

# Физика низкоразмерных систем (ФНРС)

## Методические указания к изучению дисциплины

### Аннотация

Физика низкоразмерных систем является одной из основ профессиональной теоретической подготовки и подготовки к научно-исследовательской деятельности в области физики конденсированного состояния, приобретающей все большее внимание в последнее время в связи с перспективами развития квантовых и нано технологий.

Для изучения дисциплины ФНРС необходима предварительная подготовка по теоретической физике (квантовая механика, статистическая физика и термодинамика), молекулярной физике и физике твердого тела. Требуется знакомство с методами вычислений, программированием, а также наличие опыта в сопровождении больших программных пакетов. ФНРС в настоящее время интенсивно развивается и уже дифференцировалась на ряд достаточно объемных направлений, собрать которые в одном небольшом курсе затруднительно. Поэтому при составлении рабочей программы по данной дисциплине мы постарались не в последнюю очередь учесть характер научно-исследовательской работы аспирантов кафедры (компьютерное моделирование материалов, нанотехнологии). В результате курс оказался состоящим из четырех частей:

1. Низкоразмерные системы, то есть системы, в которых существуют области, где движение электрона ограничивается (и, следовательно, квантуется) в одном, двух или во всех трех направлениях в пространстве. Эти области называются «квантовыми ямами, нитями и точками», соответственно. Ограничивающие область размеры имеют порядок нанометров и могут создаваться путем локального изменения свойств материала за счет легирования, создания контактов между разнородными материалами и пр. Наиболее распространенный пример реализации таких систем на практике – полупроводниковые гетероструктуры.
2. Существуют системы, сами по себе имеющие нанометровый масштаб в одном, двух или трех измерениях. Нуль-мерными системами являются, например, атомы и не слишком большие молекулы. В их строении и свойствах квантовые эффекты играют решающую роль. Квантовая механика атомов и молекул была создана в первую очередь и довольно давно, а теперь она существует в виде атомной физики и квантовой хи-

мии. Поэтому такие системы обычно не относят к 0-мерным. Открытием последних десятилетий было то, что многие вещества, хорошо изученные в объемном (3-х мерном) виде, способны образовывать довольно устойчивые 0-,1- и 2-D структуры, в том числе и обладающие дальним порядком. Наиболее известным примером является открытие новых аллотропных форм углерода, продемонстрировавших все варианты образования низкоразмерных структур: фуллерены (0D) – нанотрубки (1D) – графен(2D). Благодаря уникальным свойствам этих и подобных им структур возникла перспектива создания новых материалов и устройств, принявшая вид обширной междисциплинарной области, называемой сейчас нанотехнологией. Наличие в структурах нанометровых масштабов с необходимостью приводит к появлению квантовых эффектов, проявляющихся в свойствах этих структур и в их взаимодействиях с окружением.

3. Квантовые точки, то есть малые области со свойствами, отличными от свойств окружающей среды, по необходимости возникают в процессах фазовых превращений на этапах образования и роста зародышей новой фазы. На масштабе 1 нм зародыш конденсированной фазы содержит 2-3 десятка атомов (кластер) и его свойства пока еще сильно отличаются от свойств объемного материала. Такой зародыш можно зафиксировать в твердом состоянии и получить наночастицу, свойства которой можно использовать в разнообразных процессах создания новых материалов и изделий в рамках упомянутой выше нанотехнологии. Одна из широко распространенных реализаций этой схемы известна как технология получения наночастиц путем газофазного синтеза (например, путем конденсации паров металлов в среде инертного газа).
4. Наконец, последний (по счету) раздел курса посвящен инструментам, с помощью которых аспиранты могут исследовать объекты, перечисленные в п. 1-3. Такими инструментами здесь являются методы компьютерного моделирования материалов и устройств, начиная от классических и кончая фундаментальными квантовыми методами. Ввиду разнообразия имеющихся в этой области подходов и гигантского объема накопленных к настоящему моменту модельных данных, в настоящей программе мы ограничились подробным рассмотрением только нескольких наиболее востребованных методов атомистического моделирования, таких как первопринципные методы, базирующиеся на теории функционала электронной плотности. Все прочие методы рассмат-

риваются лишь кратко, следуя схеме: идея метода – стоимость ее реализации (объем требуемых вычислительных ресурсов) – достоинства (недостатки) – примеры использования для низкоразмерных систем.

Описанная выше идеология построения курса реализуется в следующем плане изложения дисциплины на лекциях.

Раздел 1. Системы с пониженной размерностью, их классификация, особенности и возможные применения (6 часов)

Раздел 2. Способы изготовления низкоразмерных структур. Наноинженерия. Полупроводниковые гетероструктуры (6 часов)

Раздел 3. Наноструктуры на основе углерода и их аналоги (6 часов)

Раздел 4. Атомные кластеры, их классификация, особенности строения и свойств (10 часов)

Раздел 5. Методы компьютерного моделирования низкоразмерных систем (10 часов)

Разделы 1 и 2 являются стандартными во многих университетских курсах по физике НРС, составляя в них вводную часть, где демонстрируется сущность размерных квантовых эффектов и описываются способы изготовления материалов и устройств, в которых эти эффекты могут наблюдаться и использоваться на практике. По большей части эти курсы ориентированы на подготовку специалистов в области электроники, и поэтому далее в них заложенные ранее принципы развиваются и конкретизируются до технологических схем и методов проектирования новых материалов и устройств электронной техники. В отличие от этого в предлагаемом курсе в последующих разделах 3 и 4 рассматриваются новые виды нанометровых объектов – углеродные наноструктуры и кластеры, соответственно, а в заключение - методы компьютерного моделирования НРС.

Рассмотрим структуру разделов курса более подробно.

Раздел 1.

Лекция 1. Системы с пониженной размерностью, определения и классификация. Размерное квантование и квантово-размерные структуры, условия наблюдения квантовых размерных эффектов. (2 часа).

Лекции 2 и 3. Свободный электронный газ в системах с числом измерений 0, 1 и 2. Плотность состояний. Энергия Ферми. Химический потенциал. Полная энергия. (4 часа)

## Раздел 2.

Лекция 4. Полупроводниковые квантовые ямы. Энергетическая диаграмма. Энергетический спектр электронов и дырок. Плотность состояний. Граничные условия на границе раздела двух полупроводников с разными эффективными массами. (2 часа)

Лекция 5. Способы изготовления полупроводниковых квантовых ям. Полупроводниковые гетероструктуры. Наноинженерия, Практическое использование - резонансно-туннельный диод. (2 часа)

Лекция 6. Полупроводниковые квантовые нити. Энергетический спектр. Плотность состояний. Способы изготовления. Баллистическая проводимость. (2 часа)

## Раздел 3.

Лекция 7. Аллотропные формы углерода. Углеродные наноструктуры. Фуллерены, их строение и свойства. Углеродные нанотрубки (УНТ), их симметрия и классификация. Методы синтеза углеродных наноструктур. (2)

Лекция 8. Электронная структура УНТ. Свойства УНТ: упругие модули, тепло- и электропроводность, адсорбция. Модифицирование УНТ. Дефекты. Применения УНТ в электронике, литиевой и водородной энергетике. (2)

Лекция 9. Двумерные соединения углерода. Графен. Электронная структура и свойства. Возможные применения. (2)

## Раздел 4.

Лекция 10. Атомные кластеры, определения и характерные особенности. Классификация кластеров. Методы получения и исследования кластеров. Стабильность кластеров. Магические числа. (2 часа)

Лекции 11-12. Металлические кластеры. Граница металл-вакуум. Функционал электронной плотности, модель желе и поверхностная энергия образцов металла конечных размеров. Размерные поправки к поверхностной энергии. (4 часа)

Лекция 13. Кластерная модель паров металлов. Ионизационное равновесие в кластерной плазме. Температурный ход состава плазмы. Расчет проводимости кластерной смеси. (2 часа)

Лекция 14. Диэлектрические кластеры. Ван-дер-Ваальсовы кластеры. (2 часа)

## Раздел 5.

Лекция 15. Методы компьютерного моделирования наноразмерных систем. Классификация методов и области их применимости. Современное состояние атомистического моделирования. (2 часа) 2

Лекция 16. Квантовая механика атомов, молекул и межчастичных взаимодействий. Обзор. (2 часа)

Лекция 17. Классические модели молекулярных и кластерных систем: молекулярная механика, молекулярная динамика, метод Монте-Карло. (2 часа)

Лекция 18. Методы первопринципного моделирования наноразмерных систем. Обзор. (2 часа)

Лекция 19. Обзор программного обеспечения. (2 часа)

При изучении курса не запланировано проведение ни практических занятий, ни лабораторных работ, основное время отводится на самостоятельную работу:

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоёмкость дисциплины	108
Аудиторные занятия	38
Лекции (Л)	38
Практические занятия (ПЗ)	нет
Лабораторные работы (ЛР)	нет
Самостоятельная работа (СРС)	70
Подготовка к коллоквиумам	43
Подготовка к экзамену	27
Вид итогового контроля	экзамен

Отсутствие практических занятий и лабораторных работ компенсируется выполнением научно-исследовательской работы, в которой практически всегда возникают задачи компьютерного моделирования наноразмерных объектов.

Текущий контроль успеваемости аспиранта производится в течение семестра путем назначения коллоквиумов по материалам пройденного раздела. В конце семестра назначается итоговый экзамен, на котором учитываются результаты текущего контроля. Условия контроля и критерии оценок отражены в рабочей программе дисциплины.