

УНІВЕРСИТЕТСЬКА БІБЛІОТЕКА

Бойчук В.І., Гольський В.Б.

КВАНТОВІ ОСНОВИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

Навчальний посібник

Дрогобич 2009

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка Кафедра теоретичної фізики та методики викладання фізики

Бойчук В.І., Гольський В.Б.

КВАНТОВІ ОСНОВИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

Навчальний посібник

Дрогобич 2009

Бойчук В.І., Гольський В.Б. Квантові основи наноелектроніки: Навчальний посібник. – Дрогобич: ДДПУ, 2009. – 128 с.

Посібник укладено відповідно до програми навчальної дисципліни «Квантові основи наноелектроніки» для підготовки фахівців ОКР «Магістр» спеціальності «Інформатика. Прикладана математика», затвердженої вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Бібліографія 27 назв.

Рекомендовано до друку вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана франка як навчальний посібник для студентів педагогічного факультету, (протокол № _____ від ______ 200___ року).

Рецензенти:

Ткач Микола Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Ю. Федьковича

Вірт Ігор Степанович, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри машинознавства і охорони праці Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Зміст

| ПЕРЕДМОВА | . 5 |
|--|------|
| Розділ 1. ОСНОВИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ | . 7 |
| 1.1. Фізичні основи наноелектроніки | . 7 |
| 1.2. Квантові основи наноелектроніки | . 9 |
| 1.3. Квантова частинка в потенціальній ямі | . 13 |
| 1.4. Тунельний ефект | . 17 |
| 1.5. Квантовий ефект Хола | . 22 |
| Розділ 2. НАНОТЕХНОЛОГІЇ | . 31 |
| 2.1. Історія становлення нанотехнологій | . 31 |
| 2.2. Межа мінітюаризації електронних пристроїв | . 33 |
| 2.3. Основні процеси нанотехнологій | . 36 |
| 2.4. Епітаксія | . 37 |
| 2.5. Літографія | . 38 |
| 2.6. Травлення | . 42 |
| 2.7. Технологія "вирощування" інтегральної мікросхеми | . 44 |
| 2.8. Метод скануючої тунельної мікроскопії | . 47 |
| Розділ З. НАНОВИМІРНІ СТРУКТУРИ | . 49 |
| 3.1. Схема утворення гетероструктури з двовимірним електронним газом | . 49 |
| 3.2. Квантові ями і квантові точки | . 51 |
| 3.3. Особливості енергетичного спектра електронних і діркових ста- | |
| нів у низьковимірних системах | . 53 |
| 3.4. Екситон у квантових ямах | . 54 |
| 3.5. Екситон у надгратках і надструктурах | . 58 |
| 3.6. Екситон у квантових дротах і квантових точках | . 60 |
| 3.7. Екситонні прилади, в яких використано властивості екситонів у | |
| низьковимірних системах | . 61 |
| 3.8. Вуглецеві нанотрубки. Матеріали для комп'ютерів XXI століття | . 65 |

| Розділ 4. ОДНОЕЛЕКТРОНІКА | . 79 |
|---|-------|
| 4.1. Проблеми одноелектроніки | . 79 |
| 4.2. Теоретичні основи одноелектроніки | 80 |
| 4.3. Кулонівські східці | .85 |
| 4.4. Одноелектронні транзистори | . 87 |
| 4.5. Класифікація одноелектронних пристроїв | 89 |
| Розділ 5. КВАНТОВИЙ КОМП'ЮТЕР | 93 |
| 5.1. Класичні й квантові прилади | . 93 |
| 5.2. Алгоритми: класи їхньої складності | .96 |
| 5.3. Квабіти: властивості і математичний опис станів | . 98 |
| 5.3.1. Біти й квабіти | . 98 |
| 5.3.2. Квантові біти, квантові логічні елементи і квантові мережі | 100 |
| 5.3.3. Квантова когерентність векторів стану | 108 |
| 5.4. Принципи побудови й роботи ідеального квантового комп'ю- | |
| тера | . 109 |
| 5.4.1. Ідеальний квантовий комп'ютер | . 109 |
| 5.4.2. Квантовий комп'ютер – цифровий комп'ютер з аналого- | |
| вим керуванням | . 112 |
| 5.4.3. Класична й квантова інформація у квантовій системі | . 114 |
| 5.4.4. Як реалізувати квантовий алгоритм | . 116 |
| 5.4.5. Універсальні набори елементарних операцій | . 117 |
| 5.5. Квантові алгоритми. Квантовий алгоритм Гровера | . 119 |
| ЛІТЕРАТУРА | . 123 |

Передмова

Наноелектроніка є новою галуззю науки й техніки, що формується сьогодні на основі останніх досягнень фізики твердого тіла, квантової електроніки, фізичної хімії та технології напівпровідникової електроніки. Її зміст враховує необхідність встановлення фундаментальних закономірностей, що визначають фізико-хімічні особливості формування нановимірних структур (структур розміром від одиниць до десятків нанометрів (1нм= 10⁻⁹м), їх електронні й оптичні властивості. Дослідження в області наноелектроніки важливі для розробки нових принципів, а разом з ними й нових поколінь надмініатюрних надшвидкодійних систем обробки інформації.

Спеціалісти напряму підготовки "Прикладна математика" повинні мати чітку уяву про будову електронно-обчислювальних машин, принципи їх роботи та сучасні технології в зазначеній сфері. У цьому і полягає **мета курсу**.

Завдання курсу "Квантові основи наноелектроніки" полягає у тому, щоб студенти зрозуміли та засвоїли теоретичний матеріал, вміли застосовувати знання на практиці. Це сприяє оволодінню студентами відповідними навичками та вмінями, які можуть бути використані у подальшій професійній діяльності слухачів даного курсу.

Посібник складається з п'яти розділів: «Основи наноелектроніки», «Нанотехнології», «Нановимірні структури», «Одноелектроніка» та «Квантовий комп'ютер». У першому розділі розкрито фізичні основи наноелектроніки, розглянуто властивості частинки в одновимірній потенціальній ямі та проходження квазічастинки через потенціальний бар'єр. Другий розділ присвячено розгляду основних технологій створення матеріалів з нановимірними структурами. Властивості частинок у нановимірних структурах та їх класифікація наведено у розділі «Нановимірні структури». Окремим параграфом у цьому розділі розглянуто можливість використання вуглецевих нанотрубок для створення електронно-обчислювальних пристроїв. В останніх двох розділах продемонстровано теоретичні основи майбутніх елементів наноелектроніки: одноелектронних пристроїв та квантових комп'ютерів.

5

Розділ 1. ОСНОВИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

1.1. Фізичні основи наноелектроніки

Поняття "інформаційні системи" враховує всі пристрої, що забезпечують одержання, обробку і передачу інформації. Це різні датчики, що перетворюють зовнішні впливи (звук, зображення у вигляді світлового поля різної локальної інтенсивності, тиск, температура, хімічний склад середовища тощо), на електричні сигнали. До інформаційних систем належать також електронні системи перетворення й обробки цих сигналів на основі комп'ютерної техніки і засоби радіозв'язку й телекомунікації. Інформація у цих системах подається або у вигляді неперервного електричного сигналу — аналогова форма кодування інформації, або у вигляді послідовності електричних імпульсів — цифрова форма кодування. При аналоговому кодуванні необхідна інформація задається відповідною амплітудою чи частотою коливань неперервного електричного сигналу. У цифровій формі інформація задається двійковим кодом, що визначається електричним імпульсом, для якого логічному стану "0" відповідає відсутність електричної напруги (чи струму), а стану "1" — його наявність. Цифрові коди завдяки надійній захищеності від помилок і перешкод, високим швидкостям обробки в обчислювальних системах і високій густині передачі каналами зв'язку одержали переважне поширення в сучасних інформаційних системах. Їх основним елементом є електронний прилад з двома стійкими електричними станами, що відповідають логічному 0 і 1. Типові конструкції таких приладів та їхня еволюція при розвитку електроніки показані на мал. 1. Найпростішим з них є механічний ключ, який, розмикаючи і замикаючи електричне коло, реалізує два названих логічних стани.

Першим електронним перемикаючим приладом був вакуумний діод, запатентований у 1904 році англійцем Д.А. Флемінгом. З того часу розвиток електроніки позначений винаходом і практичним освоєнням вакуумного тріода (1906 рік, Л. Де Форест і Р. Лібен) і напівпровідникового транзистора (1947 рік, У. Браттейн, Дж. Бардін, У. Шоклі), а потім інтегральних мікросхем на кремнії (1958-1959 рр.), що визначив новий напрямок у електроніці — мікроелектроніку. Головною тенденцією цього розвитку є зменшення розмірів приладових структур. У сучасних інтегральних мікросхемах вони вимірюються одиницями чи десятими частинами мікрона (1 мкм = 10⁻⁶ м).



Рис. 1.1. Еволюція перемикачів

З наближенням розмірів твердотільних структур до нанометрової області (1 нм = 0,001 мкм = = 10^{-9} м), а це утворення з одиниць і десятків атомів, усе більше проявляються квантові властивості електрона, що переважно визначаються хвильовими закономірностями, характерними для квантових частинок. З одного боку, це призводить до порушення працездатності класичних транзисторів, що використовують закономірності поведінки електрона як класичної частинки, а з іншого – відкриває перспективи створення нових унікальних перемикаючих, запам'ятовуючих і підсилюючих елементів для інформаційних систем. Останні і є основним об'єктом досліджень і розробок нової області електроніки – наноелектроніки, що зародилася у 80-х роках минулого століття.

1.2. Квантові основи наноелектроніки

Згідно з основами квантової механіки стан електрона може бути представлений хвилею, що описується відповідною хвильовою функцією. Вигляд цієї функції у нанорозмірних твердотільних структурах задається ефектами, які пов'язані із квантовим обмеженням, інтерференцією й можливістю тунелювання через потенціальні бар'єри.

Квантове обмеження. Хвиля, що відповідає вільному електрону у твердому тілі, може безперешкодно поширюватися у будь-якому напрямку. Ситуація кардинально змінюється, коли електрон потрапляє у твердотільну структуру, розмір якої *L*, принаймні в одному напрямку, співмірний за своєю величиною з довжиною його хвилі. Класичним аналогом такої структури є струна з жорстко закріпленими кінцями. Коливання струни можуть відбуватися тільки в режимі стоячих хвиль із довжиною хвилі $\lambda_n = \frac{2L}{n}, n=1, 2, 3, ...$



Рис. 1.2. Можливості для руху електронів в квантовообмеженій нанорозмірній структурі

Аналогічні закономірності поведінки характерні й для вільного електрона, що перебуває у твердотільній структурі обмеженого розміру або області твердого тіла, що обмежена непроникними потенціальними бар'єрами. На рис. 1.2 така ситуація проілюстрована на прикладі нескінченного квантового шнура, у якого обмежені розміри перетину *a* і *b*. У цих напрямках можливе поширення тільки хвиль із довжиною, яка кратна геометричним розмірам структури. Дозволені значення хвильового вектора для одного напрямку задаються співвідношенням $k = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{L}$ (*n* = 1, 2, 3, …), де *L* відповідно до

рис. 1.2 може приймати значення *а* чи *b*. Це означає, що електрони можуть мати лише певні фіксовані значення енергії, тобто має місце квантування енергії. Це явище одержало назву *квантового обмеження*. Уздовж шнура електрони можуть рухатися з будь-якою енергією.

Обмеження руху електрона з ефективною масою m^* , принаймні в одному з напрямків, відповідно до принципу невизначеності приводить до збільшення його імпульсу на величину $\frac{\hbar}{L}$ (де $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, а h — постійна Планка.). Відповідно збільшується й кінетична енергія електрона на величину $\Delta E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right) \frac{\pi^2}{L^2}$. Таким чином, квантове обмеження супроводжується як збільшенням мінімальної енергії замкненого електрона, так і квантуванням енергетичних рівнів, що відповідають його збудженому станові. Через це властивості нанорозмірних структур відрізняються від відомих об'ємних властивостей матеріалу, з якого вони зроблені.

Інтерференційні ефекти. Взаємодія електронних хвиль у нанорозмірних структурах як між собою, так і з їхніми неоднорідностями може супроводжуватися інтерференцією, яка аналогічна тій, що спостерігається для світлових хвиль. Відмінна риса такої інтерференції полягає в тому, що завдяки наявності в електронів заряду є можливість керувати ними за допомогою локального електростатичного або електромагнітного поля й у такий спосіб впливати на поширення електронних хвиль.

Ефект Аарона-Бома

У 1959 році Якір Аарон і Девід Бом звернули увагу на те, що електромагнітний вектор-потенціал повинен змінювати фазу хвильової функції електрона на величину

$$\Delta \varphi = \frac{q}{\hbar} \int (V dt - A dS),$$

де *q* –заряд електрона, *dS* і *dt* – елементи шляху і часу на траєкторії електронів, V – напруга електричного поля, А – вектор-потенціал магнітного поля.

10

На рис. 1.3 показана схема експерименту за спостереженням магнітного ефекту Аарона-Бома. Пучок електронів, що вилітає із джерела у площині «а», розщеплюється таким чином, щоб він обгинав магнітний потік з двох боків. У площині «б» парціальні електронні пучки зливаються, і електронні хвилі інтерферують одна з одною. Відносна фаза електронів у двох пучках визначається магнітним потоком Φ в соленоїді, який розміщений між шляхами руху електронів. При зміні Φ буде змінюватись як інтерференційна картина, так і провідність структури. Уперше ефект Аарона-Бома спостерігався в колі, що складається з тонкого золотого кільця з двома електричними провідниками. Можливе також електростатичне керування інтерференційною картиною.



Рис. 1.3. Схема експерименту, що дозволяє спостерігати магнітного ефекту Аарона-Бома

Тунелювання. Унікальною властивістю квантових частинок, у тому числі й електронів, є їхня здатність проникати через перешкоду навіть у випадках, коли їхня енергія менша за потенціальний бар'єр, що відповідає заданій перешкоді. Це було названо тунелюванням. Схематично воно подано на рис. 1.4. Якщо б електрон був класичною часткою, що володіє енергією E, він, зустрівши на своєму шляху перешкоду, що вимагає для подолання більшої енергії U, повинен відбитися від цієї перешкоди. Однак як хвиля, він проходить через цю перешкоду. Відповідну хвильову функцію, а отже, й імовірність тунелювання, можна знайти з рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=(E-U)\psi(x).$$

Ця ймовірність є тим більшою, чим геометрично менша ширина бар'єра і менша різниця між енергією падаючого електрона та висотою бар'єра.



Рис. 1.4. Тунелювання електрона з енергією *Е* через потенціальний бар'єр висотою *U* (*U*>*E*)

Квантове обмеження, проявляючись у нанорозмірних структурах, накладає специфічний відбиток і на тунелювання. Зокрема, квантування енергетичних станів електронів у дуже тонких, періодично розташованих потенціальних ямах приводить до того, що тунелювання через них набуває резонансного характеру, тобто тунельно проникнути через таку структуру можуть лише електрони з певною енергією. Іншим специфічним проявом квантового обмеження є одноелектронне тунелювання в умовах кулонівської блокади, про яку детальніше йтиметься нижче.

Розглянуті квантові явища вже використовуються у розробці сучасних наноелектроних елементів для інформаційних систем. Однак варто підкреслити, що ними не вичерпуються всі можливості практичного застосування квантової поведінки електрона. Активні пошукові дослідження в цьому напряму тривають і сьогодні.

1.3. Квантова частинка в потенціальній ямі



Як уже зазначалось вище, при квантовому обмеженні частинка поводиться по іншому, ніж в масивному кристалі. Для моделювання її поведінки в квантовій механіці використовується модель

потенціальної ями. Розглянемо найпростіший випадок одновимірної скінченої потенціальної ями із прямокутними стінками. Тоді залежність потенціальної енергії від координати (Рис.1.5) буде мати вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0, x > a \\ 0, & 0 \le x \le l \end{cases}.$$
 (1.1)

В області II рівняння Шредінгера, для частинки з енергією $E(0 \le E < U_0)$ можна записати так:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \qquad (1.2)$$

де

$$k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E} = \frac{p}{\hbar} > 0.$$
 (1.2a)

Загальний розв'язок рівняння (1.2), є суперпозицією синусів і косинусів:

$$\psi_{II}(x) = B_{II} \cos(kx) + A_{II} \sin(kx).$$
(1.3)

Рівняння Шредінгера для областей І та ІІІ має вигляд:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U_0)\psi(x) = 0.$$
 (1.4)

Тут потрібно розрізняти два випадки. У першому випадку ($E > U_0$) розв'язок буде мати коливний характер, який визначається рівняннями (1.3), але величина k дорівнює

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E - U_0 \right)}$$

Яких-небудь обмежень на хвильову функцію не потрібно вводити, тому енергія *Е* може приймати будь-які додатні значення.

Якщо ж *E*<*U*₀, то розв'язок рівняння (1.4) має експоненціальний характер. Його загальний розв'язок задається формулою:

$$\psi_{I,III}(x) = A_{I,III} e^{zx} + B_{I,III} e^{-zx}, \qquad (1.5)$$

де

$$\chi = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E)} > 0.$$

Зазначимо, що хвильова функція при будь-якому значенні енергії $(0 < E < U_0)$ всередині потенціального бар'єру містить як експоненціально зростаючі, так і еспоненціально спадні розв'язки. Тому потрібно вибрати такі значення енергії *E*, при яких експоненціально зростаючі розв'язки всередині потенціального бар'єра відсутні. Для цього потрібно вважати коефіцієнти *B_I* та *A_{III}* рівними нулю. Тоді

$$\psi_{I}(x) = A_{I}e^{x}, \qquad \psi_{III}(x) = B_{III}e^{-x} \equiv Be^{-x(x-I)}.$$
 (1.6)

Зшиваючи розв'язки на межах областей I та II (x=0), а також II та III (x=l) при умові, що внаслідок умови $B_I = A_{III} = 0$ експоненціально зростаючі розв'язки перетворюються в нуль, знаходимо рівняння для визначення власних значень енергії *E*.



Рис. 1.6. Частинка в потенціальній ямі з нескінченно високими стінками

Спростимо ще нашу задачу і приймемо, що V_0 і разом з ним і χ прямує до нескінченності (Рис. 1.6). Тоді, як видно з (1.6), $\psi_1(x) = \psi_{III}(x) = 0$. Тому граничні умови для (1.3) всередині потенціальної ями (область II) мають вигляд:

$$\psi_{II}(0) = \psi_{II}(l) = 0. \tag{1.7}$$

Хвильова функція (1.3) задовольняє ці граничні умови тоді, коли $B_{II} = 0$ і

$$\sin(kl) = 0. \tag{1.8}$$

Із (1.8) випливає, що

 $kl = \pi n$,

де *n* = 1, 2, 3, Значення *n* = 0 ми виключаємо із розгляду, бо при цьому хвильова функція тотожно перетворюється в нуль. Так само можна опустити від'ємні значення *n*, оскільки хвильові функції при від'ємних значеннях *n* такі ж, як відповідні хвильові функції з додатними *n*. Враховуючи, що

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$$

отримуємо такий вираз для визначення енергетичного спектру

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_0 l^2}.$$
 (1.9)

Відповідні цим значенням енергії хвильові функції дорівнюють:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\pi n \frac{x}{l}\right),\tag{1.10}$$

причому коефіцієнт А, може бути знайдений з умови нормування

$$\int_{0}^{l} \psi_{n}^{2}(x) dx = A_{n}^{2} \int_{0}^{l} \sin^{2} \left(\pi n \frac{x}{l} \right) dx = \frac{l}{2} A_{n}^{2} = 1.$$

Отже, для $\Psi_n(x)$ отримаємо наступну формулу:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\pi n \frac{x}{l}\right). \tag{1.11}$$

Хвильові функції (1.11), які є власними функціями рівняння Шредінгера, відповідно до загальної теореми про власні функції, задовольняють умові ортогональності

$$\int_{0}^{l} \psi_{n'}^{*}(x) \psi_{n}(x) dx = 0 \quad \Pi P \Pi \quad n' \neq n \,. \tag{1.12}$$

Випишемо тепер деякі конкретні власні значення E_n і власні функції Ψ_n :

$$E_{1} = \frac{\pi^{2}\hbar^{2}}{2m_{0}l^{2}}, \ \psi_{1}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\pi\frac{x}{l}\right),$$
(1.13)

$$E_2 = 4E_1, \ \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(2\pi \frac{x}{l}\right), \tag{1.14}$$

$$E_{3} = 9E_{1}, \ \psi_{3}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(3\pi \frac{x}{l}\right), \tag{1.15}$$

Наведені тут розв'язки дуже схожі на відомі розв'язки для коливання струни із закріпленими кінцями, які утворюють стоячі хвилі.

1.4. Тунельний ефект

Тунельним ефектом називається можливість елементарної частинки, наприклад, електрона пройти (протунелювати) через потенціальний бар'єр, коли бар'єр більший за енергію частинки. Можливість існування тунельного ефекту в мікросвіті була зрозуміла фізиками в період створення квантової механіки, у 20-30-х роках минулого століття. Надалі тунельним ефектом були пояснені деякі дуже важливі явища, що експериментально виявлені в різних областях фізики.



Рис. 1.7. Зіткнення частинки з потенціальним бар'єром у рамках класичної (а) і квантової (б, в) механіки: a - E – енергії частинки, U_0 – висота потенціального бар'єра, частинка рухається ліворуч праворуч; $\delta - \varphi^2(x > R)$ – ймовірність знайти частинку в точці x, яка знаходиться до бар'єру; $\epsilon - \varphi^2(x > R)$ – ймовірність знайти частинку за бар'єром у класично забороненій області, R - ширина бар'єра.

Тунельний ефект є квантовомеханічним ефектом, що не має аналога в класичній механіці, чим викликає зацікавлення ним фізиків. У рамках класичної механіки апріорно зрозуміло, що будь-яке матеріальне тіло, яке має енергію *E*, не може перебороти потенціальний бар'єр висотою U_0 , якщо $U_0 > E$ (Рис. 1.7, а). При падінні тіла на такий бар'єр воно може лише відбитися від нього. Це твердження узгоджується із законом збереження енергії.

Однак якщо матеріальним тілом є електрон, то не можна залишатися в рамках класичної механіки. Дійсно, добре відомо, що електрону властиві як корпускулярні, так і хвильові властивості. Довжина хвилі де Бройля для матеріального тіла з масою m і швидкістю v описується співвідношенням:

$$\lambda_D = \frac{2\pi\hbar}{m\nu},\tag{1.16}$$

Якщо маса *m* мала і швидкість *v* не надто велика, то довжина хвилі де Бройля може бути значною. Наприклад, для електрона, що має кінетичну енергію 1 *eB*, величина λ_D дорівнює $10r_a \sim 10^{-7}$ см, де r_a — борівський радіус. В атомних масштабах це велика величина — на порядок перевищує розмір атома.

Якщо ширина потенціального бар'єра $R \leq \lambda_D$, то при падінні на бар'єр електрон з визначеною ймовірністю може виявитися з іншого його боку – електрон протунелює через бар'єр, не змінивши своєї енергії. У цьому якісно полягає суть тунельного ефекту.

У тих випадках, коли потенціальний бар'єр такий, що його висота є меншою за енергію частинки, то, з погляду класичної механіки, частинка обов'язково (ймовірність дорівнює одиниці) проходить через бар'єр. Однак квантова механіка доводить, що це не так. Ті ж причини, що зумовлюють підбар'єрне тунелювання, є причиною і надбар'єрного відбиття частинки. При висоті бар'єра, що дорівнює енергії частинки, ймовірність проходження дорівнює імовірності відбиття, тобто половині. Ймовірність проходження, яка близька до одиниці, досягається лише при $E >> U_0$.

Тунельний ефект не має аналогів у класичній механіці, тому цікаво підкреслити, що він має аналогію в оптиці. Наявність такого аналога не є випадковим, позаяк в основі тунельного ефекту лежать хвильові властивості частинок. А між хвилею імовірності і електромагнітною хвилею є багато спільного.

Звернімося тепер до опису тунельного ефекту в рамках квантової механіки. Нехай потенціальний бар'єр є стаціонарним. Запишемо рівняння Шредінгера у формі, що не залежить від часу:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) = [E - U(\vec{r})]\psi(\vec{r}), \qquad (1.17)$$

де E — повна енергія частинки, $U(\vec{r})$ — потенціальна енергія частинки, а $\psi(\vec{r})$ — хвильова функція.

Розглянемо одновимірну задачу. Це дає змогу замінити рівняння (1.17) з частинними похідними на звичайне диференціальне рівняння з однією незалежною змінною *х*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = [E - U(x)]\psi(x).$$
(1.18)

Залежність хвильової функції від часу описується експонентою $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$, так що хвильову функцію можна записати у вигляді:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right).$$
(1.19)

Розв'язавши рівняння (1.18) щодо $\psi(x)$, можна одержати з (1.19) вираз для шуканої хвильової функції $\Psi(x,t)$. Виберемо найпростішу східчасту форму бар'єра (Рис. 1.7,*б*):

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x \ge 0 \end{cases}$$
 (1.20)

Знайдемо $\psi(x)$ для довільного значення аргументу. Звернімося спочатку до області ліворуч від бар'єра. У цій області x < 0 рівняння (1.18) зводиться до такого:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x).$$
 (1.21)

Легко встановити, що це рівняння має два незалежні розв'язки e^{ikx} і e^{-ikx} , де $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Таким чином, у цій області хвильова функція $\psi(x)$ описується формулою:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{1.22}$$

Отже, розв'язок в є осцилюючою функцією. Для конкретності будемо вважати, що *A* = 1.

В області *х* ≥ 0 рівняння (1.18) має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = [E - U_0]\psi(x).$$
(1.23)

Нехай *Е* < *U*₀. Одержуємо два незалежні розв'язки цього рівняння:

$$e^{\pm qx}$$
, $q = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$,

тому загальний розв'язок можна задати формулою:

$$\psi(x) = Ce^{-qx} + De^{qx}.$$
 (1.24)

Враховуючи те, що $\psi(x)$ повинна бути обмеженою в усій області визначення, отримуємо, що D = 0. Отже, залишається лише перший доданок з розв'язків рівняння (1.23), що відповідає експонентному спаданню функції $\psi(x)$ зі зростанням величини x в області x > 0.

Тепер потрібно зшити розв'язки (1.22) та (1.24) у точці x=0. Константи *А*, *В* і *С* визначають, виходячи з очевидного припущення про неперервність хвильової функції і її першої похідної у всій області зміни величини x.

Остаточний вираз для функції $\psi(x)$ має вигляд:

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + \frac{1 - i\sqrt{V_0 / E - 1}}{1 + i\sqrt{V_0 / E - 1}} \exp(-ikx) & npu \quad x < 0, \\ \frac{2\exp(-qx)}{1 + i\sqrt{V_0 / E - 1}} & npu \quad x > 0 \end{cases}$$
(1.25)

З виразу (1.25) видно, що при x<0 функція $\psi(x)$ є суперпозицією двох хвиль. Одна з хвиль, e^{ikx} , поширюється вправо, убік бар'єра; друга, e^{-ikx} — уліво від бар'єра. Тому що модуль множника при e^{ikx} у виразі (1.25) дорівнює 1, амплітуди цих хвиль рівні. Таким чином, ліворуч від бар'єра, при x<0, вираз (1.25) описує можливі стани падаючої та пружно відбитої частинки (Рис. 1.7, *б*). Цей процес відповідає законам класичної механіки.

Однак з виразу (1.25) також видно, що при x>0 хвильова функція проникає за бар'єр в область, заборонену з погляду класичної механіки. Амплітуда хвильової функції за бар'єром експоненціально зменшується при збільшенні *x*, і при великих *x* вона прямує до нуля (Рис. 1.7, *б*):

$$\psi(x) \approx B \exp(-qx),$$
 (1.26)

Отже, праворуч від бар'єра $\psi(x)$ описує тунелювання частинки в класично заборонену область.

З виразу (1.25) також можна бачити, що при необмежено великій висоті бар'єра $(U_0 \to \infty)$ величина q прямує до нескінченності. Згідно з (1.25), це означає, що величина $\psi(x) = 0$ при x > 0. Таким чином, при нескінченній висоті бар'єра ми повертаємося до класичної картини — частинка за бар'єр не проникає, а лише відбивається від нього.

У тому випадку, коли бар'єр має скінчену ширину R і є досить вузьким, так що $R \le \lambda_D$, частинка тунелює за бар'єр з визначеною ймовірністю і поширюється вправо в просторі за бар'єром (Рис. 1.7, *в*). При цьому сума ймовірностей пройти через бар'єр і відбитися від нього дорівнює одиниці. Відповідно амплітуда хвилі, відбитої від бар'єра, менша від амплітуди хвилі, що падає на бар'єр. Якщо бар'єр не дуже вузький, то ймовірність тунелювання частинки експоненціально мала.

Конкретна форма бар'єра (який реально ніколи не буває прямокутним) змінює кількісно ймовірність тунелювання, не змінюючи тієї якісної картини, що отримана вище.

1.5. Квантовий ефект Хола

До числа найбільш яскравих відкриттів у фізиці твердого тіла за останню чверть століття з повним правом можна вважати квантовий ефект Хола, що є новим макроскопічним проявом квантових властивостей речовини. Перш ніж перейти до обговорення цього ефекту, згадаємо, що являє собою відкритий більше ста років тому класичний ефект Хола.

а). Класичний ефект Хола

Класичний ефект Хола полягає у тому, що у провіднику зі струмом **I**, поміщеному в магнітне поле **B**, виникає електричного поля E_H , яке перпендикулярне до **I** та **B**. З'ясуємо причину виникнення цього електричного поля.



Рис. 1.8. Схема для спостереження ефекту Хола

Нехай провідник зі струмом I, що тече вздовж осі X під дією створеного джерелом ЕРС електричного поля, поміщений у магнітне поле B, спрямоване уздовж осі Z (рис. 1.8). На електрони, що рухаються в провіднику зі швидкістю v і створюють струм I, з боку магнітного поля буде діяти спрямована по осі Y сила Лоренца

$$\vec{F}_B = e\left[\vec{v} \times \vec{B}\right], \qquad (1.27)$$

де e — взяте за модулем значення заряду електрона. Під дією сили Лоренца (1.27) електрони відхиляються від руху уздовж осі X і збираються біля бічної грані провідника, перпендикулярної до осі Y, заряджаючи її негативно. Відповідно протилежна бічна грань провідника заряджається позитивно й у провіднику вздовж осі Y виникає електричне поле E_H (холівске поле). Електрони будуть відхилятися під дією сили Лоренца доти, доки заряд на бічних гранях

провідника не стане настільки великим, що сила, яка діє на електрони з боку холівського поля

$$F_H = eE_H \tag{1.28}$$

не зрівноважить силу Лоренца (1.27). Умова рівноваги сил (1.27) і (1.28)

$$e\vec{E}_{H} = e\left[\vec{v} \times \vec{B}\right] \tag{1.29}$$

дає змогу знайти холівську різниця потенціалів (ЕРС Хола) V_H між бічними гранями провідника. Позначимо буквами *b* і *d* геометричні розміри провідника, зображеного на рис. 1.8. Згідно з (1.29),

$$V_H = E_H b = b \left[\vec{v} \times \vec{B} \right]. \tag{1.30}$$

З визначення сили струму I випливає, що

$$\mathbf{I} = e \ n \ v \ S, \tag{1.31}$$

де *n* – концентрація електронів у провіднику

$$n = \frac{N}{V} \tag{1.32}$$

N – число електронів у провіднику, $V = S_0 d$ — об'єм провідника, S_0 — площа поперечного перерізу провідника в площині (*X*, *Y*), а S=bd — площа поперечного переріза провідника в площині (*Z*, *Y*). Тоді з (1.30) і (1.31) одержуємо

$$V_H = R_H \mathbf{I}, \tag{1.33}$$

де величина

$$R_{H} = \frac{B}{end} \tag{1.34}$$

називається холівским опором.

б). Квантовий ефект Хола



Рис. 1.9. Кремнієва МДН-структура

На відміну від класичного квантовий ефект Хола спостерігається у провідниках, товщина яких d надзвичайно мала і порівнянна з міжатомною відстанню. У таких провідниках, які називаються двовимірними електронними системами, поступальний рух електрона уздовж осі Z неможливий, тому рух електрона має двовимірний характер у площині (X, Y). Типовим прикладом двовимірної електронної системи, у якій спостерігається квантовий ефект Хола, є структура метал–діелектрик–напівпровідник (МДН-структура), утворена шарами металу і напівпровідника, розділеними шаром діелектрика (Рис. 1.9). Така структура – це плоский конденсатор, обкладками якого є шари металу і напівпровідника. При подачі напруги V_g між цими обкладками у приповерхній області напівпровідника виникає тонкий провідний електронний шар (інверсійний канал), що буде двовимірною електронною системою. Причому заряд цього електронного шару визначається відомим виразом

$$Q = C_0 V_g, \tag{1.35}$$

де С₀ — ємність МДН-структури. Оскільки

$$Q=Ne, \tag{1.36}$$

то з (1.35), (1.36) одержуємо число електронів у цій двовимірній системі

$$N = \frac{C_0 V_g}{e}.$$
 (1.37)

в). Властивості двовимірної електронної системи в магнітному полі

Добре відомо, що у випадку локалізації електрона в обмеженій області простору закони квантової механіки дають змогу електрону приймати не будь-які значення енергії, а лише ряд строго визначених дискретних значень (частковим наслідком цього є наявність дискретного енергетичного спектра електрона в атомі, де рух електрона обмежений в області простору поблизу атомного ядра завдяки кулонівському притяганню електрона до ядра). Неважко переконатися в тому, що у випадку малої товщини d провідника, зображеного на рис. 1.8, рух електрона має локалізований характер. Справді, завдяки наявності магнітного поля рух електрона в площині (X, Y) буде відбуватися на циклотронній орбіті, що має форму кола, і буде обмежено радіусом r цього кола, а рух електрона вздовж осі Z буде обмежено товщиною d двовимірного шару. Таким чином, рух електрона буде локалізованим в обмеженній області простору у всіх трьох напрямах, що приводить до появи дискретного енергетичного спектра. Розв'язок рівняння Шредінгера для електрона в магнітному полі B показує, що радіус циклотронної орбіти

$$r = \left(\frac{2\hbar}{eB}\right)^{\frac{1}{2}},\tag{1.38}$$

а кутова частота обертання електрона по циклотронній орбіті (частота прецесії) визначається формулою:

$$\omega = \frac{eB}{m_0},\tag{1.39}$$

Оскільки обертальний рух електрона має періодичний осцилюючий характер, то рівні енергії електрона в магнітному полі визначаються добре відомим квантово-механічним виразом для енергії гармонійного осцилятора

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{1.40}$$

де номер енергетичного рівня n = 0, 1, 2, 3..., а в ролі частоти коливань осци $лятора <math>\omega$ виступає частота прецесії (1.39). Енергетичні рівні (1.40), схематично зображені на рис. 1.10, називаються рівнями Ландау на честь видатного фізика-теоретика Л.Д. Ландау, що вперше отримав вираз (1.40) при розв'язку рівняння Шредінгера для електрона в магнітному полі. З (1.38) випливає, що площа, обмежена циклотронною орбітою одного електрона в площині (*X*, *Y*), має вигляд

$$S_e = \pi r^2 = \frac{h}{eB}.$$
 (1.41)

Оскільки площа двовимірного електронного шару в площині (X, Y) дорівнює S_0 , то максимальна кількість електронів, що можуть розміститися в цій площині на даному рівні Ландау, є



$$N_0 = \frac{S_0}{S_e} = \frac{S_0 eB}{h} \,. \tag{1.42}$$

Рис. 1.10. Структура рівнів енергії електрона в магнітному полі

г). Суть квантового ефекту Хола

Для того, щоб з'ясувати особливості протікання електричного струму в двовимірній електронній системі з дискретним енергетичним спектром (1.40), згадаємо, з чим пов'язане протікання струму в звичайних тривимірних провідниках. Рух електронів під дією зовнішнього електричного поля в провідниках якісно можна уявити собі в такий спосіб: завдяки зовнішньому електричному полю, створеному джерелом ЕРС, електрон у провіднику рухається з прискоренням і плавно збільшує свою енергію доти, доки при зіткненні з дефектом кристалічної ґратки не втратить набрану енергію, після чого процес плавного прискорення електрона повторюється знову. Такий стрибкоподібний рух електрона характеризується середньою швидкістю упорядкованого руху (дрейфовою швидкістю) v, що і визначає силу струму (1.31). Таким чином, протікання струму І вздовж осі X (Рис. 1.8) нерозривно пов'язане з можливістю плавного збільшення енергії електрона під дією зовнішнього електричного поля.

У випадку дискретного енергетичного спектру (1.40) можливість плавної зміни енергії електрона відсутня, оскільки зміна енергії в цьому випадку при переході електрона з одного рівня Ландау на іншій може бути тільки стрибкоподібним. Такої стрибкоподібної зміни енергії електричне поле забезпечити не може, у зв'язку з чим при наявності дискретного енергетичного спектра (1.40) протікання струму І стає неможливим. Однак у реальних дво-



Рис. 1.11. Процес розсіяння електрона на дефекті кристала

вимірних електронних системах струм І у загальному випадку не дорівнює нулю, і пов'язано це з тим, що при отриманні співвідношення (1.40) для дискретного енергетичного спектра не була врахована можливість розсіяння електрона на дефектах кристалічної ґратки (на домішкових атомах, на дислокаціях тощо), які присутні в будь-якому реальному твердому тілі. Нехай електрон рухається по циклотронній орбіті з центром у точці 1, що зображена на рис. 1.11. При зіткненні з центром розсіювання S електрон перейде на циклотронну орбіту з центром у точці 2. Таким чином, при наявності розсіяння електрон уже не можна вважати локалізованим у межах однієї циклотронної орбіти: рух електрона в площині (*X*, *Y*) стає делокалізованим, що відповідно до основних принципів квантової механіки приводить до зникнення дискретного характеру енергетичного спектра.

Аналіз рівняння Шредінгера для електрона в магнітному полі при наявності дефектів кристалічної ґратки показує, що завдяки розсіюванню електрона дискретні енергетичні рівні (1.40) перетворюються на вузькі енергетичні смуги шириною $\Delta E \sim h/\tau$, де τ — середній час між актами розсіяння електрона. Оскільки в межах розширеного рівня Ландау можлива плавна зміна енергії електрона під дією електричного поля, то стає можливим описаний вище механізм протікання електричного струму вздовж осі Х. Таким чином, неодмінною умовою протікання електричного струму вздовж осі X є наявність процесів розсіювання електрона. Розглядаючи зображений на рис. 1.11 процес розсіювання електрона зі стану з центром циклотронної орбіти в точці 1 (стан 1) у стан з центром циклотронної орбіти в точці 2 (стан 2), ми припускали, що стан 2 не зайнятий іншим електроном (в іншому випадку цей процес розсіювання виявився б неможливий через принцип Паулі, що забороняє двом електронам перебувати в одному стані). Припущення про те, що стан 2 вільний і розсіяння електрона можливе, цілком справедливе для випадку, коли число електронів на рівні Ландау незначне в порівнянні з числом електронів на заповненому рівні Ландау N_0 . У випадку, коли число електронів на рівні Ландау є рівним N₀, усі стани на даному рівні виявляються зайняті електронами і, незважаючи на наявність центрів розсіяння, зображений на рис. 1.11 перехід електрона з однієї циклотронної орбіти на іншу в межах одного рівня Ландау є неможливим.

Для здійснення процесів розсіяння з переходом електрона на вільні (збуджені стани) рівні Ландау необхідно подолати енергетичний поріг $\frac{h\omega}{2\pi}$ між сусідніми рівнями Ландау (1.40). Однак добре відомо, що середня енергія, яку електрон може одержати від навколишнього середовища при темпе-

28

ратурі *T*, є величина пропорційна $k_B T$, де k_B — постійна Больцмана. Тому при досить низьких температурах, коли

$$T \ll \frac{\hbar\omega}{k_B},\tag{1.43}$$

електрон не може одержати ззовні енергію, порівнянну з величиною енергетичного порога між рівнями Ландау. У зв'язку з цим переходи електрона між різними рівнями Ландау заборонені. Таким чином, при цілком заповненому електронами рівні Ландау і виконанні умови (1.43), зникає розширення рівня Ландау внаслідок зникнення процесів розсіювання електронів і протікання струму І стає неможливим. Звідси випливає, що сила струму І прямує до нуля при тих значеннях V_g , при яких $N=iN_0$, де i=1, 2, 3, ... — число повністю заповнених електронами рівнів Ландау. З (1.32), (1.33), (1.37) і (1.42) випливає, що при тих значеннях V_g , коли **І**=0, холівський опір (1.34) дорівнює

$$R_{H} = \frac{S_0 B}{Ne} = \frac{h}{e^2 i}.$$
 (1.44)

Отже, величина холівського опору (1.44) визначається лише фундаментальними фізичними сталими: сталою Планка *h* і зарядом електрона *e*.



д). Значення квантового ефекту Хола

Змінюючи V_g і вимірюючи 1/R_H тоді, коли струм І вдовж осі X стане рівний нулю, можна з високою точністю визначити величину e^2/h . Якісний вигляд експериментальної залежності величини 1/R_H від V_g , що має характерний вигляд сходів, наведений на рис. 1.12. На східцях цих сходів значення величини 1/R_H виявляються кратними e^2/h . Цікавим виявляється та обставина, що саме така комбінація фундаментальних сталих, спільно зі швидкістю світла визначає фундаментальну світову константу, названу сталою тонкої структури, яка характеризує взаємодію електронів з електромагнітним випромінюванням, що у системі одиниць СГСЄ має вигляд

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \tag{1.45}$$

Постійна (1.45) відіграє найважливішу роль у теорії квантової електродинаміки, у зв'язку з чим для перевірки правильності положень цієї теорії необхідно мати незалежні методики визначення точного числового значення α . Одна з цих методик і побудована на використанні квантового ефекту Хола.

Таким чином, квантовий ефект Хола, з одного боку, є фундаментальним явищем, у якому квантові властивості речовини виявляються в макроскопічних масштабах, а з іншого – має важливе прикладне значення в метрології як метод точного визначення фундаментальних фізичних констант. Завдяки фундаментальному і прикладному значенню квантового ефекту Хола першовідкривач цього явища Клаус фон Клітцинг у 1985 році був визнаний гідним Нобелівської премії з фізики.

Розділ 2. НАНОТЕХНОЛОГІЇ

2.1. Історія становлення нанотехнологій

Префікс **нано** (від грецького "nannos" – "карлик") означає одну мільярдну (10⁻⁹) частку якоїсь одиниці (у нашому випадку – метра). Розмір одного атома чи дрібної молекули порядку одного нанометра.

Відповідно, **нанотехнології** визначаються як сукупність методів і прийомів маніпулювання речовиною на атомному і молекулярному рівнях з метою виробництва кінцевих продуктів з наперед заданою атомною структурою.

Сучасні мікросхеми з розмірами компонентів в одну десяту товщини найтоншого волоска можуть вважатися маленькими, але кожен транзистор усе ще містить трильйони атомів, і так названі "мікрокомп'ютери" (окремі чіпи) ще видимі неозброєним оком.

Прабатьком нанотехнологій можна вважати грецького філософа Демокрита. Приблизно в 400 р. до н.е. він уперше використовував слово "атом" для опису найменшої частки речовини.

1905 рік. Швейцарський фізик Альберт Айнштайн опублікував роботу, у якій доводив, що розмір молекули цукру складає приблизно 1 нанометр.

1931 рік. Німецькі фізики Макс Кнолл і Ернст Руска створили електронний мікроскоп, який вперше дав змогу досліджувати нанооб'єкти.

1959 рік. Американський фізик Ричард Фейнман уперше опублікував роботу, в якій оцінювалися перспективи мініатюризації. Основні положення нового напряму нанотехнологій були ним висвітлені в його легендарній лекції "Там унизу – море місця" ("There's Plenty of Room at the Bottom"), у Каліфорнійському технологічному інституті. Тоді його слова здавалися фантастикою лише з однієї причини: ще не існувало технології, яка давала б змогу оперувати окремими атомами на атомарному рівні (мається на увазі можливість пізнати окремий атом, узяти його і поставити на інше місце). Щоб стимулювати інтерес до цієї області, Фейнман призначив приз у \$1000 тому, хто

31

вперше запише сторінку з книги на голівці шпильки, що, до речі, було здійснено вже у 1964 році.

1968 рік. Альфред Чо і Джон Артур, співробітники наукового підрозділу американської компанії Bell, розробили теоретичні основи нанотехнології в процесі обробки поверхонь.

1974 рік. Японський фізик Норіо Танігучі ввів у наукове середовище слово "нанотехніка", запропонувавши описувати механізми розмірами меншими одного мікрона.

1981 рік. Німецькі фізики Герд Бінніг і Генріх Рорер створили скануючий тунельний мікроскоп – прилад, який уможливлює здійснювати вплив на речовину на атомарному рівні. Через чотири роки його творці одержали Нобелівську премію.

1985 рік. Американські фізики Роберт Керл, Херольд Крото і Річард Смоллі створили технологію, яка дає змогу точно вимірювати предмети діаметром в один нанометр.

1986 рік. Створено атомно-силовий мікроскоп, який, на відміну від тунельного мікроскопа, дає можливість здійснювати взаємодію з будь-якими матеріалами, а не тільки зі струмопровідними.

1986 рік. Нанотехнологія стала відома широкій публіці. Американський футуролог Ерік Дрекслер опублікував книгу, у якій передбачає, що нанотехнологія незабаром почне активно розвиватися.

1989 рік. Дональд Ейглер, співробітник компанії ІВМ, виклав назву своєї фірми атомами ксенону.

1998 рік. Голландський фізик Сез Деккер створив транзистор на основі нанотехнологій.

1999 рік. Американські фізики Джеймс Тур і Марко Рід, визначили, що окрема молекула поводить себе так само, як і молекулярні ланцюжки.

2000 рік. Адміністрація США підтримала створення проекту "Національна Ініціатива" в галузі нанотехнологій (National Nanotechnology Initiative). Нанотехнологічні дослідження одержали державне фінансування. Тоді з федерального бюджету було виділено \$500 млн.

У 2002 році сума асигнувань була збільшена до \$604 млн.

У 2003 році дана сума сягнула \$710 млн.

У **2004 році** уряд США прийняв рішення, впродовж чотирьох років збільшити фінансування наукових досліджень у даній галузі до \$3,7 млрд.

2004 рік. Адміністрація США підтримала створення проекту "Національна Наномедична Ініціатива" як частина National Nanotechnology Initiative.

Загалом, у 2004 році, світові інвестиції в нанотехнології склали понад \$12 млрд.

Стрімкий розвиток нанотехнологій визначається, насамперед, потребами суспільства у швидкій переробці величезних масивів інформації. Сучасні кремнієві чіпи можуть при всіляких технічних хитрощах зменшуватися ще приблизно до 2012 року. А потім повинна наступити ера наночіпів, у яких замість кремнію використовуватимуться різні вуглецеві з'єднання розміром у кілька нанометрів. Сьогодні ведуться інтенсивні розробки в цьому напрямі.

2.2. Межа мінітюаризації електронних пристроїв

Транзисторна технологія, що використовується сьогодні в комп'ютерних процесорах, називається CMOS (неоднорідна структура метал-оксиднапівпровідник), і була розроблена для перших електронних годинників, оскільки споживала менше енергії в порівнянні з попередниками. З 1970-х років експерти почали пророкувати, що через 10–15 років ця технологія досягне межі свого розвитку, і пророкують це донині. Але сьогодні в електронній індустрії існує незаперечний висновок, що тенденція мініатюризації її компонентів перерветься: на шляху в мікрокосм поступово стають видними справжні будівельні блоки матерії – її атомна структура. Електронні оболонки атомів – найменші компоненти, які можна з'єднати разом у нормальних умовах з метою одержання технічних структур. Тому видно фундаментальну межу. Контур провідника не може бути тоншим за розмір атома. Технологія

33

СМОЅ уже давно доходила до меж можливостей, іноді досить цікавих. Провідники, що з'єднують транзистори на мікросхемі, уже настільки тонкі, що атоми алюмінію в таких умовах втрачають стабільність. Їх просто змиває потоком електронів як гальку в бурхливому потоці. Це явище позначається спеціальним терміном – «електроміграція». Тому доцільніше використовувати мідні провідники з кращою провідністю, що сприяє підсиленню сигналів у чіпі. Крім того, провідники сьогодні розташовуються настільки близько один біля одного, що створюється ємність, яка виявляється явно, як у конденсаторі. Якщо цей ефект не брати до уваги при конструюванні мікросхеми, вона може вийти з режиму синхронної роботи.

Деякі компоненти транзисторів поступово зменшуються до розміру менш, ніж 20 нанометрів. Це вже область квантових явищ, де проявляються тунельні ефекти: у таких транзисторах, де струму не повинно бути, він починає протікати. І хоча струми дуже слабкі, у сумі вони дають значні втрати, і процесор нагрівається. Ці неконтрольовані заряди також можуть викликати логічні помилки фатального характеру.

У дуже тонких структурах починають проявлятися хвильові властивості електрона, що описується квантовою теорією. Але багато вчених бачать у цьому можливість створення нового виду електроніки, яка приведе до створення квантового комп'ютера, що відкриває якісно новий математичний світ.

Уже в 1965 році Гордон Мур, співзасновник фірми Інтел, усвідомив, що *ємність мікросхем подвоюється кожні півтора року*. Цей «закон» тепер піддається сумніву через дію людського фактора. У той час як число транзисторів на чіпі щорічно збільшується на 50 відсотків, аналітики скаржаться, що продуктивність праці конструкторів мікросхем збільшується всього на 20 відсотків за рік.

Промисловість спробувала протидіяти цій тенденції, поступово збільшуючи розмір конструкторських робочих груп, які сьогодні складаються з 250–300 осіб і в такій кількості стають важко керованими.

34



Необмежений ріст суперечить другому закону Мура, згідно з яким зменшення розмірів структур спричиняє збільшення вартості виробничого підприємства. У цей час комп'ютерні процесори (СРU) уже оснащуються структурами, розміри яких менші за

100 нанометрів і містять більше, ніж 100 мільйонів транзисторів.

Якщо вірити Дорожній карті напівпровідникової промисловості, чиї прогнози в основному засновані на реальних технічних розробках, у найближчі кілька років можна чекати появи структур розміром 45 нанометрів. У такому випадку на одному чіпі вміститься більше мільярда транзисторів. Це відкриє можливості, про які сьогодні ми можемо тільки мріяти.

Конструктори мікросхем ще на самому початку подумували про третій вимір, але ці зусилля з низки причин ні до чого не привели. Можливо, дорогу в третій вимір знайшли в компанії Infineon AG, Мюнхен, якій удалося виростити вуглецеві нанотрубки (CNT) на полірованих силіконових пластинах, на яких установлюють мікросхеми. Вуглецеві нанотрубки є першокласними провідниками й тому виникає дуже мало відпрацьованого тепла. Вони ж можуть служити сполучними ланками (VIA) – стійкими до механічних впливів – між різними рівнями мікросхеми. У перспективі, дослідники компанії Infineon вважають за можливе розробку оригінальної тривимірної технології для мікросхем за допомогою вуглецевих нанотрубок. Тим більше, що, будучи відмінними теплопровідниками, вони можуть розсіювати тепло усередині тривимірних чіпів.
2.3. Основні процеси нанотехнологій

До основних технологічних процесів, які одержали останнім часом широке застосування в нанотехнологіях, належать процеси **самоорганізації** та літографії.

Для того, щоб матеріали, створювані методами нанотехнології, мали поліпшені характеристики, вони повинні бути добре структуровані на рівні атомів і молекул. Найбільш популярними способами створення таких структур з наперед заданими характеристиками є *самоорганізації*.

Самоорганізація широко розповсюджена у живій природі. Структура всіх тканин визначається їхньою самоорганізацією з клітин (синтез білка, наприклад); структура самих клітин визначається самоорганізацією з окремих молекул. Механізм самоорганізації наносистем у живій природі підштовхнув дослідників до спроби "скопіювати" його принципи для побудови штучних наноструктур. Тому на сьогодні досягнуто значних успіхів у виготовленні наноматеріалів, які імітують природну кісткову тканину. Для цього застосували технологію самоорганізації волокон діаметром приблизно 8 нм, які імітують природні волокна колагену. До отриманого матеріалу добре прикріплюються природні кісткові клітини, що дає змогу використовувати його як "клей" або "шпаклівку" для кісткової тканини.

Добре розвинута електростатична самоорганізація, яке уможливлює зміну властивостей матеріалу у реальному часі. Основою для нього служить керування різницею потенціалів, прикладених до матеріалу з наночастинками усередині.

Однієї з пріоритетних областей застосування нанотехнологій, безумовно, є мікроелектроніка (**наноелектроніка**).

2.4. Епітаксія

Епітаксією називається процес нарощування шарів речовини з новими властивостями шляхом вводу (на рівні атомів) нових елементів з відтворенням кристалічної структури існуючої (базисної) основи. Для прикладу розглянемо епітаксійний процес заміщення атомів галію атомами алюмінію



GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$

Рис. 2.2. Процес заміщення атомів галію атомами алюмінію *GaAs-AlGaAs*

GaAs-AlGaAs.

Над зростаючою поверхнею показані атоми газової суміші компонентів у приповерхній області. Буквами **n-n** та **i-i** позначені нормальна й інвертована поверхні розділу зростаючих шарів речовини. Для електрона (дірки) область між цими поверхнями є квантовою ямою шириною L.

Перетворення GaAs в

 $Al_xGa_{1-x}As$ — це процес, у якому частина атомів галію заміщується атомами алюмінію. Величина *x* задає частку атомів галію, заміщених атомами алюмінію. Зазвичай вона змінюється у межах від 0,15 до 0,35.

Основні процеси, що відбуваються в зоні епітаксійного росту GaAs-

AlGaAs

1. Адсорбція атомів із зони змішування на поверхні.

2. Міграція (поверхнева дифузія) адсорбованих атомів по поверхні.

3. Проникнення (вбудовування) адсорбованих атомів у кристалічну гратку.

4. Термічна десорбція.

5. Утворення поверхневих зародків.

6. Взаємна дифузія



Рис. 2.3. Схема реактора для молекулярно-променевої епітаксії

Епітаксійне вирощування проводять в особливому реакторі (Рис. 2.3.). Розглянемо схему реактора молекулярнопроменевої епітаксії, призначеного для трикомпонентних одержання легованих сполук. Весь реактор розміщається в камері надвисокого вакууму, в якому є блок нагрівання (1), підкладка (2), заслінка окремого осередку (3), ефузійні осередки основних компонентів (4), ефузійні осередки

легуючих домішок (5).

Якщо нарощувані шари зі складом не відрізняються (чи незначно відрізняються) від матеріалу підкладки, то кажуть, що відбувається гомоепітаксія або автоепітаксія. Процес нарощування епітаксійних шарів, які істотно відрізняються за складом від речовини підкладки, називають гетероепітаксією.

2.5. Літографія

Літографія – технологія нанесення електронних компонентів (шляхів, якими передається електричний струм) на підкладку.

Як основний спосіб "малювання" топологічного малюнка на поверхні кремнієвих пластин, літографія є визначальним технологічним процесом виробництва інтегральних мікросхем (IMC), і тому заслуговує на окрему увагу.

Завданням літографії є перенос малюнків з фотошаблонів на поверхню пластини для того, щоб створити на ній необхідні електропровідні шари. Для цього на діоксидну плівку наносять шар фоторезисту.



Рис. 2.4.Вихідна напівпровідникова пластина з провідністю р-типу покрита шарами SiO₂ і фоторезисту

Фоторезист – світлочутливий матеріал, який після опромінення стає розчинним у певних хімічних речовинах. Розрізняють два типи фоторезисту – позитивний і негативний. Позитивні фоторезисти передають малюнок фотошаблона один до одного, негативні – формують негативне зображення фотошаблона.

Фотошаблон – це пластинка, що складається з прозорих і непрозорих ділянок і виконує роль трафарету.

Багатьом відомо, що основою перших ЕОМ служили електронні лампи, і що їхня продуктивність була вкрай малою, а габарити і складність обслуговування – надзвичайно великі. Створення перших ІМС або планарних транзисторів (від англ. "planar" – плоский) мало революційне значення і привело до створення мікропроцесорів, що дало поштовх бурхливому росту індустрії інформаційних технологій.

Дивною є та особливість транзисторів, що збільшення їхньої продуктивності супроводжується зменшенням розмірів. Сучасні транзистори в 20 разів швидші й у 100 разів менші, ніж ті, що випускалися два десятиліття тому. Але для того, щоб транзистори продовжували зменшуватися в розмірах, слід постійно удосконалювати методи літографії.

Для цього необхідно, щоб товщина ліній, які наносяться світловим пучком на поверхню фоторезисту в момент формування "малюнка" мікросхеми, була якнайменшою. Тому повинна зменшуватися довжина хвилі, оскільки саме вона обмежує точність операцій унаслідок явищ дифракції.

На перших порах засвічування здійснювали випромінюванням з довжиною хвилі, яка приблизно відповідає величині спектру видимого світла – трохи більше одного мікрона. Проте товщина ліній, сформованих за допомогою такого процесу, була більшою, ніж довжина хвилі випромінювання.

З часом стандартними стали довжини хвиль 435 і 365 нм. За допомогою джерела випромінювання з довжиною хвилі 365 нм створюються лінії завтовшки до 0,35 мікрона, що майже відповідає довжині хвилі. Пізніше, завдяки переходу на джерела, що діють у спектрі глибокого УФ-

випромінювання (*DUV-літографія* "Deep Ultra Violet"), застосували довжину хвилі 248 нм. Поступово напівпровідникова промисловість перейшла на 0,18мікронну літографію. Досягнення топологічних розмірів, менших за 100 нм, таким чином, неможливе без зменшення довжини хвилі випромінювання через застосування принципово нових джерел.



Рис. 2.5. Схема оптичної системи EUV-літографа

У наш час інтенсивно ведуться дослідження з метою удосконалення технології, що називається *EUV-літографією* (Extreme Ultra Violet) – літографія у спектрі жорсткого ультрафіолету. Вважається, що ця технологія стане гідним послідовником DUV-літографії. Процес виробництва за технологією EUV-літографії забезпечить товщину ліній провідників 0,07 мікрон (70 нм), що приблизно в тисячу разів менша за товщину людського волоска. EUVлітографія є звичайною оптичною літографією, але з використанням випромінювання з довжиною хвилі 11-14 нм та відбивної оптики з фотошаблонами. Оптична система EUV-літографа містить набір дзеркал між джерелом світла і маскою. Набір дзеркал між маскою і заготовкою забезпечує зменшення розміру зображення в 4 рази, що дає змогу малювати лінії зменшені до 70 нм.

Щоб наочно уявити про переваги EUV-літографії, наведемо кілька прикладів:

• EUV-технологія приведе до появи мікропроцесорів, які у 30 разів швидші за існуючі. Процесор з 10 Ггц, наприклад, буде настільки швидким, що за час, за який людина встигає лише моргнути (близько 1/50 секунди), він зможе провести близько 400 млн. обчислень.

• EUV-літографія призначена для розташування на кремнієвій підкладці елементів розміром 0,07 мкм (70 нм) і менших. На одному кристалі солі (з ребром 0,25 мм) може розміститися майже 3600 таких 70-нанометрових елементів.

•Сьогоднішні літографічні установки із застосуванням глибокого ультрафіолетового випромінювання (DUV-машини), використовують джерела світла з довжиною хвилі 248 нм. Довжина хвилі EUV-випромінювання приблизно 13 нм, тобто майже у 20 разів менша. Для порівняння, довжина хвилі видимого світла міститься в діапазоні від 400 до 700 нм.

•Елементи, нанесені за допомогою EUV- і DUV-літографії, приблизно так само відрізняються один від одного, як дві однакові лінії, проведені на папері кульковою ручкою (EUV) і товстим маркером (DUV). Перехід до EUV літографії уможливить перетнути рубіж в 100 нм, залишаючись у рамках традиційної фотолітографії. Однак складна дзеркальна оптика і дорога технологія виготовлення фотошаблонів робить такий підхід надзвичайно дорогим, що є суттєвим недоліком і залишає місце для розробки літографічних процесів, заснованих на інших фізичних принципах.

М'яка літографія. Звичайна фотолітографія прекрасно зарекомендувала себе у випадку, коли необхідно розмістити якомога більшу кількість елементів на маленькій площі напівпровідникового кристала. Однак вона зовсім не підходить для випадків, коли ті ж елементи потрібно розмістити на великій площі, на інших матеріалах або не на плоских поверхнях.

Техніка, що необхідна для розміщення транзисторів на будь-яких поверхнях і матеріалах, названа "м'якою літографією". Вона невимоглива до якості і форми підкладки, а тому її можна застосовувати як для нерівних і гнучких поверхонь, так і навіть для об'ємних фігур.

Як приклад, що демонструє можливості нової технології, дослідники з Іллінойського університету (США) демонструють півсферу, покриту матрицею фоточутливих транзисторів, яка здатна зіграти роль основного елемента для широкоформатного цифрового фотоапарата.

Процес виготовлення відбувається у такий спосіб: спершу на обрану поверхню послідовно наносять тонкі плівки алюмінію, кремнію та нітриду кремнію. Далі поверхня нагрівається і на ній методами зондової мікроскопії "малюють" на поверхні визначену наноструктуру з характерними розмірами в десятки нанометрів. Потім м'яку полімерну матрицю, форма якої штампована наноструктурою, піддають опроміненню для затвердіння.

Мінімальні розміри елементів, створених таким способом, складають приблизно 10 нм, що дає змогу в принципі здійснювати дуже щільний запис, проте продуктивність і надійність не є достатньою.

Безумовно, багато проблем ще чекають свого розв'язку, але вже сьогодні зрозуміло, що на метод м'якої літографії чекає велике майбутнє. Ця технологія порівняно проста і дешева, а тому можна очікувати її широкого застосування в недалекому майбутньому.

2.6. Травлення

Процес видалення опроміненого фоторезисту і діоксидної плівки називається *травленням*. Цей процес необхідний для того, щоб розкрити вікно для доступу до матеріалу основи. Травлення може бути хімічним (вологим) або плазмовим (сухим).

Хімічне (вологе) травлення базується на розчиненні хімічними речовинами не захищених фоторезистерною маскою ділянок зразка. Вологе травлення – ізотропний процес, що приводить до формування малюнка з похили-

ми стінками. При цьому розмір малюнка не може бути меншим за 2 мікрони. Використовувані для вологого травлення хімікати, як правило, токсичні і отруйні.

| Травлення | | | | | | |
|-----------|---------------|----------|--------------------|----------------|------------------------|--|
| Вологе | | Сухе | | | | |
| Занурення | Пульверизація | Плазмове | Реактивно-плазмове | Іонно-плазмове | Активне іонно-плазмове | Радикальне травлення пото- ком нейтральних частинок |

Основні види травлення

У зв'язку з цим більш ефективними є "сухі" методи обробки, засновані на взаємодії газорозрядної плазми з поверхневим шаром матеріалу. Серед "сухих" методів травлення розрізняють такі його види, як плазмове, іоннопроменеве, іонно-хімічне, плазмохімічне та травлення потоком нейтральних частинок.

Результатом процесу травлення є повне видалення матеріалу на ділянках, не захищених фоторезистом.

| Матеріал | Застосування | | | |
|-----------------------------------|--|--|--|--|
| Моно Si | Базові кристали | | | |
| Термічний SiO ₂ | Маска при травленні Si | | | |
| Хімічно осаджена SiO ₂ | Підзапірний діелектрик, ізоляція між шарами | | | |
| Si_3N_4 | Маска в деяких операціях травлення, діелектрик в | | | |
| | структурах з накопиченням заряду | | | |
| Al, Cu, W | Металізація | | | |
| Cr | Фотошаблони | | | |
| Ta, Ti, Mo | Підшар | | | |
| Ta ₂ O ₅ | Діелектрик в структурах накопичення заряду | | | |
| TiN | Підшар | | | |

Таблиця 2.1. Матеріали для яких необхідні процеси травлення

2.7. Технологія "вирощування" інтегральної мікросхеми

Одним з головних досягнень наноелектроніки, в якій знайшли своє відображення процеси епітаксії, літографії та травлення, безсумнівно, є розробка технології "вирощування" інтегральних мікросхем (IMC), яка заслуговує на окрему увагу.

Технологія "вирощування" інтегральної мікросхеми (IMC) відбувається в декілька етапів:

1. Підготовка підкладки. Підкладкою для мікросхеми є напівпровідникова пластина з кристала кремнію (Si) – найбільш розповсюдженого напівпровідника на Землі. Для цієї мети застосовується хімічно чистий кремній, який переплавляється у великі циліндричні заготовки. Після низки додаткових хімічних очищень монокристал кремнію розрізається на тонкі пластини, які у майбутньому послужать підкладкою для виготовлення процесорів.

Очищена кремнієва пластина піддається так званому *оксидуванню* (або *окислюванню*) – впливу на заготовку киснем, що відбувається під впливом високої температури (1000°С). Завдяки цьому на поверхні заготовки утворюється тонкий шар діоксиду кремнію SiO₂. Регулюючи час впливу кисню і температуру кремнієвої підкладки, можна легко сформувати шар оксиду потрібної товщини. Діоксидна плівка відрізняється дуже високою хімічною стійкістю, великою механічною міцністю, і властивостями діелектрика, що забезпечує надійну ізоляцію розташованого під ним кремнію і захищає його від небажаних впливів при подальшій обробці.

2. Якщо деякі області кремнію, які лежать під шаром діоксиду, необхідно піддати подальшій обробці, то шар оксиду необхідно попередньо видалити з відповідних ділянок. Очищення таких ділянок на кремнієвій підкладці виконується за допомогою процесу *літографії*. Метою цього процесу є перенос малюнків з фотошаблонів на поверхню пластини для того, щоб створити на ній необхідні шари.

Для цього на діоксидну плівку наносять шар фоторезисту.



Рис. 2.6. Опромінення фоторезисту через фотошабиси.

3. Третім кроком при створенні ІМС є *експонування* – пластина з накладеним на неї фотошаблоном піддається опроміненню потоком відповідного випромінювання. У результаті експонування фоторезист, що розташований під "вікнами" фотошаблона (прозорими ділянками), засвічується. Після цього і опромінений шар, чия структура і хімічні властивості змінилися під дією випромінювання, і шар діоксиду кремнію, який міститься під ним, можуть бути вилучені за допомогою хімікатів (кожен шар – своїм хімікатом).

4. Наступним кроком є травлення – видалення опроміненого фоторезисту і діоксидної плівки. Цей процес необхідний для того, щоб розкрити вікно для доступу до матеріалу підкладки. Результатом процесу травлення є повне видалення матеріалу на ділянках, не захищених фоторезистом.





3 - натвпровідникова пластина,

5 - опроланена ділянка фоторезисту.



5. Заключним етапом формування мікросхеми є процеси епітаксії, дифузії та металізації.

Епітаксійне нарощування дає змогу створювати атомні шари, рівномірно леговані (введені в кремній) по пластині.

Дифузія є тим процесом, що найчастіше використовують для спрямованої зміни параметрів p- і n-областей пластин, попередньо підготовлених у процесі літографії. Для дифузії в кремній як акцептор додається бор (В), а донори - фосфор (Р) і миш'як (Аs).

Процес дифузії полягає у нагріванні пластини до температури, що не перевищує температуру плавлення і упровадженні всередину пластини домішок (бору, фосфору, миш'яку) у виді іонів з високою енергією.



Рис. 2.8. Вирощування на поверхні пластини епітаксільного n-шару за допомогою дифузії донорних домішок

Процес металізації завершує виготовлення ІМС. У його ході осаджуються тонкі металеві плівки з алюмінію, золота або нікелю, які утворюють електричні з'єднання між активними областями і приладами, розміщеними на кристалі.

Шар металу ще раз піддається методу літографії і травлення, детально описаному вище, у результаті чого від усього металізаційного шару залишаються лише струмопровідні лінії і контактні площадки, які ми можемо спостерігати на будь-якій мікросхемі.

Отже, процес виготовлення мікросхем включає декілька технологічних етапів: очищення, окислювання, літографія, травлення, дифузія, осадження, вимірювання. Очевидно, що для подальшого удосконалення мікроелектроніки, тобто збільшення продуктивності за рахунок зменшення розмірів чіпів (мікросхем), ключовим моментом є саме удосконалення методів літографії.

2.8. Метод скануючої тунельної мікроскопії

На початку XX століття виникла оригінальна ідея вивчати речовину, не збільшуючи досліджувану площу її поверхні, а ніби доторкаючись до неї. Її реалізації допоміг, відкритий на той час, *тунельний ефект*, на підставі якого в 1981 році був створений перший *скануючий тунельний мікроскоп (СТМ)*, що уможливив розглянути атоми на поверхні золота, а потім і монокристалі-чного кремнію. Це стало початком бурхливого розвитку нанотехнологій.

Робочим органом СТМ (зондом) служить струмопровідна металева голка (у перших варіантах використовувався вольфрам або сплав платини).



Рис. 2.9. Схематичне зображення скануючого тунельного мікроскопа

Суть його роботи полягає у тому, що зонд підводиться до досліджуваної поверхні на дуже близьку відстань L (0,5 нм) і, при подачі на нього постійної напруги, між ними виникає тунельний струм.

Тунельний струм залежить від відстані між зондом і зразком за експоненціальним законом. Тому при збільшенні відстані тільки на 0,1 нм тунельний струм I_t зменшуються майже в 10 разів. Це забезпечує високу розді-

льну здатність мікроскопа, що створює можливість дослідження для об'єктів нанометрового формату, оскільки незначні зміни за висотою рельєфу поверхні викликають істотну зміну тунельного струму.

Підтримуючи струм і відстань постійним за допомогою системи стеження, СТМ дає змогу зонду сканувати наноповерхні досліджуваних зразків, переміщаючись над нею по осях X і Y, весь час то опускаючись, то піднімаючись залежно від рельєфу досліджуваної поверхні. Інформація про це переміщення відслідковується комп'ютером, і програмно візуалізується так, щоб дослідник міг побачити на екрані об'єкт із потрібним розширенням (візуальним збільшенням). Існують два варіанти конструкції СТМ залежно від режиму сканування зразків. У режимі постійної висоти вістря голки переміщується в горизонтальній площині над зразком. При цьому змінюється лише тунельний струм. Виходячи з даних про величини тунельного струму, виміряних у кожній точці сканування поверхні зразка, будується образ топографії поверхні.

У режимі постійного струму СТМ для підтримки постійного струму тунелювання задіюється система зворотного зв'язку, шляхом підбору висоти скануючого пристрою над поверхнею взірця в кожній його точці.

У кожного режиму є свої переваги і недоліки. Режим постійної висоти швидший, позаяк системі не доводиться постійно переміщувати скануючий пристрій вгору-вниз, але при цьому методі більш-менш достовірну інформацію можна одержати тільки з відносно гладких поверхонь. У режимі постійного струму можна з високою точністю вимірювати будь-які поверхні, але тоді виміри займають значно більше часу.

Розділ 3. НАНОВИМІРНІ СТРУКТУРИ

3.1. Схема утворення гетероструктури з двовимірним електронним газом

Маса електрона в кристалі *m*, називається ефективною масою і відрізняється від маси вільного електрона m_0 . Вона має зміст параметра зв'язку між енергією і квазіімпульсом і, як правило, у напівпровідниках значно менша від маси вільного електрона. З цієї причини довжина хвилі де Бройля в напівпровідниках велика. Для руху електронів у площині зберігається та ж зонна структура, що й у масивному кристалі. Мінімальна енергія електрона (при *n=1*) не дорівнює нулю у випадку розмірного квантування і збільшується зі зменшенням розміру структури *d* згідно із законом $1/d^2$.

У квантовій фізиці важливим є принцип Паулі, відповідно за якого в стані з однією енергією може бути не більш двох електронів з різними спінами. Тоді якщо в структуру ми яким-небудь чином додаємо електрони, вони будуть розподілятися по станах з різною енергією. Для характеристики електронів у кристалах уводиться поняття густини станів g, що визначається як число станів N в одиничному інтервалі енергій:

$$g(E) = \frac{dN}{dE}.$$
(3.1)

Зокрема, густина станів електронів у двовимірних кристалічних системах визначається формулою:

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2}$$
(3.2)

і не залежить від енергії.

У квазідвовимірних структурах можна виготовити одновимірні канали, які називають квантовими нитками, у яких електрон може рухатися тільки уздовж одного напрямку. При обмеженні руху частинки і в цьому напрямку одержуємо так звані квантові точки, тобто область напівпровідника зі звичайним розміром 5-20 нм в усім трьох напрямках. Такі напівпровідники характеризуються тим, що в них виникають рівні енергії для електрона, подібні до атомних.

Густина електронних станів у квантовій нитці

$$g(E) \sim \frac{1}{\sqrt{E}},$$

а в квантовій точці це просто рівень чи рівні енергії. Саме наявність рівнів енергії, що можуть бути зайняті електронами, робить фізичні властивості напівпровідникових квантових точок багато в чому схожими на властивості атомів.



Рис. 3.1. a – зонна діаграма двох різних напівпровідникових матеріалів (GaAs i Ga₁, _xAl_xAs). E_c – дно зони провідності, E_v – вершина валентної зони, E_g – ширина забороненої зони. Індекси 1 і 2 належать до GaAs i Ga_{1-x}Al_xAs відповідно. Всі енергії відраховуються від рівня енергії електрона у вакуумі; б – профіль дна зони провідності E_c гетеропереходу. ΔE_C – розрив зони провідності, E_0 і E_1 – рівні розмірного квантування. Двовимірний електронний газ в гетеропереході заштрихований. Світлі – іонізовані, темні – неіонізовані домішки.

Двовимірний електроний газ утвориться на плоскій границі контакту двох напівпровідників з різною шириною забороненої зони — так званій гетероструктурі. Розглянемо утворення гетеропереходу на прикладі двох напівпровідників — GaAs і Ga_{1-x}Al_xAs (ширина забороненої зони кристалу Ga₁₋ _xAl_xAs збільшується при збільшенні x). На мал. 3.1, a зображено зонні діаграми двох розділених у просторі напівпровідників різного складу. Енергія електрона у вакуумі обрана як точка відліку. Отже, усередині напівпровідника енергія електрона менша, ніж у вакуумі. Для того, щоб електрон видалити з напівпровідника, необхідно затратити визначену енергію.

Якщо два різні напівпровідники з'єднати, то біля межі поділу середовищ відбувається перерозподіл електричного заряду й утвориться гетероперехід (Рис. 3.1, *б*). Електричне поле, що створене електронами в арсеніді галію та йонізованими домішками алюмінію у твердому розчині арсеніду галію (показані на рис. 3.1, *б* світлими кружками), приводить до вигину зон, і в утвореній квантовій ямі виникають кілька рівнів енергії.

Характерний розмір потенціальної ями гетероструктури у напрямку, що перпендикулярний до гетерограниці, є порядку або менший довжини хвилі де Бройля для електронів у *GaAs*. Тому рух електронів у цьому напрямку квантований. При цьому електрони можуть вільно рухатися уздовж границі гетеропереходу, тобто електронний газ буде двовимірним. Гетероструктура *GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs* є типовою. Ширина забороненої зони E_g у *GaAs* складає 1,52 ев. При додаванні *Al* величина E_g росте. Для стандартної гетероструктури при концентрації алюмінію x = 0,3 різниця заборонених зон складає ~0,4 ев. На границі виникає стрибок потенціалу, ~60% якого припадає на зону провідності і ~40% — на валентну зону.

У наш час створені гетероструктури з різними напівпровідниками і напівпровідниковими сполуками *Ge/Si*, *InAs/GaAs* і т.д.

3.3. Квантові ями і квантові точки

Напівпровідникові нанокристали, тобто кристали з дуже маленькими (близько 10-20 нм) розмірами, одержали в літературі назву квантових точок. Квантовими їх назвали тому, що при настільки малих розмірах в електронів проявляються квантові властивості. Фізичні властивості кристалів дуже малих розмірів можуть принципово відрізнятися від масивних кристалів. Наприклад, речовина з металевими властивостями лише за рахунок зменшення

розмірів може перейти в діелектричний стан. Оскільки в останні роки розроблені методи, що дають змогу одержувати нанокристали багатьох речовин, то зацікавлення ними уже не тільки теоретичне, але й практичне. До того ж зовсім недавно була показана принципова можливість створення приладів на основі нанокристалів – лазерів чи елементів пам'яті з кращими параметрами, ніж ті, що існують. Усе це ще більше підсилило інтерес до кристалів малих розмірів.

Наявність двох гетеропереходів може привести до утворення квантової ями. У такій квантовій ямі виникають рівні енергії заряду. При легуванні напівпровідника ці рівні будуть заповнені електронами, що можуть вільно рухатися лише в площині. Обмеживши рух цих електронів у двох напрямках, що залишилися, можна одержати квантову точку. Для цього існує кілька способів. Найпростіше це зробити розрізавши електронним чи іонним пучком шар напівпровідника, у якому міститься двовимірний електроний газ, на області розміром $d < \lambda X$. Можна використовувати вибіркове травлення поверхні, у результаті якого утворяться острівці — квантові точки. Мінімальний розмір точки d, якого вдається досягти такими методами, зазвичай складає десятки нанометрів. При цьому відстань між рівнями розмірного квантування у таких структурах буде невеликою. Це легко бачити, що енергія обернено пропорційна квадрату d. Сьогодні застосовуються досконаліші методи, що дають змогу одержувати напівпровідникові квантові точки з регульованими розмірами (меншими за нанометр).

3.4. Особливості енергетичного спектра електронних і діркових станів у низьковимірних системах

За останнє десятиліття у фізиці напівпровідників спостерігається різкий поворот інтересів убік гетеросистем низької вимірності. До них належать так звані квантові ями, квантові дроти й квантові точки (рис. 3.2), а також перехідні стани між ними. Виявилося, що, змінюючи розмірність і регулюючи величину квантового обмеження, можна радикальним чином змінювати ене-

ргетичний спектр квазічастинок системи, що сприяє не тільки розв'язку фундаментальних проблем квантової механіки і фізики напівпровідникових кристалів, але й створенню нових напівпровідникових приладів чи оптимізації відомих. Очевидно, що саме низьковимірні гетеросистеми стануть основною матеріальною базою мікроелектроніки й оптоелектроніки нинішнього століття. Винник навіть термін "зонна інженерія". Для позначення спроби штучного створення нових матеріалів із заданою зонною структурою або ж заданим спектром електронних енергетичних рівнів, за аналогією "генної інженерії" у біології.



Рис. 3.2. Екситонне поглинанняі густини електронно-діркового станів у низьковимірних гетеросистемах. Матеріал квантових ям, дротів і точок позначений світлим, бар'єрних шарів між ними – темними лініями

Як з'ясувалося, низька вимірність системи стабілізує екситонні стани, роблячи їх стійкими в набагато більш широкому діапазоні температур і зовнішніх електричних полів. Енергія зв'язку й сила осцилятора екситонних станів у цих системах істотно зростають, сприяючи практичній реалізації екситонних ефектів навіть при кімнатній температурі. Все це сприяло тому, що екситонна спектроскопія виявилася не лише потужним дослідницьким засобом, але й перетворилась на безпосереднє джерело нових ідей і засобів напівпровідникового приладобудування. З'явилися оптичні модулятори, фазообертачі, перемикачі й бістабільні елементи, оптичні транзистори та лазери, що побудовані на властивостях екситонного газу. Ці прилади відрізняються високою чутливістю до керуючого зовнішнього впливу.

Для радикальних змін оптичних властивостей необхідно, щоб енергетичні витрати були порядку екситонної енергії зв'язку. Тоді зміни оптичних постійних будуть досить істотними за величиною, тому що екситонним переходам у гетеросистемах відповідає сила осцилятора, значно більша ніж це мало місце у відповідних масивних кристалах.

Низьковимірними, на відміну від об'ємного (3D, three-dimensional), називають такі гетеросистеми, коли рух носіїв заряду обмежений в одному, двох або всіх трьох вимірах. Відповідно, маємо двовимірні (2D), одновимірні (1D) і нульвимірні (0D) об'єкти. Квантове обмеження реалізується в тих випадках, коли характерна квантова довжина носія заряду (довжина хвилі де Бройля, середня відстань між частинками тощо), стає рівною відповідному фізичному розміру об'єкта або меншою від нього.

У випадку тонкої плівки електрон або дірка міститься в одновимірній потенційній ямі. У цьому напрямку (OZ) рух обмежений і енергія носіїв заряду квантується, утворюючи систему дискретних рівнів. В інших напрямках (XOУ) рух частинок є вільним. Для оцінки середньої відстані між електроном і діркою в екситонному стані досить обчислити борівський радіус (a_{ex}^*) :

$$a_{ex}^* = 0.53 \frac{\varepsilon_0}{\mu}, \stackrel{0}{A},$$

де $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$, ε_0 – статична діелектрична проникність кристала. Умовою виникнення квантових ефектів для екситонних станів, таким чином, є

$$L_z \le a_{ex}^*, \tag{3.3}$$

де *L*_z – ширина квантової ями.

У випадку обмеженості руху об'єкта у двох напрямках, наприклад *z* і *x*, залишається лише один напрямок вільного руху *y*, тоді як у двох інших рух

квантується. У такому випадку маємо квантовий дріт. Умовою утворення квантового дроту є

$$L_{z,x} \le a_{ex}^*. \tag{3.4}$$

I нарешті, якщо обмежені всі три напрямки руху, то це квантова точка. На відміну від математичної, вона може бути відносно великих розмірів і містити в собі багато тисяч атомів. Умовою утворення квантової точки відповідно буде

$$L_{x,y,z} \le a_{ex}^*. \tag{3.5}$$

Створення й широке дослідження низькорозмірних систем стали можливими завдяки успіхам фізики гетеропереходів і розробці прецизійних методів їхнього виготовлення, таких, як, наприклад, молекулярно-пучкова епітаксія. Процес молекулярно-пучкової епітаксії полягає у нанесенні на чисту поверхню підкладки, що орієнтує в умовах надвисокого вакууму шарів напівпровідникових матеріалів, підібраних за принципом кристалофізичної відповідності. При цьому умови росту передбачають детальний контроль in situ параметрів зростаючого шару методами дифракції електронів, растрової електронної мікроскопії, оже-спектроскопії, а також мас-спектроскопічний контроль парціальних змін сполуки залишкових газів або ж внесених випарниками у вакуумне середовище молекулярних компонентів. Установка системи ефузійних джерел (випарників) різних матеріалів уможливлює вирощувати тонкі шари, що чергуються, вхідні до складу гетеропар, а також легуючі добавки, буферні, покривні, стоп-шари й спайсери. Зручним прийомом є синтез твердих розчинів заміщення, період кристалічної решітки яких може служити підгінним параметром, що залежить від співвідношення компонентів, що взаємно замінюються.

Так були вирощені квантові ями й надґратки з багаторазово повторюваними шарами ям і бар'єрів. Товщина шарів при цьому встановлюється з точністю до одного атомного моношару. Далі в принципі з них можуть бути виготовлені квантові дроти й точки фотолітографічними методами, хімічного

або плазмового гравіруванням, а також окислюванням, дифузією або імплантацією нових матеріалів. Однак у випадку 0*D-структур* більш ефективними виявилися методи, засновані на самоорганізації зростаючого шару при відповідним чином підібраних умовах. Відзначимо також, що надалі виявилося можливим успішно застосовувати до створення низькорозмірних структур ще й модифікації інших методів епітаксіального росту, випробуваних у напівпровідниковій технології, таких, як газофазна й рідиннофазна епітаксія тощо.

На нижній частині рис. 3.2 наведено вид функції густини станів $\rho(\varepsilon)$ залежно від енергії. При зниженні розмірності від 3D до 2D коренева залежність заміняється східчастою. В одновимірних системах густина станів є спаданою функцією енергії. Нарешті, у нульвимірних об'єктах густина станів відповідає дельта-функції. І якщо в 2D- і 1D-структурах при збільшенні номера стану хвости попередніх рівнів, перекриваючись, наближають загальну картину до густини станів тривимірного кристалу, то в 0D-випадку суцільне тло густини станів може бути відсутнє до краю іонізації.

Як і в об'ємному випадку, міжзонне поглинання супроводжується утворенням екситонів біля всіх істотних особливостей густини станів. Причому зменшення вимірності системи веде до того, що повне екранування кулонівської взаємодії стає у принципі неможливим, тому виникають кращі умови для зв'язування електронів і дірок в екситони.

3.5. Екситон у квантових ямах

Тонка вільна плівка напівпровідника – це приклад прямокутної потенційної ями, до якої можна застосувати наближення нескінченних бар'єрів. Розв'язок відповідної квантово-механічної задачі добре відомий з підручників і дає такий набір власних енергій і власних функцій:

$$E_{N} = \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}} \left(\frac{\pi N}{L_{z}}\right)^{2} = 13, 6 \frac{m}{m^{*}} \pi^{2} \left(\frac{a_{0}}{L_{z}}\right)^{2} N^{2},$$

$$\varphi(z) = \left(\frac{2}{L_z}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi N z}{L_z}\right).$$

де a_0 – борівський радіус, $a_0 = 0,53$ $\stackrel{0}{A}$, а N = 1, 2, ... – квантове число.

Таким чином, квантові рівні енергії в потенціальній ямі з нескінченними стінками являють собою послідовність дискретних рівнів, що розбігаються (як N^2), їхня енергія пропорційна також $\frac{1}{L_z^2}$. Хвильові функції мають синусоїдальну форму із числом напівперіодів на яму, що відповідає номеру рівня. Врахування скінченності висоти бар'єрів істотно не змінює картини, за винятком деякого проникнення хвильових функцій у бар'єрну область і деформації залежності E(N) при наближенні до енергії бар'єра (Рис. 3.3).



Рис. 3.3. Зміна густини станів (*a*) і енергетичного спектра (б) квазі-2*D*-гетеросистеми при одночасному зменшенні значень ширини ям і бар'єрів. Позначення 3*D* і 2*D* стосуються тривимірної і двовимірної густини станів.

При міжзонному оптичному поглинанні, пов'язаному з переходами з рівнів валентної зони на квантові рівні електрона, у ямі утвориться обмежений або зв'язаний квазідвовимірний екситон. У граничному випадку повної двовимірності, коли $L_z << a_{ex}^*$, енергія зв'язку його основного стану (*n*=1) збільшується до максимального значення $4R_{3D}^*$ (чотири енергії зв'язку об'ємного екситону) і може бути виражена простою формулою:

$$R_{2D}^* = \frac{R_{3D}^*}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2}, \ n = 0, 1, 2, \dots$$

При збільшенні L_z аж до $L_z \approx 10 a_{ex}^*$ енергія зв'язку продовжує залишатися більшою, ніж в об'ємного екситона. Типовий спектр поглинання з багаторазово повторюваними квантовими ямами однакової ширини з відносно широким бар'єром (так називаними Multiple Quantum Wells – MQW) є послідовністю екситоних максимумів, зв'язаних енергіями зв'язку $R_{3D}^* < R^*(N, L_z) < R_{2D}^*$ з відповідними сходами густини станів.

При збільшенні L_z стає можливою ситуація, коли $L_z > a_{e,h}^*$, проте порівняне з радіусом екситона a_{ex}^* (радіус екситона завжди більший за борівські радіуси електрона й дірки, тому що зведена маса електрона й дірки завжди менша за маси окремих частинок). Тоді можливе квантування екситона як цілого, але у виразі для E_N ефективну масу потрібно замінити на трансляційну масу екситону $M = m_e^* + m_h^*$. Характерна структура властиво екситонного квантування спостерігається аж до розмірів $L_z >> a_{ex}^*$, коли ефекти квантування електронів і дірок окремо вже несуттєві.

3.6. Екситон у надгратках і надструктурах

Надграткою (superlattice – SL) називають гетеросистему з багаторазово повторюваними квантовими ямами, бар'єри якої тунельно-прозорі для електронів (дірок). Як правило, це вимагає товщини бар'єрів порядку нанометрів. У випадку надгратки спостерігається деякою мірою повернення до тривимірної поведінки. Рух носіїв струму стає можливим як уздовж, так і упоперек шарів. Однак зонна структура системи повністю перебудовується й більше не еквівалентна ні структурі рівнів квантової ями, ні структурі вихідних матеріалів ям і бар'єрів. З'являються нові заборонені й дозволені міні-зони, ширина дозволених міні-зон росте, а заборонених – спадає зі зменшенням ширини бар'єрів і збільшенням енергії й номера рівня N (див. Рис. 3.3). Цікаво, що густина станів також втрачає простий східчастий характер. Кожна міні-зона дозволених станів має власний закон дисперсії й відповідну власну ефективну масу електронів або дірок. До всіх особливостей густини станів у міні-зонах може бути прив'язаний власний екситон. При цьому його положення не обмежується низькоенергетичним краєм кожної міні-зони, але може вибирати й іншу особливу точку зонної структури. Енергія зв'язку екситону у надгратці на краях міні-зон зменшується щодо відповідних квантових ям з непрозорим бар'єром.

У новій системі електронних станів, що характеризують надґратку, роль домішок і дефектів відіграють будь-які порушення періодичної послідовності шарів. Зокрема, періодично повторюваний збій у вигляді розширеного бар'єра може приводити до виникнення донорного рівня в забороненій мінізоні, що може перебувати на місці колишнього суцільного спектра дозволених станів матеріалу бар'єра. Ефект може бути істотно посилений, якщо розміри елементів надструктури підібрані так, що задовольняються брегівські умови відбиття у відрізках надґратки, що оточують бар'єр. Це приводить до сильної локалізації електронної хвильової функції в надбар'єрній області, як показано на рис. 3.4.



Рис. 3.4. Фрагмент надгратки з періодично повторюваним розширеним бар'єром (у центрі), створеної на базі гетеросистеми In_xGa_{1-x}As/GaAs з дотриманням умови брегівської локалізації електронних хвильових функцій над бар'єром

3.7. Екситон у квантових дротах і квантових точках

Системи з вимірністю, що менша двох, вивчені недостатньо, а одержувані експериментально зразки таких систем досить далекі від досконалості. Особливо це справедливо для одновимірних систем, виготовлення яких практично неминуче поєднане із застосуванням літографічних процесів для організації мікромалюнка в площині зразка – латерального обмеження. Однак роздільної здатності сучасної мікролітографії, за винятком окремих випадків, явно недостатньо для надійного виконання умови (3.3) по осі *х*.

Густина станів в одновимірній системі (див. рис. 3.2.) має вигляд кореневої залежності, що спадає при збільшенні енергії за законом $(E - E_N)^{-\frac{1}{2}}$, де $E_N \in N$ -й рівень розмірного квантування квантового дроту. До кожного з екстремумів наведеної густини станів E_N прив'язана своя серія екситонних станів. Енергія зв'язку основного стану повністю одномірного екситону, коли $L_{z,x} =$ 0, нескінченна. Відповідна структура одномірного атома водню досліджена ще в 1959 році Р. Лудоном. Однак реальна ситуація є, як правило, квазіодновимірною. У результаті енергія зв'язку основного стану екситону залишається скінченною й логарифмічно росте при збільшенні відношення $a^*/_{L_{z,x}}$. Екситон у квантових дротах подібний до екситону в об'ємному кристалі при наявності сильного, але кінцевого магнітного поля, притім роль поперечного розміру (радіуса) дроту відіграє магнітна довжина $\lambda = \left(\frac{e\hbar}{cB}\right)^{\frac{1}{2}}$. У цьому випадку всі збуджені стани двічі вироджені через наявність інверсії (-z, +z) в системі для будь-якої точки на осі z, прийнятої за центр ваги мас або за нуль відліку.



Рис. 3.5. Окрема квантова точка з CdS у матриці із силікатного скла (*a*), зображення отримане електронним мікроскопом високого роздільною здатністю, темні смуги розділяють атомні моношари, *б* – модель пірамідальної квантової крапки InAs у матриці з GaAs

Першим видом об'єктів, які виявилися продуктивними при дослідженні квантових точок, є мікрокристали напівпровідникових сполук типу А^{II}В^{VI} у скловидній матриці. Мікрокристали практично сферичної форми утворяться в результаті кристалізації відповідних компонентів, уведених у силікатне скло, при його остиганні й перекристалізації у процесі наступної термообробки (Рис. 3.5). Природно, вони не можуть бути точно однакового радіуса. Розкид радіусів створює неоднорідне розширення спектральних ліній оптично-го пропускання, відбиття або люмінесценції. Якщо вдається спостерігати

спектр люмінесценції дуже маленької ділянки зразка, що містить мінімальну кількість мікрокристалів (а саме така можливість надається сучасної близькопольовою оптичною мікроскопією), широка лінія, утворена сукупністю мікрокристалів з розкидом радіусів δa , змінюється вузькими лініями, що характерні для атомної спектроскопії.

Досліджуючи енергетичний спектр квантової точки, варто розрізняти два граничні випадки: *a* << *a*^{*}_{ex} і *a* >> *a*^{*}_{ex}. У першому спектр визначається головним чином спектром найбільш легкої квазічастинки, як правило, електрона. Без врахування кулонівської взаємодії електрона й дірки енергія частинки дорівнює:

$$E_{l,n} = E_g + \frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \varphi_{l,n}^2,$$

де $\varphi_{l,n}$ – універсальний набір чисел, що є коренями функцій Бесселя, а l і n – квантові числа, що задають собою орбітальний момент кількості руху й порядковий номер кореня функції Бесселя відповідно. Для міжзонних переходів між першими рівнями розмірного квантування електронів і дірок край поглинання визначається оберненою зведеною масою електрона й дірки й обернено пропорційний квадрату радіуса мікрокристала:

$$E_{0,1} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \,.$$

Врахування кулонівської взаємодії зміщує лінії у червоний бік, але відповідна цьому зсуву обернена залежність від *а* має лінійний характер:

$$\delta E = \frac{C_1 e^2}{\kappa_0 a}$$

Природно, що екситоні поправки до положень спектральних ліній стають несуттєвими при дуже малих радіусах мікрокристалів. Водночає при здійсненні другої умови $a >> a_{ex}^*$ стає малим короткохвильовий зсув ліній розмірного квантування й найбільш помітні зміни в спектрах можуть відбутися

через квантування екситона як цілого, коли для основного стану *n*=1 справедливо

$$E_{0,1} = E_g - R^* + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ma^2}$$

На рис. 3.6. показаний типовий вид спектрів поглинання мікрокристалами *CdS* різного середнього радіуса. Слід зазначити, що при тій самій кількості напівпровідникового компонента в склі, край поглинання зміщується більш, ніж на 1 ев через зменшення радіуса *a* від 320 Å до 12 Å. Тільки за рахунок розмірного квантування колір скляного бруска з мікрокристалами CdS змінюється від повністю прозорого (12 Å) до темно-червоного (320 Å).

Досить недавно був розроблений і почав швидко розвиватися ще один метод створення наноструктур із напівпровідниковими квантовими точками – синтез мікрокристалів з колоїдних систем при використанні поверхнево активних речовин. Метод виявився ефективним при синтезі 0*D* систем із широкого кола матеріалів $A^{II}B^{VI}$, $A^{III}B^{V}$, A^{IV} і низки інших, притому ще й забезпечує рекордно малий розкид діаметрів мікрокристалів (<5%) і високу їхню концентрацію.



Рис. 3.6. Спектри оптичної густини *D* зразків, що містять мікрокристали CdS різного радіуса: *I* – 320, *2* – 23, *3* – 15, і *4* – 12 Å. На вставці – енергетична схема переходів

Квантові точки в діелектричній матриці практично не можуть бути використані в процесах, пов'язаних із транспортом носіїв заряду. Тому особливий інтерес викликали повідомлення про можливості створення квантових точок у напівпровідниковому середовищі в результаті використання різних процесів самоорганізації кристалів у процесі епітаксіального росту. Ці процеси засновані на властивостях субмоношарових покриттів, гетероструктур з невеликою, але певною різницею сталих ґратки. Вона приводить до виникнення пружнонапруженого стану, і до розбіжності швидкостей латерального й вертикального росту. Утворені квантові точки, в результаті, уже не мають форми кулі, а, як правило, кристалізуються у вигляді простих геометричних фігур. Наприклад, у випадку вирощування мікрокристалів InAs у матриці з GaAs (див. Рис. 3.5.) квантові точки мають вигляд чотиригранної піраміди. На основі таких наноструктур удалося вперше створити експериментальні напівпровідникові інжекційні лазери, що демонструють потенційну можливість виготовлення приладів, які мають винятково низькі пороги генерації при відсутності залежності порога від робочої температури. Саме так виглядають теоретичні переваги лазерів на квантових точках.

3.8. Екситонні прилади, в яких використано властивості екситонів у низьковимірних системах

Узагальнюючи викладене вище, можна побачити, що екситонні стани істотні для всяких міжзонних оптичних процесів, що відбуваються у низковимірних системах. Це насамперед відбувається через неможливість повного екранування в них кулонівської взаємодії електрона й дірки, що народжуються у результаті поглинання кванта світла. Крім того, енергія зв'язку й сила осцилятора екситонних станів збільшуються зі зниженням розмірності системи. При цьому варто мати на увазі, що енергія розмірного квантування носіїв заряду має (незалежно від розмірності системи) вигляд:

$$E = E_g + \frac{C_i \hbar^2}{2ma^2},$$

де *C_i* – деякий коефіцієнт, що враховує конкретну форму об'єкта, і *a* – розмір. Енергія зв'язку екситонів залежить від розміру згідно з формулою:

$$R^* = \frac{C_j e^2}{\kappa_0 a}$$

тобто обернено пропорційна першій степені розміру. Тому в області дуже малих розмірів квантових точок енергію *R*^{*} можна не враховувати.

Врахування кулонівської взаємодії приводить лише до певного довгохвильового зсуву спектральних ліній. При цьому пропадає також і структура властиво екситонних збуджених станів, переходячи до атомоподібного спектру енергетичних станів квантової точки. Відповідно виникає питання про можливість застосування екситонної концепції в тому вигляді, коли екситон сам собою розглядається як гігантський атом. Виникають також проблеми, пов'язані із можливістю застосування при обчисленні енергії зв'язку статичної діелектричної проникності кристала й навіть ефективної маси. Зрозуміло, що діелектрична проникність – поняття макроскопічне, а ефективна маса квазічастинки або ж наближення "ефективної маси" взагалі є властивістю кристала. І природно виникає питання: починаючи з якої мінімальної кількості атомів або постійних ґраток ці поняття можуть бути використані? Досвід експериментального дослідження дає дивну відповідь: вони застосовні вже починаючи з декількох постійних ґраток, тобто при таких радіусах мікрокристалів, як *a*=10 Å! Більш того, при дуже малих розмірах набирають силу й стають істотними такі відносно слабкі явища, як обмінна взаємодія, енергія якої обернено пропорційна кубу розміру мікрокристала. Більше істотними стають також процеси утворення екситонних молекул: біекситонів, тріонів тошо.

У низьковимірних системах, як уже згадувалося, збільшується сила осцилятора, але що виявляється набагато істотніше, радикально збільшується можливий робочий діапазон зовнішніх електричних полів, за допомогою яких здійснюється керування приладом. Це відбувається за рахунок значного збільшення енергії іонізації. Так, для модуляційних приладів виявився винятково зручним ефект Штарка у квантових ямах, який одержав назву гігантського ефекту Штарка, тому що електрон і дірка у квазідвовимірного екситона є притиснутими розтягуючим електричним полем до двох протилежних стінок ями й можуть бути іонізовані лише після тунелювання крізь бар'єрний шар. У зв'язку з тими ж стабілізуючими властивостями екситона в низьковимірних гетероструктурах, робочу температуру навколишнього середовища також виявилося можливим істотно підвищити аж до кімнатної і вище. Що ж стосується сильної температурної залежності положення екситонних ліній, яке залежить від ширини заборонної зони, то тут важливою є інтеграція випромінюючих світлоелементів з елементами, що здійснюють обробку інформації світловими променями. Це часто виявляється можливим у межах однієї й тієї ж багатошарової гетероструктури.

Так почала розвиватися галузь науки й техніки, що за аналогією з електронікою можна було б назвати екситонікою і в якій роль середовища, що здійснює різні операції з обробки інформації, замість електронного газу здійснює екситонний газ. Ще більш вражаючими могли б виявитися можливості, закладені в екситонних поляритонах, тому що максимально мислимі швидкості поширення сигналів тут могли б поєднуватися з надзвичайно низькими енергетичними витратами на керування приладом.

3.9. Вуглецеві нанотрубки. Матеріали для комп'ютерів XXI століття

Вуглецеві нанотрубки — своєрідні циліндричні молекули діаметром приблизно від половини нанометра і довжиною до декількох мікрометрів. Ці полімерні системи вперше виявлені в 1991 році як побічні продукти синтезу фулерену С₆₀. Проте вже зараз на основі вуглецевих нанотрубок створюються електронні пристрої нанометрового (молекулярного) розміру. Очікується, що

в недалекому майбутньому вони замінять елементи аналогічного призначення в електронних схемах різних приладів, у тому числі сучасних комп'ютерів. У результаті буде досягнута теоретична межа щільності запису інформації (порядку одного біта на молекулу) і обчислювальні машини отримають практично необмежену пам'ять і швидкодію, що лімітується тільки часом проходження сигналу через прилад.



Рис. 3.7. Побудова моделі нанотрубки: а) графітовий шар і стрічка; б) нанотрубка

Одностінна вуглецева нанотрубка, яка не містить дефектів, представляє собою згорнуту у вигляді циліндра стрічку з розміщенням атомів за типом графіту (Рис. 3.7). Щоб задати просторове розташування атомів у нанотрубці, відкладемо на графітовому шарі вектор $C = (na_1, ma_2)$, де a_1 і a_2 – базисні вектори, а n і m – цілі числа. Через точки початку і кінця цього вектора проведемо перпендикулярно до нього дві прямі — L і L' та виріжемо із шару нескінченну стрічку уздовж цих ліній. Згорнемо стрічку в циліндр так, щоб прямі L і L' з'єднались. У такого циліндра L буде твірною, а довжина кола дорівнюватиме модулю вектора C. Одержимо нанотрубку (n, m). У загальному випадку нанотрубки мають гвинтову вісь симетрії (тоді говорять, що вони хіральні). Нехіральними виявляються нанотрубки (n, 0) і (n, n), у яких вугле-

цеві шестикутники орієнтовані паралельно і перпендикулярно до осі циліндра відповідно.



Рис. 3.8. Електронна структура нехіральних трубок

Метали і напівпровідники. Для створення електронних пристроїв та їхнього об'єднання у складні прилади потрібні напівпровідники і матеріали з високою електропровідністю. Нанотрубки з різними значеннями індексів (*n*, m) — це полімери різної будови, тому вони повинні володіти різними електричними властивостями. Залежності електричних властивостей нанотрубок від геометричних параметрів були проаналізовані на основі квантовохімічних розрахунків їхньої зонної структури. Атоми вуглецю в нанотрубках з'єднанні σ - та π -зв'язками: три з чотирьох валентних електронів кожного вуглецю утворять локалізовані σ-зв'язки, а четвертий – бере участь в утворенні делокалізованого л-зв'язку (як, наприклад, у бензолі). Ці л-електрони слабозв'язані зі своїми атомами, тому саме вони можуть брати участь у переносі заряду. Висока (металічна) провідність може виникати, якщо зайняті *π*-стани не відділені від вакантних π^* - станів (Рис. 3.8). У іншому випадку нанотрубка — напівпровідник. Розрахунки показують, що металевим типом зонної структури володіють ті нанотрубки, для яких різниця *n* - *m* кратна трьом, — тобто третина. Треба було цілих шість років, щоб квантово-хімічний прогноз підтвердився експериментально. Методами скануючої тунельної мікроскопії для ізольованих нанотрубок — фактично для об'єктів молекулярного розміру —

вдалося визначити атомну структуру (геометрію — за топографічними зображеннями) і електропровідність (за залежністю струму через нанотрубку від напруги).



Рис. 3.9. Вплив дефекту семикутник-п'ятикутник на геометрію нанотрубки (а) і енергію рухливих електронів (б)

Діод. Циліндричні невигнуті нанотрубки утворяться з повторюваних вуглецевих шестикутників. Якщо вуглецевий шестикутник замінити, наприклад, на п'ятикутник, семикутник чи на два такі дефекти, як показано на рис. 3.9, нанотрубка зігнеться. З різних сторін щодо вигину орієнтація вуглецевих шестикутників буде різною. Але зі зміною орієнтації шестикутників стосовно осі нанотрубки міняється її електронний спектр, положення рівня Фермі, ширина оптичної щілини і т.п. Зокрема, для наведеного на рис. 3.9. випадку, ліворуч щодо вигину нанотрубка повинна бути металевою, а праворуч — напівпровідниковою. Таким чином, ця вигнута нанотрубка повинна бути молекулярним гетеропереходом метал-напівпровідник. Якщо розглядати дані частини нанотрубки ізольовано, з різних боків щодо вигину електрони, то вони на рівні Фермі мають різну енергію. У єдиній системі виграш в енергії приводить до перетікання заряду й утворення потенціального бар'єра. Електричний струм у такому переході тече тільки в тому випадку, якщо електрони переміщаються з області нанотрубки з більшою енергією Фермі в область з меншою енергією. Іншими словами, струм може текти тільки в одному напрямку. «Одностороннє» проходження струму через нанотрубку з вигином використовується для створення діода – одного з основних елементів електронних схем (Рис. 3.10).



Рис. 3.10. Діод на вигнутій нанотрубці. Нанотрубка лежить на непровідній (кварцовій) підкладці в контакті з двома надтонкими проводами (а); вольт-амперна характеристика для такої системи (б)

Польовий транзистор. На основі напівпровідникової чи металевої нанотрубки вдалося зробити польові транзистори, що працюють при кімнатній (у першому випадку) і наднизькій (у другому) температурі. Польові транзистори (тріоди) — електронні пристрої, на перенесення заряду через який впливає зовнішнє (керуюче) електричне поле, що використовується в підсилювачах електричного сигналу, перемикачах тощо.

У транзисторі на напівпровідниковій нанотрубці електричне поле керує концентрацією носіїв у зонах делокалізованих станів (Рис. 3.11). У напівпровідниковій нанотрубці стани валентної зони відділені від станів зони провідності енергетичною щілиною — забороненою зоною. Через наявність цієї щілини при звичайних умовах концентрація носіїв у зонах мала і нанотрубка має високий опір. При подачі на третій електрод (затвор) електричного потенціалу U в області нанотрубки виникає електричне поле і вигин енергетичних зон змінюється. Через зсув краю валентної зони щодо рівня Фермі концентрація дірок у валентній зоні (і відповідно електропровідність) зростає за екс-

понентним законом. Якщо потенціал затвора близько шести вольт, то концентрація дірок досягає максимального значення, опір — мінімального, а нанотрубка стає металевою.



Рис. 3.11. Польовий транзистор на напівпровідниковій нанотрубці. Нанотрубка лежить на непровідній (кварцовій) підкладці в контакті з двома надтонкими проводами. Третім електродом використовується кремнієвий шар (а); залежність провідності в ланцюзі від потенціалу затвора (б)

При створенні польового транзистора на металевій нанотрубці використовуються ефекти тунельного переносу електронів окремих молекулярних орбіталей. Через скінчену довжину нанотрубки її електронний спектр, строго кажучи, є не неперервним, як показано на рис. 3.8, а – дискретним. При довжині нанотрубки ~ 1 мкм, відстань між окремими рівнями ~ 1 меВ (Рис. 3.12).



Рис. 3.12. Схема переносу електронів за участю одного дискретного рівня в польовому транзисторі на металевій нанотрубці (а) і залежність провідності в ланцюзі від потенціалу затвора (б)

Такий характер розщеплення рівнів не позначається на електропровідності нанотрубки при кімнатній температурі, але цілком визначає її електричні властивості при температурі, що нижча за 1 К. Провідність металевої на-
нотрубки в таких умовах зумовлена тим, що електрони перескакують (тунелюють) з верхнього заповненого рівня катода на провідний дискретний рівень нанотрубки, а потім з нанотрубки на нижній незаповнений рівень анода. У межах нанотрубки тунелювання електрона відбувається дуже легко (практично без розсіювання і без втрат енергії) за рахунок π -електронних станів, делокалізованих на всю довжину нанотрубки. Висока металева провідність в електричному колі можлива у випадку, якщо так само легко здійснюється перенесення електронів між нанотрубкою і електродами. В експерименті це може бути досягнуто точнішим приведенням рівнів Фермі електродів до енергії провідного рівня нанотрубки. Увімкнення зовнішнього електричного поля при подачі електричного потенціалу на третій електрод зміщує електронний рівень нанотрубки, і її опір зростає.

Дисплей. Дисплей — це перше, що ми бачимо, коли підходимо до комп'ютера. Виявилося, що вуглецеві нанотрубки можуть бути корисні також і для створення дисплеїв нового покоління.



Рис. 3.13. Схема дисплея, у якому використовується автоелектронна емісія з нанотрубок

Розглянемо вуглецеву нанотрубку, закріплену на катоді й орієнтовану в напрямку анода (Рис. 3.13). Якщо на електроди подати напругу відповідної полярності, нанотрубка заряджається негативно, лінії електричного поля поблизу зарядженої нанотрубки викривляються і в околиці вістря нанотрубки напруженість поля стає величезною і зростає зі зменшенням товщини нанотрубки. Таке локальне поле може виривати електрони з нанотрубки. Під дією зовнішнього поля електрони, що летять, формуються в пучок. Цей ефект, що називається автоелектронною емісією, крім дисплеїв, використовується для створення випрямлячів.

В обидвох випадках беруть два плоскі електроди. Один з них покривають шаром з вуглецевих нанотрубок, орієнтованих перпендикулярно до другого електрода. Якщо на електроди подається така напруга, що нанотрубка заряджається негативно, то з нанотрубки на другий електрод випромінюється пучок електронів: струм у системі є. При іншій полярності нанотрубка заряджається позитивно, електронна емісія з неї неможлива і струму у системі не буде.

Щоб з допомогою автоелектронної емісії одержати зображення, на аноді закріплюють люмінофор. Електронний удар збуджує молекули люмінофора, що потім переходять в основний стан, випромінюючи фотони. Наприклад, при використанні як люмінофор сульфіду цинку з добавками міді й алюмінію спостерігається зелене світіння, а при додаванні срібла — синє. Червоний колір одержують за допомогою легованого європієм оксиду ітрію.

Електромеханічний резонанс. Перетворення електричних коливань на механічні використовують при створенні різних пристроїв, наприклад електроакустичних головок. Для виникнення коливань нанотрубки під дією електричного поля її закріплюють на одному з двох електродів під кутом до другого електрода. При подачі на електроди електричної напруги трубка заряджається і за рахунок електростатичного притягання відхиляється до другого електрода. Якщо на електроди подати змінну напругу, частота якої збігається з частотою власних коливань нанотрубки, що залежать від її товщини і довжини, виникнуть механічні коливання нанотрубки.

Квантові провідники. Теоретичні й експериментальні дослідження електричних і магнітних властивостей нанотрубок знайшли низки ефектів,

що вказують на квантову природу перенесення заряду в цих молекулярних дротах і можуть бути використані в електронних пристроях.

Провідність звичайного дроту обернено пропорційна його довжині і прямо пропорційна поперечному перерізу, а у випадку нанотрубки вона не залежить ні від її довжини, ні від товщини і дорівнює кванту провідності $2e^2/h$ (12.9 кОм⁻¹) — граничному значенню провідності, що відповідає вільному перенесенню делокалізованих електронів по всій довжині провідника. При звичайній температурі значення густини струму (10⁷ $A \cdot cm^{-2}$) на два порядки перевищує досягнуту зараз густину струму в надпровідниках.

Нанотрубка, що знаходиться при температурі близько 1 К і контактує з двома надпровідниковими електродами, сама стає надпровідником. Цей ефект зв'язаний з тим, що куперівські електронні пари, які утворяться у надпровідникових електродах, не розпадаються при проходженні через нанотрубку.

При низьких температурах на металевих нанотрубках спостерігали східчасте зростання струму (квантування провідності) при збільшенні напруги *V*, прикладеної до нанотрубки. Кожен стрибок струму відповідає появі чергового делокалізованого рівня електрона в проміжку між рівнями Фермі катода й анода (Рис. 3.12, а).

Нанотрубки володіють яскраво вираженим магнітоопором: електропровідність сильно залежить від індукції магнітного поля. Якщо прикласти зовнішнє поле в напрямку осі нанотрубки, спостерігаються значні осциляції електропровідності. Коливальний характер залежності електропровідності від потоку магнітної індукції через нанотрубку пояснюється ефектом Ааронова-Бома (залежністю фази електронної хвилі від магнітної індукції). У випадку перпендикулярної орієнтації поля спостерігається зростання електропровідності, що відбиває модифікацію енергетичного спектра — утворення рівня Ландау в точці перетинання валентної зони і зони провідності, що дає ріст густини станів на рівні Фермі.

Хімічна модифікація. Можливості використання нанотрубок у молекулярній електроніці зростають при переході від чисто вуглецевих до хімічно модифікованих нанотрубок. Наприклад, завдяки наявності циліндричної порожнини усередину вуглецевих нанотрубок вдається розмістити різні елементи, включаючи важкі метали. Можливе також додавання аддендів (наприклад, атомів фтору) на зовнішню поверхню трубки. Крім вуглецевих, тепер уміють отримувати і бор-азотні нанотрубки. В усіх цих випадках повинні отримуватися матеріали з новими і доки ще експериментально не вивченими властивостями.



Рис. 3.14. а) – легована металом вуглецева нанотрубка всередині циліндричного потенціального бар'єра. І — область постійного міжатомного потенціалу, ІІ — область атомного потенціалу. (При розрахунках вважається, що атомні сфери дотикаються одна до одної.); б) Структура металізованої нанотрубки

Металізовані нанотрубки. Розрахунки властивості електронів металізованих нанотрубок вимагали розробки нового квантово-хімічного методу, названого методом лінеаризованих приєднаних циліндричних хвиль. У цьому методі робиться припущення, що система розміщена в непроникному потенціальному бар'єрі циліндричної форми, причому в області атомів електронний потенціал сферично симетричний (практично збігається з атомним), а в міжатомному просторі постійний (Рис. 3.14). Тоді електронний спектр системи визначається вільним рухом електронів у міжатомному просторі і розсіянням на атомних центрах.

Як показують розрахунки, впровадження атомів перехідних металів у вуглецеві нанотрубки повинно приводити до різкого зростання провідності як напівпровідникових нанотрубок (за рахунок появи в забороненій зоні електронних станів металу), так і металевих (за рахунок підвищення щільності станів поблизу рівня Ферми). Усі бор-азотні нанотрубки, на відміну від вуглецевих, незалежно від їхньої геометрії повинні бути широкозоними напівпровідниками. Розміщення у них атомів перехідних металів і утворення структур, що зображено на рис. 3.14 б., повинно приводити до формування металевої зонної структури в системі. Вихідна однотипність електронних властивостей бор-азотних нанотрубок може бути корисна в технологічному плані, тому що полегшує виготовлення нанодротів з більш відтвореними характеристиками. Якщо одну половину напівпровідникової нанотрубки заповнити металом, а другу залишити без змін, ми знову одержимо молекулярний гетероперехід метал-напівпровідника. У випадку бор-азотної нанотрубки це буде гетероперехід широкозоний напівпровідник – метал, на основі якого можна конструювати нанодіоди й інші елементи, здатні функціонувати при високих температурах.

Отже, шляхом хімічної модифікації різних ділянок однієї нанотрубки будуть створюватися складні багатофункціональні електронні пристрої, подібні до інтегральних схем сучасних комп'ютерів. Можна сказати, що тут знайшла друге життя ідея легування напівпровідникових матеріалів, без якої не існувала б сучасна електроніка. Володіючи настільки перспективним об'єктом, як нанотрубки, ми маємо всі підстави з оптимізмом дивитися в майбутнє технології й очікувати нових якісних проривів у цій сфері.

Розділ 4. ОДНОЕЛЕКТРОНІКА

4.1. Проблеми одноелектроніки

Останнім часом у зв'язку з наближенням до меж мініатюризації класичими мікроелектронних приладів зріс інтерес до приладів, що можуть забезпечити подальший прогрес електроніки. Одним з можливих шляхів такого прогресу є створення приладів, у яких контролюється переміщення визначеної кількості електронів, зокрема, одного. Створення так званих одноелектронних приладів відкриває привабливі перспективи цифрової одноелектроніки, у якій біт інформації буде представлений одним електроном. У таких приладах переміщення електрона відбувається за допомогою тунелювання. Позаяк час тунелювання електрона досить малий – теоретична межа швидкодії одноелектронних приладів дуже висока. З іншого боку, робота, необхідна для переміщення одного електрона, також мала, отже, енергоспоживання одноелектроніки К.К. Лихарєва теоретична межа швидкодії одноелектронного приладу складає сотні ТГц (терагерц), а енергоспоживання вання одного приладу складає сотні ТГц (терагерц), а

Явище одноелектронного тунелюваня вперше було передбачено в 1986 р. К.К. Лихарєвим. Через кілька років після його першої статті з'явилося багато робіт, у яких описано експериментальне спостереження ефектів, передбачених ним. Таким чином, теорія блискуче підтвердилася експериментально.

Через особливості, що будуть детально проаналізовані нижче, перші експерименти проводилися при дуже низьких температурах (кілька мілікельвінів). У наш час одноелектронні ефекти спостерігаються і при кімнатній температурі. Це здійснено лише при використанні скануючого тунельного мікроскопа (СТМ). Приладів, що працюють при кімнатній температурі, дотепер не створено. Стійко функціонуючі прилади з відтворюваними характеристиками існують лише при температурі 4.2 К. Однак на відміну від ситуації з високотемпературною надпровідністю, де неясно, чи можлива надпровідність

при кімнатній температурі, одноелектронні ефекти при кімнатній температурі рі вже спостерігалися. Проблема полягає у створенні працездатних приладів.

4.2. Теоретичні основи одноелектроніки

Крім К.К. Лихарєва, теоретичні питання розглядаються також у статті М. Тинхама, а також в оглядах Л. Гирлігса і ван Хоутена. Розглянемо міркування Лихарєва докладно.

Нехай маємо тунельний перехід утворений двома близько розташованими металевими електродами й ізолюючим шаром між ними. Позначимо ємність такої системи через *C*. Тоді енергія системи задається формулою:

$$E = \frac{Q^2}{2C},\tag{4.1}$$

де *Q* – заряд на обкладках конденсатора. Оскільки заряд кратний заряду електрона, то мінімальна величина зміни енергії *∆Е* дорівнює:

$$\Delta E = \frac{e^2}{2C}.\tag{4.2}$$

Для проявлення ефектів, які зв'язані з дискретною природою зарядів, необхідно, щоб мінімальна зміна енергії була більшою за температурні флуктуації, тобто

$$\Delta E >> kT , \qquad (4.3)$$

де *k*– постійна Больцмана, а *T* – температура. Крім цього, потрібно, щоб дана зміна перевищувала енергію квантових флуктуацій, величину яких можна оцінити з наступних співвідношень:

$$\Delta E \tau >> h, \quad \tau = RC \longrightarrow \Delta E >> \frac{h}{RC},$$
(4.4)

де $R = max(R_i; R_s)$ – опір переходу чи витоку, що шунтує перехід. Виходячи з цього виразу можна записати, що

$$R \gg R_o, \tag{4.5}$$

де $R_Q = \frac{h}{4e^2} = 6,45 \ \kappa O_M$ – квантовий опір.

Важливим припущенням теорії одноелектронного тунелюваня є висновок, що початковий заряд Q_0 на тунельному переході може бути відмінний від 0. Більше того, може приймати значення не кратні цілому числу електронів. Даний факт пояснюється тим, що цей заряд може створюватися поляризацією прилеглих електронів, заряджених домішок тощо, і в такий спосіб приймати будь-яке значення. Запишемо заряд Q з рівняння (4.1) в наступному вигляді

$$Q = Q_0 \pm ne. \tag{4.6}$$

Можна побачити, що якщо Q_0 в межах від $-\frac{e_2}{2}$ до $\frac{e_2}{2}$, то додавання чи віднімання цілого числа електронів буде збільшувати загальну енергію системи, тобто є енергетично невигідним. Зазначений висновок ілюструється на Рис. 4.1.



Рис. 4.1 Залежність зарядової енергії переходу від заряду. Стрілками показане додавання (віднімання) одного електрона

З нього видно, що якщо заряд хоча б небагато менший за значення *e*/2, то додавання чи віднімання одного електрона (штрихпунктирні лінії) приводить до збільшення загальної енергії. Якщо ж заряд перевищує значення *e*/2, то вигідним стає тунелювання електрона через діелектрик. При напрузі, що знаходиться в межах від $-e'_{2C}$ до $+e'_{2C}$ струм через тунельний перехід протікати не буде, бо напруга на конденсаторі $V = Q'_C$. Тобто, для того, щоб забезпечити тунелювання через перехід, необхідно перебороти силу кулонівського відштовхування електронів. Ефект відсутності струму при прикладанні напруги в зазначених межах був названий ефектом кулонівської блокади. Таким чином, кулонівська блокада — це явище відсутності струму при прикладанні напруги до тунельного переходу через неможливість тунелювання електронів внаслідок їх кулонівського відштовхування. Напруга, яку необхідно прикласти до переходу для подолання кулонівської блокади, іноді називають також напругою відсічення. Логічно ввести термін «напруга кулонівської блокади» і позначення V_{KБ}:



Рис 4.2. Одноелектронне тунелювання в умовах кулонівської блокади

$$V_{KE} = \frac{e}{2C} \,. \tag{4.7}$$

Розглянемо процес протікання струму через одиночний тунельний перехід. Струм є неперервною величиною, тому заряд на одній стороні переходу накопичується поступово. При досягненні величини e/2 відбувається тунелювання одного електрона через перехід, і процес повторюється. Це аналогічно падінню крапель з нещільно закритого крана: при досягненні деякої критичної маси крапля відривається від крана і починається утворення наступної (така аналогія була запропонована Лихарєвим.) Заряд одного електрона e накопичується при струмі I за час t: $e = I \times t$, потім електрон тунелює через перехід. Зрозуміло, що процес повторюється періодично з частотою

$$f = \frac{I}{e},\tag{4.8}$$

де *I* – струм через перехід. Такі осциляції були названі одноелектронними тунельними (Single Electron Tunneling-SET) осциляціями.

Потрібно ще раз зазначити, що спостереження кулонівської блокади можливе лише при виконанні умов (4.3) і (4.5). Ці умови, особливо температурні (4.3), накладають досить жорсткі обмеження на конструкції одноелектронних приладів. З (4.2) і (4.3) можна одержати значення ємності, але необхідне для спостереження кулонівської блокади при даній температурі T. Підставивши чисельні значення e и k, одержимо, що для спостереження ефекту необхідно, щоб

$$C \ll \frac{e^2}{2kT}.\tag{4.9}$$

При T=4.2 К маємо C<<2·10⁻¹⁶Ф, а для T =77 К і T=300 К – відповідно C<<10⁻¹⁷ і C<<3·10⁻¹⁸. Таким чином, для роботи приладів при високих температурах (вищих за 77 К) необхідно, щоб ємність системи досягала $10^{-18} \Phi - 10^{-19} \Phi$ чи 0,1 а $\Phi - 1$ а Φ (аттофарада).

На рис. 4.3. показана еквівалентна схема розглянутої системи.



Рис. 4.3. Еквівалентна схема тунельного переходу

Рис. 4.4. Еквівалентна схема конструкції з двома переходами

Прямокутником позначений тунельний перехід. Таке графічне позначення для кулонівського тунельного переходу є загальноприйнятим. Перехід характеризується опором R і ємністю C, C' – ємність контактів. До переходу прикладена напруга <math>V. З наведеної схеми видно, що якщо паразитна ємність C' більша від ємності переходу, то ємність системи буде визначатися шунтуючою ємністю C'. У реальних приладах не вдається одержати шунтуючу ємність, меншу за 10^{-15} Ф, що як мінімум на два порядки більша від необхідної для спостереження одноелектронного тунелювання навіть при температурах рідкого гелію. Отже, спостереження одноелектронного тунелювання у системі з одним переходом при сьогоднішньому розвитку технології є проблематичним.

Для розв'язку заданої проблеми була запропонована конструкція з двох тунельних переходів, що під'єднанні послідовно. Еквівалентна схема цієї конструкції зображена на рис. 4.4. Як видно з рисунка, ємність контактів уже не шунтує ємність кожного переходу. Загальну електростатичну енергію такої системи можна записати у вигляді



Рис. 4.5 Вольт-амперна характеристика подвійного переходу при 20 мк, для затворної напруги 0 (суцільна крива) і e/2C (штрихова крива). Точкові криві відповідають теоретичним розрахункам для симетричного переходу з такими ж ємністю й опором

$$E = \frac{Q_1^2}{2C_1} + \frac{Q_2^2}{2C_2}, \qquad (4.10)$$

де 1,2 — індекси переходів. Фізично така конструкція є малою провідною частинкою, яка відділена тунельними переходами від контактів, тому $Q_1=Q_2=Q$ – заряд, що міститься на частинці. Тоді (4.10) можна переписати у вигляді, що цілком аналогічний формулі (4.1). Лише замість ємності *C* буде фігурувати ємність $C_{\Sigma} = C_1 + C_2$,

тому що C₁ і C₂ під'єднанні паралельно. Таким чином, справедливими залишаються формули (4.2), (4.4) і (4.8) при заміні в них C на C_{Σ} . У формулах (4.3) і (4.4) необхідно замінити R на max(R_1, R_2). Характерна вольтамперна характеристика двоперехідної системи із симетричними переходами зображена на рис. 4.5.

4.3. Кулонівські східці

Розглянемо двоперехідну систему з несиметричними переходами. Темп тунелювання через 1 перехід можна записати у вигляді:

$$\Gamma_1 = \frac{\delta E_1}{e^2 R_1},\tag{4.11}$$

де $\delta E_1 = eV_1 - \frac{e^2}{2C_1}$ зміна енергії на 1-му переході при падінні на ньому напруги $V_1 > V_{KE}$. Підставивши δE_1 в (4.11), одержимо:

$$\Gamma_1 = \frac{V_1}{eR_1} - \frac{1}{2R_1C_1} \,. \tag{4.12}$$

Аналогічний вираз можна записати для Γ_2 . З (4.12) видно, що для інших *R* і *C* 2-го переходу, одержимо, що $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$ будуть різнитися і темпи тунелювання. Якщо *R* і *C* переходів рівні, то при збільшенні напруги буде відбуватися плавний ріст струму, тому що кількість електронів, які перейшли на кулонівський острів, буде дорівнювати кількості тих, що пішли.

При несиметричності переходів на острівці буде існувати заряд n електронів. При збільшенні напруги до значення, яке достатнє для закидання на острівець n+1-го електрона, спочатку буде відбуватися різке збільшення струму, зумовлене переходом з високим темпом тунелювання. Подальше збільшення струму, спричинене переходом з низьким темпом тунелювання, буде повільним доти, доки на острівець не зможе потрапити n+2-й електрон. Таким чином, хоча струм через систему протікає неперервно, у кожен момент часу на острівці буде існувати визначена кількість електронів, що залежить від прикладеної напруги. У результаті ВАХ двоперехідної системи має східчастий вигляд, який називають "кулонівськими східцями". Сходинки ку-

лонівських східців будуть тим яскравіше виражені, чим несиметричніші переходи, а при симетрії переходів, тобто при рівності RC, сходинки зникають. Сімейство кулонівських східців, розраховане К.К. Лихарєвим для різних значень Q₀, показано на рис. 4.6. Як уже відзначалося вище, заряд Q у рівнянні (4.1) має вигляд

$$Q = Q_0 - ne$$

де n – ціле число електронів на кулонівському острові. Заряд Q_0 має поляризаційну природу, тому розташовуючи поруч з кулонівським островом третій електрод – затворний, Q₀ можна неперервно, пропорційно до затворної напруги змінювати.



Рис. 4.6 Розрахункова ВАХ схеми, показа- Рис. 4.7. Залежність напруги на квантовій нього заряду (G₁<<G₂, C₁=2*C₂)

ної на рис. 4.4 для різних значень зовніш- точці при постійному струмі через неї *I*=30 рА у залежності від напруги на затворі

Отже, при неперевній зміні Q₀, періодично буде виконуватися умова кулонівської блокади, що графічно показано на рис. 4.1. При зміні затворної напруги періодично буде виникати кулонівська блокада, а залежність струму через точку (чи напруги на ній при постійному струмі) буде мати осцилюючий характер. Приклад таких осциляцій (напруга на точці при постійному струмі через неї залежно від затворної напруги) показано на рис. 4.7

4.4. Одноелектронні транзистори

Візьмемо для визначеності сферичний нанокристал. Помістимо його в середовище з діелектричною проникністю ε . Його ємність буде $C = \varepsilon R$, а потенціал U = q/C, де q – електричний заряд. Для нанокристала діаметром R у кілька нанометрів величина ємності складає приблизно 10^{-18} Ф. Якщо помістити в нього один електрон (заряд 1,6•10⁻¹⁹ Кл), то його потенціал зміниться на ~0,1 В і збільшується пропорційно 1/R. Цього поля цілком достатньо, щоб завадити руху інших електронів. Схематичне зображення транзистора, де нанокристал CdSe ϵ активним елементом, подано на рис. 4.8. Зазвичай на приготовлену структуру осаджуються нанокристали, і один з них стає активним елементом, як показано на рис. 4.8. Прилад виготовляється на кремнієвій підкладці, на яку можна подати напругу V_g для зміни положення рівня енергії в нанокристалі. Підкладка відділена шаром окису кремнію SiO₂ від золотих електродів, на які висаджені нанокристали. Один з нанокристалів замикає електроди. Опір такого приладу, як правило, близький до 10 МОм.



Рис. 4.8. Схематичне зображення одноелектронного транзистора з нанокристалом CdSe (активний елемент)

На структурі з одиночною квантовою точкою експериментально добре демонструються атомні властивості квантових точок. Якщо прикласти невелику (кілька мілівольт) напругу V між електродами, то при певній напрузі V_g (див. рис. 4.8) електрон може потрапити в нанокристал. Електрон потрапив у квантову точку, якщо його енергія зрівняється з енергією рівня нанокристалу.

Число електронів у квантовій точці можна змінювати по одному. При цьому спостерігається сплеск струму, що складає 10^{-12} А. При збільшенні V_g знову відбудеться сплеск струму. Кількість таких сплесків залежить від числа рівнів розмірного квантування й у принципі визначається розмірами нанокристала. Описаний прилад на сьогодні добре працює лише при дуже низьких температурах.



Рис. 4.9. Залежність струму від напруги при послідовному по одному заповненні електронами квантової точки. Числа біля піків – кількість електронів

На рис. 4.9 наведено залежність струму, що проходить через квантову точку, від напруги V_g, яка змінює положення рівня енергії в точці. Кожен пік відповідає проходженню одного електрона. Спостерігаються дві істотні особливості: відстані між піками не рівні і величини піків різні. Величини піків визначають енергію. Найбільша енергія відповідає двом і шести електронам, як в атомі при заповненні електронами оболонки. Нагадаємо, що в атомі цілком заповненим електронним оболонкам відповідає число електронів два (атом гелію) або вісім (атом неону), але у квантовій точці для заповнення всіх станів двох рівнів необхідно мати шість електронів. Взаємодія електронів приводить до того, що їхня енергія (положення рівня) залежить від числа електронів, які міститься на рівнях розмірного квантування. Це є причиною зміни відстані між піками на рис. 4.9. Без взаємодії рівні розташувалися б на однаковій відстані. З'явилися вже повідомлення про створення одноелектронної пам'яті, що працює при кімнатній температурі. Прилад заснований на транзисторі, у якому один електрон, що проник у нанокристал, запирає провідність вузького каналу транзистора.

4.5. Класифікація одноелектронних пристроїв

*I. На основі виділення характерних активних областей приладів розрі*зняються наступні класи одноелектронних структур.

1) Однотунельні прилади. Такі структури містять тільки один тунельний перехід. Прикладом може служити одноелектронний діод, що містить pn-перехід з виродженим газом носіїв заряду, або одноелектронний бокс, у якому тунельний перехід приєднаний до джерела напруги через конденсатор.

2) Ланцюжок тунельних переходів. До цього класу відносяться структури, що містять два й більше тунельні переходи в активній області, які з'єднані послідовно. Один з найбільш вивчених приладів, що належить до цього класу – одноелектронний транзистор. Він містить два тунельних переходи, що відокремлюють дуже малий «острівець» напівпровідника від областей джерела й стоку. Більшість інших відомих у цей час одноелектронних приладів відносяться до цього класу: «насос», модулятор, одноелектронна пам'ять тощо.

<u>3) Матриці тунельних переходів.</u> Структури цього класу містять в активній області послідовні й паралельні з'єднання тунельних переходів у площині. Прикладом такої структури може бути гранульований мікроперемикач.

<u>4) Масиви тунельних переходів.</u> Такі структури містять послідовні й паралельні з'єднання тунельних переходів у різних вимірах.

Кожному з відзначених класів може бути поставлена у відповідність певна розмірність, а саме: однотунельним приладам — нульвимірний елемент (0D); ланцюжкам тунельних переходів — одновимірний масив (1D); матрицям — двовимірний (2D) і масивам тунельних переходів — тривимірний масив елементів (3D).

Кожний з відзначених класів структур (відповідної розмірності) може бути представлений певним видом принципової структурної схеми. Наведемо структурні схеми приладів, що стосуються перерахованих класів.

1) Бокс (однотунельний прилад). Структурна схема цього приладу відповідає нульвимірній розмірності 0D (Рис. 4.10). Як острівець виступає проміжний електрод між тунельним переходом і конденсатором затвора.

2) Транзистор (ланцюжок тунельних переходів) містить два тунельних переходи, з'єднані послідовно, і острівець між ними. Керування струмом через структуру здійснюється за допомогою затвора. На рис. 4.10 представлений один з варіантів принципових структурних схем цього приладу. Відповідна розмірність схеми — 1D. Існують і інші варіанти принципових структурних схем одноелектронного транзистора. Ці схеми відрізняються розташуванням острівця й затвора щодо джерела й стоку, а також конфігурацією затвора. Острівець може перебувати як у площині джерела й стоку, так і вище або нижче цієї площини. Конфігурація затвора може бути різною. Одна з конфігурацій, яка часто використовується в одноелектронних структурах – розщеплений затвор. Затвор може розташовуватися як у площині острівця (збоку від нього), так і зверху (знизу) острівця, безпосередньо над (під) ним або збоку від нього. У реальному транзисторі кількість затворів може бути різною, причому в одному приладі можуть використовуватися затвори різної конфігурації й з різним розташуванням щодо острівця.



Рис. 4.10. Принципові структурні схеми деяких одноелектронних структур

3) Принципова структурна схема для «багатоострівного» ланцюжка тунельних переходів відрізняється від схеми транзистора кількістю острівців (Рис. 4.10). Так само як і для транзистора, розташування острівців щодо джерела й стоку, а також конфігурація, кількість і розташування затворів можуть бути різними.

4) Мікроперемикач (матриця тунельних переходів) — принципова структурна схема цього приладу наведена на рис. 4.10 і відповідає розмірності 2D. Схема містить двовимірний масив острівців. Керування струмом через структуру здійснюється затвором, розташованим над острівцями (на схемі він не показаний).

II. Умовно (тому що звичайно одноелектронні структури складаються з різних матеріалів) можна виділити наступні види одноелектронних структур за матеріалами острівця (острівців).

1) Металеві. До цього виду відносяться плівкові структури, у яких металеві острівці розділені тунельними бар'єрами у вигляді діелектричних шарів, структури на основі гранульованих плівок, на основі металевих колоїдних частинок тощо. У таких структурах має місце обмеження тривимірного електронного газу в острівцях.

2) Напівпровідникові. Прикладом таких структур можуть бути, наприклад, прилади на основі наступних гетероструктур: GaAs/AlGaAs, GaAs з блегованим шаром, AlGaAs/InGaAs/GaAs тощо. У цих структурах здійснюється обмеження двовимірного електронного газу (ДЕГ) у малі острівці різними методами: у результаті прикладання певних зсувів до затворів, шляхом використання електронно-променевої літографії й травлення структури, при використанні іонно-променевої імплантації Ga тощо. До цього виду також ставляться кремнієві одноелектронні структури: на основі МОП польового транзистора; структури, отримані методом осадження нанорозмірних кремнієвих кристалів; структури, вирощені на підкладці кремнії-на-ізоляторі; структури на основі δ-легованого SiGe тощо.

<u>3) Діелектричні.</u> У цьому випадку діелектричні острівці повинні бути розділені шарами з меншою проникністю в порівнянні з матеріалом острівців. У цей час прикладів виготовлення приладів цього виду немає.

<u>4) Органічні.</u> Прикладом такої структури може служити, наприклад, транзистор на основі плівки із суміші стеаринової кислоти й карбонатових кластерів. Останні виступають як острівці.

5) Композиційні. У цьому випадку острівці виготовлені з композиційного матеріалу або з різних матеріалів. До цього виду можна віднести структури, які не підходять до жодного з раніше виділених видів одноелектронних структур.

Розділ 5. КВАНТОВИЙ КОМП'ЮТЕР 5.1. Класичні й квантові прилади

Головні технічні досягнення XX століття пов'язані з тим, що вдалося зрозуміти квантові закони будови матерії. Лазерна техніка заснована на знанні квантових спектрів електронів у газах, напівпровідниках і діелектриках. Квантова теорія зонної структури спектрів електронів у напівпровідниках служить базисом фізики транзисторів. Атомна енергетика побудована на розумінні квантових законів будови атомного ядра.

Хоча функціонування лазерів і транзисторів засновано на використанні квантових властивостей матерії, ці прилади, проте, найчастіше працюють у класичному режимі. Дійсно, струми електронів і напруги на електродах транзисторів є класичними величинами, отриманими в результаті усереднення по великому ансамблі часток. Аналогічно, когерентне лазерне випромінювання описується законами класичної електродинаміки.

"Класичність" лазерного випромінювання забезпечується наявністю великого ансамблю квантів лазерного випромінювання. При переході в режим одиночних фотонів (одноатомні лазери) лазер стає квантовим приладом у тому розумінні, що не тільки його функціонування засноване на квантових законах, але і його випромінювання являє собою квантовий об'єкт, наприклад одиночний фотон. Транзистор в одноелектронному режимі може стати квантовим приладом, якщо динаміка електрона описується квантовим рівнянням Шредінгера (так званий балістичний режим транзистора).

Таким чином, той самий прилад може працювати як у класичному, так і у квантовому режимі. Будемо вважати поняття "класичний прилад" і "прилад, що працює в класичному режимі", тотожними. Функціонування класичного приладу описується рівняннями класичної фізики для класичних змінних.

Під квантовим приладом будемо розуміти прилад, що працює у квантовому режимі. Квантовий режим означає, що динаміка приладу описується рівнянням Шредінгера для хвильової функції. Аргументами хвильової функції виступають квантові змінні (координати, імпульси, спіни частинок). Хви-

льова функція квантової системи має квантову когерентність у тім звичайному змісті, що вона здатна до прояву явищ інтерференції при додаванні різних компонентів хвильової функції. Властивість когерентності хвильової функції, що описує квантовий прилад, є його найважливішою відмітною рисою. Термін "квантовий прилад" ми використаємо як скорочений варіант терміна "квантово-когерентний прилад"¹.

Дотепер всі машини, що використовувались людиною в практичній діяльності, були класичними. Проте технічну революцію XX століття в інформатиці й енергетиці правомірно назвати першою квантовою революцією, настільки тісно вона пов'язана із квантовою фізикою. Уявимо собі тепер, що ми перебороли технологічні й інші труднощі, що коштують на шляху створення квантово-когерентних приладів, і створили нове покоління машин і технічних систем, що забезпечують використання квантових технологій у практичній діяльності. Це було б здійсненням другої квантової революції.

Закони класичної й квантової фізики мають принципові розходження. Тому можна сподіватись, що квантово-когерентні прилади й квантові технології будуть мати принципові відмінності від класичних приладів і технологій того ж призначення. Було б важливо із практичної точки зору, якби відмінності квантових приладів і технологій від класичних аналогів означали їх "переваги". Іншими словами, квантова техніка й технології повинні допомогти перебороти встановлені для класичної техніки "межі" і обмеження.

Теоретичний аналіз і експерименти демонструють наявність саме таких можливостей. Можливо, наприклад, перебороти дифракційну межу роздільної здатності у квантовій оптичній мікроскопії й квантовій оптичній літографії, побудувати "абсолютно секретні" квантові лінії зв'язку (квантова криптографія). У квантовій метрології можливе збільшення чутливості інтерференційних приладів на кілька порядків величини. Квантові комп'ютери мають істотні переваги в порівнянні із класичними комп'ютерами й можуть забезпе-

¹ Тут виникає необхідність пояснити зміст терміна "прилад квантової електроніки". Цей термін не еквівалентний терміну "квантовий прилад". Як показано вище, прилад квантової електроніки (лазер) може бути як класичним приладом (класичний режим), так і квантовим (квантово-когерентний режим).

чити розв'язок завдань, що вважаються "не розв'язуваними" на класичних комп'ютерах. Створення квантових комп'ютерів пов'язане з подоланням як технологічних труднощів, так і обмежень, пов'язаних з декогеренізацією станів квантового комп'ютера.

Бурхливий ріст інтересу до експериментів по квантовій динаміці частинок в останній чверті XX століття пов'язаний з появою ряду принципово нових експериментальних методик, що дають можливість утримувати окремі атоми, іони, електрони, охолоджувати їх до наднизьких температур (аж до рівня нанокельвіна), переміщати їх і, головне, управляти їхньою квантовою динамікою. Методи втримання заряджених частинок в електромагнітних пастках дозволили збільшити час утримання до багатьох тижнів, охолоджувати частинки до наднизьких температур за допомогою лазерних методів охолодження, досліджувати їхні спектри в умовах максимальної ізоляції з метою створення еталонів частоти й часу.

У пастках Пауля були здійснені стани речовини, що називаються одномірними іонними кристалами. У них ланцюжок іонів утримується разом із зовнішніми статичними й змінними електричними полями від розсіювання, обумовленого кулонівським відштовхуванням іонів. Поля можна вибрати так, щоб рівноважна відстань між іонами становила кілька мікрометрів, що дозволяє впливати на кожний іон окремо, наприклад сфальцьованим лазерним променем, керувати квантовою еволюцією стану іона. Така структура служить популярною моделлю для експериментів по створенню одного із прототипів квантового комп'ютера. При створенні цієї моделі використані досягнення техніки надвисокого вакууму, оригінальних електричних пасток, лазерного охолодження, лазерного керування квантовою динамікою.

Схожий одномірний ланцюжок атомів фосфору ³¹Р може бути занурено в безспіновий діелектричний кристал кремнію ²⁸Si, охолоджений до температур порядку 1 мК. Квантовою динамікою ядерного й електронного спінів атомів ³¹Р можна управляти методами імпульсного ядерного й електронного магнітного резонансу. Селективний доступ до окремого атома досягається

настроюванням його резонансних частот шляхом керування електронною структурою атома електричними полями на наноелектродах. Для побудови такої структури необхідно розвивати й використати методи так званих нанотехнологій з атомною роздільною здатністю. Інші пропозиції по створенню елементів квантових комп'ютерів на основі твердого тіла засновані на фізиці низькорозмірних електронних систем у напівпровідниках – двовимірного електронного газу, електронів у квантових дротах і квантових точках. Ці структури виготовляються методами молекулярної епітаксії й нанолітографії.

5.2. Алгоритми: класи їхньої складності

Щоб розв'язати завдання, комп'ютер, класичний або квантовий, виконує певну послідовність операцій (інструкцій). Опис цієї послідовності операцій називається алгоритмом розв'язку завдання. Завдання характеризується розмірністю n, яка рівна, наприклад, числу розрядів двійкового числа, над яким виконується алгоритм. Алгоритм реалізується за деякою схемою операцій N_n , що залежить від n схема N_{n+l} виходить із N_n на основі простих правил.

У теорії складності алгоритмів для класичних комп'ютерів прийнято розділяти алгоритми на ефективні й неефективні. Алгоритм ставиться до класу ефективних, якщо схема N_n складається з поліноміального числа операцій $O(n^d)$, де d = const, n - розмірність завдання. Час виконання ефективного алгоритму зростає з розміром завдання поліномінально: $t_n \sim n^d$. У цьому випадку використовуваним для розв'язку завдання ресурсом є час роботи комп'ютера. До інших ресурсів ставляться обсяг пам'яті комп'ютера й (у випадку квантового комп'ютера) точність виконання операцій. Ефективний алгоритм повинен використати поліноміальну кількість ресурсів, що є обмеженими. Ефективні алгоритми називаються також поліноміальними (клас Р).

Ефективним алгоритмам класу Р протиставляються неефективні, потребуючі експоненціально більших ресурсів (часу, пам'яті, точності). Наприклад, якщо $t_n \sim 2^n$, алгоритм зараховується до неефективного. Прикладом завдання, для якого не знайдено ефективного алгоритму розв'язку на класич-

ному комп'ютері, є завдання про обчислення простих множників великих *n*-розрядних чисел (завдання про факторизацію чисел)².

В 1994 р. Шор побудував алгоритм розв'язку цієї задачі на квантовому комп'ютері, що виявився поліноміальної складності: необхідне число операцій $O(n^2 log_2(log_2(n) log_2(\varepsilon^{-1})))$, де ε - імовірність помилкового результату обчислень. Результат Шора був сенсаційним. Він спростовував так звану тезу (емпіричний закон) Черча-Тьюринга: всі комп'ютери еквівалентні в тому розумінні, що перехід від одного комп'ютера до іншого не змінює класу складності завдання. Теза була сформульована для безлічі класичних комп'ютерів. Теза порушується, якщо безліч включає квантові комп'ютери.

Результат не виявився несподіваним для фізиків. Інформація не є тільки математичним поняттям. Вона має фізичного носія: кодується, зберігається, обробляється, передається, записується, стирається шляхом зміни стану носія інформації. Інформація фізична. Наявність глибокого зв'язку між фізикою й інформацією виявляється при зіставленні термодинамічної ентропії у фізиці й інформаційній ентропії Шеннона в теорії інформації: вони збігаються з точністю до постійного множника.

Принципові розходження класичних і квантових законів фізики обумовлюють і принципові розходження між класичною й квантовою інформацією, а також методів їхньої обробки. Фізична теорія інформації містить у собі класичну й квантову теорії інформації, а в більш широкому змісті (із включенням до складу поняття відповідних технічних засобів) класичну й квантову інформатику. До чудових досягнень класичної теорії інформації ставиться розв'язок парадокса з демоном Максвелла, що порушує другий закон термодинаміки. Парадокс зникає, якщо врахувати властивості процесу стирання інформації: стирання 1 біта інформації супроводжується витратою енергії $kT \cdot \ln(2)$ і зростанням ентропії на $k \cdot \ln(2)$ (принцип Ландауэра, 1961).

² Доказ того, що ефективний алгоритм цього завдання не існує, не знайдено.

5.3. Квабіти: властивості і математичний опис станів

5.3.1. Біти й квабіти

Словами "біт" і "квабіт" позначають як одиниці класичної й квантової інформації, так і класичні й квантові системи, що є носіями 1 біта (квабіта) інформації.

У сучасних класичних комп'ютерах існують біти пам'яті, що зберігають інформацію, і керовані біти в "схемах", що обробляють інформацію. У магнітній пам'яті ЕОМ бітом є намагнічена область магнітної плівки: двом напрямкам намагніченості відповідають значення "0" і "1" біт інформації. Перемикання "0" ^ "1" або "1" ^ "0" вимагає подолання енергетичного бар'єра між двома станами намагніченої плівки; саме наявність бар'єра забезпечує надійність зберігання інформації.

В оперативній пам'яті ЕОМ носієм інформації є тригерна транзисторна схема. В описаних комірках пам'яті стани "0" і "1" розділені енергетичним бар'єром. Більше того, стану з мінімальною енергією є атракторами, до яких система еволюціонує з безлічі станів, що оточують атрактор. Надійність зберігання інформації в класичних комп'ютерах забезпечується наявністю енергетичного бар'єра, що розділяє два атрактора, що представляє стани "0" і "1".



Рис. 5.1. Схема класичного інвертора на двох польових транзисторах (а) і передавальна характеристика інвертора (б). Стани "0" і "1" на вході (F_m) і виході (F_{out}) кодуються значеннями електричної напруги

Прикладом керованого біта, використовуваного в системах обробки інформації в ЕОМ (процесорах), є інвертор, побудований на двох транзисторах (Рис. 5.1). В інверторі вхідна напруга V_{in} "керує" напругою V_{out} на виході: якщо V_{in} відповідає значенню "0" ("1"), те V_{out} – "1" ("0"). Інвертор виконує логічну операцію НЕ (NOT). При цьому використовується нелінійне функціональне співвідношення

$$V_{out} = f(V_{in}), \tag{5.1}$$

обумовлене властивостями транзисторів і їхніх зв'язків у схемі.

Базовим елементом квантового комп'ютера (носієм квантової інформації) є квантовий біт – квабіт. У системах квантового зв'язку інформація передається шляхом фізичного переносу квабіта – носія інформації або методом телепортації квантового стану квабіта.



Рис. 5.2. Схема квантового біта – квабіта. Логічні стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ квабіта відповідають власним функціям енергії спіна I=1/2 або проекції I_z у постійному магнітному полі *B*

У якості квабіта може бути обрана будь-яка квантова система із двома станами, що характеризується ортонормованими хвильовими функціями $|\varphi_0\rangle$ і $|\varphi_1\rangle$. Зручним прикладом квабіта є ядерний (або електронний) спін I=1/2, що у постійному зовнішньому магнітному полі *В* має два рівні енергії:

$$E_0 = -\frac{1}{2}\hbar\gamma B, \quad E_1 = \frac{1}{2}\hbar\gamma B \tag{5.2}$$

відповідним напрямкам спіна уздовж поля або проти поля (Рис. 5.2). Хвильові функції

$$|\varphi_0\rangle = \left|I_z = \frac{1}{2}\right\rangle \qquad \left|\varphi_1\rangle = \left|I_z = -\frac{1}{2}\right\rangle$$
(5.3)

є власними функціями оператора повної енергії спіна в магнітному полі В:

$$H = -I_z \hbar \gamma B \,. \tag{5.4}$$

Є й інші варіанти вибору станів квабіта. В інших популярних реалізаціях станами квабіта вибирають орбітальні стани електрона у квантових ямах або квантових точках. Стану "0" і "1" електрон у квантових точках можуть бути розділені потенціальним бар'єром, як у реалізації класичного біта. Проте у квантовому випадку стан "1" зберігає нестійкість стосовно розпаду "1" → "0" завдяки можливості тунельного переходу крізь бар'єр. Керування динамікою квабіта виконується лазерними імпульсами через збуджені рівні енергії електрона.

Великий інтерес викликають реалізації квабітів з використанням надпровідникових структур. У зарядовому надпровідниковому квабіті станам $|0\rangle$ і $|1\rangle$ відповідають відсутність і наявність заряду однієї куперовській парі на металевій надпровідній квантовій точці. Станам $|0\rangle$ і $|1\rangle$ квабіта в надпровідниковому кільці з переходами Джозефсона в магнітному полі відповідають надпровідникові струми в протилежних напрямках.

Велика кількість експериментів виконана на квабіті – одиночному фотоні. Будь-які два стани фотона з ортогональними поляризаціями можуть бути вибрані як стани $|0\rangle$ і $|1\rangle$ квабіта. Можливий також вибір двох фотонних станів, що розрізняються фазою π . Системи з фотонного й атомного квабітів у резонаторі становлять базисну систему для експериментів у розділі квантової оптики, що називається резонаторною квантовою електродинамікою (cavity QED).

5.3.2. Квантові біти, квантові логічні елементи і квантові мережі

Стани квантового комп'ютера формуються зі станів окремих, що у певному сенсі не взаємодіють між собою, двостанових квантових систем, званих квантовими бітами (qubits), які далі будемо скорочено називати квабітами. Для опису станів квабітів у гільбертовому просторі використовують спінорне зображення

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix}.$$
(5.5)

Низка n-квабітів утворює n-квабітовий регістр, стани якого лежать у гільбертовому просторі, що є тензорним добутком n гільбертових просторів окремих квабітів

$$H^{[n]} = H_1 \otimes H_2 \otimes \dots \otimes H_n \,. \tag{5.6}$$

Відповідні спінорні базиси також є тензорним добутком, наприклад,

$$|00\rangle = |0\rangle|0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\begin{bmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\\0\\0\\0 \end{bmatrix},$$
(5.7)

$$|01\rangle = |0\rangle|1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\begin{bmatrix} 1\\0\\0\\1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{bmatrix},$$
(5.8)

$$|10\rangle = |1\rangle|0\rangle = |1\rangle\otimes|0\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\begin{bmatrix}1\\0\\1\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\1\begin{bmatrix}0\end{bmatrix}\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},$$
(5.9)

$$|11\rangle = |1\rangle|1\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\begin{bmatrix}0\\1\\1 \end{bmatrix} \\ 1\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\\0\\0\\1 \end{bmatrix}.$$
(5.10)

Зрозуміло, що n-квабітовий регістр може зображати всі натуральні числа від 0 ($|0...0\rangle_n$) до $2^n - 1$ ($|1...1\rangle_n$) (як і відповідний класичний регістр).

$$\mathbf{x} \leftrightarrow |\mathbf{x}\rangle \equiv |\mathbf{x}_{n-1}\mathbf{x}_{n-2}\dots\mathbf{x}_{2}\mathbf{x}_{1}\mathbf{x}_{0}\rangle \equiv |\mathbf{x}_{n-1}\rangle \otimes |\mathbf{x}_{n-2}\rangle \otimes \dots \otimes |\mathbf{x}_{1}\rangle \otimes |\mathbf{x}_{0}\rangle, \quad \mathbf{x}_{j} = \{0,1\}.$$
(5.11)

Арифметичним операціям із цими числами (за mod 2ⁿ) відповідають зміни станів окремих квабітів квантового регістру, які здійснюються під впливом певних фізичних чинників (як правило — електро-магнетних полів). Такі фізичні пристрої називаються квантовими логічними елементами (quantum gates), для скорочення будемо позначати їх КЛЕ. КЛЕ реалізують ширший клас операцій, ніж операції алгебри Буля. Дія КЛЕ на квантовий регістр у гільбертовому просторі його станів описується унітарними операторами.

Розгляньмо спочатку найпростіші КЛЕ: одноквабітові перетворення Адамара \hat{H} і зміни фази $\hat{\Phi}$, унітарні оператори яких у спінорному базисі зображаються матрицями 2×2

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \hat{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$
(5.12)

З означення перетворення Адамара легко встановити його дію

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \ \hat{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle),$$
 (5.13)

або

$$\hat{H}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + (-1)^{x} |1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i\pi x} |1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{y=0}^{1} e^{i\pi xy} |y\rangle,$$
(5.14)

де $x, y = \{0, 1\}$. Розгляньмо тепер одночасну дію операторів Адамара на кожен квабіт квантового регістру, що перебуває в стані $|0 \dots 0\rangle_n$.

$$\hat{H}^{[n]}|0...0\rangle = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \left(\left(0 \right) + \left| 1 \right\rangle \right) ... \left(0 \right) + \left| 1 \right\rangle \right) = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \sum_{x_{n-1}=0}^{1} ... \sum_{x_{1}=0}^{1} \sum_{x_{0}=0}^{1} \left| x_{n-1} x_{n-2} ... x_{2} x_{1} x_{0} \right\rangle = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \sum_{x} \left| x \right\rangle, \quad (5.15)$$

Як бачимо, дія п одноквабітових операторів Адамара на кожен із квабітів п-квабітового регістру перевела останній у стан, що є суперпозицією 2^n станів, кожен з яких визначає натуральне число з відрізку $0...2^n - 1$.Тобто такий стан відображає одночасно всі числа з відрізку $0...2^n - 1$ з однаковою амплітудою. Ця властивість квантових регістрів називається квантовим паралелізмом і є найважливішою з тих, що визначають надефективність квантових процесорів. Класичні комп'ютери такої властивості не мають, оскільки кожен їхній стан визначає тільки одне число.

Легко перевірити, що одночасна дія *n* операторів Адамара на всі квабіти регістру, який перебуває в стані, що визначає число $y = y_{n-1}y_{n-2} \dots y_2 y_1 y_0$, $(y_j = \{0,1\})$, переводить його в стан, що задає "суперпозицію" чисел

$$\hat{H}^{[n]}|y\rangle = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \sum_{x_{n-1},\dots,x_0}^{1} (-1)^{x \cdot y} |x\rangle,$$
(5.16)

$$y \cdot x \equiv (y_{n-1}x_{n-1} + \dots + y_1x_1 + y_0x_0) \mod 2$$
 (5.17)

На перший погляд, це перетворення видається перетворенням Фур'є, але ця відповідність існує тільки, коли y = 0, оскільки при перетворенні Фур'є в показник експоненти входить множення *xy mod 2ⁿ*, тоді як множення (5.17) швидше нагадує скалярний добуток за *mod 2*. Слід указати на відносність суперпозиції: стани, задані як суперпозиція, в іншому базисі будуть мати зовсім інший вигляд.

Дія оператора зміни фази $\hat{\Phi}(\varphi)$ є дещо простішою

$$\hat{\Phi}(\varphi)|x\rangle = e^{i\varphi x}|x\rangle, \quad x = \{0,1\}$$
(5.18)

Операторів Адамара й операторів зміни фаз достатньо, щоб збудувати довільний унітарний одноквабітовий оператор. Мережа, збудована з квабітів і КЛЕ, називається квантовою мережею (quantum network) і зображається схемами з такими позначеннями: світова лінія квабіта — горизонтальна лінія, а дія КЛЕ на цей квабіт — певний знак на цій лінії. Наприклад, дія оператора Адамара H на квабіт \x) зображується графічно так:

$$\hat{H}|x\rangle \leftrightarrow |x\rangle - H - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + (-1)^{x}|1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i\pi x}|1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{y} e^{i\pi xy} |y\rangle$$
(5.19)

а дія оператора зміни фази —

$$\hat{\Phi}(\varphi)|x\rangle \quad \leftrightarrow \quad |x\rangle \stackrel{\hat{\Phi}(\varphi)}{\longrightarrow} e^{i\varphi x}|x\rangle,$$
(5.20)

Найзагальніший одноквабітовий унітарний оператор залежить від чотирьох параметрів, і його матриця має вигляд:

$$\hat{U} = \begin{bmatrix} e^{i\left(\delta + \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2}\right)} \cos(\theta) & e^{i\left(\delta + \frac{\alpha}{2} - \frac{\beta}{2}\right)} \sin(\theta) \\ e^{i\left(\delta - \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2}\right)} \sin(\theta) & e^{i\left(\delta - \frac{\alpha}{2} - \frac{\beta}{2}\right)} \cos(\theta) \end{bmatrix}.$$
(5.21)

Її можна факторизувати:

$$\hat{U} = e^{i\left(\delta + \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2}\right)} \times \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\beta} \end{bmatrix}.$$
(5.22)

Після нескладних перетворень отримаємо

$$\hat{U} = e^{i\left(\delta + \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta}{2} - \theta\right)} \hat{\Phi}\left(-\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \hat{H} \hat{\Phi}\left(2\theta\right) \hat{H} \hat{\Phi}\left(-\beta + \frac{\pi}{2}\right).$$
(5.23)

З точністю до загального фазового множника квантова мережа цього перетворення є такою:



Як видно з (5.23), при $-\alpha = \beta = \delta = \theta = \pi/2$ U стає оператором заперечення, тобто реалізує операцію NOT алгебри Буля

$$\sigma_{x} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{x} |0\rangle = |1\rangle, \quad \sigma_{x} |1\rangle = |0\rangle, \quad (5.24)$$

а його квантова мережа спрощується до



Дія двоквабітових КЛЕ описується унітарними операторами в гільбертовому просторі, які в базисі (00), (01), (10), (11) зображаються матрицями 4×4. Зокрема матриця оператора контрольованого НЕ (XOR або CNOT) має вигляд

$$XOR = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$
(5.25)

а його графічне зображення таке:



Оператор XOR перекидає (заперечує) стан другого квабіта тільки тоді, коли перший квабіт перебуває в стані |1), тобто реалізує додавання за модулем 2, як і в класичній зворотній ОМ. Варто звернути увагу, що

$$XOR|x\rangle|0\rangle = |x\rangle|x\rangle \tag{5.26}$$

і може видатися, що порушується теорема про відсутність клонування, але ніякого клонування немає, бо рівняння (5.26) правильно тільки для відомих станів x = 0 або x = 1.

Матриця іншого КЛЕ — контрольованого зсуву фази — має схожу загальну структуру:

$$B(\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$
(5.27)

а його квантова мережа має вигляд:

$$\frac{|x\rangle}{|y\rangle} \xrightarrow{B(\varphi)} e^{i\varphi xy} |x\rangle |y\rangle.$$

Матриці (5.25) і (5.27) мають структуру, характерну для контрольованих операторів: на діагоналі матриці всюди стоять одиниці, за винятком двох елементів справа внизу, де розташована 2×2 матриця оператора, який змінює стан останнього (згори) квабіта при умові, що всі інші квабіти перебувають у станах, які відповідають 1:

$$CU[n \times n] = \begin{bmatrix} I_{[n-2\times n-2]} & 0\\ 0 & U_{[2\times 2]} \end{bmatrix}.$$
 (5.28)

Уведемо одноквабітовий оператор

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & i \end{bmatrix},\tag{5.29}$$

де *i* — уявна одиниця, і відповідний йому двоквабітовий контрольований оператор

$$CV = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{bmatrix} = B\left(\frac{\pi}{2}\right),$$
(5.30)

що є частковим випадком оператора $B(\varphi)$ і так зображається графічно:



Із цього оператора й оператора Адамара можна збудувати квантову мережу, яка реалізовує оператор XOR



Аналогічно з цих двох операторів можна збудувати КЛЕ — квантовий відповідник "Toffoli gate" з трьома входами та виходами



Останній КЛЕ виконує таку ж операцію, як у класичному випадку "Toffoli gate",



і разом з КЛЕ "XOR" дає змогу збудувати суматор з переносом у вищий розряд



Часто вживаний при побудові квантових мереж КЛЕ "SWAP", який здійснює обмін умістом двох ква-бітів, так пов'язаний з КЛЕ "XOR":



звідки можна легко отримати матрицю оператора SWAP у спінорному базисі

$$SWAP = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
(5.31)

Оператор іншого часто вживаного КЛЕ ХОВ задається матрицею:

$$\sqrt{XOR} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2}\\ 0 & 0 & \frac{1-i}{2} & \frac{1+i}{2} \end{bmatrix}.$$
 (5.32)

У праці А. Баренцо та ін. (А. Barenco et al., 1995) доведено, що з двох одноквабітових операторів \hat{H} і $\hat{\Phi}(\varphi)$ та з одного двоквабітового (наприклад, з XOR чи іншого оператора) можна точно побудувати довільний унітарний оператор, що діє в гільбертовому просторі $H_1 \otimes ... H_n$, і використати при цьому $4^n n^3$ цих базових операторів (у цій же статті зазначено, що в неопублікованій роботі Е. Knill отримано значення 4^n n). А це вказує на те, що з певним чином дібраних базових КЛЕ можна збудувати квантову мережу, яка реалізує унітарний оператор, котрий виконує відповідні арифметичні розрахунки.

Отже, квантовий процесор — це квантовий регістр + скінчена мережа квантових логічних елементів (КЛЕ), що, діючи на квантовий регістр, змінює його стани.

Квантове обчислення — це: ініціалізація початкового стану квантового регістру + унітарна еволюція квантового регістру під керуванням квантової мережі за скінчений проміжок часу від початкового стану квантового регістру ("входу") до його кінцевого стану ("виходу") + зчитування кінцевого стану квантового регістру.

5.3.3. Квантова когерентність векторів стану

Стани квантової системи, що описуються векторами стану $|\psi\rangle$, називаються чистими. Їм протиставляються так звані змішані стани, які не можна описати векторами стану. Чисті й змішані стани квантових систем принципово розрізняються за ознакою когерентності: чисті стани когерентні, змішані – некогерентні.

Поняття когерентності у квантовій фізиці визначається аналогічно поняттю когерентності в оптиці: хвильові функції (вектори стану) квантовокогерентних систем здатні до інтерференції. Відомий експеримент за спостереженням дифракції електронів на двох щілинах по суті є експериментом по виявленню квантової когерентності орбітальної хвильової функції $|\psi\rangle$ вільного електрона.

5.4. Принципи побудови й роботи ідеального квантового комп'ютера 5.4.1. Ідеальний квантовий комп'ютер



Рис. 5. Схема квантового комп'ютера.

Схема квантового комп'ютера представлена на рис. 5.5. Власне кажучи квантовий комп'ютер являє собою регістр із *n* квабітів, що керуються зовнішніми (класичними) сигналами. Квантовий комп'ютер вмонтований у класичне оточення, що складається з керуючого класичного комп'ютера й генераторів імпульсів, які керують еволюцією квабітів, а також засобами виміру

стану квабітів. У ході обчислень до регістра *n* можна додати інші регістри, що грають допоміжну роль (ancillas).

Прийнято називати ідеальним квантовий комп'ютер, стани якого завжди когерентні. Це означає, по-перше, відсутність взаємодії комп'ютера з оточенням, що створює шуми й порушує когерентність вектора стану комп'ютера (декогерентність); по-друге, в ідеальному квантовому комп'ютері зовнішні сигнали здійснюють точне керування.

Вектор стану $|\psi\rangle$ квантового регістра з *n* квабітів являє собою розклад по 2^n базисних станах регістра $|i_1...i_n\rangle$ $i_1...i_n = \{0,1\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\dots,i_n} a_{i_1,\dots,i_n} |i_1\dots i_n\rangle$$
(5.33)

Тут суперпозиція $|\psi\rangle$ є вектором в 2^n -вимірному векторному просторі, $|i_1...i_n\rangle$ - 2^n базисних векторів (ортів) цього простору, $a_{i_1...,i_n}$ - проекції вектора $|\psi\rangle$ на напрямки ортів $|i_1...i_n\rangle$. Усе, що можна знати про фізичну систему, зосереджено в її векторі стану $|\psi\rangle$. Усе, що можна зробити із системою, – це перетворити її початковий вектор стану $|\psi_{in}\rangle$ в інший вектор: $|\psi_f\rangle$. Тому процес обчислень на квантовому комп'ютері розглядається як перетворення початкового вектора стану комп'ютера $|\psi_{in}\rangle$ у кінцевий вектор стану $|\psi_f\rangle$ шляхом множення вектора $|\psi_{in}\rangle$ на унітарну матрицю U розмірності $2^n \times 2^n$:

$$\left|\psi_{f}\right\rangle = U\left(2^{n} \times 2^{n}\right)\psi_{in}\rangle\tag{5.34}$$

Зручно вважати, що в початковому стані комп'ютера всі його квабіти перебувають у стані |0>:

$$|\psi_{in}\rangle = |0_1 \dots 0_n\rangle.$$

Цю операцію називають ініціалізацією. Стан $|0_1...0_n\rangle$ можна одержати охолодженням квабітів до наднизьких температур або шляхом виміру й керуванням станів квабітів. Алгоритм розв'язку завдання знаходиться у матриці пе-
ретворення $U(2^n \times 2^n)$. Класична інформація про розв'язок завдання розміщується в кінцевому векторі стану $|\psi_f\rangle$; вона повинна бути отримана виміром квабітів.

Для розв'язку завдання на квантовому комп'ютері треба виготовити необхідну кількість квабітів, ініціалізувати їх, керувати їхньою квантовою еволюцією, виконати перетворення $U|\psi_{in}\rangle$ і виміряти стани квабітів, що описуються вектором $|\psi_{f}\rangle = U|\psi_{in}\rangle$.

Розглянемо питання про ресурси квантового комп'ютера, що дають йому перевагу в порівнянні із класичним комп'ютером. Аналіз проведемо виходячи з рівняння (5.34) роботи комп'ютера. Введемо спочатку більше компактні позначення вектора стану $|\psi\rangle$. Базисний стан $|i_1...i_n\rangle$ являє собою *n*розрядне двійкове число $|x\rangle$, розряди якого збігаються із числами $i_1,...,i_n = \{0,1\}$. У цих позначеннях

$$|\psi\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} a_x |x\rangle.$$

Суперпозиція $|\psi\rangle$ містить 2^n компонент, що представляють собою розклад вектора $|\psi\rangle$ по базисних функціях $|x\rangle$, $0 \le x \le 2^n$ -1. Обмежений фізичний ресурс, тобто найбільша кількість $n \approx 10^3$ частинок (квабітів), створює експоненціально великий $2^n = 2^{1000} \approx 10^{300}$ математичний інформаційний ресурс квантового комп'ютера. Саме із цієї обставини випливають основні переваги квантового комп'ютера.

Наслідком принципу суперпозиції є 2^n -кратний квантовий паралелізм обчислень. Насправді, зміна стану тільки одного квабіта перебудовує всю суперпозицію. (Оскільки набір базисних функцій $|x\rangle$ постійний, перебудовуються всі 2^n проекцій a_x вектора $|\psi\rangle$.)

Порівняємо ці факти з можливостями регістра класичного комп'ютера. Класичний регістр із n бітів може перебувати тільки в одному з 2^n станів, оскільки він не підкоряється принципу суперпозиції. Стан класичного регістра одновимірний. Зміна стану одного біта переводить регістр в інше одновимірний (близький за значенням) стан. Ресурси класичного комп'ютера експоненціально малі в порівнянні з ресурсами квантового комп'ютера. Гільбертовий простір станів $|\psi\rangle$ є простір комплексних чисел. Це означає, що амплітуди a_x у розкладі $|\psi\rangle = \sum a_x |x\rangle$ є комплексними числами:

$$a_x = |a_x|e^{i\varphi_x}$$

При додаванні векторів

$$|\psi\rangle + |\psi'\rangle = \sum (a_x + a'_x)|x\rangle$$

відбувається інтерференція квантових амплітуд:

$$a_{x} + a_{x}' = \left[\left(\left| a_{x} \right| + \left| a_{x}' \right| \right) \cos\left(\varphi_{x}^{-} \right) + i \left(\left| a_{x} \right| - \left| a_{x}' \right| \right) \sin\left(\varphi_{x}^{-} \right) \right] e^{i\varphi_{x}^{+}}, \quad \varphi_{x}^{\pm} = \frac{\varphi_{x} \pm \varphi_{x}'}{2}$$

У ході квантових обчислень інтерференція амплітуд відбувається всюди й автоматично. Тому деякі автори уявляють собі квантовий комп'ютер як складний інтерферометр для амплітуд вектора стану квантового комп'ютера. Виникає питання: чи не можна використати явище інтерференції електромагнітних хвиль для здійснення квантових обчислень? Інакше кажучи, чи не є оптичні комп'ютери аналогом квантових? Порівнюючи суперпозицію оптичних хвиль в оптичному комп'ютері із суперпозицією векторів стану у квантовому комп'ютері, слід відзначити, що в ньому відбувається однократна інтерференція оптичних мод; у квантовому комп'ютері відбувається 2^n -кратна інтерференція амплітуд для кожного вектора $|x\rangle$, $0 \le x \le 2^n$ -1. Вектор стану квантового комп'ютера містить як цифрову ($|x\rangle$), так і аналогову (a_x) інформацію. Оптичний комп'ютер не здатний моделювати квантові обчислення, він повинен бути віднесений до класу класичних аналогових комп'ютерів.

5.4.2. Квантовий комп'ютер – цифровий комп'ютер з аналоговим керуванням

Аналіз рівняння $|\psi_f\rangle = U|\psi_{in}\rangle$ для квантового комп'ютера дозволяє встановити принципи роботи й керування квантовим комп'ютером. Стан $|\psi_{in}\rangle = |0_1...0_n\rangle$ не містить ніякої інформації ні про завдання, ні про способи його розв'язку. Всю інформацію про розв'язуване завдання й алгоритм його розв'язку містить матриця перетворення *U*. А кінцевий вектор стану

$$\left|\psi_{f}\right\rangle = \sum_{x=0}^{2^{n}-1} a_{x}^{(f)} \left|x\right\rangle$$

містить інформацію про розв'язок завдання. Одержати цю інформацію можна, вимірявши в базисі $|0\rangle$, $|1\rangle$ стан кожного з *n* квабітів комп'ютера в стані $|\psi_f\rangle$. Виконавши виміри, ми одержимо кожне зі значень $0 \le x \le 2^n - 1$ з ймовірностями $|a_x^{(f)}|^2$, як це випливає із загальних принципів квантової фізики.

Як різні числа *х* можуть представляти розв'язок завдання, якщо він повинен бути єдиним? Насправді, це так; тільки одне значення $|s\rangle$ є розв'язком, інші значення $|x\rangle \neq |s\rangle$ помилкові. Щоб ідея квантового комп'ютера мала реальний сенс, квантовий алгоритм повинен приводити до такого стану $|\psi_f\rangle$, що ймовірність знайти правильний розв'язок $p_s = |a_x^{(f)}|^2 \approx 1$, тоді як сума ймовірностей всіх помилкових розв'язків була:

$$\sum_{x\neq s} \left| a_x \right|^2 << 1$$

Всі придумані до теперішнього часу квантові алгоритми мають описану властивість. Отже, квантовий комп'ютер дає цифровий розв'язок завдання *s* з певною ймовірністю, тобто є цифровим імовірнісним комп'ютером.

Тепер проаналізуємо спосіб керування квантовим комп'ютером. У ході квантових обчислень відбувається перетворення початкового вектора стану $|\psi_{in}\rangle = \sum_{x} a_{x}^{(in)} |x\rangle$ у кінцевий вектор $|\psi_{f}\rangle = \sum_{x} a_{x}^{(f)} |x\rangle$ через неперервний ряд станів.

Базисний набір станів $|x\rangle$ зберігається незмінним. Динаміка стану комп'ютера передається змінами в часі амплітуд $a_x(t)$, які є аналоговими величинами, що приймають неперервний ряд значень в інтервалі $0 \le |a_x| \le 1$. Керувати комп'ютером – значить, керувати процесами $a_x(t)$, тобто за способом керування квантовий комп'ютер є аналоговим комп'ютером.

Таке сполучення властивостей - аналоговий спосіб керування, імовірнісний характер подання цифрового розв'язку - не є присутнім у жодному типі класичних комп'ютерів. Квантовий комп'ютер виглядає мінотавром у світі комп'ютерів, сполучаючи несумісні в класичному світі властивості аналогових і цифрових класичних комп'ютерів. За сучасними оцінками параметри керуючих квабітами сигналів (імпульсів) повинні контролюватися з похибкою 10⁻⁵-10⁻⁴. Таку дорогу плату повинні будуть заплатити творці квантових комп'ютерів за сюрприз зустрічі з мінотавром - цифровим комп'ютером з аналоговим керуванням. Висока точність операцій необхідна, щоб упоратися із проблемою декогерентізації квантових станів.

5.4.3. Класична й квантова інформація у квантовій системі

Розглянемо вектор стану квабіта $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ з наступної точки зору: скільки інформації і якої (класичної? квантової?) утримується в квабіті, що перебуває в цьому стані?

Поставивши ці питання, ми зіштовхуємося з фундаментальними проблемами визначення поняття інформації (класичної, квантової) стосовно до квантових систем. Не маючи можливості в даній роботі викладати ці питання детально, ми пропонуємо прийняти інтуїтивну форму визначення класичної й квантової інформації, що зберігається в квабіті з станом $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$. Віднесемо до класичної частини ту інформацію, що ми маємо в класичній формі при вимірі стану квабіта. При вимірі квабіта в базисі $|0\rangle$, $|1\rangle$ ми одержуємо 0або 1. Отже, невідомий нам стан квабіта містить максимально один біт класичної інформації.

111

Значення компонентів α , β вектора $|\psi\rangle$ характеризуються трьома аналоговими величинами: модулями $|\alpha|$, $|\beta|$ і різницею фаз $\varphi = \arg\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)$.

Інформація, яка міститься в амплітудах α , β можна віднести до квантової частини інформації, що міститься в квабіті з станом $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$. Квантова частина інформації не може бути отримана при однократному вимірі стану квабіта. Щоб визначити $|\alpha|$, $|\beta|$, потрібно провести нескінченну кількість вимірів над ансамблем частинок у стані $|\psi\rangle$ і визначити ймовірності p(0) і p(1) результатів випробувань:

$$p(0) = |\alpha|^2$$
, $p(1) = |\beta|^2$.

Для визначення різниці фаз φ , необхідні виміри інтерференційного типу. Повне визначення вектора стану прийнято називати томографією квантового стану.

Аналоговий характер квантової інформації має принципове значення для квантової теорії. Цим виражається той факт, що безліч квантових станів утворить континуум: будь-які два стани із цього континуума можуть бути перетворені один в одного неперервним чином за допомогою унітарного перетворення. Харді показав, що, прийнявши в системі аксіом теорії ймовірностей можливість неперервного (conti-nious) перетворення станів один в одного (замість стрибкоподібного переходу в класичній теорії ймовірностей), можна інтерпретувати квантову механіку як квантову теорію ймовірностей.

Зі сказаного в попередніх розділах випливає, що процеси квантових обчислень протікають у просторі аналогових змінних, тобто амплітуд a_x при базисних станах $|x\rangle$ системи.

Квантова теорія інформації будується багато в чому за аналогією з теорією класичної інформації Шеннона: аналогічно інформаційної ентропії Шеннона будується квантова ентропія фон Неймана. Як ентропія Шеннона характеризує кількість інформації, що міститься (у середньому) в одному сигнальному символі x, який з'являється з імовірністю p(x), так і ентропія фон Неймана характеризує інформацію у квантових станах p_x , що виступають як сигнальні символи й з'являються з імовірністю $p(p_x)$.

Властивості ентропії фон Неймана відрізняються від властивостей ентропії Шеннона, якщо розглядати квантові стани p_x із властивостями, відмінними від властивостей класичних систем, такими як неповне розрізнення неортогональних станів, заплутані (entangled) стану композитних систем і ін..

5.4.5. Як реалізувати квантовий алгоритм

Керування роботою квантового комп'ютера з *n* квабітами описує перетворення $|\psi_f\rangle = U(2^n \times 2^n)|\psi_{in}\rangle$, де $|\psi_{in}\rangle$ і $|\psi_f\rangle$ - вектори з 2^n компонентами. При значеннях $n=10^3$ множення $U|\psi_{in}\rangle$ стає недоступним для найшвидших (порядку 10^{12} операцій у секунду) комп'ютерів. Ще більш важкою представляється фізична реалізація перетворення $|\psi_{in}\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$.

Шлях до реалізації квантових алгоритмів знаходиться, якщо розглянути можливість розкладу матриці $U(2^n \times 2^n)$ в упорядкований добуток матриць другого й четвертого порядків:

$$U(2^n \times 2^n) = \prod_{i,j} U_i(2 \times 2) \otimes U_j(2^2 \times 2^2).$$
(5.35)

Матриця другого порядку

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

Перетворюється у вектор

$$a \\ b$$

стану одного квабіта:

$$\begin{vmatrix} a'\\b' \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta\\\gamma & \delta \end{vmatrix} \begin{vmatrix} a\\b \end{vmatrix}$$

тобто кожна матриця $U_i(2\times 2)$ у розкладі (5.35) описує операцію на тому або іншому окремому квабіті комп'ютера. Матриці $U(2^2 \times 2^2)$ перетворять вектори стану пари квабітів:

$$|\psi_{in}\rangle = a_{00}|00\rangle + a_{10}|10\rangle + a_{01}|01\rangle + a_{11}|11\rangle \rightarrow |\psi_{f}\rangle = a_{00}'|00\rangle + a_{10}'|10\rangle + a_{01}'|01\rangle + a_{11}'|11\rangle$$

Отже, числа співмножників другого й четвертого порядку в розкладі (5.35) визначають число однобітових і двоквабітових операцій, необхідних для реалізації алгоритму. Щоб алгоритм був ефективним, необхідно, щоб повне число операцій було поліноміальним від числа "задіяних" квабітів у комп'ютері: N=P(n). Якщо число операцій зростає експоненціально з розмірністю завдання (числом задіяних у розв'язку завдання квабітів комп'ютера), то алгоритм ставиться до класу неефективних.

5.4.6. Універсальні набори елементарних операцій

Однобітові операції описують обертання окремого квабіта:

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \rightarrow \alpha' |0\rangle + \beta' |1\rangle.$$

Характер двоквабітових операцій вимагає додаткових роз'яснень. Двоквабітова операція припускає взаємозалежність станів двох квабітів, свого роду керування (control) одного квабіта (контрольованого) іншим (контролюючим). Такого роду взаємозалежність вимагає наявності фізичної взаємодії між квабітами, на час виконання операції або постійно.

Серед двоквабітових операцій виділяють операцію "контрольоване НЕ" (Controlled NOT – CNOT). Нехай контролюючий квабіт буде першим, контрольований – другим. Тоді операція CNOT характеризується таблицею вхідних і вихідних станів квабітів.

| Вхідний стан | $\left 00 \right\rangle$ | 01 angle | $ 10\rangle$ | $ 11\rangle$ |
|---------------|---------------------------|----------|--------------|--------------|
| Вихідний стан | $\left 00 \right\rangle$ | 01 angle | 11> | $ 10\rangle$ |



Рис. 5.6. Схема двоквабітової операції СМОТ.

З таблиці видно, що в операції СNOT другий квабіт інвертується:

$$|0
angle
ightarrow |1
angle, |1
angle
ightarrow |0
angle,$$

якщо перший перебуває в стані |1). Діаграмний символ операції представлений на рис. 5.6 (горизонтальними лініями показані осі часу, вертикальними – взаємодія квабітів).

Якщо

$$|\psi_1\rangle = \alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle, \quad |\psi_2\rangle = \alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle$$

то за допомогою таблиці операції легко обчислити $|\psi_{12}\rangle$:

$$|\psi_{12}\rangle = \alpha_1 \alpha_2 |00\rangle + \alpha_1 \beta_2 |01\rangle + \beta_1 \alpha_2 |11\rangle + \beta_1 \beta_2 |10\rangle$$

Узагальненням контрольованої операції є операція *C*-*U*, де *U* - будь-яка одноквабітова операція. Вона виконується над другим квабітом, коли контролюючий квабіт перебуває в стані $|1\rangle$. Зокрема, операція *U* може бути операцією зміни фази:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

Тоді

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \xrightarrow{U(\varphi)} \alpha |0\rangle + e^{i\varphi}\beta |1\rangle$$

Однобітові операції (континуум обертань вектора стану) плюс двоквабітова операція CNOT становлять універсальний набір операцій, що дозволяє здійснити будь-яке перетворення вектора стану комп'ютера. З погляду практичної реалізації наявність континуума операцій у наборі незручно.

Максимальною простотою виконання володіє деякий дискретний набір операцій. Як такий набір пропонується, наприклад, набір, що складається з однобітових операцій: перетворення Адамара *H*, фазового вентиля

$$U(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv Z$$

фазового вентиля $U(\pi/4)$ і двоквабітового вентиля СNOT.

Фізична реалізація квантової операції завжди супроводжується деякою похибкою виконання ε . З урахуванням цієї обставини теорія квантових операцій повинна будуватися як теорія апроксимацій. Щоб досягти похибки ε в у виконанні однобітової операції, треба затратити $O(\log_2^c \varepsilon^{-1})$ операцій з дискретного набору (теорема Соловей-Китаєва).

Крім однобітових операцій, двоквабітова операція СNOT при фізичному виконанні містить у собі процес вільної еволюції двох квабітів під впливом гамільтоніана їхньої взаємодії. У процесі вільної еволюції один квабіт керує іншим, при цьому використовується енергія взаємодії. Також відзначимо, що довільне унітарне перетворення стану вимагає $O(n^2 4n)$ операцій з універсального набору, тобто число операцій експоненціально велике. Щоб вважатися ефективними, квантові алгоритми повинні виконуватися поліноміальним числом операцій.

5.5. Квантові алгоритми. Квантовий алгоритм Гровера

На даний час відкриті й докладно досліджені три класи квантових алгоритмів: 1) алгоритми з квантовими схованими підгрупами перетворень абелевих груп (до них ставиться алгоритм Шора факторизації чисел); 2) алгоритми з підсиленням амплітуд (їхнім представником є алгоритм Гровера пошуку об'єкта в неструктурованій базі даних); 3) алгоритми для моделювання квантових систем на квантовому комп'ютері.

Алгоритми класів 1) і 3) передбачають застосування дискретного фур'єперетворення. При виконанні фур'є-перетворення на класичному комп'ютері потрібно експоненціально велика кількість операцій. На квантовому комп'ютері фур'є-перетворення виконується за поліноміальне число (n^2) операцій. Тому квантові алгоритми класів 1) і 3) демонструють експонентне прискорення розв'язку завдання в порівнянні з алгоритмами, що виконуються на класичних комп'ютерах.

Принцип алгоритму Гровера - посилення амплітуди стану, що відповідає шуканому об'єкту.

Розрахунок функції f(x) квантовим процесором як відображення $\{0,1\}^{[n]} \xrightarrow{f} \{0,1\}^{[m]}$ описується дією унітарного оператора в гільбертовому просторі З ${}^{[n+m]}$, у якому квантовий регістр може перебувати в 2^{n+m} станах. Зазвичай, для аналізу запропонованих квантових алгоритмів зручно розділити квантовий регістр на два: регістр аргументу $|x\rangle_n$ і регістр значень функції $|y\rangle_n$. Тоді розрахунок функції можна зобразити так:

$$|x\rangle_{n}|y\rangle_{m} \xrightarrow{f(x)} |x\rangle_{n}|y \oplus f(x) \operatorname{mod} 2^{m}\rangle_{m}$$
(5.36)

або

$$|x\rangle|0\rangle \xrightarrow{f(x)} |x\rangle|f(x)\rangle.$$
(5.37)

Квантова надефективність може проявлятися не обов'язково в розрахунку самих функцій, а в дослідженні деяких їхніх властивостей.

Алгоритм Гровера - одна з реалізацій переваг квантових обчислень, застосована до задачі пошуку. Це алгоритм для квантового комп'ютера, і реалізувати його на машині із класичною архітектурою так, щоб використати його можливості, неможливо. Проте обчислювальні здатності звичайної машини дозволяють змоделювати поводження архітектури квантового комп'ютера.

Перейдемо до опису схеми алгоритму Гровера.

Нехай у нас є квантовий регістр із N квабітами. Імовірності всіх усіляких станів можна представити у вигляді вектора з 2^{N} компонентами.

Наприклад, хвильовий вектор $|AB\rangle$ буде таким

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha^2 \\ \alpha\beta \\ \alpha\beta \\ \beta^2 \end{bmatrix}$$
(5.38)

Алгоритм Гровера складається із трьох кроків:

- 1) Переводимо регістр у стан суперпозиції ($\frac{1}{\sqrt{N}}, \frac{1}{\sqrt{N}}, ..., \frac{1}{\sqrt{N}}$), тобто вирівнюємо ймовірності всіх *N* станів. Це можна зробити за *O* = lg(*N*) операцій. За законами квантової механіки можна змінювати хвильовий вектор за допомогою унітарних операцій, використовуючи гейт Адамара. Як результат, ми одержуємо вектор, усі компоненти якого рівні $\frac{1}{\sqrt{N}}$. Нас цікавить тільки один, *i*-тий стан.
- 2) Повторюємо кілька разів наступні унітарні перетворення: *R* (перетворення повороту фази) і *D* (перетворення дифузії), $O = \sqrt{N}$ раз. Після кожної ітерації амплітуда потрібного стану зміниться на величину $2M(\Psi) + \Psi_i$, де $M(\Psi)$ середнє значення компонента вектора після перетворення *R*, а Ψ_i амплітуда бажаного стану до *R*.
- Вимірюємо стан системи. При вимірюваннях одержимо бажаний стан з імовірністю принаймні 0,5.

На відміну від класичних алгоритмів точність одержання правильного результату не пропорційна кількості ітерації. Існує кількість ітерації, після яких імовірність потрібного результату буде зменшуватися. Оптимальна кількість ітерації (повторень *R D*) порядку $\frac{2}{\pi}\sqrt{N}$. Це один з головних проявів квантового підходу.

Сучасний етап досліджень в області квантових комп'ютерів і квантових обчислень є етапом розробки фундаментальних проблем. Підсумком цього етапу повинен бути вибір одного зі шляхів реалізації квантового комп'ютера як головного. Найімовірніше, прийдеться створити декілька прототипів кван-

тових комп'ютерів за допомогою різних технологій, порівняти їх і вибрати один для подальшого розвитку.

Поки ж відносно майбутнього квантових комп'ютерів існує широкий діапазон думок - від пророкувань прийдешньої (неминуче) квантової технічної революції до похмурого скептицизму. Перелічимо аргументи "проти".

- Квантовий комп'ютер не потрібний: немає завдань, які потребують цього, щоб робити й зробити квантовий комп'ютер. За минулий час знайдені тільки два ефективних квантових алгоритми (Шора й Гровера). Не вартує робити квантовий комп'ютер тільки заради того, щоб зламати сучасну популярну криптосистему RSA: вона сама піде в небуття вчасно створення квантового комп'ютера.
- Квантовий комп'ютер аналогова машина спеціалізованого типу, що важко реалізувати.
- Природа не обрала квантовий метод обчислень у мозку немає квантових операцій.

Припустимо, прийде час, коли буде освоєна квантова динаміка систем на атомному рівні й побудована квантова інформаційна техніка. Що далі? Які нові ресурси природи можуть бути використані для створення нових поколінь інформаційної техніки? Ступеня волі систем у менших, чим атом, обсягах (атомні ядра, елементарні частки) пов'язані з більшими енергіями, що ускладнює їхнє використання для кодування інформації. Чи означає це, що на атомному рівні будуть вичерпані інформаційні ресурси природи?

ЛІТЕРАТУРА

- Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Електронні властивості двовимірних систем.
 М.: Світ, 1985. 416 с.
- Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: "Наука", 1978. 616 с.
- Белявский В.И. Физические основы полупроводниковой нанотехнологии// Соросовский образовательный журнал. – № 10. –1998. – С. 92–98.
- 4. Борисенко В.Е. Наноэлектроника основа иформационных систем XXI века.// Соросовский образовательный журнал. № 5. –1997. С. 100–104.
- Борисенко В.Е. Учеб. пособие по курсу "Наноэлектроника" для студентов специальности "Микроэлектроника" В 3 ч. – Ч. 1. – Основы наноэлектроники. – Мн.: БГУИР, 2001. – 48 с.
- Борисенко В.Е. Учеб. пособие по курсу "Наноэлектроника" для студентов специальности "Микроэлектроника". В 3 ч. – Ч.2. Нанотехнологии. – Мн.: БГУИР, 2001. – 76 с.
- 7. Боум А., Квантовая механика. Основы и приложения (Мир, Москва, 1990).
- 8. Брандт Н.Б. Надпровідність // Соросовский Освітній Журнал. 1996. № 1. С. 100-107.
- Вакарчук І.О. Квантова механіка: Підручник для студентів фізичних спеціальностей вищих закладів освіти. – Львів: Львівський держ. ун-т ім.. І.Франка, 1999. 488 с.
- Валиев К. А., Кокин А. А., Квантовые компьютеры: надежды иреальность (РХД, Москва-Ижевск, 2000).
- 11. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: "Наука", 1973. 588 с.
- 12. Делоне Н.Б. Туннельный эффект // Соросовский образовательный журнал.
 Т.6. № 1. 2000. С. 79–84.
- 13. Демиховский В.Я. Квантові ями, нитки, крапки: Що це таке? // Соросовский Освітній Журнал. 1997. № 5. С. 80-86.
- 14. Демиховский В.Я. Квантовые ямы, нити, точки. Что такое? // Соросовский образовательный журнал. № 5. 1997. С. 80–86.

- 15.Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы наноэлектроники: Учеб. пособие. – 2-е изд., испр. и доп. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. – 496 с.
- 16.Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники: Учебное пособие для вузов. - Новосибирск, 2000. – 328 с.
- 17.Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: материалы для компьютеров XXI века// Природа. № 11. 2000. С. 23–30.
- Екимов А.И., Онущенко А.А. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников // Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т.34. – № 6. – С. 363-366.
- 19.Кибис О.В. Квантовый эффект Холла. //Соросовский образовательный журнал. № 9. 1999. С. 89-93.
- 20.Кульбачинский В.А. Полупроводниковые квантовые точки// Соросовский образовательный журнал. Т.7., № 4. 2001. С. 98–104.
- 21. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика в десяти домах: Т.III. Квантовая механика. М.: "Наука", 1989. 768 с.
- 22. Нокс Р. Теория экситонов. М.: "Наука", 1968. 382 с.
- 23.Опенов Л.А. Спиновые логические вентили на основе квантовых точек. // Соросовский образовательный журнал. Т.6. № 6. 2000. С. 93–98.
- 24.Стин Э., Квантовые вычисления (РХД, Москва-Ижевск, 2000).
- 25.Шик А.Я. Квантові нитки // Соросовский Освітній Журнал. 1997. № 5. С. 87-92.
- 26.KlitzingK. von, Dorda G., Pepper M. // Phys. Rev. Lett. 1980. Vol. 45. P. 494-497.
- 27.Lomonaco S. J., Jr., A Rosetta Stone for Quantum Mechanics with an Introduction to Quantum Computation arXiv:quant-ph/0007045 (2000).

Іменний покажчик

| Аарон Я. | Смоллі Р. | |
|-------------|-------------|--|
| Айнштайн А. | Танігучі Н. | |
| Артур Д. | Тинхам М. | |
| Бардін Дж. | Тур Д. | |
| Баренцо А. | Фейнман Р. | |
| Бінніг Г. | Флемінг Д. | |
| Бом Д. | Форест Л. | |
| Браттейн У. | Хоутен | |
| Гирліге Л. | Чо А. | |
| Деккер С. | Шоклі У. | |
| Демокрит | Шор | |
| Джозефсон | Knill E. | |
| Дрекслер Е. | | |
| Ейглер Д. | | |
| Керл Р. | | |
| Клітцинг К. | | |
| Кнолл М. | | |
| Крото Х. | | |
| Ландау Л. | | |
| Ландауэр | | |
| Лихарєв К. | | |
| Лібен Р. | | |
| Лудоном Р. | | |
| Мур Г. | | |
| Рід М. | | |
| Рорер Г. | | |
| Руск Е. | | |

Предметний покажчик

інформаційні системи аналогова форма кодування інформації цифрова форма кодування механічний ключ електронним перемикаючим інтегральних мікросхем хвильовою функцією квантовим обмеженням тунелювання ефективною масою принципу невизначеності енергетичних рівнів Ефект Аарона-Бома рівняння Шредінгера кулонівської блокади потенціальній ямі власні значення власні функції потенціальний бар'єр хвилі де Бройля постійна Планка борівський радіус