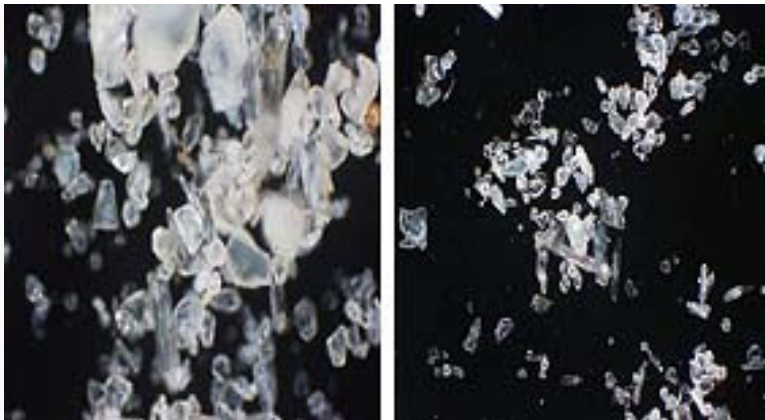
Тип пор	Диаметр пор, d
Микропоры	$d < 2 \text{ мкм}$
Мезопоры	$2 \text{ мкм} < d < 50 \text{ мкм}$
Макропоры	$(d > 50 \text{ мкм})$



**Рис. 15.** Изображение пористого материала, полученного в электронном микроскопе.

### Вопрос 30. Что такое нанодисперсии?

*Нанодисперсии* — система, состоящая из жидкой фазы с равномерно растворенными в ней наночастицами (рис.16). Сегодня основное применение нанодисперсий в медицине и косметике.



**Рис. 16.** Тонкодисперсный порошок с размером частиц не более 10 мкм из природного слоистого минерала серпентинит, получаемого при помощи тщательного измельчения (в увеличенном и уменьшенном масштабе) ([industry.noveco.ru](http://industry.noveco.ru)).

Наночастицы, растворенные в жидкой фазе можно использовать для транспорта лекарств. Лекарство «прицепляется» к поверхности наночастиц или располагается в их объеме. Наночастицы выполняют функцию трамвая для лекарств, доставляя и высаживая их на остановке «больной орган».

Нанодисперсии активно применяются в косметике. Оказывается, косметические омолаживающие и восстанавливающие препараты легче проникают в клетки биологических тканей, если их поместить в специальный **наноконтейнер**.

### Вопрос 31. Что такое наноструктурированные поверхности и пленки?

На поверхности луж можно наблюдать радужные пятна. Это пример пленки, которая образовались из бензина, равномерно «растекшегося» по поверхности воды. Толщина пленок может составлять несколько атомных слоев. Такие пленки являются одним из объектов нанотехнологий. Самая тонкая пленка состоит из одного атомного слоя вещества, нанесенного на твердую или жидкую поверхность. Такие пленки называют **пленками Ленгмюра – Блоджетта**. Пленки или слои, собранные из полупроводниковых материалов называют **гетероструктурами**.

### Вопрос 32. Что такое гетероструктура?

Пленки или слои, собранные из полупроводниковых материалов называют **гетероструктурами**. Гетероструктура может состоять из последовательности десятков полупроводниковых слоев, с толщиной в несколько нанометров (рис.17). Полупроводниковые гетероструктуры используются для создания ярких светодиодов, лазеров и других полупроводниковых приборов современной микроэлектроники. В 2000 году российский ученый Жозес Алферов получил Нобелевскую премию по физике за разработку технологий создания гетероструктур.

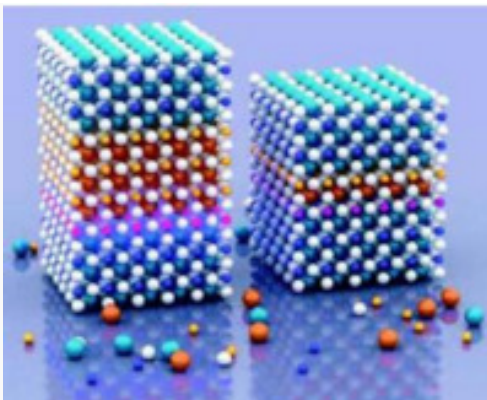


Рис. 17. Модель гетероструктуры (<http://www.nanonewsnet.ru>).

### Вопрос 33. Какие технологии существуют для создания наноматериалов и наноструктур?

Первое упоминание методов, которые впоследствии будут названы нанотехнологией, связывают с известным выступлением Ричарда Фейнмана «Там внизу много места», сделанным им в 1959 году в Калифорнийском технологическом институте на ежегодной встрече Американского физического общества. Ричард Фейнман предположил, что возможно механически перемещать одиночные атомы, при помощи манипулятора соответствующего размера, по крайней мере, такой процесс не противоречил бы известным на сегодняшний день физическим законам.

Нанотехнологии позволяют создать и использовать материалы и устройства нанометровых размеров. Существует два подхода при получении нанометровых объектов и изделий. Эти подходы принято называть технологиями «сверху-вниз» и «снизу вверх».

Технология «сверху-вниз» основана на уменьшении размеров тел механической или иной обработкой, вплоть до получения объектов нанометрового размера. Так, например, наночастицы можно получить перемалывая в специальной мельнице материал

макроскопических размеров. Другим примером технологии «сверху – вниз» является литография.

Технология «снизу-вверх» сводится к получению наноразмерного объекта путем сборки из отдельных атомов и молекул. В большинстве технологий сборки наноматериалов из отдельных атомов лежит явление конденсации. Конденсация (позднелатинское *condensatio* – сгущение, от латинского *condenso* – уплотняю, сгущаю), переход вещества из газообразного состояния в жидкое или твёрдое вследствие его охлаждения или сжатия. Дождь, снег, роса, иней — все эти явления природы представляют собой следствие конденсации водяного пара в атмосфере. Конденсация пара возможна только при температурах ниже критической для данного вещества. Аналогично молекулам воды, можно «конденсировать» атомы и молекулы других химических элементов. Конденсация, как и обратный процесс – испарение, является примером фазовых превращений вещества (фазовый переход первого рода).

Процесс фазового превращения из газа в жидкость или из жидкости в твердое вещество протекает за определенное время. На начальной временной стадии процесса превращения образуются наночастицы, которые затем перерастают в макроскопические объекты. Наночастицы можно получить, если «заморозить» фазовый переход на начальной стадии.

При конденсационном методе получения наночастиц необходимо испарить из макроскопического тела атомы, из которых и будет проходить «сборка». Испарение можно произвести за счет термического или лазерного разогрева макроскопического тела. Испаренные атомы необходимо перенести в область пониженных температур, где и происходит их конденсация в наночастицы. Сложность технологического процесса заключается в создании условий, при которых наночастицы не перерастут в макроскопические тела. На основе явления конденсации получают фуллерены, углеродные трубки, нанокластеры и наночастицы различного размера. Управляемая конденсация атомов на поверхности кристалла (подложке) лежит в основе технологии – эпитаксии.

### **Вопрос 34. Что такое эпитаксия?**

Эпитаксия (от греч. *Επί* – на, над и греч. *Τάξις* – расположение, порядок), ориентированный рост одного кристалла на поверхности другого (подложки). Эпитаксию необходимых атомов на поверхность кристалла можно производить как из жидкой, так и газовой фазы. Процесс эпитаксия обычно начинается с возникновения на подложке отдельных кристалликов, которые срастаясь друг с другом, образуют сплошную плёнку. Современные методы эпитаксии позволяют наращивать слои толщиной в несколько (даже один!) атомных слоев, а также последовательно наращивать слои с различными физико-химическими свойствами.

Эпитаксия широко используется в микроэлектронике (транзисторы, интегральные схемы, светодиоды и т. Д.); в квантовой электронике – многослойные полупроводниковые гетероструктуры, инжекционные лазеры, в устройствах интегральной оптики в вычислительной технике (магнитные элементы памяти) и т.п.

## Вопрос 35. Что такое литография?

Название «литография» происходит от греческих слов «литос» - камень и «графо» - пишу, что дословно означает «писать на камне». В настоящее время литография является одним из основных инструментов получения наноструктур в электронике.

Литография позволяет создавать наноструктуры на поверхности твердых тел. В простейшем случае литография состоит из нескольких этапов: На первом этапе на поверхность твердого тела наносится слой фоторезиста. Фоторезист – это светочувствительное вещество, которое под действием излучения изменяет структуру поверхности, на которую он нанесен. Далее на поверхность наносится фотошаблон, представляющий собой маску из прозрачных и непрозрачных для излучения участков. Фотошаблон представляет собой трафарет для «резьбы» по поверхности твердого тела. Следующий этап процесса литографии называется экспонированием. Поверхность твердого тела с нанесенным на нее фоторезистом и наложенным сверху фотошаблоном подвергается облучению оптическим источником излучения (лампа или лазер). В результате, под прозрачными для излучения участками фотошаблона происходит изменение структуры поверхности, вызванное действием фоторезиста.

Измененная фоторезистом часть поверхности может быть удалена вместе с фоторезистом с помощью процедуры травления. Химическое травление основано на растворении специальными химическими веществами (травителями) поверхности, изменившей свою структуру под действием облученного фоторезиста.

Таким образом, можно «вырезать» на поверхности твердого тела достаточно сложные структуры. Литография является одним из основных этапов создания микросхем – устройств, управляющих электронной техникой. Уменьшение размеров микросхем может быть достигнуто при уменьшении размеров «рисунков», формируемых при литографии. Характеристикой источника оптического излучения, используемого для «засветки» фоторезиста через фотошаблон является длина волны излучения. Из-за явления дифракции данная величина, не может быть больше размера деталей, которые мы хотим вырезать с помощью литографии. Если мы используем в литографии источник излучения с длиной волны в 1 микрон, то и минимальный размер деталей, которые нам удастся нарисовать будет таким же. Для того, чтобы нарисовать объект нанометрового размера с помощью литографии необходимо использовать источники дальнего ультрафиолетового излучения с длиной волны в несколько десятков нанометров.

## Вопрос 36. Какие наноматериалы самые перспективные?

Самыми перспективными материалами нанотехнологий в настоящее время считаются материалы и структуры на основе углеродных нанотрубок и других углеродных материалов. Спектр применения этих материалов чрезвычайно широк – от био- и химических сенсоров до микросистем и полупроводниковых приборов нанометровых размеров. Обладая уникальными механическими свойствами, они очень чувствительны ко многим параметрам окружающей среды, и в то же время устойчивы и технологичны.

Углеродные нанотрубки необыкновенно прочны на растяжение и на изгиб. Под действием больших механических напряжений они не рвутся, не ломаются, а просто



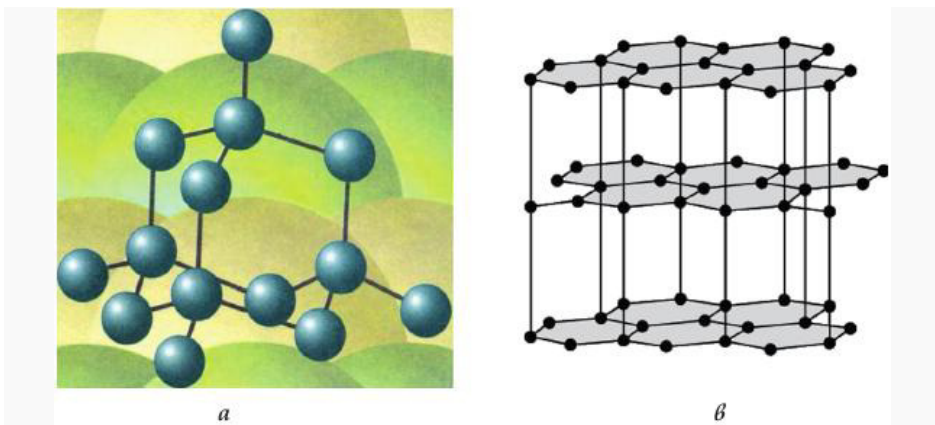
перестраивают свою структуру. Нанотрубки обладают важными для практического использования свойствами: они способны проводить ток очень высокой плотности, менять свои свойства при присоединении (адсорбции) других атомов и молекул, испускать электроны со своих концов при низких температурах (холодная электронная эмиссия) и т.д. Поэтому во всем мире ведутся интенсивные исследования их свойств, что расширяет область их практического использования.

### Вопрос 37. Какие углеродные материалы существуют?

Углерод является неметаллическим химическим элементом IVA подгруппы (C, Si, Ge, Sn, Pb) периодической системы элементов Д.И.Менделеева. Поэтому у углерода 4 валентных электрона. Он широко распространен, составляет основу живой природы, но содержание его в земной коре всего 0,19%. Д. И. Менделеев писал, что «ни в одном из элементов такой способности к усложнению не развито в такой мере, как в углероде».

Способность атомов одного химического элемента соединяться друг с другом различными способами, образуя различные пространственные конфигурации, называется *аллотропией*.

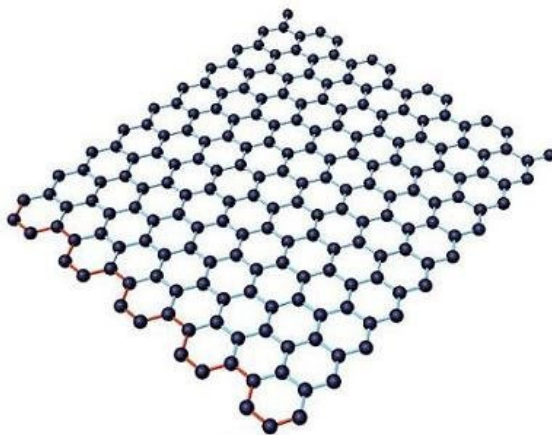
Углерод в полной мере обладает этим свойством. Действительно, у углерода четыре аллотропические модификации – алмаз (рис.18а), графит (рис.18б), карбин и фуллерен. В последние годы обнаружены новые модификации углерода: фуллерены, углеродные нанотрубки, графен, уникальные свойства которых открывают большие возможности в области нанотехнологий.



**Рис. 18.** Кристаллическая структура алмаза (а) и графита (б)

У алмаза все четыре валентных электрона атомов углерода образуют высокопрочные ковалентные связи С–С. Их трудно разорвать. Поэтому у него отсутствуют электроны проводимости, и он относится к диэлектрикам. По этой же причине алмаз обладает исключительной твердостью и высокой температурой плавления (3550°C).

Другой аллотропической формой углерода является графит, сильно отличающийся от алмаза по свойствам. Графит – мягкое черное вещество из легко слоящихся плоскостей, называемых графеновыми. В пределах графеновой плоскости атомы углерода соединены сильными ковалентными связями. Эти связи образуют двухмерную гексагональную решетку, в основе которой лежит правильный шестиугольник (рис. 19). Однако, в отличие от алмаза, в образовании связей участвуют только 3 электрона. Четвертые электроны атомов свободны. Это обуславливает хорошую электропроводность графеновых плоскостей (электрическое сопротивление – 0,0014 См). Между графеновыми плоскостями существует слабое притяжение, которое обусловлено силами Ван-дер-Ваальса. Природа этих сил объясняется взаимодействием электронной оболочки атома с положительно заряженным ядром соседнего атома, кулоновское поле которого экранировано собственными электронами. Слабое взаимодействие между плоскостями приводит к тому, что они легко скользят относительно друг друга и могут отслаиваться от графита.



**Рис. 19.** Модель графена в виде двухмерной гексагональной решетки (<http://www.ixbt.com>)

Хотя графит известен с незапамятных времен, изолированные графеновые плоскости научились получать и исследовать только в 2004 году. Профессор А. Гейм совместно с группой доктора наук К.С. Новоселова (Черноголовка, Россия) сумели получить материал толщиной в один атом углерода. Этот материал, названный графеном, представляет собой двухмерную плоскую молекулу углерода толщиной в один атом.

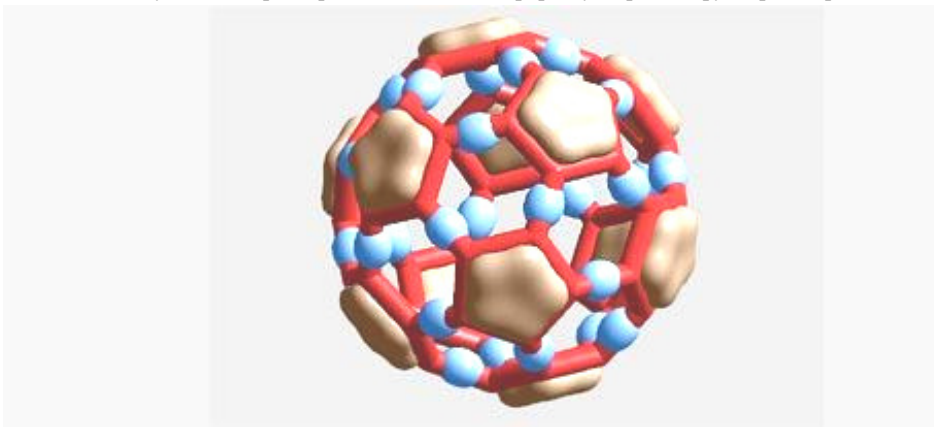
Свойства графена оказались совершенно удивительными. Эффективная масса электронов графена стремится к нулю, поэтому эти электроны обладают большой подвижностью. Их подвижность в сотни раз превосходит подвижность электронов и дырок в кристаллическом кремнии, который является самым распространенным материалом современной микроэлектроники.

Графен позволяет создавать транзисторы и другие полупроводниковые приборы очень малых габаритов (порядка нескольких нанометров). Уменьшение размеров

транзистора приводит к изменению его свойств. С уменьшением размеров происходит переход в наномир, где усиливается роль квантовых эффектов. Электроны перемещаются по каналу как волны де Бройля, а это уменьшает количество столкновений (актов рассеяния) и, соответственно, повышает эффективность транзистора, так как уменьшаются потери энергии, неизбежные при рассеянии электронов.

Третьей аллотропической формой углерода является карбин, открытый в 60-х годах XX века. Карбин представляет линейную структуру, в которой атомы углерода соединены двойными связями ( $=C=C=$ ) либо чередующимися одинарными и тройными связями. Таким образом, структура карбина одномерная. Эти нити могут формировать углеродные волокна, обладающие большой прочностью и проводящими свойствами. Карбиновые нити могут замыкаться в кольца.

В 1985 году была открыта ранее неизвестная форма углерода – фуллерены (рис. 20).



**Рис. 20.** Модель фуллерена

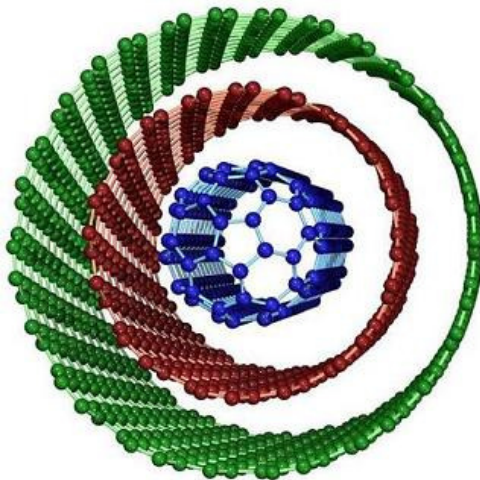
Фуллерен представлял собой новую аллотропическую форму углерода. В фуллерене каждый атом углерода соединён тремя прочными химическими связями с другими атомами. Это имеет место и на графеновой плоскости. Однако, в отличие от графена, фуллерен образует выпуклую, замкнутую поверхность, состоящую из правильных шести и пятиугольников. По виду он напоминает футбольный мяч. Фуллерен назван в честь архитектора Б. Фуллерена, который создавал подобные купола у строящихся помещений.

Формы фуллеренов могут быть достаточно разнообразными. В то же время квантовохимические расчеты показывают, что их построение подчиняется определенным правилам. Стабильные кластеры углерода имеют вид полиэдров, в которых каждый атом углерода имеет координационное число 3. Более стабильны карбополиэдры, содержащие только пяти- и шестичленные циклы. Наиболее исследованной является молекула фуллерена, которая состоит из 60 атомов и обозначается  $C_{60}$ . Структура  $C_{60}$  содержит 20 шестиугольников и 12 пятиугольников, причем каждый шестиугольник граничит с 3 пятиугольниками и 3 шестиугольниками, пятиугольники граничат только с шестиугольниками. Такая структура обеспечивает молекуле  $C_{60}$  необычайную устойчивость. Наличие пятиугольников при построении замкнутых объемных геометрических фигур обязательно, именно они обеспечивают искривление графитовых

слоев. Длины С–С связей различаются в зависимости от того, на какой границе они находятся: длина С–С связи на границе шестиугольник-шестиугольник равна 0,139 нм, а длина С–С связи на границе шестиугольник-пятиугольник 0,144 нм.

Уже упоминалось, что в образовании структуры фуллерена принимает участие 3 электрона. Четвертый электрон находится на свободной химической связи. Поэтому данные молекулы обладают важными химическими свойствами. Они могут образовывать полимерные структуры, а также присоединять водород (гидрированные фуллерены), фтор (фторированные фуллерены) и другие атомы.

После открытия фуллерена ученые выяснили, что графеновые плоскости могут при определенных условиях сворачиваться в трубки. Эти образования были названы *углеродными нанотрубками* (УНТ). УНТ – это полые продолговатые цилиндрические структуры диаметром порядка от единиц до десятков нанометров и длиной порядка десятков микрон (рис.21).



**Рис.21.** Модель многостенной углеродной нанотрубки (<http://www.ixbt.com>)

Идеальная нанотрубка представляет собой свернутую в цилиндр графеновую плоскость, т. Е. поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Формы углеродных нанотрубок очень разнообразны. Они могут быть одностенными или многостенными (однослойными или многослойными), прямыми или спиральными, длинными и короткими и т. Д. УНТ могут быть открытыми. В последнем случае их конец заканчивается половинкой фуллерена, поэтому фуллерены и УНТ являются родственными структурами купольного типа.

## Вопрос 38. Как получают углеродные нанотрубки и родственные материалы?

Со дня открытия углеродных нанотрубок (УНТ) Ишимой в 1991 году разработано множество методов их выращивания, которые можно классифицировать по двум основным направлениям: высокотемпературному и среднетемпературному. Высокотемпературный метод основан на испарении графита тем или иным способом, например лазером или дуговым разрядом. Среднетемпературные методы – это методы химических транспортных реакций.

При *высокотемпературных методах* получения графит испаряется при температурах выше температуры возгонки ( $3200^{\circ}\text{C}$ ). Высокотемпературные методы разделяются на две основные группы: дуговой разряд между графитовыми электродами и испарение импульсным лазером.

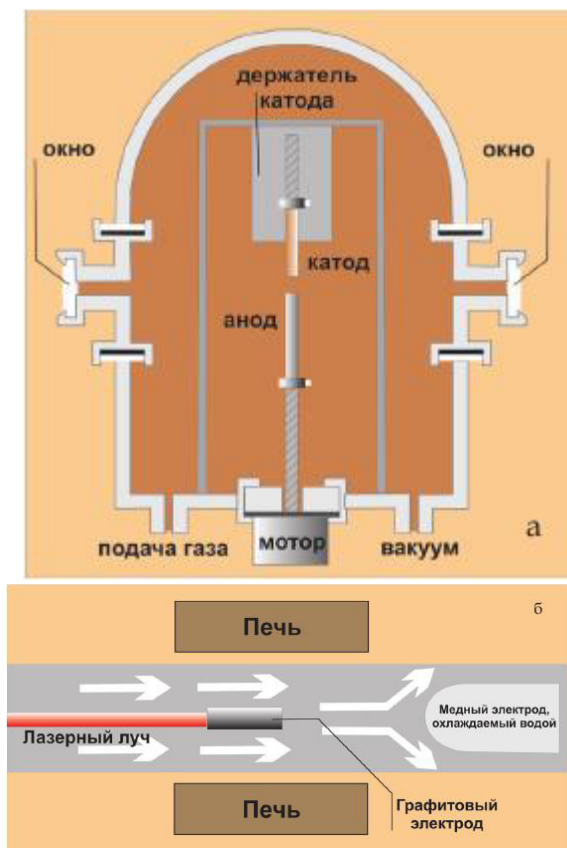
На рис.22 приведена схема выращивания УНТ в дуговом разряде. При *дуговом разряде* один из графитовых электродов (анод) содержит частицы катализаторов, а именно Fe, Ni, Co или редкоземельные элементы. Реактор дугового разряда состоит из цилиндра диаметром 30 см и длиной порядка 1 м. Из реактора предварительно откачивается воздух, а потом объем заполняется рабочим инертным газом. Поджигается дуговой разряд с током более 60 А.

УНТ можно получать, испаряя графитовый электрод с катализатором лучом лазера в потоке инертного газа (рис.22). При этом УНТ осаждаются на медный, охлаждаемый водой, электрод. Метод химических транспортных реакций заключается в осаждении УНТ при пиролизе углеводорода, например ацетилена, в присутствии катализатора. В этом случае температура выращивания трубок составляет  $700\text{--}900^{\circ}\text{C}$ .

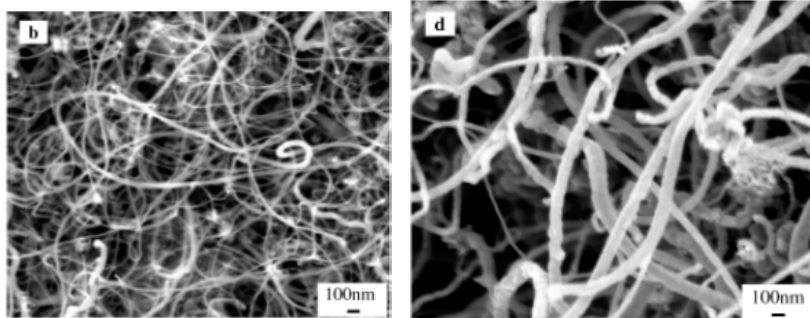
Температура роста и вещество катализатора влияют на свойства трубок. На рис. 23 приведены сделанные электронным микроскопом снимки УНТ, выращенных при двух температурах.

## Вопрос 39. Каков механизм роста углеродных нанотрубок?

Считается, что нанотрубки открыты в течение всего процесса роста, и атомы углерода присоединяются к открытому концу (рис.24). Последовательное присоединение димеров  $\text{C}_2$  (два атома углерода) приводит к непрерывному росту нанотрубок. Иногда требуются 37анотехн  $\text{C}_3$  (три атома углерода), чтобы добавлять шестиугольники и не формировать пятиугольники. Введение пятиугольников приводит к искривлению, которое закрыло бы нанотрубку и закончило бы рост. Появление семиугольника приводит к изменениям в размере трубки и её ориентации в пространстве. Таким образом, введение пар «пятиугольник-семиугольник» может разнообразить структуры трубок, что очень часто наблюдается экспериментально. Последние научные результаты показывают, что УНТ растет из капли катализатора, в качестве которого выступает металл подгруппы железа. Фуллерены выращиваются аналогичными методами.

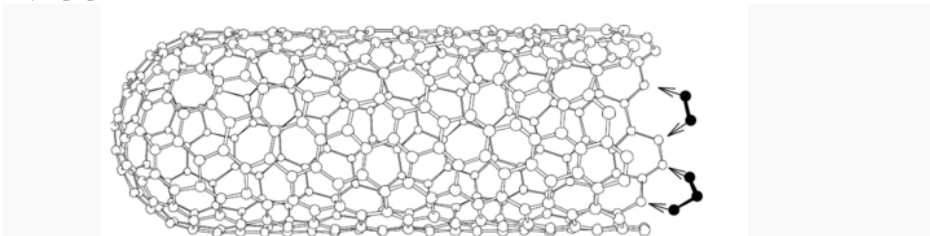


**Рис.22.** Высокотемпературные методы выращивания УНТ: сверху) в дуговом разряде; снизу) лазерным испарением



**Рис.23.** Получение УНТ различных размеров при изменении температуры роста: слева – 750 °С; справа – 900 °С.

Карбины получают методами отслаивания графеновых плоскостей. Для этого используют чистый графит либо карбид кремния. Это химическое соединение состоит из чередующихся слоев углерода и кремния. Кремниевый слой растворяют, а углеродный монокатомный слой отделяется. Проблема состоит в том, как его сохранить, так как он деформируется и разрушается. Выход был найден, когда слой поместили на подложку из окиси кремния. В этом случае он достаточно устойчив, и его можно исследовать. Однако при этом свойства подложки и особенно её дефекты влияют на свойства полученного «бутерброда».



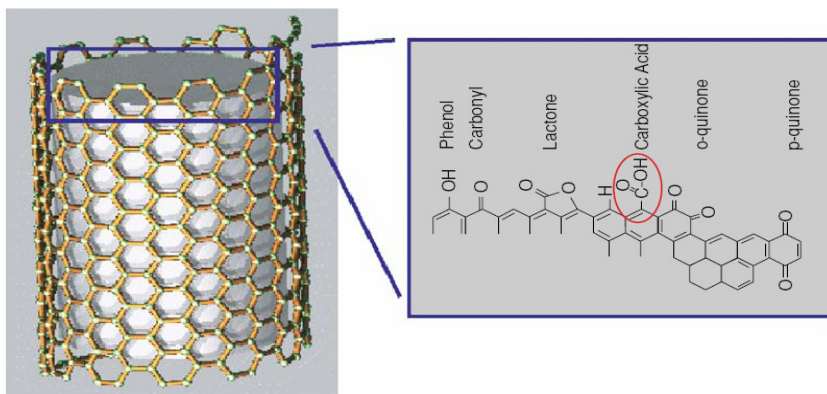
**Рис.24.** Схема механизма роста углеродной нанотрубки (белые шарики – атомы углерода структуры, черные шарики – димеры C2 и C3 нанотехн C3). На открытом конце происходит рост, поглощение C2 и C3.

#### **Вопрос 40. Как будут применяться углеродные нанотрубки?**

**Химические и биохимические сенсоры.** Углеродные нанотрубки обладают важным свойством – изменять свою проводимость при адсорбции чужеродного атома или молекулы. Величина изменения проводимости зависит от числа адсорбированных атомов. Ленгмюр, исследуя явление адсорбции, установил, что число адсорбированных атомов определяется давлением, которые они создают в окружающей среде. В соответствии с уравнением состояния  $p = nkT$  давление  $p$  определяется концентрацией атомов  $n$  в пространстве. Поэтому изменение проводимости нанотрубки можно использовать для определения концентрации химических веществ в пространстве, окружающем нанотрубку.

Это изменения свойство можно усилить, применяя специальную обработку поверхности нанотрубки. В последнее время возникло направление, которое названо «ковалентной химией углеродных нанотубок». Это направление заключается в поиске и присоединении к УНТ радикалов, которые повышают чувствительность к измерению концентрации определенных веществ. Это направление опирается на то обстоятельство, что в образовании самой нанотрубки участвует 3 электрона каждого атома углерода, а четвертый может установить химическую связь с присоединяемой молекулой. Этот процесс показан на рис. 25.

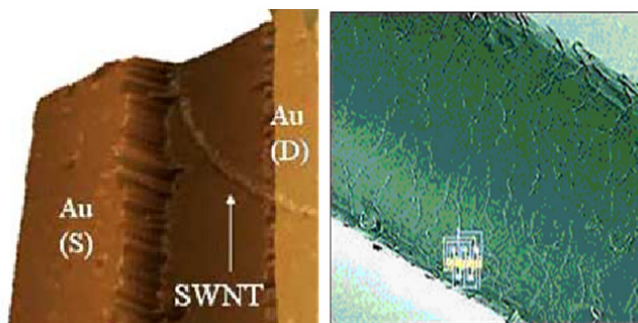




**Рис. 25.** Присоединение различных функциональных групп к УНТ.

Присоединенные функциональные группы (радикалы) образуют своеобразную «шубу» у нанотрубки, которая реагирует на присоединение определенного чужого атома или молекулы. Подбирая состав «шубы» можно измерять концентрацию достаточно сложных молекул, в том числе ДНК.

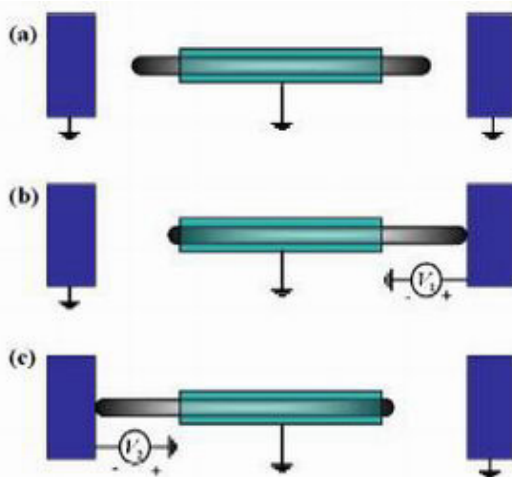
**Вычислительные системы.** Основу современных вычислительных систем составляют логические элементы на полевых транзисторах и ячейки памяти. Полевой транзистор с изолированным затвором представляет прибор, проводимость канала которого управляется электрическим полем. Это поле создается при подаче электрического напряжения на электрод затвора. В настоящее время созданы такие транзисторы у которых роль канала исполняют углеродные нанотрубки (рис.26). Пока эти транзисторы уступают по своим параметрам транзисторам на основе кремния. Но ученые надеются их улучшить. На базе такой техники созданы первые интегральные схемы. На рис 25 приведено изображение такой схемы в электронном микроскопе на фоне человеческого волоса.



**Рис.26.** Полевой транзистор (слева) и микросхема на фоне волоса (справа) на основе УНТ. SWNT – англоязычное обозначение углеродной нанотрубки, выполняющей роль канала в полевом транзисторе.



Исследования технологий хранения информации в целом являются одним из наиболее активно развивающихся направлений в настоящее время. Это обусловлено потребностью хранения все больших объемов информации во всё меньших объемах пространства. Углеродные нанотрубки позволяют изготавливать элементы памяти как совместимые с традиционной кремниевой планарной технологией, так и новые оригинальные элементы. В качестве примера приведем создание элементов памяти на основе механических свойств многостенных углеродных нанотрубок (рис. 27).



**Рис.27.** Схема работы «механической» памяти на основе нанотрубок.

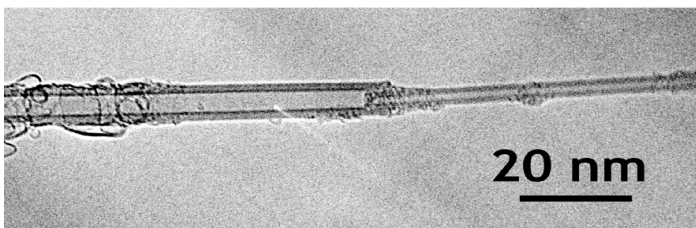
Для создания элемента памяти вскрываются концы многостенной трубки, а её внешняя оболочка закрепляется между двумя электродами (рис.27а). В зависимости от того, на левый или правый электрод соединяется с плюсом электрического напряжения, внутренняя часть трубки скользит и притягивается к этому электроду (рис.27 б и в). Таким образом, можно создать как обычную двухпозиционную память (0, 1), так и трехпозиционную (0, 1, 2).

#### **Вопрос 41. Как передвигаются многостенные углеродные нанотрубки?**

Ковалентная связь между атомами углерода очень прочная. Поэтому квантовые нити (карбиновые структуры и углеродные нанотрубки) на основе углеродных структур очень прочные. Высказывалось предположение, что трос, изготовленный из углеродных структур, может быть спущен со спутника на землю и по нему может двигаться лифт. При этом углеродные структуры являются единственным материалом, трос из которого не порвется под собственной тяжестью.

Важными механическими свойствами обладают многостенные углеродные нанотрубки, которые представляют собой цилиндры из моноатомных слоёв углерода, вставленные один в другой (рис. 28). При этом внутренние цилиндры могут

перемещаться относительно внешних практически без трения. Телескопический эффект полностью обратим. Внутреннюю трубку можно вдвигать и выдвигать. Причем этот процесс можно повторять многократно. Имеют место телескопические силы, которые в случае УНТ складываются из нескольких составляющих: сил Ван-дер-Ваальса, статических и динамических сил трения. Силы трения малы. Их экспериментальная оценка дала величину около  $10^{-14}$  Ньютона на атом. Эксперименты с фрагментом, приведенным на рис.28 показали, что силы трения остаются постоянными с течением времени.



**Рис.28.** Изображение многостенной УНТ в просвечивающем электронном микроскопе.

Описанный эксперимент позволяет создавать подшипники диаметром единицы нанометров. Кроме того, было обнаружено, что механические свойства тесно связаны с электрическими. При перемещении внутреннего цилиндра относительно внешнего полное сопротивление системы рис.28. изменяется по экспоненциальному закону:

$$R = R_0 \exp\left(\frac{x}{L_0}\right)$$

где:  $L_0$  -характеристическая длина, обусловленная свойствами трубки,  $R_0$  - сопротивление в случае, когда цилиндры полностью вдвинуты друг в друга. Изменение сопротивления позволяет изготавливать очень чувствительные датчики перемещения и ускорения. Установлено, что свойства трубок изменяются при изгибе, что позволяет изготовить датчики деформации.

## **Вопрос 42. Как в химии могут применяться углеродные нанотрубки?**

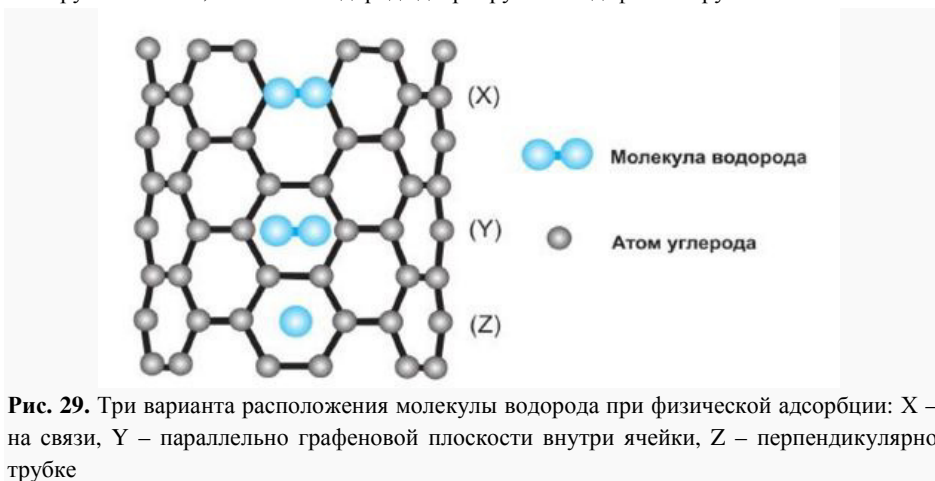
*Адсорбцией* называется физическое явление, проявляющиеся во взаимодействии атома либо молекулы одного вещества с поверхностью другого и фиксации этого атома на поверхности.

Если адсорбированное вещество не образует химической связи с поверхностью, а удерживается какими-либо силами, например, электростатическими, то адсорбция называется физической. Если химическая связь образуется – то это химическая адсорбция или хемосорбция. Особенностью адсорбции на УНТ является изменение структуры электронных состояний трубки и ее свойств. Например, адсорбция кислорода приводит к изменению типа проводимости трубки с электронной на дырочную. Поэтому явление

адсорбции можно использовать для создания датчиков концентрации различных веществ – хемосенсоров.

Водород является одним из источников энергии будущего. Высокими темпами ведутся исследования в области водородной энергетики. В связи с этим встает проблема хранения водорода. Заполнять водородом бак, как это делается с бензином, нельзя. Водород взаимодействует с кислородом воздуха, образуя воду. Эта химическая реакция протекает быстро и может сопровождаться сильным взрывом. Поэтому хранить его надо так, чтобы он не соприкасался с кислородом и выделялся очень медленно. Для этого хранилища можно заполнять пористыми веществами, которые адсорбируют водород. Одним из методов хранения этого ценного продукта является адсорбция на поверхности углерода, представленного различными аллотропическими формами.

В этом отношении перспективными материалами для хранения водорода являются новые углеродные материалы: фуллерены и углеродные нанотрубки. Так, например, углеродные нанотрубки способны удерживать водород при температурах, близких к комнатной. На рис. 29 приведены возможные варианты расположения адсорбированного водорода. Обнаружено, что энергия химической связи водорода с графеновой плоскостью весьма велика, что способствует адсорбции достаточно больших количеств водорода. Обнаружено также, что часто водород адсорбируется на дефектах трубки.



### Вопрос 43. Могут ли углеродные нанотрубки проводить ток?

Проводимость макроскопических твердых тел  $g$  есть величина обратная удельному сопротивлению. Проводимость определяется как произведение концентрации свободных носителей  $n$ , подвижности носителей заряда  $\mu$  и заряда электрона  $e$ .

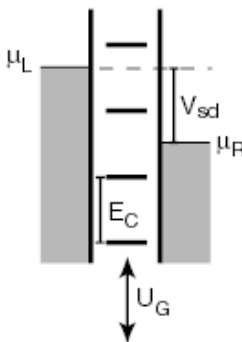
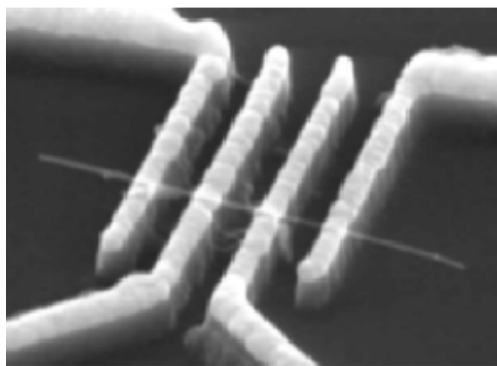
$$g = e\mu n$$

Подвижность - это дрейфовая скорость которую носитель заряда развивает при напряженности электрического поля 1 В/м. Подвижность зависит от взаимодействия

носителей заряда с разнообразными дефектами: примесями, колебаниями решетки, границами и поверхностями раздела и т.д. Взаимодействие с дефектами не носит характер соударения, т.к. электрон не сталкивается с дефектом. В то же время при взаимодействии скорость электрона меняется по направлению и величине. Поэтому говорят, что при взаимодействии с дефектом электрон рассеивается. При этом он теряет энергию, которая выделяется в виде тепла. **Физическое явление, приводящее к разогреву проводника при протекании в нем тока, называют эффектом Джоуля-Ленца.**

В отличие от массивных тел, проводимость углеродных нанотрубок, как и других квантовых нитей, имеет выраженный квантовый характер. Длина УНТ составляет несколько микрон, что меньше длины свободного пробега электронов. После пересечения границы, отделяющей трубку от внешней среды, электрон движется свободно, как выпущенная из ружья пуля. Такое движение принято называть баллистическим. При этом пока электрон движется внутри трубки, он не взаимодействует с её поверхностью. Рассеяние имеет место только в области контактов.

Для того, чтобы уяснить механизм баллистического протекания тока, рассмотрим следующую модель. Пусть имеется 2 контакта металла с УНТ (рис.30). Через левый контакт ( $L$ ) электрон входит в трубку, а через правый контакт  $R$  выходит. Металлические контакты, через которые входит и выходит электрон, представим в виде потенциальных ям. На каждом энергетическом уровне такой ямы в соответствии с принципом Паули располагается по 2 электрона с противоположно направленными спинами.



**Рис.30.** Схема измерения проводимости УНТ, полученная в сканирующем растровом микроскопе (слева) и потенциальная диаграмма контактов нанотрубки (справа).

Энергетические уровни в металле заполнены до определенной энергии, называемой уровнем Ферми или химическим потенциалом. В состоянии равновесия эти уровни расположены при одной энергии. Электрическое напряжение между контактами равно нулю. Ток отсутствует. Приложенное к контактам напряжение ( $V_{sd}$ ) понижает уровень Ферми второго контакта (рис.30). Оказывается, что в промежутке энергий  $\Delta E = eV_{sd} = \mu_L - \mu_R$  уровни первого контакта заняты электронами, а второго

свободны. Движение внутри углеродной нанотрубки возможно только в пределах разрешенных значений энергии. Попадая в трубку электрон принимает одно из этих значений ( $E$ ), в указанном интервале  $\Delta E$ . Электрон с энергией  $E$ , из указанного промежутка, свободно пролетая сквозь трубку, не меняет своей энергии и попадает на пустые состояния контакта 2. Если бы эти состояния были заполнены, то ток протекать не смог бы. Поэтому очевидно, что величина проводимости пропорциональна числу свободных уровней трубки.

Предполагается, что высокая проводимость нанотрубок позволит реализовать сверхпроводники на их основе или приборы с высокой плотностью токов, поскольку сами трубки не выделяют тепло при протекании тока. В этом направлении является самой трудной задачей создание контактов с такими же хорошими характеристиками.

#### **Вопрос 44. Как использовать высокую проводимость углеродных нанотрубок?**

Явление выхода электронов из вещества в вакуум называется электронной эмиссией. Хорошо известно явление термоэлектронной эмиссии. Это явление состоит в том, что при нагреве твердого тела до высоких температур, превышающих  $1000^\circ\text{C}$ , электроны в нем приобретают энергию достаточную для преодоления работы выхода и могут выйти в вакуум. На основе термоэлектронной эмиссии изготавливались катоды электронных ламп, которые в течение многих десятилетий определяли развитие электроники.

Меньших энергетических затрат требует холодная эмиссия при которой электрон выходит в вакуум за счет действия сильного электрического поля. Этот метод не был развит, т.к. требовал создания очень высоких электрических напряжений. Исследование углеродных трубок позволило изменить ситуацию. Радиус одностенной углеродной нанотрубки составляет  $0.7\text{ нм}$ . Это позволяет создавать вблизи конца такой трубки электрическое поле более  $10^8\text{ В/см}$ . Таких полей достаточно для выхода электрона в вакуум. Таким образом, эффективность полевой эмиссии электронов из нанотрубок обусловлено их малым диаметром и высокими электрическими полями на концах нанотрубок.

С технологической точки зрения УНТ хороши тем, что имеют стабильные параметры и высокие плотности тока эмиссии. В дисплеях реализованы плотности эмиссионного тока более  $500\text{ мА/см}^2$ . Рекордсменами эмиссионных свойств являются одностенные трубки. Это связано с тем, что диаметр их существенно меньше многостенных, а напряженность поля растет обратно пропорционально радиусу острия. Эмиссия используется для создания источников света и экранов дисплеев.

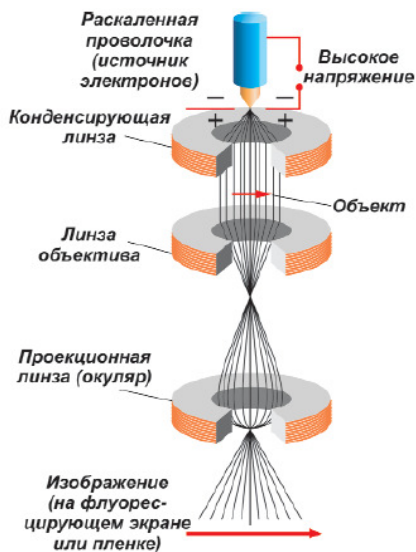
#### **Вопрос 45. Что такое просвечивающий электронный микроскоп?**

Минимальный размер объектов, доступный человеческому глазу, составляет на расстоянии наилучшего зрения, равном  $25\text{ см}$  величину порядка  $0.1\text{ мм}$ , для изучения более мелких объектов применяются различные оптические приборы – как простейшие, например лупа, так и более сложные, состоящие из нескольких линз – оптические микроскопы. Увеличение современных оптических микроскопов достигает  $1500$  раз, это

означает, что с их помощью можно различать объекты размером порядка  $10^{-7}$  м, т. е. в сотни нанометров. На пути дальнейшего увеличения разрешающей способности оптических микроскопов возникают трудности принципиального характера. Дело здесь в существовании так называемого дифракционного предела разрешения (установленного Рэлеем в семидесятых годах девятнадцатого века), говорящего о том, что нельзя различить объекты, расстояние между которыми меньше, чем  $d = 0.61\lambda/n$ , где  $\lambda$  – длина световой волны, а  $n$  – показатель преломления среды. Как известно, оптический диапазон (т.е. видимый глазом свет), простирается от 400 (фиолетовый) до 800 нм (красный), таким образом, даже теоретически при помощи самого сильного микроскопа нельзя рассмотреть объекты мельче примерно 200 нм. В этот диапазон попадают, например, живые клетки, размер которых составляет сотни и тысячи нанометров, а вот атомы, размеры которых не превышают нескольких десятых нанометра, оптическому микроскопу уже недоступны. Естественным выходом в данной ситуации представляется уменьшение длины волны излучения. Причем для того, чтобы при помощи такого микроскопа можно было различать отдельные атомы, длину волны излучения придётся уменьшить в тысячу раз.

В тридцатые годы двадцатого века была предложена схема микроскопа, использующего для построения изображения вместо световой волны поток электронов. Изобретение электронного микроскопа стало возможным вследствие бурного развития квантовой механики в начале века, когда было установлено, что частицы микромира, в частности электрон, обладают корпускулярно-волновым дуализмом, т.е. обладают свойствами как частицы, так и волны. Электронам, как оказалось, свойственна интерференция, дифракция и другие свойства, до сих пор, как считалось, присущие только световой волне. В то же время, электроны – это заряженные частицы, движением которых можно управлять при помощи электрического и магнитного поля, электронные пучки отклоняются электрическими и магнитными полями примерно так же, как световые лучи – оптическими линзами. Поэтому в электронном микроскопе устройства фокусировки и рассеивания электронного пучка называют “электронными линзами”.

Схема электронного микроскопа таким образом, аналогична схеме оптического микроскопа: электронная пушка, испускающая поток электронов плюс система электрических (магнитных) линз, фокусирующая поток электронов на исследуемом предмете. Останется только каким-то образом превратить изображение в видимое. Этот комплекс проблем был решён в тридцатых годах двадцатого века, в 1932 немецкие учёные М.Кнолл и Э.Руска построили первый такой микроскоп, применив магнитные линзы для фокусировки электронов. Этот прибор был предшественником современного **просвечивающего электронного микроскопа**. (Руска был вознагражден за свои труды тем, что стал лауреатом Нобелевской премии по физике за 1986 год). Схема электронного просвечивающего микроскопа приведена на рис. 31.



**Рис. 31.** Схема работы просвечивающего электронного микроскопа.

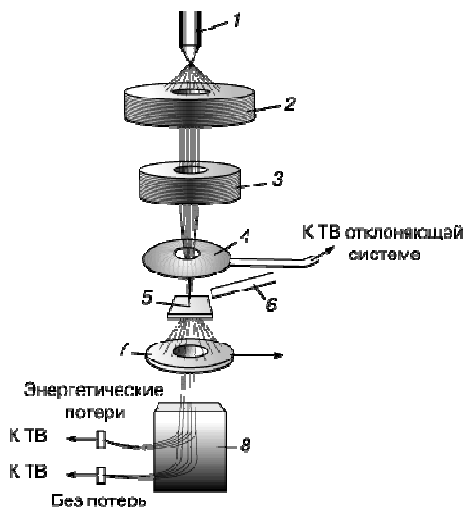
Источник излучения, т.е. источник электронов в таких микроскопах представляет собой электронную пушку, в которой источником электронов является чаще всего нагретая вольфрамовая нить. Далее испускаемые электроны проходят через электронную линзу-кондensor, регулирующую интенсивность потока излучения и освещаемую площадь поверхности исследуемого образца, а затем через линзу-объектив проецируются на люминесцентный экран, позволяющий преобразовать «электронную тень» в обычное изображение, которое можно сфотографировать или же наблюдать непосредственно.

Просвечивающий электронный микроскоп имеет несколько принципиальных особенностей: поскольку электронный поток сильно поглощается веществом, то внутри установки должен быть создан глубокий вакуум, по этой же причине исследуемый образец должен быть очень тонким (порядка 100 нм), и его изготовление является сложной исследовательской задачей.

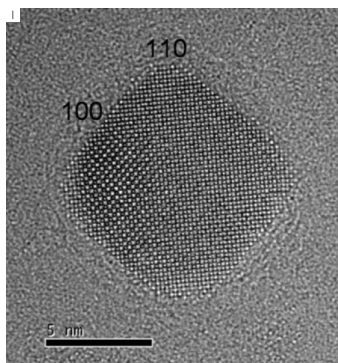
#### **Вопрос 46. Что такое растровый электронный микроскоп?**

От проблем с пробоподготовкой освобожден так называемый **растровый или сканирующий электронный микроскоп**, схема которого изображена на рисунке 32. Его конструкция имеет много общего с конструкцией просвечивающего электронного микроскопа, принципиальное отличие заключается в том, что на электронный пучок освещает не всю поверхность исследуемого предмета, а фокусируется в определённой его точке, которая при помощи отклоняющей системы перемещается по поверхности, сканируя её. На этом же принципе основано, например, построение изображения на экране телевизора (растра). Электроны, отражённые от поверхности в фиксируются детектором, что даёт возможность получать информацию о её структуре.

Поскольку в данном случае электроны, участвующие в построении изображения не проходят через исследуемый образец, то нет ограничений на толщину образца, и его подготовка существенно упрощается, кроме того, нет необходимости поддерживать внутри установки глубокий вакуум, что упрощает конструкцию микроскопа. Хотя схема растрового электронного микроскопа была предложена Кноллем в 1935 году, а первая реальная установка была создана М. фон Арденне в 1936 году, развитие по различным техническим причинам она получила лишь в шестидесятых годах двадцатого века.



**Рис.32** Схема работы растрового электронного микроскопа. 1 – источник электронов; 2 – ускоряющая система; 3 – магнитная линза; 4 – отклоняющие катушки; 5 – образец; 6 – детектор отраженных электронов; 7 – кольцевой детектор; 8 – анализатор (<http://www.krugosvet.ru>)



**Рис. 33.** Микрофотография наночастиц  $\text{CeO}_2$ , полученная при помощи электронного микроскопа Titan с максимальным разрешением 0.05 нм (иллюстрация компании производителя электронных микроскопов FEI Company <http://www.fei.com>).



Разрешающая способность просвечивающих электронных микроскопов достигает 0.2 нм что даёт возможность получать изображения отдельных атомов и молекул, разрешающая способность растровых электронных микроскопов приближается к этой величине и достигает в настоящее время величины 0.5 нм (рис. 33).

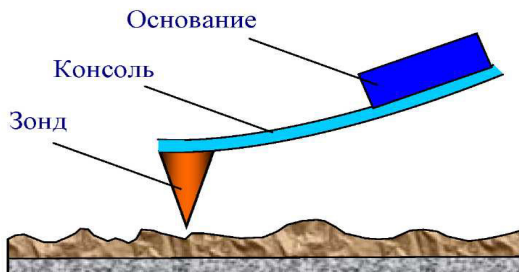
#### **Вопрос 47. Что такое сканирующий атомно-силовой микроскоп?**

Атомно-силовая микроскопия – вид зондовой микроскопии, в основе которого лежит силовое взаимодействие атомов. На расстоянии около одного ангстрема между атомами образца и атомом зонда (кантилевера) возникают силы отталкивания, а на больших расстояниях – силы притяжения. Идея устройства очень проста – кантилевер, перемещаясь относительно поверхности и реагируя на силовое взаимодействие, регистрирует ее рельеф.

В сканирующих зондовых микроскопах исследование микрорельефа поверхности и ее локальных свойств проводится с помощью специальным образом приготовленных зондов в виде игл. Рабочая часть таких зондов (острие) имеет размеры порядка десяти нанометров. Характерное расстояние между зондом и поверхностью образцов в зондовых микроскопах по порядку величин составляет 0,1 – 10 нм.

В основе работы зондовых микроскопов лежат различные типы взаимодействия зонда с поверхностью. Так, работа туннельного микроскопа основана на явлении протекания туннельного тока между металлической иглой и проводящим образцом; различные типы силового взаимодействия лежат в основе работы атомно-силового, магнитно-силового и электростатического микроскопов.

В основе работы АСМ лежит силовое взаимодействие между зондом и поверхностью, для регистрации которого используются специальные зондовые датчики, представляющие собой упругую консоль с острым зондом на конце (рис. 34). Сила, действующая на зонд со стороны поверхности, приводит к изгибу консоли. Регистрируя величину изгиба, можно контролировать силу взаимодействия зонда с поверхностью



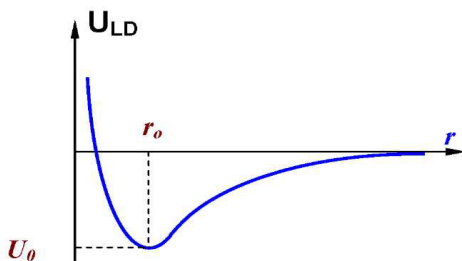
**Рис. 34.** Схематическое изображение зондового датчика АСМ.

Качественно работу АСМ можно пояснить на примере сил Ван-дер-Ваальса. Наиболее часто энергию 50ано-дер-ваальсова взаимодействия двух атомов, находящихся на расстоянии  $r$  друг от друга, аппроксимируют степенной функцией – потенциалом Леннарда-Джонса (рис.35):

$$U_{LD}(r) = U_0 \left\{ -2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 + \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} \right\}$$

Первое слагаемое в данном выражении описывает дальнodelствующее притяжение, обусловленное, в основном, диполь – дипольным взаимодействием атомов. Второе слагаемое учитывает отталкивание атомов на малых расстояниях. Параметр  $r_0$  – равновесное расстояние между атомами,  $U_0$  – значение энергии в минимуме.

Потенциал Леннарда-Джонса позволяет оценить силу взаимодействия зонда с образцом. Общую энергию системы можно получить, суммируя элементарные взаимодействия для каждого из атомов зонда и образца.



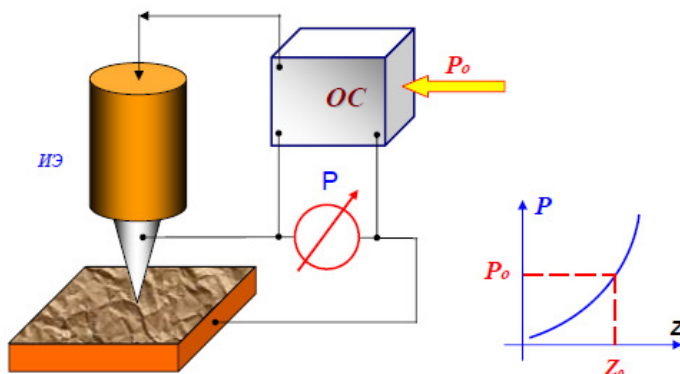
**Рис. 35.** Качественный вид потенциала Леннарда-Джонса.

В общем случае данная сила имеет как нормальную к поверхности, так и латеральную (лежащую в плоскости поверхности образца) составляющие. Реальное взаимодействие зонда с образцом имеет более сложный характер, однако основные черты данного взаимодействия сохраняются – зонд АСМ испытывает притяжение со стороны образца на больших расстояниях и отталкивание на малых.

#### **Вопрос 48. Как измеряется сила взаимодействия зонда с поверхностью в атомно-силовом микроскопе?**

Пусть взаимодействие зонда с поверхностью характеризуется некоторым параметром  $P$ . Если существует достаточно резкая и взаимно однозначная зависимость параметра  $P$  от расстояния зонд – образец  $P=P(z)$ , то данный параметр может быть использован для организации системы обратной связи (ОС), контролирующей расстояние между зондом и образцом. В качестве параметра  $P$  наиболее часто выступает ток или электрическое напряжение, возникающие из-за эффектов туннелирования или наведения потенциала

при взаимодействии с поверхностью. На рис. 36 схематично показан общий принцип организации обратной связи сканирующего зондового микроскопа.



**Рис.36.** Схема организации системы обратной связи зондового микроскопа.

Система обратной связи поддерживает значение параметра  $P$  постоянным, равным величине  $P_0$ , задаваемой оператором. Если расстояние зонд – поверхность изменяется (например, увеличивается), то происходит изменение (увеличение) параметра  $P$ . В системе ОС формируется разностный сигнал, пропорциональный величине  $\Delta P = P - P_0$ , который усиливается до нужной величины и подается на исполнительный элемент (ИЭ).

Исполнительный элемент обрабатывает данный разностный сигнал, приближая зонд к поверхности или отодвигая его до тех пор, пока разностный сигнал не станет равным нулю. Таким образом можно поддерживать расстояние зонд-образец с высокой точностью. В существующих зондовых микроскопах точность удержания расстояния зонд-поверхность достигает величины  $\sim 0.01 \text{ \AA}$ .

При перемещении зонда вдоль поверхности образца происходит изменение параметра взаимодействия  $P$ , обусловленное рельефом поверхности. Система ОС обрабатывает эти изменения, так что при перемещении зонда в плоскости  $X, Y$  сигнал на исполнительном элементе оказывается пропорциональным рельефу поверхности.

## Вопрос 49. Как организован процесс измерения в атомно-силовом микроскопе?

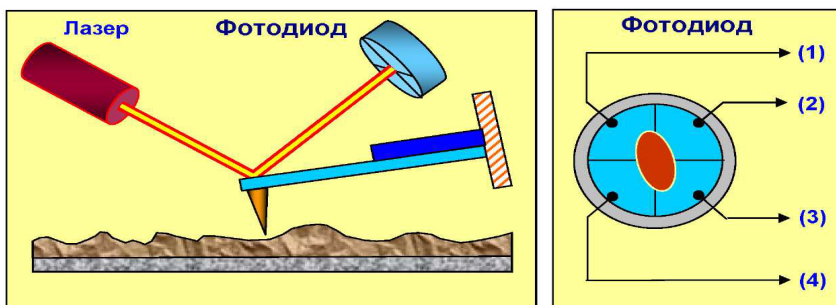
Для получения изображения в АСМ осуществляют специальным образом организованный процесс сканирования образца. При сканировании зонд вначале движется над образцом вдоль определенной линии (строчная развертка), при этом величина сигнала на исполнительном элементе, пропорциональная рельефу поверхности, записывается в память компьютера. Затем зонд возвращается в исходную точку и переходит на следующую строку сканирования (кадровая развертка), и процесс повторяется вновь. Записанный таким образом при сканировании сигнал обратной связи

обрабатывается компьютером, и затем АСМ изображение рельефа поверхности  $Z = f(x, y)$  строится с помощью средств компьютерной графики.

Наряду с исследованием рельефа поверхности, зондовые микроскопы позволяют изучать различные свойства поверхности: механические, электрические, магнитные, оптические и многие другие. Для этого используют специальные кантилеверы с магнитными или проводящими покрытиями (Co, TiN, Au, алмазное покрытие). Применение жидкостной атомно-силовой микроскопии позволяет локально проводить электрохимические реакции, прикладывая потенциал между зондом и проводящей поверхностью, что используется для исследования биологических объектов.

Получение АСМ изображений рельефа поверхности связано с регистрацией малых изгибов упругой консоли зондового датчика. В атомно-силовой микроскопии для этой цели широко используются оптические методы (рис. 37).

Оптическая система АСМ юстируется таким образом, чтобы излучение полупроводникового лазера фокусировалось на консоли зондового датчика, а отраженный пучок попадал в центр фоточувствительной области фотоприемника [1]. В качестве позиционно чувствительных фотоприемников применяются четырехсекционные полупроводниковые фотодиоды. Основные регистрируемые оптической системой параметры – это деформации изгиба консоли под действием Z-компонент сил притяжения или отталкивания ( $FZ$ ) и деформации кручения консоли под действием латеральных компонент сил ( $FL$ ) взаимодействия зонда с поверхностью.



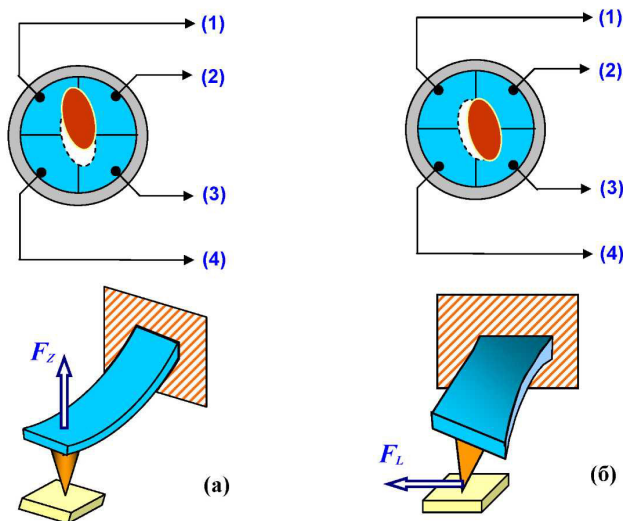
**Рис. 37.** Схема оптической регистрации изгиба консоли зондового датчика АСМ.

Если обозначить исходные значения фототока в секциях фотодиода через  $I_{01}, I_{02}, I_{03}, I_{04}$ , а через  $I_1, I_2, I_3, I_4$  – значения токов после изменения положения консоли, то разностные токи с различных секций фотодиода будут однозначно характеризовать величину и направление изгиба консоли зондового датчика АСМ. Действительно, разность токов вида

$$\Delta I_z = (\Delta I_1 + \Delta I_2) - (\Delta I_3 + \Delta I_4)$$

пропорциональна изгибу консоли под действием силы, действующей по нормали к поверхности образца (рис. 38(а)). А комбинация разностных токов вида характеризует изгиб консоли под действием латеральных сил (рис. 38(б)).

$$\Delta I_L = (\Delta I_1 + \Delta I_4) - (\Delta I_2 + \Delta I_3)$$



**Рис. 38.** Соответствие между типом изгибных деформаций консоли зондового датчика и изменением положения пятна засветки на фотодиоде.

## Вопрос 50. Что такое зонд в атомно-силовом микроскопе?

Зондирование поверхности в атомно-силовом микроскопе производится с помощью специальных зондовых датчиков, представляющих собой упругую консоль –кантилевер (cantilever) с острым зондом на конце (рис. 39). Датчики изготавливаются методами фотолитографии и травления из кремниевых пластин. Упругие консоли формируются из тонких слоев легированного кремния,  $\text{SiO}_2$  или  $\text{Si}_3\text{N}_4$ .

Один конец кантилевера жестко закреплен на кремниевом основании-держателе. На другом конце консоли располагается собственно зонд в виде острой иглы. Радиус закругления современных АСМ зондов составляет 1-5 нм в зависимости от типа зондов и технологии их изготовления. Угол при вершине зонда – 10-20°. Силу взаимодействия зонда с поверхностью  $F$  можно оценить следующим образом:

$$F = k \Delta Z,$$

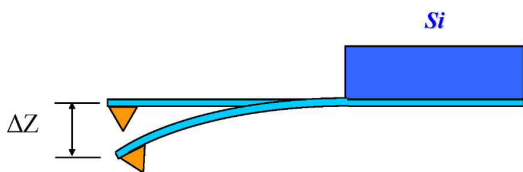
где  $k$  – жесткость кантилевера;  $\Delta Z$  – величина, характеризующая его изгиб.

Коэффициенты жесткости кантилеверов  $k$  варьируются в зависимости от используемых при их изготовлении материалов и геометрических размеров. При работе зондовых АСМ датчиков в колебательных режимах важны резонансные свойства кантилеверов.

Собственные частоты изгибных колебаний консоли прямоугольного сечения определяются следующей формулой:

$$\omega_{pi} = \frac{\lambda_i}{l^2} \sqrt{\frac{EJ}{\rho S}},$$

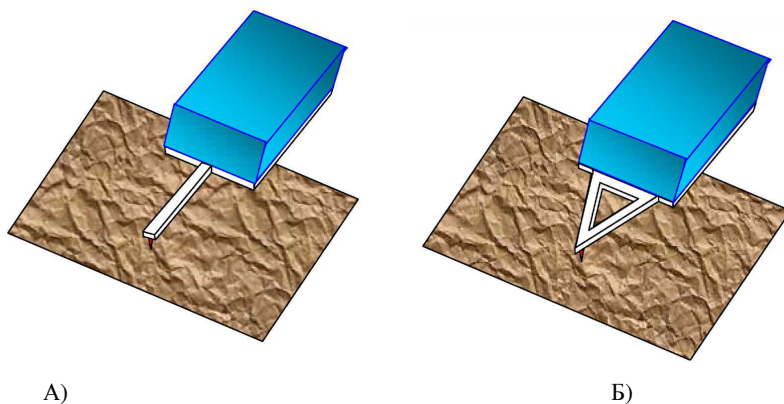
где  $l$  – длина консоли;  $E$  – модуль Юнга;  $J$  – момент инерции сечения консоли;  $\rho$  – плотность материала;  $S$  – площадь поперечного сечения;  $\lambda_i$  – численный коэффициент (в диапазоне 1-100), зависящий от моды изгибных колебаний. Как видно резонансная частота кантилевера определяется его геометрическими размерами и свойствами материала. Частоты основных мод лежат в диапазоне 10-1000 кГц.



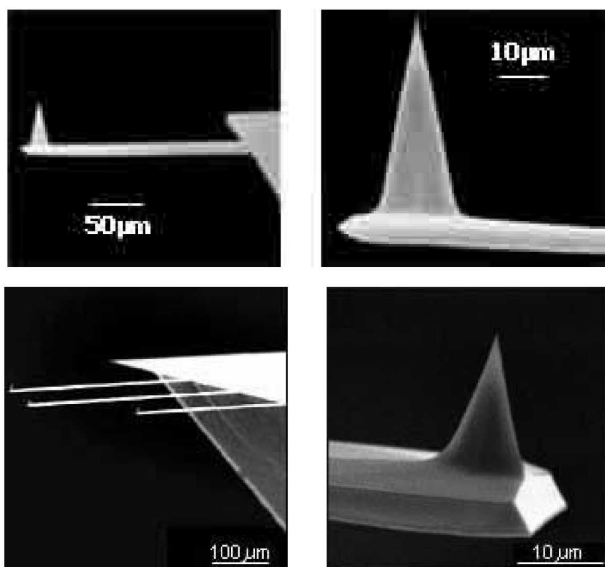
**Рис. 39.** Схематичное изображение зондового датчика АСМ.

Добротность кантилеверов, в основном, зависит от той среды, в которой они работают. Типичные значения добротности при работе в вакууме составляют  $10^3 - 10^4$ . На воздухе добротность снижается до 300 – 500, а в жидкости падает до 10 – 100.

В атомно-силовой микроскопии применяются зондовые датчики двух типов – с кантилевером в виде балки прямоугольного сечения и с треугольным кантилевером, образованным двумя балками. Общий вид зондовых датчиков с кантилевером в виде балки прямоугольного и треугольного сечений представлены на рис.40.



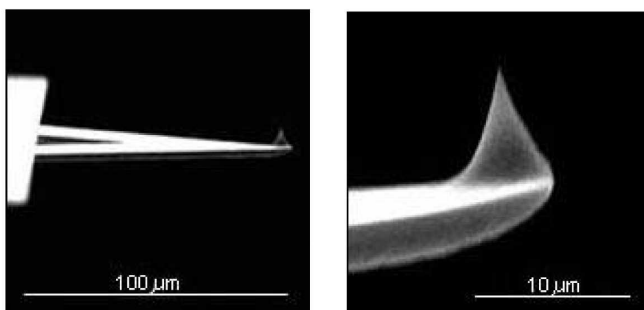
**Рис. 40.** Общий вид зондового АСМ датчика с одиночной консолью прямоугольного сечения (А) и с одиночной консолью треугольного сечения (Б).



**Рис. 41.** Электронно-микроскопическое изображение АСМ зонда, расположенного на прямоугольной консоли.

На рис. 41 показаны электронно-микроскопические изображения выпускаемых серийно зондовых датчиков NSG11 с консолью прямоугольного сечения компании НТ-МДТ. Иногда зондовые датчики АСМ имеют несколько кантилеверов различной длины (а значит, и различной жесткости) на одном основании. В этом случае выбор рабочей консоли осуществляется соответствующей юстировкой оптической системы атомно-силового микроскопа.

Зондовые датчики с треугольным кантилевером имеют при тех же размерах большую жесткость и, следовательно, более высокие резонансные частоты. Чаще всего они применяются в колебательных АСМ методиках.



**Рис. 42.** Электронно-микроскопическое изображение АСМ зонда, расположенного на треугольном кантилевере.

Общий вид и габариты зондовых датчиков с треугольной консолью представлены на рис. 42. Изготовление зондовых датчиков для АСМ представляет собой достаточно сложный технологический процесс, включающий в себя операции фотолитографии, ионной имплантации, химического и плазменного травления.

### Вопрос 51. Что такое контактные методы в атомно-силовом микроскопе?

В идеальных экспериментальных условиях (например, в условиях сверхвысокого вакуума) когда кантилевер приближается к поверхности образца на него начинают воздействовать сила Ван дер Вальса. Они распространяются достаточно далеко и ощутимы уже на расстояниях в несколько десятков ангстрем. Затем на расстояниях в несколько ангстрем начинают действовать силы отталкивания (рис.43).

В реальных условиях (в условиях окружающей атмосферы) в воздухе практически всегда присутствует некоторая влажность и на поверхностях образца и иглы присутствуют слои адсорбированной воды. Когда кантилевер достигает поверхности образца возникают капиллярные силы, которые удерживают иглу кантилевера в контакте с поверхностью и увеличивают минимально достижимую силу взаимодействия.

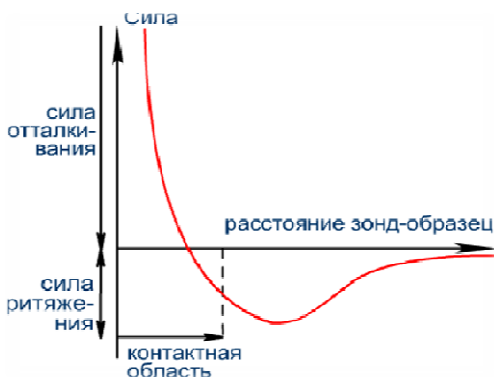


Рис. 43. Сила взаимодействия поверхности с зондом в контактном режиме.

Электростатическое взаимодействие между зондом и образцом может проявляться довольно часто. Оно может быть как притягивающим, так и отталкивающим. Ван дер Ваальсовы силы притяжения, капиллярные, электростатические и силы отталкивания в точке, где зонд касается образца, в равновесии уравниваются силой, действующей на кончик зонда со стороны изогнутого кантилевера.

При работе в контактном методе изгиб кантилевера отражает отталкивающую силу и используется непосредственно в системе обратной связи или в их комбинации для отображения рельефа поверхности.

Наряду с отображением рельефа в процессе сканирования могут отображаться и другие характеристики исследуемого образца. Если кантилевер с зондом являются проводящими, то появляется возможность отображения сопротивления растекания

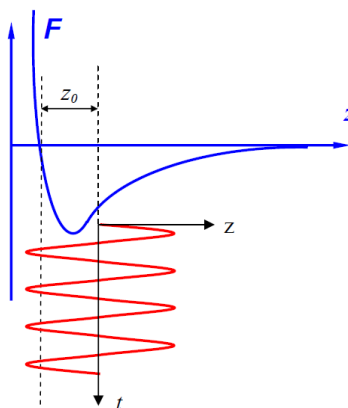


образца. Если сканирование проводится в направлении перпендикулярном продольной оси кантилевера (в латеральном направлении) силы трения вызывают его скручивание. Измеряя это скручивание с помощью четырехсекционного фотодетектора, можно одновременно с отображением рельефа отображать также и распределение сил трения по поверхности образца.

## Вопрос 52. Что такое полуконтактные методы в атомно-силовом микроскопе?

Использование колеблющегося кантилевера в сканирующей силовой микроскопии впервые было предложено Биннигом. Одни из наиболее ранних экспериментальных реализаций зондовой микроскопии с колеблющимся кантилевером были представлены в работах. В них было продемонстрировано влияние градиентов сил на сдвиг резонансной частоты кантилевера и возможность бесконтактного сканирования поверхности образца. Необходимо отметить также, что ранее Дюриг изучал частотный сдвиг колеблющегося кантилевера в силовом поле иглы сканирующего туннельного микроскопа.

Была продемонстрирована также возможность зондирования материалов при резком уменьшении амплитуды колебаний кантилевера. Возможность сканирования поверхности образца не только в притягивающих, но и в отталкивающих силах была также продемонстрирована. Относительно слабый сдвиг частоты колебаний под влиянием отталкивающих сил означает, что контакт зонда с поверхностью образца в процессе колебаний не является постоянным. Только в течение короткой части периода колебаний зонд «ощущает» контактные отталкивающие силы. Особенно это касается колебаний с большой амплитудой.



**Рис.44.** Схематичное представление принципа выбора рабочей точки.  $Z_0$  – расстояние между острием зонда и поверхностью.

Сканирование поверхности образца с колеблющимся кантилевером является не бесконтактным, а скорее прерывисто-контактным. Выбор расстояния от поверхности образца до острия зонда или выбор рабочей точки осуществляется из условия изменения

частоты колебаний кантилевера (рис.44). При этом работа АСМ происходит в режиме отталкивания острия зонда и небольшого участка притяжения. Соответствующий метод сканирующей силовой микроскопии назван прерывисто-контактный или полуконтактным методом.

Полуконтактный метод обладает определенными преимуществами по сравнению контактными методами. Прежде всего, при использовании этого метода давление кантилевера на поверхность образца существенно меньше, что позволяет работать с более мягкими и легко разрушающимися материалами, такими как полимеры, биоматериалы и клетки и другие живые объекты. Полуконтактный метод также более чувствителен к различным взаимодействиям с поверхностью, что дает возможность измерять ряд характеристик поверхности – распределение вязкости и упругости, электрических и магнитных доменов.

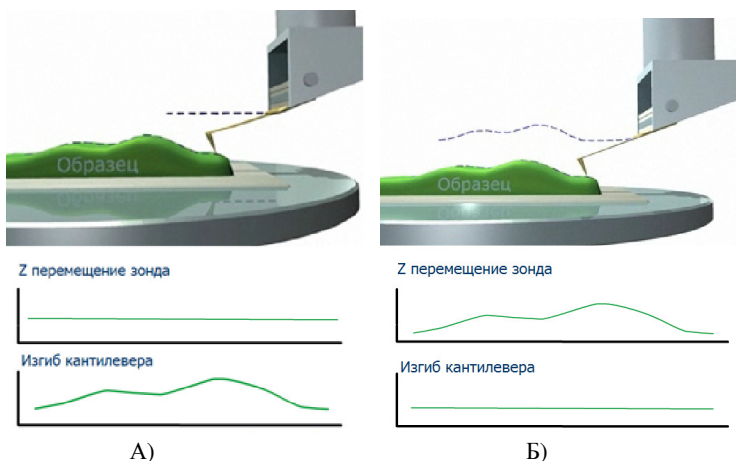
### **Вопрос 53. Что такое методы постоянной высоты и постоянной силы?**

При использовании контактных методов кантилевер изгибается под действием сил отталкивания, действующих на зонд. Сила отталкивания  $F$  действующая на зонд связана с величиной отклонения кантилевера  $x$  законом Гука:  $F = -kx$ , где  $k$  является жесткостью кантилевера. Величина жесткости для различных кантилеверов варьируется от 0.01 до нескольких N/m.

В АСМ величина вертикальных смещений кантилевера измеряется с помощью оптической системы регистрации и преобразуется в электрический сигнал DFL. В контактных методах сигнал DFL используется в качестве параметра, характеризующего силу взаимодействия между зондом и поверхностью образца. Величина DFL прямо пропорциональна силе взаимодействия. При использовании метода постоянной высоты сканер микроскопа поддерживает закрепленный конец кантилевера на постоянной высоте. Таким образом, отклонения кантилевера отражают рельеф поверхности исследуемого образца (рис.45 (А)).

Основным достоинством метода постоянной высоты является высокая скорость сканирования. Она ограничивается практически только резонансными свойствами кантилевера. К недостаткам метода постоянной высоты относится требование достаточной гладкости поверхности образцов. При исследованиях достаточно мягких образцов (подобно полимерам, биологическим объектам и т.д.) они могут разрушаться или процарапываться, поскольку зонд находится в непосредственном механическом контакте с поверхностью.

При использовании метода постоянной силы величина изгиба кантилевера поддерживается в процессе сканирования постоянной при помощи системы обратной связи (рис.45 (Б)). Таким образом, вертикальные смещения сканера отражают рельеф поверхности исследуемого образца. Основным достоинством метода постоянной силы является возможность наряду с измерениями рельефа поверхности проводить измерения и других характеристик – сил трения, сопротивления растекания и др. К числу недостатков метода постоянной силы относится ограничение скорости сканирования временем отклика системы обратной связи.



**Рис. 45.** Прохождение зонда АСМ в методе постоянной высоты (А) и методе постоянной силы (Б).

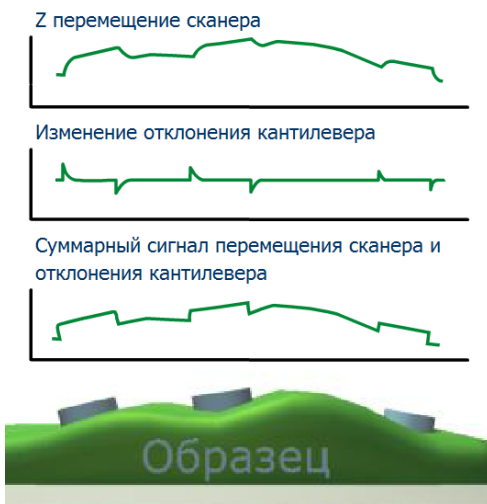
При сканировании относительно мягких образцов с развитой поверхностью сила давления зонда на поверхность варьируется, одновременно неравномерно прогибается и поверхность образца. В результате полученный рельеф поверхности может быть искажен. Возможное наличие существенных капиллярных сил, обусловленных наличием слоя воды, также приводит к ухудшению разрешения.

## Вопрос 54. Что такое контактный метод рассогласования?

Скорость сканирования в методе постоянной силы ограничена постоянной времени системы обратной связи. Этот недостаток в значительной степени может быть преодолен с использованием того факта, что в процессе сканирования новое значение величины изгиба кантилевера, т.е. сигнал рассогласования, устанавливается быстрее, чем система обратной связи приведет величину изгиба к предустановленному значению. Сигнал рассогласования системы обратной связи, возникающий в процессе сканирования с использованием метода постоянной силы содержит дополнительную информацию относительно рельефа поверхности. Он может быть использован для более полного воспроизведения рельефа.

Контактный метод рассогласования может рассматриваться как промежуточный между методом постоянной силы и методом постоянной высоты, если коэффициент усиления системы обратной связи (т.е. скорость обработки сигнала рассогласования) устанавливается таким, чтобы система была способна обрабатывать относительно гладкие особенности рельефа и в то же время быть достаточно медленной, чтобы обрабатывать крутые ступеньки. В результате сигнал рассогласования будет плохо отображать гладкие особенности рельефа и с высоким контрастом отображать резкие шероховатости (рис.46).

Такой способ отображения может быть полезным для поиска небольших неоднородностей на большом относительно гладком фоне.



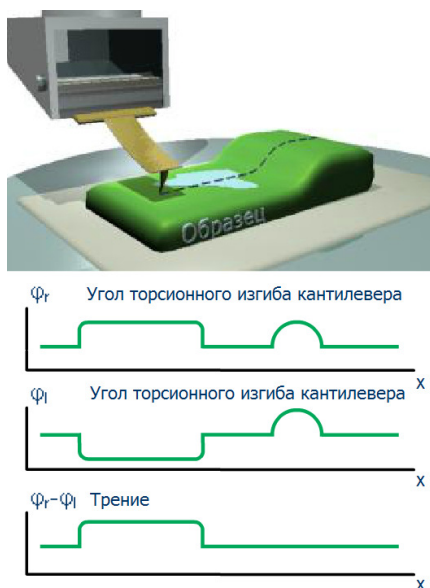
**Рис. 46.** Прохождение зонда АСМ в контактном методе рассогласования.

## **Вопрос 55. Что такое метод латеральных сил?**

Метод латеральных сил позволяет различать области с различными коэффициентами трения, а также подчеркивать особенности рельефа поверхности. Эти возможности могут быть использованы одновременно с получением рельефа поверхности для более полной характеристики исследуемого образца. Физические основы метода латеральных сил заключаются в следующем. При сканировании по методу постоянной силы перпендикулярно продольной оси кантилевера помимо изгиба кантилевера в нормальном направлении происходит также и его торсионный изгиб. Он обусловлен моментом силы действующей на зонд. Для малых отклонений угол закручивания пропорционален поперечной или латеральной силе. Торсионное закручивание кантилевера измеряется оптической следящей системой микроскопа.

При сканировании гладкой поверхности с участками с различными коэффициентами трения угол скручивания меняется на каждом участке. Это позволяет проводить измерения локальной силы трения. Если же поверхность не гладкая, то такая интерпретация затруднена. Для того, чтобы различить участки с различными коэффициентами трения и неоднородности рельефа необходимо использовать второй проход в противоположном направлении (рис.47).

Метод латеральных сил имеет важное значение при исследованиях полупроводников, полимеров, пленочных покрытий, запоминающих сред, при изучении поверхностных загрязнений, химических особенностей и фрикционных характеристик и многое другое. Кроме того измерения латеральных сил позволяют относительно просто достигать атомарного разрешения на слюде и на других слоистых материалах.



**Рис. 47.** Двухпроходная методика в методе латеральных сил. При прямом проходе измеряется  $\varphi_r$ , а при обратном проходе –  $\varphi_l$ . Коэффициент трения вычисляется как разность этих величин.

Контактных методов в АСМ достаточно много, но все они направлены на изучение твердых поверхностей и не подходят для исследования биологических объектов, для которых используются полуконтактные методы.

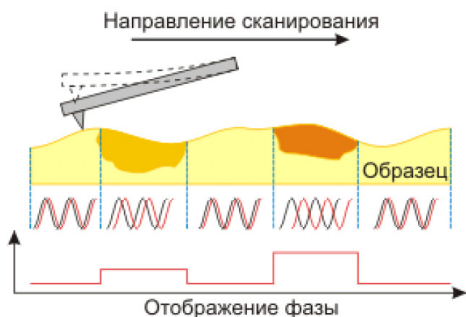
## Вопрос 56. Что такое метод отображения фазы?

Ощущение контактных отталкивающих сил в процессе сканирования приводит к дополнительному фазовому сдвигу колебаний кантилевера относительно возбуждающих колебаний пьезовибратора.

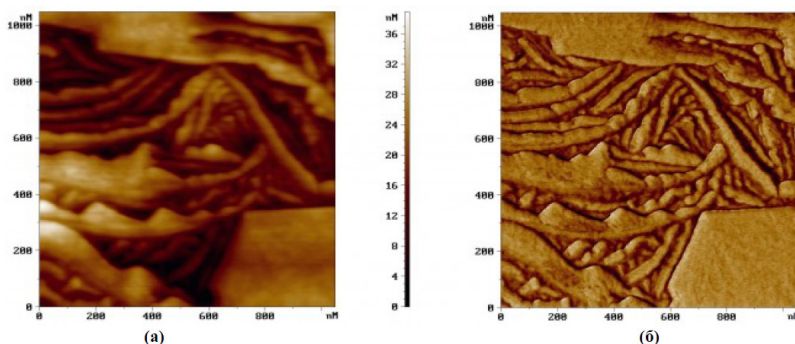
Этот фазовый сдвиг зависит от характеристик материала образца. Регистрация и отображение фазового сдвига в процессе сканирования широко используется в исследованиях наноструктурированных и неоднородных материалов. Такой метод получил название метода отображения фазового контраста.

В процессе сканирования по полуконтактному методу, когда колеблющийся кончик зонда касается поверхности образца, он испытывает взаимодействие отталкивающих, адгезионных, капиллярных и других сил. Одновременно регистрируется изменение не только амплитуды колебаний кантилевера, но и сдвиг фазы. Если поверхность образца является неоднородной по своим свойствам, соответствующим будет и фазовый сдвиг (рис. 48).

Распределение фазового сдвига по поверхности будет отражать распределение характеристик материала образца. Метод отображения фазы позволяет получать ценную информацию в широкой области применений, в некоторых случаях отображая неочевидные контрасты свойств материалов. Этот метод используется, например, для исследований биологических объектов, образцов с магнитными и электрическими характеристиками, а также для ряда других применений (рис. 49).



**Рис.48.** Изменение фазы колебаний на различных участках образца при сканировании.



**Рис. 49.** ACM изображение поверхности пленки полиэтилена с размером 1x1 мкм:  
а) рельеф поверхности, полученный в режиме постоянной амплитуды;  
б) соответствующее распределение фазового контраста.

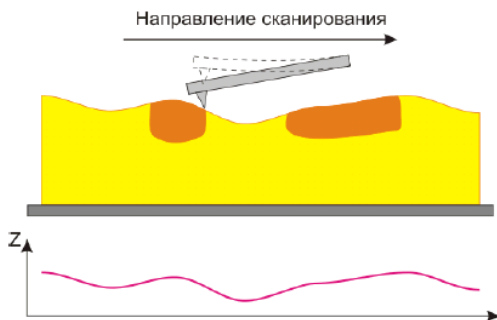
## Вопрос 57. Что такое метод зонда Кельвина?

Метод Зонда Кельвина позволяет изучать распределение поверхностного потенциала по образцу. Для этого в процессе сканирования необходимо поддерживать амплитуду колебаний зонда, раскачиваемого электрическим полем на частоте своего механического резонанса, равной нулю, путем изменения постоянного напряжения смещения  $U_0$ .

При сканировании значение переменной составляющей напряжения смещения  $U_1 \cdot \sin(\omega t)$  должно быть достаточно большим для возбуждения колебаний зонда. Частота

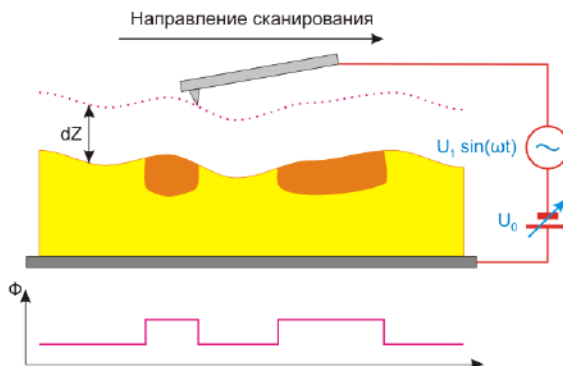
переменного электрического поля выбирается равной резонансной частоте зондового датчика.

Если при каком-то значении постоянного напряжения амплитуда колебаний становится равной нулю, значит это напряжение  $U_0$  равно поверхностному потенциалу в этой точке. Для исключения влияния рельефа поверхности на результаты исследования используется двухпроходная методика.



**Рис.50.** Первый проход зонда при сканировании для получения рельефа поверхности.

В процессе сканирования производится следующая процедура. На первом проходе сканируемой строки определяется рельеф по полуконтактному методу (рис. 50). Во время второго прохода расстояние между сканируемой поверхностью и зондовым датчиком поддерживается постоянным (рис.51). Это расстояние должно быть достаточно большим, чтобы исключить влияние рельефа. В таком случае зонд подвергается воздействию только дальнодействующих сил, основной вклад в которые осуществляется электрическими свойствами образца. Но расстояние  $dZ$  не должно быть чрезмерно большим, так как в этом случае уменьшается измеряемый сигнал и ухудшается латеральное разрешение.



**Рис.51.** Второй проход зонда – сканирование осуществляется на фиксированном расстоянии от поверхности.  $\Phi$  – потенциал поверхности.

Полуконтактных методов достаточно много и на всех останавливаться нет смысла при рассмотрении вопросов изучения живых объектов. При исследовании биологических объектов всегда выбирают полуконтактные методы, поскольку только они не разрушают поверхность образца. В этом направлении наиболее интересны субмикронные особенности и нанорельеф поверхности мембран живых объектов. Рассмотрим наиболее интересные приложения АСМ к биологическим объектам.

## **Вопрос 58. Что такое наноэлектроника?**

Современный уровень развития науки и техники неразрывно связан с тенденциями уменьшения размеров объектов, инструментов и приборов, используемых человеком. Например, широко известные электронные приборы, такие как мобильные телефоны, коммуникаторы, карманные персональные компьютеры, индивидуальные медицинские аппараты и многое другое еще несколько лет назад казались просто фантастическими, сегодня прочно вошли жизни современного человека. Это стало возможно благодаря тому, что современная наука обратила более пристальное внимание на объекты, размеры которых составляют несколько микро- и даже нанометров, сформировав тем самым новое направление электроники сверхмалых размеров – **наноэлектронику**.

**Наноэлектроника** – область электроники, занимающаяся разработкой физических и технологических основ создания интегральных электронных схем с размерами элементов менее 100 нм.

Основная задача наноэлектроники состоит в создании новых миниатюрных электронных устройств и методов их объединения в интегральные схемы. Научные исследования в этой области охватывают различные области знаний: материаловедение, электронику, механику, биологию, физику, химию, медицину. И объединяет их объект исследований – структуры со сверхмалыми размерами и необычными для «большого» мира свойствами.

Особенностью наноэлектроники как новой отрасли электротехники, на сегодняшний день является то, что уменьшение размеров элементов является основным средством прогресса всей технологии.

## **Вопрос 59. Что такое закон Мура?**

Известно, что развитие современной микроэлектроники осуществлялось в результате последовательных переходов от электротехнических компонентов к электронным лампам, от ламп к транзисторам, а затем от транзисторов к интегральным схемам, каждый из которых означал не только изменение технологии, но и появление новых особенностей в технике и обществе.

Обычно процесс постоянного уменьшения размеров элементов интегральных схем описывается известным законом Мура (рис.52.) – эмпирическим наблюдением, сделанным в 1965 году. В соответствии с этим законом плотность компоновки электронных компонентов удваивается приблизительно за каждые полтора – два года, что приводит к соответствующему росту мощности вычислительных средств и их производительности. Очевидно, что эта закономерность не может действовать



бесконечно и непрерывное уменьшение размеров электронных изделий должно когда-то и как-то закончиться. Это действительно произойдет, если вспомнить, что существуют физико-химические ограничения дальнейшего уменьшения размеров полупроводниковых структур, возникающие, когда размеры интегральных схем будут составлять всего несколько атомных слоев. Квантовомеханические законы не позволят описывать такие структуры привычными законами классической физики. Однако уже сегодня техника вплотную приблизилась к теоретической возможности запоминать и передавать 1 бит информации с помощью одного электрона, положение которого в пространстве может быть задано одним атомом.

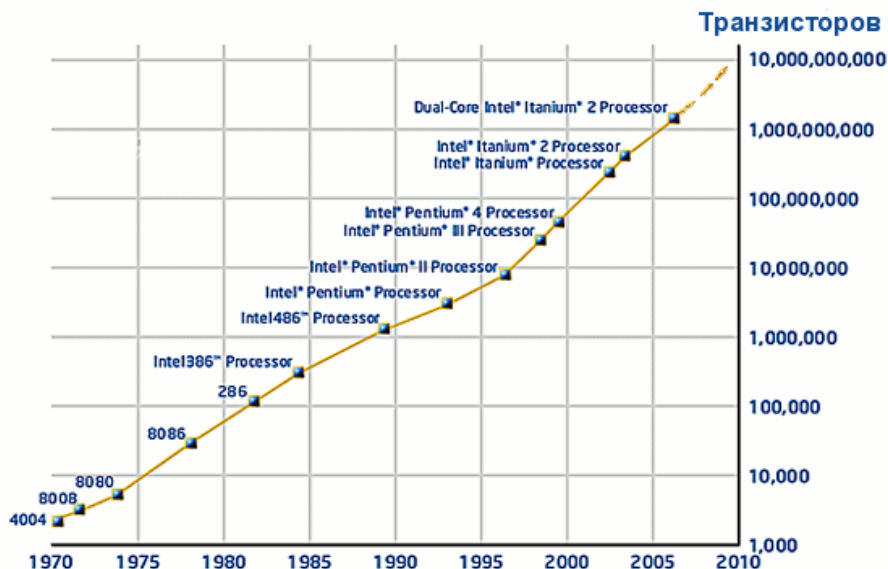


Рис.52. Закон Мура (<http://www.intel.com>).

С момента формулировки закона Мура прошло более 40 лет. Несмотря на некоторые колебания в периоде удвоения, закон Мура продолжает работать. Однако, в 2007 году сам Мур признал, что его закон перестаёт действовать уже из-за атомарных ограничений и влияния скорости света.

Тем не менее, тенденция миниатюризации в электронике не сбавляет, а лишь увеличивает скорости. Большое количество исследователей из различных стран мира создают новые типы электронных элементов со сверхмалыми размерами, которые и составят в ближайшем будущем элементную базу наноэлектроники. Для знакомства с такими элементами наноэлектроники обратимся к наиболее изученным эффектам в современной физике, на базе которых уже сегодня реализуются приборы, отличающиеся по принципам работы от существующих полупроводниковых диодов и транзисторов.

## Вопрос 60. Что такое транзистор на одноэлектронном туннелировании?

В 1986 году советскими учеными К.К. Лихаревым и Д.В. Авериным был предложен **одноэлектронный транзистор** на эффекте кулоновской блокады. Данный эффект, обусловлен отталкиванием электронов в контактах от электрона на точке, а также дополнительным кулоновским потенциальным барьером который создает электрон, закрепившийся на точке. Кулоновский барьер препятствует вылету электрона из точки, а также попаданию новых электронов на нее. При этом электрический ток в цепи протекает порциями, что соответствует движениям единичных электронов. Рассмотрим более подробно конструкцию и принцип работы одноэлектронного транзистора. Также как и любой полупроводниковый транзистор, он имеет три электрода, называемые истоком, стоком и затвором. В области между электродами (рис.53) располагается дополнительный металлический или полупроводниковый «наноостровок» - наночастица или кластер нанометровых размеров, изолированный от электродов диэлектрическими прослойками, через которые и может при определенных условиях происходить движение электрона. Если приложить напряжение между истоком и стоком транзистора, то ток протекать не будет. Поскольку электроны в данный момент заблокированы на наночастице. Для наблюдения 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 ток. Таким образом, управляя потенциалом на затворе, можно пропускать через барьеры одиночные электроны. Количество электронов в наночастице должно быть не более 10, а желательно и меньше. Это может быть достигнуто в квантовых структурах с размером порядка 10 нм.

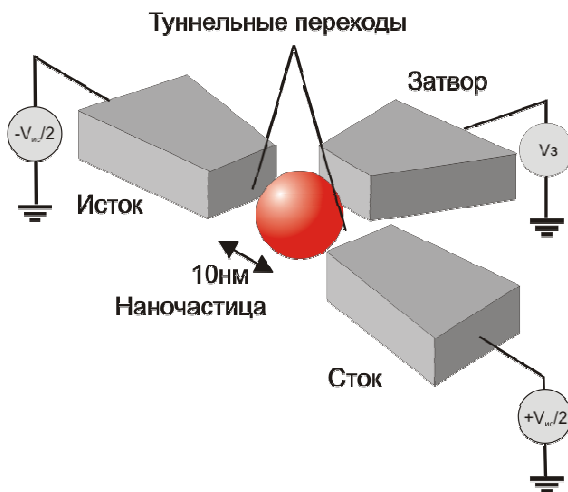


Рис. 53. Одноэлектронный транзистор

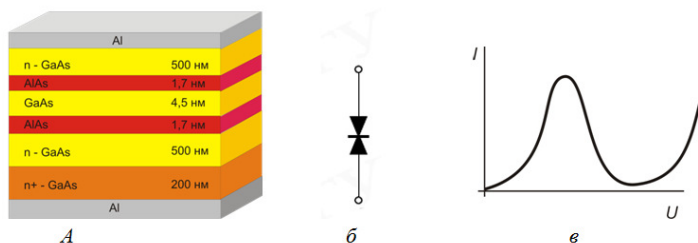
В цифровых интегральных схемах на одноэлектронных транзисторах один бит информации, то есть два возможных состояния 0 и 1, может быть представлен как присутствие или отсутствие одного электрона на наночастице. Тогда схема памяти емкостью  $10^{12}$  бит, что в 1000 раз больше, чем у современных сверхбольших интегральных схем, может разместиться на кристалле площадью всего 6,45 см<sup>2</sup>. Над практической реализацией этих перспектив сегодня активно работают специалисты ведущих американских, японских и европейских электронных фирм.

Различные другие одноэлектронные приборы можно получить при увеличении количества туннельно-связанных наноструктур. Один из таких приборов – одноэлектронная ловушка. Главное свойство данного прибора – это так называемая би-или мультистабильная внутренняя зарядовая память. У одноэлектронной ловушки в пределах некоторого диапазона напряжения, прикладываемого к затвору, один из наноструктур, обычно ближайший к затвору может быть в одном, двух или более устойчивых зарядовых состояниях, т.е. содержать один или несколько электронов. На этой основе уже сегодня создаются различные логические элементы, которые в ближайшем будущем могут стать элементной базой нанокomпьютеров.

## Вопрос 61. Что такое приборы на резонансном туннелировании?

При более детальном рассмотрении эффекта прохождения электронов через потенциальные барьеры, создаваемые всей совокупностью заряженных частиц при контакте двух, например, полупроводниковых материалов было установлено несколько интересных фактов. Оказалось, что в структуре со сверхмалыми размерами свойства этого эффекта зависят от разрешенных энергетических состояний для электронов внутри самой структуры. В результате чего, в наноструктуре с двумя потенциальными барьерами, наблюдается резкое возрастание протекающего через нее тока только при совпадении уровня Ферми в электроде, поставляющем электроны и энергетического уровня в наноструктуре. Это явление получило название **резонансное туннелирование**.

Явление резонансного туннелирования было впервые описано в 1958 году японским исследователем Л. Исаки и детально исследовалось им до 1974 года. Однако всестороннее теоретическое обоснование и экспериментальные транзисторы на резонансном туннелировании появились лишь в начале 90-х годов 20 века.



**Рис.54.** Структура (а), схемное обозначение (б) и вольт-амперная характеристика (в) резонансно-туннельного диода.

Резонансно-туннельный диод представляет собой сложную периодическую структуру (рис.54а), размеры некоторых областей которой составляют несколько нанометров. Условное схемное обозначение показано на рис. 54(б).

Рассмотрим работу резонансного диода. Ток, протекающий через него, зависит от величины приложенного напряжения. Если приложенное напряжение мало и энергия электронов, проходящих через потенциальный барьер, меньше энергии дискретного уровня, то прозрачность барьера и, следовательно, протекающий ток будут малы. Ток достигает максимального значения при таких напряжениях, когда энергия электронов равна энергии дискретного уровня. При более высоких напряжениях энергия электронов станет больше энергии дискретного уровня и прозрачность барьера для электронов уменьшится. При этом ток также уменьшится. Вольтамперная характеристика резонансного туннельного диода показана на рис. 54 в. Видно, что на вольтамперной характеристике имеется максимум и участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением (рис. 54 в – область уменьшения тока при увеличении напряжения), что чрезвычайно привлекательно для создания многоуровневых логических элементов, элементов памяти и твердотельных сверхвысокочастотных генераторов.

Добавление управляющего электрода к резонансно-туннельному диоду превращает его в резонансно-туннельный транзистор и расширяет возможности его применения. Такие транзисторы имеют частоты переключения порядка  $10^{12}$  Гц, что в 100-1000 раз выше, чем у самых лучших кремниевых транзисторов из современных интегральных микросхем.

Нанoeлектроника в настоящее время вплотную приблизилась к созданию и новых типов вычислительной техники – нанокomпьютеров. Компания Intel, например, выпускает процессоры по 45 нанометровой технологии и заявляет о 32 нанометровой технологии производства. В перспективе компания говорит о создании процессоров с 2 миллиардами транзисторов. Уже сейчас можно предположить, что нанокomпьютеры будут развиваться одновременно по нескольким направлениям, реализующим различные способы представления информации – на основе квантовой логики, классической логики, а также некоторые другие, например, генетические, молекулярно-биологические, молекулярно-механические и др. Однако в основу всех этих направлений можно поместить теорию так называемых квантовых вычислений, которая учитывает не элементную базу, а новый тип квантовомеханических логических операций. Устройства, построенные на таком типе вычислений называются квантовыми компьютерами.

## **Вопрос 62. Что такое квантовый компьютер?**

**Квантовый компьютер** – вычислительное устройство, использующее при работе квантовомеханические эффекты, и реализующее выполнение квантовых алгоритмов. Квантовые компьютеры работают на основе квантовой логики.

Идея квантовых вычислений впервые была высказана Ю.И. Маниным в 1980 году, но активно эта проблема стала обсуждаться после появления в 1982 году статьи американского физика-теоретика Р. Фейнмана. В этих работах было предложено использовать для вычислений операции с состояниями квантовой системы. Авторы обратили внимание на то, что каждое состояние квантовой системы в отличие от

классической может находиться в состоянии суперпозиции. В терминах классического компьютера квантовый бит (quantum bit = кубит) в соответствии с законами квантовой механики может находиться одновременно в двух равновероятных состояниях «0» и «1». Тогда два кубита могут быть уже в четырёх смешанных состояниях – 00, 01, 10, и 11, представляя четыре числа сразу. Видно, что увеличение растёт по степенному закону: на  $m$  кубитах можно выполнять одновременно вычисление над  $2^m$  числами параллельно. Это значит, что, используя всего несколько сотен кубитов, можно представить одновременно больше чисел, чем имеется атомов во вселенной.

Данный факт также позволяет предполагать такое же увеличение скорости вычислений квантового компьютера по сравнению с классическим. Это предположение основано на том, что при квантовых вычислениях элементарным шагом является отдельная операция над  $m$  – кубитной суперпозицией — принцип квантового параллелизма. Иначе говоря, когда в классическом компьютере вычисляется единственное выходное значение для одного входного состояния, в квантовом компьютере вычисляются выходные значения для всех входных состояний. Иначе говоря квантовый компьютер может за короткое время решать задачи, с которыми современные компьютеры не могли бы справиться в течении сотен лет.

### **Вопрос 63. Что такое квантовая оптоэлектроника?**

**Оптоэлектроника** в настоящее время представляет собой раздел физики и техники, занимающийся преобразованием оптического излучения в электрический ток и обратно. Все мы хорошо знакомы с оптоэлектроникой, поскольку более 90% информации, которую получает человек, составляет зрительная оптическая информация. Каждый день мы сталкиваемся на улице – со светофорами и рекламными экранами, на концертах и дискотеках наблюдаем лазерные шоу, дома – смотрим на экраны компьютеров, телевизоров, мобильных телефонов и пользуемся многими другими устройствами, даже не подозревая о том, что в основе этих устройств также лежат нанотехнологии и работа их основывается на свойствах нанообъектов.

Круг применений устройств оптоэлектроники очень широк. Однако в самой оптоэлектронике можно выделить несколько типов устройств:

- фотоприемники – преобразователи света в электрический ток. Фотоприемник, работающий на принципе изменения сопротивления под действием света, называется фоторезистор, если за основу берут диод или транзистор, такой прибор называется, соответственно, фотодиод или фототранзистор. К фотоприемникам относится также и фотополупроводниковый умножитель;

- светоизлучательные приборы – преобразователи тока в световое излучение, например, лампы накаливания, электролюминесцентные индикаторы, полупроводниковые светодиоды и лазеры;

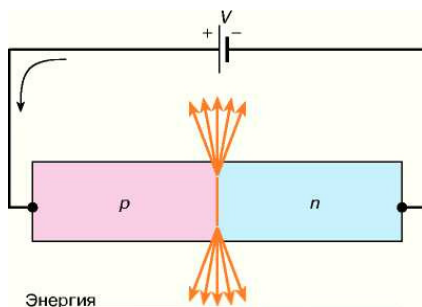
- оптопары – пара светоизлучательный прибор – фотоприемник или, по-другому, преобразователи «ток- свет- ток», которые используют для изоляции электрических цепей;

- оптоэлектронные интегральные схемы – интегральные микросхемы, в которых осуществляется оптическая связь между отдельными узлами или компонентами.

Самыми распространенными приборами, использующими достижения нанотехнологий, являются диоды и лазеры, основанные на  $p$ - $n$ -переходах. На основе  $p$ - $n$ -переходов создаются источники некогерентного и когерентного излучения. **Когерентные волны** (от *cohaerens* – лат. «находящийся в связи») – согласованные колебания световых волн. Световые волны когерентны, если их частота и, соответственно, длина волны одинакова. Примером не когерентного источника света может служить светодиод, а когерентного – лазер.

## Вопрос 64. Как работает светодиод?

Рассмотрим принцип работы светодиода, построенного на гомогенном  $p$ - $n$  переходе или гомопереходе. **Гомопереходом** называют  $p$ - $n$  переход, где  $p$  и  $n$  области сделаны из одного материала. В том случае, когда  $p$  и  $n$  области сделаны из разных материалов, переход называют **гетеропереходом**. Светодиод излучает свет только когда ток протекает в прямом направлении. Электроны из  $n$ -области попадают в область  $p$ - $n$  перехода, а дырки – из  $p$ -области. Как известно, дырки несут положительный заряд и представляют собой отсутствие электронов в химической связи атомов кристаллической решетки. Поэтому при встрече дырки и электрона, оба носителя тока исчезают. В результате получается нейтральная химическая связь, состоящая из двух валентных электронов. Самое интересное то, что подвижный электрон имеет большую энергию, чем находящийся в химической связи. Именно поэтому при столкновении электрона и дырки выделяется энергия в виде кванта света, как показано на рис.55. Понятно, что яркость пропорциональна току светодиода. Однако с увеличением тока растет и тепловой нагрев, что очень сильно ограничивает сферу применения гомогенных светодиодов.



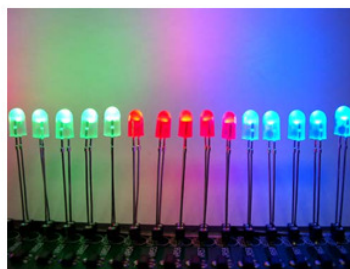
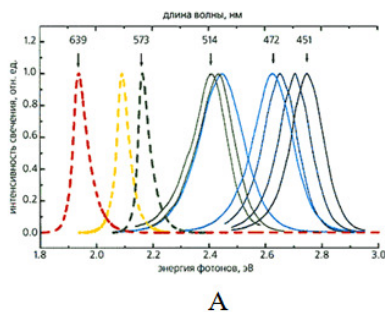
**Рис. 55.** Схема и энергетическая диаграмма полупроводникового светоизлучающего диода.

Долгое время массовое производство светодиодов ограничивалось приборами, излучающими в красной и инфракрасной областях спектра. Первые зеленые светодиоды стали делать из фосфида галлия GaP, а синие – из карбида кремния SiC. Однако эти материалы создают излучение слабой интенсивности либо быстро перегреваются. Исследования свойств нитридов элементов группы III таблицы Менделеева (AlN, GaN, InN) позволили заключить, что они являются наиболее перспективными материалами для

изготовления светодиодов. Эти материалы излучают во всей видимой и ультрафиолетовой областях спектра от 240 до 620 нм.

В 70-х годах группа Ж. Панкова из лаборатории компании IBM создала фиолетовые и голубые диоды на основе эпитаксиальных пленок GaN, однако они довольно быстро перегревались и выходили из строя. С развитием нанотехнологий удалось усовершенствовать процесс эпитаксии – выращивания нанометровых слоев от 20 до 100 нм на подложку из другого материала. Такие структуры получили название гетероструктур. В результате в 1989 г. Ш.Накамура впервые получил гетероструктуры на основе GaN. Так были созданы светодиоды на гетеропереходах GaInN – GaAlN.

В отличие от гомоперехода р и п области гетероперехода можно очень сильно легировать. Легирование – это добавление примеси в полупроводник, которая и определяет его тип проводимости – р или n. При сильном легировании сопротивление этих областей существенно уменьшается. Следовательно, при протекании тока выделяется меньше тепла, чем в гомопереходе. Кроме этого концентрация электронов и дырок в таких светодиодах будет значительно выше, а значит, будет выше и их яркость. Применяемые современные материалы перекрывают весь видимый диапазон излучения (рис 56).



**Рис 56.** Спектры излучения светодиодов на основе гетероструктур InGaN/AlGaIn/GaN (сплошные линии) и AlInGaP/GaP (штриховые) (А). Светодиоды фирмы «COTCO» с овальной оптикой 110х50 град (Б).

## Вопрос 65. Как работает лазер?

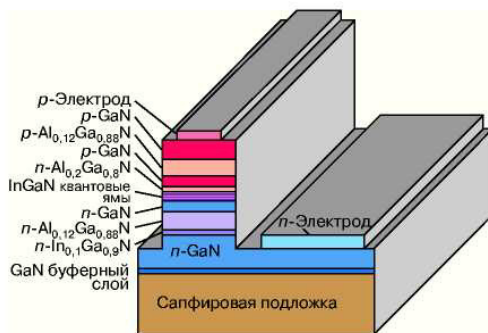
**Лазер** (англ. LASER – Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation «Усиление света с помощью вынужденного излучения») – устройство, использующее вынужденное излучение для создания когерентного потока света. Лазеры излучают волны согласованно, т.е. с одинаковыми частотами, длинами волн и направлением распространения. Полупроводниковый лазер является самым компактным, экономичным и надежным. Именно поэтому его используют в CD- или DVD-плеерах, лазерных принтерах, а также компьютерах. Телефония, интернет, оптическая и другие виды кабельной связи получили «второе дыхание» благодаря применению полупроводниковых лазеров. За 40 лет полупроводниковые лазеры прошли многочисленные этапы развития и усовершенствования и получили самое широкое распространение. Этому способствовало

увеличение количества лазерных полупроводников, перекрывающих широкий спектральный диапазон от ультрафиолетового до инфракрасного.

Современный уровень развития нанотехнологий позволяет контролировать рост слоев толщиной всего в один атом, т.е. менее 1 нм. Переход к подобным гетероструктурам позволил снизить плотность тока диодных лазеров примерно в  $10^4$ - $10^5$  раз. Другой важнейший показатель качества полупроводникового лазера это ресурс его работы. В первых непрерывных лазерах ресурс был всего несколько секунд, в современных лазерах – до миллионов часов.

Работа полупроводникового лазера на основе гетероструктур происходит следующим образом. Пропускается ток через р-п переход в прямом направлении. Возникает два конкурирующих процесса. С одной стороны при попадании электрона и дырки в р-п гетеропереход излучается квант света. С другой стороны часть невозбужденных электронов поглощает кванты света, тем самым, уменьшая интенсивность и мощность излучения. При увеличении тока процесс излучения преобладает над процессом поглощения. В результате возникает состояние **инверсной населенности**. Инверсная заселенность – состояние, при котором больше половины носителей заряда – электронов находится в возбужденном состоянии. При этом на пути фотонов чаще встречаются возбужденные электроны, чем невозбужденные, поэтому индуцированное излучение фотонов происходит чаще, чем их поглощение. Экспериментально явление усиления света при его прохождении через среду с инверсной населенностью уровней было открыто в 1951 г. российскими физиками Валентином Александровичем Фабрикантом, Михаилом Максимовичем Вудынским, Фаиной Алексеевной Бутаевой.

Использование лазеров на гетероструктурах также позволило уменьшить пороговый ток – минимальный ток, при котором лазер способен когерентно излучать. Впервые уменьшение порогового тока и размеров активной области за счет использования гетеропереходов было достигнуто Ж.И. Алферовым. Примером гетеролазера может служить лазер, показанный на рис. 57. Как видно из рисунка, в такой структуре избыточные носители сосредоточены внутри активной области (квантовой ямы InGaAs), ограниченной с обеих сторон потенциальными барьерами (GaAs), что исключает их распространение в прилегающие области.



**Рис. 57.** Структура эпитаксиальных слоев инжекционного лазера.



## Вопрос 66. Что такое индуцированное излучение?

Физической основой работы лазера служит явление **индуцированного излучения**. Дадим краткое описание этого явления. Излучение, испускаемое при самопроизвольном переходе атома из одного состояния в другое, называется **спонтанным**. Спонтанное излучение различных атомов происходит некогерентно, так как каждый атом начинает и заканчивает излучать независимо от других. В 1916 г. А. Эйнштейн предсказал, что переход электрона с верхнего энергетического уровня на нижний с излучением фотона может происходить под влиянием внешнего электромагнитного поля с частотой, равной собственной частоте перехода. Такое излучение называют **вынужденным или индуцированным**.

Индуцированное излучение возникает при совпадении частоты электромагнитного поля с собственной частотой излучения возбужденного атома, возникающего при переходе на более низкий энергетический уровень (рис.58). Таким образом, в результате взаимодействия возбужденного атома с фотоном, частота которого равна частоте перехода, получаются два совершенно одинаковых по энергии и направлению движения фотона-близнеца.

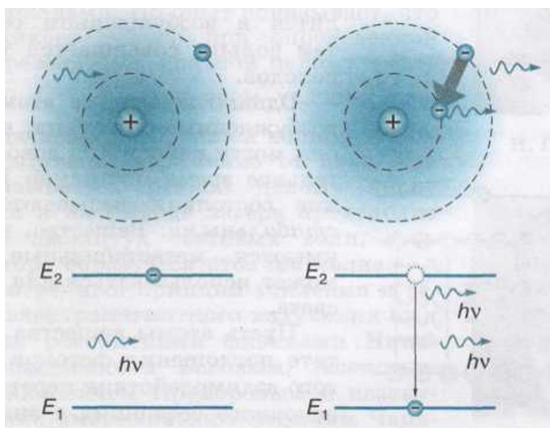


Рис. 58. К иллюстрации вынужденного излучения

## Вопрос 67. Что такое МЭМС?

Микросистемная техника за короткий срок стала одним из признанных направлений высоких и критических технологий 21-го века. Автономные микросистемы, прежде всего микророботы, должны активно использоваться в области производства, медицины, охраны здоровья человека и экологии. Терминология в области микросистем пока еще не установилась. В основе её классификации лежат принципы действия и конструктивные элементы. Наиболее широко применяется термин – «микроэлектромеханические системы» - МЭМС. В дальнейшем появились термины микрооптоэлектромеханические

системы (МОЭМС) и микрохимикозлектромеханические системы (МХЭМС). Выделение области применения МЭМС привело к появлению, например, термина Био-МЭМС. В последнем случае речь идет о микросистемах, которые могут производить анализы биологических жидкостей (например, крови) и подготавливать данные о её составе и даже наличия болезнетворных факторов (например, вирусов).

Микросистема – это интеллектуальная миниатюризированная система, обладающая чувствительными, вычислительными и производительными функциями.

**Чувствительная (сенсорная) функция** заключается в способности определять наличие и концентрацию химических и биологических компонент в окружающей среде.

**Вычислительная функция** означает, что микросистема обладает процессором (вычислителем), который проводит необходимые вычисления и подготавливает информацию для передачи и отображения другими устройствами. Например, передает её по электронной сети в другие компьютеры либо отображает на экранах.

**Производительная функция** означает, что микросистема наделяется микроскопическими исполнительными механизмами. Она управляет их работой. Например, для того, чтобы провести анализ биологической жидкости, к ней надо доставить химические реагенты, по изменению свойств которых судят о свойствах жидкости. Для этой цели используются насосы микронных размеров, которые перекачивают нужные жидкости. Эти насосы формируются непосредственно в кристалле, на базе которого создается микросистема.

Поэтому в микросистеме обычно используется комбинация двух или больше устройств, действующих на основе использования электрических, механических, оптических, химических, биологических, магнитных или других свойств и интегрированных на одном чипе или мультичиповой плате.

**МЭМС – это интегрированные микроустройства или системы, комбинирующие электрические и механические компоненты, изготовленные по технологиям, совместимым с технологией Интегральных схем и имеющие размеры от микрометров до миллиметров.**

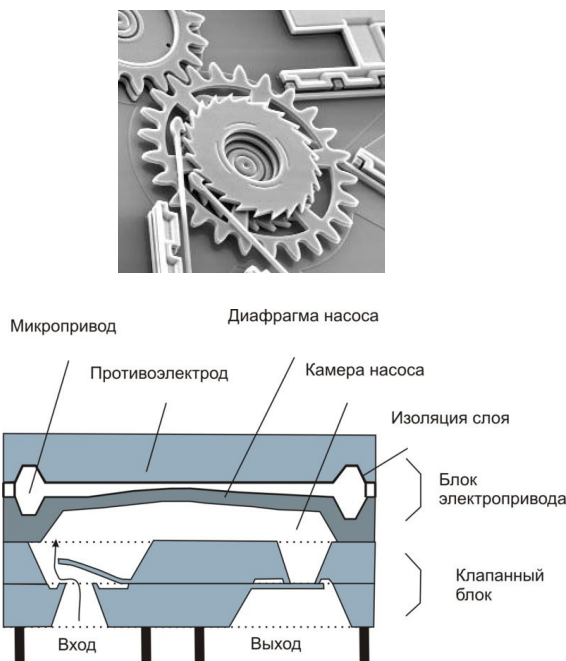
Таким образом, современная технология создания интегральных схем тесно связана с технологией МЭМС. Однако чтобы реализовать научные идеи в этой области в эту технологию необходимо интегрировать другие достижения физики, химии и биологии, тогда возникает принципиально новое качество изделия. Поэтому технология МЭМС впитывает всё лучшее, что достигнуто в смежных областях знаний, в том числе в области нанотехнологий.

## **Вопрос 68. Что такое силовые элементы МЭМС?**

В МЭМС необходимо включать исполнительные механизмы, которые преобразуют электрическую энергию в механическую (рис.59). В настоящее время основным силовым элементом механической части МЭМС является мембрана. Прогиб мембраны осуществляется электростатическими либо пьезоэлектрическими силами. В настоящее время достигнуты большие успехи в изготовлении мембран в монокристаллах кремния, в том числе в России ГНЦ РФ «Технологический центр». Мембраны изготавливаются

методами планарной технологии, такими же, как производство интегральных схем. На рис. 59. Показана схема действия микронасоса с мембранными силовыми элементами.

Такой насос изготавливается из четырех кристаллов кремния. В каждом кристалле методами планарной технологии выполняются необходимые элементы, а затем кристаллы склеиваются. Верхняя пластина содержит противоэлектрод мембраны. Это металлизированная поверхность кремния. Вторая пластина содержит рабочую мембрану из кремния. Верхняя поверхность мембраны покрыта слоем металла. Вместе они составляют блок электропривода, однако, они электрически изолированы друг от друга. Если между ними приложить электрическое напряжение, то противоэлектрод и мембрана притягиваются друг к другу. Мембрана прогибается вверх и под ней создается пониженное давление. Первые две пластины снизу создают вместе клапанный блок. Когда под мембраной пониженное давление, то мембрана входа прогибается вверх и жидкость втягивается в полость под мембраной. Если напряжение, приложенное к блоку электропривода отключить, то под действием упругих сил мембрана возвращается в первоначальное положение. При этом под ней создается избыточное давление. Мембрана выхода прогибается вниз и жидкость выталкивается в канал выхода. Повторяя этот цикл необходимое количество раз, можно перекачать из канала входа в канал выхода необходимую порцию жидкости.



**Рис. 59.** Изображение МЭМС, полученное в электронном сканирующем микроскопе (сверху). Конструкция диафрагменного микронасоса с электростатическим принципом управления и пассивным лепестковым клапаном (снизу).

## Вопрос 69. Что такое сенсоры, наносенсоры?

**Сенсоры**, или датчики – это технические элементы, чувствительные к внешним воздействиям (от англ. «sense» - «чувствовать»).

Сенсоры уже давно встраиваются в автомобили, музыкальные центры, холодильники и другие бытовые приборы. Датчики широко используются в охранных системах, системах контроля над глобальными катаклизмами (например, **сейсмодатчики**, способные заблаговременно предупредить людей о надвигающемся землетрясении по малейшим колебаниям), системах противопожарной безопасности, медицине.

**Ультразвуковые сенсоры** по принципу работы напоминают локатор. Волны, исходящие от них, проникают в любой угол помещения, и малейшее изменение геометрии комнаты приводит к срабатыванию сигнализации.

**Инфракрасные датчики** срабатывают в момент попадания движущегося объекта, излучающего тепло (например, человека или собаки) в зону чувствительности датчика.

**Пьезоэлектрический сенсор** предназначен для обнаружения механических воздействий на отдельные предметы и используется при охране сейфов, музейных экспонатов и т.д. Такой сенсор представляет собой МЭМС-устройство, способное обнаружить смещение вплоть до 1 микрона. В основе работы сенсора лежит пьезоэлектрический эффект, суть которого подробно излагалась в первой главе при описании пьезомеханического манипулятора, обеспечивающего перемещение зонда сканирующего микроскопа.

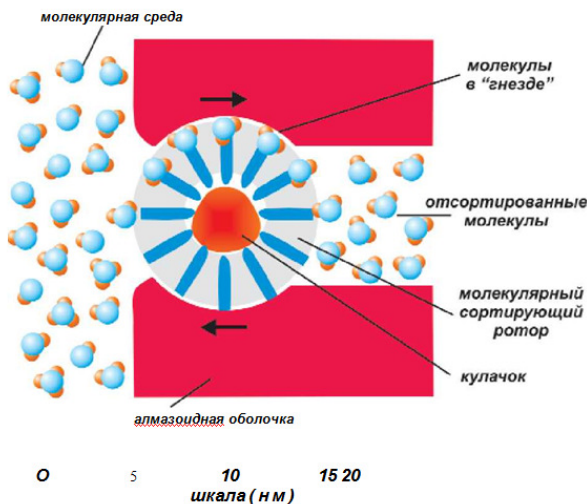
Работа **газовых сенсоров** заключается в анализе воздуха, попадающего в сенсор через полупроницаемую мембрану. Молекулы газа вступают в реакцию с электролитом у измерительного электрода. В результате реакции генерируется электрический ток, по измерению которого можно судить о наличии тех или иных веществ в атмосфере. Такие устройства позволяют определять утечку газов и проверять состояние атмосферы на предмет наличия токсичных веществ, взрывоопасного водорода и т.п.

**Наносенсоры** – это чувствительные элементы, действие которых основано на наномасштабных эффектах. Сегодня наносенсоры находят широкое применение в контроле над состоянием сложных систем, бытовой технике и в биомедицине.

## Вопрос 70. Что такое Молекулярный Сортирующий Ротор?

С помощью НЭМС-систем можно построить нанорецептор, который смог бы отделять молекулы только одного типа. Классический нанорецептор, названный Молекулярным Сортирующим Ротором (МСР), предложен Эриком Дрекслером.

Каждый ротор (см. рис. 60) имеет «гнезда» по окружности, конфигурированные под определенные молекулы. Находясь в окружении молекул, «гнезда» селективно захватывают только заданные молекулы и удерживают их до тех пор, пока молекула не окажется внутри устройства. От «гнезда» ее отсоединяет стержень, расположенный внутри ротора. Такие роторы могут быть спроектированы из  $10^5$  атомов и иметь размеры порядка  $(7 \times 14 \times 14 \text{ нм})$  при массе  $2 \times 10^{-21} \text{ кг}$ . Они смогут сортировать молекулы, состоящие из 20 и менее атомов, со скоростью  $10^6$  молекул/сек при энергозатратах в  $10^{-22} \text{ Дж}$  на 1 молекулу. МСР позволяет создавать давление в 30 000 атмосфер, потребляя  $10^{-19} \text{ Дж}$ .



**Рис 60.** Молекулярный сортирующий ротор

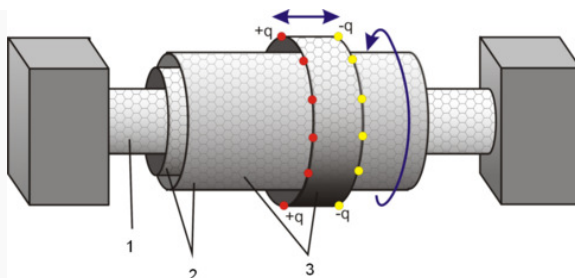
Роторы полностью обратимы и поэтому могут быть использованы как для нагнетания, так и для выгрузки молекул газов, воды и глюкозы. Каждый ротор имеет 12 «гнезд» для присоединения молекул, расположенных по длине окружности ротора. МСР позволяют нагнетать в резервуары химически чистые вещества, в которых не будет ни одной чужеродной молекулы.

## **Вопрос 71. Применяются ли в МЭМС углеродные нанотрубки?**

Произвольное, но контролируемое манипулятором относительное движение слоев в многослойных углеродных нанотрубках, а также их выдающиеся упругие свойства допускают в качестве подвижных элементов применение наноэлектромеханических систем. Был предложен ряд устройств, перспективных для применения в МЭМС и основанных на относительном движении слоев углеродных нанотрубок: наноподшипники вращения и скольжения, наношестерня, нанопереключатель, осциллятор гигагерцового диапазона, броуновский наномотор, нанореле, а также пара наноболт-наногайка. Более того, экспериментально созданы наномоторы, в которых в качестве вала и втулки использованы слои многослойной углеродной нанотрубки.

Недавно было предложено использовать двухслойную углеродную нанотрубку, являющуюся парой наноболт-наногайка, для преобразования силы, приложенной к одному из слоев и направленной вдоль оси нанотрубки, в относительное вращение слоев. Такая пара может быть использована в наноактуаторе, т.е. в наноустройстве, предназначенном для приведения МЭМС в движение. Принцип работы этого устройства аналогичен принципу приведения во вращение юлы. Принципиальные схемы наноактуатора показаны на рис. 61. В этой схеме статор наномотора закреплен

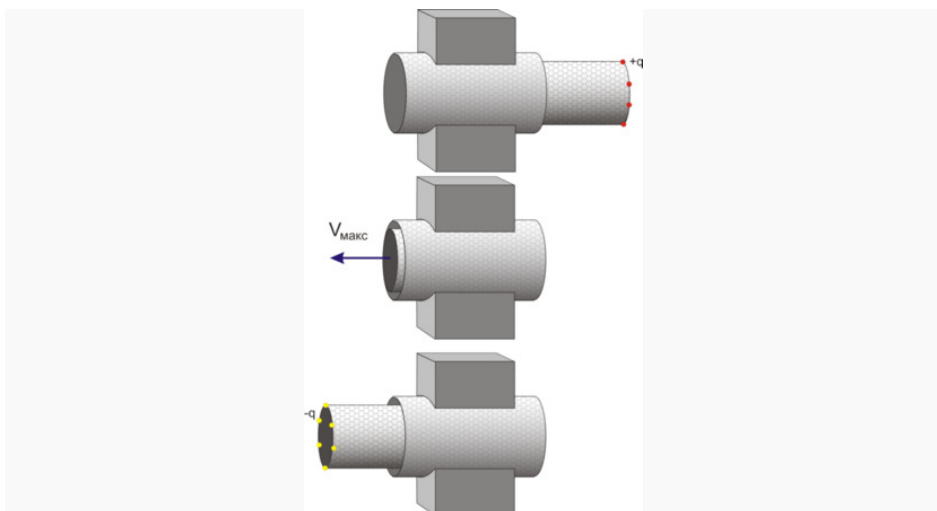
неподвижно. Следующие два слоя являются ротором. Относительное положение этих слоев должно быть зафиксировано. Статор и ротор представляют собой наноподшипник вращения. Внешний слой служит для преобразования силы, приложенной вдоль оси нанотрубки, во вращение ротора. Такое преобразование возможно в том случае, если эти слои образуют пару наноболт-наногайка.



**Рис. 61.** Принципиальные схемы наноактуатора: со статором – внутренним слоем (а), со статором – внешним слоем (б)

Движение происходит следующим образом. В электрическом поле (при подаче электрического потенциала) диполь  $+q - q$  (элемент 3 на рис.61) начинает двигаться вдоль линий поля и вдоль статора. Кулоновское взаимодействие заставляет вращаться ротор, поскольку он состоит из углеродной нанотрубки, у которой атомные слои расположены под углом к оси нанотрубки. Кулоновское взаимодействие диполя с атомами поверхности нанотрубки возникает благодаря наведенному дипольному моменту углеродной нанотрубки.

Внутреннюю часть двухслойной углеродной нанотрубки можно заставить колебаться (рис. 62). Для этого внешний слой закрепляется. Внутренний слой дополнительно обрабатывается. На одном конце адсорбируются положительные ионы водорода, а на другом – отрицательные ионы фтора. Под действием неоднородного электрического поля внутренняя труба, которая представляет диполь, может перемещаться относительно внешней, как было показано выше. Это колебательное движение можно преобразовать во вращательное.



**Рис. 62.** Последовательные (а-в) положения слоев гигагерцевого осциллятора в течение половины периода колебаний. А, в – максимальное телескопическое выдвигание внутреннего слоя, сила Ван-дер-Ваальса втягивает внутренний слой во внешний; б – внутренний слой проходит по инерции с максимальной скоростью  $V_{\text{макс}}$  положение с максимальной потенциальной энергией

## Вопрос 72. Что такое проект «Умная пыль»?

В 1998 году американские ученые из военного агентства DARPA выдвинули концепцию «умной пыли» (smart dust). Суть ее заключается в том, чтобы разбрасывать с самолетов над зоной боевых действий тысячи крошечных сенсоров-радиопередатчиков, которые незаметно для противника станут отслеживать все его перемещения и действия.

В рамках совместного проекта Калифорнийского университета в Беркли и корпорации Intel были созданы умные сенсоры Motes – чувствительные приборы размером с таблетку аспирина, способные автономно работать в любых условиях и с помощью радиоволн объединяться в локальные сети для передачи собранной информации центральному компьютеру.

Исследователи изготовили несколько сотен экспериментальных «умных пылинок», которые были снабжены сенсорами и радиопередатчиками, передающими сигнал по цепочке от одного робота к другому. Поскольку объем памяти «пылинки» составляет лишь несколько килобайт, то для их совместной работы разработали специфическую «крошечную» операционную систему TinyOS, оперирующую файлами размером порядка 200 байт, и соответствующую систему баз данных TinyDB, проводящую внутрисетевую обработку данных. При этом они отличаются достаточно долгим сроком службы – их батареек хватает на несколько лет! Секрет такой долговременной работы «пылинок» заключается в том, что они включаются лишь на короткое время: делают замеры, передают сигнал – и снова «засыпают».

### **Вопрос 73. Каковы области применения «умной пыли»?**

Благодаря таким качествам, как беспроводность, автономность, миниатюрность, множественность, надежность и относительно низкая стоимость, «умная пыль» уже стремительно находит применение в повседневной человеческой жизни. Помимо военных и полицейских целей, самоорганизующиеся сенсорные сети могут использоваться и в мирных целях – от наблюдения за окружающей средой до присмотра за пожилыми людьми.

«Motes» проходят испытания в качестве средства для моделирования последствий землетрясений, мониторинга движения транспорта в военных зонах, использования воды в сельскохозяйственных угодьях, получения информации о состоянии зданий, дорог, загрязнении водоемов и т.д. В частности, это будет очень важно для тех «motes», которые будут использоваться в городах для обнаружения признаков нападения биотеррористов.

Одним из обоснованных опасений являются сомнения по поводу правомочности данной технологии. Помимо позитивных применений, «умная пыль» может играть роль и незаметного подслушивающего устройства (особенно если учесть современные темпы миниатюризации электроники), что дает ее обладателям большие возможности для вторжения в личную жизнь граждан. А по мере ее распространения вероятность злоупотреблений полученной информацией может только расти. Но поскольку остановить научно-технический прогресс еще не удавалось, это, по-видимому, должно привести к совершенствованию законов с учетом появившихся новых технических возможностей покушения на неприкосновенность личности.

### **Вопрос 74. Что такое проект «электронный нос»?**

**Электронный нос** – это мультисенсорная система для скоростного анализа состояния воздуха, имитирующая работу человеческого органа обоняния.

Такое устройство представляет собой программируемый набор датчиков, каждый из которых «нюхает» отдельный компонент запаха вещества или продукта. Чем больше датчиков установлено, тем точнее результат. Наносенсоры для электронного носа подбираются по их химическому средству, и обычно для этой цели используются полимерные проводящие плёнки.

В отличие от обычных газовых сенсоров, разрабатываемых специально для каждого отдельного вещества, электронный нос достаточно универсален, а с помощью наносенсоров способен уловить и детектировать настолько малые концентрации веществ, что с ним не сравнится ни одна ищейка.

Как правило, электронный нос состоит из трех функциональных узлов:

- системы пробоотбора;
- матрицы сенсоров с заданными свойствами;
- блока процессорной обработки сигналов, поступающих от сенсоров.

Исследуемая проба закачивается воздушным насосом в кюветное отделение, где установлена линейка или матрица сенсоров. Там порция газовой смеси разделяется на отдельные фракции, которые прогоняются через систему специальных рецепторов и, в зависимости от состава и количества, изменяют их характеристики. В одном из



вариантов электронного носа присоединение специфической молекулы к поверхности сенсора, представляющего собой тончайшую иглу-кантилевер толщиной в 100 нм и длиной 50 микрон, вызывает изменение резонансной частоты за счет изменения его массы. Измеряя новую частоту колебаний кантилевера, можно определить присутствие специфических групп молекул.

Величины показаний каждого детектора передаются на процессорный модуль. Специальная программа анализирует полученные данные и выдает результаты в виде своеобразных «клякс» - хроматограмм.

После дегустации в систему подаются пары промывочного газа (например, спирта), чтобы удалить пахучее вещество с поверхности датчиков и подготовить прибор к проведению нового измерительного цикла.

Период времени, в течение которого сенсоры электронного носа анализируют закаченную пробу воздуха, называется временем отклика. Современные образцы отличаются достаточно высоким быстродействием. Время отклика у некоторых из них составляет порядка 10 секунд.

Период подачи в ячейку промывочного газа получил название времени восстановления (латентного периода). Время восстановления, как правило, колеблется в пределах минуты.

Для распознавания образов запаха система «электронный нос» использует элементы искусственного интеллекта.

## **Вопрос 75. Каковы области применения «электронного носа»?**

На сегодняшний день достаточно большое количество «электронных носов» являются коммерчески доступными приборами. Современный электронный нос обладает высокой степенью специфичности и 81анотехнтельности, работает в течение длительного времени и использует сравнительно недорогую технологию твердотельного датчика-сенсора.

«Электронный нос» может обеспечить новые возможности в борьбе с контрабандным ввозом и распространением наркотиков, предупредить террористические диверсии. Вынюхивая метан, можно быстро обнаружить и устранить утечки в газопроводах.

«Электронный нос» может быть использован для оценки свежести продуктов, контроля качества, мониторинга случайных или преднамеренных загрязнений или несоответствий торговой марки.

«Электронный нос» необходим при разработке и производстве кормов для животных, ведь в этом случае сами потребители продукта не могут прокомментировать его запах.

Портативный интегральный прибор может помочь туристам отличить съедобные природные объекты от несъедобных.

Ученые Пенсильванского университета создали «электронный нос», который выявляет инфекционные болезни по дыханию обследуемого человека. «Электронный нос» подносится ко рту больного, получает его выдох и сравнивает химический состав с базой данных типичных примеров химического состава выдоха заведомо больных людей, на основании чего ставится соответствующий диагноз.

## Вопрос 76. Что такое проект «электронный язык»?

Этот прибор распознает жидкости сложного состава по вкусу, то есть выполняет работу электронного дегустатора.

В основе прибора – массив сенсоров, методы распознавания образов и многомерной калибровки для обработки данных. «Электронный язык» состоит из четырех разных химических сенсоров, каждый из которых по-разному реагирует (изменением электрического сопротивления) на тот или иной вкус. Комбинация сигналов сенсоров составляет электронный «отпечаток» вкуса. Для удобства классификации «отпечатков» разработчики сводят реакции всех сенсоров к местоположению одной точки на графике. Присутствие сладкой компоненты смещает точку к верхней левой вершине диаграммы, кислой компоненты – к верхней правой вершине, горькой или соленой – вниз графика.

Как и «электронный нос», данная система основана на хроматографии, когда состав смеси определяется путем разделения присутствующих в ней компонентов. В «электронном языке» это достигается за счет применения специального микрочипа с миллионами мельчайших каналов, предназначенных для отбора молекул строго определенного размера. Сигнал от микрочипа обрабатывается компьютером и выдается в удобной для пользователя форме.

Возможности распознавания вкуса с помощью «электронного языка» ученые показали на примере минеральной воды, соков, кофе и растительного масла. Его также можно использовать и для анализа рабочих жидкостей на предмет наличия примесей а также с целью быстрого и точного мониторинга окружающей среды.

## Вопрос 77. Что такое проект «видеочки»?

Новая МЭМС-технология позволила компании Microvision сделать систему проекции изображения прямо на сетчатку глаза. Этим создается иллюзия полноразмерного изображения.

Шлем с трехмерным изображением может использоваться не только пилотами сверхзвуковых самолетов, но автомеханиками и инженерами (рис. 63). На сетчатку глаза передается рисунок, показывающий точные чертежи выбранного автомобильного узла, его комплектация, необходимые расчеты. С помощью беспроводной системы пользователь связан с Интернетом. Также с помощью встроенной системы расчетов автомеханик может рассчитать любой узел автомобиля (или другого механизма).

«Видеочки» могут пригодиться инженерам, химикам и биологам.

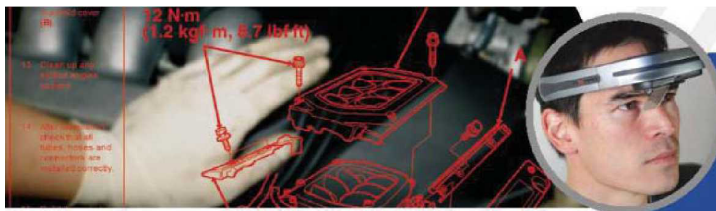


Рис 63. Видеочки - экспертная система NOMAD от Microvision

## **Вопрос 78. Какие источники энергии могут применяться в нанотехнологиях?**

Датчики, способные передавать из глубины организма параметры кровяного давления или иные данные, теперь могут быть столь малы, что для них оказываются слишком велики даже самые крошечные батарейки традиционного типа. К счастью, нанотехнологии позволили создать микроскопические генераторы, вырабатывающие ток на месте. Очередное чудо нанотехнологий держит пинцетом профессор Чжун Линь Ван (Zhong Lin Wang) из технологического института Джорджии (Georgia Tech). Тонкая таблеточка, главная, рабочая часть, которой – это квадратик с поперечником в пару миллиметров, способна выдавать электричество, собирая вибрацию из окружающей среды. Пусть мощность устройства измеряется пиковаттами – для целей авторов аппарата это достаточно.

Масса разных электронных приборов (вроде медицинских датчиков внутри тела, или датчиков внутри сооружений) нуждается в чрезвычайно компактных и долговечных источниках питания. В этом направлении работают многие исследователи и получен ряд результатов, каждый из которых обладает своими преимуществами и недостатками. Одним из направлений является создание генераторов энергии на основе нановискеров. Другим перспективным направлением является создание генераторов с радиационной накачкой на основе альфа- и бета-источников. При этом технологически радиационно-стимулированные источники энергии готовы к серийному выпуску на производстве, но обладают слабыми характеристиками и низкими токами генерации. Источники на основе нановискеров технологически не устойчивы, быстро разрушаются, но могут быть улучшены за счет развития спектра наноматериалов и новых технологических подходов.

## **Вопрос 79. Что такое нановискер?**

В основе генератора на нановисках – мириады нанопроводков из оксида цинка или другого материала. Тонкие нитевидные кристаллы, называемые в научной литературе вискерами («усиками» – от английского whiskers). Они являются одновременно и полупроводниками, и пьезоэлектриками. Так что если их слегка согнуть и отпустить – генерируют импульс тока. Ранее было показано, что при помощи наконечника атомного силового микроскопа можно индивидуально пригибать эти проводки, получая ток.

Заметим, в обычном макромасштабе принцип генерации тока пьезоэлектриками надежд инженеров не оправдал. А в нанотехнологиях и наноизделиях он может оказаться выгодным. Конечно, атомный силовой микроскоп сооружение для этого весьма крупное и массивное. Так что нановискерам надо добавить контакты, чтобы получился генератор. Как показано на рис.64 геометрически нановискеры представляют собой столбики из кристаллического материала, рост которых происходит при определенных условиях.



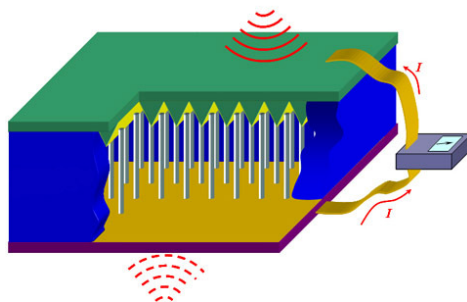
**Рис.64.** Манганитные висеры  $\text{Ba}_6\text{Mn}_{24}\text{O}_{48}\text{K}$ .

В процессе роста нановискеров возникает асимметрия их уникальных свойств. В зависимости от материала нановискеров они могут обладать пьезоэлектрическими, магнитными и другими свойствами.

### **Вопрос 80. Как работает генератор энергии на нановискерах?**

Схема наногенератора на нановискерах содержит специальный зубчатый электрод из кремния, покрытого тонким слоем платины. На его поверхности находится огромное количество выступов, в промежутки между которыми попадают верхушки нановискеров. Кремниевый электрод вибрирует, отклоняет верхушки нанопроводков в разные стороны (как ветер колеблет верхушки деревьев) и собирает с них электрический ток (рис.65).

Наногенератор был создан из вертикально параллельно выстроенных вискеров  $\text{ZnO}$ , помещенных с небольшим зазором под металлический зигзагообразный электрод. Ультразвуковая волна, проходя через жидкость, инициирует колебания электрода, который в свою очередь сгибается и одновременно заставляет колебаться массив вискеров. Сочетание пьезоэлектрического эффекта и полупроводниковых свойств преобразует механическую энергию колебаний и деформации в электричество, которое передается электроду.

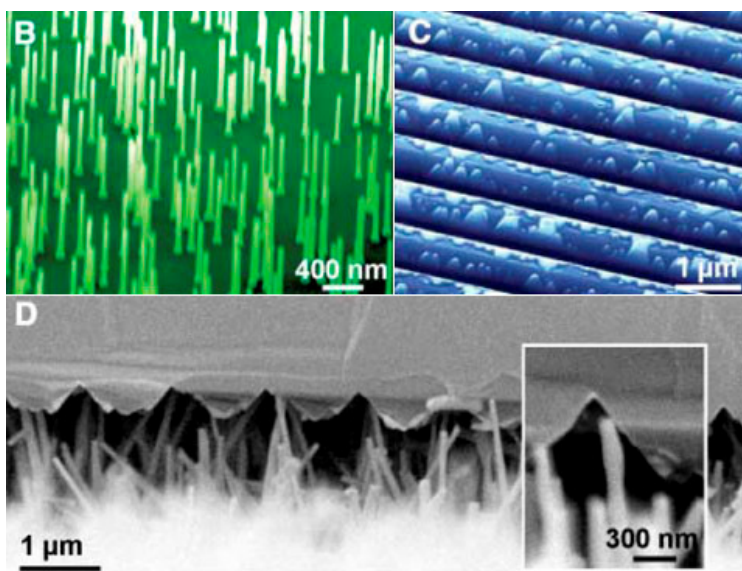


**Рис.65.** Фиолетовый и тёмно-жёлтый цвет – подложка, синий – гибкие, упругие и герметичные стенки, зелёный – пилообразный электрод, серый – нанопроводки, красный – ультразвук и получаемый ток. (gatech.edu)

Созданные в настоящий момент наногенераторы имели площадь 2 мм<sup>2</sup>, и генерировали ток силой до 35 нА непрерывно в течение 4 часов, при этом потенциально срок их службы значительно дольше. Устройство помещали в воду и подавали ультразвук (рис.66). В качестве подложки для выращивания нанопроводков применялся арсенид галлия, сапфир или даже гибкий полимер. Таким образом, подобный наногенератор можно сделать еще и гибким. К тому же основной материал – оксид цинка – не токсичен, что важно для медицинского применения.

В будущем подобные генераторы могли бы собирать либо имеющуюся в теле энергию (кровенный поток, сокращения мускулов), либо улавливать ультразвуковые колебания, специально посылаемые извне. Таким способом, к примеру, небольшой механизм снаружи, на теле пациента, мог бы одновременно подзаряжать массу нанодатчиков, курсирующих внутри тела.

Недостатками этих устройств является короткое время работы, поскольку они выходят из строя по не понятным причинам. Кроме этого в выработке тока участвуют лишь 1% от общего числа нановискеров. Не решена также проблема выращивания нановискеров одного размера, так, чтобы все они шли параллельно друг другу и равномерно размещались на подложке (рис.66). Достижение такого идеала могло бы многократно повысить выходную мощность устройства при тех же размерах. Нановискеры, которые более короткие, не достают до верхнего электрода, и наоборот, те нановискеры, которые слишком длинны – не могут сгибаться и распрямляться должным образом, чтобы генерировать ток.

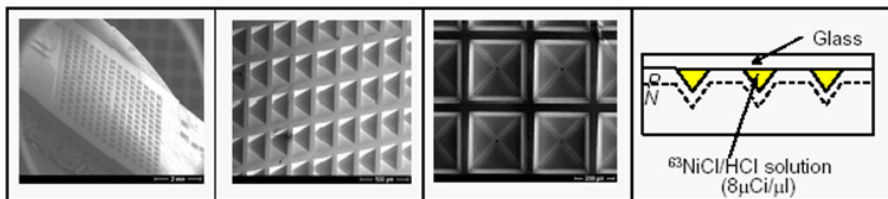


**Рис.66.** Основные элементы генератора на основе нановискеров: В – выращенные на подложке нановискеры, С – верхний электрод, D – разрез генератора в сборе (gatech.edu).

## Вопрос 81. Что такое радиационно-стимулированный источник питания?

Одним из самых перспективных вариантов создания батарей питания для наноустройств является преобразование радиоактивной энергии изотопов в электричество. Такие генераторы энергии называют радиационно-стимулированные источники энергии. Наиболее часто в качестве источника энергии используют бета-источник. Бета-частицы, образующиеся при распаде радиоактивного вещества, например, никель-63, попадают в диод. В результате энергия бета-частиц преобразуется в электрическую и возникает наведенный потенциал, также как это происходит при освещении солнечных батарей.

На рис.67 изображена структура пирамидального кремниевого диода. Размер одной ячейки составляет 200 мкм, но уменьшение до нанометрового диапазона не представляет принципиальных трудностей. Максимальная мощность такой структуры составляет 0,32 нВт при токе замыкания 2,86 нА. Эффективность варьировалась от 0,05 до 0,1%. При этом деградация структуры в течение года и более не наблюдалась.



**Рис.67.** Бетавольтаическая микробатарея на основе кремниевого р-п-диода в виде матрицы из обратных пирамид. Слева первые три рисунка структура диода, справа конфигурация жидкого раствора  $^{63}\text{NiCl}/\text{HCl}$  помещенного в матрицу диода.

При дальнейших исследованиях возможно повышение эффективности элементов питания, а также не исключается возможность уменьшения размеров до нанометрового масштаба. В настоящее время батареи питания с применением изотопа Ni-63 не могут быть использованы для питания телефонов, ноутбуков и т.д., но они успешно могут быть применены для питания микроэлектромеханических систем. Дальнейшие исследования в этой области приведут к наноразмерным радиационно-стимулированным источникам питания.

## Вопрос 82. Применяются ли в обычных батарейках наночастицы?

Ведущие американские, немецкие и японские автопроизводители – General Motors, Chrysler, Ford, Mercedes-Benz, Volkswagen, BMW, Toyota, Mitsubishi, Honda, Subaru, альянс Renault-Nissan – рассматривают именно электромобиль как наиболее перспективное направление дальнейшего развития автомобильной промышленности и лишь ожидают массового появления эффективных аккумуляторных технологий. Как

показывает анализ – в этом направлении именно нанотехнологии скажут свое решающее слово.

29 марта 2005 компания Toshiba взбудоражила индустрию электротехник, и, представив прототип новой литий-ионной аккумуляторной батареи. Обычные литий-ионные батареи заряжаются со скоростью 2-3% в минуту от общей мощности, а для их полной зарядки требуется час. Новый аккумулятор Toshiba создан с применением наноматериалов, в частности, из нанокристаллов титанита лития изготовлен отрицательный электрод, способный поглощать 80% от общей мощности батареи за минуту. Полная же емкость аккумулятора восстанавливается уже через 2-3 (!) минуты с момента начала зарядки.

Кроме высокой скорости перезарядки новые батареи обладают высокой плотностью заряда – представленный японцами опытный образец габаритами всего 3,8× 62×35 мм обеспечивал емкости 600 мА/ч.

Помимо отличных характеристик емкости и режима заряда новая батарея имеет увеличенный срок службы: после 1000 циклов заряда/разряда происходит потеря лишь 1% ее емкости, а общий ресурс новых батарей составляет более 5 тысяч циклов. Кроме того, батарея может работать при температурах до -40оС, теряя при этом лишь 20% заряда против 100% у типичных современных батарей уже при -25оС.

После трех лет подготовки производства – в марте 2008 года – компания Toshiba вывела на рынок литий-ионные наноаккумуляторы, получившие название SciB (Super Charge ion Battery).

Приведенный в начале статьи пример разработки Toshiba не единичен. Другая японская компания Matsushita Battery Industrial Co., Ltd. (MBI) разработала и представила на форуме «Intel Developer Forum fall (IDF) 2005» прототип цилиндрической аккумуляторной Li-ion батарей с нанотехнологически обработанным катодом на основе никелевого оксида.

По сравнению с показанной ранее «призматической» батареей, цилиндрическая батарея имеет улучшенную объемную плотность энергии – до 620 Вт/л. Благодаря новым батареям непрерывный срок работы ноутбука может составлять до 13 часов.

В США с 2007 года серийно продаются АБ, радикально улучшенные с помощью наноматериалов. Компания Phoenix Motorcars успешно завершила первичные испытания электрического пикапа с аккумуляторами NanoSafe производства компании Altairnano.

Литий-ионные аккумуляторы с электродами из наноструктурированных материалов (35 кВт.ч.) заряжаются за 10 минут. Дальность пробега автомобиля с такими аккумуляторами на 1 зарядке – 200 км. Более того, компания Altairnano уже разработала версию аккумуляторов 70 кВт.ч. что позволит увеличить пробег электромобиля до 400 (!) км, что практически сравнимо с бензиновыми машинами и в 3-4 раза превышает показатель современных электромобилей.

Обычные литий-ионные аккумуляторы не способны обеспечить достаточно большой ток разряда, и, кроме того, из-за теплового разрушения углеродного анода литий-ионные аккумуляторы выходят из строя после нескольких сотен циклов заряда-разряда.

В аккумуляторах Altairnano вместо углеродного используется анод из нанокристаллов титаната лития. Площадь его поверхности составляет около ста квадратных метров на грамм вещества, против трех квадратных метров у углерода.

За счет большой площади анода разработчикам удалось значительно увеличить допустимые токи заряда и разряда. К тому же титанат лития меньше подвержен тепловому старению, и новый аккумулятор выдерживает до двадцати тысяч циклов перезарядки.

Еще в конце октября 2006 года Altairnano завершила испытания своих аккумуляторов, в ходе которых они прошли цикл заряда/разряда 15000 раз. Теоретически 15000 циклов зарядки достаточно для 40 лет эксплуатации электромобиля. Специалисты Altairnano рассчитывают на 20 лет эксплуатации в реальных условиях.

Единственной серьезной проблемой новых аккумуляторов является их высокая взрывоопасность, поскольку высокая скорость зарядки сопровождается выделением тепла и энергии, так что локально может неконтролируемо произойти реакция окисления и взрыва.

### **Вопрос 83. Какие методы моделирования существуют в нанотехнологиях?**

Чтобы создать любой нанообъект, будь то наноробот либо новая молекула, нужно сначала детально разработать ее структуру и технологию создания. Но как это сделать, если такие структуры даже невозможно увидеть? Чтобы избежать конструирования многочисленных дорогих прототипов наносистем, чтобы понять, какая из них будет работать, а какая нет, инженеры используют модели.

Молекулярные модели могут быть разными. В самом простом случае это *физические модели* из цветных шариков, украшающие школьные кабинеты химии. Такие модели предельно просты и наглядны, однако их достоверность оставляет желать лучшего. Ведь атомы — это отнюдь не твердые пластиковые шарики, а сложные физические системы, живущие по своим законам.

Поскольку модели цветных шариков плохо отражают реальные свойства молекул, нанотехнологии обычно используют *компьютерные модели*, в которых можно задать настоящие законы квантовой физики. Основанное на мощном математическом аппарате, компьютерное моделирование играет ключевую роль в разработке наносистем

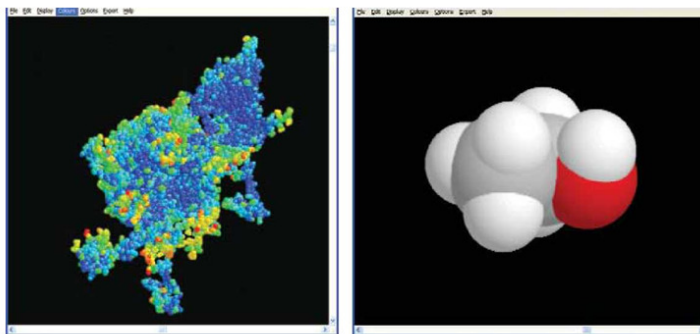
Что же представляет собой компьютерное моделирование? Наверняка многие читатели имеют представление о различных САПР – системах автоматизированного проектирования (или по-английски CAD – computer aided design). Обычные инженеры, дизайнеры и архитекторы давно используют преимущества компьютерного моделирования, применяя в работе известные программы, такие как MathCAD, AutoCAD, ArchiCAD и т.п.

Творчество молекулярного инженера очень похоже на творчество архитектора, проектирующего здание, который, в зависимости от назначения, рассчитывает его прочность, устойчивость, удобство строительства, стоимость, влияние окружающей среды и т.п. При этом большинство необходимых расчетов, основанных на теоретических данных, берет на себя компьютерная программа. При современном уровне знаний, позволяющем судить о квантовых законах с большой достоверностью, расчет и моделирование наноструктур стали вполне реальной задачей, сходной с обычными задачами CAD.



## Вопрос 84. Что такое визуальное моделирование?

Наиболее простая из современных визуализационных программ – небольшая программа RasMol, которая ничего не рассчитывает, но позволяет наблюдать в трехмерном виде наноструктуры, созданные другими (рис.68). В программе можно хорошенько рассмотреть наноструктуру, покрутить, увидеть химические элементы, связи и группы, а также экспортировать результаты в графический файл. На сайте [www.pdb.org](http://www.pdb.org) есть модели всех известных белков и биомолекул.



**Рис 68.** Наноструктуры в окне программы RasMol. Вирус SV40 (слева) и молекула этилового спирта (справа).

## Вопрос 85. Что такое численное моделирование?

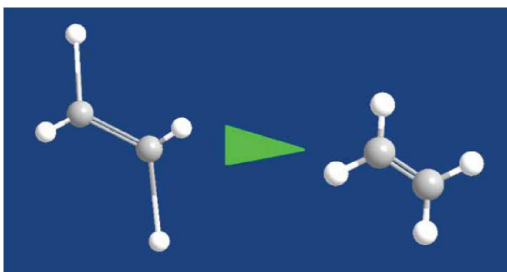
Для построения реальных наноматериалов используют математическое моделирование методами квантовой механики, молекулярной динамики и методом Монте-Карло и другие. С их помощью можно увидеть не только трехмерную модель объекта, но и его поведение при воздействии температуры, электромагнитных полей, гамма-квантов и др. Численное моделирование позволяет рассчитать структуру молекул, поведение атомов в процессе какого-либо динамического процесса, энергетические параметры наноматериалов и молекул, такие как энергия образования химической связи, энергия валентных электронов, энергия колебаний в различных направлениях и многое другое. Таким образом целью численного моделирования является не визуализация, а получение информации о структуре и энергетических параметрах материалов.

## Вопрос 86. Что такое молекулярная механика?

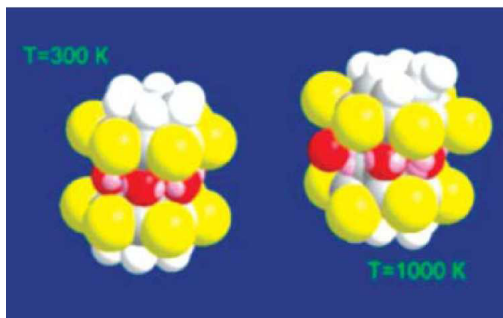
Молекулярная механика рассматривает самые простые модели молекул и наноматериалов. Основой для моделирования этих структур является информация о химических связях атомов друг с другом. Так в Chem3D можно любую химическую формулу набрать на клавиатуре, после чего на экран автоматически выводится

графическое изображение этой молекулы. Банк данных молекул хранит информацию о всех известных молекулах и их структурах, что позволяет не только визуализировать известные молекулы и кластеры, но и получать новые с хорошей достоверностью и на качественном уровне представить структуру и свойства нового кластера или молекулы.

При использовании алгоритмов молекулярной механики можно «вручную» собрать молекулу или наноструктуру, тогда программа сама оптимизирует ее, представляя реальное расположение атомов. Алгоритм оптимизации при этом опирается на потенциал взаимодействия атомов и подбирает структуру молекулы такой, при котором ее энергия будет минимальной (рис.69).



**Рис.69.** Преобразование структуры молекулы этилена ( $C_2H_4$ ) при «ручном» наборе структуры молекулы в реальный вид.



**Рис.70.** Поведение нанокластера при различных температурах.

Кроме этого молекулярная механика позволяет промоделировать нагрев структуры, повлиять на нее электромагнитными полями и посмотреть динамику этих взаимодействий (рис.70). Таким образом можно оценить температуру, при которой молекула распадется или нанокристалл расплавится.

## **Вопрос 87. Что такое молекулярная динамика?**

Метод молекулярной динамики (МД) предназначен для решения задачи о движении отдельных атомов, описываемых как материальные точки, обладающие массой, в поле

сил взаимодействия атомов друг с другом, инерционных сил, прилагаемых к твёрдому телу, частью которого являются исследуемые движущиеся атомы.

Модель кристалла – совокупность классических частиц. Потенциалы взаимодействия частиц постулируются. В расчётах, как правило, используются парные центральные потенциалы взаимодействия, зависящие лишь от межатомного расстояния.

Для того, чтобы результаты, получаемые для моделируемого кристаллита можно было распространить на макрообъем и сравнить затем с экспериментом, должны быть заданы условия «сшивания» кристаллита с внешним объемом. В методе МД можно выделить несколько типов граничных условий (ГУ):

### *1. Жесткие ГУ. Координаты граничных атомов зафиксированы.*

В этом случае предполагается, что достаточно большое количество подвижных атомных слоев вполне компенсирует влияние фиксированных граничных атомов на исследуемое явление. Граничные атомы могут быть зафиксированы либо в узлах идеальной решетки, либо в узлах упруго искаженной решетки. Этот вид ГУ привлекателен своей простотой и применяется в вариационном методе.

### *2. Периодические граничные условия.*

Если в некотором из направлений по характеру задачи имеется период полной идентичности, то целесообразно выбрать размер расчетной ячейки в этом направлении равным периоду идентичности. Последнее позволяет имитировать бесконечно протяженный кристалл в рассматриваемом направлении. Такие периодические условия являются в известном смысле точными, а не приближенными, в той степени, в какой соблюдается полная идентичность. Размеры периода в выбранном направлении в этом случае должны быть достаточно большими, чтобы обеспечить статичность и пренебречь взаимодействием дефектов в соседних периодических областях.

### *3. Нулевые граничные условия.*

При расчетах нанокристаллов необходимо использовать именно нулевые граничные условия, поскольку только в них можно изучать поведение частиц нанокристаллита на поверхности кристалла. Моделируемый кристаллит представляет собой кусок кристалла с требуемой структурой, помещенный в вакуум. Никакие атомы кристаллита не фиксируются. Система частиц, составляющих кристаллит, является замкнутой системой.

Для описания движения классических частиц используют систему дифференциальных уравнений классической динамики Ньютона. Начальные условия задачи определяются решаемой задачей. Для моделируемого кристаллита, содержащего  $N$  одинаковых атомов, позиции и скорости всех атомов полностью характеризуются  $6N$  координатами. В процессе моделирования ансамбль частиц приводится к каноническому или микроканоническому виду. В любом случае разброс координат и скоростей атомов должен соответствовать средним величинам макропараметров, таких как температура и давление.

Перед расчетом происходит процедура обезразмеривания физических величин. Действительно, в уравнениях движения имеется ряд постоянных множителей, которые можно исключить выбором безразмерных единиц. Например, в качестве единиц длины и времени в системе дискретных единиц естественно принять шаги дискретизации: длину ребра ячейки моделирования и шаг по времени. Таким образом все координаты переводятся в безразмерную систему путем деления на длину ребра ячейки.

Для перевода дискретной модели в программу для вычислительной машины сначала разрабатывают последовательность операций (численный алгоритм), при исполнении которых определяются все требуемые неизвестные, входящие в уравнения дискретной модели, а затем эту последовательность представляют в виде машинных команд. Мерой качества алгоритмов с точки зрения быстродействия служит количество арифметических операций, требуемых для решения задачи.

В методе молекулярной динамики можно получать различные характеристики нанокристаллов и структур. В качестве примера можно привести такие величины как температура, давление, распределение атомов по координационным числам, коэффициент диффузии, энергия дефектообразования и многое другое.

## **Вопрос 88. Что такое квантовая химия?**

Квантовая химия – это направление химии, рассматривающее строение и свойства химических соединений, реакционную способность, кинетику и механизм химических реакций на основе квантовой механики. Предметом квантовой химии являются: квантовая теория строения молекул, квантовая теория химических связей и межмолекулярных взаимодействий, квантовая теория химических реакций и реакционной способности и др. Квантовая химия находится на стыке химии и квантовой физики (квантовой механики). Она занимается рассмотрением химических и физических свойств веществ на атомарном уровне (моделях электронно-ядерного взаимодействия, представленных с точки зрения квантовой механики).

Вследствие того, что сложность изучаемых объектов не позволяет находить явные решения уравнений, описывающих процессы в химических системах, применяют приближенные методы расчета. С квантовой химией неразрывно связана вычислительная химия – дисциплина использующая математические методы квантовой химии, адаптированные для составления специальных компьютерных программ, используемых для расчета молекулярных свойств, амплитуды вероятности нахождения электронов в атомах, симуляции молекулярного поведения.

Основной задачей квантовой химии является решение уравнения Шредингера и его релятивистского варианта (уравнение Дирака) для атомов и молекул. Уравнение Шредингера решается аналитически, учитывая следующие ограничения: жёсткий ротатор, гармонический осциллятор, одноэлектронная система. Но реальные многоатомные системы содержат большое количество взаимодействующих электронов и для таких систем не существует аналитического решения уравнения. По этой причине в квантовой химии приходится строить различные приближённые, обычно численные или получисленные решения. Из-за быстрого роста сложности поиска решений с ростом сложности системы и требований к точности расчёта, возможности квантовохимических расчётов сильно ограничиваются текущим развитием вычислительной техники. Решение уравнения Шредингера строится на уравнении Хартри-Фока-Рутана итерационным методом (SCF-self consistent field – самосогласованное поле) и состоит в нахождении вида волновой функции.

Получаемая при решении уравнения волновая функция является математической абстракцией. Имеет определённый физический смысл лишь квадрат её значения, который

характеризует вероятность распределения (плотность) отрицательно заряженного электронного облака.

### **Вопрос 89. Какие вычислительные методы используют в квантовой химии?**

В квантовой химии используют приближения, исходя из общих соображений, которые оказались весьма эффективны при проведении реальных численных экспериментов:

1. Приближение Борна – Оппенгеймера или адиабатическое: движение электронов и движение ядер разделено, поскольку ядра движутся настолько медленно, что при расчёте движения электронов ядра можно принять за неподвижные объекты.

2. Одноэлектронное приближение (или приближение Хартри-Фока): считается, что движение электрона не зависит от движения других электронов системы. В связи с этим в уравнения, используемые в квантовой химии вносятся поправки на взаимное отталкивание электронов. Это позволяет волновую функцию электронов представить в виде суммы волновых функций отдельных электронов.

3. Приближение, называемое МО ЛКАО по аббревиатуре – Молекулярная Орбиталь как Линейная Комбинация Атомных Орбиталей: в данном подходе волновая функция молекулы представляется как сумма атомных орбиталей с коэффициентами:  $\Psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n$ , где  $\Psi$  – волновая функция (электронная часть волновой функции атома),  $c_1$  – коэффициент при атомной орбитали,  $\psi_1$  – волновая функция атомной орбитали. Решение задачи состоит в нахождении коэффициентов  $C$ . При учёте всех интегралов – так называемый метод *Ab initio*.

### **Вопрос 90. Что такое приближение Борна-Оппенгеймера в квантовой химии?**

**Приближение Борна – Оппенгеймера** – вариация адиабатического приближения уравнения Шрёдингера в квантовой химии, метод анализа молекулярных систем, заключающийся в том, что в системе выделяют и отдельно описывают ядра атомов и электроны, для которых характерные времена изменения состояния сильно различаются. М. Борн и Р. Оппенгеймер в 1927 году впервые показали, что электронные волновые функции подчиняются условию, при котором можно использовать это приближение. Однако расчеты с этим приближением стали широко использоваться только с приходом вычислительной техники и предвзоли развитие нанотехнологий.

Масса ядра значительно превышает массу электрона, вследствие чего скорость движения ядер мала по отношению к скорости движения электронов. В результате медленно движущиеся ядра образуют электростатическое поле, в котором с намного большей скоростью движутся электроны, успевающие мгновенно подстроиться к любому изменению координат ядер. Поэтому в приближении считают ядра фиксированными и рассматривают только движение электронов. На языке квантовой механики это эквивалентно допущению, что полная волновая функция молекулы может быть выражена в виде произведения электронной и ядерной функций:

$$\Psi(r, R) = \Psi_{el}(r, R) \times \Psi_{nuc}(R)$$

Приближение Борна-Оппенгеймера является существенным для квантовой химии. В этом приближении полная энергия молекулы представляет собой сумму электронной энергии  $E_{el}$ , вычисленной при фиксированной конфигурации ядер, и колебательно-вращательной энергии ядер  $E_{nuc}$ :

$$E = E_{el} + E_{nuc}.$$

## Вопрос 91. Что такое приближение Хартри-Фока в квантовой химии?

**Метод Хартри-Фока** – в квантовой механике приближённый метод решения уравнения Шредингера путём сведения многочастичной задачи к одночастичной в предположении, что каждая частица движется в некотором усреднённом самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными частицами системы. Известно, что решение уравнения Шредингера позволяет получить целый ряд сведений о свойствах системы, в том числе и об её энергетическом спектре. Метод был впервые предложен английским физиком Дугласом Хартри в 1927 году, однако содержал существенные недостатки и был впоследствии улучшен советским физиком Владимиром Фоком. Метод широко используется в квантовой химии, в частности, для проведения численного моделирования конфигурации некоторых молекул.

Метод Хартри-Фока часто применяется для исследования физических свойств смешанных кристаллов, например, для нанокристаллов и кластеров в кристаллической решетке. Уравнение Шрёдингера для атомов, содержащих более одного электрона, не может быть решено в аналитическом виде. В связи с этим рассматривают приближённые методы, наиболее существенным из которых является метод самосогласованного поля. Идея метода заключается в том, что каждый электрон в атоме рассматривается как движущийся в самосогласованном поле, создаваемом ядром вместе со всеми остальными электронами. Вместе с тем этот метод может применяться не только в атомной физике, но и просто для систем взаимодействующих частиц.

Построение самосогласованного поля может осуществляться либо методом последовательных приближений (изначально предложенным Хартри) или прямым вариационным методом. Существенно, что вычисления методом самосогласованного поля весьма громоздки, особенно для сложных атомов. Для них применяется другой метод – метод Томаса – Ферми.

Обобщением метода Хартри-Фока, в котором учитываются волновые функции пар частиц, является метод Хартри-Фока-Боголюбова. Метод состоит из нескольких стадий. На первом этапе решается задача о движении электрона в определённом модельном потенциале, который должен как можно лучше отображать взаимодействие выбранного электрона с ядрами атомов и другими электронами. Найденные волновые функции используются для того, чтобы определить взаимодействие электрона с другими электронами и ядрами, уточняя потенциал. В дальнейшем опять решается задача

нахождения волновых функций электрона для нового потенциала и нахождения из него следующего, более точного. Процедура продолжается до тех пор пока изменения в самосогласованном поле будут пренебрежимо малы, тогда говорят о достижении сходимости.

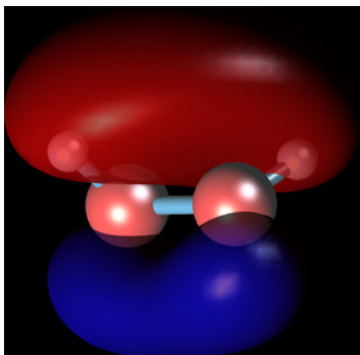
Уравнения Хартри-Фока являют собой одноэлектронные уравнения типа уравнения Шрёдингера, которым соответствуют орбитали  $\psi_i$ , отвечающие минимальным значениям энергии молекулярной системы.

## **Вопрос 92. Что такое приближение Молекулярных орбиталей в квантовой химии?**

**Теория молекулярных орбиталей (МО)** дает представление о распределении электронной плотности и объясняет свойства молекул. В этой теории квантовомеханические зависимости для атома распространены на более сложную систему – молекулу. Молекула рассматривается как целое, а не как совокупность сохранивших индивидуальность атомов. В молекуле (как и в атоме) имеются дискретные энергетические состояния отдельных электронов или молекулярные орбитали с их самосогласованным движением в поле друг друга и всех ядер молекулы.

Предполагается, что все электроны данной молекулы распределяются по соответствующим орбиталиям. Состояние электрона в атоме описывается одноэлектронной волновой функцией  $\psi$ , являющейся решением уравнения Шрёдингера. Волновая функция  $\psi$ , зависящая от четырёх квантовых чисел, имеющая конкретный математический вид и удовлетворяющая условию нормировки и однозначности по аналогии с атомной называется молекулярной орбиталью (МО). Каждая орбиталь характеризуется своим набором квантовых чисел, отражающих свойства электронов в данном энергетическом состоянии. В отличие от одноцентровых орбиталей атомов, орбитали молекул многоцентровые, то есть молекулы имеют общие орбитали для двух или более атомных ядер. Каждая молекулярная орбиталь обладает определённой энергией, приближённо характеризующейся соответствующим потенциалом ионизации.

По аналогии с атомными s-, p-, d-, f- орбиталями молекулярные орбитали обозначают греческими буквами  $\sigma$ -,  $\pi$ -,  $\delta$ -,  $\gamma$ -. МО образуются при комбинировании атомных орбиталей при достаточном сближении. Совокупность МО молекулы с указанием её типа и количеством электронов на ней даёт электронную конфигурацию молекулы. Существуют 3 типа молекулярных орбиталей: связывающие, разрыхляющие и несвязывающие. Электроны на связывающих молекулярных орбиталях упрочняют связь, на разрыхляющих как бы дестабилизируют (расшатывают). Молекула является устойчивой лишь в том случае, если число электронов на связывающих орбиталях превышает число электронов на разрыхляющих. Электроны, находящиеся на несвязывающих молекулярных орбиталях, участия в образовании химической связи не принимают (рис. 71).



**Рис.71.** Распределение молекулярных орбиталей перекиси водорода  $\text{H}_2\text{O}_2$ , вычисленные с помощью метода МО ЛКАО.

Из исходных атомных орбиталей возникает  $n$  МО. Так, при образовании двухатомной молекулы  $\text{H}_2$  из атомов  $\text{H}$  из  $s$ -орбиталей двух атомов  $\text{H}$  возникают две двухцентровые МО – одна энергетически более выгодная (связывающая  $\sigma_s^{\text{cb}}$ ), другая менее выгодная (разрыхляющая  $\sigma_s^{\text{разр}}$ ), чем исходные атомные орбитали. На связывающей МО электрон большую часть времени пребывает между ядрами (повышается электронная плотность), способствуя их химическому связыванию. На разрыхляющей же МО электрон большую часть времени находится за ядрами, вызывая отталкивание ядер друг от друга.

Характер распределения электронов по МО определяет порядок или кратность связи, её энергию, межъядерные расстояния или длину связи, магнитные свойства молекул и др. Заполнение молекулярных орбиталей подчиняется тем же правилам, что и заполнение атомных: принципу энергетической выгоды, принципу Паули, правилу Хунда, принципу заполнения электронных структур.

В общепринятом приближении молекулярная орбиталь рассматривается как линейная комбинация атомных орбиталей (приближение МО ЛКАО). Кратность связи в теории молекулярных орбиталей определяется выражением

$$N = \frac{n_{\text{bond}} - n_{\text{aer}}}{2}$$

где  $n_{\text{bond}}$  и  $n_{\text{aer}}$  — суммарные количества электронов на связывающих и разрыхляющих орбиталях соответственно.

Рассмотрим на примере молекулы водорода. У двух атомов водорода два  $1s$  орбитали с 1 электроном на каждой. Они имеют одинаковую энергию. Далее по приближению МО ЛКАО эти две орбитали преобразуются на 2: связывающую и разрыхляющую. Причём связывающая находится по энергии ниже  $1s$  орбиталей водорода на  $\Delta E$ . Разрыхляющая орбиталь находится выше  $1s$  орбиталей на  $\Delta E$ . Пусть  $1s$  орбитали водорода имеют энергию  $E$ , тогда связывающая орбиталь имеет энергию  $E - \Delta E$ , разрыхляющая  $E + \Delta E$ . Сложим энергии этих двух орбиталей  $(E - \Delta E) + (E + \Delta E) = 2E$ , что соответствует двум  $1s$  орбиталям двух атомов водорода. То есть закон сохранения энергии выполняется, что и должно быть.



### **Вопрос 93. Что такое метод Монте-Карло?**

Для моделирования процессов, происходящих во время роста нанокристаллов, их отжига, выращивании различных пленок и соединений на кристаллах широко используют метод Монте-Карло (МК). Метод МК является стандартным стохастическим методом исследования многочастичных систем и основан на вероятностном описании моделируемой системы. Преимущество МК заключается в простоте получаемых моделей и высокой производительности алгоритмов, что позволяет исследовать значительные по размерам объекты.

Сначала Энрико Ферми в 1930-х годах в Италии, а затем Джон фон Нейман и Станислав Улам в 1940-х в Лос-Аламосе предположили, что можно использовать связь между стохастическими процессами и дифференциальными уравнениями «в обратную сторону». Они предложили использовать стохастический подход для аппроксимации многомерных интегралов в уравнениях переноса, возникших в связи с задачей о движении нейтрона в изотропной среде.

Идея была развита Уламом, который, по иронии судьбы, также как и Фокс боролся с вынужденным бездельем во время выздоровления после болезни, и, раскладывая пасьянсы, задался вопросом, какова вероятность того, что пасьянс «сложится». Ему в голову пришла идея, что вместо того, чтобы использовать обычные для подобных задач соображения комбинаторики, можно просто поставить «эксперимент» большое число раз и, таким образом, подсчитав число удачных исходов, оценить их вероятность. Он же предложил использовать компьютеры для расчётов методом Монте-Карло.

Годом рождения метода Монте-Карло считается 1949 год, когда в свет выходит статья Метрополиса и Улама «Метод Монте-Карло». Название метода происходит от названия коммуны в княжестве Монако, широко известного своими многочисленными казино, поскольку именно рулетка является одним из самых широко известных генераторов случайных чисел. Станислав Улам пишет в своей автобиографии «Приключения математика», что название было предложено Николасом Метрополисом в честь его дяди, который был азартным игроком.

### **Вопрос 94. Для чего применяется метод Монте-Карло?**

Появление первых электронных компьютеров, которые могли с большой скоростью генерировать псевдослучайные числа, резко расширило круг задач, для решения которых стохастический подход оказался более эффективным, чем другие математические методы. После этого произошёл большой прорыв и метод Монте-Карло применялся во многих задачах, однако его использование не всегда было оправдано из-за большого количества вычислений, необходимых для получения ответа с заданной точностью.

Наиболее часто метод Монте-Карло применяется для моделирования процесса роста нанокристаллов, где используют две вариации метода МК: стандартный термодинамический и кинетический. Первый из них предназначен для расчета конфигурации заданной системы, находящейся в термодинамическом равновесии. В этом случае, МК позволяет рассчитать сходящуюся серию последовательных состояний системы, по которым определить интересующие параметры.

Кинетический МК метод, напротив, позволяет смоделировать динамику изменения системы в неравновесном состоянии или релаксационные процессы, именно поэтому его часто используют для исследования процессов роста кристаллов.

Физическая модель кинетического Монте-Карло метода роста кристалла сводится к введению понятий событий или элементарных процессов реализуемых в системе атомов, находящихся в узлах кристаллической решетки. Под элементарными процессами понимается диффузионный прыжок атома, десорбция частицы с поверхности кристалла и осаждение атома на кристалл. Каждое событие в реальной системе происходит с заданной вероятностью, при этом величина, равная числу событий в единицу времени является темпом данного процесса.

Основными рассматриваемыми типами процессов в моделируемой системе нанокристалла являются стандартные события адсорбции и поверхностной диффузии, редко встречаются работы с моделированием объемной диффузии.

## Вопрос 95. Кто занимается нанотехнологиями в России?

ОАО «РОСНАНО» и Фонд инфраструктурных и образовательных программ – государственные инструменты создания наноиндустрии в стране. Открытое акционерное общество «РОСНАНО» решает эту задачу коммерческими средствами, выступая соинвестором в нанотехнологических проектах со значительным экономическим потенциалом. Миссия РОСНАНО – построение в России конкурентоспособной нанотехнологической индустрии, основанной как на идеях отечественных ученых, так и на трансфере передовых зарубежных технологий. Задачей некоммерческого Фонда инфраструктурных и образовательных программ является создание инновационной инфраструктур страны.

Цель деятельности РОСНАНО и Фонда инфраструктурных и образовательных программ – стимулировать рост наноиндустрии в России до уровня производства 900 млрд. рублей в 2015 году. Объем продаж проектных компаний, в которые соинвестирует РОСНАНО, должен к этому времени составить не менее 300 млрд рублей. Задачи этих двух структур представлены ниже.

**ОТКРЫТОЕ АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО  
«РОСНАНО»**  
Бизнес-структура

### Инвестиционные проекты

- Инициация
- Отбор
- Бизнес-структурирование
- Софинансирование
- Сопровождение

**ФОНД ИНФРАСТРУКТУРНЫХ  
И ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ**  
Некоммерческая организация

### Инновационная инфраструктура

- Нанотехнологические центры и инжиниринговые компании
- Стандартизация, сертификация, метрология
- Образование
- Совершенствование инновационного законодательства
- Популяризация нанотехнологий

Кроме головных организаций в России существуют успешные компании, занимающее заметное место на рынке нанотехнологий в России и за рубежом, например компании NT-

МДТ. Компания НТ-МДТ организована в 1990 году в г. Зеленоград – центре Российской микроэлектроники, с целью применить накопленные опыт и знания в области нанотехнологий для обеспечения исследователей приборами, способными решать широкий спектр задач в области нанометровых размеров.

## **Вопрос 96. Кто стоял у истоков нанотехнологий в России?**

26 апреля 2007 года в послании Федеральному собранию президент России Владимир Путин обозначил нанотехнологии в качестве одного из наиболее приоритетных направлений развития науки и техники и предложил учредить Российскую корпорацию нанотехнологий.

Государственная корпорация «Российская корпорация нанотехнологий» была учреждена в июле 2007 года специальным Федеральным законом от 19 июля 2007 года № 139-ФЗ. В 2007 году правительство Российской Федерации внесло имущественный взнос в размере 130 млрд рублей для обеспечения деятельности корпорации. Официально зарегистрирована 19 сентября 2007 года.

Согласно распоряжению Правительства Российской Федерации от 17 декабря 2010 года № 2287-р. Российская корпорация нанотехнологий первой из государственных корпораций завершила реорганизацию и с 11 марта 2011 года перерегистрирована в открытое акционерное общество «РОСНАНО».

В начале 2011 года американское издание Fast Company, специализирующееся на теме инноваций, составило рейтинг ведущих инновационных компаний России. В этом рейтинге компания «РОСНАНО» заняла 4-е место.

В декабре 2010 года ОАО «РОСНАНО» учредило дочернюю компанию — RUSNANO USA, Inc. Организация создана с целью представления интересов ОАО «РОСНАНО» и проектных компаний на территории США и Канады, а также для содействия в продвижении российской нанотехнологической продукции на мировые рынки.

## **Вопрос 97. Какие критерии используются при создании производств в области нанотехнологий?**

Выстраивая бизнес-модель своих инвестиционных проектов, вкладывая собственные финансовые средства и привлекая ресурсы частных соинвесторов, РОСНАНО ставит целью довести научные разработки, имеющие потенциал коммерциализации, до стадии работающего бизнеса. Компания инвестирует средства в проекты самого широкого спектра – от альтернативной энергетики до биомедицины, от создания новых материалов до машиностроения и металлообработки. Приоритетом являются проекты, нацеленные на создание новых либо на расширение и модернизацию существующих производств.

Для того чтобы инвестиционный проект был одобрен к софинансированию РОСНАНО, он должен удовлетворять ряду жестких требований:

- быть технически реализуем и экономически эффективен;
- принадлежать к сфере нанотехнологий;
- создать производство или R&D центр в России;
- достичь годовой выручки не менее 250 млн. рублей через пять лет после старта.



Компания использует различные формы инвестирования: вклад в уставный капитал проектной компании, займы, гарантии по кредитам, лизинговые операции. Одним из принципов системы отбора проектов, созданной в ОАО «РОСНАНО», является анализ конкурентоспособности их продукции в России и на мировых рынках. Значительная часть одобренных к софинансированию проектов находится на уровне мировых технологий, а ряд проектов превышает его, что предопределяет их экспортный потенциал. Кроме того, при оценке проектов принимаются во внимание следующие факторы: импортозамещение, трансфер и внедрение передовых технологий в России, социальная значимость проектов.

Приведем несколько примеров инновационных проектов РОСНАНО, продукция которых значительно превосходит мировые аналоги по технико-экономическим и потребительским свойствам:

- Вакцины на основе вирусоподобных частиц. Неспособная к самостоятельному размножению частица служит контейнером, в котором доставляются гены белков, вызывающих иммунный ответ. Технология разработана в НИИ эпидемиологии и микробиологии имени Н. Ф. Гамалеи, НИИ гриппа и других ведущих исследовательских институтах страны.

- Магниторезистивная память на основе термического переключения, созданная компанией Crosus. Преимуществами памяти являются энергонезависимость, практически неограниченное число циклов перезаписи, высокая производительность при чтении и записи.

- Детекторы широкого спектра веществ на основе технологии меченых нейтронов, разработанные в ОИЯИ. Их отличие от обычных рентгеновских установок состоит в том, что скрытое вещество идентифицируется по его элементному составу, а не по плотности. Установка детекторов на основе метода меченых нейтронов на станциях метро и вокзалах стала частью федеральной программы по обеспечению безопасности населения на транспорте.

## **Вопрос 98. Какие производства запущены в России в области нанотехнологий?**

Инвестиционную деятельность в РОСНАНО ведут шесть бизнес-единиц. Бизнес-единицы как рассматривают заявки, пришедшие в РОСНАНО, так и самостоятельно

привлекают проекты для финансирования. Они проводят всесторонний анализ поданных заявок, и если проект соответствует требованиям РОСНАНО, защищают его на правлении или совете директоров РОСНАНО. Специалисты бизнес-единиц сопровождают одобренные к финансированию проекты на протяжении всего инвестиционного цикла.

С 2010 года по первый квартал 2012 года проектные компании РОСНАНО запустили 20 заводов, выпускающих нанотехнологическую продукцию.

#### *ЗАВОДЫ, ЗАПУЩЕННЫЕ В I КВАРТАЛЕ 2012 ГОДА*

Создание производства отечественных корпусированных RFID-меток на металл и RFID-интегральных схем высокой чувствительности для пассивных систем радиочастотной идентификации. проектная компания: ООО «РСТ-Инвент». место размещения производства: Санкт-Петербург.

Создание производства плат с высокой теплопроводностью для монтажа светодиодов высокой яркости на основе технологии получения нанопористого слоя  $Al_2O_3$  на алюминиевой пластине методом анодирования. проектная компания: ООО «МСЛР». место размещения производства: Владимир.

Организация производства модифицированных слоистых наносиликатов, мастербatches и полимерных нанокомпозиционных материалов нового поколения. проектная компания: ЗАО «МЕТАКЛЭЙ». место размещения производства: Карачев, Брянская область.

Создание серийного производства сверхбольших интегральных схем на основе технологии с проектными нормами 90 нанометров и создание собственного дизайн-центра. проектная компания: ООО «СИТРОНИКС-Нано». Место размещения производства: Зеленоград.

#### *ЗАВОДЫ, ЗАПУЩЕННЫЕ в 2011 ГОДУ*

Организация производства малогабаритного измерителя взрывоопасных газов. проектная компания: ООО «Оптосенс». место размещения производства: Санкт-Петербург.

Расширение существующего производства измерительно-аналитического оборудования для нанотехнологий в сфере материаловедения, биологии и медицины. проектная компания: ЗАО «Центр перспективных технологий» (ЦПТ). место размещения производства: Москва.

Производство квантовых точек методом коллоидного синтеза. проектная компания: ООО «НТИЦ «Нанотех-ДУБНА». Место размещения производства: Дубна, Московская область.

Создание предприятия по производству арсенид галлиевых пластин, чипов и оптических компонентов на основе вертикально-излучающих лазеров и фотодетекторов. проектная компания: ООО «Коннектор Оптик». Место размещения производства: Санкт-Петербург.

Производство литий-ионных (Li-Ion) аккумуляторов нового поколения для электротранспорта и энергетики. проектная компания: ООО «ЛИОТЕХ». Место размещения производства: Новосибирск.

Создание сети инновационных производственных центров, оказывающих услуги по нанесению наноструктурированных защитных покрытий. проектная компания: ЗАО

«Плакарт». Место размещения производства: Щербинка, Московская область;

Создание комплекса высокотехнологичных производств германиевых продуктов для оптико- и нанoeлектронной техники. проектная компания: ООО «Германий и приложения». место размещения производства: Новомосковск, Тульская область.

Создание производства новых композитных материалов - препрегов. проектная компания: ЗАО «Препрег-СКМ». Место размещения производства: Москва.

Создание производства высокобарьерных полимерных пленок для выпуска гибкой упаковки нового поколения. проектная компания: ООО «Данафлекс-Нано». Место размещения производства: Казань, Республика Татарстан.

Производство гибкой полимерной упаковки, модифицированной нанокompозитами собственного производства. проектная компания: ЗАО «Уралпластик-Н». Место размещения производства: Арамил, Свердловская область.

Создание серийного производства износостойких изделий из наноструктурированной керамики и металлокерамики. проектная компания: ООО «Вириал». Место размещения производства: Санкт-Петербург.

Создание массового производства сверхпрочных пружин с использованием технологий контролируемого формирования однородных наноразмерных субструктур в материале. проектная компания: ООО «НПЦ «Пружина». Место размещения производства: Ижевск, Удмуртская Республика.

Расширение производства термоэлектрических охлаждающих микросистем с использованием наноразмерных порошков на основе теллурида висмута для опто-, микро- и нанoeлектроники. проектная компания: ООО «РМТ». место размещения производства: Москва, Нижний Новгород.

#### *ЗАВОДЫ, ЗАПУЩЕННЫЕ В 2010 ГОДУ*

Создание производства электрохимических станков для высокоточного изготовления деталей из наноструктурированных материалов. проектная компания: ООО «ЕСМ». место размещения производства: Уфа, Республика Башкортостан.

Твердотельная светотехника: создание производства экологически чистых и энергосберегающих систем освещения на основе нанотехнологий. проектная компания: ЗАО «Оптоган». Место размещения производства: Санкт-Петербург.

Производство монолитного твердосплавного металлорежущего инструмента с наноструктурированным покрытием. проектная компания: ЗАО «Новые инструментальные решения». Место размещения производства: Рыбинск, Ярославская область.

### **Вопрос 99. Как создать производство в области нанотехнологий?**

В РОСНАНО разработана многоступенчатая система экспертизы, нацеленная на отбор технически реализуемых и экономически обоснованных проектов. РОСНАНО финансирует проекты, годовая выручка которых через пять лет должна достичь не менее 250 млн рублей. Как только проект достигает стадии зрелости, РОСНАНО продает свою долю, инвестируя вырученные средства в другие проекты.

ЕСЛИ ОБЪЕМ ФИНАНСИРОВАНИЯ ПРОЕКТА ИЗ СРЕДСТВ РОСНАНО БОЛЬШЕ 1,3 МЛРД РУБЛЕЙ ИЛИ МЕНЬШЕ 300 МЛН РУБЛЕЙ, РЕШЕНИЕ ОБ УЧАСТИИ В

НЕМ ПРИНИМАЕТ СОВЕТ ДИРЕКТОРОВ КОМПАНИИ. РЕШЕНИЯ О ФИНАНСИРОВАНИИ ОБЪЕМОМ ОТ 300 МЛН ДО 1,3 МЛРД РУБЛЕЙ ПРИНИМАЮТСЯ ПРАВЛЕНИЕМ РОСНАНО.

*Подача запроса на софинансирование проекта позволяет заявителю:*

- получить профессиональную экспертную оценку своего предложения;
- выявить новые сферы применения инновационного продукта;
- в случае положительного решения - создать успешный бизнес.

*Этапы рассмотрения заявки.* Прохождение заявки на получение софинансирования со стороны РОСНАНО можно разделить на 7 этапов.

*Этап 1. подача заявки на софинансирование*

Заявителю необходимо зарегистрироваться в личном кабинете на официальном сайте РОСНАНО - [www.rusnano.com](http://www.rusnano.com), после чего заполнить следующие документы:

- заявление;
- анкету;
- паспорт проекта;
- научно-технологический паспорт проекта (НТПП);
- бизнес-план.

*Этап 2. Входная экспертиза и распределение заявок*

На этом этапе проверяется правильность составления заявки, ее принадлежность к области нанотехнологий и соответствие поданных документов требованиям РОСНАНО. В случае соответствия заявка распределяется в одну из бизнес-единиц компании. Проектный офис извещает заявителя о результатах проведенной входной экспертизы и, если выявлены недоработки, предлагает внести исправления.

*Этап 3. Научно-техническая экспертиза*

Научно-техническая экспертиза определяет соответствие содержания заявки сфере нанотехнологий, оценивает научную состоятельность и техническую реализуемость проекта. Рабочие группы, состоящие из представителей бизнес-единиц и департамента научно-технической экспертизы, определяют типы проектов и формируют список необходимых экспертиз. В него могут входить научно-техническая, производственно-технологическая и патентная экспертизы, а также контрольные испытания в аккредитованных сертифицированных центрах.

*Этап 4. рассмотрение проекта на научно-техническом совете*

Научно-технический совет при совете директоров РОСНАНО на основе материалов по проекту и результатов экспертиз делает заключение о технической реализуемости проекта, его научной обоснованности, а также соответствии проекта области нанотехнологий. По результатам работы научно-технический совет дает рекомендации правлению и совету директоров РОСНАНО.

*Этап 5. инвестиционная экспертиза*

На этапе инвестиционной экспертизы проводится развернутый анализ бизнес-плана, рынка сбыта и инвестиционной привлекательности проекта, патентная экспертиза, ведутся переговоры с потенциальными соинвесторами по подготовке инвестиционного соглашения по проекту.

*Этап 6. Утверждение проекта*

После научно-технического совета пакет документов проекта проходит инвестиционную комиссию и поступает на рассмотрение правлению РОСНАНО.

Если объем инвестиций РОСНАНО в проект составляет от 300 млн рублей до 1,3 млрд рублей, то решение о финансировании принимается правлением компании.

В случае, когда объем финансирования проекта из средств РОСНАНО превышает 1,3 млрд рублей, решение об участии в нем утверждается советом директоров. Также к компетенции совета директоров относится одобрение параметров участия в проектах с финансированием со стороны РОСНАНО менее 300 млн рублей. Это же требование относится и к созданию инвестиционных фондов вне зависимости от объема финансирования.

#### *Этап 7. Выделение финансирования*

После утверждения проекта к финансированию все участники сделки подписывают юридически обязывающие документы и приступают к финансированию проекта.

Регламентный срок от этапа поступления заявки до этапа подписания инвестиционного соглашения составляет 180 дней. На всех этапах реализации проекта РОСНАНО контролирует целевое расходование вложенных ею средств через участие в органах управления проектных компаний и систему казначейского контроля исполнения бюджета.

### **Вопрос 100. Какие перспективы у нанотехнологий?**

Бурное развитие нанотехнологий, которое наблюдается в настоящее время, указывает на огромные возможности их применения в различных сферах человеческой деятельности. По мнению ученых нанотехнологии в будущем могут даже стать настоящим спасением для человечества. Когда на Земле запасы нефти, газа и угля окажутся недостаточными для поддержания энергетики, на помощь людям придут созданные на основе нанотехнологий дешевые солнечные батареи, способные превращать солнечную энергию в электрическую. Применение порошковых нанотехнологий позволит создать топливные элементы нового поколения, способные генерировать из любого типа органического топлива электрическую энергию с КПД не ниже 60-70%.

Очень перспективны нанотехнологии для исследования и освоения космоса. Так, освоению ближнего и дальнего космоса людьми, скорей всего, будет предшествовать освоение его наноспутниками и нанороботами. На сегодняшний день наноспутниками называют космические аппараты массой не более 10 кг. Они представляют собой полнофункциональные устройства для измерений и наблюдений из космоса. На таких спутниках можно устанавливать практически все присущие большому космическому аппарату, но выполненные на основе нанотехнологий, бортовые системы: ориентации, электропитания, радиосвязи, бортовой вычислительный комплекс. Малый вес таких спутников определяет минимальные энергозатраты для вывода их на нужные орбиты.

Большое количество нанороботов специального назначения будут выпущены в космическое пространство для подготовки его к заселению человеком. Они сделают пригодными для обитания Луну, астероиды, ближайшие планеты, соорудят из «подручных материалов» (метеоритов, комет) космические станции. Это будет намного



дешевле и безопаснее существующих ныне методов построения космических станций, когда при их строительстве на орбите присутствует человек.

Любые достижения в нанонауке прежде всего рассматриваются обществом под углом их применимости к информационным технологиям. Несмотря на нарастающий уровень трудностей, в течение нескольких последних десятилетий поддерживается неизменный и очень высокий темп роста всех существенных характеристик в электронике. Наиболее революционные достижения в этой области приближаются к квантовым пределам, выдвигаемым самой природой, когда работает только один электрон, один квант энергии, один квант магнитного потока.

С принципиальной точки зрения для оперирования в двоичной системе исчисления необходимы устройства, которые способны реализовывать два устойчивых состояния «0» и «1» и допускать быстрое переключение между ними. Подобными наноустройствами могут служить рассмотренные выше одноэлектронный транзистор, сверхпроводящий джозефсоновский переход и наномагнитная спинтронная структура. Их использование позволяет ожидать достижения быстродействия порядка  $\sim 10^{12}$  операций в секунду и плотности записи информации порядка  $10^3$  Тбит/см<sup>2</sup>, что на много порядков выше, а энергопотребление - на несколько порядков ниже, чем достигнутые сегодня. При такой плотности записи в жестком диске размером с наручные часы можно будет разместить библиотеку национального масштаба.

В ближайшем будущем предполагается, что в качестве ячеек хранения информации будут также применяться углеродные нанотрубки. В последнее время активно ведется разработка модуля памяти на их основе. Не исключено, что в перспективе подобные устройства станут альтернативой традиционной флэш-памяти. Ожидается также переход от планарных структур к объемным микросхемам, размеры активных элементов уменьшаться до размеров молекул. Получат распространение объемные решения на нейроноподобных элементах. Появится быстродействующая долговременная память на белковых молекулах, емкость которой будет измеряться терабайтами.

Нанотехнологии – без сомнения самое передовое и многообещающее направление развития науки и техники на сегодняшний день. Возможности этого направления поражают воображение, а мощь вселяет страх. Видимо будущее развитие нанотехнологии будет основываться на балансе между созиданием и разрушением. Как и у любого передового направления, у нанотехнологии обязательно появятся и военные применения. Трезвомыслящие ученые прекрасно понимают, что нанотехнология способна породить серьезные проблемы, поскольку может быть использована для нанесения ущерба, а не только для всеобщего блага. В 1989 году была создана специальная организация «Институт Предвидения» (Foresight Institute) с девизом «Готовясь к нанотехнологиям». Здесь был подготовлен набор правил «техники безопасности» для разработчиков и изготовителей наносистем. Основатель и глава этого института - Эрик Дрекслер, который в своей книге «Машины созидания» проанализировал возможные опасности, связанные с неконтролируемым развитием нанотехнологии. По инициативе Дрекслера проводятся ежегодные Форсайтовские конференции, которые фиксируют достижения нанотехнологий и отмечают возможные опасные для общества моменты ее развития. На одной из первых таких конференций было принято обращение к ученым и правительствам – не проводить наноразработки в военных целях. К сожалению,

диктовать реальный спектр нанотехнологических разработок и приложений будут вовсе не ученые, а правительства и индустрия.

## **Вопрос 101. Существует ли современная история нанотехнологий?**

Остановимся коротко на основных хронологических моментах развития нанонауки. Известный историк Ричард Букер отмечал, что «историю нанотехнологий создать крайне сложно по двум причинам. Во-первых, по причине размытости самого этого понятия. Например, нанотехнологии часто не являются технологиями в привычном смысле этого слова. Во-вторых, человечество всегда пыталось экспериментировать с нанотехнологиями, даже и не подозревая об этом». Поэтому с определенной долей иронии и условности можно сказать, что у ее истоков вообще стояли средневековые алхимики. Именно они первыми пытались решить задачу получения золота из других металлов. По мнению многих специалистов, отцом современной нанотехнологии можно считать древнегреческого философа Демокрита, который примерно в 400 г. до н.э. впервые использовал слово «атом» для определения самой малой частицы вещества.

Исторически первыми наноматериалами можно считать красные и рубиново-красные опалесцирующие стекла Древнего Египта, Древнего Рима и многих витражей культовых сооружений средних веков. В книге «Введение в нанотехнологию» Чарльз Пул приводит один показательный пример применения первых нанотехнологий: в Британском музее хранится кубок, известный под названием «Кубок Ликурга», изготовленный древнеримскими мастерами. Его стенки содержат наночастицы золота и серебра, добавленные в стекло, которые при различном освещении меняют цвет кубка от темно-красного до светло-золотистого.

В 1661 году ирландский химик Роберт Бойль первым опубликовал утверждение, что все состоит из «корпускул» - сверхмалых частиц, которые в разных сочетаниях образуют различные вещества и предметы.

Первый прорыв в практическом применении нанотехнологий был совершен американским изобретателем Джорджем Истмэном, который в 1883 году изготовил фотопленку со светочувствительным слоем из наночастиц бромистого серебра. Далее развитие основных представлений, а также методов формирования и контроля наноструктур происходит взрывными темпами. Оно базируется на достижениях и открытиях исследователей самых разных научных направлений. В основе своей нанотехнологии представляют собой логическое продолжение современных оптических, микроэлектронных, материаловедческих, химических, биологических и иных технологий с учетом возникающих размерных эффектов. Впервые понятие «нанотехнологии» была озвучено Ричардом Фейнманом в 1959 году на заседании американского физического общества. Его речь получила название «Внизу полным полно свободного места. Приглашение в новый мир физики». Р. Фейнман имел в виду мир нанометрового масштаба, в котором работают фундаментальные законы квантовой физики, управляющие поведением отдельных атомов и их что законы физики не запрещают создавать «конструкции» из отдельных атомов. Пророчество великого исследователя положило начало современной эпохи нанотехнологий.

Ниже приводится хронология значимых событий в развитии нанотехнологий:

- в 1931 году немецкие физики Макс Кнолл и Эрнст Руска создали электронный микроскоп, который впервые позволил исследовать нанообъекты;
- в 1966 году Роберт Янг предложил идею использования пьезодвигателей, которые в настоящее время обеспечивают перемещения острой зонды сканирующего туннельного микроскопа с точностью до  $10^{-3} \dots 10^{-2}$  нм;
- в 1968 году Альфред Чо и Джон Артур разработали теоретические основы нанотехнологии при обработке поверхностей;
- в 1971 году компаниями Bell и IBM (США) получены первые одноатомные полупроводниковые пленки – «квантовые ямы». Началась эпоха практической нанотехнологии – технологии низкоразмерных полупроводниковых структур.
- в 1974 году японский физик Норио Танигучи в своем докладе «Основные принципы нанотехнологий» ввел в научный оборот слово «нанотехнология», которым предложил называть процессы, происходящие в областях размером менее одного микрона;
- в 1982 году немецкие физики Герд Биннинг и Генрих Рорер создали первый сканирующий туннельный микроскоп, способный показывать отдельные атомы;
- в 1985 году американские физики Роберт Керл, Хэрольд Крото и Ричард Смейли открыли фуллерен – молекулу, по форме напоминающую футбольный мяч и содержащую 60 атомов углерода, чем предопределили стремительное развитие технологии углеродных нанотрубок;
- в 1986 году появился сканирующий атомно-силовой микроскоп; выходит книга Э. Дрекслера, названная библией наноауки – «Машины творения: грядет эра нанотехнологий». В ней Дрекслер описал молекулярных самовоспроизводящихся роботов, способных производить сборку молекул, их декомпозицию, запись в память нанокomпьютера программ воспроизведения и реализацию этих программ. Рассчитанный на многие десятилетия прогноз развития нанотехники в течение 20 лет невероятным образом сбывается шаг за шагом с существенным опережением по времени; американский физик А. Эшкин создает лазерный пинцет – устройство манипулирования микро- и нанообъектами с помощью сфокусированного лазерного луча;
- в 1987 году французский физик Ж.М. Лен вводит в обиход понятия «самоорганизация» и «самосборка»;
- в 1989 году показана возможность создания молекулярных автоматов. С помощью СТМ, произведенного фирмой IBM, были набраны три буквы (IBM) из 35 атомов ксенона на грани кристалла никеля. Дальнейшие работы подтвердили возможность «надежного закрепления» атомов на поверхностях, выполненных из различных материалов. Субмолекулярная сборка с этого момента становится реальностью;
- в 1991 году получен первый трехмерный искусственный метаматериал, названный его создателем Э. Яблоновичем (США) «фотонным кристаллом»; японским физиком С. Ииджимой получены первые углеродные нанотрубки;
- в 1998 году созданы первые полевые транзисторы на основе нанотрубок, разработана технология создания нанотрубок длиной не больше 300 нм;
- в 1999 году американскими физиками М. Ридом и Дж. Туром разработаны единые принципы манипуляции как одной молекулой, так и молекулярными цепочками;

- в 2000 году разработаны принципы нанотомографии, т.е. создания трехмерной картины внутреннего строения вещества с разрешением 100 нм;
- в 2001 году специалистами компании IBM созданы первые образцы логических микросхем на основе полевых транзисторов на углеродных нанотрубках;
- в 2002 году созданы основы первого бионаномеханизма путем синтеза углеродной нанотрубки с молекулой ДНК (С. Деккер, Голландия);
- в 2003 году международным коллективом исследователей расшифрован геном человека;
- в 2004 году российскими учеными получены первые образцы графена, т.е. мономолекулярных пленок с гексагональной решеткой графита;
- в 2001-2005 годах коллективом американских исследований расшифрован механизм копирования клетками генетической информации;
- в 2007 году интернациональной группой физиков из США, Германии и Голландии разработан сканирующий электронный микроскоп с субатомным разрешением в 0,05 нм; группой американских ученых разработана технология сканирующей нанолитографии с разрешением 12 нм и скоростью нанесения дорожек более 1 мм/с.
- 2010 году российские ученые Андрей Гейм и Константин Новосёлов получили Нобелевскую премию по физике за исследования графена - двумерного материала, состоящего из атомов углерода и проявляющего необычные свойства.

В настоящее время принято считать, что первое упоминание о структурах и методах, которые в современном понимании объединяются термином «нанотехнологии», было высказано Нобелевским лауреатом Ричардом Фейнманом в лекции «Там внизу много места», которую он прочитал в 1959 году в Калифорнийском технологическом институте на ежегодной встрече Американского физического общества. В этой лекции Р. Фейнман высказал предположение, что в будущем «возможно будет механически перемещать одиночные атомы при помощи манипулятора соответствующего размера, по крайней мере, такой процесс не противоречит известным на сегодняшний день физическим законам». С помощью такого манипулятора можно, будет производить поатомную сборку макрообъектов. Таким нанороботам требуется только дать необходимое количество молекул и энергию и написать программу для сборки необходимых предметов. Развитие техники манипуляции на атомарном уровне позволит решить многие проблемы химии и биологии». Остается только восхищаться столь удивительному предвидению ученого.

## Используемая литература

1. Аналитическая просвечивающая электронная микроскопия, Синдо Д., Оикава Т. Техносфера, 2006.
2. Бахтизин Р.З. Голубые светодиоды // Соросовский образовательный журнал, 2001, т. 7, №3, С. 75-83.
3. Биргер И.А., Шорр Б.Ф., Иосилевич Г.Б. Расчет на прочность деталей машин // М.: Машиностроение, 1979. 702 с.
4. Валиев К.А., Кокин А.А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. Регулярная и хаотическая динамика (РХД) М.-Ижевск. 2001.
5. Введение в нанотехнологию. / Н. Кобаяси. Пер. с японск. М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007.
6. Гаман В.И. Физика полупроводниковых приборов: Учебное пособие. Томск: Издательство томского университета, 1989. 360 с.
7. Демиховский В.Я. Квантовые ямы, нити, точки. Что это такое? // Соросовский образовательный журнал, №5, 1997.
8. Ершова О.В., Лозовик Ю.Е., Попов А.М., Бубель О.Н., Поклонский Н.А., Кисляков Е.Ф. Управление движением наноэлектромеханических систем на основе углеродных нанотрубок // ФТТ, 2007, т. 49, вып. 10, С. 1914-1918.
9. Золотухин И.В. Углеродные нанотрубки // Соросовский образовательный журнал, 1999, №3, С. 111-115.
10. Интернет-сайт компании «НТ-МДТ» <http://www.ntmdt.ru>
11. Кузнецов С.С., Лозовик Ю.Е., Попов А.М. Наноактуатор, основанный на углеродной нанотрубке // ФТТ, 2007, т.49, вып. 5, С. 951-958.
12. Кульбачинский В.А. Полупроводниковые квантовые точки // Соросовский образовательный журнал, 2001, т. 7, №4, С. 98-104.
13. Миронов В. Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Учебное пособие для студентов старших курсов высших учебных заведений. РАН. Институт физики микроструктур. Нижний Новгород, 2004 г.114с.
14. Нанотехнологии: Азбука для всех. / Под ред. Ю.Д. Третьякова. М. ФИЗМАТЛИТ, 2008.
15. Нанотехнологии для всех. Большое - в малом / М. Рыбалкина. М.: Nanotechnology News Network, 2005. 434 с.
16. Наноэлектроника: Учеб. пособие для студ. В 3 ч. Ч. 3: Перенос носителей заряда в низкоразмерных структурах / В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина. Мн.:БГУИР, 2004.
17. Очарование нанотехнологии. /У. Хартманн. Пер. с нем. М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008.
18. Сайт элективного учебного пособия «Введение в нанотехнологии» <http://nano-edu.ulsu.ru>.
19. Юнович А.Ю. Свет из гетероперехода // Природа, 2001, № 6, С. 38-46.
20. Bennig G.K. Atomic force microscope and method for imaging surfaces with atomic resolution. US Patent 4,724,318.

21. Martin Y., Williams C.C. and Wickramasinghe H.K. Atomic force microscope–force mapping and profiling on a sub 100-Å scale // J. Appl. Phys. 61, 4723 (1987) <http://dx.doi.org/10.1063/1.338807>.
22. Meyer G. and Amer N.M. Erratum: Novel optical approach to atomic force microscopy // Appl. Phys. Lett. 53, 2400 (1988).
23. Dürig U., Gimzewski J.K. and Pohl D.W. Experimental Observation of Forces Acting during Scanning Tunneling Microscopy // Phys. Rev. Lett. 57, 2403–2406 (1986).
24. Savvateev M.N. Application note “AFM study of macromolecules' structure and organization”. Интернет сайт компании НТ-МДТ ([www.ntmdt.ru](http://www.ntmdt.ru)).
25. [www.krugosvet.ru](http://www.krugosvet.ru)

Учебное издание

**Юрий Сергеевич Нагорнов**

**101 вопрос о нанотехнологиях**

Учебное пособие

Печатается в авторской редакции

Подготовка оригинал-макета

*Ю.С. Нагорнов*

Подписано в печать 28.09.2012

Формат 60х84/16. Гарнитура Nimes Nev Roman.

Усл. печ. л. 6,51. Уч.-изд. л. 6,76.

Тираж 1000 экз. заказ № 15/05/10

Оригинал макет подготовлен в научно-образовательном центре  
«Математические модели и теоретические основы классической  
и квантовой информатики»

ФГБОУ ВПО «Тольяттинский государственный университет»  
445667, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14.

Отпечатано с оригинал-макета в ООО «Колор-Принт»  
432063, г. Ульяновск, ул. Ленина, 75

Обложка отпечатана в ООО «Колор-Принт»  
432063, г. Ульяновск, ул. Ленина, 75

При участии ООО «Стрежень»