

электрического поля и света, что представляет практический интерес.

Список литературы

1. Буткевич В. Г., Бочков В. Д., Глобус Е. Р. Фотоприемники и фотоприемные устройства на основе поликристаллических и эпитаксиальных слоев халькогенидов свинца // Прикладная физика. 2001. № 6. С. 66–112.
2. Нуриев И. Р., Абдуллаев М. И., Фарзалиев С. С. Особенности роста эпитаксиальных пленок $PbSe_{1-x}Te_x$ // Тез. докл.

XVI Международной научно-технической конференции по фотоэлектронике и приборам ночного видения. М.: ОРИОН, 2000. С. 94–95.

3. Дирочка А. И., Кононов А. С., Серебrenников П. С., Сулейманов Н. А. Электронографические исследования поверхности гетероструктур $PbSnTe-PbTe$, полученных молекулярно-лучевой эпитаксией // Прикладная физика. 2003. № 2. С. 85–87.

4. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Теория протекания и проводимость сильно неоднородных тел // УФК. 1975. Т. 117. С. 401–430.

5. Агасиев А. А. Формирование и электрофизические свойства пленок сложных металлооксидов. ... Докт. диссер. Баку, 1995.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНСТРУИРОВАНИЕ МНСТ

УДК 621.382

И. И. Абрамов, д-р физ.-мат. наук, проф.
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, г. Минск,
Республика Беларусь

ПРОБЛЕМЫ И ПРИНЦИПЫ ФИЗИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ. IV. Квантовомеханические формализмы

В данной части работы выделены наиболее перспективные приборные структуры твердотельной наноэлектроники, а также основные квантовомеханические формализмы, которые можно использовать для их моделирования.

Приборные структуры наноэлектроники

Прежде чем анализировать основные проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур твердотельной наноэлектроники, необходимо выделить те из их огромного на настоящий момент времени многообразия, которые будут в дальнейшем рассматриваться. При этом акцент сделаем на выборе типов приборных структур, представляющих наибольший интерес для построения наноэлектронных интегральных схем (ИС). Такая постановка вопроса связана с тем, что главным объектом разработки и исследования в области наноэлектроники, как и микроэлектроники, должна стать ИС или в более широком смысле — интегрированная информационная система [1].

Сначала рассмотрим, как может вообще интерпретироваться ИС, что чрезвычайно важно для ее

разработки, анализа и моделирования, а также понимания исследуемого вопроса. Здесь можно выделить следующие возможные основные подходы:

- ИС представляется как сочетание барьеров и ям, а также некоторого набора элементарных зарядов, фиксированных и подвижных;
- ИС представляется как сочетание разнообразных объектов различной размерности (3D, 2D, 1D и 0D), т. е. включающих и наноструктуры, а именно: квантовые пленки или слои (размерность 2D), квантовые проволоки (1D) и квантовые точки (0D);
- ИС представляется как сочетание приборных структур, выполняющих некоторые элементарные функции, например логические, и соединенные между собой.

Первый подход является наиболее детальным и, в сущности, уже давно используется при описании твердых тел. Подход для них мог применяться вследствие периодичности структур исследуемых кристаллических тел. В результате задача их описания значительно упрощается. В ИС ситуация, конечно же, гораздо сложнее, по крайней мере на данном этапе их разработки и производства. Поэтому данный подход для ИС в целом использовать фактически невозможно на современных уровнях развития теории и вычислительной техники. Несмотря на это для наноэлектронных ИС он был бы идеальным подходом.

Второй подход тоже является достаточно детальным и в принципе возможен, так как он менее сложен по сравнению с первым. Автору, однако, не известны случаи его реального применения, за исключением простейших приборных структур.

Третий подход традиционно используется при описании современных ИС. В настоящее время нет оснований для сомнений в его возможной результативности при описании наноэлектронных ИС, хотя очевидно, что ситуация значительно усложнится. Это будет связано с очень сильно воз-

росшей степени взаимодействия между приборными структурами в схемах с уровнем интеграции ориентировочно выше 10^{10} элементов на кристалле.

Удачная аналогия здесь может быть проведена с мозгом человека [1]. В данном случае мозг (степень интеграции около 10^{10} нейронов) — аналог ИС, а нейрон — элементарная приборная структура. Известно, что между нейронами существуют многочисленные связи, по крайней мере типы и функции некоторых из них в настоящий момент времени не ясны. Однако почти не вызывает сомнения, что обработка информации мозгом ведется ансамблями, т. е. целыми группами нейронов, на основе статистических принципов (гипотеза "вероятностно-статистической организации мозга") [2, 3]. Значит, есть определенные основания считать, что и в нанoeлектронных ИС *сверхвысокой степени интеграции (более 10^{10} элементов на кристалле) рассматриваемый третий подход по-прежнему может быть применен.* Таким образом, мы пока научились более или менее удовлетворительно "собирать" ИС из относительно больших блоков (приборных структур). Поэтому главной *ближайшей стратегической целью является поиск более "гибких" блоков и создание более "гибких" программ их объединения по сравнению с существующими ИС.*

По изложенным причинам далее будут рассматриваться именно нанoeлектронные приборные структуры, представляющие в ближайшее время перспективу для построения ИС нанoeлектроники, а не наноструктуры. Поясним, почему мы разделяем эти два термина, хотя в специальной литературе достаточно часто встречается путаница в их использовании.

Во-первых, наноструктура — это, вообще говоря, не прибор. И здесь необходимо констатировать, что в настоящее время чаще исследуются именно наноструктуры, а не собственно нанoeлектронные приборы.

Во-вторых, в приборной структуре нанoeлектроники принципиально важно взаимодействие, как правило, классических областей и активной области (в данном случае наноструктуры), что может очень сильно повлиять на физику работы прибора. В более общем случае для приборной структуры важны взаимодействия из следующего набора, а именно: разнообразных объектов различной размерности (3D, 2D, 1D, 0D), из которых состоит элемент; взаимодействия с окружающей средой, включая другие приборные структуры ИС. Следовательно, в элементе, как правило, встречаются интерфейсные области, например, области перехода между 3D объектами и 2D объектами, как это имеет место в резонансно-туннельном диоде. Подчеркнем, что 3D области в ИС нанoeлектроники будут, по-видимому, встречаться обязательно, хотя бы вследствие необходимости "перехода" к нашему макроскопическому миру. Таким образом, имеет место процесс измерения в традиционном в кван-

товой механике смысле. Ясно, что отмеченные взаимодействия (измерения) могут очень сильно изменять и усложнять физику работы приборных структур по сравнению с входящими в них активными областями (наноструктурами).

В-третьих, будут ли должным образом функционировать многие наноструктуры, если их включить в ИС? Ответ на этот вопрос, очевидно, непрост. Так, показано, что далеко не все на настоящий момент времени обнаруженные эффекты в низкоразмерных системах, в частности в наноструктурах, могут найти применение в приборах [4, 5]. Следует, по-видимому, ожидать, что многие наноструктуры и эффекты в них в составе ИС будут оказывать "вредное" или паразитное влияние на функционирование ИС. Понятно, что их придется учитывать при разработке ИС нанoeлектроники.

Анализ литературы, прежде всего прогнозов большого числа групп различных специалистов в области электроники США, Японии, России, стран ЕС и других стран, приводит к выводу, что создание ИС новых поколений в ближайшие десятилетия будет происходить на основе кремниевых технологий, включая использование новых материалов, в том числе наноматериалов, путем дальнейшего уменьшения активных областей элементов при одновременном ограничении токов утечки, повышения плотности упаковки приборных структур, увеличения размеров пластины, модернизации схемотехнических и архитектурных подходов (например, переход на создание систем-на-пластине, трехмерная интеграция и др.). *Принципиально важным при этом будет улучшение (расширение возможностей, повышение адекватности, эффективности, надежности и др.) методов и средств автоматизированного проектирования и моделирования.* Таким образом, *развитие будет происходить, судя по всему, эволюционным (плавным) путем сначала к гибридной нанoeлектронике, а затем непосредственно к нанoeлектронике.*

На этом непростом пути основными, по-видимому, будут являться элементы из четырех типов приборных структур. Приведем следующее высказывание двух ведущих российских ученых в области микроэлектроники [6]: "Приборы нанoeлектроники — это, прежде всего, нанотранзисторы, т. е. транзисторы с классической МДП-структурой, но с длиной канала менее 100 нм, одноэлектронные приборы, туннельно-резонансные диоды и транзисторы". Автор разделяет эту точку зрения по поводу трех отмеченных важнейших типов приборных структур, однако считает необходимым сюда же добавить приборы на квантовых проволоках (четвертый тип). Несмотря на то, что приборы последнего типа наименее разработаны и исследованы, а их применение в ИС приведет к повышению требований к нанотехнологическим методам, в частности, к чистоте материалов, они перспективны для применения в ИС по следующим причинам.

Во-первых, они как бы являются закономерным продолжением миниатюризации межсоединений, контактных систем ИС на нанометровые размеры, а следовательно, отлично "вписываются" в планарную технологию изготовления ИС. Во-вторых, здесь хорошо просматривается аналогия с волноводами СВЧ-электроники. Это как бы естественное распространение СВЧ-электроники на нанoeлектронику. В-третьих, достижения последних лет по созданию приборных структур на квантовых проволоках, в частности углеродных нанотрубках, просто нельзя не отметить.

Итак, основными типами нанoeлектронных приборных структур для данной работы будут являться: 1) нанотранзисторы с МДП-структурой; 2) резонансно-туннельные структуры (диоды и транзисторы); 3) одноэлектронные структуры (транзисторы и многоостровковые структуры); 4) структуры на основе квантовых проволок.

Первое (ведущее) место нанотранзисторов с МДП-структурой в настоящее время фактически не вызывает сомнений [6—9]. Заметим, что физика их функционирования будет существенно отличаться от физики классического МДП-транзистора. Здесь значительное влияние будут оказывать квантовые эффекты. Отсюда и измененное название приборных структур. На второе место поставлены резонансно-туннельные структуры, так как на их основе уже созданы первые нанoeлектронные ИС, производимые серийно, правда, пока на соединениях типа $A^{III}B^V$ и невысокой степени интеграции [10]. Одноэлектронные структуры могут "возникнуть" в результате дальнейшей естественной миниатюризации традиционной флэш-памяти микроэлектроники. Кроме того, уже сейчас очевидно, что одноэлектронные приборные структуры могут быть в принципе уменьшены до атомных размеров! В связи с изложенным, несмотря на возможные серьезные проблемы, второй—четвертый типы, т. е. "чисто нанoeлектронные приборные структуры", по-видимому, найдут применение в сверхинтегрированных ИС, сначала, возможно, в ИС гибридной нанoeлектроники в функционально-интегрированных с МОП-транзисторами структурах. По-видимому, это наиболее реальное другое (по сравнению с нанотранзисторами с МДП-структурой) направление создания ИС новых поколений (степень интеграции 10^{10} элементов на кристалле и выше). Допустимо также создание (комбинированных) приборных структур, в которых будет наблюдаться комбинация квантовомеханических эффектов, а не один доминирующий (более глубокая функциональная интеграция!).

Здесь целесообразно вспомнить историю развития микроэлектроники. В результате конкурентной жесточайшей "борьбы", продолжающейся десятилетия, из множества приборных структур основными фактически остались две: МОП-транзистор и биполярный транзистор. Поэтому еще очень рано

говорить об основной приборной структуре нанoeлектроники. В настоящее время можно лишь утверждать, что в ИС новых поколений найдут полезное применение следующие квантовые эффекты, а именно: туннелирование (резонансное, последовательное, одноэлектронное и др.), размерное квантование, квантовая интерференция. Они попросту будут являться естественным результатом дальнейшей миниатюризации активных элементов. Скажем так, что влияние этих физических эффектов начнет быть существенным и ими уже нельзя будет пренебречь, как в приборных структурах микроэлектроники [11, 12]. По изложенным причинам в этой статье и будут рассмотрены основные квантовомеханические формализмы, которые целесообразно использовать при моделировании выделенных четырех типов приборных структур твердотельной нанoeлектроники.

Это не означает, что другие приборные структуры не представляют интереса. Отметим следующие направления в нанoeлектронике, которые могут привести к созданию высокоинтегрированных информационных систем: 1) схемы на сверхпроводниках, включая высокотемпературные; 2) спинтронику, 3) молекулярная нанoeлектроника.

В настоящее время большие надежды возлагаются на молекулярную нанoeлектронику [5, 8, 9]. Однако она, к сожалению, находится лишь в "зачаточном" состоянии, и тут предстоит разрешить очень много проблем. О том, что здесь, в принципе, может быть достигнут значительный успех, свидетельствуют такие информационные системы, как мозг человека [1]. Сверхсложной проблемой, по-видимому, будет разработка соответствующих технологий. *Промежуточным, возможно вынужденным, решением может стать, например, модернизация или модификация естественных биологических (в данном случае технологических) процессов, т. е. необходимо, по-видимому, использовать подход "от имеющегося", а не наоборот.* Данный подход, вообще говоря, не относится ни к методу "сверху—вниз", ни к методу "снизу—вверх", используемым и интенсивно развиваемым в настоящее время в нанотехнологии [5]. Здесь, очевидно, также непростой путь, включая преодоление очень серьезных морально-этических проблем. Таким примером может служить клонирование человека. Целесообразно задуматься и о возможности "слияния" технологий, т. е. какого-то объединения процессов типа "сверху—вниз" и "снизу—вверх" [13] или их комбинации.

Посмотрим на проблему с другой стороны. Уже сейчас ясно, что предельные минимальные размеры активных приборных структур в ИС будут определяться размерами атомов и молекул, а возможно — ядер и электрона. Поэтому поиск и создание новых приборных структур в нанoeлектронике, отличающихся от отмеченных и рассматриваемых далее, необходим. Существенные коррективы

в данный процесс может внести чрезвычайно бурное развитие новых методов нанотехнологии, создание новых наноматериалов [5, 14]. Несмотря на это автор надеется, что, по крайней мере, некоторые из отмеченных в цикле статей подходов, проблем и принципов будут также важны или встретятся и для возможных новых приборных структур нанoeлектроники.

Основные формализмы

Вернемся к сформулированному в [1] парадоксу. В его справедливости мы фактически убедились при рассмотрении моделей элементов микроэлектроники [11, 12]. Ситуация не изменяется и для приборных структур нанoeлектроники, что также не удивительно. В целом, это связано с тем, что чем меньше размеры структуры, тем меньше носителей определяют характер функционирования прибора. В то же время системы с меньшим числом частиц, как правило, менее устойчивы и более подвержены различным влияниям. Результатом является большая чувствительность процессов, протекающих в элементе, к различным воздействиям. Поэтому в физико-математической модели необходимо учитывать многие факторы и детали. Как итог, происходит усложнение модели, иногда существенное. При этом *становится фактически невозможным применение хорошо отработанных методов статистической физики, справедливых для большого числа частиц и эффективно использовавшихся ранее в рамках полуклассического подхода [11, 12]. Это и является одной из основных проблем, возникающих при моделировании многих нанoeлектронных приборных структур. В результате, как правило, необходимо применять в качестве базового один из следующих формализмов квантовомеханического подхода, а именно [15]: 1) волновых функций; 2) матриц плотности; 3) функций распределения Вигнера; 4) функций Грина; 5) фейнмановских интегралов по траекториям.*

Когда и какой формализм необходимо применять? Ответить на эти два вопроса очень непросто. Попытаемся это сделать в оставшейся части цикла статей.

Вопрос о необходимости использования квантовомеханического подхода вообще нами уже анализировался ранее и связывался с соизмеримостью характеристической длины прибора или размеров технологических неоднородностей $L_{\text{хар}}$ с длиной волны де Бройля λ_B [1, 11]. Это правильная в целом оценка, однако сделаем несколько замечаний.

Во-первых, при описании транспорта в очень малых полупроводниковых приборных структурах число параметров (физических оценочных параметров длины, времени, частоты, скорости и др.), которые являются важными характеристиками процессов, оказывающих влияние на их поведение, может

быть, по крайней мере, более 35 [16]. Причем в [16] приведен в общем-то далеко неполный перечень! Ясно, что использовать их все при оценке практически невозможно.

Во-вторых, в мезоскопических образцах, представляющих для нас бесспорный интерес, транспорт традиционно характеризуют следующими основными параметрами: длиной волны де Бройля электронов (на поверхности Ферми), длиной свободного пробега при упругом рассеянии (или время релаксации импульса), длиной фазовой когерентности.

В-третьих, хорошо известно, что основными характеристическими параметрами при описании квантового транспорта являются: длина волны де Бройля λ_B и длина фазовой когерентности λ_ϕ . Таким образом, рассматриваемый вопрос достаточно сложен и, вообще говоря, должен анализироваться в каждом конкретном случае приборной структуры и воздействий на нее. Поэтому сравнение $L_{\text{хар}}$ с λ_B , как одной из основных квантовых характеристик микрочастицы, должно рассматриваться лишь как определенный оценочный ориентир.

В настоящее время существует много разнообразных формализмов и методов квантовомеханического описания транспорта в твердых телах. Здесь рассмотрим лишь основные.

Формализм волновых функций. Наиболее полное описание состояния частицы (или системы) в квантовой механике, как известно, базируется на волновых функциях. Основное уравнение данного формализма — уравнение Шредингера, а именно [17, 18]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(q, t), \quad (1)$$

где \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π ; Ψ — волновая функция; \hat{H} — оператор Гамильтона (гамильтониан); q — координаты точки пространства конфигураций; i — мнимая единица. Данное уравнение является одним из ключевых в квантовой механике и фактически постулируется. В случае необходимости учета спина оно соответствующим образом модифицируется [17, 18].

Как следует из (1), особая и, по существу, главная роль в квантовой механике (среди операторов) отводится гамильтониану, так как, задавая его, формулируются в математическом виде все особенности исследуемой системы. Поэтому составление данного оператора изучаемого объекта (системы) является, пожалуй, ключевой проблемой физико-математической постановки задачи. И это бесспорно при моделировании сложных объектов, в частности, приборных структур нанoeлектроники. В целом "успех решения задачи в смысле согласования выводов теории с опытом уже определяется тем, насколько основательно выбран гамильтониан (все ли важнейшие взаимодействия

учтены!)” [18]. К сожалению, это крайне тяжело сделать для приборов нанoeлектроники, так как все детали взаимодействий, очевидно, учесть не удастся. Последнее связано со следующими основными причинами: неполнотой экспериментальных данных об исследуемых приборных структурах и достаточно невысоким уровнем наших познаний в рассматриваемой области. Гамильтониан определяется двумя факторами: природой анализируемой системы и природой действующих на эту систему полей. Поэтому при моделировании нанoeлектронных приборных структур уравнение (1) должно быть дополнено уравнениями для микрополей, например уравнениями Лоренца, что еще больше усложняет модель. Другой комплекс важнейших проблем в процессе постановки задачи возникает при формулировке граничных условий.

Кроме шредингеровского представления, в котором вся информация о временном развитии системы перенесена на волновую функцию $\Psi(q, t)$, удовлетворяющую (1), иногда используются гейзенберговское представление и представление взаимодействия [17, 18]. Считается, что в большинстве случаев решить непосредственно уравнение Шредингера (1) легче, чем соответствующие матричные уравнения, например в гейзенберговском представлении. Это особенно важно при реализации моделей на вычислительной технике со средними возможностями, в частности, для таких сложных объектов, как нанoeлектронные приборы. Другие представления часто бывают удобны при поиске приближенного решения задачи. В целом же необходимо заметить, что данных три представления (метода) эквивалентны, хотя соответствующие волновые функции различаются.

Для нас также важно отметить, что аналогом шредингеровского представления операторов и волновых функций в классической механике является метод Гамильтона—Якоби. Подобные аналогии из классической механики имеются для всех других основных квантовомеханических формализмов [17, 18]. Именно это и является первопричиной подобия иерархии моделей квантовомеханического и полуклассического подходов [11].

К сожалению, для формализма волновых функций свойственен один недостаток. Для смешанных ансамблей, что характерно для приборных структур нанoeлектроники, находится набор волновых функций. Иногда это неудобно и может сводить на нет отмеченное преимущество данного формализма, например, в шредингеровском представлении, при построении экономичных квантовомеханических моделей. Поэтому более целесообразны в таких случаях для смешанных ансамблей могут быть другие формализмы.

Формализм матриц плотности. Статистический оператор (матрица плотности) $\hat{\rho}$ позволяет единообразно описывать как чистые, так и смешанные ансамбли, поэтому рассмотрение с его помощью

традиционно считается наиболее общей формой квантовомеханического описания системы [17]. Важно заметить, что для смешанных ансамблей отнюдь нет необходимости находить состояния составляющих их чистых ансамблей.

Основным уравнением формализма является уравнение Лиувилля—фон-Неймана [17, 18]:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -[\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (2)$$

где $[\hat{H}, \hat{\rho}]$ — квантовая скобка Пуассона, а матрица плотности задается с помощью соотношения

$$\hat{\rho} = \sum_n |\Psi_n\rangle w_n \langle \Psi_n|, \quad (3)$$

причем

$$\sum_n w_n = 1.$$

Здесь $|\Psi_n\rangle$ — вектор n -состояния, w_n — вероятность этого состояния. Отметим, что уравнение Лиувилля—фон-Неймана является исходным и в другой концепции представления открытых систем на микроуровне [1], правда, в оснащенных гильбертовых пространствах. Так же, как и ранее, при моделировании элементов нанoeлектроники уравнение (2) необходимо дополнить уравнениями для микрополей.

С помощью статистического оператора можно описать движение микрочастицы, а также микро- и макроскопические системы и взаимодействие между ними. Последнее чрезвычайно важно для нанoeлектронных приборных структур, включающих, как уже отмечалось, классические области и наноструктуру (наноструктуры). Нетрудно также заметить подобие уравнения (2) с уравнением Лиувилля классической статистической физики. Более того, квантовое уравнение формально переходит в классическое в пределе $\hbar \rightarrow 0$, при достаточной гладкости потенциала и начальной матрицы плотности. В связи с этим небезосновательна точка зрения [19] о том, что квантовая механика — прямое обобщение классической статистической механики.

Одной из ключевых проблем при анализе открытых квантовых систем в рамках выбранного традиционного подхода [1] является редукция полной задачи для закрытой квантовой системы к описанию изучаемой и входящей в нее открытой системы. Согласно [19] "под открытой квантовой системой понимается система A с ограниченным числом степеней свободы f_A , взаимодействующая с другой системой B , имеющей неограниченное (или очень большое) число степеней свободы f_B ". Заметим, что данное определение не противоречит определению И. Пригожина, приведенному в [1], и с точ-

ки зрения автора лучше подходит для анализа приборных структур наноэлектроники.

В соответствии с приведенным определением гамильтониан всей (замкнутой) системы $(A + B)$ может быть представлен в виде [19]

$$\hat{H} = \hat{H}_A(x) + \hat{H}_B(Q) + \hat{W}_{AB}(x, Q), \quad (4)$$

где $\hat{H}_A(x)$ — гамильтониан изолированной системы A ; $\hat{H}_B(Q)$ — гамильтониан изолированной системы B ; $\hat{W}_{AB}(x, Q)$ — оператор энергии взаимодействия систем A и B ; x — координаты системы A ; Q — координаты системы B .

Если $\hat{\rho}_{AB}(t)$ — статистический оператор всей системы, то необходимо решить уравнение (2) в виде

$$\partial \hat{\rho}_{AB} / \partial t = -[\hat{H}, \hat{\rho}_{AB}], \quad (5)$$

где \hat{H} задается (4). Для нас же больший интерес представляет поведение исследуемой малой открытой системы A (приборной структуры). Статистический оператор данной системы $\hat{\rho}_A(t)$ выражается с помощью соотношения [19]

$$\hat{\rho}_A(t) = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}(t), \quad (6)$$

где Tr_B — след, который берется только по переменным системы B . К сожалению, получить точное уравнение для $\hat{\rho}_A(t)$ практически невозможно [19].

Таким образом, мы приходим к двум важным и неутешительным выводам о том, что *сформулировать строгий гамильтониан, а также построить соответствующее уравнение для матрицы плотности наноэлектронной приборной структуры, как открытой системы, фактически не представляется возможным! Это и является двумя "стартовыми" проблемами моделирования элементов наноэлектронных ИС. Поэтому единственный выход из создавшейся ситуации — вывод приближенных уравнений. Это и является "стратегической линией" при разработке моделей приборов и элементов наноэлектроники. Следовательно, как и для полуклассического подхода [11], после "первого шага" введение дополнительных допущений фактически обязательно и для квантово-механического подхода.*

При построении уравнения для статистического оператора можно выделить ряд важных случаев (приближений) [19, 20]:

- система A практически не влияет на большую систему B ;
- систему B можно описать с использованием методов классической статистической физики;

- малая микроскопическая система A управляет большой макроскопической системой B .

Все три случая представляют существенный интерес при рассмотрении приборов и элементов ИС наноэлектроники. В настоящее время для приборных структур обычно исследуется первый случай, хотя и являющийся серьезным упрощением проблемы, однако для него удается получить практически важные результаты, в частности, рассчитать вольт-амперные характеристики и другие электрические параметры приборов. В результате исходное уравнение (5) может быть сведено к гораздо более простому "управляющему уравнению" (система B управляет A), что чрезвычайно важно при построении модели.

Рассмотренное уравнение для матрицы плотности (5) приведено в шредингеровском представлении. Иногда удобным бывает использование соответствующих уравнений в гейзенберговском представлении и представлении взаимодействия. В гейзенберговском представлении матрица плотности не зависит от времени, и поэтому необходимо исследовать эволюцию других операторов. В случае, когда гамильтониан может быть разбит на две части

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad (7)$$

(где \hat{H}_0 — гамильтониан более простой системы или системы в отсутствии возмущения; \hat{W} — оператор энергии возмущения), удобным бывает представление взаимодействия. Уравнение Лиувилля—фон-Неймана в этом представлении упрощается, так как в скобки Пуассона войдет только \hat{W} , что часто более удобно при получении упрощенных уравнений.

Дальнейшее упрощение уравнений может быть осуществлено путем перехода к одночастичным матрицам плотности. Для этого часто эффективным бывает метод вторичного квантования [17, 18], который применяется при решении задач для ансамблей одинаковых частиц, а также с переменным их числом. К сожалению, аналогично полуклассическому случаю [11], при переходе к одночастичным матрицам плотности выводится иерархия уравнений, в которой в уравнении для одночастичной матрицы плотности входит двухчастичная матрица плотности и т. д. При получении упрощенных уравнений приходится также вводить условия ослабления корреляций и другие [20, 21] для того, чтобы оборвать цепочку уравнений. В целом схема метода Боголюбова вывода квантовых кинетических уравнений остается без изменений [20].

Таким образом, *при использовании формализма матриц плотности при выводе квантовых кинетических уравнений возникают подобные полуклассическому случаю проблемы [11], поэтому принципы и ме-*

тоды их разрешения схожи. Это значительно упрощает непростою задачу рассмотрения проблем и принципов моделирования приборов нанoeлектроники несмотря на относительно невысокий уровень развития данной сложнейшей области.

Формализм квантовых функций распределения.

В квантовых теориях систем, включая открытые, часто еще более удобным является другое описание на основе квантовых функций распределения или функций Вигнера [20, 22]. Во многом это связано с определенным соответствием, в данном случае с классическим описанием на основе функций распределения [11].

Пусть для системы, состоящей из N частиц, матрица плотности в координатном представлении обозначается $\rho_N(q', q'', t)$, где $q = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$; $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ — координаты соответствующих частиц. Функция Вигнера в данном случае — матрица плотности в смешанном представлении координат и импульсов, а именно [20, 22]:

$$f_N(q, p, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3N}} \int \rho_N\left(q + \frac{1}{2}\hbar\gamma, q - \frac{1}{2}\hbar\gamma, t\right) \times \exp(-i\gamma p) d\gamma, \quad (8)$$

где q, p — $3N$ -мерные векторы; $p = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$; $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ — импульсы соответствующих частиц. Следовательно, функция Вигнера связана с матрицей плотности в координатном представлении. Так как функция Вигнера может принимать отрицательные значения, то не является функцией распределения в традиционном смысле, используемом в классической статистической физике. Тем не менее, после интегрирования по координатам или по импульсам получаются положительно определенные функции распределения по импульсам или по координатам, имеющие ясный физический смысл.

Используя непосредственно уравнение для матрицы плотности в координатном представлении в качестве исходного, с помощью (8) можно легко получить уравнение для функции Вигнера [22]:

$$\frac{\partial f_N(q, p, t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar(2\pi)^{6N}} \int \left[H\left(q' - \frac{1}{2}\hbar\gamma, p' + \frac{1}{2}\hbar\tau\right) - H\left(q' + \frac{1}{2}\hbar\gamma, p' - \frac{1}{2}\hbar\tau\right) \right] f_N(q', p', t) \times \exp[i(p' - p)\tau + i(q' - q)\gamma] d\tau d\gamma dq' dp', \quad (9)$$

где $H(p, q)$ — функция Гамильтона. Подчеркнем, что уравнение (9) уже не содержит операторов, в отличие от исходного уравнения для матрицы плотности (2), однако, к сожалению, является интегродифференциальным. Предельный переход от данного уравнения к классическому осуществляется путем разложения подынтегрального выражения по степеням \hbar . В результате в первом приближении получается классическое уравнение для

многочастичной функции распределения, совпадающее с уравнением Лиувилля [22].

Подобно, как и ранее для матрицы плотности, кардинальное упрощение квантового уравнения (9) может быть осуществлено путем перехода к одночастичным функциям Вигнера и введения предположений для обрыва цепочки уравнений [20, 22]. В итоге выводится квантовое кинетическое уравнение, которое в пределе при $\hbar \rightarrow 0$ переходит в кинетическое уравнение Больцмана.

В связи с изложенным выше функция Вигнера небезосновательно называется формальным аналогом классической функции распределения и рассматривается как обобщение последней на квантовый случай [20]. Тем самым устанавливается еще более тесная связь между квантовой механикой и классической статистической физикой, лежащей в основе полуклассического подхода. В целом описанный формализм считается одним из наиболее удобных для построения квантовых теорий открытых систем [22], к которым мы отнесли приборные структуры микро- и нанoeлектроники [1].

Таким образом, квантовомеханический подход, основанный на формализме функций Вигнера, может рассматриваться как прямое расширение полуклассического подхода на случаи необходимости учета квантовых эффектов в приборных структурах. Поэтому при описании приборов и элементов микро- и нанoeлектроники используется, строго говоря, квантовомеханический подход в сочетании с различными предположениями (огрублениями по пространству, времени и др.). Наиболее кардинальные, общепринятые приближения и приводят к полуклассическому подходу. Следовательно, может быть построена единая иерархия моделей квантовомеханического подхода, включающая и рассмотренные модели полуклассического подхода [11].

Формализм функций Грина. В упрощенных теориях квантового транспорта при сокращенном описании систем удобным является и еще один формализм — формализм функций Грина [21, 23]. И в этом случае матрица плотности (функция Вигнера) в координатном представлении имеет непосредственную связь с функциями Грина. Важно отметить, что знание данных функций достаточно для решения задач квантового транспорта.

Вывод кинетических уравнений для функций Грина, к сожалению, сложен. Это связано со следующими причинами:

- функции Грина, используемые на практике, — это обычно одночастичные функции, а следовательно, учесть строго влияние других объектов системы практически невозможно;
- число необходимых при рассмотрении задачи различных, хотя и зависимых, функций для неравновесных явлений может быть равным шести, в том числе две традиционные — запаздывающая и опережающая функции Грина;

- в получаемом упрощенном уравнении (уравнениях) типа Дайсона [23] и других для функции (функций) Грина появляются собственно энергетические части, которые учитывают взаимодействие единственной частицы с ее окружением многочастичной системы, предысторию частицы и должны быть получены с помощью дополнительных соотношений.

Последняя ситуация подобна ситуации, возникающей и рассмотренной в рамках полуклассического подхода [11] (в частности, в кинетическое уравнение Больцмана в интеграл столкновений входят скорости рассеяния, для которых необходимо получить соответствующие соотношения). Данный формализм достаточно часто и успешно применяется при описании квантового транспорта в твердом теле при анализе различных частных случаев. К сожалению, с усложнением задачи при его использовании затраты вычислительных ресурсов становятся очень значительными даже для высокопроизводительных систем.

Фейнмановские интегралы по траекториям (путям). Кроме традиционной формальной схемы квантовой механики, основанной на уравнении Шредингера, для описания открытых систем иногда используется фейнмановская формулировка квантовой механики [18, 24]. В данном случае вместо гамильтонова формализма в качестве исходного применяется лагранжев метод. Здесь основной объект — пропагатор, который позволяет связать волновую функцию $\Psi(q, t)$ с ее начальным значением $\Psi(q_0, t_0)$. Его знания также достаточно для описания квантовой системы. Достоинствами данного формализма считаются его физическая наглядность и более тесная связь с классической физикой.

К сожалению, данный формализм в общем случае является неудобным и достаточно громоздким в математическом плане. По крайней мере в его рамках сложно учитывать влияние зонной структуры [25], поэтому небезосновательно считается, что *для практических целей более удобно использовать непосредственно уравнение Шредингера с эффективным комплексным гамильтонианом*, так как математический аппарат рассматриваемого формализма может быть сведен именно к этому случаю [26]. С помощью данного подхода могут быть также получены уравнения для редуцированных матриц плотности открытых систем [26].

В целом этот формализм является одним из интересных, перспективных подходов получения упрощенных уравнений для описания квантового транспорта в открытых системах несмотря на относительно слабую степень его разработанности на настоящий момент времени.

Таким образом, рассмотренные формализмы эквивалентны. В чем же тогда смысл применения того или иного формализма? Можно назвать, по крайней

мере, четыре часто встречающиеся причины использования конкретного формализма, а именно:

- удобнее постановка задачи;
- проще редуцирование к описанию непосредственно исследуемой системы;
- легче получить решение задачи;
- удобнее интерпретация полученных результатов.

Например, как уже отмечалось, важное преимущество формализма функций Вигнера — возможность естественного вывода упрощенных квантовых кинетических уравнений, часто используемых на практике при моделировании наноэлектронных приборных структур.

Общие замечания

Проведенный анализ показывает, что многие утверждения, касающиеся проблем и принципов моделирования приборных структур микроэлектроники и рассмотренные ранее [11, 12], будут полезны и здесь. Так, можно также выделить четыре комплекса проблем: физические, математические, разработки программного обеспечения; определяемые вычислительной техникой, оборудованием, идентификацией параметров моделей и заданием исходных данных. Принципиально важной является AP-проблема [12], связанная с главной проблемой моделирования — неполнотой описания модели [1]. Бесспорно, важны и многие рассмотренные в [11, 12] проблемы: граничных условий, оценки адекватности модели, электрофизических параметров и др. Следует сразу же отметить, что данные проблемы при моделировании приборных структур наноэлектроники, как правило, еще сложнее.

Сначала рассмотрим лишь наиболее "острые" проблемы в целом. При постановке задачи возникает сразу несколько серьезных проблем, отмеченных ранее, а именно: запись гамильтониана; получение системы уравнений; формулировка граничных условий. Уже подчеркивалось, что запись точного гамильтониана для приборной структуры как открытой системы фактически невозможна, а следовательно, строгая система уравнений также не может быть получена. Более того, даже если бы это было достижимо, то учесть всю гамму важных факторов при моделировании конкретного элемента практически не представляется возможным. Это связано с тем, что здесь на *поведение прибора могут оказывать существенное влияние разного рода флуктуации*, а именно: в распределении отдельных ионов примеси внутри структуры; отдельных зарядов на поверхности раздела и др. К сожалению, влияние флуктуаций на поведение приборных структур наноэлектроники практически не исследовано. Поэтому *частую мы в определенном смысле моделируем усредненную (в статистическом смысле!) приборную структуру*. Таким образом, хотя мы вроде бы отказались от классической статистической

физики, она к нам "навязчиво приходит" с другой стороны. К этой проблеме в задании исходных данных можно добавить очень существенную в рассматриваемом случае проблему задания электрофизических параметров, которая, к сожалению, также часто игнорируется. Известно, что при моделировании элементов нанoeлектроники электрофизические параметры, как правило, задаются соответствующими объемными материалами. Это, мягко говоря, проблематично, так как хорошо известно, что электрические, магнитные и другие свойства наноструктурных материалов, к которым можно отнести изучаемые нами объекты, часто существенно изменяются [5, 14]. Для смягчения этой проблемы необходимо детальное моделирование электрофизических свойств структуры элементов нанoeлектроники. Идеальным, вообще говоря, было бы совместное моделирование электрофизических и электрических параметров и характеристик приборных структур. Проводимые исследования в этом направлении, однако, явно недостаточны. *В итоге можно прийти к не очень утешительному выводу: при моделировании приборных структур нанoeлектроники в настоящее время многие результаты должны рассматриваться лишь как весьма приближенные или качественные, особенно по внутренним переменным, хотя бы вследствие отмеченных неопределенностей.*

Некоторые основные направления разрешения ключевых проблем уже отмечались. Заметим, что многие принципы и пути разрешения указанных проблем будут, по крайней мере, схожи со случаем моделирования приборных структур микроэлектроники, а в ряде ситуаций просто остаются в силе. К сожалению, модели приборных структур нанoeлектроники менее разработаны, поэтому не всегда на настоящий момент времени можно подтвердить сказанное. Уверенность в этом часто вселяет подобие моделей полуклассического и квантово-механического подходов, т. е. фактически первопричина данного утверждения. Например, оказывается, что наиболее удачно AP-проблема и для приборных структур нанoeлектроники часто разрешается с помощью комбинированных моделей. Применение указанных в [1] методов синтеза также приводит ко всему разнообразию известных моделей элементов нанoeлектроники физического типа. *Вследствие принципиальной необходимости получения приближенных уравнений и здесь полезно понятие грубости модели [12]. Первые и важнейшие действия при построении таких моделей, как правило, — использование свойств симметрии и размерности изучаемой системы.*

В следующей статье будут более детально рассмотрены проблемы и принципы физики и моделирования элементов нанoeлектроники на примере резонансно-туннельных приборных структур.

Список литературы

1. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. Часть I. Основные положения // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 8. С. 34—37.
2. **Владимирский Б. М., Чораян О. Г.** Нейрокибернетика в начале нового века // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2002. № 7—8. С. 4—14.
3. **Кирой В. Н., Сухов А. Г.** Что и как вычисляет мозг — взгляд нейрофизиологов // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2002. № 7—8. С. 82—96.
4. **Kelly M. J.** The poor prospects for one-dimensional devices // Int. J. Electronics. 1993. V. 75. N 1. P. 27—40.
5. **Нанотехнология** в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований / Под ред. М. К. Роко, Р. С. Уильямса, П. Аливисатоса. М.: Мир, 2002. 292 с.
6. **Валиев К., Орликовский А.** Новое поколение элементной базы микроэлектроники: Кремниевый нанотранзистор сохраняет свои позиции // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. 2000. № 4. С. 46—49.
7. **International Technology Roadmap for Semiconductors: 1999 edition.** Austin, TX: International SEMATECH, 1999; 2001 edition, 2002 update; 2003 edition, 2004 edition; 2005 edition.
8. **Technology Roadmap for Nanoelectronics** / Ed. by R. Compañó, L. Molenkamp, D. J. Paul. EC IST programme Future and Emerging Technologies. 1999. 81 p.
9. **Technology Roadmap for Nanoelectronics** / Ed. by R. Compañó. EC IST programme Future and Emerging Technologies, Second Edition, 2000. 104 p.
10. **Resonant-tunneling mixed-signal circuit technology** / A. Seabaugh, B. Brar, T. Broekaert, F. Morris, P. van der Wagt, G. Frazier // Solid-State Electron. 1999. V. 43. P. 1355—1365.
11. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. Часть II. Модели полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 9. С. 26—36.
12. **Абрамов И. И.** Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. Часть III. Численное моделирование в рамках полуклассического подхода // Нано- и микросистемная техника. 2006. № 1. С. 36—46.
13. **Кобаяси Н.** Введение в нанотехнологию. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. 134 с.
14. **Наноматериалы** и нанотехнологии / Ж. И. Алферов, А. Л. Асеев, С. В. Гапонов, П. С. Копьев, В. И. Панов, Э. А. Полторацкий, Н. Н. Сибельдин, Р. А. Сулис // Микросистемная техника. 2003. № 8. С. 3—13.
15. **Абрамов И. И.** Моделирование физических процессов в элементах кремниевых интегральных микросхем. Мн.: БГУ, 1999. 189 с.
16. **Barker J. R., Ferry D. K.** On the physics and modeling of small semiconductor devices // Solid-State Electron. 1980. V. 23. N 6. P. 519—549.
17. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Квантовая механика. Нерелятивистская теория: Учебн. пос. М.: Наука, 1974. 752 с.
18. **Блохинцев Д. И.** Основы квантовой механики: Учебн. пос. М.: Наука, 1976. 664 с.
19. **Блохинцев Д. И.** Квантовая механика: Лекции по избранному вопросу: Учебн. пос. М.: Атомиздат, 1981. 96 с.
20. **Гуров К. П.** Основания кинетической теории (метод Боголюбова). М.: Наука, 1966. 352 с.
21. **Ахиезер А. И., Пелетминский С. В.** Методы статистической физики. М.: Наука, 1977. 368 с.
22. **Климонтович Ю. Л.** Статистическая теория открытых систем. Т. 3. Физика квантовых открытых систем. М.: Янус — К, 2001. 508 с.
23. **Займан Дж.** Современная квантовая теория. М.: Мир, 1971. 288 с.
24. **Фейнман Р., Хибс А.** Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968. 383 с.
25. **Quantum Transport in Semiconductors** / Ed. by D. K. Ferry, C. Jacoboni. New York, London: Plenum Press, 1992. 292 p.
26. **Менский М. Б.** Квантовые измерения и декогеренция. М.: Физматлит, 2001. 232 с.