



ამირან ბიბილაშვილი

თანამედროვე ნანოტექნოლოგიები

(ლექციების კურსი)

თბილისი 2018

1. ნანოტექნოლოგიის არსი, ამოცანები და ტერმინოლოგია	4
2. საკუთარი ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი	8
3. n-ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი	10
4. p-ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი	12
5. დენის მატარებელთა ძვრადობა	14
6. ნახევარგამტარის ზედაპირზე დიფექტრიკული ფირის მიღება	16
7. ფოტოლიტოგრაფია: ფოტორეზისტი და მისი სახეები, ფოტოშაბლონი და მისი კონტროლი, ფოტოლიტოგრაფია SiO_2 -ის მაგალითზე	20
8. ნახევარგამტარში მინარევის დიფუზია და ლეგირების პროცესები	25
9. ეპიტაქსიის პროცესებით თხელი ფირების მიღება	29
10. სქემის ტოპოლოგიის შექმნა და მოდელირება	30
11. სქემის შექმნა ველის ტრანზისტორის მაგალითზე	33
12. ინტეგრალური სქემები და მათი კლასიფიკაცია	34
13. ფოტოლიტოგრაფიის ალტერნატიული მეთოდები	36
14. ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფია	37
15. ფეთქებადი ლიტოგრაფია	38
16. მასკანირებელი ზონდური მიკროსკოპია	39
17. ნანოლიტოგრაფია	41
18. ტალღური ფუნქციის არსი	44
19. ერთელექტრონიანი ატომის ორბიტალები	48
20. კვანტური რიცხვების არსი	50
21. მრავალელექტრონიანი ატომის ორბიტალები	52
22. მოლეკულის აღნაგობა	54
23. ელემენტთა ქიმიური ბმა	57
24. ჰომეოპოლარული (კოვალენტური) ბმა	59
25. ჰეტეროპოლარული (იონური) ბმა	62
26. მეტალური ბმა.	64
27. მოლეკულური (ვან-დერ-ვაალსის) ბმა	65
28. წყალბადისებური ბმა	66
29. ნანოსტრუქტურებში შინაგანი და გარეგანი ზედაპირების როლი	67
30. ინდივიდუალური ნანონაწილაკები და ნანოსისტემები	72

31. ნანონაწილაკის გეომეტრიული სისტემა	75
32. მაგიური რიცხვი	77
33. ნანონაწილაკის ელექტრული სტრუქტურა	78
34. მეტალური ნანონაწილაკები	80
35. ნანოშეზღუდვები: ნანოფირფიტის, ნანომაფთულის და კვანტური წერტილის ცნებების არსი	84
36. კრისტალის აგებულება	87
37. ფულერენი	90
38. ნახშირბადის ნანომილაკები. ჰირალობა	96
39. ფულერენის და ნანომილაკის მიღება გრაფიტის ლაზერული აორთქლებით	100
40. ფულერენის და ნანომილაკის თვისებები და გამოყენება	103
41. ელექტრონული მიკროსკოპიის გაზომვის არსი და მეთოდები	106
42. მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპი	108
43. ატომურ-ძალური მიკროსკოპი	110
44. მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი	112
საკითხავი მასალა	
45. კავშირი ტალღურ და კვანტურ მოვლენებს შორის	114
46. კონდოს ეფექტი	120
47. მემრისტორი და მისი მუშაობის პრინციპი	125
48. იონისტორი (სუპერკონდენსატორი) და მისი მუშაობის პრინციპი საკითხები თანამედროვე ნანოტექნოლოგიებში	130 142

თანამედროვე ნანოტექნოლოგიები

თავი 1.

1. ნანოტექნოლოგიის არსი, ამოცანები და ტერმინოლოგია

თავსართი „ნანო“ ბერძნული სიტყვაა და ნიშნავს „ჯუჯას“, ანუ ნანოსამყაროს ნომინალის ზომა R შეიცავს ნანობიექტს ნანომეტრების მასშტაბით: $1\text{ნმ}=10^{-9}\text{მ}=10^{-6}\text{მმ}=10^{-3}\text{მკმ}$; ნანობიექტი შეიძლება იყოს ბუნებაში ან მიღებულ იქნას ხელოვნურად. „ნანო“ მოიცავს ფიზიკურ, ქიმიურ, ბიოლოგიურ, სამედიცინო და ა.შ. ობიექტებს. სწორედ მათ მიღებას და პარამეტრების განსაზღვრას შეისწავლის ნანომეცნიერება. ნანომეცნიერება შეიძლება განისაზღვროს, როგორც დისციპლინათა შორისო მეცნიერება, რომელიც რამდენიმე ნმ-ან (10^{-9}მ) ზომის ობიექტებს და პროცესებს იკვლევს ფუნდამენტურად: ფიზიკო-ქიმიური, მექანიკური, სითბური, ოპტიკური და ა.შ. თვისებების თვალსაზრისით. ნანოტექნოლოგია შეიძლება განისაზღვროს, როგორც ნანომეცნიერების გამოყენებითი კვლევებისა და მათი პრაქტიკული მიღების ერთობლიობა, რომელიც გადადის მასობრივ წარმოებაში. ის შეიცავს ცოდნის, მეცნიერული მიდგომების და თავისებურებების, კონკრეტული პროცედურების და მათი მატერიალური შედაგის – ნანოპროდუქტის ერთობლიობას. ამიტომ შესაძლებელია ტერმინი ნანოტექნიკა, რომელიც მოიცავს ყველა ზემოთ ჩამოთვლილ პროცესებს და თეორიულ საფუძვლებს, შეიძლება ჩავთვალოთ, როგორც ნანოტექნოლოგიის ერთ-ერთი შემადგენელი ნაწილი.

ნანომეცნიერება არის ცოდნის და მოქმედების თავისებურებების ერთობლიობა ნანოზომის საგნებზე, ხოლო ნანოტექნოლოგია და ნანოტექნიკა – მათზე ქმნის სტრუქტურებს და ხელსაწყოებს ზომით ატომურიდან ($0,1\text{ ნმ}$) ~ 100 ნმ .

		ავტომობილი			ქალაქი	
		სინათლე	ადამიანის ↑ თმა			
ატომი	ნანომილი	0,4 . . . 0,8	30			
1Å	1ნმ		1მკმ	1მმ	1მ	1კმ
10^{-10} მ	10^{-9} მ		10^{-6} მ	10^{-3} მ		10^3

იმისათვის, რომ შევისწავლოთ ნანოტექნოლოგიის ძირითადი პრინციპები, საჭიროა გავერკვეთ იმ საკითხების არსში, საიდანაც წარმოიშვა იგი. ზოგადად, შეიძლება ითქვას, რომ ელექტრონიკამ შეცვალა ადამიანის ყოფაცხოვრება ძირფესვიანად მე-19 საუკუნეში. მისგან მე-20 საუკუნის მეორე ნახევარში შეიქმნა მიკროელექტრონიკა, ხოლო ამ საუკუნის დასაწყისში მიკრო გადაიზარდა ნანოში და უპრიანია ჯერ გავერკვეთ მიკროტექნოლოგიის ძირითად საკითხებში, რომელიც გაგვიადვილებს ნანოტექნოლოგიის შესწავლას.

მიკროელექტრონიკის განვითარება, რომელიც განსაზღვრავს მეცნიერების და ტექნიკის სხვა დარგების პროგრესს, ძირითადად განპირობებულია მიკროელექტრონული სისტემების სწრაფქმედებისა და ინტეგრაციის ხარისხის გაზრდით. ამ მიმართულებით პროგრესი მიიღწევა ინტეგრალური მიკროსქემის (იმს) ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირებისა და ფუნქციონალური ქმედების გაზრდით. მაგრამ, ამ ტენდენციის განვითარების გზაზე არსებობს ფიზიკური, ტექნოლოგიური და ენერგეტიკული წინაღობები, რომელთა გადალახვის მცდელობამ შექმნა ახალი მიმართულება – ნანოელექტრონიკა. მიკროდან ნანოელექტრონიკაზე გადასვლის მიზნით იმს-ის ელემენტების მინიატურიზაციის საკითხი დღეს-დღეობით მეტად აქტუალურია.

რამდენიმე რიგით ზომების შემცირება პრაქტიკულად ცვლის ნანოელემენტის მუშაობის ფიზიკური მექანიზმების საფუძვლებს. მაგალითად, ნანოელემენტში ელექტრონი გამოიყენება, არა როგორც დენის გადამტანი ნაწილაკი, არამედ როგორც ტალღა. ნანოელექტრონიკა წარმოადგენს მიკროელექტრონიკის ლოგიკურ გაგრძელებას. საინფორმაციო ხელსაწყოები შემცირდნენ მიკროდან (10^{-6} მ) ნანო (10^{-9} მ) ზომამდე. ნანოელექტრონიკაში ელემენტების ტიპური ზომები შეადგენენ 10 – 100 ნმ-ს.

აღსანიშნავია, რომ ნანოელექტრონიკის და ნანოტექნოლოგიის შექმნა არაა განპირობებული მხოლოდ ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირებით ნანომასშტაბამდე. ძირითადი ფაქტორია ნანომასალებებისთვის სრულიად ახალი, უნიკალური თვისებების გამოვლენა, რომელთა ახსნა კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში შეუძლებელია და საჭიროებს უფრო რთული ფიზიკის ჩართვას. მაგალითად, როგორც ცნობილია ოქროს მასალა არ იუანგება, მაგრამ ნანორაოდენობის ოქროს თვლადი ატონები (დაახლოებით 70 – 80 ატომი) ძალიან სწრაფად (ფეთქებად) იუანგება. ახალი პროცესების კვლევისა და

ახსნისათვის საჭიროა ახალი იდეები, ახალი მიდგომები, ახალი გამზომი აპარატურა და ტექნოლოგიური მოწყობილობები.

ნანონაწილაკები ზომების მიხედვით მოთავსებულია მცირე მოლეკულებსა და კომპაქტურ მყარ სხეულებს შორის და თავისი თვისებებით განსხვავდება ორივე მეზობლისაგან. ნანონაწილაკები, ისევე როგორც მყარი სხეულები, მოლეკულებისაგან განსხვავებით, ხასიათდება კოლექტიური თვისებებით (ფაზური მდგომარეობა, სითბო და ელექტროგამტარებლობა და ა.შ.), მაგრამ ეს თვისებები დამოკიდებული აღმოჩნდა მათ ზომებზე, რის ახსნაც ტრადიციული მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიის საფუძველზე შეუძლებელი აღმოჩნდა.

„ნანომასალის“ და „ნანოსტრუქტურის“ ტერმინი შემოღებულია იმ შემთხვევისათვის, როცა ობიექტის ხაზოვანი ზომა ერთი მიმართულებით მაინცაა ნანომეტრული დიაპაზონის. აღსანიშნავია, რომ სტრუქტურებს ეწოდებათ ორგანოზომილებიანი, ერთგანზომილებიანი და ნულგანზომილებიანი, რადგანაც მათი ზომები ერთი, ორი ან სამი მიმართულებით განსაზღვრულ „კრიტიკულ“ მნიშვნელობაზე ნაკლებია. ამ „კრიტიკული“ მნიშვნელობის ქვემოთ სტრუქტურა ამ მიმართულებაზე (მიმართულებებზე) ხდება სრულიად განსხვავებული თვისებების, ვიდრე კომპაქტური, მოცულობითი (სამგანზომილებიანი) მასალა, საიდანაც ისაა დამზადებული.

სტრუქტურის ზომისა და ფუნქციონალურ დანიშნულებას შორის კავშირის მოძებნისათვის, პირველ რიგში, მოითხოვება შესაბამისი ტექნოლოგიის და გამზომი აპარატურის შექმნა. მოხდა მიკროელექტრონული ხელსაწყოების შექმნის პროცესების გადაზრდა ნანოელექტრონიკის ახალ პრინციპებად. კერძოდ, მიკროელექტრონიკის ის ძირითადი საკითხები, საიდანაც წარმოიშვა ნანოელექტრონიკის პრინციპები არის შემდეგი პროცესები:

- ა) ქვესაფენი (ნახევარგამტარი) და მის ზედაპირზე ქანვის მიღების პროცესები;
- ბ) ფოტოლიტოგრაფია: ფოტორეზისტი და მისი სახეები; ფოტოშაბლონი, მისი მიღება და კონტროლი;
- გ) ნახევარგამტარში დიფუზიისა და ლეგირების პროცესები;
- დ) ნახევარგამტარზე ეპიტაქსიით თხელი ფირების მიღება;
- ე) ფოტოლიტოგრაფიის სრული პროცესი;
- ვ) ტოპოლოგიის შექმნა და ხელსაწყოს მოდელირება;
- ზ) ინტეგრალური სქემები და მათი კლასიფიკაცია.

ნანოტექნოლოგიის პრინციპების შესწავლისათვის გავერკვიოთ ზოგიერთი ტერმინის არსში:

ქვესაფენი – წამოადგენს, ძირითადად ნახევარგამტარის ან, ზოგჯერ დიელექტრიკის ფირფიტას, სისქით 300 მკმ, რომელაზედაც ფორმირდება სქემა, ანუ ის არის სქემის საყრდენი;

ფოტორეზისტი – ორგანული, ბლადტი სითხეა, რომელიც ულტრაიისფერი სხივის მოქმედებით იცვლის სრუქტურას, რის შედეგადაც იცვლება გამსხნელი მჟავის მიმართ მედეგობა, ანუ ამოწამვლა მოხდება ლოკალურად, სასურველი არეების მიხედვით;

ფოტოშაბლონი - არის ბრტყელ-პარალელურიანი მინის ან კვარცის ფირფიტა, დაფარული საჭირო კონფიგურაციით ულტრაიისფერი სხივისათვის გაუმჭვირვალე Cr_2O_3 ან Fe_2O_3 შრით;

ფოტოლიტოგრაფია – პროცესია, სადაც ფოტორეზისტის, ფოტოშაბლონის და ქიმიური მჟავებითა და გამსხნელებით ქვესაფენის ზედაპირზე გადადის საჭირო სურათი;

ეპიტაქსია – პროცესია, რომლის დროს ხდება ქვესაფენზე (საფენზე) თხელი ფირების გაზრდა ისე, რომ გაზრდილი ფირი იმეორებს საფენის სტრუქტურას;

დიფუზია – მაღალტემპერატურული ($1100^{\circ}C$) პროცესია, სადაც ქიმიური ელემენტის კონცენტრაციის გრადიენტით ხდება საფენში ამ ელემენტის შეყვანა;

ლეგირების პროცესშიც ხდება საფენში ელემენტის შეყვანა უფრო დაბალ ტემპერატურაზე, მისი დასხივებისას, მაღალენერგეტიკული ენერგიის მქონე ამ ელემენტის იონებით;

ინტეგრალური მიკრისქემა (იმს) – არის ტრანზისტორების, რეზისტორების (წანაღობების) და კონდენსატორების (იმს-ის ელემენტები) ერთობლიობა, შეერთებულნი საჭიროების მიხედვით, რომლებიც ფორმირდებიან ერთ ტექნოლოგიურ პროცესში, ერთ საფენზე და ასრულებენ საჭირო ფუნქციას;

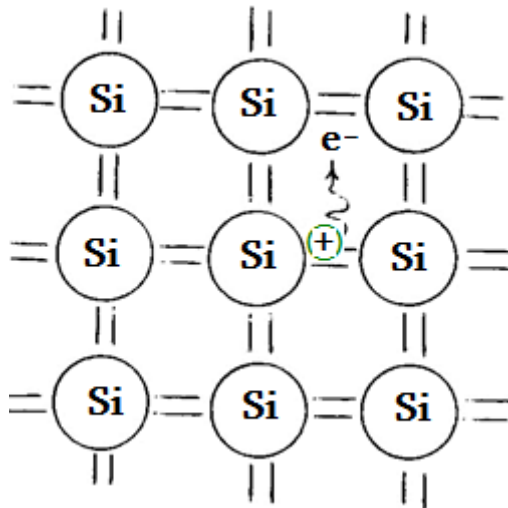
ფოტოშაბლონის შექმნამდე ხდება იმს-ის **მოდელირება** მისი მომავალი ფუნქციონალური დანიშნულების მიხედვით, ტრანზისტორების, რეზისტორების და კონდენსატორების ურთიერთ კომფორტული განლაგება, ანუ **ტოპოლოგიის** შექმნა. **ნანოტექნოლოგია** – მეცნიერების ახალი მიმართულებაა, რომელიც განსაზღვრული რაოდენობის ატომების და მოლეკულების მანიპულაციით

აწეობს და ქმნის სასურველი სტრუქტურის მასალებს და ხელსაწყოებს. მას შეუძლია მიიღოს სასურველი ნანობიექტები და ნანოსტრუქტურები ხელოვნური სინთეზით, რომელთა მსგავსები არ არსებობენ საერთოდ ბუნებაში, შექმნას ჯერ არნახული სიმძლავრის და სისწრაფვის კომპიუტერები და საინფორმაციო საშუალებების სხვა ხელსაწყოები. უახლოეს ათწლეულში მისი სამეცნიერო-ტექნიკური განვითარების ტემპი მოახდენს ნანორეგულაციას და კარდინალურად შეიცვლება ადამიანის მოღვაწეობის ყველა სფერო. ნანოტექნოლოგია, რომელსაც ხშირად უწოდებენ „მაღალ ტექნოლოგიებს“, ემყარება სამეცნიერო და ექსპერიმენტულ საფუძვლებს. ის წარმოადგენს დისციპლინათა შორისო მეცნიერებას და აერთიანებს ფიზიკას, ქიმიას, ბიოლოგიას, ელექტრონიკას, მედიცინას და სხვა დარგებს. მსოფლიოს ბევრ ქვეყანაში ის აღიარებულია სახელმწიფოს განვითარების პრიორიტეტულ მიმართულებად.

2. საკუთარი ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი

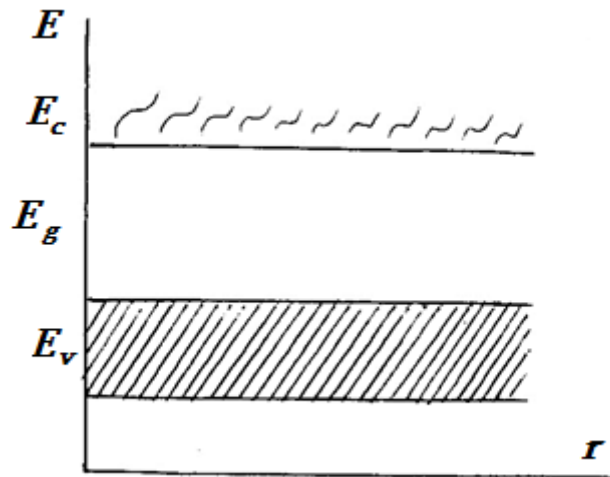
ნახევარგამტარები არიან მასალები, რომელთა გამტარებლობა მოთავსებულია მეტალურ ($10^4 \div 10^6$ ომი \cdot სმ $^{-1}$) და დიელექტრიკულ ($10^{-3} \div 10^{-5}$ ომი \cdot სმ $^{-1}$) გამტარებლობებს შორის. მათ ძალიან დიდი მნიშვნელობა აქვთ ტექნიკასა და ყოფაცხოვრებაში. ისინი წარმოადგენენ ძირითადად იმს-ის საფენებს, ან ასრულებენ სხვადასხვა ფუნქციებს.

ნახევარგამტარები ძირითადად მოთავსებულნი არიან მენდელეევის სისტემის მე-4 ჯგუფში, ისეთები როგორცაა გერმანიუმი (Ge) და სილიციუმი (Si). განვიხილოთ სუფთა, მინარეგების გარეშე, ნახევარგამტარული მასალა, მაგალითად სილიციუმი, რომელთა კვანძებში არიან მხოლოდ სილიციუმის ატომები. მის ატომს აქვს გარე შრეზე 4 სავალენტო ელექტრონი და მოლეკულის შექმნისას სილიციუმის ყოველი ატომი გარშემორტყმულია 8 ელექტრონით, რითაც ხდება ყველა ბმის გაჯერება. ასევე ნახევარგამტარულ მასალასაც ქმნიან მენდელეევის სისტემის მე-3 და მე-5 ჯგუფის ელემენტები შეერთებისას, მაგალითად, გალიუმი (Ga) და არსენიდი (დარიშხანი As) -- GaAs, მე-2 და მე-6 ჯგუფის - ცინკი (Zn) და გოგირდი (S) – ZnS და ა. შ. ისინიც მოლეკულის შექმნისას, მათი ყოველი ატომი გარშემორტყმულია 8 ელექტრონით (ნახ.2.1).



ნახ.2.1. საკუთარი ნახევარგამტარის სქემატური წარმოსახვა

აბსოლუტურ ნულ გრადუს ტემპერატურაზე ყველა სავალენტო ელექტრონი იმყოფება ბმაში, ენერგეტიკულად ყველა ელექტრონი ერთნაირია, არაა უპირატესი რომელიმე მათგანი. ყოველი ენერგეტიკული ზონა შეიცავს მრავალ ცალკეულ ენერგეტიკულ დონეს. ცხადია, რომ სასრული ზომის კრისტალში დონეთა შორის მანძილი ატომების რიცხვის უკუპროპორციულია. თუ კრისტალში $10^{22} \div 10^{23}$ სმ^{-3} ატომია, მაშინ მათ მიერ შექმნილი ენერგეტიკული დონეები ერთმანეთისგან დაშორებული იქნება $10^{-22} \div 10^{-23}$ ევით, ე.ი. ზონა იქნება კვაზიუწყვეტი. ელექტრონები მათზე განლაგდებიან პაულის პრინციპით და იქნებიან სასრული რაოდენობის. საჭირო იქნება სრულიად მცირე ენერგეტიკული ზემოქმედება, რომ ელექტრონი გადავიდეს ზემო დონეზე, თუ იქ იქნება თავისუფალი ადგილი. ამიტომ მათი ენერგეტიკული განლაგებისას ყველა ელექტრონის ენერგეტიკული დონე იქნება მკვეთრად მიკრული ერთმანეთზე და ქმნიან უწყვეტ სპექტრს, ე.წ. **სავალენტო** ზონას (ნახ. 2.2-ზე E_v). ასეთი ნახევარგამტარი, მასზე გარე ძაბვის მოდებისას დენს არ გაატარებს, რადგან არაა დენის თავისუფალი მატარებლები – ელექტრონები. დენის თავისუფალი მატარებლების შექმნისათვის საჭიროა ბმის გაწყვეტა, ანუ მისგან ელექტრონის „მოგლეჯა“, რისთვისაც საჭიროა ენერგიის გარკვეული რაოდენობის დახარჯვა (E_g). ამ ენერგიის მცირე ენერგისას თავისუფალი ელექტრონები არ მიიღებიან, ანუ მათ ექნებათ **აკრძალული** არე, ზონა



ნახ.2.2. ნახევარგამტარის ენერგეტიკული ზონები

(ნახ. 2.2-ზე E_g). ამ ენერგიის მაღლა მიიღება თავისუფალი ელექტრონები, რომლებსაც შეუძლიათ მონაწილეობა მიიღონ გამტარებლობაში და ისინი აქ ქმნიან გამტარებლობის ზონას (ნახ. 2.2-ზე E_c).

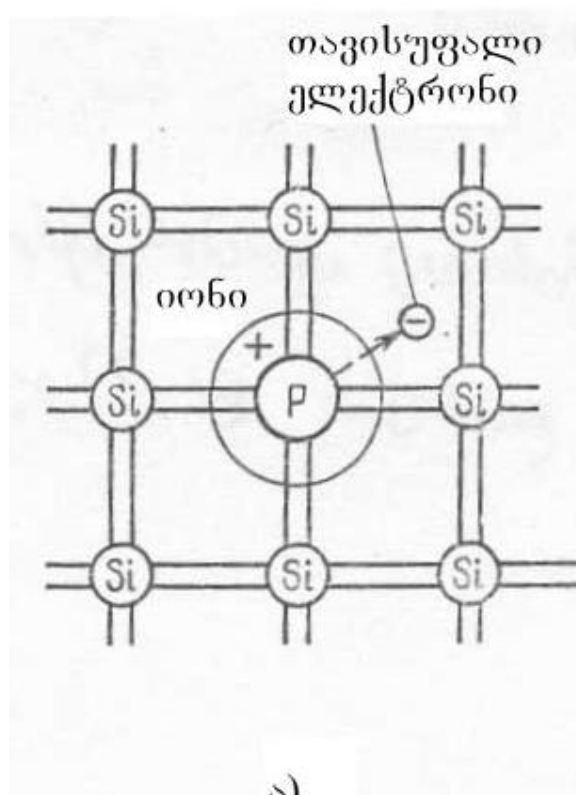
ნახევარგამტარმა ეს E_g ენერგია შეიძლება მიიღოს სხვადასხვა გზით, მაგალითად, სითბოთი ან სინათლით, მაშინ გამტარებლობის ზონაში მოხვდება ელექტრონი და ის სავალენტო ზონაში ტოვებს ცარიელ ადგილს ანუ ხვრელს. ხვრელის მუხტი იქნება ელექტრონის მუხტის საწინააღმდეგო – „დადებითი“. შესაბამისად, გამტარებლობის ზონაში ელექტრონების რიცხვი (n_i) იქნება ტოლი სავალენტო ზონაში ხვრელების რიცხვისა (p_i). ასეთი ნახევარგამტარი არის საკუთარი ნახევარგამტარი და მისთვის $n_i = p_i$. ასეთი საკუთარი ნახევარგამტარის გამტარებლობას ეწოდება საკუთარი გამტარებლობა.

აკრძალული ენერგიეს სიდიდე დამოკიდებულია სტრუქტურის, ატომთა ბმის, მასალის სახეზე და ამიტომ ის განსხვავდება ნახევარგამტარული მასალის მიმართ.

3. ელექტრონული გამტარებლობის (n) ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი

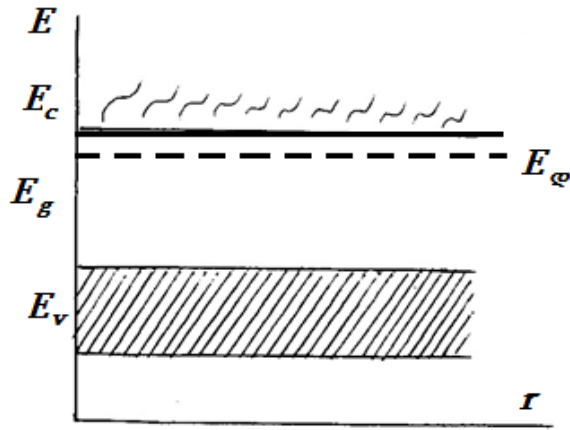
რეალურად ნახევარგამტარში ყოველთვის არსებობენ მინარეული ცენტრები, რომლებიც წარმოადგენენ უცხო ატომებს ნახევარგამტარის კრისტალში – ჩანაცვლებითი (კვანძებში) და ჩანერგვითი (კვანძთა შორის). ასეთ შემთხვევაში გამტარებლობა განპირობებულია მინარეული ატომებით და ეწოდება მინარეული გამტარებლობა. განვიხილოთ ჩანაცვლებითი მარტივი

ცენტრები, რომელთა მოქმედება დამოკიდებულია ჩანაცვლებული ატომის ვალენტობაზე. მაგალითად, თუ სილიციუმში შევიყვანო მე-V ჯგუფის ელემენტს (მაგალითად ფოსფორს P-ს), რომელსაც აქვს ხუთი სავალენტო ელექტრონი, მაშინ ხუთიდან ოთხი სავალენტო ელექტრონი მონაწილეობს მეზობელი სილიციუმის ატომების ბმაში (ნახ.3.1) და ქმნიან მყარ გარსს შემდგარს რვა ელექტრონისგან. ამ კომბინაციიდან მე-9 ელექტრონი (ანუ ფოსფორის მე-5 ელექტრონი) იქნება სუსტად ბმული ხუთვალენტოვანის ბირთვთან, შესაძლებელია ადვილად მოწყვედეს მას და გახდეს თავისუფალი. ამიტომ მინარეული ატომი გახდება ერთჯერადად დადებითად დამუხტული იონი, რომელიც იქნება უძრავი.



ნახ.3.1. n- ტიპის სილიციუმი.

ენერგეტიკულად, ამ ელექტრონის მოწყვეტის ენერგია იქნება ბევრად მცირე, ვიდრე საკუთარი ნახევარგამტარის შემთხვევაში და შესაბამისად, მისი ენერგეტიკული დონე იქნება გამტარელობის ზონასთან ახლოს აკრძალულ ზონაში, რაც მოცემულია ნახ. 3.2-ზე. ასეთი მინარეული ნახევარგამტარი არის

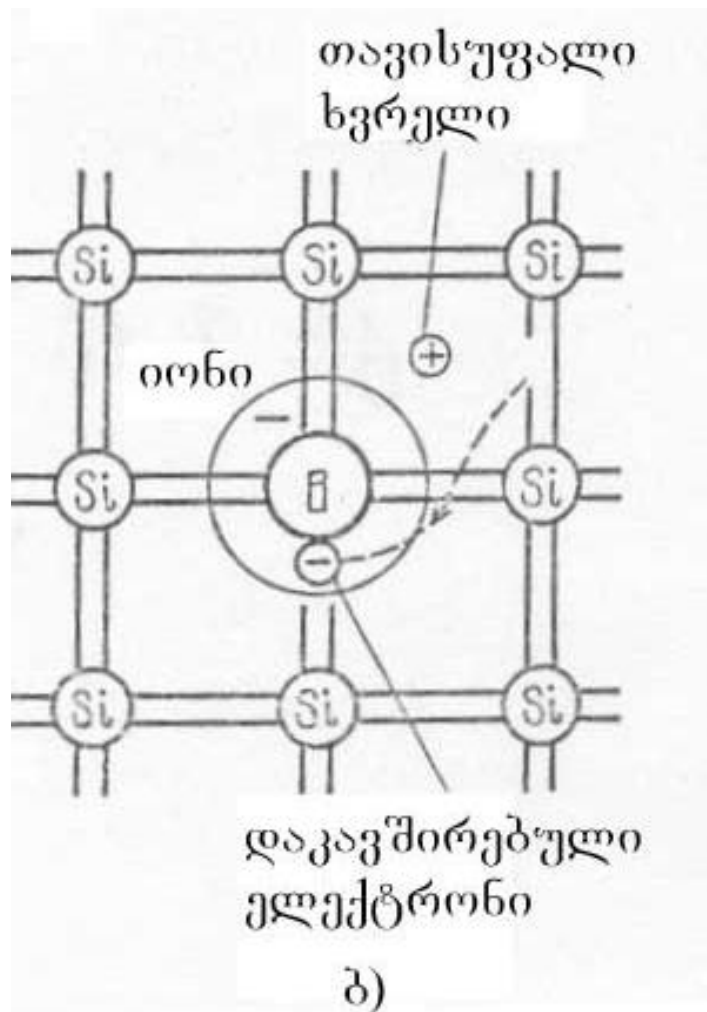


ნახ.3.2. ელექტრონული ტიპის (n) ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი

ელექტრონული ტიპის, ხოლო მინარევი - დონორული (გამცემი) ტიპის. შესაძლებელია, რომ გამტარებლობის ზონაში თავისუფალ ელექტრონებს, შექმნილნი მინარეული ატომებით, რომლებისთვისაც საჭიროა მცირე ენერგია, დაემატონ თავისუფალი, საკუთარ ელექტრონები და გამტარებლობა უფრო მეტად იქნება ელექტრონული. ასეთი ნახევარგამტარი არის ელექტრონული, ანუ n - ტიპის. მინარევს, რომლებიც აძლევენ ელექტრონებს მესერს, ეწოდებათ დონორული. ამ დროს, თუ დონეზე ზის ელექტრონი დამუხტულია უარყოფითად და თუ არ ზის - ნეიტრალურია. ამიტომ: $n = p + N_d^+$, სადაც იონიზირებული დონორების კონცენტრაცია: $N_d^+ = N_d - n_d$. ზოგადად, $p \ll N_d^+$ და $n \approx N_d^+$.

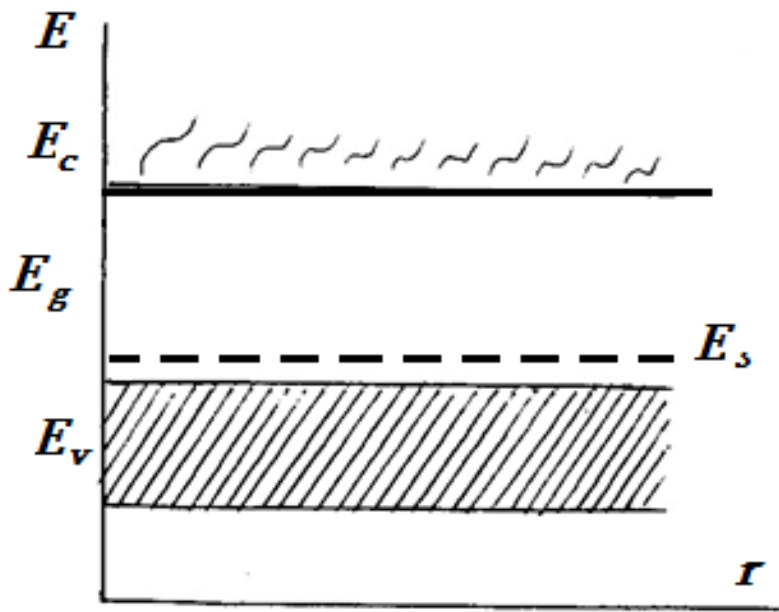
4. ხვრელური გამტარებლობის (p) ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი

რეალურად ნახევარგამტარში ყოველთვის არსებობენ მინარეული ცენტრები, რომლებიც წარმოადგენენ უცხო ატომებს ნახევარგამტარის კრისტალში - ჩანაცვლებითი (კვანძებში) და ჩანერგვითი (კვანძთა შორის). ასეთ შემთხვევაში გამტარებლობა განპირობებულია მინარეული ატომებით და ეწოდება მინარეული გამტარებლობა. განვიხილოთ ჩანაცვლებითი მარტივი ცენტრები, რომელთა მოქმედება დამოკიდებულია ჩანაცვლებული ატომის ვალენტობაზე. მაგალითად, თუ სილიციუმში შევიყვანთ მე-3 ჯგუფის ელემენტს (მაგალითად ბორს), მაშინ სამივე სავალენტო



ნახ.4.1. p-ტიპის სილიციუმი

ელექტრონი მონაწილეობს მეზობელი სილიციუმის ატომების ბმაში (ნახ.4.1) და რვა ელექტრონიანი მეარი გარსის შექმნისათვის აკლია ერთი ელექტრონი. ამ ბმის შექმნისათვის შეიძლება ელექტრონი მოვიდეს სილიციუმის სხვა მეზობელი ბმიდან. მაშინ მიიღება უარყოფითი იონი კვანძში და ხვრელი სავალენტო ზონაში, ანუ მიიღება ხვრელების სიჭარბე. ასეთი ნახევარგამტარი არის ხვრელური, ანუ p-ტიპის. ასეთი ტიპის მინარევია აქცეპტორული – ნეტრალურია, როცა მასზე არ ზის ელექტრონი და უარყოფითად დაძუხტულია, როცა მასზე ზის ელექტრონი (ნახ.4.2).



ნახ.4.2. ხვრელური ტიპის (p) ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი

ზოგადად, შეიძლება იყოს, რომ საკუთარს დაემატოს აქცეპტორული და იყოს გამტარებლობა შერეული, მაგრამ რადგანაც საკუთარი ავღზნება ბევრად ნაკლებია აქცეპტორულზე, ამიტომ ხვრელების კონცენტრაციაა $p \approx N_a$.

5. დენის მატარებლების ძვრადობა

ერთგვაროვან ნახევარგამტარში სითბური ავღზნებით შექმნილი თავისუფალი ელექტრონები ასრულებენ ქაოსურ მოძრაობას. თითოეული ელექტრონის ტრაექტორია წრფივია მანამ, სანამ არ დაეჯახება მესერის დეფექტს, სხვა დენის მატარებელს და ა.შ. ამ დროს დენის საშუალო მნიშვნელობა ნულის ტოლია ნებისმიერი მიმართულებით.

ორ მეზობელ დაჯახებას შორის მანძილი არის თავისუფალი განარბენის მანძილი $\bar{\lambda}$, მოძრაობის საშუალო სიჩქარე ამ მანძილზე \bar{v} და თავისუფალი განარბენის საშუალო დრო $\bar{\tau}$. მათ შორის არის ცხადი კავშირი $\bar{\tau} = \frac{\bar{\lambda}}{\bar{v}}$.

თუ ნახევარგამტარულ ნიმუშზე მოდებულია საკმაოდ მცირე მუდმივი ელექტრული ველი რაღაც დაძაბულობით, მაშინ ქაოსურ მოძრაობასთან ერთად გაჩნდება ელექტრონების და ხვრელების ურთიერთსაწინააღმდეგო

მიმართული მოძრაობის სიჩქარის მდგენელი. ეს სიჩქარე იწოდება გამტარებლობის დრეიფული სიჩქარის საშუალოდ.

გარე ველის მოქმედებით m^* მასის და e მუხტის მატარებელი იმოდრავებს აჩქარებით: $a=eE/m^*$.

შეიძლება ჩაითვალოს, რომ მრავალჯერადი დაჯახების შედეგად ელექტრონის დრეიფული სიჩქარის საშუალო: $\bar{v}_{dr} = a\bar{\tau}$, მაშინ $\bar{v}_{dr} = e\bar{\tau} E/m^*$.

აღვნიშნოთ $\mu = \frac{e\bar{\tau}}{m^*} = \frac{\bar{v}_{dr}}{E}$. მას უწოდებენ მუხტის მატარებლის ძვრადობას.

ეს რიცხობრივად ტოლია დრეიფული სიჩქარისა, მიღებული ერთეულოვან ველში. მისი განზომილებაა $\text{სმ}^2/\text{ვ}\cdot\text{წმ}$. მატარებლის ძვრადობა არის ერთ-ერთი მთავარი პარამეტრი ნახევარგამტარული მასალისათვის და ახდენს ძალიან დიდ გავლენას უშუალოდ მასზე შექმნილი სქემის პარამეტრებზე, კერძოდ მის სწრაფქმედებაზე. ელექტრონისათვის ძვრადობა უარყოფითი სიდიდეა, ხვრელისათვის კი დადებითი.

ეს ფორმულა გვაძლევს საშუალებას გავაანალიზოთ ძვრადობის დამოკიდებულება ნახევარგამტარული მასალის ზოგიერთ პარამეტრისაგან. ძვრადობა დამოკიდებულია ელექტრონის თავისუფალი განარბენის საშუალო დროზე ანუ მესერის რაღაც დეფექტზე გაბნევისას ორ მეზობელ დაჯახებას შორის მანძილზე. ნახევარგამტარში რაც ნაკლები დეფექტია, მით მეტია თავისუფალი განარბენის მანძილის სიგრძე. ნახევარგამტარში ელექტრონების გაბნევა ხდება ძირითადად მინარეულ ატომებზე და მესერის სითბურ რხევებზე. ამიტომ ელექტრონების ძვრადობა უდიდესი უნდა იყოს სუფთა ან მცირედ ლეგირებულ ნახევარგამტარში დაბალ ტემპერატურაზე. მინარეული ატომების კონცენტრაციის გაზრდისას და ტემპერატურის მატებასთან ერთად ძვრადობა უნდა მცირდებოდეს. ძვრადობა უკუპროპორციულია მატარებლის მასისა. აქედან ჩანს, რომ რადგან სხვადასხვა ნახევარგამტარს აქვს სხვადასხვა ეფექტური მასები, ასევე განსხვავებული ექნებათ ძვრადობები ე.ი. ელექტრონის და ხვრელის ძვრადობებიც სხვადასხვაა ($\mu_n > \mu_p$).

საკონტროლო კითხვები:

1. რას ნიშნავს ნანო?
2. განმარტეთ, რა არის ფოტოლიტოგრაფია, ფოტორეზისტი და ფოტოშაბლონი;

3. განმარტეთ, რა არის ქვესაფენი, დიფუზია, ლეგირება და ეპიტაქსია;
4. რა არის ინტეგრალური მიკროსკოპი?
5. როგორია საკუთარი ნახევარგამტარი?
6. რა არის „ხვრელი“ და რა კავშირშია ელექტრონთან?
7. როგორია საკუთარი ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი?
8. როგორ მიიღება ელექტრონული ტიპის ნახევარგამტარი?
9. როგორია ელექტრონული ტიპის ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი?
10. როგორ მიიღება ხვრელური ტიპის ნახევარგამტარი?
11. როგორია ხვრელური ტიპის ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი?
12. განმარტეთ – რა არის დენის მატარებელთა ძვრადობა და რა ერთეულებში იზომება?
13. რა პარამეტრებზეა დამოკიდებული დენის მატარებელთა ძვრადობა?

6. ნახევარგამტარის ზედაპირზე დიელექტრიკული ფირების მიღების პროცესები.

სილიციუმის ზედაპირზე მყოფი ატომები თავიანთი ბუნებით განსხვავდებიან მოცულობაში მყოფ ატომებისაგან. მოცულობაში ატომები ერთმანეთს უკავშირდებიან გაწყვილებული ელექტრონებით, ხოლო ზედაპირზე მყოფ ატომებს აქვთ ერთი გაუწყვილებელი ბმა და ამიტომ ისინი ცდილობენ როგორმე შეავსონ ეს ელექტრონებით, ან მოცულობიდან ან, უფრო ადვილად, გარე ატმოსფეროდან. ამიტომ სილიციუმის ზედაპირზე რეალურად ყოველთვისაა „საკუთარი ჟანგი“ მიღებული გარე ატმოსფეროდან დამჯდარი ატომებით: ჟანგბადით, აზოტით თუ სხვა აირებით. ამიტომ, პროცესის სრული კონტროლისათვის საჭიროა სილიციუმზე სქემის ფორმირებისათვის ტექნოლოგიის დაწყების წინ ქიმიურად გასუფთავდეს ასეთი ჟანგისაგან.

დიელექტრიკული ფირები არიან აუცილებელი შემადგენელი ნაწილები იმს-ის წარმოებაში. ეს ფირები გამოიყენებიან, როგორც პასიური ასევე აქტიური ელემენტების ფორმირებაში. დიელექტრიკული ფირები გამოიყენებიან გამტარ ფენებს შორის იზოლაციისათვის, ნიღაბის სახით

დიფუზიის ან ლევირების შემთხვევაში სქემის ჰერმეტიზაციისა და პასივირებისათვის მისი არასასურველი მინარევებისაგან, ჩამკეტქვეშა დიელექტრიკად ველით ტრანზისტორებში, დიელექტრიკად ფენოვან კონდენსატორებში და ა.შ. მის ხარისხზე და სრულყოფაზე დამოკიდებული იმს წარმოების ტექნოლოგიის ხარისხი და საბოლოო ვარიანტში იმს პარამეტრები. ამიტომ დიელექტრიკული ფირების წინაშე დგას მკაცრი მოთხოვნები. ისინი უნდა იყვნენ:

- 1) კარგი იზოლაციის მქონე, მცირე გამტარებლობის
- 2) მცირე ფორიანობის;
- 3) კარგი დამცველუნარიანი;
- 4) ქვესაფენთან მაღალი ადგეზიის ხარისხით;
- 5) მდგრადი პარამეტრებით გარე ფაქტორების მოქმედების მიმართ;
- 6) ქიმიურად ადვილად დასამუშავებელი მუშავეების და ტუტეების მიმართ;

მიმართ;

7) მცირე ზედაპირული მდგომარეობებით ნახევარგამტართან გამყოფ საზღვარზე;

- 8) რადიაციულად მდგრადი

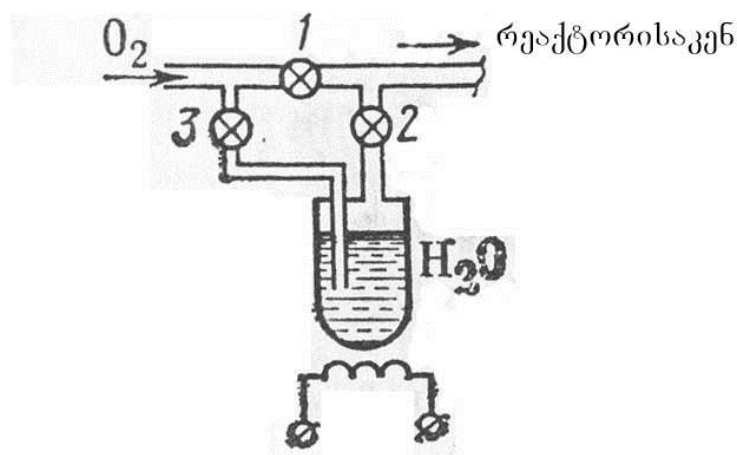
დღეისათვის მიკრო- და ნანოელექტრონიკაში გამოყენებული დიელექტრიკის სახეები მეტად თუ ნაკლებად აკმაყოფილებენ ამ მოთხოვნებს. ამ მოთხოვნების დაკმაყოფილება დამოკიდებულია როგორც დიელექტრიკის სახეზე, ასევე მის მიღების მეთოდზე. არსებობს დიელექტრიკის მიღების მრავალი მეთოდი: ქიმიური (თერმული დაჟანგვა, აგრეგაციის ქიმიური დაშლა და რეაქციით დიელექტრიკული ფირის ქვესაფენის ზედაპირზე დაფენა) და ფიზიკური (ვაკუუმში გაფრქვევა, პლაზმური ანოდირება) მეთოდები. გავსცნოთ ყველაზე უფრო მარტივ და გავრცელებულ მეთოდს – სილიციუმის თერმული დაჟანგვას.

ეს მეთოდი მარტივია, არ მოითხოვს რთულ ტექნოლოგიურ აპარატურას და იძლევა ხარისხიან ჟანგს (დიელექტრიკულ ფენას). სილიციუმის ჟანგს (SiO_2) და სილიციუმს ერთმანეთთან ახლოს აქვთ ტემპერატული გაფართოების კოეფიციენტების მნიშვნელობები და ამიტომ ტემპერატურის ცვლილებისას მათ გამყოფ საზღვარზე არ ჩნდება მექანიკური დარღვევები, $Si - SiO_2$ გამყოფ საზღვარზე მცირე მუხტის ზედაპირულ მდგომარეობათა სიმკვრივე, SiO_2 ადვილად და სელექციურად მუშავდება მუშავაში, სადაც არ ფუჭდება Si -ის ზედაპირი, ის კარგად იცავს Si -ის ზედაპირს უცხო

მინარევებისგან და ა.შ. ყოველივე ამან განაპირობა სილიციუმის თერმული დაჟანგვის ტექნოლოგიის ფართო გამოყენება მიკრო- და ნანო იმს-ის შექმნაში.

არსებობს სილიციუმის თერმული დაჟანგვის მეთოდის ორი სახე: 1) მაღალტემპერატურული დაჟანგვა „მშრალ“ ჟანგბადში და 2) შედარებით დაბალტემპერატურული დაჟანგვა „სველ“ ჟანგბადში. პირველ შემთხვევაში სილიციუმის დაჟანგვა ხდება 1150°C-ზე სინესტისაგან და სხვა გაზებისაგან გასუფთავებულ ჟანგბადის არეში, ხოლო მეორე შემთხვევაში დაჟანგვის პროცესი მიმდინარეობს 800°C-ზე წყლის ორთქლის შემცველ ჟანგბადის გარემოში. ნახ.1.7-ზე გამოსახულ დანადგარის 1; 2 და 3 ონკანების საშუალებით შესაძლებელია ორივე პროცესის მონაცვლებით ჩატარება.

თერმული დაჟანგვის პროცესი მიმდინარეობს სამი სტადიით: 1) დამჟანგავის აღსორბცია დასაჟანგი ფირფიტის ზედაპირზე; 2) დამჟანგავის გასვლა მზარდ დიელექტრიკულ ფირში და 3) დამჟანგავის რეაქცია სილიციუმის ატომებთან გამყოფ საზღვარზე $Si - SiO_2$.



ნახ.1.7. „მშრალი“ და „სველი“ ჟანგბადის მიმღები დანადგარი:

1; 2 და 3 ონკანები.

ექსპერიმენტულად დადგენილია, რომ გარე ძაბვის მოქმედებით შეიძლება შეიცვალოს დაჟანგვის სიჩქარე და კერძოდ, რომ დაჟანგვის პროცესში უფრო მეტად მონაწილეობენ ჟანგბადის უარყოფითი იონები.

ჟანგბადის იზოტოპის გამოყენებამ ცდაზე აჩვენა, რომ ჟანგის ზრდა მიმდინარეობს $Si - SiO_2$ გამყოფ საზღვარზე და არა SiO_2 -გაზი.

SiO_2 ფირის ზრდის კინეტიკის ექსპერიმენტულმა გამოკვლევებმა აჩვენეს, რომ მისი სისქის ზრდის სიჩქარე დროში ემორჩილება თითქმის წრფივ პარაბოლურ კანონს: $x^2 + k_1x = k_2t$, სადაც x -ჟანგის სისქეა, t - დაჟანგვის დრო, k_1 და k_2 სიჩქარის შესაბამისად წრფივი და პარაბოლური მუდმივებია.

ეს კანონი არ სრულდება დაჟანგვის პროცესის დასაწყისში, როცა ხდება ადსორბცია დამჟანგველის სილიციუმის ზედაპირზე.

აქედან ჩანს, რომ ჟანგის ზრდის სიჩქარე სისქის ზრდასთან ერთად ეცემა: $\frac{dx}{dt} \sim \frac{k_2}{2x}$. მართლაც ასეთი დამოკიდებულება ცდაზეც შეიმჩნევა.

„მშრალი“ დაჟანგვის დროს SiO_2 -ის სისქის დამოკიდებულება დაჟანგვის ტემპერატურაზე და დროზე განისაზღვრება ემპირიული ფორმულით:

$$x^2 = 21,2t \cdot \exp\left(-\frac{1,33}{kT}\right) \quad (6.1)$$

სადაც k - ბოლცმანის მუდმივაა, T - აბსოლუტური ტემპერატურა და 1,33(ევ) პროცესის აქტივაციის ენერგია.

პროცესის დადებით მხარედ უნდა ჩაითვალოს ის, რომ „მშრალი“ დაჟანგვით მიღებული ფირი SiO_2 დიდი სიმკვრივისაა (2,27გ/სმ³). მართლაც, აქტივაციის დიდი ენერგია იწვევს ჟანგბადის იონების დიდი სიმკვრივით ჩაწეობას ჟანგში. მაგრამ ეს პროცესი ხასიათდება პროცესის დიდი ხანგრძლივობით, რაც აიხსნება ჟანგბადის იონების მცირე დიფუზიის კოეფიციენტით SiO_2 -ში და დაჟანგვის პროცესის დიდი აქტივაციის ენერგიით.

დაჟანგვის პროცესის სიჩქარე შესამჩნევად იზრდება თუ ჟანგბადი გადის წყლის ორთქლში და ნაჯერი ორთქლი მიეწოდება დაჟანგვის არეს, ე.ი. მიიღება „ნესტიანი“ ჟანგბადის გარემო. აქაც ხდება პროცესის დასაწყისში Si -ის ზედაპირზე ჟანგბადის შემცველი ნაერთის ჰემოადსორბცია თხელი SiO_2 ფენის წარმოქმნით. შემდეგ ხდება ჟანგბადის შემცველი ორთქლის დიფუზია მიღებულ თხელ ჟანგში და იმისათვის, რომ წარმართოს შემდეგი ჟანგის სისქის ზრდა, საჭიროა წარმოქმნილ ჟანგში მოხდეს რეაგენტის უწყვეტი გადატანა.

„სველი“ დაქანგვისას SiO_2 ფირის სისქე დამოკიდებულია დაქანგვის ტემპერატურაზე და დროზე შემდეგი ემპირიული ფორმულით:

$$x^2 = 7,26t \cdot \exp\left(-\frac{0,8}{kT}\right) \quad (6.2)$$

სადაც x - ქანგის სისქეა, t - დაქანგვის დრო, k - ბოლცმანის მუდმივაა, T - ტემპერატურა და 0,8(ევ) პროცესის აქტივაციის ენერგია.

(6.1) და (6.2) შედარება იძლევა, რომ „სველი“ დაქანგვის დროს დაქანგვის აქტივაციის ენერგია უფრო დაბალია, ვიდრე „მშრალი“ დაქანგვისას. ამიტომ „სველი“ დაქანგვისას ქანგის ზრდის სიჩქარე უფრო მეტია და მიღებული ფირების სიმკვრივე უფრო ნაკლებია, ვიდრე „მშრალი“ დაქანგვისას. გარდა ამისა, ქანგის ზრდის სიჩქარეებს შორის განსხვავება იმითაცაა გამოწვეული, რომ დიფუზიის კოეფიციენტები SiO_2 -ში ასეთია:

$$D_{H_2O} = 9,5 \cdot 10^{-10} \text{ სმ}^2/\text{წმ}; \quad D_{H_2} = 2,2 \cdot 10^{-6} \text{ სმ}^2/\text{წმ} \quad \text{და} \quad D_{O_2} = 2,8 \cdot 10^{-14} \text{ სმ}^2/\text{წმ}.$$

პრაქტიკამ აჩვენა, რომ პირველი და მეორე მეთოდის ურთიერთშენაცვლება იძლევა შედარებით კარგ შედეგს. ამიტომ ხარისხიანი ქანგის მიღებისათვის დაქანგვა ხდება 15 წთ „მშრალ“ ქანგბადში, შემდეგ „სველ“ ქანგბადში 1 სთ და 45წთ, შემდეგ კვლავ „მშრალში“ 30წთ. ამ შემთხვევაში მიიღება SiO_2 ფირი სისქით $\sim 0,45$ მკმ კარგი დამცავი თვისებებით.

7. ფოტოლიტოგრაფია: ფოტორეზისტი და მისი სახეები; ფოტოშაბლონი, მისი მიღება და კონტროლი.

იმს-ის შექმნაში ლიტოგრაფიას უკავია წამყვანი როლი. ლიტოგრაფიის პროცესი ნიშნავს შაბლონიდან სურათის დიდი სიზუსტით გადატანას ფირფიტის ზედაპირზე. მისი საშუალებით ხდება „ფანჯრების“ გახსნა ნიღბის ფირფიტაში, რომელშიც ხდება მინარევის დიფუზია, ან ლეგირება შემდეგ დიელექტრიკული ფირებისათვის საჭირო ფორმის და ზომის მიცემა და მეტალიზაცია.

ფოტოლიტოგრაფია დაფუძნებულია ფოტომგრძნობიარე პოლიმერული მასალის – ფოტორეზისტის გამოყენებაზე, რომელიც შეიძლება იყოს

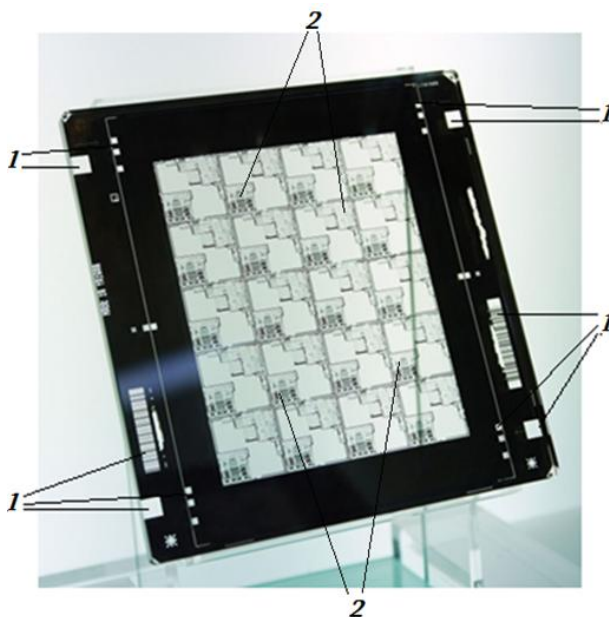
პოზიტიური ან ნეგატიური. ფოტოლიტოგრაფიაში გამოყენებული ფოტორეზისტები მგრძობიარენი არიან ულტრაიისფერი გამოსხივების მიმართ 310-450ნმ ტალღის სიგრძის ინტერვალში. მათში შეყვანილია სპეციალური მინარევი ფირფიტის ზედაპირზე მათი ადგეზიის გაუმჯობესებისათვის და მაღალ ტემპერატურაზე მჟავების და ტუტეების მოქმედების მედეგობის ხარისხის ამაღლებისათვის.

პოზიტიური ფოტორეზისტის დასხივების სტადიისას ხდება მოლეკულებში ქიმიური ბმის გაწყვეტა შთანთქმული გამოსხივების კვანტი შედეგად, მიიღება მოლეკულის დაშლა (დესტრუქცია) და თავისუფალი რადიკალი. ამის შედეგად გასხივებული არეების მედეგობა გამსხნელის მიმართ მცირდება. გამსხნელის მიმართ რეაქციისას მიიღება ადვილად აქროლადი ნაერთი, რაც საერთო ჯამში იძლევა ფოტორეზისტის მთლიანად მოცილებას ზედაპირიდან. ფირფიტის ზედაპირზე მიღებული ლოკალური არეები იმეორებენ ფოტოშაბლონის სურათს. ნეგატიური ფოტორეზისტის შემთხვევაში ხდება პირიქით – დასხივებული არეები ხდებიან უფრო მედეგნი გამსხნელის მიმართ.

ფოტოშაბლონის სურათის გადატანა ფირფიტის ზედაპირზე ხდება სამი სტადიით: 1) ფოტოშაბლონით, ფოტორეზისტის ექსპონირება, ანუ დასხივება; 2) სურათის გამჟღავნება და გამაგრება, ანუ ლოკალურად დამცველი ნიღბის შექმნა და 3) ფირფიტის დაუცველ არეებში მისი ზედაპირის მოწამვლა.

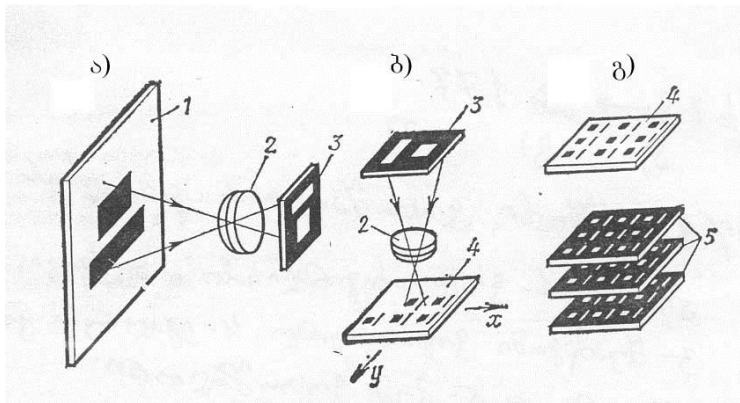
ყოველი ამ სტადიის პროცესში მოქმედებენ ფაქტორები, რომლებიც ამახინჯებენ ფოტოშაბლონის საწყის სურათს. მაგალითად, ექსპონირებისას ადგილი აქვს დიფრაქციას, სინათლის გარდატეხას და არეკვლას, რომლებიც ცვლიან სურათის ელემენტების ზომებს და ახდენენ მისი ნაპირების განრთხმას. გამჟღავნების და გამაგრების პროცესში შეიძლება მოხდეს ფოტორეზისტის გაბერვა, გაჟღენთა და თავისუფალ არეებში მათი გადასვლა, რაც ცვლის სურათის ზომებს. ფირფიტის ზედაპირის მოწამვლისას გამსხნელი შეიძლება შევიდეს ფოტორეზისტის ქვეშ და სურათი დაამახინჯოს. მაშასადამე, ფოტოშაბლონიდან სურათს ელემენტის ზუსტი გადატანისათვის ფირფიტის ზედაპირზე ფოტოლიტოგრაფიის პროცესს უნდა ჰქონდეს მთლიანობაში შესაბამისი გარჩევისუნარიანობა (სიზუსტე). მას აფასებენ 1 მმ-ში მოთავსებული ხაზების მაქსიმალური რიცხვით: $R=1000/2a_{\min}$, სადაც a_{\min} - ხაზის სიგანეა [მკმ]-ში. პრაქტიკაში ხშირად გარჩევისუნარიანობას აფასებენ უბრალოდ a_{\min} -ის სიდიდით.

ფოტოლიტოგრაფიაში ფოტოშაბლონი არის ძირითადი ინსტრუმენტი. მათი საშუალებით ხდება ფოტორეზისტის ლოკალური დასხივება და იმს-ის ტოპოლოგიის ზუსტი გადატანა ფირფიტის ზედაპირზე. იმს-ის შექმნისათვის საჭიროა მრავალჯერადი ფოტოლიტოგრაფია სხვადასხვა სურათის ფოტოშაბლონების, ანუ ფოტოშაბლონის კომპლექტის გამოყენებით. ის არის ბრტყელ-პარალელურიანი მინის ან კვარცის ფირფიტა, დაფარული საჭირო კონფიგურაციით გაუმჭვირვალე Gr_2O_3, Fe_2O_3 შრით.



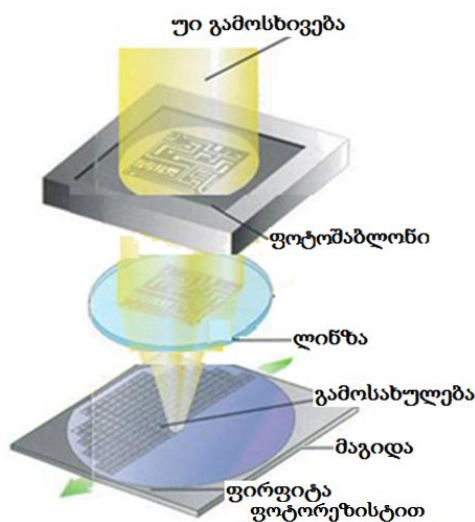
სურ.7.1. ფოტოშაბლონი: 1-შეთავსების წერტილები და
2- $Gr_2O_3; Fe_2O_3$

ფოტოშაბლონის კომპლექტის დამზადების პროცესი იწყება იმს-ის ტოპოლოგიური ნახაზის – ფოტოორიგინალის შექმნით შესაბამისი შრეების მიხედვით. ნახ.7.1-ზე მოცემულია ფოტოშაბლონის შექმნის პროცესი ერთი შრისათვის. ტოპოლოგია იხაზება კოორდინოგრაფით სპეციალურ თხელ ფირფიტაზე დიდი სიზუსტით, მასშტაბით 500:1. ორიგინალის ზომები მცირდება ფოტოლინზებით 50-ჯერ და მიიღება შუამდგომი შაბლონი. ეს უკანასკნელი თავის მხრივ კიდევ მცირდება ფოტოლინზებით მასშტაბით 1:1 და სპეციალური ლინზით ხდება მისი მულტიპლიკაცია (გამრავლება) განსაზღვრული ბიჯით.



ნახ.7.1. ფოტოშაბლონის შექმნის პროცესი
(დახაზვა არ მოითხოვება).

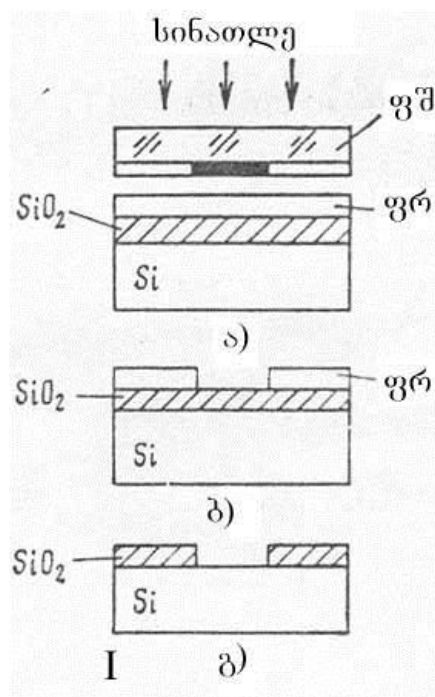
ამით მიიღება ეტალონური ფოტოშაბლონი, რომლის შემდეგ მზადდება სამუშაო შაბლონი (სურ.7.1). იმს-ის შექმნისას ხდება მრავალჯერადი ფოტოლიტოგრაფია შესაბამისი ფოტოშაბლონის გამოყენებით. ამიტომ არსებითია ფოტოშაბლონის ზუსტი შეთავსება ფირფიტაზე წინა ფოტოლიტოგრაფიით შექმნილ სურათთან. წინააღმდეგ შემთხვევაში იმს არ იმუშავებს. ზუსტი შეთავსებისათვის ყოველ ფოტოშაბლონზე გათვალისწინებულია სპეციალური ნიშნები, რომლებიც ზუსტად მეორდებიან და გადადიან ფირფიტის ზედაპირზე და მათ ეწოდებათ შეთავსების წერტილები (სურ.7.1-ზე 2) ფოტოშაბლონის დადებისას ზედაპირზე ათავსებენ წინა ლიტოგრაფიით მიღებულ ნიშნებს და ამ ფოტოშაბლონის ნიშნებს ერთმანეთს და ამით აღწევენ შეთავსების სიზუსტის გაზრდას.



სურ.7.2. ფოტოგრაფიის პროცედურის წარმოსახვა

ზოგადად, შეიძლება დავასკვნათ: ფოტოლიტოგრაფია, ანუ ოპტიკური ლიტოგრაფია არის პროცესი, რომელიც გამოიყენება მიკროსტრუქტურების ფორმირებაში სასურველი სურათის გადასატანად საფენის ზედაპირზე (სურ.7.2).

განვიხილოთ SiO_2 ნიღბის მაგალითზე ფოტოლიტოგრაფიის პროცესის ძირითადი ეტაპები. სილიციუმზე შექმნილ SiO_2 -ის ზედაპირს ქიმიურად ასუფთავებენ და ახდენენ გაცხიმვას, შემდგომში ფოტორეზისტის კარგი ადგეზიისთვის. ათავსებენ ცენტრიფუგაზე, ზედაპირის ცენტრში ათავსებენ რამდენიმე წვეთ ფოტორეზისტის ხსნარს, რომელიც ბრუნვისას განირთხმება მთელ ზედაპირზე $\sim 1\mu\text{m}$ სისქით და შემდეგ აშრობენ ღუმელში 100°C -ზე $15\div 20$ წთ-ის განმავლობაში. ფირფიტაზე დებენ ფოტოშაბლონს (ნახ.7.2ა) (ფშ) სურათით ფოტორეზისტისაკენ (ფრ) და სინათლით (ულტრაიისფერი იხივი) ასხივებენ, შემდეგ მას აშორებენ. პოზიტიური ფრ-ისას ხდება დასხივებული ნაწილის ამოწამვლა გამხსნელით (ნახ.7.2ბ). ამის შემდეგ წამლავენ SiO_2 მუავით, რომელიც არ მოქმედებს ფრ-ზე. ფრ-ის აშორებენ ტოლუოლით, რომელიც არ მოქმედებს Si და SiO_2 -ზე (ნახ.7.2გ).



ნახ.7.2. ფშ-ით ტექნოლოგიური პროცესი.

8. ნახევარგამტარში მინარევის დიფუზიისა და ლეგირების პროცესები.

ნახევარგამტარის ლოკალური უბნების ელექტროფიზიკური თვისებების ცვლილება (ელექტროგამტარებლობის ტიპი, ხვედრითი წინააღმდეგობა) შესაძლებელია ლეგირებით, ანუ მინარეული ატომების მასში კონტროლირებადი შეყვანით. იმს-ის შექმნის ტექნოლოგიაში ძირითადად გამოიყენება მინარევით ლეგირების ორი მეთოდი – თერმული დიფუზია და იონური ლეგირება.

1) მინარევის თერმული დიფუზია. მაღალ ტემპერატურაზე (~1000÷1200°C) ნახევარგამტარის ზედაპირის გავლით მინარეველი ატომები ვრცელდებიან მის მოცულობაში სითბური მოძრაობის შედეგად.

კრისტალურ მესერში მინარეული ატომის შეღწევა ძირითადად ხდება მესერის ვაკანსიებში თანმიმდევრული გადაადგილებით. შესაძლებელია აგრეთვე გადაადგილება კვანძთა შორის და შემდეგ ჩანაცვლება კვანძში. უნდა აღინიშნოს, რომ მინარეული ატომი ელექტრულად აქტიურია, ანუ არის ან დონორი, ან აქცეპტორი, მხოლოდ მაშინ, როცა ის არის კვანძში. შესაბამისად იმისათვის, რომ იქნას მიღებული ძლიერად ლეგირებული უბნები საჭიროა ვაკანსიის დიდი კონცენტრაცია ნიმუშის ზედაპირის უბანში. ტემპერატურის ზრდით იზრდება ვაკანსიების რიცხვი, თანახმად გამოსახულებისა:

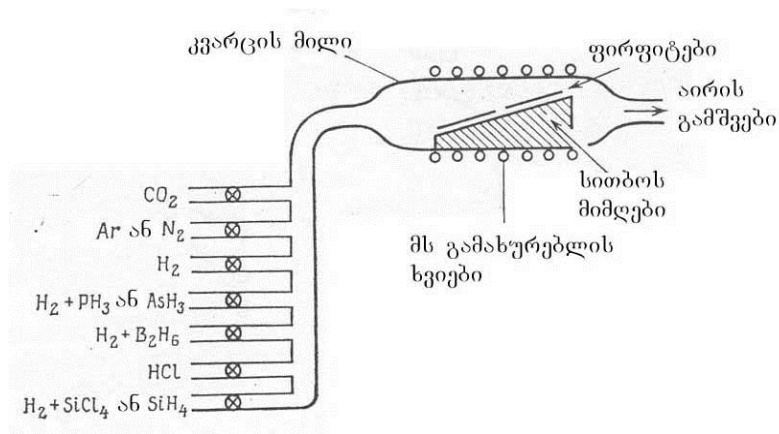
$$N_{\text{ვკ}} = N \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (8.1)$$

მოქმედებით მინარეულ ატომს შეუძლია დაიკავოს მეზობელი ვაკანსიის ადგილი და ასე გადაადგილდეს კრისტალში. კვანძიდან ვაკანტურ კვანძში მინარეული ატომის გადასვლის W ალბათობა დამოკიდებულია მეზობლად ვაკანსიის არსებობის ალბათობაზე და პოტენციალური ჯებირის გადალახვის ალბათობაზე, რომელიც არსებობს ატომსა და ვაკანსიის ადგილს შორის:

$$W \sim e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (8.2)$$

დიფუზიის დანადგარის სქემა მოცემულია ნახ.8.1-ზე, რაზედაც შესაძლებელია შენაცვლებით, როგორც n-, ასევე p-ტიპის უბნების მიღების პროცესების ჩატარება. თერმული დიფუზიის პროცესი ტარდება კვარცის ღუმელებში, სადაც მისაბმელ აპარატში იქნება შესაბამისი მინარევი ნაერთთან ერთად, რომელიც არის თხიერი, მაგალითად, AsH_3 , B_2H_6 , BBr_3 ან $POCl_3$.

სილიციუმში ბევრი მინარეული ატომი დიფუნდირებს კვანძთაშორის და ჩერდებიან მათში, ე.ი. ქმნიან ჩანერგვის მყარ ხსნარებს. რაგდგანაც ატომის კვანძთა შორის გადასვლის ალბათობა უფრო მეტია, ვიდრე კვანძიდან კვანძში, ამიტომ მინარევის ჩანერგვის დიფუზია უფრო სწრაფად მიმდინარეობს, ვიდრე ჩანაცვლების. დიფუზიის მეთოდით ნახევარგამტარში შეიძლება შევიყვანოთ მინარევი მოცემულ მაღალ ტემპერატურაზე, ზღვრულ გამსხნელობაზე ნაკლები კონცენტრაციით და ოთახის ტემპერატურამდე გაცივებისას იქნება ზღვრული. ნივთიერების დიფუზიური გადატანის პროცესების აღწერა შესაძლებელია ფიკის კანონებით.



ნახ.8.1. დიფუზიის დანადგარის სქემა.

დიფუზიის პირველი განტოლება (ფიკის I კანონი) განსაზღვრავს მინარეული ატომების ნაკადს მისი დიდი კონცენტრაციის უბნიდან ნაკლები კონცენტრაციის უბნისაკენ

$$F = -D \frac{dN}{dx} \quad (8.3)$$

სადაც D - დიფუზიის კოეფიციენტი რიცხობრივად ტოლია მინარეული ატომების რაოდენობისა, გამავალი დროის ერთეულში დიფუზიის მიმართულების მართობ ფართის ერთეულში, როცა მინარეული

კონცენტრაციის გრადიენტი $\frac{dN}{dx}$ ერთის ტოლია. ნიშანი მინუსი მიუთითებს, რომ დიფუზია მიდის კონცენტრაციის შემცირების მიმართულებით.

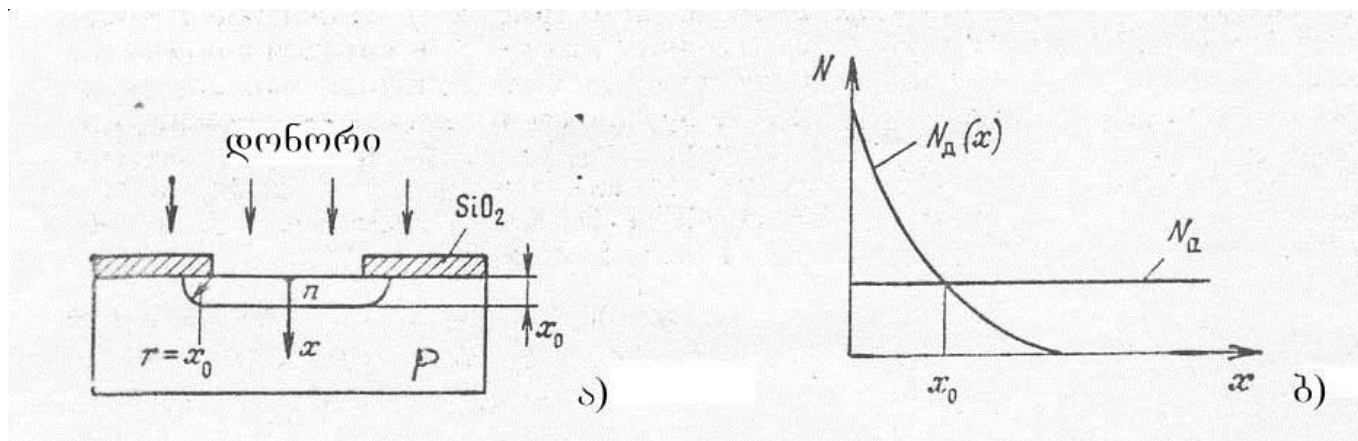
დიფუზიის მეორე განტოლება (ფიკის II კანონი) გადმოდის პირველიდან იმ დაშვებით, რომ დიფუზიის კოეფიციენტი არაა დამოკიდებული კონცენტრაციაზე:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \quad (8.4)$$

ფიკის II კანონი გამოსახავს დიფუზიის ძირითად კანონს. ის განსაზღვრავს მოცემულ ტემპერატურაზე ნახევარგამტარში შეყვანილი მინარევის კონცენტრაციას დროის ნებისმიერ მომენტში, ზედაპირიდან ნებისმიერ მანძილზე.

ხშირ შემთხვევაში, მიკრო- და ნანო იმს-ის ელემენტების შექმნისას დიფუზიურ პროცესებს ატარებენ ორ სტადიად. პროცესის პირველი სტადია, ე.წ. ზედაპირზე შედგენა, ეთანადება დიფუზიის უსასრულო წყაროს და დიფუზიანტი შედის ნახევარგამტარის მცირე შრეში; მეორე სტადია, ე.წ. ზედაპირიდან სიღრმეში განდგენა, ეთანადება დიფუზიას სასრული, პირველ სტადიაში შექმნილი წყაროდან. ამ დროს ხდება ზედაპირიდან განსაზღვრულ სიღრმემდე ნახევარგამტარში მინარევის გადანაწილება და ხდება ზედაპირული კონცენტრაციის შემცირება მოცულობაში მინარეული კონცენტრაციის გაზრდის შედეგად.

როგორც წესი, სილიციუმში მინარევის დიფუზია ხდება ლოკალურად, SiO_2 -ის ნიღაბის გამოყენებით, სისქით 0.5მკმ (ნახ.8.2ა.). მინარევის კონცენტრაცია



ნახ.8.2. დიფუზიის პროცესი (ა) და მინარევის განაწილება სიღრმეში (ბ).

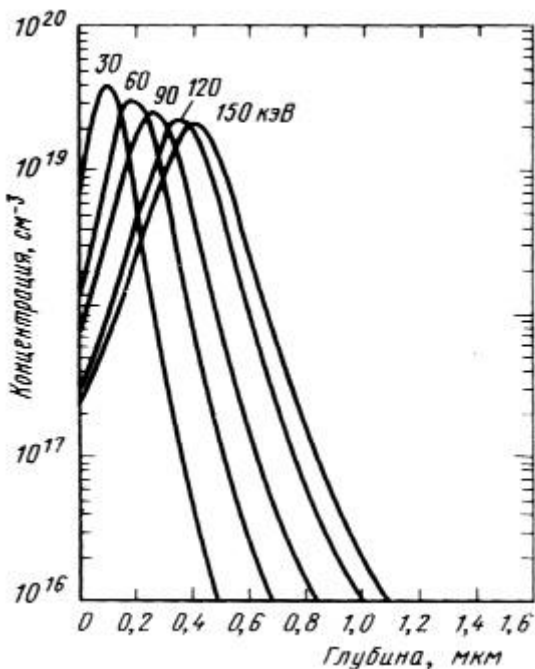
მაქსიმალურია ზედაპირზე და ეცემა ფირფიტის მოცულობაში (ნახ.8.2.ბ). x_0 მანძილს, სადაც მინარეული დონორული კონცენტრაცია ემთხვევა საწყისს აქცეპტორულ კონცენტრაციას ეწოდება დიფუზიური შრის სისქე. ამავე დროს ამ შემთხვევაში x_0 ეთანადება $p-n$ გადასასვლელის საზღვარს.

2. იონური ლეგირება. იონური ლეგირება არის ტექნოლოგიური პროცესი, სადაც მინარევის იონების ბომბარდირებით ფირფიტის ზედაპირზე ხდება მინარევის შეყვანა ნიშუშში.

ზემოთ განხილულ თერძული დიფუზიის პროცესს აქვს რიგი ნაკლოვანებები, რითაც მისი ფართო გამოყენება შეზღუდულია.

ამიტომ გამოიყენება ნახევარგამტარის სხვა ელემენტთა იონებით ლეგირება. ნახევარგამტარის კრისტალში მინარევის იონის შეყვანისათვის საჭირო ენერგიას ის ღებულობს გარე ელექტრული ველიდან რამდენიმე ასეული კოლოვოლტი ძაბვისას. წინასწარ ღებულობენ მალეგირებელი ნივთიერების იონს, ხოლო ნახევარგამტარის, როგორც სამიზნის ტემპერატურა არის ოთახის ან ახურებენ იმ ტემპერატურამდე, რომ არ მოხდეს დიფუზიის პროცესის აქტივაცია და შეყვანილი მინარევის გადანაწილება. როგორც დიფუზიის დროს, იონური ლეგირებისას ნახევარგამტარის ელექტრული გამტარებლობის ტიპის შეცვლა ხდება მინარევის ჩანაცვლებისას მესერის კვანძებში. მინარევის კონცენტრაციის მაქსიმუმი მდებარეობს ნახევარგამტარის სიღრმეში (ნახ.8.3), რომლის რეგულირება შესაძლებელია იონის ენერგიით. თუ იონური ნაკადი მიმართულია ქვესაფენის ზედაპირის მართობულად, მაშინ ლეგირებული არის კონფიგურაცია ზუსტად ემთხვევა მასკის კიდის საზღვარს და გვერდით ლეგირებას ადგილი არა აქვს.

ნახ.8.3. იონური ლეგირებისას ენერგიის მიხედვით მინარევის განაწილება სიღრმეში



იონური ლეგირება (იმპლანტაცია) იძლევა საშუალებას:

1)ზუსტად და განმეორადებულად მოვახდინოთ მალეგირებელი იონის ჩანაცვლება მესერის კვანძებში იონური ნაკადის დენისა და დასხივების დროს კონტროლირებით;

2) $p-n$ გადასვლის სიღრმის მიღების დიდი სიზუსტე (0,02მკმ-მდე)

3)პროცესის განხორციელების სისწრაფე (რამოდენიმე წთ-ში) დანადგარის ჯგუფური ჩატვირთვისას კარგი განმეორადობებით

4)პრაქტიკულად მინარევის განაწილების ნებისმიერი პროფილის მიღება საფეხურიანი ლეგირებით, ანუ ლეგირების ენერჯისა და მალეგირებელი ელემენტის სახის ცვლილებით.

მიუხედავად ამისა, იონურ ლეგირებას აქვს ზოგიერთი ნაკლოვანებები:

1) იონური ლეგირების შემდეგ საჭიროა ფირფიტის გამოწვა (800°C) მინარევის აქტივიზაციისთვის და მიღებული რადიაციული დეფექტის გაქრობისათვის;

2) იონური ლეგირების პროცესის ჩატარების დანადგარი საკმაოდ ძვირადღირებულია და რთულია.

კრისტალის მესერში მოთავსებულ ატომთან დაჯახებისას, იონი წანაცვლებს მას კვანძთა შორის, რის შედეგად შეიქმნება წერტილოვანი დეფექტი (ვაკანსია და კვანძთაშორის ატომი). თავის მხრივ, კვანძთაშორის გასულ ატომს შეუძლია შექმნას წანაცვლებათა კასკადი და მოუწესრიგებელი არეები. მაშასადამე, მოძრაობის გზაზე შეიქმნება დარღვეულ სტრუქტურული უბნები, ე.წ. კლასტერები, რომლებშიც შეიძლება შეერთდნენ და შეიქმნას ამორფული უბნები.

იონური ლეგირების დანადგარი შედგება იონის წყაროსაგან, მას-სპექტრომეტრისაგან, ამახჩარებლისაგან და მისაღები კამერისაგან.

პრაქტიკულად დიფუზია და იონური ლეგირება ხორციელდება ფირფიტის ზედაპირზე ლოკალურად SiO_2 ან Si_3N_4 -ის ნიღბების გამოყენებით, სისქით 0,5მკმ, რომელიც აღემატება ამ მასალებში იონების განარბენის შესაძლო მანძილებს.

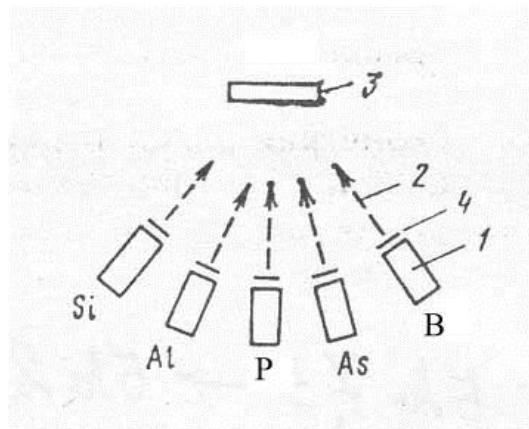
საკონტროლო კითხვები:

1. როგორი მოთხოვნები დგას დიელექტრიკული ფირების წინაშე?
2. რამდენი სახის თერმული დაჟამგვა არსებობს და რა არსი აქვთ თითოეულს?
3. რით განსხვავდება თერმული დაჟანგვის ეს მეთოდები ერთმანეთისგან?
4. აღწერეთ ფოტორეზისტის და ფოტოშაბლონის არსი და დანიშნულება;
5. რამდენი სახის ფოტორეზისტისტი არსებობს და რა განსხვავებაა მათ შორის?
6. რით განსაზღვრავენ ფოტოლიტოგრაფიის სიზუსტეს?
7. რასში მდგომარეობს ფოტოლიტოგრაფიის პროცესი?
8. რა არის დიფუზია მყარ სხეულებში?
9. როგორ ტარდება თერმული დიფუზიის პროცესი?
10. რა არის იონური ლეგირება?
11. რა უპირატესობით ხასიათდებიან თითოეული მათგანი?

9. ეპიტაქსიით თხელი ფირების მიღება.

ეპიტაქსია ეს არის პროცესი, როცა მონოკრისტალური (სილიციუმის) ქვესაფენზე ეფინება (სილიციუმის) ატომები და დაფენილი ფირი აგრძელებს ქვესაფენის სტრუქტურას და მის კრისტალოგრაფიულ ორიენტაციას. ხშირ შემთხვევაში ქვესაფენის და ფირის მასალა (ჰომოეპაქსია) ერთნაირია, მაგრამ შეიძლება იყოს სხვადასხვა მასალა ახლომყოფი კრისტალური სტრუქტურით (ჰეტეროეპიტაქსია). ასე მაგალითად, სილიციუმის ფირის გაზრდა საფირონზე ეპიტაქსიური ფირი მიიღება ქვესაფენის ზედაპირის მთელ ფართობზე თანაბრად. პრაქტიკულად დიდი მნიშვნელობა აქვს შემთხვევას, როცა ეპიტაქსიის პროცესში ხდება მინარევის როგორც მალეგირებელი ელემენტის შერჩევა. ქვესაფენის სხვადასხვა გამტარებლობის ტიპზე შეიძლება სხვადასხვა გამტარებლობის ტიპის ეპიტაქსიური ფირის მიღება. ამდენად შეიძლება მივიღოთ ეპიტაქსიური ფირი ხვედრითი წინააღობის დიდ დიაპაზონში, დამოუკიდებლად ქვესაფენის ხვედრითი წინააღობისა. ნახევარგამტარის ატომების წყაროს აგრეგატული მდგომარეობის მიხედვით ეპიტაქსიური პროცესი იყოფა გაზურ, თხევად და მყარი ფაზის პროცესებად.

ყველა მათგანს აქვს თავისი დადებითი და უარყოფითი მხარეები, მაგრამ ბოლო დროს დიდი გავრცელება ჰპოვა მოლეკულურ-სხივურმა ეპიტაქსიამ (ნახ.9.1). ის დაფუძნებულია ეპიტაქსიური მასალის ნაკადისა და ქვესაფენის მასალის ურთიერთმოქმედებაზე. ეპიტაქსიური პროცესი მიმდინარეობს $\sim 10^{-7}$ ვაკუუმში, ქვესაფენის ტემპერატურა შედარებით დაბალია $\sim 600^{\circ}\text{C}$. ვაკუუმის ხუფის შიგნითაა როგორც ძირითადი, აგრეთვე მალეგირებელი ელემენტების დამჭერების სპეციალური ჭურჭლები. შეიძლება მათი აორთქლება ტემპერატურით ან ლაზერის სხივით. აორთქლება შეიძლება ერთი ან ორი ამორთქლებლიდან, რითაც შესაძლებელია ქვესაფენზე მონოფირის ან ლეგირებული ფირის დატანა. ეპიტაქსიური ფირის სისქის რეგულირება შეიძლება დროის მიხედვით საფარის რეგულირებით (ნახ.1.12-ის 4). წყაროს ტემპერატურის ან ლაზერის სხივის სიმძლავრის და ქვესაფენის ტემპერატურის რეგულირებით შეიძლება მიღებულ იქნას სასურველი ქიმიური შედგენილობის და სტრუქტურის ეპიტაქსიური ფირი.



ნახ.9.1. მოლეკულურ-სხივური ეპიტაქსიის დანადგარის სქემა:

- 1-შესაბამისი ელემენტის დამჭერი; 2- მოლეკულური სხივი; 3-საფენი და 4-საფარი.

10. ტოპოლოგიის შექმნა და ხელსაწყო მოდელირება.

მიკრო- და ნანოსქემის შექმნის პროცესში ერთ-ერთი გადამწყვეტი ადგილი უკავია ტოპოლოგიის შემუშავებას, ანუ ელემენტების და შეერთებების ფორმის და განლაგების სურათის შექმნას. ტოპოლოგიის მოდელის შემუშავებისა და მისი ოპტიმიზაციისას უნდა იქნას გათვალისწინებული შემდეგი ძირითადი ფაქტორები:

1. ნახევარგამტარული იმს-ის ყველა ელემენტი უნდა იყოს რაც შეიძლება მჭიდროდ ურთიერთმიმართ ქვესაფენის ზედაპირზე ან მის შიგნით. ამ დროს იზრდება ელემენტებს შორის პარაზიტული კავშირები, სითბოცვლა და საკუთარი ხმაურის დონე.

2. ნახევარგამტარული იმს-ის ყველა ელემენტი მზადდება ერთ ტექნოლოგიურ ციკლში, რაც ზრდის პროექტირების სიზუსტეს.

იმს-ის ტოპოლოგიის შემუშავების საფუძველია ელექტრული სქემის შედგენა, ტექნოლოგიური და კონსტრუქციული მოთხოვნები. ტოპოლოგიური ნახაზის შედგენა ითვალისწინებს შემდეგ ცალკეულ ეტაპებს:

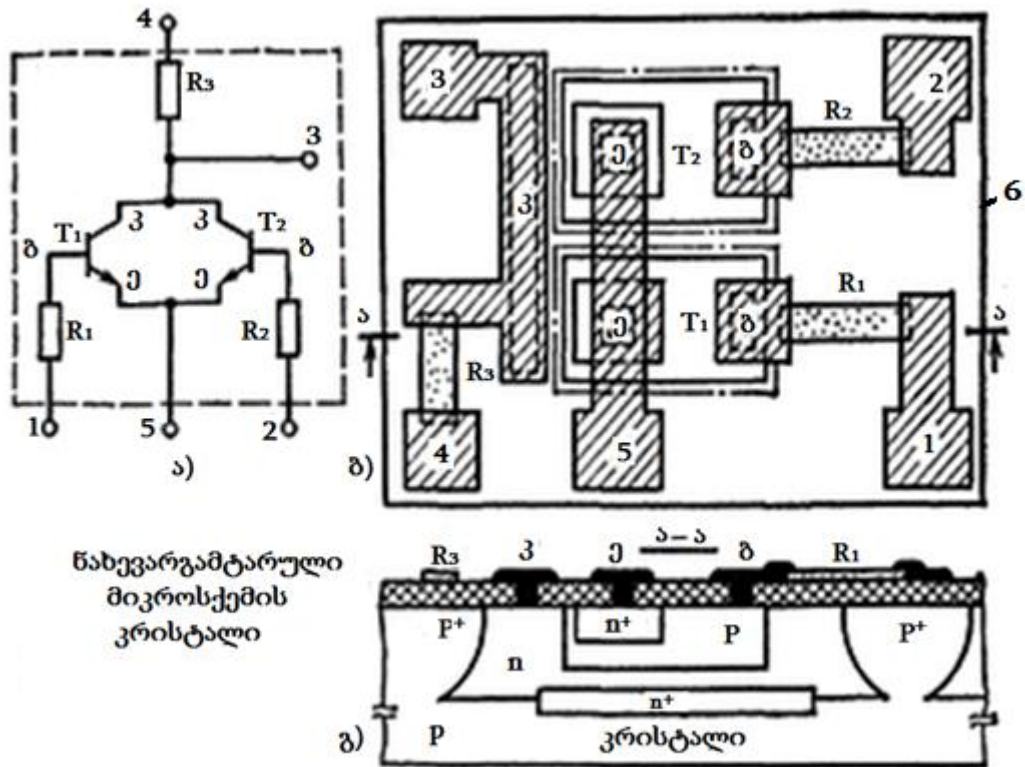
- საწყისი მონაცემების მიღება და შეთანხმება;
- იმს-ის ელემენტების სტრუქტურის გამოთვლა და სიზუსტე;
- ქვესაფენზე ან მის მოცულობაში სქემური ელემენტების განლაგება და კვანძთა შორისო შეერთების შედგენა;
- ტოპოლოგიის წინასწარი ვარიანტის შექმნა;
- მიღებული ტოპოლოგიის ოპტიმიზაცია, ანუ შესწორებები (თუ საჭიროა) გამოთვლებში, განლაგებაში და ზომებში;
- საბოლოო, ანუ მუშა ტოპოლოგიის შექმნა.

იმს-ის ტოპოლოგიის შემუშავებას იწყებენ საერთო ელექტრული, კონსტრუქციული და ტექნოლოგიური მონაცემების მიღებით და მათი ურთიერთშეთანხმებით. საწყისი ელექტრული მონაცემები ითვალისწინებს ელექტრული სქემის შედგენას საჭირო ელექტროფიზიკური პარამეტრებით, იმს-ის ელემენტებისათვის განსაზღვრული ზომების და სტატიკური და დინამიური პარამეტრების მოცემას. კონსტრუქციული მონაცემები გულისხმობს იმს-ის ელემენტების განლაგებას კრისტალის ზედაპირზე, მათი შეერთების, კონტაქტური ფართების ზომების განსაზღვრას და კორპუსის გამომყვანებთან მათ შეთანხმებას. ყველა ზომა მოიცემა სპეციალურ ნახაზზე იმ მასშტაბით, რა მასშტაბითაც შემდეგ გამოიხაზება ცალ-ცალკე იმს-ის ტოპოლოგიური ნახაზები შრეების სახით, რომელთა შემცირების შემდეგ განსაზღვრული მასშტაბით მზადდება ფოტოშაბლონის კომპლექტი.

ნახევარგამტარული იმს-ისთვის უფრო ხშირად გამოიყენება პლანარული კონსტრუქცია, რომელიც ნიშნავს ელემენტების სხვადასხვა ტიპის შრეების განლაგებას ერთ, პარალელურ სიბრტყეზე (საფენის ზედაპირზე).

იმს-ის ტოპოლოგიის შექმნა რთული პროცესია და საჭიროებს დიდ სიზუსტეს დაწყებული ქვესაფენის დაჟანგვიდან, დამთავრებული კრისტალის

კორპუსში ჩასმამდე. ამიტომ აუცილებელია ფოტოშაბლონის კომპლექტში სხვადასხვა ფენის შაბლონის ურთიერთშეთანხმებისათვის გაკეთდეს შეთავსების წერტილები. ამ წერტილებს ტოპოლოგიაში უნდა ჰქონდეს განსაზღვრული ადგილი. ნახ.10.1-ზე მოცემულია იმს სტრუქტურა, პრინციპიალური ელექტრული სქემით, შესაბამისი იმს-ის სახე ჭრილში და შესაბამისი ტოპოლოგიური ნახაზით, პლანარული ტექნოლოგიით მისაღებად.



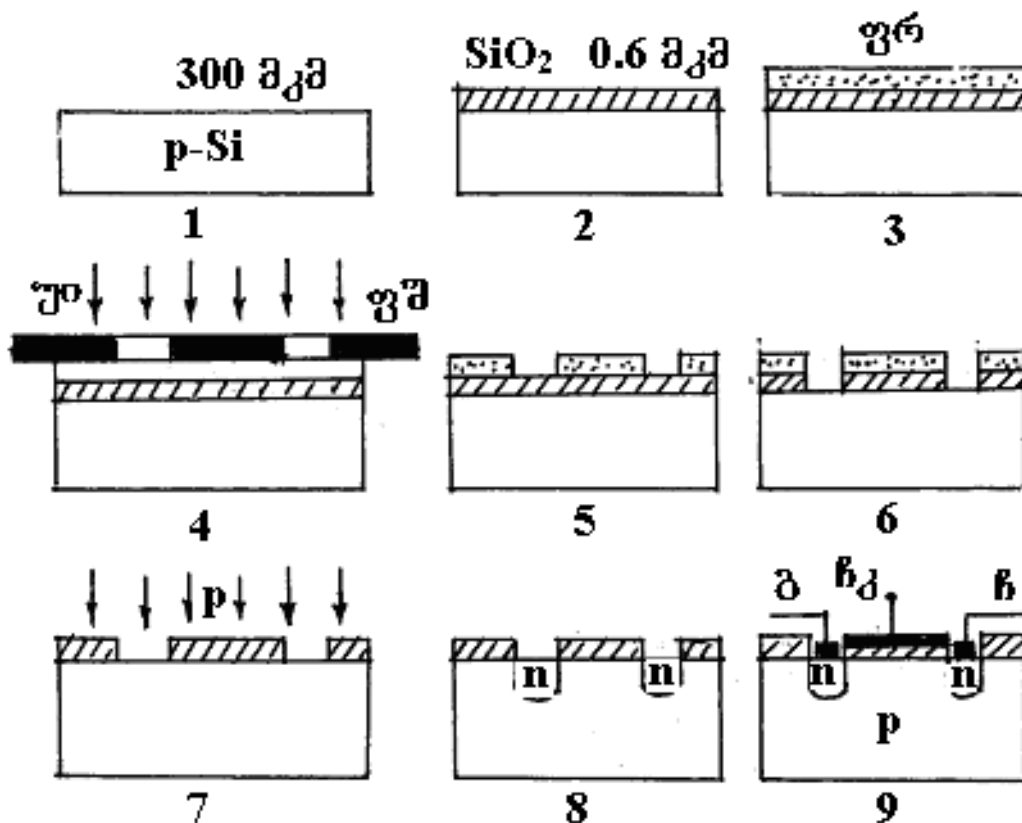
ნახ. 10.1. ნახევარგამტარული სქემის ტოპოლოგია: ელექტრული სქემა (ა), ტოპოლოგიური ნახაზი (ბ) და სქემა განხორციელებული კრისტალში (გ).

საწყისი ელექტრული მონაცემებით ითვლება აქტიური (T), პასიური (R) ელემენტების ელექტროფიზიკური პარამეტრები, მათთან თანხმდება კომპონენტაშორისო სადენების და საკონტაქტო ფართის პარამეტრები. ამის შემდეგ იხაზება პრინციპიალური ელექტრული სქემა (ნახ.10.1ა)). იმს-ის კონსტრუირებისას უნდა მოხდეს აქტიური და პასიური ელემენტების, მეტალის სადენის და საკონტაქტო ფართის გეომეტრიული ზომის დადგენა და ურთიერთგანლაგება ისე, რომ რაც შეიძლება ნაკლები გადაკვეთები სადენების შეერთებისას (ნახ.10.1ბ)). შემუშავებულ ტოპოლოგიაში უნდა იყოს გათვალისწინებული შემოჭრის ხაზი (ნახ.10.1ბ-ზე 6), რომელზეც ხდება

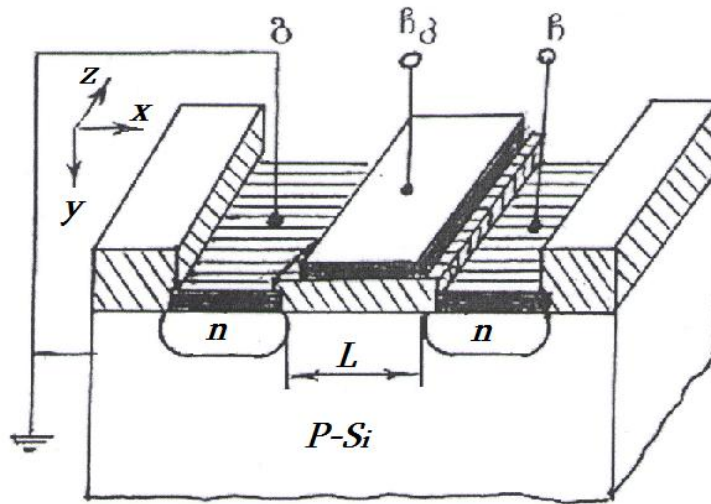
მიღებული საბოლოო კრისტალის შემოჭრა (ნახ.10.1.გ), ცალკეული იმს-ის კრისტალრბის მისაღებად.

11. სქემის შექმნა ველის ტრანზისტორის მაგალითზე.

ნახ.11.1-ზე მოცემულია ველის ტრანზისტორის მიღების ტექნოლოგიური მარშრუტი. საფენად აღებულია სილიციუმის ფირფიტა, სისქით 300 მკმ, p-ტიპის, 4,5 ომი•სმ კუთრი წინაღობით, იწმინდება ქიმიურად (ნახ.11.1-ის 1). იუანგება თერმიულად 0,6 მკმ სისქემდე (ნახ.11.1-ის 2). შემდეგ ეფინება ფოტორეზისტი (ნახ.11.1-ის 3), ტარდება ფოტოლიტოგრაფიის პროცესი (ნახ.11.1-ის 4 – 6). ამით მოხდა სასურველი სურათის (ფოტოშაბლონზე დატანილი სურათის) გადატანა სილიციუმის ზედაპირზე. ამის შემდეგ ტარდება ფოსფორის დიფუზია, რაც იძლევა ლოკალურად n ტიპს (ნახ.11.1-ის 8) გამომდენი და ჩამდენისთვის. ხდება ფოტოლიტოგრაფია ჩამკეტქვეშა დიელექტრიკის ფორმირებისათვის, ეფინება მეტალი, მაგალითად ალუმინი, ტარდება ფოტოლიტოგრაფია გამომყვანების მიღებისათვის (ნახ.11.1-ის 9) და საბოლოო სახე გამოსახულია ნახ.11.2-ზე.



ნახ.11.1. ველის ტრანზისტორის მიღების ტექნოლოგიური მარშრუტი.



ნახ.11.2. ველის ტრანზისტორის საბოლოო სახე.

12. ინტეგრალური სქემები და მათი კლასიფიკაცია.

ინტეგრალური სქემები დამზადების და ტექნოლოგიური მიღების თვალსაზრისით იყოფიან: ნახევარგამტარული, ფიროვანი და ჰიბრიდული.

ნახევარგამტარულ ინტეგრალურ სქემაში მისი ელემენტები მოთავსებულნი არიან ქვესაფენ ნახევარგამტარის ზედაპირისწინა არეში. ამ შემთხვევაში ელემენტები განლაგებული არიან ერთ სიბრტყეში, გამომყვანებით ქვესაფენის ზედაპირზე. ასეთი სქემები წარმოადგენენ თანამედროვე მიკროელექტრონიკის ძირითად სქემებს.

ფიროვანი სქემები არიან მიკროსქემები, სადაც ელემენტები შექმნილნი არიან დიელექტრიკული ქვესაფენის ზედაპირზე დაფენილი სხვადასხვა სახის ფირებით. ეს შეიძლება იყოს თხელ ($1 \div 2$ მკმ) და სქელფიროვანი ($5 \div 20$ მკმ) სქემები. ფიროვანი სქემები შეიცავენ მხოლოდ პასიურ ელემენტებს. ამიტომ ასეთი სქემების ფუნქციები შემოსაზღვრულია.

ჰიბრიდული ინტეგრალური სქემა არის სქემა, სადაც ფიროვანი სქემა და დისკრეტული სქემები არიან გაერთიანებულნი ერთ დიელექტრიკულ ქვესაფენზე. დისკრეტული ელემენტები არიან დაწებებულნი და შეერთებები მათსა და ფიროვან ელემენტებს შორის არის სივრცულად გამტარებით. ამიტომ აქტიურ ელემენტებს უწოდებენ დაკიდებულ ელემენტებს.

კიდევ გვხვდება ერთი სახის შერეული ინტეგრალური სქემა, სადაც აქტიური ელემენტები ფორმირდებიან ნახევარგამტარის ზედაპირისწინა არეში და პასიური ელემენტზე ფირების სახით მის ზედაპირზე.

ინტეგრალური მიკროსქემის (იმს) შექმნის ტექნოლოგიური დონის შეფასების ერთ-ერთი ძირითადი კრიტერიუმია ინტეგრაციის ხარისხი. ის გვიჩვენებს ინტეგრალური სქემის სირთულის ხარისხს, რომელიც ხასიათდება კრისტალში (უცხოურ ლიტერატურაში იხმარება chipirun) ინტეგრალური ტექნოლოგიით შექმნილ ელემენტთა რიცხვით (ითვლება იმს-ის ყველა ელემენტი). ინტეგრაციის ხარისხის გამოსახატავად ხმარობენ ხარისხის რიცხვს $k = \lg N$, სადაც N - ელემენტთა რიცხვია კრისტალში. k -ს მნიშვნელობის მიხედვით ინტეგრალურ სქემებს ჰყოფენ დაბალი ინტეგრაციის ($k \leq 1$, ანუ $N \leq 10$), საშუალო ინტეგრაციის ($k \leq 2$), დიდი ინტეგრაციის ($k \leq 3$) და ზედიდი ინტეგრაციის ($k > 3$, ანუ $N > 1000$) სქემებად.

ნებისმიერი სახის ინტეგრალური სქემისათვის ძირითადი და ყველაზე რთული ელემენტი არის ტრანზისტორი, რომლებიც მათი მუშაობის ფიზიკური პრინციპების მიხედვით იყოფიან ბიპოლარულ და უნიპოლარულ ტრანზისტორებად. გარე ზემოქმედებისგან დაცვის მიზნით ყველა ინტეგრალური სქემა დახურულია ჰერმეტიკულად. კორპუსიანი სქემა ჰერმეტიკულად იხურება ვაკუუმში, ხოლო უკორპუსო ებოქსიტით ან სპეციალური ლაქით.

ფუნქციონალური დანიშნულების მიხედვით ინტეგრალური სქემები იყოფა ციფრულ (ლოგიკურ), ანალოგურ (წრფივ) და ანლოგურ-ციფრულ სქემებად, მოწყობილობაში მათი გამოყენების მოთხოვნის მიხედვით ფართო და სპეციალურ მოხმარების სქემების მიხედვით.

იმის და მიხედვით, თუ რა კონსტრუქციის და ფუნქციონალური დანიშნულების მიხედვით რომელი იმს მზადდება ტექნოლოგიური პროცესების რიცხვი და მიმდევრობა არის სხვადასხვა. ყველა ეს ოპერაციები გაერთიანდნენ დამოუკიდებელ ტექნოლოგიურ ეტაპებად.

განსაკუთრებული დიდი მნიშვნელობა აქვს იმს-ის პროცენტულ გამოსავალს, მისი პარამეტრების განმეორადობას და სტაბილურობას. ამისათვის საჭიროა ყველა პროცესი ჩატარდეს სუფთა კლიმატურ ატმოსფეროში. კლიმატური ატმოსფეროს სისუფთავე მოიცავს ტემპერატურის მუდმივობას, სინოტივის სტაბილურობას და ჰაერის 1მ^3 მოცულობაში მტვრის ნაწილაკების რაც შეიძლება მცირე რაოდენობის არსებობას.

ატმოსფეროს სინოტივე და ტემპერატურა, პირველ რიგში, მოქმედებს ფოტოლიტოგრაფიის ხარისხზე და ტექნოქიმიურ პროცესებზე. ტემპერატურის ცვლილებით იცვლება ფოტორეზისტორის სიბლანტე და ქიმიური პროცესების ჩატარების სიჩქარეები, რაც უარყოფითად მოქმედებს საბოლოო პროცენტულ გამოსავალზე და იმს-ს პარამეტრების განმეორადობაზე. ამ მოთხოვნების დასაკმაყოფილებლად იქმნება სპეციალური ოთახები, რომელშიცაა მოთავსებული ყველა ტექნოლოგიური დანადგარი და ტარდება იმს-ის შექმნის ყველა პროცესი.

საკონტროლო კითხვები:

1. რას ნიშნავს ეპიტაქსიის პროცესი?
2. როგორ მიმდინარეობს მოლეკულურ-სხივური ეპიტაქსიის პროცესი?
3. რას ნიშნავს სქემის ტოპოლოგია?
4. რისთვისაა საჭირო სქემის მოდელირება?
5. როგორ მიმდინარეობს ველის ტრანზისტორის შექმნის პროცესები?
6. ჩამოთვალეთ ინტეგრალური სქემის სახეები მათი დამზადების მიხედვით;
7. ჩამოთვალეთ ინტეგრალური სქემის სახეები მათი კონსტრუქციისა და ფუნქციონალური დანიშნულების მიხედვით;
8. რა არის ინტეგრაცია და როგორ გამოითვლება?

13. ფოტოლიტოგრაფიის ალტერნატიული მეთოდები.

მიკროსქემის მინიატიურიზაცია სრულადაა დამოკიდებული ფოტოშაბლონის ხაზის ზომაზე, რომელზეც, თავის მხრივ, დამოკიდებულია ფოტორეზისტში სელექტიურად ქიმიურად ამოწამლული არის ზომა.

ლიტოგრაფიაში გამოყენებული ოპტიკური მეთოდი არის მოსახერხებელი, მარტივი, მაგრამ იძლევა მინიატიურიზაციის ფიზიკურ ზღვარს ~ 100 ნმ-ს (რეზისტის ულტრაიისფერი სხივით ექსპონირებისას). ასე, რომ ინტეგრალური სქემის ინტეგრაციის ხარისხის გაზრდის და მინიატიურისაციის გზაზე ყველაზე ვიწრო ადგილია – ლიტოგრაფია, დიდი მგრძნობიარობით და მცირე ხაზებით. რელეის თანახმად, მგრძნობიარობა განისაზღვრება თანაფარდობით: $\delta = k\lambda/A$, სადაც $k \approx 0,6$; λ – გამოყენებული გამოსხივების ტალღის სიგრძეა; A – ოპტიკის

აპარატურის ლინზის მახასიათებელი მუდმივა, რომელიც დამოკიდებულია ლინზიდან სინათლის გაშლის კუთხეზე და განისაზღვრება $A = n \times \sin \theta$, სადაც n – ლინზის გარდატეხის მაჩვენებელია და θ – სფერული კუთხე. რეალურად A ვერ მიიღება 0,8 –ზე მეტი. მინიატიურზაციისათვის საჭიროა ფოტოშაბლონში შუქგამტარი არის ზომის შემცირება. განსზღვრული ტალღის სიგრძისას, ამ ზომის შემცირება რაღაც სიდიდის ქვემოთ, იწვევს ამ სხივის დიფრაქციას და შესაბამისად, მგრძობიარობის შემცირებას და ფოტორეზისტზე არის გაშლას (განროხმას). მგრძობიარობის გაზრდის ერთ-ერთ გზად რჩება λ -ს შემცირება. ულტრაიისფერი სხივის გამოყენებისას (λ ძვეს ინტერვალში 436 – 365 ნმ). ნანოლიტოგრაფიაში შეიძლება იქნას გამოყენებული უფრო მოკლე ტალღიანი სხივები ან ალტერნატიული მეთოდები. უფრო მოკლე ტალღიან სხივებად შეიძლება იქნას გამოყენებული რენტგენის, ელექტრონების, იონების ნაკადი და ლაზერის სხივები. ამასთანვე, უნდა იქნას შერჩეული შესაბამისი მგრძობიარობის რეზისტი.

NA - ლინზის მახასიათებელი სიდიდე, რომელიც დამოკიდებულია ლინზიდან სინათლის გაშლის კუთხეზე და განისაზღვრება შემდეგნაირად:

$$A = n \times \sin \theta \quad (2.6)$$

n - ლინზის გარდატეხის მაჩვენებელია, θ - სფერული კუთხე. როგორც ფორმულიდან ჩანს, რაც უფრო მცირეა ტალღის სიგრძე, მით უფრო მცირე ზომის გამოსახულების მიღებაა შესაძლებელი.

14. ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფია.

ეს მეთოდი მოსახერხებელია სქემის მასური წარმოებისათვის. ის შეიძლება განვახორციელოთ ორი მეთოდით: 1)პროექციული – გაშლილი, არაფოკუსირებული ელექტრონების ნაკადით, როცა საფენის მთელი ზედაპირი სხივდება ერთდროულად და 2)წერტილოვანი – კარგად ფოკუსირებული ნაკადით. პირველ შემთხვევაში საჭიროა ნიდაბი-შაბლონი, როგორც ოპტიკური ფოტოლიტოგრაფიისას, ხოლო მეორე შემთხვევაში ნიდაბი-შაბლონი არაა საჭირო და დასხივების მართვა ხდება უშუალოდ ელექტრონების წყაროს დანადგარიდან.

ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფიის დანადგარი შესდგება ვაკუუმური წყობილისაგან ელექტრონების წყაროს, ელექტრონების ამჩქარებელი სისტემის, მაგნიტური ლინზების და საფენის ზედაპირის ელექტრონული სხივის სკანირების სისტემისაგან. ელექტრონული სხივის ფორმირების სისტემა უზრუნველყოფს

ელექტრონების ნაკადის შექმნას 20 – 100 კეე ენერგიით და ფოკუსირებას ნაკადის დიამეტრის 1 – 1,5 ნმ ზომით. სკანირება რეგულირდება კომპიუტერით, რომლის საშუალებით ელექტრული სხივი შეიძლება ჩაქრეს და აინთოს, ე.ი. მოხდეს ზედაპირზე ლოკალური ამოწანვლები. რეზისტად უფრო ხშირად გამოიყენება პოლიმერული მასალა პოლიმეთილმეთაკრილატი (პმმა), რომელიცაა გრძელ ჯაჭვიანი ნაერთი. ელექტრონებით დასხივებისას, ჯაჭვი წყდება, მოკლდება და ადვილად იხსნება ქიმიურ გამმულავნებელში. ნანოლიტოგრაფიაში გამოიყენება აგრეთვე, ორგანული ნაერთები, როგორცაა SiO_2 და AlF_3 , ლეგირებული LiF -ით და NaCl -ით. ეს მიიღება, როცა ფირების დასხივება ხდება მკაცრად ფოკუსირებული ელექტრონული სხივით ოთახის ტემპერატურაზე. ოქსიდი დასხივების ადგილიდან ორთქლდება და შეიძლება მივიდეთ ზედაპირზე სასურველი სურათი. ყოველივე ეს შესაძლებელია ჩატარდეს ვაკუუმში და შემდგომი პროცესები გაგრძელდეს იქვე, ვაკუუმის დარღვევის გარეშე.

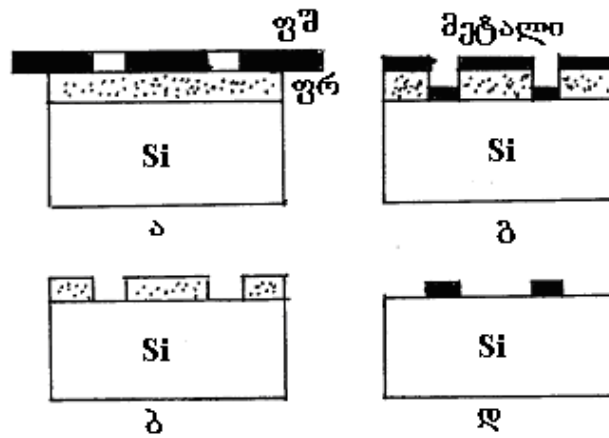
ა) **იონურ-სხივური ლიტოგრაფია** მსგავსია ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფიისა, მხოლოდ აქ გამოიყენება He^+ იონები, რომელთა ტალღის სიგრძე $\lambda=5 \cdot 10^{-5}$ ნმ 100კეე ძაბვაზე, როცა იგივე ძაბვაზე ელექტრონებისათვის $\lambda=4 \cdot 10^{-3}$ ნმ. ეს იძლევა საშუალებას გავაუმჯობესოთ გარჩევისუნარიანობა და რეზისტის სქელ ფირებში მოვახდინოთ გამოსახულების ექსპონირებამასიური წარმოებისათვის იონურ-სხივური ლიტოგრაფია ფერხდება იმიტომ, რომ დანადგარი არის ძვირადღირებული და იონური დასხივება იწვევს საფენის სტრუქტურის რადიაციულ დარღვევებს.

ბ) **რენტგენული ლიტოგრაფია** შეიძლება ჩატარდეს $\lambda=16$ ნმ ტალღის სიგრძის ფოტონების ნაკადით, რომელთა მისაღებად გამოიყენება სინხროტრონული გამოსხივება, რაც ხდის ამ პროცესს მოუხერხებელად. აგრეთვე, არაა შესაძლებელი რენტგენული სხივის ფოკუსირება და შესაბამისად, შაბლონის გარეშე პროცესის ჩატარება. მიღწეული მინიმალური ზომები 50 – 70 ნმ-ია.

ეპლაზმური ლიტოგრაფია ითვლება ერთ-ერთ ყველაზე პერსპექტიულ მეთოდად, მაგრამ ჯერ-ჯერობით გამოიყენება ლაზერის წყაროდ პლაზმის გაზური განმუხტვა, რაც დაკავშირებულია ვაკუუმთან. არავაკუუმური ლაზერის წყაროების გამოიყენება ამ მეთოდს ხდის პერსპექტიულად.

15. ფეთქებადი ლიტოგრაფია.

ეს მეთოდი გამოიყენება ძირითადად მეტალური ფირებისათვის, როცა ძნელია მისი ქიმიური მოწამვლა. ეს პროცესი გამოსახულია ნახ.15.1-ზე:



ნახ.15.1. ფოტოქებადი ლიტოგრაფიის პროცესი

რეზისტის, სისქით 1 მკმ, ფორმირება საფენის ზედაპირზე (ა), იხსნება რეზისტის სასურველ უბნებში (ბ), ეფინება მეტალი, სისქით 0,3 – 0,4 მკმ (მაგ. ოქრო) მთლიანად, მთელ ზედაპირზე (გ), ხდება სტრუქტურის დამუშავება აქტიურ ორგანულ გამხსნელში (მაგ. აცეტონში), რაც იწვევს რეზისტის და შესაბამისად, მის ზემოთ მეტალის შრის მოცილება და მიიღება სასურველი მეტალის სურათი საფენის ზედაპირზე (დ). ასეთი სახით მიღებული მეტალის ლოკალური ფირები შეიძლება გამოყენებულ იქნას ნანოელექტრონიკულ ხელსაწყოებში ელემენტებად ან ნიღბებად ხელსაწყოს დამზადების შემდგომ პროცესებში.

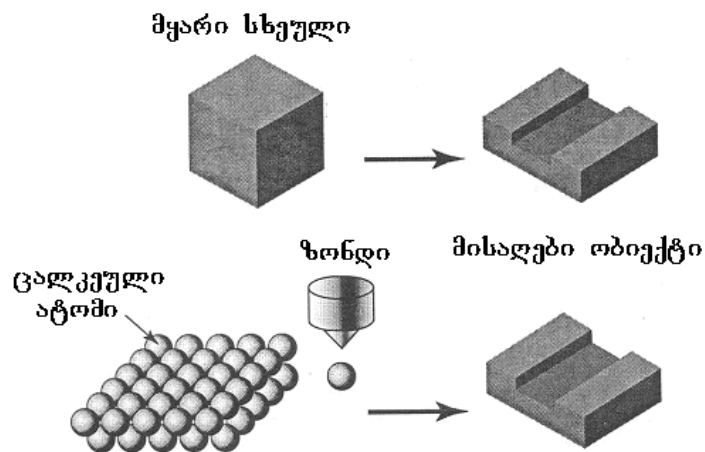
16. მასკირების ზონდური მიკროსკოპია

ეს მეთოდი შეიძლება გამოყენებულ იქნას ელექტრონებით რეზისტის მექანიკური, ლოკალური მოდიფიკაციისათვის უკონტაქტო და კონტაქტიან რეჟიმებში მუშაობისას. პროცესი ტარდება ელექტრონულ მიკროსკოპზე და რეზისტის მოდიფიკაციისათვის საჭიროა მიკროსკოპის ზონდი ახდენდეს ელექტრონების ეფექტურ ინჟექტირებას. ამისათვის „ნანო კალამი“ დამზადებული ან დაფარული სილიციუმის ნიტრიდით, კვლავ ოქროთი იფარება. სკანირების უკონტაქტო რეჟიმში მუშაობისას, ზონდზე ედება უარყოფითი ძაბვა 5 – 20 ვ-ის სიდიდის. სკანირების პროცესში მანძილი ზონდი-საფენი და ზონდიდან ელექტრონების ნაკადი მუდმივი სიდიდეებია. შესაძლებელია ელემენტის მინიმალური ზომა 30 ნმ-ზე მცირე მივიღოთ.

მიკროსკოპის კონტაქტურ რეჟიმში მუშაობისას ხდება რეზისტის, ან უშუალოდ საფენის ზედაპირის მექანიკური მოდიფიკაცია, მათში არხების, ღრმულების ფორმირება და ა.შ. ამ შემთხვევაში ზონდი არის, როგორც წერტილოვანი ინსტრუმენტი და პირდაპირი მექანიკური დამუშავება ხდება დიდი სიზუსტით. ამ პროცესის უარყოფითი მხარე ისაა, რომ დიელექტრიკზე

მოდულიზაციისას, დიელექტრიკი იმუხტება და სხივი აირეკლება, რაც აუარესებს ამოჭმული არხის ხარისხს.

ზოგადად, სასურველი ობიექტის მიღება შესაძლებელია ორი გზით, რომლებსაც პირობითად ჰქვიათ ტექნოლოგიები „ზემოდან-ქვემოთ“ და „ქვემოდან-ზევით“ (ნახ.16.1). მიმართულება „ზემოდან-ქვემოთ“ გულისხმობს მასიური სხეულის ზომების შემცირებას მიკრო- და ნანომეტრული მასშტაბამდე მექანიკური ან სხვა სახის დამუშავებით. მაგალითისათვის შეიძლება განვიხილოთ მასიური ნახევარგამტარული მასალა, რომლის ფოტოლიტოგრაფიული დამუშავებით მიიღება ხელსაწყო.



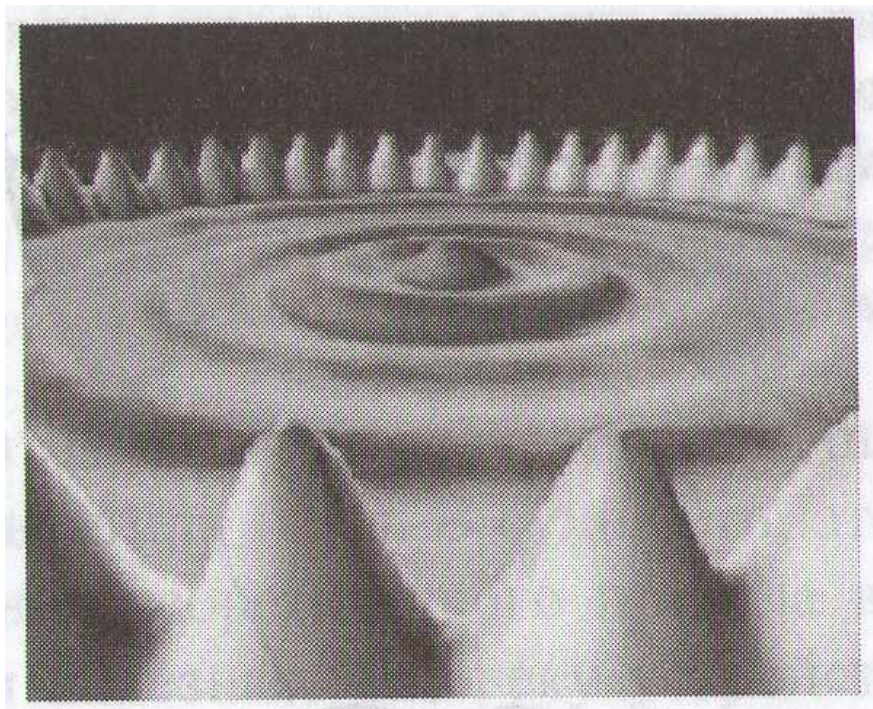
ნახ. 16.1. მასალის დამუშავების ორი მთავარი ნანოტექნოლოგიური პრინციპი

უკანასკნელი მონაცემებით, სინათლის ყველაზე მოკლე ტალღით დამუშავებული ზომა 50 ნმ-ია. უნდა აღინიშნოს, რომ ეს ტექნოლოგია რთულია, მოითხოვს დიდ დროს და ძვირადღირებულ დანადგარებს, რის გამოც ფართომასშტაბიან წარმოებაში გამოუდგარია.

ტექნოლოგიის „ქვემოდან-ზევით“ იდეა მდგომარეობს იმაში, რომ უშუალოდ ატომების ან მოლეკულების შესაბამისი კონფიგურაციის აწყობით მიიღება სასურველი ნანოობიექტი. შეიძლება ითქვას, რომ ეს ტექნოლოგია იძლევა მასალის ეკონომიას წინასთან შედარებით და მისი შებრუნებულია. „ქვემოდან-ზევით“ ტექნოლოგიის ტიპური მაგალითია ატომების ცალობით დადება კრისტალის ზედაპირზე მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპით. ასეთი მანიპულაციის მაგალითი მოცემულია ნახ.16.2-ზე, სადაც სპილენძის ზედაპირზე წრიულადაა განლაგებული რკინის ატომები.

„ქვემოდან-ზევით“ ტექნოლოგიის დახმარებით ერთმანეთზე დავაწყობთ არა მარტო ცალკეული ატომები, არამედ ატომთა შრეები. დღეს-დღეობით ეს მეთოდი

ხასიათდება ძალიან მცირე ეფექტურობით და წარმადობით, მაგრამ მას აქვს დიდი მომავალი.

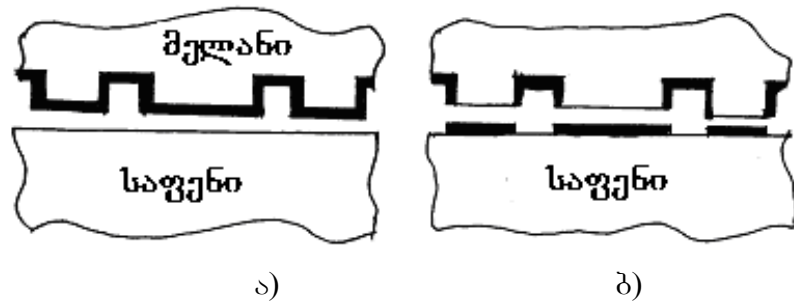


ნახ.16.2. სპილენძის ზედაპირზე რკინის ატომების
წრიული განლაგება (დახაზვა არ მოითხოვება).

17. ნანოლიტოგრაფია

ნანოლიტოგრაფია, ანუ ნანობეჭვდა ახალი მიმართულებაა ლიტოგრაფიის ტექნოლოგიაში, რომელიც აერთიანებს მარტივ, იაფფასიან, მგრძობიარობის ნანომეტრულ უბანში და მაღალი წარმადობის პროცესებს. აქ არ გამოიყენება რაიმე სახის გამოსხივება, ამიტომ ადგილი არა აქვს დიფრაქციულ მოვლენებს და შესაბამისად ლიტოგრაფიული პროცესები უფრო ზუსტია. გამოიყენება ნანობეჭვდის ორი ხერხი: მელნით და ნაჭდით ბეჭვდა.

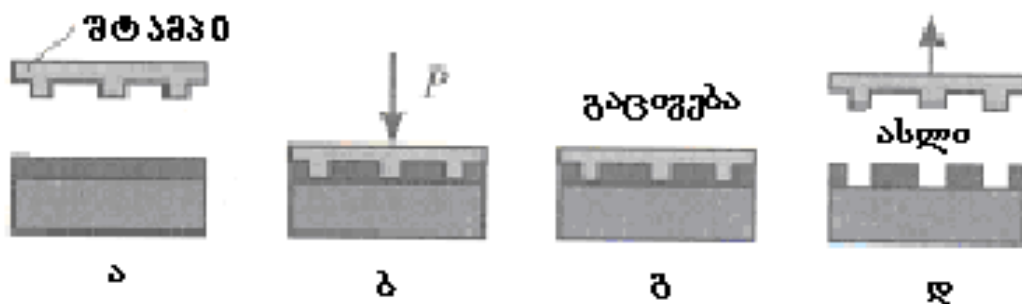
ა) მელნით ბეჭვდაში მელნის სახის რეზისტის მასალა დაიტანება სათანადო სურათის ელასტიკურ შტამპზე (ნახ.17.1ა). შემდეგ შტამპს მექანიკურად მცირე წნევით ახებენ საფენის ზედაპირს, რომელზეც შტამპის მოცილების შემდეგ რჩება მონომოლეკულური ფენა (ნახ.17.1ბ). მიღებული მელნით ნახატი გამოიყენება ნიღბად შემდგომი ოპერაციისათვის.



ნახ.17.1. ნანობეჭვლა: შეხებაამდე (ა) და შეხების შემდეგ (ბ).

შტამპზე მოქმედი მექანიკური ძაბვა უარყოფითად მოქმედებს სურათის ფორმირებაზე და შეთავსებაზე, განსაკუთრებით მრავალჯერადი ხმარებისას. გარდა ამისა, გარშემო ატმოსფეროს ტემპერატურის ცვლილებით იცვლება ელასტომერის (შტამპის მასალა) ზომები და, შესაბამისად სურათიც. მელნის სურათის დიფუზიური განრთხმები ხდება შტამპის საფენთან კონტაქტისას. ეს ძნელად კონტროლდება. უნდა იყოს კარგი ადგეზია საფენზე დარჩენილ მელანსა და საფენს შორის. წინააღმდეგ შემთხვევაში, შტამპის აღების შემდეგ შესაძლებელია მელნის აორთქლება, ანუ გადასვლა გაზურ ფაზაში. კარგი ადგეზია, ანუ მელნის დიფუზია საფენის ზედაპირზე, აუმჯობესებს გარჩევისუნარიანობას. ამისათვის მელნის მასალაში (თიოლი) შეჰყავთ მძიმე მოლეკულები.

ბ) ნაჭდით ბეჭვდის იდეა მდგომარეობს იმაში, რომ სათანადო სურათის მქონე ხისტი შტამპი ინერგება საფენზე წინასწარ დაფენილ, თერმოპლასტიკურ პოლიმერის ფენაში, ოთახის ტემპერატურაზე უფრო მაღალ ისეთ ტემპერატურაზე, რომ მოხდენილია პოლიმერის დარბილება. ეს პროცესი გამოსახულია ნახ.17.2-ზე. შტამპის ზედაპირს აქვს საჭირო სურათის ფორმა ფანჯრებით (ნახ.17.2ა). საფენი იფარება თერმოპლასტიკურ პოლიმერის ფენით, ხურდება ისეთ ტემპერატურამდე, რომ მოხდეს მისი დარბილება (მინის მდგომარეობაში გადასვლის ტემპერატურა). მასში ინერგება შტამპი (ნახ.17.2ბ), ცივდება სისტემა იმ ტემპერატურამდე, რომ მოხდეს პოლიმერის



ნახ.17.2. ნაჭდითი ბეჭედის პროცესი

გამყარება, შემდეგ იღებენ შტამპს (ნახ.17.2გ). დარჩენილ თხელი ფენის პოლიმერს აშორებენ ქიმიურად ან პლაზმა-ქიმიურად. ამ სახით მიღებულ რეზისტის ფენას (ნახ.17.2დ) იყენებენ ნიღბად შემდეგი პროცესებისთვის.

საკონტროლო კითხვები:

1. როგორია ალტერნატიული ლიტოგრაფია?
2. როგორ ტარდება ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფია?
3. ჩამოთვალეთ ნანოლიტოგრაფიის ძირითადი სახეები.
4. როგორ ტარდება ფეთქებადი ლიტოგრაფია?
5. რასში მდგომარეობს მასკანირებელი ლიტოგრაფიის არსი?
6. როგორი პროცესებია მელნით ბეჭედისას?
7. როგორი პროცესებია ნაჭდით ბეჭედისას?

თავი 2. მოლეკულის აღნაგობა და ქიმიური ბმის ბუნება

თანამედროვე გაგებით ორ ატომს შორის ქიმიური ბმა ხორციელდება თითოეული ატომის გარე გარსის ელექტრონების (სავალენტო) მოძრაობით მეორე ატომის ბირთვის ველში. ბმა ხორციელდება იმით, რომ ეს ელექტრონი, მოძრავი ორივე ბირთვს შორის, ეკუთვნის უკვე ორივე ბირთვს და არის მათთვის განკუთვნილი.

მიკრონაწილაკის ტალღური თვისებების გამო ელექტრონების ურთიერთქმედება უნდა განვიხილოთ არა როგორც წერტილოვანი მუხტებისა, არამედ მუხტებისა, რომლებიც განროთხმულნი არიან არეში რაღაც ღრუბლის სახით. ატომები ერთდებიან მხოლოდ მაშინ, როცა ამ შეერთებით მცირდება სისტემის სრული ენერგია, რაც გამოვლინდება ბირთვებს შორის სივრცეში ელექტრონების რიცხვის სიმკვრივის გაზრდით. ამ სიმკვრივეთა გადაფარვის

სიდიდეზეა დამოკიდებული მოლეკულის (მთლიანად ნივთიერების) ფიზიკური და ქიმიური თვისებები. თავის მხრივ, გადაფარვის სიდიდე დამოკიდებულია თითოეული ატომის შიგნით ელექტრონთა კვანტურ მდგომარეობაზე, ანუ ატომურ ორბიტალებზე.

18. ტალღური ფუნქციის არსი

ნივთიერების ატომური აღნაგობის იდეა წარმოიშვა ძალიან დიდი ხნის წინათ და ითვლებოდა ატომი, როგორც განუყოფელი ნაწილაკი. მე-19 საუკუნეში ექსპერიმენტებმა აჩვენა, რომ ატომი რთული სისტემაა და შედგება სხვადასხვა ნაწილაკებისაგან. მე-20 საუკუნეში ექსპერიმენტალურად დადგინდა, რომ ელექტრონი არის ყველა ატომის შემადგენელი ნაწილაკი, მისი მუხტია $1,6 \times 10^{-19}$ კ და მასა შეადგენს $9,1 \times 10^{-28}$ გ-ს.

რეზერფორდმა თავისი ცნობილი ცდით აჩვენა, რომ ატომი შედგება დადებითად დამუხტული ატომბირთვისაგან და მის გარშემო მოძრავი უარყოფითი მუხტის მატარებელი ელექტრონებისაგან. მთავარი უარყოფითი მხარე რეზერფორდის ატომური (პლანეტარული) მოდელისა იყო ის, რომ ის ეწინააღმდეგებოდა კლასიკურ ელექტროდინამიკურ კანონს: მოძრავი ელექტრონი უნდა ასხივებდეს ენერგიას და უნდა უახლოვდებოდეს ბირთვს. ორბიტის რადიუსის თანდათანობითი შემცირება გამოიწვევდა ელექტრონის ბრუნვის პერიოდის შემცირებას და გამოსხივების სიხშირის გაზრდას. ეს ნიშნავდა, რომ ატომი არ შეიძლებოდა ყოფილიყო მდგრადი, ხოლო მისი სპექტრი უნდა ყოფილიყო უწყვეტი და არაწრფივი. მაგრამ რეზერფორდის ცდის შედეგი იყო დასაბუთებული იმდენად, რომ მან დააყენა ეჭვქვეშ არა ატომური მოდელი, არამედ კლასიკური ელექტროდინამიკის შესაძლებლობა მოძრავი ელექტრონისათვის. ამის საფუძველს იძლეოდა ისიც, რომ სინათლის გამოსხივების და შთანთქმის თეორიაში ზოგიერთი ექსპერიმენტული ფაქტები ვერ იხსნებოდა სინათლის ტალღური ბუნებით.

პლანკმა წამოაყენა იდეა, რომ სინათლის გამოსხივება და შთანთქმა ხდება მხოლოდ ენერგიის სასრული პორციებით, რომელსაც მან კვანტი უწოდა. კვანტის ენერგია დამოკიდებულია სიხშირეზე $E = h\nu$, სადაც h პლანკის მუდმივაა ერთნაირი ყველა სიხშირისათვის და ტოლია $6,6 \times 10^{-34}$ ჯ.წმ. მისი განზომილებაა მოქმედების განზომილება, ანუ ენერგიის განზომილება გამრავლებული დროზე. ეს სიდიდე მნიშვნელოვანია ფიზიკაში.

ბორმა გააერთიანა რეზერვორდის ატომის აგებულება და კვანტური თეორია. თავისი თეორია მან ჩამოაყალიბა პოსტულატების სახით, რომლებიც ასეთია:

1) ატომში ელექტრონი იმყოფება მხოლოდ განსაზღვრულ (დისკრეტულ) მდგრად მდგომარეობაში, რომელსაც ეწოდება სტაციონალური. ამ მდგომარეობაში ელექტრონი ბრუნავს განსაზღვრულ ორიტებზე ბირთვის გარშემო და არ ასხივებს. ამ პოსტულატით ატომისათვის მიუღებელია კლასიკური თეორია;

2) ატომი ასხივებს მხოლოდ მაშინ, როცა ელექტრონი გადადის ერთი სტაციონალური მდგომარეობიდან (E_1)-დან მეორეზე (E_2) და მათ შორის ენერგიების სხვაობა იქნება ν სიხშირის ფოტონის გამოსხივების ენერგია:

$$E = h\nu = E_1 - E_2 \quad (18.1)$$

ეს პირობა გამოდის ენერგიის შენახვის კანონიდან.

3) ატომში ყველა შესაძლო მდგომარეობიდან ხორციელდება მხოლოდ ის, რომლისთვისაც მოძრაობის რაოდენობის მომენტი M ტოლია $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ -ის მთელი რიცხვის ჯერადია, ანუ

$$M = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}, \quad (18.2)$$

სადაც $n = 1, 2, 3, \dots$ კვანტური რიცხვია.

მარტივ შემთხვევაში ელექტრონის მოძრაობისას წრიულ ორბიტაზე მოქმედება ტოლია მისი იმპულსისა $m_e v$ -ს ნამრავლისა ორბიტის სიგრძეზე $2\pi r$ -ზე, ანუ ის პროპორციულია მოძრაობის რაოდენობის მომენტისა $M = m_e v r$. ბორის თეორიით ატომის ყოველი სტაციონალური მდგომარეობა ხასიათდება განსაზღვრული მოქმედების მნიშვნელობით, რომელსაც შეუძლია მიიღოს დისკრეტული მიმდევრობითი მნიშვნელობები: $h, 2h, 3h$ და ა.შ. სიდიდე h არის მოქმედების უმცირესი მნიშვნელობა, ანუ მოქმედების კვანტი.

ამრიგად, ელექტრონისათვის საჭირო გახდა ახალი კვანტური თეორიის შექმნა. ბორის თეორია იყო წარმატებული, რადგან მან მოგვცა ელექტრონის მოძრაობის ფიზიკური სურათი ატომში და მისი ენერგიის განსაზღვრის მეთოდი. ახალი თეორიის შექმნაში გამოჩნდა სიძნელე, რომელიც დაკავშირებული იყო თვით ელექტრონის ბუნებასთან. ეს სიძნელე განპირობებული იყო ჰაიზენბერგის¹¹ განუზღვრელობის პრინციპის არსებობასთან, რომლის თანახმად შეუძლებელია ერთდროულად ზუსტად განსაზღვროთ ელექტრონის კოორდინატი და იმპულსი. მაგალითად, თუ ელექტრონი მოძრაობს აბსოლუტურ ვაკუუმში განსაზღვრული

სიჩქარით (იმპულსით) და გვინდა რაღაც მომენტში განსაზღვროთ მისი მდებარეობა, საჭიროა ის „დავინახოთ“ მიკროსკოპით. ამისათვის ამ მდებარეობაში ელექტრონმა უნდა აირეკლოს ფოტონი, რომელიც მოხვდება მიკროსკოპში. მაგრამ ფოტონის ელექტრონზე დაჯახების შემდეგ, მისი მიკროსკოპში მოსვლამდე, ელექტრონი გადაადგილდა, შეიცვალა სიჩქარე (იმპულსი). რაც მეტია ფოტონის $h\nu$ ენერგია, მით ზუსტად გავიგებთ ელექტრონის მდებარეობას, მაგრამ მით მეტად შეიცვლება ელექტრონის სიჩქარე (იმპულსი) და მით მეტი იქნება მისი განსაზღვრის ცდომილება. განუზღვრელობის პრინციპი მათემატიკურად ასე ჩაიწერება:

$$\Delta x \Delta P_x \geq \hbar \quad (18.3)$$

სადაც Δx - ნაწილაკის განუსაზღვრელობაა x კოორდინატში მოცემულ მომენტში, ΔP_x - იმპულს-ვექტორის პროექციის განუსაზღვრელობაა x კოორდინატზე იმავე მომენტში.

(18.3)-ის მსგავსად შეიძლება ჩავწეროთ:

$$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m} \quad (18.4)$$

თუ დაუშვებთ, რომ ელექტრონის მდებარეობა ზუსტად განსაზღვრულია, მაშინ იმპულსი სრულიად განუსაზღვრელია, ანუ ის ერთნაირი ალბათობით იღებს ყველა მნიშვნელობას.

ასევე შეიძლება დავწეროთ, რომ

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (18.5)$$

(18.3) და (18.5)-ით დამაკავშირებელ წყვილებს, იმპულსს და კოორდინატს, ასევე ენერგიას და დროს უწოდებენ შეუღლებულ ცვლადებს.

მიკრონაწილაკთა განსაკუთრებული მოქმედებების განხილვიდან გამომდინარე შეიძლება გაკეთდეს შემდეგი მნიშვნელოვანი დასკვნები:

- 1) მიკროსამყაროზე ჩვენი შეცნება (ნაწილაკთა მდებარეობა, სიჩქარე ა.შ.) ატარებს ალბათურ ხასიათს.
- 2) მოძრაობის ტრაექტორიის არსი კარგავს აზრს.
- 3) მიკრონაწილაკთა ენერგია არავითარ პირობებში არ შეიძლება ნულის ტოლი იყოს, რადგანაც $E=0$ -ის შემთხვევაში მისი კოორდინატები და იმპულსი იქნებოდა ზუსტად განსაზღვრული, რაც ეწინააღმდეგება განუზღვრელობის პრინციპს.

4) განუზღვრელობის პრინციპი არის ფიზიკურად რეალური. ეს ნიშნავს, რომ შემცირება (გაზრდა) ერთ-ერთი შეუღლებული ცვლადისა აუცილებლად იწვევს მეორე ცვლადის გაზრდას (შემცირებას).

ბორის თეორიამ ვერ ახსნა H_2^+ -ის არსებობა. ამ თეორიაში ელექტრონი განიხილებოდა მხოლოდ, როგორც ნაწილაკი (კორპუსკულარული). დე ბროილმა დაუშვა, რომ m მასისა და v სიჩქარით მოძრავი ელექტრონის ტალღური თვისება ხასიათდება ტალღის სიგრძით: $\lambda = h/mv$. დე ბროილის თეორიის სისწორე დამტკიცდა ელექტრონების გაბნევისას მესერზე. თუ მისი სიჩქარეა $v=10^8$ მ/წმ, მაშინ მისი ტალღის სიგრძეა $\lambda = 7 \times 10^{-8}$ სმ, ანუ ატომის რივისაა.

ამრიგად მოცემულ მომენტში მიკრონაწილაკის მდებარეობის განმსაზღვრელი ტარექტორიის ცნება აზრს კარგავს. ასევე აზრს კარგავს მისი სიჩქარის ცნებაც. მაშინ, აზრი აქვს მიკრონაწილაკის მოცემულ მომენტში, მოცემულ ადგილზე ყოფნის ალბათობას და აღიწერება სტატისტიკური მახასიათებლებით. შეინარჩუნება მიკრონაწილაკის ისეთი მახასიათებლები, როგორცაა მასა, ენერგია, იმპულსის მომენტი. რადგან ელექტრონი ტალღური ბუნებისაა მისი მდგომარეობის აღწერისათვის უნდა იყოს ტალღური ტიპის განტოლება. ამოცანის მიზანია სივრცის განსაზღვრულ უბანში მოიძებნოს ელექტრონის ყოფნის ალბათობა. ეს ალბათობა ხასიათდება რაღაც $\Psi(x, y, z)$ ფუნქციით, რომელსაც ეწოდება ტალღური ფუნქცია და საჭიროა მისი პოვნა. ტალღური ფუნქციის პოვნა შესაძლებელია მიკრონაწილაკის მოძრაობის ტალღური განტოლებიდან. ტალღური Ψ ფუნქციის ფიზიკური არსის გაგებისათვის წარმოვიდგინოთ, რომ სივრცეში მოცემულია (x, y, z) წერტილი და მის გარშემო $dv = dx dy dz$ მცირე მოცულობა. წერტილში იყო $\Psi(x, y, z)$ ფუნქცია. dv მოცულობაში ელექტრონის მოხვედრის ალბათობა იქნება $\Psi^2 dv$, ანუ dv -ში ელექტრონის ყოფნის დროის ნაწილი.

$\frac{\Psi^2 dv}{dv} = \Psi^2$ იქნება ელექტრონის ყოფნის ალბათობის მოცულობის ერთეულში, ანუ ალბათობის სიმკვრივე, ელექტრონთა სიმკვრივე. ელექტრონის ტალღური თვისება ნიშნავს, რომ ყოველ ნებისმიერ მომენტში ელექტრონი შეიძლება იყოს ნებისმიერ წერტილში სხვადასხვა ალბათობით. ასე, რომ ელექტრონული ღრუბელი, რომლის სიმკვრივე სხვადასხვაა წერტილში არის სხვადასხვა და ეთანადება ელექტრონულ სიმკვრივეს. ყველა ელექტრონული ღრუბლისთვის შეიძლება გაგავლოთ ნებისმიერი რაოდენობის ზედაპირები, სადაც $\Psi^2 = Const$. სასაზღვრო ზედაპირი ტალღური ფუნქციის კვადრატის ერთნაირი მნიშვნელობის მქონე უბნის

შემომსაზღვრავია, მის შიგნით ელექტრონის სიმკვრივის უმეტესი ნაწილია თავმოყრილი (მაგალითად 80% ან 90%). სასაზღვრო ზედაპირი განსაზღვრავს ელექტრონული ღრუბლის ფორმას. საკვანძო ზედაპირი არის ზედაპირი, სადაც ტალღური ფუნქციის კვადრატი ნულის ტოლია. თუ Ψ ფუნქციას გავამრავლებთ - 1-ზე Ψ^2 არ შეიცვლება. ალბათობა ინარჩუნებს თავის სიდიდეს.

ტალღური ფუნქციისთვის სამართლიანია სუპერპოზიციის პრინციპი (ზედდება). თუ მიკროსისტემა აღიწერება Ψ_1 და Ψ_2 ფუნქციებით, მაშინ Ψ ტალღური ფუნქცია ტოლია მათი ჯამის ან სხვაობისა, ანუ მათი წრფივი კომბინაცია ასევე განსაზღვრავს სისტემის მდგომარეობას:

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 \quad (18.6)$$

სადაც C_1, C_2 მუდმივებია. კლასიკურისგან განსხვავებით კვანტურ მექანიკაში მიკრონაწილაკისთვის ალბათობები არამარტო იკრიბება, არამედ ხდება მათი ზედდება, ანუ ხდება ინტერფერენცია. მართლაც:

$$\Psi^2 = (C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2)^2 = C_1^2\Psi_1^2 + C_2^2\Psi_2^2 + 2C_1C_2\Psi_1\Psi_2 \quad (18.7)$$

(18.7) განტოლების ბოლო წევრი აღნიშნავს ალბათობების ზედდებას.

ტალღური განტოლებიდან ნაპოვნი ტალღური ფუნქცია, შეიცავს უგანზომილებო სიდიდეებს – კვანტურ რიცხვებს, რომლებიც ღებულობენ მთელ რიცხვით მნიშვნელობებს, ანუ ელექტრონის მდგომარეობა ატომში განისაზღვრება კვანტური რიცხვებით.

19. ერთელექტრონიანი ატომის ორბიტალი

განვიხილოთ ტალღური განტოლების ამონახსნი წყალბადის ატომში, სადაცაა ერთი ელექტრონი, მოძრავი ერთი პროტონის ველში. ამოცანაა ვიპოვოთ „ამპლიტუდა“. ამ წერტილების მდებარეობა შეიძლება იყოს დეკარტეს კოორდინატებში (x, y, z) წერტილით მოცემული, სადაც ცენტრი გადიოდეს ატომის ბირთვში.

არსებობს ამ განტოლების უამრავი ამონახსნი. მაგრამ არსებობს შემოსაზღვრა იმით, რომ ეს ამონახსნი უნდა იყოს სასრული, უწყვეტი და ერთი მნიშვნელობის. ასეთი ამონახსნის მაგალითია:

$$\Phi = a \sin m\varphi \quad (19.1)$$

ეს ფუნქცია არასდროს არ გადააჭარბებს a -ს, ანუ სასრულია, უწყვეტია სინუსის უწყვეტობის გამო. ერთი მნიშვნელობისაა მხოლოდ მაშინ, როცა m მთელი რიცხვია. ცხადია, (2.33) მაშინაა განტოლების ამონახსნი, როცა m ტოლია $0; \pm 1; \pm 2$ და ა.შ.

m რიცხვს ეწოდება მაგნიტური კვანტური რიცხვი. მისი არსებობა მიუთითებს იმაზე, რომ ელექტრონის მოძრაობა ატომში იყოს ერთმნიშვნელოვანი. ელექტრონს აქვს სამი თავისუფლების ხარისხი, ამიტომ მას უნდა ჰქონდეს კიდევ ორი კვანტური რიცხვი. ზოგადად, ტალღური განტოლების ამონახსნი შეიცავს სამ კვანტურ რიცხვს n, l და m . მთავარი კვანტური რიცხვი n ღებულობს ყველა ნატურალურ მნიშვნელობას $1, 2, \dots, \infty$ -მდე. მთავარი კვანტური n რიცხვის მოცემული მნიშვნელობისათვის ორბიტალური (აზიმუტალური) კვანტური რიცხვი l ღებულობს მნიშვნელობას 0 -დან $(n-1)$ -მდე: $l = 0; 1; 2; \dots; (n-1)$. ორბიტალური კვანტური რიცხვის მოცემული მნიშვნელობისათვის მაგნიტური კვანტური რიცხვი m ღებულობს მნიშვნელობას $-l$ -დან $+l$ -მდე ნულის ჩათვლით, სულ $(2l+1)$ რაოდენობას: $m = -l; -(l-1); \dots; -1; 0; +1; \dots; (l-1); l$.

ტალღური ფუნქცია $\Psi_{n;l;m}$ აღწერს ელექტრონის განსაზღვრულ მდგომარეობას, როცა მოცემულია სამივე კვანტური რიცხვი. ერთელექტრონიან ტალღურ ფუნქციას, როცა მოცემულია სამი n, l, m კვანტური რიცხვი ეწოდება ატომური ორბიტალი (აო). ამიტომ როცა ამბობენ, რომ ელექტრონი იმყოფება რაღაც განსაზღვრულ აო-ზე, იგულისხმება ელექტრონის მდგომარეობის შესაბამისი ტალღური ფუნქცია არის ცნობილი, ანუ მოცემულია ყველ კვანტური რიცხვის მნიშვნელობები.

სიმარტივისათვის შემოღებული აო-ის აღმნიშვნელი სიმბოლოები, მაგალითად $l = 0; 1; 2; 3; \dots$ ორბიტალები აღინიშნებიან s, p, d, f და ა.შ. შესაბამისად. გარდა ამისა, n ღვას l -ის წინ. ასე მაგალითად $n=1$, მაშინ $l=0; m=0$, აღნიშვნა $1s$, $n=2, l=0, m=0$ $2s$; $l=1, m=0$ ან ± 1 $2p$ (სამი $2p$ აო) და ა.შ.

მოვიყვანოთ აო-ის აღნიშვნის ცხრილი:

$n = 1$	$l = 0$	$m = 0$	$1s$
$n = 2$	$l = 0$	$m = 0$	$2s$
	$l = 1$	$m = 0; \pm 1$	$2p$ (სამი აო)

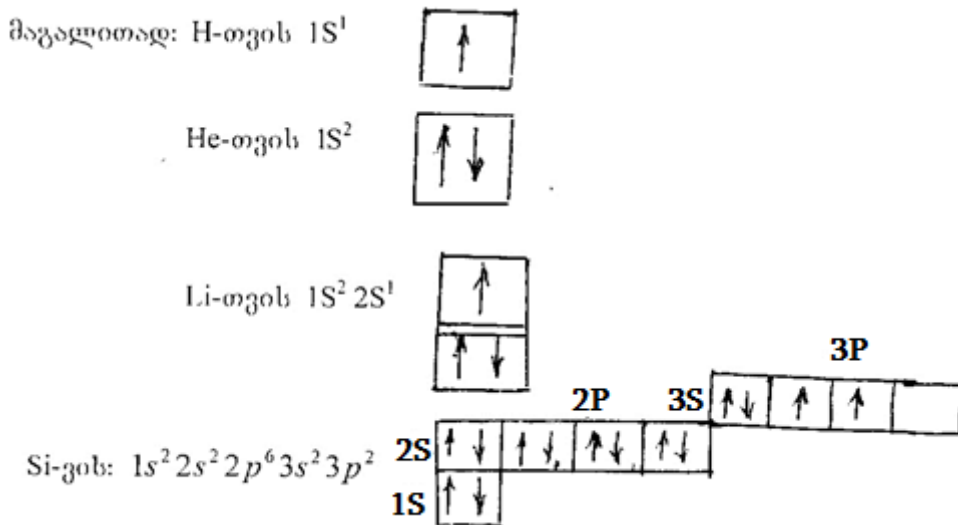
$n = 3$	$l = 0$	$m = 0$	$3s$
	$l = 1$	$m = 0; \pm 1$	$3p$ (სამი აო)
	$l = 2$	$m = 0; \pm 1; \pm 2$	$3d$ (ხუთი აო)

ხარისხში რიცხვი მიუთითებს მასზე ელექტრონების რაოდენობას. ამ ჩანაწერში მთავარი და ორბიტალური რიცხვები ელექტრონების რაოდენობის გამომხატველი რიცხვი ხარისხში. ასეთია ატომის ელექტრონული ფორმულის ჩაწერა.

20. კვანტური რიცხვების არსი.

თვალსაჩინოებისათვის ატომურ ორბიტალებს გამოსახავენ ელექტრონული კონფიგურაციით – უჯრედით, ე.წ. კვანტური უჯრედით, შიგნით ელექტრონის სპინის გამომხატველი ისრით.

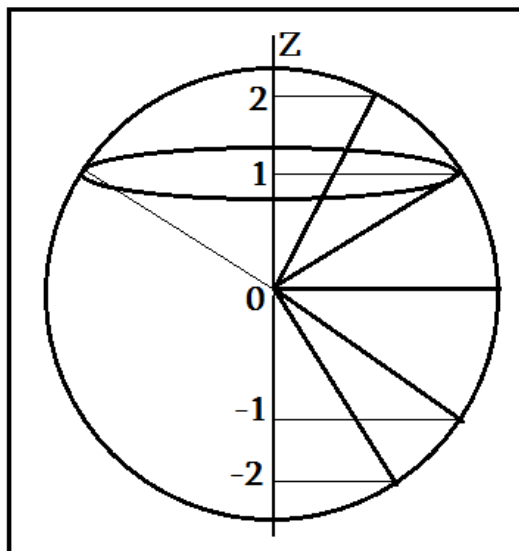
წყალბადის ატომში ელექტრონის ენერგია იკვანტება და განისაზღვრება მთავარი კვანტური რიცხვით. მისი ერთადერთი ელექტრონი მიისწრაფვის დაიკავოს უმცირესი ენერგიის მქონე $1s$ ორბიტალი. ამ დროს ატომი არის ყველაზე უფრო მდგრად მდგომარეობაში, ანუ ე.წ. ძირითად მდგომარეობაში. ატომური სისტემის ძირითად მდგომარეობაში ელექტრონის სრული ენერგია არის მინიმალური. ყველა ორბიტალს, ერთნაირი მთავარი კვანტური რიცხვებით აქვთ ერთნაირი ენერგიები.



რაც მეტია ბირთვიდან მანძილი, მით მცირეა მისი ბირთვთან ბმის ენერგია. მთავარი კვანტური n რიცხვი განსაზღვრავს ელექტრონის ბირთვთან დაშორებას, ანუ ორბიტალის ზომას. იმ წერტილებში, სადაც ელექტრონის ყოფნის ალბათობა ნულია, ტალღური ფუნქციაც ნულია. წერტილების გეომეტრიულ ადგილს, სადაც ელექტრონის ყოფნის ალბათობა ნულია, ეწოდება საკვანძო ზედაპირი.

ატომს არა აქვს მკაცრი საზღვარი, ელექტრონს არა აქვს ტრაექტორია, ორბიტა, არამედ აქვს ყოფნის ალბათობა განსხვავებული სხვადასხვა ადგილებში. ამიტომ შეიძლება ვთქვათ ბირთვის გარშემო ელექტრონული ღრუბელი არის სხვადასხვა სიმკვრივით, რომლის ზომას განსაზღვრავს მთავარი კვანტური რიცხვი.

ორბიტალური კვანტური l რიცხვი განსაზღვრავს ელექტრონული ღრუბლის სახეს, ანუ აო-ის ფორმას და მოძრაობის რაოდენობის მომენტს M -ს. ენერგიის მსგავსად იკვანტება ისიც და მისი გეგმილიც რომელიმე გამოყოფილ ღერძზე, მაგალითად z ღერძზე, რომელიც დამოკიდებული m მაგნიტურ კვანტურ რიცხვზე. ეს მსგავსია პლანეტების მოძრაობისა მზის გარშემო - n რიცხვი გვიჩვენებს მოძრავი პლანეტის ორბიტას, l რიცხვი - პლანეტის ორბიტის ფორმას და m - ორბიტის დახრას. ნახ.20.1-ზე მოცემულია $l = 2$ სათვის შესაბამისი ფორმები და დახრები.



ნახ.20.1. ორბიტალური კუთხური მომენტის სივრცული დაკვატვა ($l=2$).

ამ სამი კვანტური რიცხვით ვერ აიხსნა ზოგიერთი ექსპერიმენტული მონაცემი. მაგალითად, აღმოჩნდა, რომ წყალბადის ატომის სპექტრის ყოველი

ხაზი იხლიჩება ორად, ანუ არის დუბლეტი. ამ ფაქტის ახსნისათვის ულენბეკმა და გაუდსმიტმა დაუშვეს, რომ ელექტრონი ბრუნავს საკუთარი ღერძის გარშემო, აქვს საკუთარი კუთხური მომენტი დამას სპინი უწოდეს. ელექტრონის სპინი არის მუდმივი სიდიდე $s = \pm \frac{1}{2}$. ეს ისეთი ფუნდამენტური სიდიდეა, როგორც ელექტრონის მასა, მუხტი.

მაშასადამე, ელექტრონის მდგომარეობა განსაზღვრულია, თუ მოცემულია ოთხი კვანტური რიცხვი n, l, m და s .

21. მრავალ ელექტრონიანი ატომის ორბიტალები

მრავალელექტრონიან ატომში არის ბირთვი და z ელექტრონი. ყოველი ელექტრონი განიცდის ბირთვისგან მიზიდვას და სხვა ელექტრონისგან განზიდვას. ზუსტად განისაზღვროს განზიდვის ენერგია რთულია და ტალღური განტოლების ამოხსნა ზუსტად არ არის შესაძლებელი. ამიტომ ის მიახლოებით იხსნება, ამისათვის დაშვებულია, რომ განზიდვის ენერგია მცირეა მიზიდვის ენერგიასთან შედარებით. მაშინ ყოველი ელექტრონი არის დამოუკიდებელი ერთმანეთისგან და ის იმყოფება განსაზღვრულ ორბიტალზე, ისეთივე ფორმის და ისეთივე სიმეტრიისას, როგორცაა წყალბადის ატომში და განისაზღვრება ოთხივე n, l, m და s კვანტური რიცხვებით.

მრავალელექტრონიანი ატომის შემთხვევაში აუცილებელია განისაზღვროს რომელ ატომურ ორბიტალზე განაწილდებიან ელექტრონები და რა თანმიმდევრობით. ამისათვის დაცული უნდა იყოს შემდეგი პრინციპები:

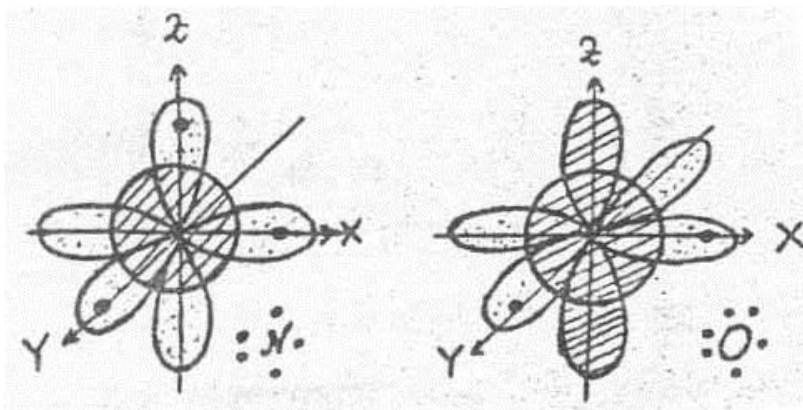
1) ენერგიის მინიმუმის პრინციპის თანახმად, ჯერ უნდა შეივსოს მცირე ენერგიის მქონე ორბიტალები;

2) პაულის პრინციპის თანახმად, ატომში ნებისმიერი ორი ელექტრონის მდგომარეობა უნდა განსხვავდებოდეს ერთმანეთისაგან ოთხი კვანტური n, l, m და s რიცხვებიდან ერთით მაინც. ეს ნიშნავს, რომ ერთ ატომურ ორბიტალზე, რომელიც ხასიათდება სამი n, l, m რიცხვებით შეიძლება იმყოფებოდეს ერთი ნებისმიერი მიმართულების სპინით ან ორი ელექტრონი სხვადასხვა მიმართულების სპინით $+1/2$ ან $-1/2$.

3) ჰუნდის წესით ატომურ ორბიტალებზე ელექტრონები ისწრაფიან მოთავსდნენ ისე, რომ შეინარჩუნონ პარალელურ სპინიანი ელექტრონების უდიდესი რიცხვი. მაგალითად, ფოსფორის შემთხვევაში რომელსაც აქვს სულ 15 ელექტრონი, ძირითადადში $1s$ ატომურ ორბიტალზე განლაგდება ($n = 1; l = 0; m = 0$)

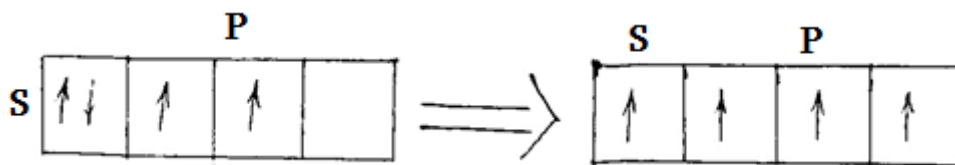
ორი ელექტრონი $(1s)^2$. შეივსება $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ და $3p^3$ -ში იქნება სამი ელექტრონი პარალელური სპინით.

ატომთა ელექტრონული კონფიგურაციები შეიძლება გამოისახოს ე.წ. ორბიტალური სქემების საშუალებით. ნახ.21.1-ზე დაშტრიხული ორბიტალი შეესაბამება ელექტრონულ წყვილს, დაუშტრიხავი კი კენტ ელექტრონს.



ნახ.21.1. აზოტის და ჟანგბადის ატომების ორბიტალური კონფიგურაციები.

გავანალიზოთ ვალენტოვნების საკითხი. ელემენტის ვალენტობას განსაზღვრავს გაუწყვილებელი სპინების რიცხვი. იმ შემთხვევაში, თუ ერთიდაიგივე მთავარი კვანტური რიცხვის ფარგლებში შესაძლებელია ელექტრონთა წყვილის შემცველი ორბიტალიდან ერთი ელექტრონის ვაკანტურ ორბიტალზე გადასვლა, მაშინ გაუწყვილებელი სპინების რაოდენობა და შესაბამისად ელემენტის ვალენტოვნება გაიზრდება (ნახ.21.2).



ნახ.21.2. ელემენტის ვალენტოვნების გაზრდის მაგალითი.

შესაძლებელია ელექტრონი გადავიდეს ბმული მდგომარეობიდან ($E < 0$) თავისუფალ მდგომარეობაში (ატომის იონიზაცია), რომელსაც ყოველთვის თან ახლავს ენერგიის დახარჯვა. ამ დროს მიიღება დადებითად დამუხტული იონი და თავისუფალი ელექტრონი.

იონიზაციის ენერგია არის ენერგია, რომელიც საჭიროა დაიხარჯოს იმისათვის, რომ ძირითად მდგომარეობაში მყოფი ნეიტრალური ატომიდან ელექტრონი მოვაცილოთ და გადავიყვანოთ უსასრულობაში. იონიზაციის ენერგიას გამოსახავენ ელექტრო-ვოლტებში. ეს ენერგია ყოველთვის დადებითია. იონიზაციის ენერგიას ხშირად უწოდებენ იონიზაციის პოტენციალს. მაგრამ რადგან იგულისხმება პოტენციალთა სხვაობა ვოლტებში, ამიტომ იონიზაციის ენერგია E_i (ეე) და იონიზაციის პოტენციალი I_i (ე) რიცხობრივად თანხვედებიან ერთმანეთს. მრავალელექტრონიანი ატომის შემთხვევაში შესაძლებელია ელექტრონის თანდათან მოცილება მეორე, მესამე და ა.შ. ამიტომ მიიღება შესაბამისად პირველი, მეორე, და ა.შ. იონიზაციების ენერგიები. ყოველი ატომისათვის შემდეგი იონიზაციის ენერგია იზრდება, რაც დაკავშირებულია შექმნილ იონზე დადებითი მუხტის გაზრდასთან.

ბევრ ატომს აქვს თვისება მიიერთოს ელექტრონი, რომელიც გამოიხატება სიდიდით – სწრაფვა ელექტრონისადმი. სწრაფვა ელექტრონისადმი არის ის ენერგია, რომელიც გამოიყოფა ნეიტრალური (თავისუფალი) ატომის მიერ ელექტრონის მიერთებისას. ამ დროს ატომი იმუხტება უარყოფითად. ის არის უარყოფითი სიდიდე. მრავალელექტრონიან ატომში ყოველი შემდეგი სწრაფვა ელექტრონისადმი ენერგია აბსოლუტური მნიშვნელობით იზრდება, რადგან იზრდება ელექტრონის განზიდვა იონის მიერ. იონიზაციის პოტენციალის და სწრაფვა ელექტრონებისადმის საშუალო არითმეტიკული არის სიდიდე, რომელსაც ეწოდება **ელექტროუარყოფითობა**, რომელსაც აქვს ფიზიკური აზრი და მნიშვნელოვანი პარამეტრია ყველა ელემენტისათვის. ორი ელემენტის შეერთებისას ელექტრული ღრუბელი გადაიწევა იმ ელემენტის მხარეს, რომლის ელექტროუარყოფითობაც მეტია.

22. მოლეკულის აღნაგობა

მიკრონაწილაკების ტალღური ბუნების გამო ორი ატომის ელექტრონების ურთიერთქმედება უნდა განვიხილოთ, როგორც მათი ელექტრონული ღრუბლების ურთიერთქმედება. ატომები შეერთდებიან მოლეკულებად მაშინ თუ ამ დროს სისტემის სრული ენერგია შემცირდება ბირთვებს შორის ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივის გაზრდის ხარჯზე.

ელექტრონების ასეთი ორიენტაცია დაკავშირებულია ელექტრონების გაცვლასთან ორ ატომს შორის, რომელიც არის ელექტრონების განურჩევლობის პრინციპის შედეგი. ეს სიმარტივისათვის განვიხილოთ წყალბადის მოლეკულის

მაგალითზე. შორს მყოფი წყალბადის ატომი არ რეაგირებს ერთმანეთზე. მათი რაღაც მანძილზე დაახლოებისას მოხდება ელექტრონების ურთიერთქმედება, რომლებიც ადრე მოძრაობდნენ თავიანთი ბირთვის ველში. როდესაც წყალბადის ორი ატომი ურთიერთშორს არიან თვითოეული ხასიათდება $1s_1$ და $1s_2$ მდგომარეობებით. ამასთან $1s_1$ და $1s_2$ ურთიერთშექცევადია, განურჩევლობის პრინციპით. მოლეკულური ორბიტალი იქნება:

$$\Psi = C_1 1s_1 + C_2 1s_2 \quad (22.1)$$

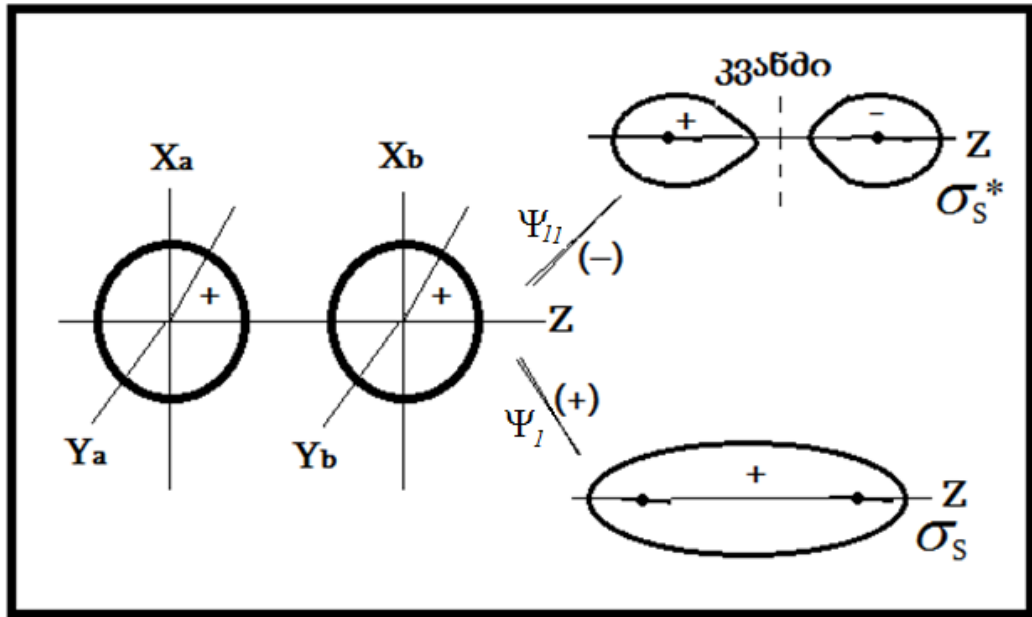
რადგანაც ურთიერთშექცევადია, ამიტომ $C_1^2 = C_2^2$, ანუ $C_1 = \pm C_2 = \pm C$ და გამოდის, რომ:

$$\Psi_I = C(1s_1 + 1s_2) \quad \text{და} \quad \Psi_{II} = C(1s_1 - 1s_2) \quad (22.2)$$

ორი ატომური ორბიტალიდან მივიღეთ ორი მოლეკულური ორბიტალი. Ψ_I -ის შემთხვევაში დადებითი S ფუნქციები იკრიბება (აო გადაიფარება) და $|\Psi_I|^2$ ბირთვებს შორის სივრცეში იზრდება, ანუ ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე იზრდება. ამას მივყავართ სისტემის ენერჯიის შემცირებამდე, ანუ ორი ატომის კავშირის შექმნამდე. ასეთი მოლეკულური ორბიტალი (მო) არის **დამაკავშირებელი**. ეს მოცემულია ნახ.22.1-ზე. Ψ_{II} -ს ფუნქციის შემთხვევაში

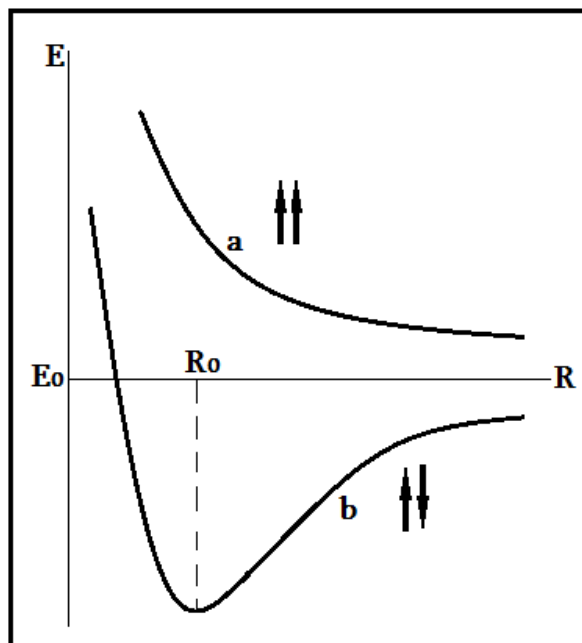
ბირთვებს შორის არეში არის საკვანძო სიბრტყე. ასეთი სისტემის ენერჯია იზრდება და კავშირი ატომებს შორის არ მყარდება. ასეთი ორბიტალია **ანტიდამაკავშირებელი** და აღინიშნება σ_s^* -ით. მაშასადამე, წყალბადის მოლეკულის წარმოქმნა დამოკიდებულია შესაერთებელი ატომების მიახლოების მანძილზე.

მდგრადი მოლეკულის შექმნა მოითხოვს, რომ გასაერთიანებელი ატომების სპინები იყვნენ ანტიპარალელური (სინგლეტურ მდგომარეობაში). ამ დროს ატომების მიახლოების მანძილები ხასიათდებიან მინიმუმის ენერჯიით (ნახ.22.2) ატომების სპინების პარალელობისას (ტრიპლეტური მდგომარეობა) იწვევს ანტიდამაკავშირებელი ორბიტალის წარმოქმნას (ნახ.22.2).



ნახ.22.1. მოლეკულური ორბიტალების წარმოქმნა ორი წყალბადის 1S ატომებისაგან.

მაშასადამე, ხდება პარალელურ სპინებიანი ელექტრონების განზიდვა და ამ დროს ხდება შესაბამისი ელემენტების განზიდვა. აქედან გამომდინარე, ელექტრონის გადასვლა დამაკავშირებელი ორბიტალიდან ანტიდამაკავშირებელზე იწვევს ბმის შესუსტებას.



ნახ.22.2. ორი ატომისაგან შემდგარი წყალბადის მოლეკულის ენერჯის დამოკიდებულება ატომთა შორის მანძილზე ორი სხვადასხვა სპინური მდგომარეობისათვის.

საკონტროლო კითხვები:

1. რა სახის კვანტური რიცხვები არსებობს?
2. განმარტეთ კვანტური რიცხვების არსი;
3. ჩამოაყალიბეთ მრავალელექტრონიან ატომის შემთხვევაში ელექტრონების ორბიტალებზე განაწილების რიტერიუმები;
4. რაში მდგომარეობს პაულის პრინციპი და ჰუნდის წესი?
5. როგორ მიიღება დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ორბიტალები?

23. ელემენტთა ქიმიური ბმა

ატომების შეერთებით წარმოიქმნება რთული სისტემები. ეს სისტემები შეიძლება იყვნენ შედგენილი გომეო და გეტერო ატომგულებისაგან, მდგრადი ან არამდგრადი სხვადასხვა ფაზურ მდგომარეობაში. მოცემულ პირობებში მრავალატომიანი სისტემა მდგრადია ნიშნავს, რომ არ ხდება თავისთავად დაშლა ცალკეულ ატომებად ან რაიმე ნაწილებად. ეს იმას არ ნიშნავს, რომ მას არ შეუძლია მოახდინოს კვლავ შეერთებები ან რეაქციაში მონაწილეობა. ყოველივე ამას განსაზღვრავს ქიმიური ბმა ორ ან მრავალ ატომებს შორის.

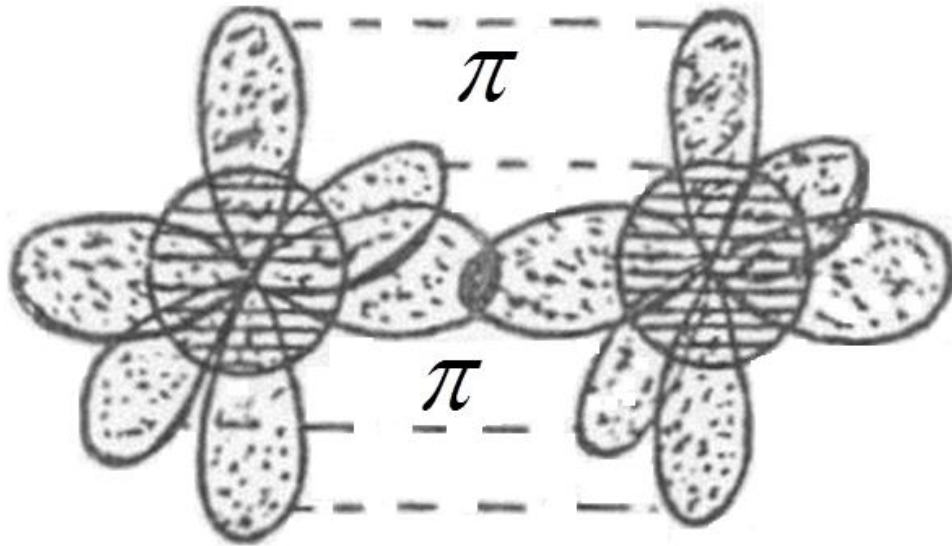
მოლეკულებში ელექტრონები მოძრაობენ ფიქსირებული ატომების ბირთვებს შორის, რომლებიც სივრცულად არიან განლაგებულნი სისტემაში, ანუ გეომეტრიულად არიან მოთავსებულნი ურთიერთ მიმართ. უახლოეს ატომებს შორის ურთიერთქმედება არის სწორედ ქიმიური ბმა. ამიტომ მიღებულია გამოთქმა ატომის ატომთან კავშირზე, მაგალითად, $O-H, N-H$ და ა.შ. გეომეტრიულ მოდელში პირდაპირი მანძილები (ხაზები) ასახავენ ბმის ხაზებს, ანუ ხაზები გამავალი ბირთვებზე. **ბმის სიგრძე** (d) ეს არის მანძილი დამაკავშირებელი ატომების ბირთვებს შორის. ერთი ატომისათვის ორ ბმის კავშირის ხაზებს შორის კუთხეს ეწოდება **სავალენტო კუთხე**. წყლის მოლეკულაში $\angle HOH = 104,5^\circ$. მოლეკულის გეომეტრიულ მოდელში მოცემულია მისი სივრცული მდებარეობა, ე.ი. მოცემულია მოლეკულაში ბმის სიგრძე და სავალენტო კუთხე.

რადგანაც მოლეკულა არის მდგრადი მდგომარეობა, ამიტომ ბმის გაწყვეტისათვის საჭიროა ენერგიის დახარჯვა. მოლეკულის ატომიზაციის ენერგია ეს არის D ენერგია, რომელიც საჭიროა მოლეკულის სრული დისოციაციისთვის, თავისუფალ ატომებად დასაშლელად. მაგალითად, წყლისთვის $H_2O_{გაზო} \rightarrow 2H + O$ საჭიროა $D = 928$ კჯ/მოლ. ორივე $O-H$ ბმა ერთნაირია, ამიტომ $O-H$ ბმის ენერგიაა $E_{(O-H)} = \frac{D}{2} = 464$ კჯ/მოლ. ბმის ენერგია ეწოდება მოლეკულის ატომიზაციის ენერგიის იმ ნაწილს, რომელიც მოდის ერთ მოცემულ ბმაზე. მისი განმარტებიდან ჩანს, რომ ყველა ბმის ენერგიის ჯამი არის მოლეკულის ატომიზაციის ენერგია.

ამრიგად, ქიმიური ბმის დროს ხდება ურთიერთქმედება ორ ან რამდენიმე ატომს შორის, რომლებიც ახორციელებენ მდგრად სისტემებს და ახდენენ მაკავშირებელი ატომების ელექტრონული გარსის თავისებურ გადაწყობას.

მარტივი ბმები ხორციელდება ერთი ელექტრონული წყვილით, მაგალითად, H_2, HCl, F_2 ბმები ერთნაირი, მარტივებია. ასეთია σ -ბმა. ამ დროს ის მიმართულია ბირთვის შემაერთებელ სწორ ხაზზე. ასეთი ერთი ბმა წარმოიქმნება მრავალელექტრონიან ბმაშიც. რადგან σ -ბმა ღებულად სიმეტრიულია, ამიტომ შესაძლებელია ატომების თავისუფალი ბრუნვა ამ ღედის გარშემო. ატომებს შორის ერთი σ -ბმის განხორციელება არ ნიშნავს იმას, რომ მათ შორის არ წარმოიქმნას სხვა ბმა. ბმას, რომელიც ხორციელდება ორი და მეტი ელექტრონული წყვილით ახასიათებენ ჯერადობით (რიგით). ჯერადობა შეიძლება იყოს ორჯერადი, სამჯერადი და ა.შ. ჯერადი ბმა შეიცავს ერთ σ -ბმას, π -ბმას.

π ბმა არის ბმა, როცა ბმის ხაზზე გადის ერთი საკვანძო სიბრტყე. მაგალითად, განვიხილოთ სამმაგი ბმა აზოტის მოლეკულაში. $2P$ -ში მოთავსებულ ელექტრონებში ერთ-ერთის გადაფარვისას მიიღება ერთი σ ბმა, დანარჩენი ორი $2P$ -ორბიტალების გადაფარვით ორი π ბმა (ნახ.23.1). π ბმა წარმოიქმნება ბირთვების შემაერთებელი ღერძის ორივე მხარეს.



ნახ.23.1. აზოტის მოლეკულის წარმოქმნის სქემა

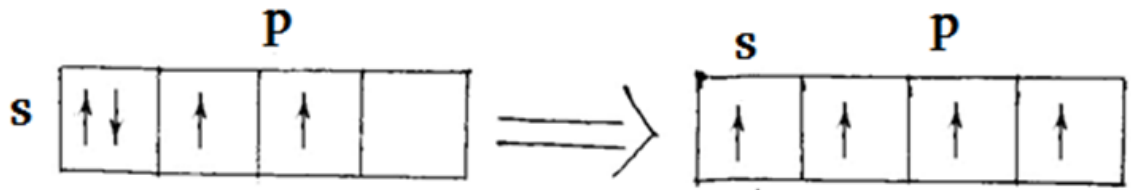
24. ჰომეოპოლარული (კოვალენტური) ბმა

კოვალენტური ბმის დროს ატომების მოლეკულური გაერთიანება ხდება ელექტრონებით, რომლებიც ხდებიან საერთო წყვილები თითოეული ატომისათვის. უარყოფითად დამუხტული ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე არის მაქსიმალური დადებითად დამუხტულ ბირთვებს შორის. კოვალენტური ბმის წარმოქმნა შეიძლება წარმოდგენილ იქნას, როგორც ატომური ორბიტალების, ანუ ელექტრონული ღრუბლების გადაფარვა. აქედან გამომდინარე, კოვალენტური ბმის სიმტკიცე მისი წარმოქმნილი ორბიტალების გადაფარვების ინტენსივობის პროპორციულია.

ბმების საკითხის ანალიზის სრულყოფისათვის საჭიროა ჰიბრიდიზაციის საკითხის განხილვა, რომელიც ერთმანეთისაგან დამოუკიდებლად შეიმუშავეს პოლინგმა, სლეტერმა, მილიკენმა, ჰუნდმა მეთანის გეომეტრიის ასახსნელად.

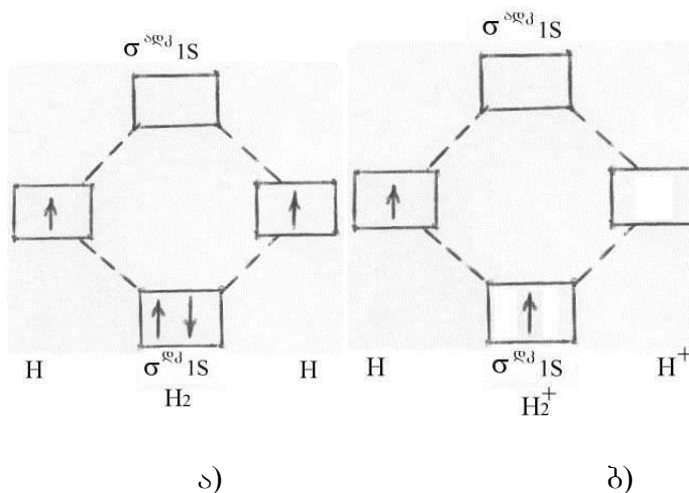
ნახშირბად ატომმა სამი ბმა უნდა წარმოქმნას ერთმანეთის მიმართ მართებული $2P$ -ორბიტალით, ხოლო ერთი ბმა – სფერული $2s$ ორბიტალით. ეს არ ასახავს რეალურად მეთანის გეომეტრიას. ამიტომ მათ დაუშვეს, რომ ბმებს წარმოქმნიან არა „სუფთა“ $2P$ და $2s$ მდგომარეობები, არამედ „შერეული“ მათი გადანაწილების ოთხი ექვივალენტური ჰიბრიდული ორბიტალები. ნახ.24.1-ზე

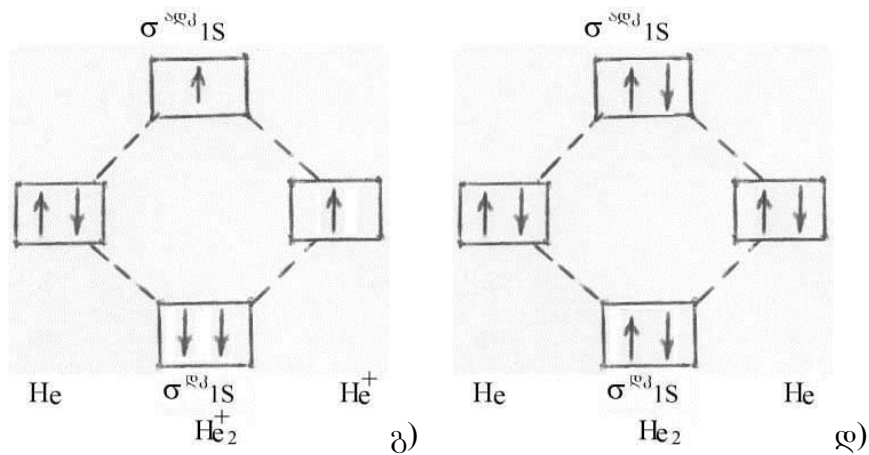
მოცემულია ასეთი SP^3 ჰიბრიდიზაცია. ამ დროს S -ში ერთი ელექტრონი, P -ში – სამი. ასევე ადგილი აქვს SP^2 ჰიბრიდიზაციას, სამი თავისუფალი ბმით, ერთი S -ში, 2 - P -ში. SP ჰიბრიდიზაციისას S -დან გადადის 1 P -ში.



ნახ.24.1. SP^3 ჰიბრიდიზაციის სქემა

მოლეკულური ორბიტალების ერთობლიობა განსაზღვრავს მოლეკულის ელექტრონულ კონფიგურაციას. ის იგება იმ პრინციპით, რა პრინციპითაც მრავალელექტრონიანი ატომის ელექტრონული კონფიგურაცია (ენერგიის მინიმუმის, პაულის პრინციპი და ჰუნდის წესი). თუ გვაქვს რამდენიმე ატომისაგან შემდგარი მოლეკულა და ცნობილია ატომის ტალღური ფუნქციები, მაშინ მოლეკულის ტალღური ფუნქცია არის მასში შემავალი ატომების ტალღური ფუნქციების წრფივი კომბინაცია. წრფივი კომბინაციებით მიიღება ისე, როგორც ბმები σ, π ორბიტალები. $1s$ ატომის ორბიტალიდან ელექტრონის გადასვლას მოლეკულის დამაკავშირებელ ორბიტალზე, რის შედეგად მიიღება ბმა, თან სდევს ენერგიის გამოყოფა, ხოლო მოლეკულის ანტიდამაკავშირებელ ორბიტალზე – ენერგიის ხარჯვა. შესაბამისად, $\sigma_{\text{დამაკავშირებელი}}^{1s}$ $1s$ -ზე ელექტრონის ენერგია უფრო დაბალია, ვიდრე $\sigma_{\text{ანტიდამაკავშირებელი}}^{1s}$ $1s$ -ზე, რაც მოცემულია ნახ.24.2-ზე.

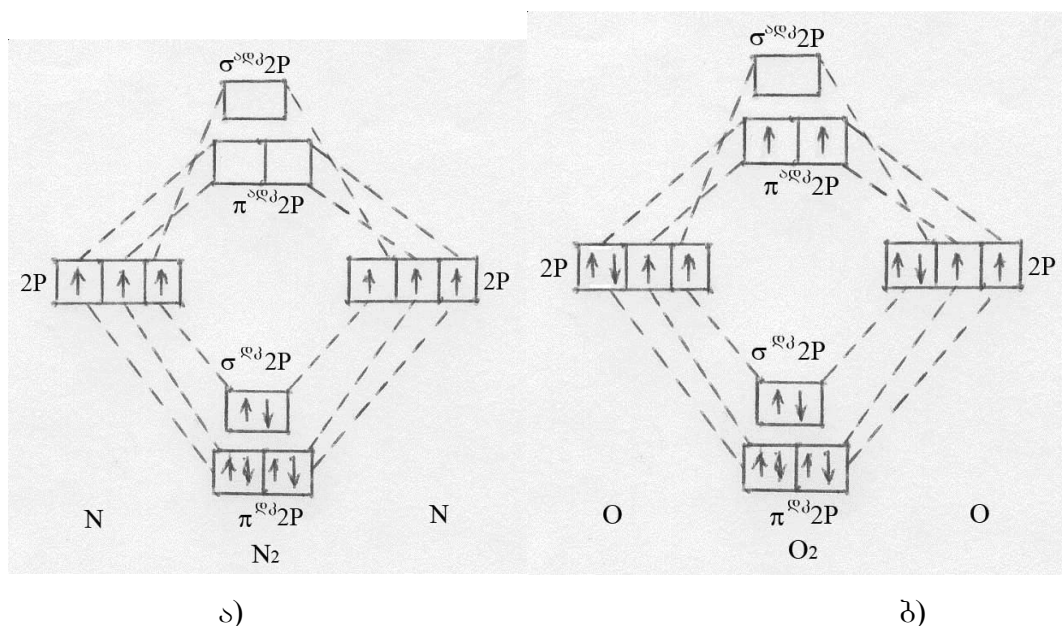




ნახ.24.2. ჰომეოატომებისაგან შედგენილი მოლეკულური ორბიტალების ენერგეტიკული დიაგრამა.

ბმის სიმეტრიცეს განსაზღვრავს ენერგიების სხვაობა დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ ორბიტალებს შორის, რომლებიც არიან დამოკიდებული მათზე მყოფი ელექტრონების რიცხვითა სხვაობაზე (ჯერადობაზე). მაგალითად, H_2 -ში ერთჯერადი ბმაა. თუ 6 დამაკავშირებელშია და 2 ანტიდამაკავშირებელში, მაშინ სხვაობა 4-ია. ამ მიზეზით He_2 -ში არის ნული ჯერადობის ბმა და ეს მოლეკულა არ იქნება მდგრადი, რაც მართლაც ბუნებაში არ არსებობს.

აზოტისა და ოქსიგენისათვის გარე შრეზეა $2S^2 2P^3$ და $2S^2 2P^4$ შესაბამისად. ბმაში მონაწილეობენ $2P$ -ელექტრონები, რადგან $1S$ და $2S$ -ელექტრონები მოქმედება ძალიან მცირეა. მყარდება ერთი σ და 2π - ბმა შესაბამის (ნახ.24.3.)



ნახ.24.3. ჟანგბადის (ა) და აზოტის (ბ) ატომებისაგან შედგენილი მოლეკულური ორბიტალების ენერგეტიკული დიაგრამა.

ელექტრონული კონფიგურაციით.

აზოტის მოლეკულაში არის 6 ელექტრონი დამაკავშირებელ ორბიტაზე და ნული ანტიდამაკავშირებელზე და სხვაობაა 6, ხოლო ჟანგბადის მოლეკულაში 6 ელექტრონია დამაკავშირებელზე და 2 გაუწყვილებელი ანტიდამაკავშირებელზე და სხვაობაა 4, ამიტომ ბმა აზოტის მოლეკულაში მეტი უნდა იყოს, ვიდრე ჟანგბადის მოლეკულაში. მართლაც N_2 -ის დისოციაციის ენერგია 943 კჯ/მოლ, ხოლო O_2 -სა 494 კჯ/მოლ. O_2 -დან ერთი ელექტრონის წასვლამ ანტიდამაკავშირებელი ორბიტიდან უნდა გაზარდოს ბმის სიმტკიცე, მართლაც O_2^+ -თვის ანტიდამაკავშირებელში არის ერთი ელექტრონი და დისოციაციის ენერგია გახდა 642 კჯ/მოლ. ამრიგად, ანტიდამაკავშირებელ ორბიტაზე ელექტრონის არსებობა ასუსტებს ბმას.

25. ჰეტეროპოლარული (იონური) ბმა

ქიმიურ ბმაში შეიძლება მონაწილეობდნენ ორი ერთნაირი ატომი, რომლებიც არიან იდენტურნი. ამ დროს ყოველი ატომის გარსის მუხტი იქნება სიმეტრიული. ასეთი ბმა არის არაპოლარული. როცა ბმა შედგენილია სხვადასხვა ატომებისაგან, მაშინ ელექტრული ღრუბელი გადაწეულია ერთ-ერთი ატომის მხრისკენ და იქმნება დიპოლი, $\mu = lq$, სადაც l ცენტრიდან გადაწევის მანძილია. ასეთი ბმა არის პოლარული. ორ მაკავშირებელ ატომისათვის ელექტრული ღრუბლის თავის მხარეს გადაწევას ახასიათებენ სიდიდით, რომელსაც ეწოდება **ელექტროუარყოფითობა**. ატომის ელექტროუარყოფითობა A არის მისი იონიზაციის ენერგიისა და სწრაფვა ელექტრონებისადმის საშუალო არითმეტიკული:

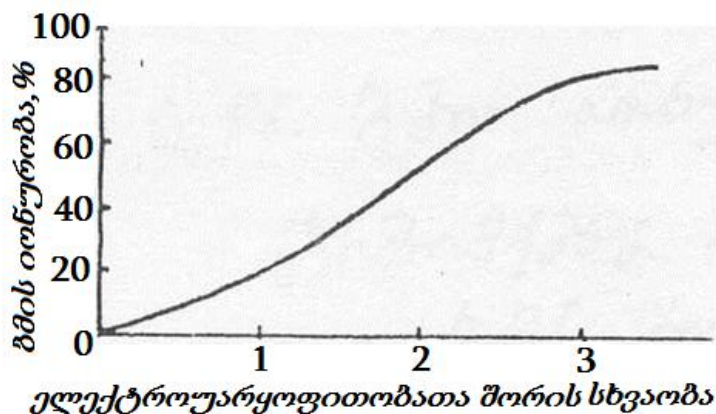
$$A = \frac{1}{2}(I_i + F) \quad (25.1)$$

რაც მეტია A , მით ძნელია მოაცილო ატომს ელექტრონი და მით მეტი ენერგია გამოიყოფა მისი შეერთებისას. მაგალითად, წყალბადისათვის $A_{H_2} = 14.3$ ევ., ხოლო ქლორისთვის $A_{Cl} = 16.7$ ევ. და ცხადია HCl -ში ქლორი თავისკენ მიიზიდავს მეტ ელექტრონს.

იონური ბმის დროს არ ხდება ერთი ატომიდან მეორეზე ელექტრონების სრული გადაცემა, არამედ დაიშვირება ელექტრონული ღრუბლის წანაცვლება უფრო მეტი ელექტროუარყოფითობის მქონე ატომისაკენ.

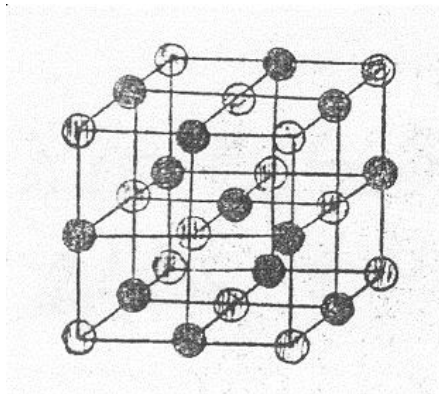
უმეტესად იონური ბმა მყარდება ისეთ ატომებს შორის, რომელთა ელექტროუარყოფითობა დიდად არის განსხვავებული. ელექტროუარყოფითობის ცხრილი: Li – 1.0; Be – 1.5; C – 2.5; N – 3.0; O – 3.5; F – 4.0; Na – 0.9; Al – 1.5; Si – 1.8; Cl – 3; Ka – 0.8; Ga – 1.6; Ge – 1.8; As – 2.0; Br – 2.8; Cs – 0.7; I – 2.5; და ა.შ. ნახ.2.10-ის მიხედვით ნათლადაა წარმოდგენილი ბმის იონურობა მისი წარმომქმნელი ელემენტების ელექტროუარყოფითობის სხვაობის მიმართ. მაგალითად $\chi_{Cl} - \chi_{Na} = 2.1$ და ბმა $\approx 60\%$ -ით იონურია.

იონმა შეიძლება მიიზიდოს იონი საწინააღმდეგო მუხტით და ნებისმიერი მიმართულებით. ერთნიშნაანი იონები ლაგდებიან რაც შეიძლება შორს ერთმანეთისგან. იონური ნაერთები ქმნიან კრისტალურ მესერს, სადაც სიმეტრიის სიბრტყეთა გადაკვეთის კვანძებში განლაგებულია კათიონები და ანიონები.



ნახ.25.1. ბმის იონურობის კავშირი მის წარმომქმნელ ატომთა ელექტროუარყოფითობებს შორის სხვაობასთან.

ნახ.25.2-დან ჩანს თითოეული კათიონის (Na^+) ირგვლივ განლაგებულია ექვსი ანიონი (Cl^-) და პირიქით.



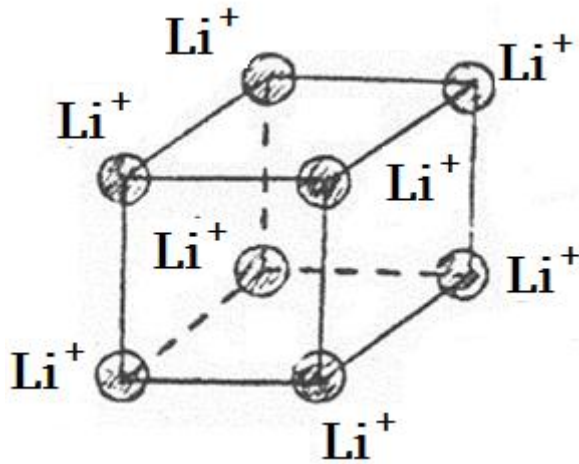
ნახ.25.2. ნატრიუმის ქლორის კრისტალური მესერის სქემა.

• - Na^+ , o - Cl^- .

26. მეტალური ბმა

მეტალური თვისებები გააჩნია ზოგიერთ ნივთიერებას, რომელიც არის კონდენსირებული. ყველა ნივთიერება, რომელიც კონდენსირებულია მეტალურ მდგომარეობაში არაა მეტალი. მეტალის თვისებას განსაზღვრავს მეტალური ბმა. მეტალის კრისტალურ მესერში (კვანძებში) განლაგებულია მეტალის კათიონები, ხოლო მათ შორის მოძრაობს თავისუფალი ელექტრონები – ე.წ. ელექტრონული გაზი. კვანძთა შორის იონებისა და ელექტრონების მიზიდვით განპირობებულია მეტალის მთლიანობა, სიმტკიცე.

მეტალური ბმის სპეციფიკა ისაა, რომ კრისტალის ყველა ატომი მონაწილეობს ელექტრონების გაერთიანებაში და გაერთიანებული ელექტრონები თავისი ატომების გარშემო არ ლოკალიზირდებიან, არამედ თავისუფლად გადაადგილდებიან მთელი მესერის შიგნით, რითაც ქმნიან „ელექტრონულ გაზს“. რადგანაც არ აქვთ ლოკალური ბმები. მეტალური კრისტალები (იონურისგან განსხვავებით) არ ირღვევიან ატომების მდებარეობის შეცვლისას, ე.ი. მათი თვისებაა პლასტიკურობა დეფორმაციისას. თავისუფალი ელექტრონების არსებობის გამო მეტალები ხასიათდებიან დიდი ელექტრო და სითოგამტარობით. მაგალითად, განვიხილოთ პერიოდული სისტემის პირველი მეტალი – ლითიუმის კრისტალური მესერის აგებულება (ნახ.26.1).



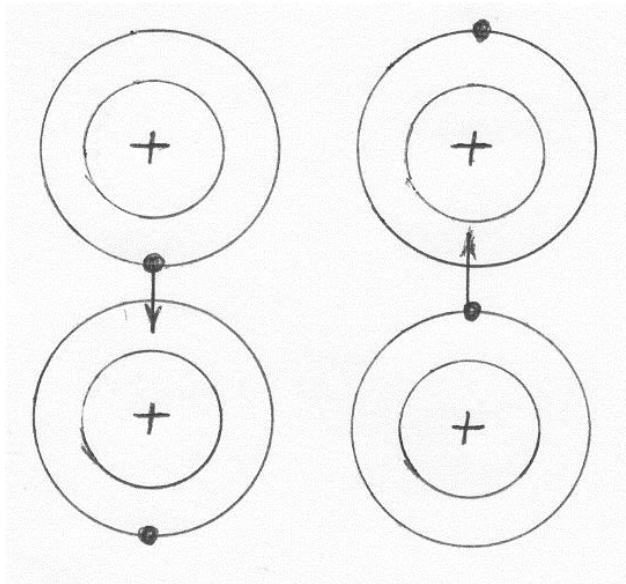
ნახ.26.1. ლითიუმის კრისტალური მესერის სქემა.

მეტალურ კრისტალურ მესერში მეტალის კათიონებს შორის თავისუფალი ელექტრონების საშუალებით დამყარებულ ქიმიურ კავშირს მეტალური ბმა ეწოდება.

27. მოლეკულური (ვან-დერ-ვაალსის) ბმა

მოლეკულური (ვან-დერ-ვაალსის) ბმა დაიზიარება რიგ ნივთიერებებისათვის, მოლეკულებს შორის, რომელთა შიგა მოლეკულური ბმა კოვალენტურია. მოლეკულათა შორის მიზიდვა არსებობს, როცა სავალენტო ელექტრონები ისეთ მდებარეობაში არიან ურთიერთ (კერძოდ უფრო მაქსიმალურად შორს), რომ ელექტრონების მიზიდვა ბირთვებით მეტია, ვიდრე ელექტრონების განზიდვა სხვადასხვა ატომიდან. დროის ნებისმიერ მომენტში ელექტრონი ურთიერთ უფრო არიან შორს და მაქსიმალურად ახლოს არიან ბირთვთან. ეს ძალები ელექტრული ხასიათისაა და მოქმედებენ, როგორც დიპოლის მიზიდვის ძალები. ხდება ორიენტაციული მოქმედება (დიპოლი-დიპოლი) პოლარულ მოლეკულებს შორის.

პოლარული მოლეკულების დიპოლები ისე ორიენტირდებიან, რომ საწინააღმდეგო ნიშნის პოლუსები იზიდავენ ერთმანეთს, პოლარული და არაპოლარული მოლეკულების შემთხვევაში არაპოლარულში ინდუცირდება დიპოლი და მოქმედებაა დიპოლი – ინდუცირებული დიპოლი (ნახ.27.1).



ნახ.27.1. მოლეკულური ბმის შექმნის სქემა.

ყველა შემთხვევაში ხდება დისპერსიული მოქმედება, ანუ მოქმედება სწრაფად შექმნილ და სწრაფადვე გამქრალ დიპოლებზე. ასეთი დიპოლების სინქრონული გაჩენა და გაქრობა ხდება მათ შორის მიზიდვა. ეს ბმა აღიძვრება თითქმის ყოველი ნაწილაკისათვის, მაგრამ ის ძალიან სუსტია, რამდენიმე რიგით ნაკლებია კოვალენტურ და იონურ ბმაზე. მოლეკულური ბმა, რადგანაც ორიენტირებულია, ძალიან არის დამოკიდებული ტემპერატურაზე, ამიტომ მოლეკულური კრისტალები ხასითდებიან მცირე დნობის ტემპერატურით. მაგალითად, სანთლის (პარაფინის) დნობის ტემპერატურაა $50 \pm 52^{\circ}\text{C}$.

28. წყალბადისებური ბმა

ეს ბმა ხორციელდება ორ დიდ ელექტროუარყოფით ატომს შორის, როცა მათ შორის არის წყალბადი. განვიხილოთ მაგალითზე: $\text{RX} - \text{H} + : \text{YR}' \rightarrow \text{RH} - \text{H} \cdots \text{YR}'$.

წყალბადის ატომი დაკავშირებული დიდ ელექტროუარყოფითობის მქონე X ატომთან მოქმედებს ასევე დიდი ელექტროუარყოფითობის მქონე Y ატომთან, რომელსაც არა აქვს განუყოფელი ელექტროწყვილი. ასეთი წყალბადის ბმის ენერგია (რომელიც საჭიროა მის მოსაწყვეტად) ძალიან მცირეა $8 \pm 40 \text{ კჯ/მოლ}$. წყალბადის ატომი, რომელიც დაკავშირებულია უფრო მეტი ელექტროუარყოფით ატომთან პოლარიზებულია, ანუ დამაკავშირებელი ელექტრონული წყვილი გადაწეულია მეტი ელექტროუარყოფითი ატომისაკენ. ამიტომ წყალბადის ატომის მდგომარეობა უახლოვდება H^+ -ის მდგომარეობას, ე.ი. პროტონს. მას კი არ გააჩნია ელექტრული ღრუბელი და მიიზიდება მეორე ატომის ელექტრული

დრუბელით და ინერგება მასში. სწორედ ასეთი წყალბადისებური ბმა ხორციელდება დიდი ელექტროუარყოფითობის მქონე F, O_2, N_2, Cl, S, C და ა.შ. ელემენტებს შორის. ამ დროს მიიღება წრფივი სტრუქტურა $X-H \cdots Y$. შეიძლება იქნას მიღებული სიმეტრიული ბმა $X-H-X$. ზოგადად, $H-Y$ ბმის გაძლიერება ასუსტებს $X-H$ ბმას. ყინული და წყალი წარმოადგენენ სტრუქტურას, სადაც მოლეკულათა შორისო ბმა არის წყალბადისებური. თუ ნივთიერება თავის გამსხნელთან ქმნის წყალბადისებურ ბმას, მაშინ გამსხნელობა იზრდება.

საკონტროლო კითხვები:

1. რა პარამეტრებით ხასიათდება ქიმიური ბმა?
2. როგორი სახის ბმებია π - და σ - ბმები?
3. რა არის ჰიბრიდიზაცია?
4. როგორია კოვალენტური ბმა?
5. ახსენით CO_2 მოლეკულაში ბმის პოლარობა;
6. რა არის ელექტროუარყოფითობა და როგორია იონური ბმა?
7. რატომაა აზოტის მოლეკულის იონიზაციის ენერგია (15,8 ევ) აზოტის ატომის იონიზაციის ენერგიაზე (14,5 ევ) მეტი, ხოლო ჟანგბადის მოლეკულისა და ატომისათვის – შებრუნებით?
8. რატომაა, რომ CO -ს მოლეკულიდან ელექტრონის ართმევა ასუსტებს ბმას, ხოლო NO -დან – პირიქით, აძლიერებს;
9. მოკლედ აღწერეთ ქიმიური ბმის სახეები, მათი მსგავსებები და განსხვავებები.

თავი 3.

29. ნანოსტრუქტურებში შინაგანი და გარეგანი ზედაპირების როლი

ნანონაწილაკებში მოცულობასთან შედარებით, ატომების უმეტესი წილი, მოდის ზედაპირზე. ცხადია, რომ სხეულის ზედაპირისწინა თხელ არეში ($\sim 16\text{მ}$) ატომების წილი, ანუ ხვედრითი ზედაპირი α იზრდება ნივთიერების შემადგენელი ნაწილაკების R ზომის შემცირებასთან ერთად, რადგანაც $\alpha = S/\rho V = R^2/\rho R^3 = 1/\rho R$,

სადაც S ნაწილაკის ზედაპირი, ρ – სიმკვრივე, ხოლო R – მისი ხაზოვანი ზომაა. ხვედრითი ზედაპირის სიდიდის განზომილებაა $\text{მ}^2/\text{გ}$. d წიბოს მქონე კუბის ზედაპირის ფართობია $6d^2$ და მოცულობა d^3 , მაშინ ხვედრითი ზედაპირი $\alpha=S/V=6/d$. d დიამეტრის სფეროს ზედაპირის ფართობია πd^2 და მოცულობა – $\pi d^3/6$, რაც იძლევა $\alpha=S/V=6/d$. ცილინდრს d დიამეტრით და L სიგრძით აქვს მოცულობა $V=\pi d^2 L/4$. ზღვარში, როცა $L \ll d$ არის დისკო, რომლის ორივე მხრის ფართობის ჯამია $S=\pi d^2/2$, რაც იძლევა $\alpha=S/V=2/d$. ანალოგიურად, გრძელი ცილინდრის, ანუ d დიამეტრის მავთულის შემთხვევაში $L \gg d$, ფართობი $S=\pi dL$ და ხვედრითი ზედაპირი $\alpha=S/V=4/d$. ასე, რომ ერთიდაიგივე ρ სიმკვრივის ნივთიერების სხვადასხვა ფორმისათვის ხვედრითი ზედაპირი სხვადასხვაა, კერძოდ, კუბისათვის – $\alpha=S/\rho V=6 \cdot 10^3/\rho d$; სფეროსათვის – $\alpha=S/\rho V=6 \cdot 10^3/\rho d$; თხელი ფირფიტისათვის – $\alpha=S/\rho V=2 \cdot 10^3/\rho d$ და მავთულისათვის – $\alpha=S/\rho V=4 \cdot 10^3/\rho d$, სადაც d იზომება ნმ-ში, ხოლო ρ – გ/სმ³. ნახევარგამტართა სიმკვრივე ძირითადად ძვეს ინტერვალში $2 \div 8$ გ/სმ³, კერძოდ CaAs –თვის $\rho=5,32$ გ/სმ³. შესაბამიად, მისთვის ხვედრითი ზედაპირები იქნება:

ცხრილი 29.1

ზედაპირების როლი სხვადასხვა ზომის სხეულებისთვის:

ზომა, ნმ	კუბი	სფერო	მილაკი	ფირფიტა
4	349	282	187	94
40	36	29	19	10
100	13	11	8	4
200	7	6	4	2

ცხრილიდან ჩანს, რომ ხვედრითი ზედაპირების მნიშვნელობა დამოკიდებულია ნანონაწილაკის ზომაზე და ფორმაზე. სფეროს ხვედრითი ზედაპირი მეტია, ვიდრე მავთულის და ფირფიტის, რადგან სფეროს მათ შორის უკავია მინიმალური მოცულობა. გავანალიზოთ კუბის და სფეროს ხვედრითი ზედაპირების შემთხვევა და დაუშვათ, რომ R რადიუსიანი სფეროს მოცულობა ისეთივეა, როგორც a წიბოს მქონე კუბისა, მაშინ $4/3 \cdot \pi R^3 = a^3$ და $a = (4\pi/3)^{1/3} R$, რაც იძლევა, რომ ერთიდაიგივე მოცულობისას $\alpha_{\text{კუბ.}} = 1,24 \alpha_{\text{სფერ.}}$. ამიტომ ერთიდაიგივე მოცულობისას კუბს აქვს 24% -ით მეტი ხვედრითი ზედაპირი, ვიდრე სფეროს. თუ ტოლი აქვთ ზედაპირები, მაშინ $\pi d^2 = 6a^2$, საიდანაც $d=1,4a$. R რადიუსიანი სფეროსა და R რადიუსიან და L სიგრძის ცილინდრს შორის $4\pi R^3/3 = \pi R^2 L$ და ვღებულობთ: $L=1,3R$. ტოლი

ხვედრითი ზედაპირებისას ცილინდრის სიგრძე 30%-ით მეტი უნდა იყოს სფეროს დიამეტრზე.

ხვედრითი ზედაპირის გაზრდა, გარდა ნაწილაკის ზომის შემცირებისა, შესაძლებელია სიმკვრივის შემცირებით, ანუ ფორიანობის გაზრდით. ეს შესაძლებელია მოცულობით მასალაში წვრილი სიცარიელების შექმნით. ზოგიერთი მასალა, მაგალითად ცეოლიტი, მათი მიღების პროცესში, სხვადასხვა გარე ფაქტორების მოქმედებისას, ფორმირდება მარცვლების სახით, შიგა სიცარიელებით (ფორებით). ეს ფორები ხშირად არიან ნმ-ული ზომის და გამოდიან ზედაპირზე. ამ შემთხვევაში ნანონაწილაკის გარე ზედაპირს ემატება შიგაც და ზედაპირის საერთო ფართი იზრდება.

ზოგადად, კატალიზისათვის საჭიროა საფენი ზედაპირის დიდი ფართობით. თუ ეს საფენი ფოროვანია, მაშინ კატალიზატორის მოლეკულები ეკვრიან საფენის ზედაპირს და იწვევენ ქიმიურ რეაქციაში კატალიზურ ეფექტს. რაც მეტია ფორი, მით მეტი ზედაპირია და პროცესიც უფრო ეფექტურია. ცნობილია აგრეთვე, რომ ზედაპირზე დისოცირებული ატომების თვისებები განსხვავდება მოცულობითი ატომების თვისებებისაგან, რადგან ზედაპირული ატომები უშუალოდ უკავშირდებიან გარშემო მყოფ ატმოსფეროს ატომებს, ვიდრე მოცულობითი. გარდა ამისა, ზედაპირზე ატომების გაუჯერებელი ბმების გამო შეიძლება მოხდეს მათი სხვანაირი რეკონსტრუქცია და განლაგება, ამიტომ შესაძლებელია ზედაპირზე დაჯდნენ გარშემო ატმოსფეროში მყოფი ატომები ან მოლეკულები და შეიქმნას ზედაპირული „ჟანგის“ ფენა. ამრიგად, თვისობრივად ყოველთვის განირჩევა ზედაპირულსწინა უბანი და მოცულობა ერთმანეთისგან. ყოველივე ეს ერთად ქმნის საფუძველს, რომ ზედაპირისწინა უბანი განვიხილოთ, როგორც ნივთიერების ახალი მდგომარეობა და რასაც შეისწავლის საგანი „ზედაპირების ფიზიკა“.

განვიხილოთ მარტივი შემთხვევა ერთკომპონენტიანი ნაწილაკის ორთქლიდან კონდენსაციისას და ხსნარიდან კრისტალიზაციისას. ამ შემთხვევაში ახალი ფაზის ნაწილაკები გამოყოფილი იქნებიან ძირითადი ფაზიდან, ხასიათდებიან განსაზღვრული ზედაპირული ენერგიით და აქვთ სფერული ფორმა.

ნივთიერების კრისტალური მდგომარეობა უფრო მდგრადია, ვიდრე ამორფული, ამიტომ ყველა ამორფული მდგომარეობა მიისწრაფვის კრისტალიზაციისკენ. ამ პროცესის მიმდინარეობის კანოკზომიერება დამოკიდებულია გარემოს ფიზიკო-ქიმიურ თვისებებზე, სადაც ეს პროცესები მიმდინარეობს და გარე ფაქტორებზე, სადაც ეს გარემოა მოთავსებული. მაგრამ, ყოველთვის გარემოს მახასიათებელია

– მისი ტემპერატურა. კრისტალური წანაზარდის ჩამოყალიბებას თან სდევს სისტემის ენერჯის შემცირება სიდიდით:

$$\Delta G = 4\pi R^2 \sigma^* - (4\pi R^3 / 3) \Delta g, \quad (29.1)$$

რომელიც არამონოტონურადაა დამოკიდებული წანაზარდის ზომაზე (რადიუსზე), რაც ნაჩვენებია ნახ.29.1-ზე.

წანაზარდის ფორმირებისას ზედაპირის სრულყოფა მოითხოვს ენერჯის მასზე დახარჯვას, რაც იმითაც გამოიხატება, რომ ზედაპირის გაზრდისას იზრდება გაუჯერებელ ბმათა რიცხვი და საბოლოო ჯამში ზედაპირზე ენერჯია იზრდება R^2 -ის პროპორციულად. კრისტალის მოცულობის ფორმირებისას – ენერჯია გამოიყოფა, ენერჯია მცირდება R^3 -ის პროპორციულად, მიიღება ენერჯის მინიმუმი. კლასტერის ჩამოყალიბებისთვის, თავისუფალი ენერჯის ცვლილების მაქსიმუმი იქნება კრიტიკულ რადიუსზე, როდესაც $\frac{\partial \Delta G}{\partial R} = 0$, ანუ:

$$R_c = 2\sigma^* / \Delta g \quad (29.2)$$

კრისტალური კლასტერის ჩამოყალიბებისას R_c -ს რადიუსით მიღებული სისტემა წარმოადგენს სტაბილურს - იქნება მინიმუმი ენერჯია. თუ სისტემა ჩამოყალიბდება R_c -ზე მეტი, ან ნაკლები რადიუსით იქნება არასტაბილური და ტემპერატურის ფლიქტუაციისას ის დაიშლება.

ყურადსაღებია ის, რომ წანაზარდჩამოყალიბების პროცესზე გავლენას ახდენს მინარევების ადსორბცია, რითაც მცირდება გაუჯერებელი ნბის რიცხვი და შესაბამისად მცირდება ზედაპირული ენერჯია. ეს იძლევა საშუალებას ვმართოთ წანაზარდჩამოყალიბების პროცესი.

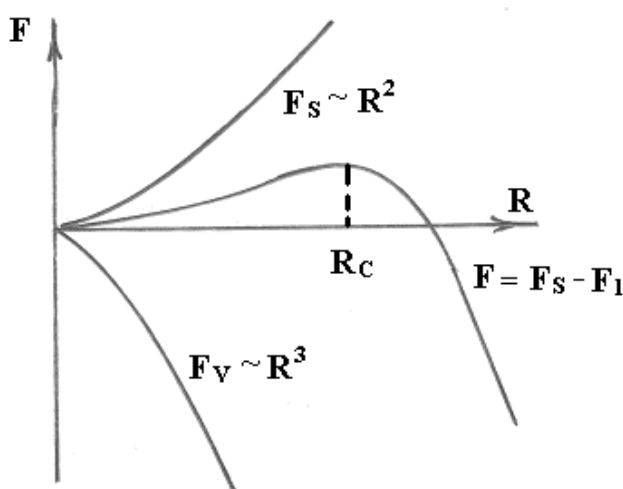
წანაზარდები კრიტიკული R_c -ს რადიუსით ხელსაყრელია სტაბილური კრისტალის შემდგომი ზრდისთვის. კრისტალიტების ზრდის სიჩქარე კრიტიკული წანაზარდების კონცენტრაციის და მათი ზრდის სიჩქარეთა პროპორციულია:

$$v_n \sim \exp[-\Delta G_c / (kT)] \exp[-E_a / (kT)] \quad (29.3)$$

სადაც, ΔG_c - კრიტიკული წანაზარდის შექმნისას სისტემის თავისუფალი ენერჯის ცვლილებაა, k - ბოლცმანის მუდმივა, T -აბსოლუტური ტემპერატურა და E_a - ატომის დიფუზიის ნაწილში აქტივაციის ენერჯია. რადგანაც სიდიდე ΔG_c უკუპროპორციულია T^2 -სა, ამიტომ საბოლოო ჯამში, კრისტალიტების შექმნის სიჩქარე ტემპერატურის მიმართ იქნება დამოკიდებული, როგორც $\exp(-1/T^3)$. ცხადია, რომ ყოველი განსაზღვრული კრისტალური ფაზა ყალიბდება

ტემპერატურის ვიწრო ინტერვალში, რომლის ქვემოთ წანაზარდი არ წარმოიქმნება, ხოლო ზემოთ – შექმნის და დაშლის პროცესები მიმდინარეობენ ისე სწრაფად, რომ წანაზარდის ფორმირებას ადგილი არა აქვს.

კონდენსირებულ მდგომარეობაში ატომის ან მოლეკულის ქიმიური პოტენციალი უფრო მცირეა, ვიდრე გაზში ან ხსნარში და ნაღნობში. ამიტომ ცხადია, რომ გაზში ან ხსნარში და ნაღნობში კრისტალის ზრდისათვის საჭიროა კრისტალიზაციის ცენტრს ჰქონდეს ზომა კრიტიკულ R_c - ზე მეტი. ეს გასაგებია, თუ გავანალიზებთ ახალი ფაზის წანაზარდის მოდელში თავისუფალ ენერჯიაში მოგებას (ნახ.3.1).



ნახ.29.1. თავისუფალი ენერჯიის დამოკიდებულება ახალი ფაზის ზომაზე.

სფერული წაზრდისას თავისუფალი ენერჯია იზრდება, როგორც R^3 , ხოლო ზედაპირულისას – R^2 . ამიტომ მათი სხვაობა იძლევა მრუდს მაქსიმუმით. რეალური ნივთიერებისათვის ეს მაქსიმუმი არის ზომებში 1 – 10 ნმ-ის ფარგლებში, რაც ეთანადება წანაზარდში რამდენიმე ერთეულიდან რამდენიმე ათასეული ატომის არსებობას. ამრიგად, კრისტალიზაციის ცენტრები – არიან მცირეატომიანი კლასტრები ან ნანონაწილაკები. წანაზარდები R_c ზომით არის კრიტიკული, რადგანაც ფაზის ზრდა ხდება მაშინ, როცა $R > R_c$. წანაზარდი, როცა $R < R_c$ იხსნება ან ორთქლდება გარშემო ატმოსფეროში. ეს მოდელი ასახავს მხოლოდ ფაზის ზრდის დასაწყისს. სიტუაცია უფრო რთულდება, როცა ახალი ფაზა ფორმირდება მყარი მატრიცის შიგნით, სადაც აღიძვრება ღრეკადი დაძაბულობები და დამატებითი ენერჯიები.

ნანონაწილაკებში, ნანოკრისტალურ მასალებში, ნანოკომპოზიციებში ფაზური გადასვლებზე დიდ გავლენას ახდენს სტრუქტურული ერთეულის ზომები. კერძოდ,

მაგნიტური მოწესრიგების თავისებურება, ნივთიერების მაგნიტური თვისება მისი გარე მაგნიტურ ველში მოთავსებისას არსებითადაა დამოკიდებული ნაწილაკის ზომაზე, ფენის სისქეზე და სხვა გეომეტრიულ მახასიათებლებზე. ბევრი მეტალების ნანოკლასტერებში და ნანონაწილაკებში ატომების რიცხვის შემცირებისას რამდენიმე ათეულამდე ჰკარგავენ მეტალურ თვისებებს. ამასთანავე, ეს ზრდის სავალენტო ელექტრონების ურთიერთმოქმედებას და ატმოსფეროსთან რეაქციის სიჩქარეს. ამ მიზეზით ცნობილია, რომ მასიური ოქრო არ იჟანგება, ხოლო ოქროს 70-75 ატომი ფეთქებადად უერთდება ჟანგბადს.

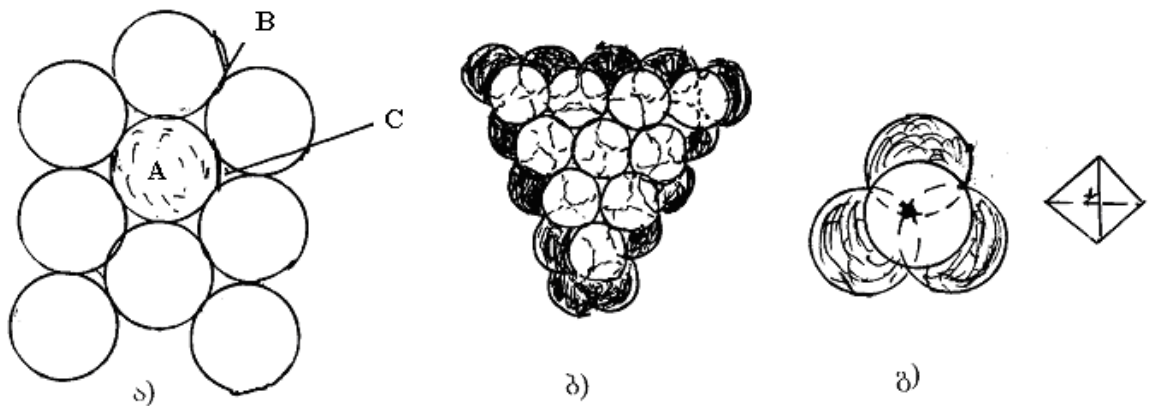
ზომის შემცირების ზედაპირული ეფექტების გავლენას განიცდიან: დისლოკაციები, მიკრონაპრალები, ადგეზია, სტატიკურობა, კაპილარობა და ა.შ.

ცნობილია, რომ უცხო ატომების დიფუზია ზედაპირზე უფრო სწრაფად მიმდინარეობს, ვიდრე მოცულობაში (განსაკუთრებით მაღალ ტემპერატურაზე), რადგან თავისუფალი, გაუწყვილებელი ბმები ბევრია და დიფუზიისათვის ბმის გაწყვეტაზე ენერგია არ იხარჯება. ნანოსტრუქტურის მასალებში მარცვლოვნების გაზრდის გამო შინაგანი საზღვრები დიდია, დიდია საზღვრის ეფექტის ფარდობა მოცულობით ეფექტთან და შესაბამისად, მკვეთრად იზრდება დიფუზიის კოეფიციენტი.

30. ინდივიდუალური ნანონაწილაკები და ნანოსისტემები

ნანონაწილაკები შედგება 10^6 ან უფრო მცირე რაოდენობის ატომებისაგან, ამიტომ მათი თვისებები მკვეთრად განსხვავდება იმ ატომების თვისებებისაგან, რომლებიც ბმაში არიან ნივთიერების მოცულობაში. თვით ნანონაწილაკების ზომები, შედგენილი ბმული ატომებით ან მოლეკულებით, არ აღემატება 100 ნმ-ს. ცალკეული ატომები შეერთებისას ქმნიან კლასტერებს, რომელშიც ატომების რიცხვი და შესაბამისად მისი ზომაც იცვლება. მაგალითად, 1 ნმ-ის რადიუსიანი კლასტერი შეიცავს 25 ატომს, რომელთა უმეტესი ნაწილი ზედაპირზეა. ბევრი მოლეკულა, განსაკუთრებით ბიოლოგიური, შედგება 25 მოლეკულაზე ნაკლები მოლეკულისაგან. მაგალითად, ჰემ-მოლეკულა ($\text{FeC}_{34}\text{H}_{32}\text{O}_4\text{N}_4$), ადამიანის სისხლის ჰემოგლობინის საფუძველი და უჯრედთან ჟანგბადის მიმტანი, შედგება 75 ატომისაგან. მათ შორის არ შეიძლება ზუსტი საზღვრის გავლება. ისინი ლაგდებიან, როგორც ცალკეული ატომების ჯგუფები ან მოცულობითი მასალის ნაწილები. როგორც ვიცით, კრიტიკულ ზომაზე ნაკლები ზომის ნანონაწილაკები

ავლენენ უნიკალურ თვისებებს მოცულობით მასალებთან შედარებით. თუ ნაწილაკის ზომა ნაკლებია რაღაც მასხასიათებელ, კრიტიკულ ზომასთან შედარებით, მაშინ ის ავლენს ახალ ფიზიკურ და ქიმიურ თვისებებს. შეიძლება მივიღოთ, რომ ნანონაწილაკი – ესაა ატომების აგრეგატი, რომელთა ზომებია 1-დან 100 ნმ-მდე განიხილება, როგორც მოცულობითი მასალის ნაწილი, მაგრამ რაღაც მოვლენის შესაბამის სიგრძეზე ნაკლები ზომის. ატომების ეს აგრეგატები, ანუ კლასტერები ხასიათდებიან ატომის ჩაწყობის სხვადასხვა სიმკვრივით. შეიძლება დავუშვათ, რომ ატომები არიან გარკვეული რადიუსის მქონე უკუმშვადი სფეროები. ამის გამო ნივთიერების კრისტალური სტრუქტურა შეიძლება გავიგოთ, თუ წარმოვიდგენთ, რომ ის მიღებულია ასეთი სფეროების მჭიდროდ დაწყობის შედეგად. ეს სფეროები მიიზიდებიან კულონური, ვად-დერ-დ-ვაალსური ან სხვა რომელიმე ძალებით და ამის გამო ცდილობენ მოთავსდნენ ერთმანეთის მიმართ რაც შეიძლება მჭიდროდ, ისე, რომ მათ შორის მანძილს ჰქონდეს მინიმალური მნიშვნელობა, ხოლო თითოეული სფერო გარშემორტყმულ იყოს მეზობელი სფეროების მაქსიმალური შესაძლო რიცხვით. სფეროების ასეთ წყობას, რომელიც ხასიათდება პოტენციალური ენერჯის მინიმუმით, სფეროების უმჭიდროესი წყობა ეწოდება. რაც გამოსახულია ნახ. 30.1 - ზე.



ნახ.30.1. ტოლრადიუსიანი სფეროების წყობა ერთფენად (ა) ორფენად (ბ) და ტეტრაედრულად (გ).

ნახ. 30.1ა-ზე მოცემულია ერთნაირი რადიუსის სფეროების ფენა უმჭიდროესი წყობის დროს. ნახ.30.1 ბ-ზეა, როცა მეორე ფენის სფეროები ივსდებიან პირველი ფენის ჩაღრმავებებში. ნახ.30.1 გ-ზე გამოსახულია, როცა პირველი და მეორე ფენის სფეროების ცენტრები ქმნიან სწორ ტეტრაედრს, რომლის შიგნით მოთავსებულია ტეტრაედრული სიცარიელე. ცხადია, რომ სფეროების უმჭიდროეს წყობას გააჩნია კომპაქტურობის კოეფიციენტის ყველაზე დიდი მნიშვნელობა.

კომპაქტურობის კოეფიციენტი არის ერთ ელემენტალურ უჯრედში შემავალ სფეროების მოცულობის შეფარდება უჯრედის სრულ მოცულობასთან, რომელიც სფეროების მოცულობასთან ერთად შეიცავს მათ შორის არსებულ სიცარიელეთა მოცულობებსაც. ვთქვათ, ელემენტალური უჯრედის მოცულობაა V , მასში მოთავსებულია r რადიუსიანი n სფერო, მაშინ კომპაქტურობის კოეფიციენტი იქნება: $q=4/3\pi r^3 n/V$.

ნებისმიერი უმჭიდროესად ჩაწყობილი სტრუქტურისათვის q ტოლია 0,74, ე. ი. სივრცე ივსება 74%-ით. სიბრტყეზე სფეროების მაქსიმალური ჩალაგება მოცემულია ნახ.30.1ა-ზე. თითოეული სფერო ეხება 6 მეზობელ სფეროს (კოორდინაციული რიცხვია 6) და მის ირგვლივ ქმნის 6 სამკუთხა სიცარიელეს. სამკუთხა სიცარიელე ერთდროულად ეკუთვნის სამ სფეროს და თითოეულ სფეროზე მოდის ამ სიცარიელის 1/3. ცენტრში მყოფ სფეროზე მოსული სიცარიელეთა რიცხვი იქნება $6 \times 1/3 = 2$, ე.ი. ორჯერ მეტია, ვიდრე ფენაში მყოფი სფეროების რიცხვი.

სფეროების უმჭიდროესი სივრცული წყობა მიიღება აღნიშნული ფენების ერთმანეთზე დადების შედეგად, ისე, რომ ყოველი ზედა სფერო ხვდება ქვედა ფენის სფეროთა შორის სიცარიელეში. რადგანაც, სიცარიელეების რიცხვი ორჯერ მეტია სფეროების რიცხვზე, ამიტომ წყობა შეიძლება განხორციელდეს 1) მეორე ფენის სფეროები დაიკავებენ BBB ტიპის ადგილებს, 2) ან დაიკავებენ CCC ტიპის ადგილებს. მეორე ფენისათვის ამას არავითარი პრინციპული მნიშვნელობა არა აქვს. ამ ფენის თითოეული სფერო ეხება ქვედა ფენის სამ სფეროს (ნახ.30.1 ბ) და ზემოდან ხურავს სამკუთხა სიცარიელეს, რომელიც ქვედა ფენის სამი სფეროს მიერაა შექმნილი. ოთხი სფეროს ცენტრების შეერთებით მიიღება სწორი ტეტრაედრი (ნახ.30.1 გ) და წარმოიშობა ტეტრაედრული სიცარაელე. ნახ.30.1 ბ-დან ჩანს, რომ მეორე ფენაში კიდევ არსებობს მეორე გვარის სიცარიელეები, როდესაც ქვედა სიცარიელეს თანხვდება ზედა სიცარიელე. ეს სიცარიელე გარშემორტყმულია 6 სფეროთი, რომლის ცენტრების შეერთებით მიიღება ოქტაედრი. ასეთი სახისაა ოქტაედრული სიცარიელე, რომლებიც გაცილებით დიდი მოცულობისაა, ვიდრე ტეტრაედრული სიცარაელე. დადგენილია, რომ ტეტრაედრული სიცარაელეს შიგნით მოთავსებული სფეროს რადიუსი უნდა შეადგენდეს ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,22, ხოლო ოქტაედრულ სიცარიელეში – 0,41.

მესამე ფენის შევსებისათვის მნიშვნელობა ენიჭება, თუ მესამე ფენის სფეროები დაიკავებენ ABAB, ACAC ან BCBC (ნახ.30.1) მდგომარეობებს. ამ

შემთხვევაში სფეროების წყობა ხასიათდება პრიმიტიული ჰექსაგონალური უჯრედის სიმეტრიით. მეოთხე და შემდეგი ფენის წყობისათვის შეიძლება იყოს უფრო რთული ABCA, BCAC, ACCB და ა.შ.

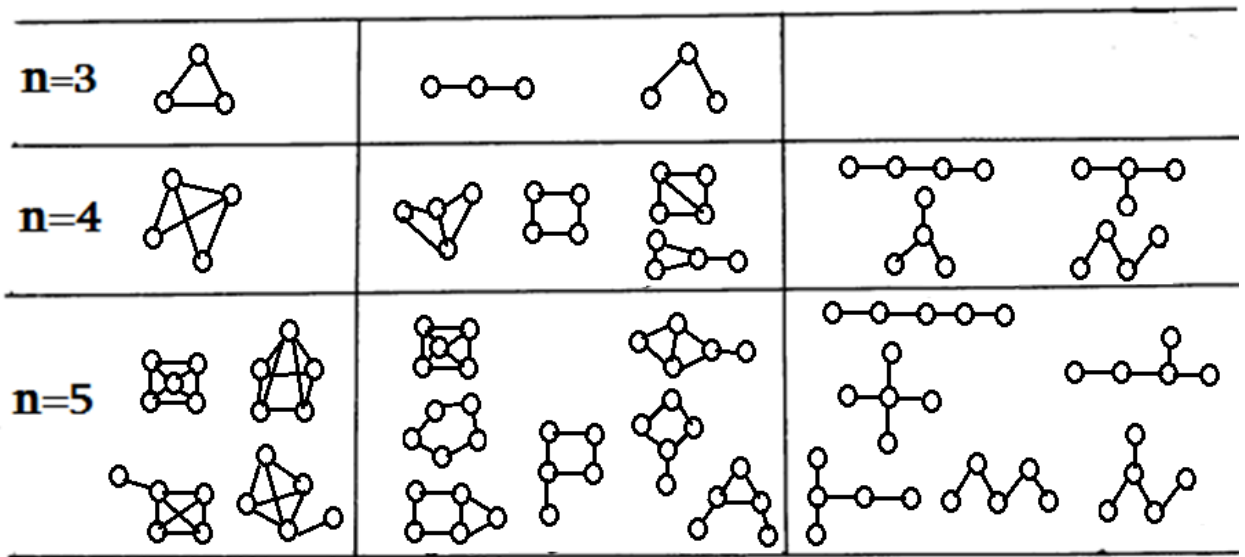
ერთი და იგივე რადიუსის სფეროებისაგან შეიძლება აიგოს მოცულობითად ცენტრირებული კუბური მესერი, რომელიც არაა უმჭიდროესი წყობა და მისი კომპაქტურობის კოეფიციენტია 68%. სფეროს რადიუსი, რომელიც წიბოსა და წახნაგის ცენტრის სიცივლელებში ჩაეტევა არის ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,15 და 0,29. გარდა ამისა, უჯრედში 24 სიცივლელა კოორდინაციული რიცხვით 3 (ტრიედრული სიცივლელე) და სხვა.

31. ნანონაწილაკის გეომეტრიულ სტრუქტურას

ატომების კომპაქტურად ჩაწყობის თავისებურებების შემდეგ ადვილად გავარჩევთ. მისი კრისტალური სტრუქტურა ისეთივეა, როგორც შესაბამისი მოცულობითი მასალის კრისტალური სტრუქტურა, მხოლოდ მესერის პარამეტრის რამდენადმე განსხვავებით. 80 ნმ ზომის ალუმინის ნაწილაკის რენტგენულმა დიფრაქციამ აჩვენა მისი ბაზოცენტრირებული სახის ელემენტარული უჯრედი, ისეთივე, როგორც მოცულობითი მასალის. კომპაქტური წყობის პრინციპით, 13 ატომისაგან შემდგარ ალუმინის კლასტერს, უნდა ჰქონდეს ისეთივე ბაზოცენტრირებული სახის ელემენტარული უჯრედი, როგორც 80 ნმ ზომის ნაწილაკს. მაგრამ, ფუნქციონალური სიმკვრივის მეთოდით მოლეკულური ორბიტალების გამოთვლამ აჩვენა, რომ მინიმალური ენერგია აქვს იკოსაედრულ წყობის ფორმას, რომელიც ჯერ ექსპერიმენტზე არ დამტკიცდა. ზოგჯერ ნანონაწილაკს, რომლის ზომა < 5 ნმ აქვს სხვაგვარი სტრუქტურა, ვიდრე მის მოცულობით მასალას. მაგალითად, ოქროს ნაწილაკებს, ზომით 3 – 5 ნმ აქვთ იკოსაედრული სტრუქტურა, როცა მოცულობითი ოქრო კრისტალიზდება ბაზოცენტრირებულ მესრად. მცირე ნანონაწილაკის სტრუქტურის ექსპერიმენტული განსაზღვრა ძალიან რთულია და მონაცემებიც მწირია. მაგრამ, მაინც დადგინდა, რომ ინდიუმის კლასტერის სტრუქტურა განიცდის ცვლილებას 5,5 ნმ ზომის შემცირების შემდეგ. 6,5 ნმ-ის ზევით, რაც ეთანადება დაახლოებით 6000 ატომს, კლასტერს აქვს ტეტრაგონალური ბაზოცენტრირებული სტრუქტურა, ფარდობით c/a ტოლი 1,075. 6,5 ნმ-ის ქვევით ფარდობა c/a მცირდება და 5 ნმ-სას ხდება 1-ის ტოლი, ე. ი. ხდება კუბური.

გეომეტრიული აგებულების მიხედვით კლასტერი შეიძლება იყოს სხვადასხვა ფორმის: ჯაჭვი, ციკლი, პირამიდა, პოლიედრი და ა. შ. ნახ.31.1-ზე მოცემულია

კლასტერის გეომეტრიული აგებულების ფორმა 3; 4 და 5 ატომის შემთხვევაში. უფრო მეტი ატომების კლასტერისათვის ფორმა უფრო რთულდება.



ნახ.31.1. კლასტერის გეომეტრიული აგებულების ფორმები.

უნდა აღინიშნოს, რომ იზოლირებული ნანონაწილაკის სტრუქტურა განსხვავდება სტაბილიზირებულ ლიგანდ-სტრუქტურისაგან. ლიგანდ-სტაბილიზაცია მიიღება მაშინ, როცა მეტალურ ატომებს ან იონებს მიუერთდება არამეტალური იონების ჯგუფი. სტრუქტურის შეცვლა აისახება ნანონაწილაკის მრავალ თვისებაზე.

Al_{13} –ში ერთ ატომზე მოსული ბმის ენერგია უფრო მცირეა, ვიდრე მოცულობაში. Al_{13} – ის კლასტერს ზედაპირზე აქვს ერთი გაუწყვილებელი ელექტრონი. ერთი ელექტრონის დამატება ავსებს გარსს, რაც ზრდის $Al_{13}(-)$ იონის ბმის ენერგიას. მაგრამ, მაინც ნაკლებია, ვიდრე მოცულობაში.

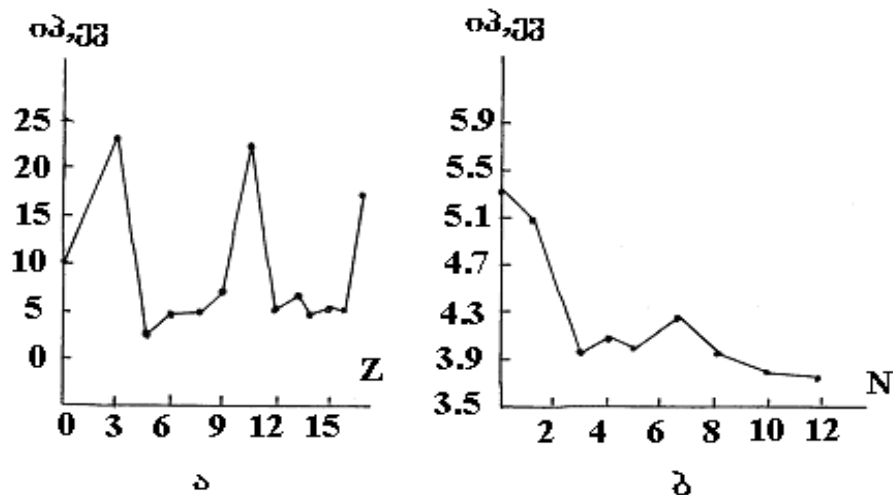
ნანონაწილაკებს განვიხილავთ, როგორც ინდივიდუალურს, იზოლირებულს, მაგრამ ეს ყოველთვის ასე არაა. ზოგიერთი ნანონაწილაკი, მაგალითად, ალუმინი, გამოირჩევა დიდი რეაქციული აქტივობით. ინდივიდუალური ალუმინის ნაწილაკი ჰაერზე სწრაფად იფარება ჟანგით. რენტგენულმა ფოტოელექტრულმა სპექტროსკოპიამ აჩვენა, რომ 80 ნმ ზომის კლასტერისას, ალუმინის ჟანგის სისქე 3 – 5 ნმ-ია. ამიტომ, ხშირად სუფთა ნანონაწილაკის მიღებისთანავე მათ ფარავენ ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებით (ზან), ანუ აკეთებენ პასივაციას. მაგალითად, ოქროს ნანონაწილაკს ფარავენ გოგირდ-წყალბადის ორგანული

ნაერთით და იქმნება S-Au – ის ძლიერი ბმა, რომელიც ხასიათდება მოლეკულური სიმეტრიით და ოქროს იცავს გარე ფაქტორების მოქმედებისაგან.

32. მაგიური რიცხვი.

მას-სპექტროსკოპიის მეთოდით შესაძლებელია გაიზომოს მასალის შემადგენელ ნაწილაკთა რაოდენობის დამოკიდებულება ნივთიერების მასის მუხტთან ფარდობაზე $[N=f(m/e)]$. ტყვიის კლასტერზე ჩატარებულმა მას-სპექტრომეტრიულმა ექსპერიმენტმა აჩვენა, რომ 7 და 10 ატომებისაგან შემდგარი კლასტერები უფრო ალბათური არიან, ანუ უფრო სტაბილური არიან, ვიდრე სხვა ატომებისაგან შემდგარი კლასტერები.

ნახ.32.1ა-ზე მოცემულია ატომების იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება მათ ატომურ Z ნომერზე, რომელიც ატომში პროტონების რიცხვის ტოლია. იონიზაციის პოტენციალი – ესაა ენერგია, რომელიც საჭიროა ნეიტრალური ატომისათვის გარე შრედან ერთი ელექტრონის მოსაცილებლად. იონიზაციის



ნახ.32.1. იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება ატომურ ნომერზე (ა) და Na- ის კლასტერში ატომების რიცხვზე (ბ).

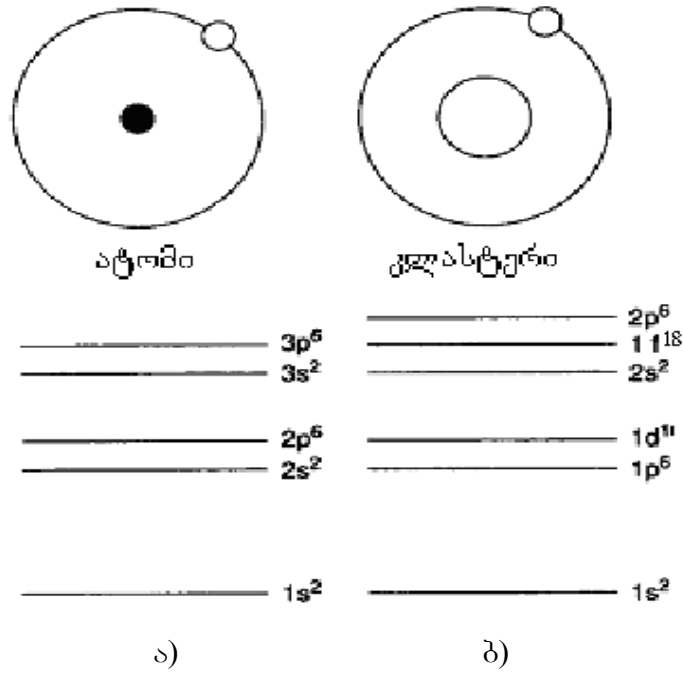
პოტენციალის მაქსიმალური მნიშვნელობები აქვთ ნეიტრალური გაზის ატომებს He, Ne, Ar და ა. შ., რადგანაც მათ აქვთ შევსებული გარე s და p ორბიტალები. ყველაზე მცირე აქვთ ტუტემიწათა მეტალებს Na, Ka და ა. შ. მათ აქვთ მხოლოდ ერთი ელექტრონი გარე ორბიტალზე და მის მოსაწყვეტად მცირე ენერგიაა საჭირო. ნახ.32.1 ბ-ზე გამოსახულია ნატრიუმის ატომების კლასტერისათვის იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება მათში არსებული ატომების რიცხვზე. პიკები მიიღება, როცა კლასტერში არის 2 და 8 ატომი. ტყვიისათვის 7

და 10, და ნატრიუმისათვის 2 და 8 არიან მაგიური რიცხვები. ყველა ატომის კლასტერს აქვს განსაზღვრული მაგიური რიცხვი. ესაა ატომების ის რიცხვი, როცა შესაბამისი კლასტერი სტაბილურია. მისი არსებობა იძლევა საშუალებას, კლასტერი განვიხილოთ, როგორც სუპერატომი. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, კლასტერის სტაბილურობას განსაზღვრავს ატომური სტრუქტურა, ამიტომ მაგიურ რიცხვს ხშირად უწოდებენ სტრუქტურულ მაგიურ რიცხვს.

33. ნანონაწილაკის ელექტრული სტრუქტურა.

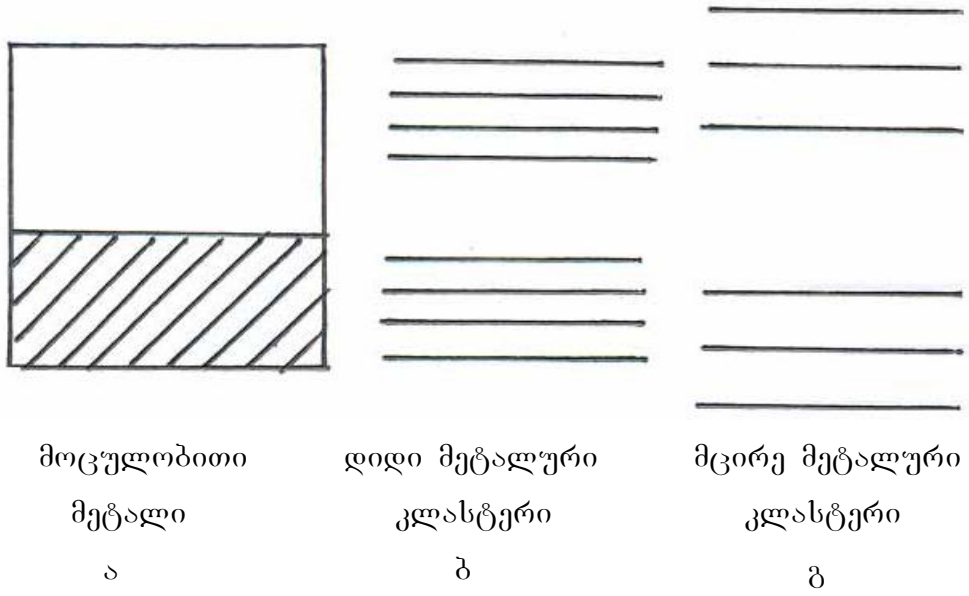
ნანონაწილაკების ელექტრული სტრუქტურის განსაზღვრისათვის საინტერესოა მათი თეორიული მოდელის დადგენა. მიახლოებით შეიძლება ითქვას, რომ ისინი წარმოადგენენ სუპერატომებს და მათთვის მისაღებია „ყელეს მოდელი“. ამ მოდელით კლასტერის თითოეული ატომის ბირთვის დადებითი მუხტი თანაბრადაა განაწილებული კლასტერის ბირთვის ტოლ სფეროს მოცულობაში. კლასტერის ენერგეტიკული დონეები შეიძლება მივიღოთ აღნიშნული სისტემისთვის ტალღური განტოლების ამოხსნით, ისე როგორც ეს ხდებოდა წყალბადის ატომისათვის. ნახ.33.1-ზე გამოსახულია ენერგეტიკული წყალბადის ატომის ენერგეტიკული დონეები და დადებითი მუხტის სფერული სისტემით განაწილების სისტემისათვის. ზედა ინდექსები აღნიშნავენ მოცემული დონეების შევსებისას მათზე ელექტრონების რაოდენობას. სუპერატომში ელექტრონების საერთო რაოდენობას ეთანადება ელექტრონების მაგიური რიცხვი, როცა ზედა ენერგეტიკული დონე მთლიანად შევსებულია. ამ მოდელით მაგიური რიცხვი ეთანადება კლასტერს, როცა მისი ყველა დონე შევსებულია ელექტრონებით.

როდესაც ატომები აკეთებენ მესერის ფორმირებას, მათ რიცხვთა მატებასთან ერთად, მათი დისკრეტული ენერგეტიკული დონეები იხლიჩებიან და გადადიან ენერგეტიკულ ზონებში. მეტალებში ზედა ენერგეტიკული ზონა ნაწილობრივია შევსებული, ხოლო ნახევარგამტარებში ვალენტური ზონა მთლიანად შევსებულია, გამოყოფილია ცარიელი ზონისაგან დრეწოთი. მეტალის ნაწილაკის შემცირებით რამდენიმე ასეულ ატომებამდე, გამტარებლობის ზონაში მდგომარეობათა სიმკვრივე რადიკალურად იცვლება – უწყვეტობა იცვლება წყვეტილ დონეთა ნაკრებით, რომელთა შორის ენერგია შეიძლება სითბურ ენერგიაზე მეტი იყოს, რაც ქმნის დრეწოს. ელექტრული სტრუქტურის ცვლილება მოცულობითი (ა), დიდი (ბ) და მცირე კლასტერის (გ) შემთხვევაში მოცემულია ნახ.33.2-ზე. მოლეკულის მსგავსს მცირე კლასტერს აქვს ენერგეტიკული დონეების



ნახ.33.1. წყალბადის ატომის (ა) და სისტემის (ბ) ენერგეტიკული დონეები.

დისკრეტული ნაკრები, დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ორბიტალებით. ექსპერიმენტზე დადგინდა, რომ კლასტერში ნანონაწილაკთა მცირე რაოდენობა იწვევს იმას, რომ ენერგეტიკული სპექტრი დისკრეტულია, მასზე ელექტრონით შევსების ალბათობაც



ნახ.31.2. ელექტრული სტრუქტურა მოცულობითი (ა), დიდი (ბ) და მცირე კლასტერების (გ) შემთხვევაში.

დისკრეტულია, რაც ძალზე განსხვავდება მოცულობითი სხეულისათვის ფერმის განაწილების უწყვეტი ფუნქციისაგან. ნანონაწილაკთა რაოდენობის ზრდასთან ერთად მცირდება დონეთა შორის ენერგეტიკული მანძილი, ანუ ღრეჩო თანდათან ქრება. მაგალითად, Ag₅₅ - ს აქვს აკრძალული ზონის სიგანე 0,2 ევ, Ag₇₉ - ს - 0,1 ევ.

მასალის ფერი განისაზღვრება იმ სინათლის ტალღის სიგრძით, რომელსაც ის შთანთქავს. შთანთქმა ხდება ფოტონებით ელექტრონების აგლზნების შედეგად ქვედა, შევსებული დონებიდან ზედა, შეუვსებელ დონეებზე. სხვადასხვა ზომის კლასტერებს აქვთ სხვადასხვა ელექტრონული სტრუქტურა, ენერგეტიკულ დონეთა შორის სხვადასხვა მანძილები. აქედან გამომდინარე, სხვადასხვა ზომის კლასტერებს ექნებათ სხვადასხვა ფერიც.

ნაჩვენები იყო, რომ ნანონაწილაკის ზედაპირზე და მოცულობაში ატომების მდგომარეობები ერთმანეთისგან განსხვავდებიან, ამიტომ განსხვავებული იქნება მათი ელექტრული სტრუქტურაც. ზედაპირზე არის გაუჯერებელი ბმები, რის შედეგად ზედაპირზე უფრო მეტია შესუსტებული ქიმიური ბმები, ვიდრე შიდა ნაწილებში მყოფი ატომებისათვის. ბმების შესუსტებს იწვევს აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს შემცირებას და მიიღება შესაბამისად, ერთ კლასტერში ზედაპირზე უფრო მცირე აკრძალული ზონის სიგანე, ვიდრე მოცულობაში.

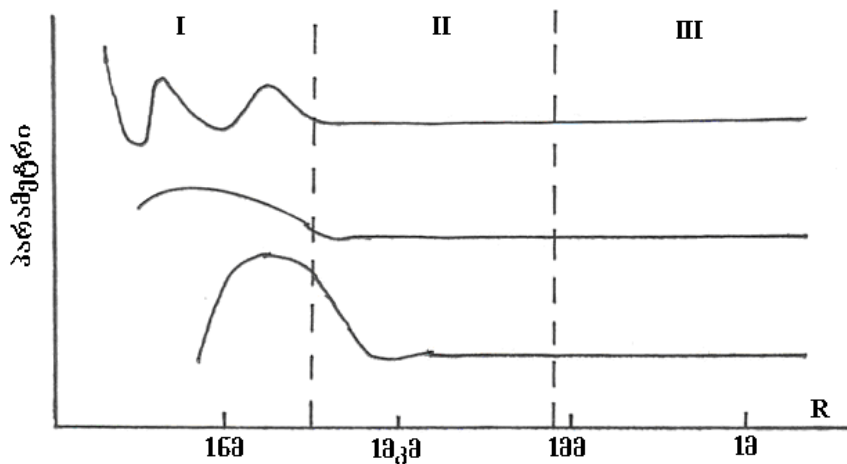
აღსანიშნავია, აგრეთვე, რომ რადგანაც ნანონაწილაკის ელექტრონული სტრუქტურა დამოკიდებულია მის ზომაზე, სხვა მასალასთან რეაქციის თვისება დამოკიდებული იქნება მის ზომაზე, ანუ კლასტერში ატომების რიცხვზე. არსებობს მრავალი ექსპერიმენტული მონაცემები ამ ფაქტის დასამტკიცებლად. ამ მოვლენას დიდი მნიშვნელობა აქვს კატალიზატორების წარმოებაში.

34. მეტალური ნანონაწილაკები

მასალების თვისებების R ზომაზე დამოკიდებულება შეიძლება გაიყოს ორ ნაწილად: 1) მცირემგრძობიარე ნიმუშის ზომის მიმართ – „მაკროსკოპული“ და 2) მაღალმგრძობიარე მასალები, რომლებშიც თვისებების ცვლილება იყოს ძალიან დიდი და ჰქონდეს ოსცილაციის ხასიათიც კი, ჰქონდეს ექსტრემუმი ან გადიოდეს ნაჯერობის ისეთ დონეზე, რომელიც მკვეთრად განსხვავდება მაკროსკოპული მდგომარეობისაგან. ის შემთხვევები მოცემულია ნახ.34.1-ზე.

მათ შორის მდებარეობს შუალედური უბანი, რომლის ზომა $R \leq 0$, სადაც მათი ელექტრო-ფიზიკური თვისებები მაკრომასალებისაგან მკვეთრად იცვლებიან,

მაშინაც კი როცა ისინი შეიცავენ ერთიდაიგივე ატომების სხვადასხვა რიცხვს. ამის მნიშვნელოვანი მიზეზებია შემდეგი: შემადგენელ ატომთა რიცხვი სასრულია; ზედაპირული ატომების როლი, მოცულობასთან შედარებით დიდია, რაც გამოორიცხავს მოცულობის თვისებებს; ზედაპირზე დიფუზიის, ატომური გადაწყობის და ატომების თვითორგანიზაციის დიდი როლი; ახალი ფაზის, ფაზური გადასვლის, დისლოკაციის შექმნის დიდი შესაძლებლობები. ყოველივე ეს ნათლად ვლინდება მეტალურ სტრუქტურებში, სადაც ელექტრულ, კაპილარულ, მაგნიტურ, ზეგამტარულ თვისებებს აქვთ განსაკუთრებული ხასიათი.



ნახ.34.1. ნანოუბანში მასალის თვისებების გამოვლენის სამი (1;2;3) ვარიანტი: I- ნანოსტრუქტურა; II – მიკროსტრუქტურა და III – მაკროსტრუქტურა.

გადატანის ნებისმიერი მოვლენისას (ელექტრული დენის, პლასტიკური დეფორმაციის, სითბოგამტარებლობის და ა. შ.) გადამტანებს შეიძლება მიეწეროს რაღაც თავისუფალი განარბენის ეფექტური R_p სიგრძე. როცა $R \gg R_p$ მატარებელთა გაბნევა ან ჩაჭერა ხდება მოცულობაში და არაა დამოკიდებული ობიექტის ზომაზე. როცა $R < R_p$ სიტუაცია რადიკალურად იცვლება და კინეტიკური მოვლენები ძლიერად არიან დამოკიდებული ნიმუშის ზომებზე.

ასევე ცხადია, სხვადასხვა ატომებისათვის ურთიერთმოქმედების პოტენციალების რაოდენობრივი მახასიათებელი იქნება სხვადასხვა, მაგრამ ზოგადი სახე და მინიმუმების არსებობა (რაღაც r_0 – მდე განზიდვა და შემდეგ მიზიდვა) ყველასთვის უნივერსალური თვისებაა. ამ ძალის მოქმედების შედეგად წარმოიქმნება ატომური კონფიგურაციები მყარი კავშირებით (კოვალენტური, იონური, მეტალური) ან სუსტი ბმებით (ვან-დერ-ვაალსი, წყალბადისებური).

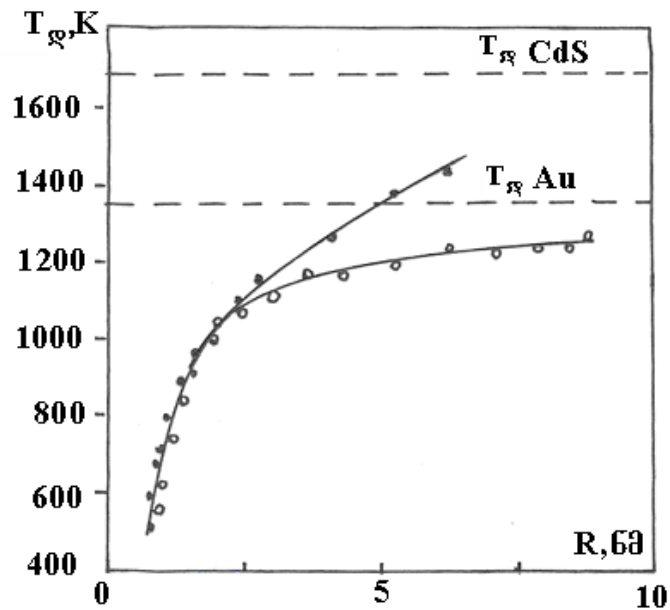
ზომითი ეფექტები ვლინდება არა მარტო ცალკეულ ნაწილაკებს შორის, არამედ ნაწილაკთაშორისაც. ნაწილაკთაშორის შესაძლებელია აღიძვრას დამუხტვის ეფექტი, გამოწვეული ერთი ნაწილაკიდან მეორეზე ელექტრონების გადასვლით. ასეთი გადასვლის შემდეგ ამ ორ ნაწილაკს შორის აღიძვრება ელექტროსტატიკური ძალები. ისინი არსებითია და არაა კულონური ხასიათის, რადგან ამ შემთხვევაში ნაწილაკთა მუხტი დამოკიდებულია მათ შორის მანძილზე. მათ შორის ეკრანირების მეტ მანძილზე ეს ძალები ბევრად მეტია, ვიდრე ვან-დერ-ვალსის ძალები, რომლებიც ასიპტოტიკურნი არიან r^{-8} სახით. ნაწილაკთაშორისო ძალები გამოიხატებიან კაზიმირის ფორმულით:

$$F_w = r^{-2} q_w^2(r), \quad q_w^2(r) \approx 10hc (R/r)^6 \quad (34.1)$$

ნაწილაკიდან ნაწილაკზე ელექტრონების გადასვლის მინიმალური რიცხვისას, (ორივე ნაწილაკის მუხტი იცვლება ერთი ელექტრონის მუხტით) და როცა დიელექტრიკული მუდმივა $\epsilon = 1$, (3.4)-ით განსაზღვრული F_w ძალა მცირეა კულონურ ძალაზე მანამ, სანამ $r < R^3$. მრავალი ელექტრონის გადასვლა ერთიდან მეორე ნაწილაკზე, გამოიწვევს ნაწილაკის დეფორმაციას და განისაზღვრება ზედაპირული დაძაბულობით და არა დაჭიმულობით. ეს ეფექტი შესამჩნევი იქნება დუდილის ტემპერატურასთან ახლო ტემპერატურაზე, როცა ნაწილაკი თავის ორთქლთან დინამიკურ წონასწორობაშია.

ზომითი შეზღუდვები იწვევენ ფაზური და სტრუქტურული გარდაქმნების, სითბოს, მუხტის გადაცემის, სიმათლის არეკვლის და შთანთქმის პირობების შეცვლას. ამის გამო იცვლება მასალის ყველა ფუნდამენტალური მახასიათებლები: მესერის მუდმივა, ელექტრული და ფონონური სპექტრები, ელექტრონების გამოსვლის მუშაობა, დნობის ტემპერატურა და ა. შ.

გამოსვლის მუშაობის ნაწილაკის ზომაზე დამოკიდებულება პირველად დაიმზირა ოქროს მარცვლებზე. ნაწილაკთა რადიუსის შემცირებისას 0,3 ნმ-მდე $Au - I$ გამოსვლის მუშაობა შემცირდა 4-დან 2 ევ-მდე. ვერცხლზე პირიქით – გაიზარდა. ყველა მასალის ნაწილაკებისათვის იქნა ექსპერიმენტულად მიღებული ზომის შემცირებასთან ერთად დნობის ტემპერატურის შემცირება. ნახ.34.2-ზე მოყვანილია Au და CdS – თვის ასეთი დამოკიდებულება.



ნახ.34.2. Au და CdS დნობის ტემპერატურის მათ ნანონაწილაკის ზომაზე დამოკიდებულება.

ეს შედეგები დამტკიცდა მრავალჯერადი ექსპერიმენტებით სხვა მეტალებზეც. ნანონაწილაკების დნობის ფიზიკური სურათი ასე წარმოდგინდება. განსაზღვრული რიცხვის ატომებიანი კლასტერი დნობის პროცესში იმყოფება მყარი და თხევადი ფაზების დინამიურ წონასწორობაში. დინამიური წონასწორობისას ყოველი ინდივიდუალური კლასტერი იცვლის ფორმას, მაგრამ ფაზათაშორის გადასვლის სიხშირე მცირეა და ყოველ ფაზაში ნაწილაკი ასწრებს წონასწორობაში მოსვლას. რაც მცირეა ნაწილაკთა რიცხვი, მით მცირე დრო და ტემპერატურაა საჭირო დინამიურ წონასწორობაში მოსვლისათვის.

საკონტროლო კითხვები:

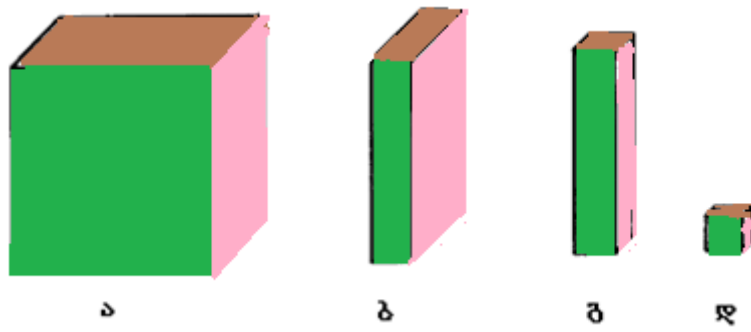
1. ნანონაწილაკებში როდგორი თანაფარდობაა შინაგან და გარე ზედაპირებს შორის?
2. რა არის ხვედრითი ზედაპირი და რაა მისი განზომილება?
3. როგორ მიიღება ახალი ფაზა და რა არის კომპაქტურობის კოეფიციენტი?
4. რასში მდგომარეობს სუპერპარამაგნეტიზმის ეფექტი?
5. რა არის მაგიური რიცხვი?
6. როგორია ნანოსისტემების გეომეტრიული და ელექტრული სტრუქტურა?
7. რას წარმოადგენს კაზიმირის ძალები ნანოსისტემებში?
8. როგორაა დამოკიდებული Au და CdS დნობის ტემპერატურა მათ ნანონაწილაკის ზომაზე?

თავი 4.

35. ნანოშეზღუდვები: ნანოფირფიტის, მავთულის და წერტილის ცნებების არსი.

მყარ სხეულებში ზომითი ეფექტები აღიძვრება იმ შემთხვევაში, როცა ობიექტის გეომეტრიული ზომები ეთანადება ამა თუ იმ ზომებს, რომლებიც განსაზღვრავენ ფიზიკური პროცესების მიმდინარეობას (მუხტის მატარებლის თავისუფალი განარბენის სიგრძე, დე ბროილის ტალღის სიგრძე და ა. შ.). საკვლევი ნიმუშის ზომების მიხედვით ანსხვავებენ კლასიკურ და კვანტურ ზომით შეზღუდვებს. გასაგებია, რომ ნანომეტრული ობიექტებისათვის, სადაც ნაწილაკთა ზომები დე ბროილის ტალღის ზომების რივისაა, დამახასიათებელია კვანტური სითბოტევადობა, ელექტროგამტარებლობა, ზოგიერთი ოპტიკური თვისებები.

სამგანზომილებიან სივრცეში ელექტრონულ სისტემას აქვს მაკროსკოპული ზომები და გამტარებლობის ელექტრონები არიან დელოკალიზირებულნი, თავისუფლად მოძრაობენ მთელ არეში. მაგალითისათვის, სპილენძის გამტარის ყველა ზომა მეტია, ვიდრე ატომთაშორის მანძილები. თუ სპილენძის გამტარის ერთ ან ორ ზომას შევამცირებთ ატომთაშორის მანძილის რიგამდე მდგომარეობა კარდინალურად შეიცვლება: დელოკალიზაცია იქნება შეუძლებელი და ელექტრონები გახდებიან ლოკალიზირებულნი. განვიხილოთ მაგალითად, სპილენძის ფირფიტა სიგრძით 10 სმ, სიფართით 10 სმ და სისქით 5 სმ. აქ ელექტრონები ყველგან თავისუფლად მოძრაობენ, ყველგან არიან დელოკალიზირებულნი. თუ სისქეს შევამცირებთ 3,6 ნმ-მდე, რომელიც ეთანადება 10 ელემენტალურ უჯრედს, ამ უჯრედის 20% ატომებისა არიან ზედაპირზე. გამტარებლობის ელექტრონები იქნებიან დელოკალიზებული ფირფიტის სიბრტყეში, მაგრამ იქნებიან ლოკალიზებული მცირე ზომით – სისქეის მიმართულებით. ასეთ ობიექტს ეწოდება **კვანტური ორმო**. თუ სისქესთან ერთად სიფართესაც შევამცირებთ ნმ-ული მასშტაბით, მაშინ ლოკალიზაცია იქნება ორ მხრივ და დელოკალიზაცია ერთი, სიგრძის გასწვრივ მხრით. ელექტრონები თავისუფლად მოძრაობენ მხოლოდ სიგრძივად და განივკვეთში არიან შეზღუდულნი. ასეთს ეწოდება **კვანტური მილაკი**. და ბოლოს, თუ სიგრძესაც შევამცირებთ ნმ-ულ ზომამდე – მიიღება **კვანტური წერტილი**. მასში ელექტრონები ლოკალურნი არიან ყველა, სამივე მიმართულებით. ეს ჩანს ნახ.35.1-დან და ცხრილი 35.1-დან:



ნახ.35.1. სხეული სხვადასხვა განზომილებებით: ა- მოცულობითი ობიექტი; ბ - კვანტური ორმო; გ - კვანტური მილაკი და დ - კვანტური წერტილი.

ცხრილი 35.1. სხვადასხვა განზომილებიანი სხეულისთვის ლოკალიზაცია.

კვანტური სტრუქტურა	დელოკალიზაციის განზ.	ლოკალიზაციის განზ.
მოცულობითი ობიექტი	$3(x, y, z); 3D$	0
კვანტური ორმო	$2(x,y); 2D$	$1(z)$
კვანტური მილაკი	$1(z); 1D$	$2(x,y)$
კვანტური წერტილი	0 0D	$3(x, y, z)$

ნანომოვლენების რაოდენობითი დახასიათებისათვის ხშირად საჭიროა მიკროერთეულებიდან (მიკრომეტრი, მიკროამპერი, მიკროწამი) გადავიდეთ ნანოერთეულებზე (ნანომეტრი, ნანოამპერი, ნანოწამი). ფიზიკური სიდიდეების ერთეულთა სისტემა დგინდება ბუნებაში მიმდინარე ფიზიკური პროცესების ურთიერთმოქმედებით. ადრეული ეტალონების ცთომილება ახალი, ნანოზომებისათვის არიან უკვე დიდი სიდიდეები და ასეთი ეტალონებით სარგებლობა შეუძლებელია. ამიტომ უნდა შემოვიღოთ ფიზიკური სიდიდეების ახალი ეტალონები ადრე განსაზღვრულ ეტალონებზე დაყრდნობით. ძირითად ერთეულებად აიღებინათ ისეთი სიდიდეები, რომლებსაც აქვთ შესაბამისი ეტალონები, განსაზღვრული დიდი სიზუსტით, და, შეესაბამებინათ მოცემულ ეპოქაში მეცნიერების და ტექნიკის განვითარებას. ეტალონი ესაა გაზომვის საშუალება, რომლიც ინახავს ფიზიკური სიდიდის გაზომვის ამ ერთეულს და მისგან აწარმოებს გაზომვის სხვა მასზე ნაკლებ ან მეტ ერთეულს. ეტალონის და შესაბამისად სიდიდის ერთეულის გარეშე არ შეიძლება სხვადასხვა დროს და სხვადასხვა ხელსაწყოებით გაზომილი სიდიდეების შეთავსება ერთმანეთთან.

ეტალონთა ერთობლიობა ქმნის ეტალონის ბაზას, რომელშიც შედის საერთაშორისო სისტემის ძირითადი ერთეულები (SI-სისტემა).

მეტრის ეტალონად მიღებულია $1650763,73 \pm 0,56$ მ – კრიპტონ 86 ატომის მიერ გამოსხივებული ტალღის სიგრძე. მისი დამაფიქსირებელი მოწყობილობა შეიცავს ოპტიკურ-ინტერფერომეტრ აპარატურათა რთულ კომპლექსს.

ატომური წამი წარმოადგენს ცეზიუმის ძირითად მდგომარეობაში მყოფ ატომში, ზეთხელი სტრუქტურის ორ დონეს შორის გადასვლის პერიოდს და ეთანადება 9192631770 ± 10^{-12} წმ-ს.

ჯოზეფსონის ეფექტზე დამყარებული ეტალონები იძლევიან საშუალებებს ძალიან ზუსტად გავზომოთ სუსტი მაგნიტური ველები (10^{-18} ტლ), მცირე დენები (10^{-10} ა) და ძაბვები (10^{-15} ვ). ეს ეფექტი მდგომარეობს ორ ზეგამტარს შორის მოთავსებულ თხელ დიელექტრიკში დენის გავლაში.

SI-სისტემის ეს ეტალონები გამოიყენებიან ნანოსტრუქტურებში, ხოლო სხვა სიდიდეები შეიძლება გამოყენებულ იქნან ტექნოლოგიური აპარატურის ნორმალური მუშაობისათვის.

კარგი გამტარების ბევრი თვისებები აიხსნება მოდელით, რომლის თანახმად სავალენტო ელექტრონები სცილდებიან თავის ატომებს, ხდებიან დელოკალიზირებულნი გამტარებლობაში, შესწევთ უნარი თავისუფლად იმოძრაონ დადებით იონებს შორის. დაჯახებიდან დაჯახებამდე ისინი გადიან თავისუფალი განარბენის L მანძილს. ასეთი ელექტრონები ისე იქცევიან, როგორც გაზი და მათ ეწოდებათ ფერმი-გაზი. მათი კინეტიკური ენერგია $E = mv^2/2 = p^2/2m$, სადაც m – მასაა, v – სიჩქარე და $p = m v$ – იმპულსი ელექტრონის. კარგად იხსნება ომის კანონიც $V = IR$.

ნანომეტრული განხილვისას, თავისუფალი ელექტრონისთვის დე ბროილის ტალღასაც ისევე იქცევა, როგორც ელექტრონი, მხოლოდ იმ გაგებით, რომ მისი შესაბამისი ტალღური ფუნქცია უნდა ვეძებოთ ალბათობის. ზომით შემოსაზღვრულ სტრუქტურაში ელექტრონის ენერგიის მნიშვნელობის ფიქსაციის მოვლენას ეწოდება კვანტური შეზღუდვები. განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად $\Delta p \Delta y \geq \hbar$ ელექტრონი m^* ეფექტური მასით იკეტება y მიმართულებით, რაც ცვლის იმპულსს და შესაბამისად მის კინეტიკურ ენერგიეს.

კვანტური წერტილის არსში არ უნდა ვიგულისხმოთ გეომეტრიული შინაარსი, რადგან კვანტური წერტილი არის ობიექტი, რომელსაც არ აქვს მაკროსკოპული განზომილება ყველა სამი მიმართულებით. იგულისხმება რამდენიმე ათეული ატომური ზომები, რომლებიც მოთავსებულნი არიან, როგორც ჩანერგვები

ძირითად მატრიცაში. ენერჯის (იმპულსის) დისკრეტულობა განპირობებულია იმით, რომ ელექტრონის ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს ნული კვანტური ნაწილაკის ზედაპირზე. ეს შესაძლებელია, როცა კვანტური ნაწილაკის მოპირდაპირე ზედაპირზე თავსდება მთელი რიცხვები $n=1, 2, 3, \dots$ დე ბროილის ნახევარტალღები $\lambda/2 = \pi\hbar/p$. აქედან გამოდის ნებისმიერ დერძე იმპულსის და ენერჯის დაკვანტვის კანონი.

დღეს-დღეობით გადაუწყვეტელი საკითხია კვანტურ სტრუქტურაში კვანტური წერტილის ზუსტად ერთნაირი ზომების მიღება. მაგრამ ინფრაწითელი ფოტომიმდებების და ლაზერების შექმნას ეს ხელს არ უშლის. არსებობს აგრეთვე სამელექტროდიანი ხელსაწყოები, რომელშიც ერთი ელექტროდი ჩამკეცია და ორი მათგანი გამომდენი და ჩამდენი. შესაძლებელია გამომდენ – ჩამდენ არხის ნახტომისებური ცვლილება და კვანტურ წერტილზე ერთი ელექტრონის გასვლა და შესაბამისად, ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მიღება.

როგორც აღენიშნეთ, დელოკალიზებულ ელექტრონს გამტარებლობის ზონაში ეწოდება თავისუფალი. ობიექტის ზომების შემცირებით ნანომასშტაბამდე ის ხდება ლოკალიზებული, ანუ მისი მოძრაობა შეზღუდულია. სხვა სიტყვით, რომ ვთქვათ, ელექტრონი ხვდება პოტენციალურ ორმოში, შეზღუდული არით უარყოფითი ენერჯით, ესაა მართკუთხა პოტენციალური ორმო დიდი კედლებით. ეს პოტენციალური ორმო შეიძლება იყოს ერთ-, ორ-, სამ- და მეტ განზომილებიანი. მეტი ელექტრონი საწინააღმდეგო სპინებით. ამიტომ გადაგვარებაა ორჯერადი.

36. კრისტალის აგებულება

ნანომასალების თვისებები და მახასიათებლები განისაზღვრებიან მათი სტრუქტურით, რომელთა შესწავლა წარმოადგენს ნანოტექნოლოგიის ერთ-ერთი მნიშვნელოვან ამოცანას. ნანომასალის სტრუქტურა კლასიფიცირდება შემადგენლობის მიხედვით: ერთფაზიანი და მრავალფაზიანი, ფორმის მიხედვით – ფიროვანი და სვეტისებური, სტატიკური განაწილების მიხედვით – იდენტურ საზღვრიანი და არაიდენტურ საზღვრიანი.

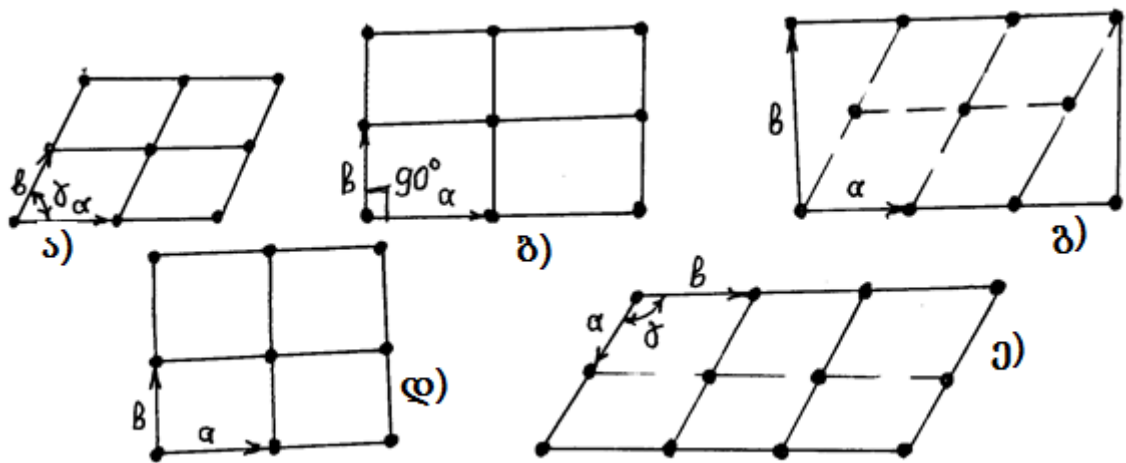
ნანომასალაში ატომები ლაგდებიან განსაზღვრული წესრიგით, თავისებური პერიოდულობით, რომელიც ქმნის კრისტალურ მესერს. პერიოდულ მესერში შეიძლება ყოველთვის გამოიყოს ელემენტარული უჯრედი, რომლის ტრანსლაციით ერთ მხარეს მაინც, მიიღება კრისტალი. ელემენტარული მესერის

შექმნა დამოკიდებულია ატომის ზომაზე და მის გარე შრეში ელექტრონების კონფიგურაციაზე. ელემენტარულ უჯრედში კოორდინატთა ღერძების არჩევა ხდება წიბოების გასწვრივ ან მათ პარალელურად და ამიტომ კოორდინატთა ღერძებს შორის კუთხეები შეიცვლება სიმეტრიის მიხედვით. კოორდინატთა სისტემის თითოეულ ღერძს გააჩნია სიგრძის საკუთარი მონაკვეთი, რომელსაც ჩამოჭრის ამ ღერძზე ერთეულად არჩეული სიბრტყე. ამგვარად, ორგანოზომილებიანი მესერის შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი ისე უნდა აირჩეს, რომ კვანძებზე აგებული ელემენტარული პარალელოგრამის სიმეტრია თანხვდებოდეს მესერის კვანძის სიმეტრიას. ამ შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი აიგება a და b მონაკვეთებზე და მათ შორის არსებულ γ კუთხეზე. ეს სიდიდეები განსაზღვრავენ კოორდინატთა სისტემის არჩევას და მათ გეომეტრიული მუდმივები ეწოდებათ.

ბრავეს 5 ორგანოზომილებიანი მესერი მოცემულია ნახ.36.1-ზე. ამ შემთხვევაში არის ბრავეს უჯრედი: ა) ირიბკუთხა პარალელოგრამი, ბ) მართკუთხედი, გ) ცენტრირებული მართკუთხედი, დ) კვადრატი და ე) რომბი, რომლებიც ქმნიან 4 სისტემას – ირიბკუთხას, მართკუთხას, კვადრატულსა და ჰექსაგონალურს.

ზოგჯერ ნივთიერება ქმნის სხვადასხვა კრისტალურ სისტემას, რომლებიც მდგრადი არიან სხვადასხვა წნევაზე და ტემპერატურაზე. ნივთიერების ამ თვისებას პოლიმორფიზმი ეწოდება, ხოლო სტრუქტურებს პოლიმორფული ფორმები ან ნივთიერების ალოტროპული მოდიფიკაცია. ალოტროპია – ერთი ქიმიური ელემენტის არსებობა ორ ან მეტ მარტივ მდგომარეობაში. პოლიმორფიზმი – ერთი შემადგენლობის მყარი სხეულის არსებობა ორ ან მეტ კრისტალურ სტრუქტურად.

მოდიფიკაცია, რომელიც მდგრადია ნორმალურ და დაბალ ტემპერატურებზე აღინიშნება α -თი, ხოლო მოდიფიკაცია, რომელიც მაღალ ტემპერატურებზეა მდგრადი – β -თი, γ -თი და ა. შ. მასალებისათვის მნიშვნელოვანია მოდიფიკაციის სახის ცოდნა, რადგან მათზეა დამოკიდებული მათი ელექტრო-, მექანიკური-, ოპტიკური- და მაგნიტური თვისებები. მაგალითად, ნახშირბადის პოლიმორფიზმია გრაფიტი, აღმასი და ფულერენი, სილიციუმი კარბიტს რამდენიმე მოდიფიკაცია აქვს და ა. შ.



ნახ.36.1. ორგამზომილებიანი ბრავეს მესერის სახესხვაობები.

საკონტროლო კითხვები:

1. როგორია კვანტური ფირფიტის, მავთულის და წერტილის ცნება?
2. როგორია კვანტური ფირფიტის, მავთულის და წერტილის დელოკალიზაციის ხარისხი?
3. როგორია ნანოსისტემებში სიგრძის, დროის და ველის განზომილობათა ეტალონები?
4. როგორია ორგამზომილებიანი ბრავეს მესერის სახესხვაობები?

37. ფულერენი

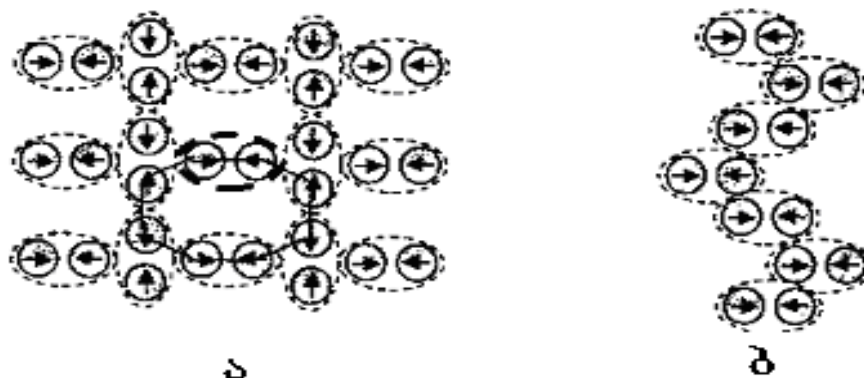
ნანოტექნოლოგია იძლევა ფართო პერსპექტივებს ახალი მასალების, ელექტრონიკის, ფიზიკის, ქიმიის, ენერგეტიკის და სხვა დარგების სწრაფი განვითარებისათვის. ამ პროცესში გადამწყვეტ როლს თამაშობენ ფულერენი და ნახშირბადის ნანომილაკები, რომლებშიც ნახშირბადისეული კავშირები თვისებებით უნიკალურია და მრავალსახა. ნახშირბადი ყველაზე უფრო გავრცელებული ელემენტია ბუნებაში და ახორციელებს სიცოცხლისათვის საჭირო ძირითად პროცესებს. ნახშირბადის ძირითადი თავისებურებაა – C – C – კავშირების შექმნა და ამ კავშირის ბუნების გაგებისთვის საჭიროა განვიხილოთ ნახშირბადის ატომის ელექტრული სტრუქტურა. ის შეიცავს 6 ელექტრონს, რომლებიც აუღვზნებელ მდგომარეობაში არიან უმდაბლეს ენერგეტიკულ დონეებზე $(1s)^2(2s)^2(2p_x)^1(2p_y)^1(2p_z)^1$. როცა მოლეკულაში ნახშირბადის ატომი დაკავშირებულია სხვა ატომთან, მისი ელექტრონული სტრუქტურა ასეთია: $(1s)^2(2s)^1(2p_x)^1(2p_y)^1(2p_z)^1$. ელექტრული მუხტი s-მდგომარეობაში განაწილებულია სფერული სიმეტრიით და 1s-ელექტრონები ქიმიურ ბმაში არ მონაწილეობენ. ხდება s- და p- მდგომარეობების ტალღური ფუნქციების ჰიბრიდიზაცია.

ნახშირბადის ორატომიანი მოლეკულის შექმნისას აღიძვრება მხოლოდ σ - ბმა, კოვალენტური და იონური კავშირის შესაბამისი წილობითი ენერგიებით 6,2 ევ და 2,2 ევ. და ბირთვებს შორის მანძილით 1,242Å-ის ტოლი.

ნახშირბადის მოლეკულების C_2-C_2 ურთიერთმოქმედებისას ყალიბდება ჯვარედინი ან ძაფისებური სტრუქტურა ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ.37.1.-ზე. C_2 მოლეკულების ურთიერთ ასეთი განლაგება იწვევს მათ გაჭიმვას და მოლეკულის შიგნით, ატომებს შორის მანძილი გაზრდას 1,242Å-დან 1,415Å-მდე. ამ პროცესზე იხარჯება ენერგია და საბოლოო შედეგად ნახ.37.1ა)-ზე გამოსახულ შრეში მყოფ C_2 მოლეკულის ბმის ენერგია ფორმირდება დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედებით და 1,855 ევ-ის ტოლია.

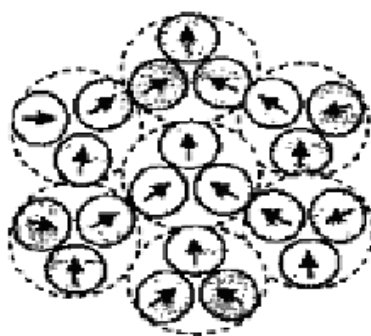
შრე წარმოადგენს სწორი ექვსკუთხედებისგან შემდგარ ბრტყელ ბადეს, რომელთა ყოველ კუთხეში მოთავსებულია ნახშირბადის ატომი (ჰექსაგონალური კრისტალური სტრუქტურა). ასეთ სიბრტყეს ეწოდება გრაფენი. გრაფენებს შორის ურთიერთქმედება მოლეკულურია და ბმის ენერგია შეადგენს 0,29 ევ-ს, ხოლო მათ შორის მანძილი – 3,35Å-ს. მცირეოდენი ძვრის დეფორმაცია იწვევს ასეთი

მასალის ფენებად დაშლას. ასეთ თვისებას ამჟღავნებს გრაფიტი. ნახშირს აქვს ძაფისებური სტრუქტურა, რომელიც გამოსახულია ნახ.37.1.ბ)-ზე.



ნახ.37.1. C_2-C_2 მოლეკულის ურთიერთმოქმედებისას ნიუთიერების შექმნის ფრაგმენტი: გრაფიტი (ა); ნახშირი (ბ).

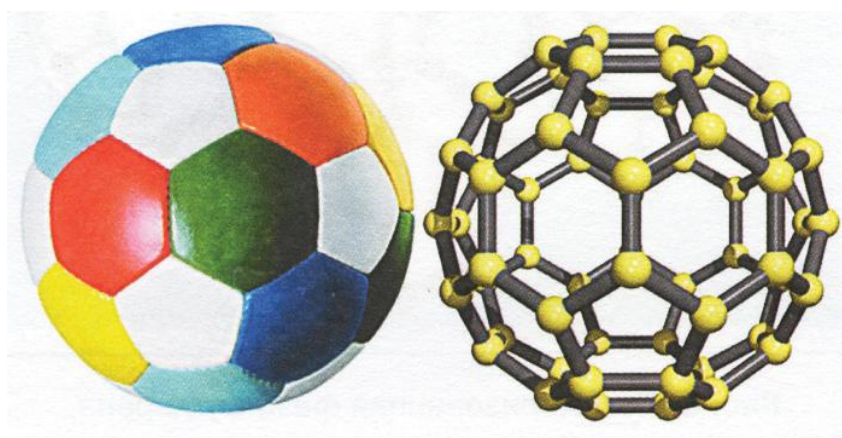
ნახშირბადის C_3 მოლეკულის შრეში განლაგების ხასიათი მოცემულია ნახ. 37.2ზე. ნახშირბადის შრეში ასეთი წყობა ხასიათდება პოტენციალური ენერჯიის მინიმუმით, კომპაქტურობის კოეფიციენტის მაქსიმალური სიდიდით და სტრუქტურა შეიცავს 12 ახლო მეოფ ნახშირბადის ატომს. მათ შორის კოვალენტური ბმა განისაზღვრება გაცვლითი ურთიერთმოქმედებით, ანუ - ბმით, 11,5 ევ იონიზაციის ენერჯიით. ასეთი თვისებებით ხასიათდება ალმასი.



ნახ.37.2. ალმასის შრეში C_3 მოლეკულის მდებარეობა დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედებისას

დიდი ხნის განმავლობაში ითვლებოდა, რომ ბუნებაში არსებობდა ნახშირბადის სამი ალოტროპიული ფორმა: კარბინი, გრაფიტი და ალმასი. გასული საუკუნის ბოლოს აღმოჩენილი იქნა უნიკალური თვისებების მქონე, ე. წ. ჩონჩხედისებური ნახშირბადის სტრუქტურა, რომელიც წარმოადგენს

ნახშირბადისეულ შეკრულ ღრუ სფერულ გარსს (ნახ.37.3). ის ჰგავს ფეხბურთის ბურთს და შედგება ნახშირბადის 60 ატომისაგან. მისი აღმოჩენა იყო თითქმის შემთხვევითი, ის აღმოჩნდა ვარსკვლავთშორისო სივრცის შესწავლისას. შეისწავლებოდა სინათლის შთანთქმა ვარსკვლავთშორისო არსებული მტვერით, ანუ იქ არსებული მცირე ნაწილაკებით. ცნობილია, რომ ვარსკვლავების სინათლის ინტენსიობა კოსმოსური სივრცის გავლის შემდეგ მცირდება. ესაა ოპტიკური შთანთქმა და ხდება ვარსკვლავებიდან დედამიწისკენ წამოსული სხივის შთანთქმით და გაბნევით მის გზაზე არსებული მტვერის ნაწილაკების მიერ. ეს შთანთქმა შეისწავლება ინტენსიობის გაზომვით მოსული სინათლის სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე, ანუ სხვადასხვა ფერზე.



ნახ.37.3. C_{60} ფულერენის მოლეკულის სტრუქტურა

ამ შთანთქმას ხსნიდნენ ვარსკვლავთშორისო არეში არსებულ ჰიპოთეტიკურად მცირე გრაფიტის ნაწილაკებზე გაბნევით, რომელსაც ასტონომთა შორის ჩვეულებრივ მოვლენად იყო მიღებული და ჰქონდა საერთო აღიარება.

დ. ჰაფმანი და ვ. კრატჩმერი ამ ახსნით ვერ დაკმაყოფილდნენ და განაგრძეს უფრო დაწვრილებით შთანთქმის საკითხის შესწავლა. ლაბორატორიულ პირობებში, ორ ნახშირის ელექტროდს შორის რკალური განმუხტვით, ჰელიუმის ატმოსფეროში, დააფინეს კვარცის მინაზე ჭვარტლის მცირე ნაწილაკები. მას სწავლობდნენ სხვადასხვა ოპტიკური მეთოდებით. მართლაც აღმოაჩინეს გრაფიტის ცნობილი სპექტრული ხაზები ულტრაიისფერ (უი) დიაპაზონში, მაგრამ ინფრაწითელ (იწ) დიაპაზონში მიიღეს ოთხი დამატებითი ხაზები, რომელთა წარმოშობა არ უკავშირდებოდა გრაფიტს.

ქიმიკოს-თეორეტიკოსების მიერ 60 ატომისაგან შემდგარი ნახშირბადი, ფორმულით C_{60} , რამდენიმე წლის წინათ იყო ცნობილი, მაგრამ მისი არსებობა ექსპერიმენტულად არ იყო დამტკიცებული. ამ მოლეკულის ბევრი თვისება გამოთვლილი იყო თეორიულად, მათ შორის იწინასწარმეტყველეს იწ-დიაპაზონის შთანთქმის სახეც. ჰაფმანის და კრატჩმერის მიერ აღმოჩენილი ოთხი შთანთქმის ხაზი კარგად ეთანადებოდა თეორიულად წინასწარმეტყველურ C_{60} მოლეკულის ამ დიაპაზონში შთანთქმის სპექტრს. მაშასადამე, მკვლევარებმა მიიღეს 60 ატომიანი, სფეროს ფორმის ნახშირბადის მოლეკულის არსებობის მყარი დამტკიცება. ეს გააკეთა ჯგუფმა, რომელშიც შედიოდა კ. კროტო, რ. კერლი და რ. სმოლი, რომლებიც 1996 წელს დაჯილდოვდნენ ნობელის პრემიით.

ფულერენებს უწოდებენ ნახშირბადის ატომებისგან შემდგარ მოლეკულათა კლასს, რომლებიც ქმნიან 12 ხუთკუთხედებისა და ორ ან უფრო მეტ ექვსკუთხედებისაგან ჩაკეტილ გარსს. ფულერინში ნახშირბადის ყოველი ატომი ესაზღვრება სამ მეზობელ ატომს და ატომების საერთო რიცხვი ყოველთვის ლუწია. ყოველი ფულერენი შეიცავს ნახშირბადის $2(10+n)$ ატომს, სადაც n – ექვსკუთხედების რიცხვია და ყოველთვის მეტია ერთზე.

C_{60} მოლეკულის არქიტექტურა შექმნა რიჩარდ ფულერენმა და მის საპატივმცემლოდ მას ფულერენი უწოდეს. ის წარმოადგენს ღრუ სფეროს ფორმას, რომელიც შედგება 20 ექვსკუთხა და 12 ხუთკუთხა სიმეტრიულად განლაგებული წახნაგებისგან, სადაც ხუთკუთხედები ერთმანეთს არ ესაზღვრებიან (ნახ.37.3). ყოველი ექვსკუთხედი ესაზღვრება სამ ექვსკუთხედს და სამ ხუთკუთხედს, ხოლო ყოველი ხუთკუთხედი – მხოლოდ სამ ექვსკუთხედს. სფეროს შემქმნელი ნახშირბადის ატომები ერთმანეთს უკავშირდებიან ძლიერი კოვალენტური ბმებით. სფეროს გარსის სისქეა – 0,1 ნმ, C_{60} მოლეკულის რადიუსი – 0,357 ნმ. დღესდღეობით ფულერენი ყველაზე უფრო გავრცელებული ტერმინია სამეცნიერო წრეებში: ის ასტრონომებმა აღმოაჩინეს კოსმოსში და მეტეორიტებში, ბიოლოგებმა შეამჩნიეს მისი მსგავსება ცოცხალი სამყაროს ბიოლოგიურ სტრუქტურასთან, გეოლოგებმა ნახეს საბადოებში, მასალათმცოდნეებმა მის ბაზაზე შექმნეს უნიკალური თვისებების მქონე მასალები და ა. შ.

რით განსხვავდება ფულერენი უფრო გავრცელებულ და ცნობილ ნახშირბადის სხვა ალოტროპიული ფორმის ნახშირბადებისაგან? მართლაც, გრაფიტი – რბილი, გაუმჭირვალე მასალაა, კარგად ატარებს ელექტრულ დენს, ხოლო გამჭირვალე ალმასი – ყველაზე მკვრივი მინერალია და დიელექტრიკია. გრაფიტის ატომური სტრუქტურა შედგება ნახშირბადის ატომების

სუსტკავშირებიანი ჰექსაგონალური ბადის შრეებისაგან, ხოლო აღმასს აქვს კუბური მესერი. შედარებით კარგად შესწავლილი C₆₀-ის მოლეკულა სფეროიდია, ექვივალენტური ზედაპირით 0,76მ-ის დიამეტრით. მისი ყველა ატომი ესაზღვრება სამ უახლოეს ატომს, რომელიც მასთან დაკავშირებულია σ-ბმით. ატომების ასეთი განლაგება ფულერენში მას ხდის უფრო ჭარბ რეაქციულ თვისებების მქონედს.

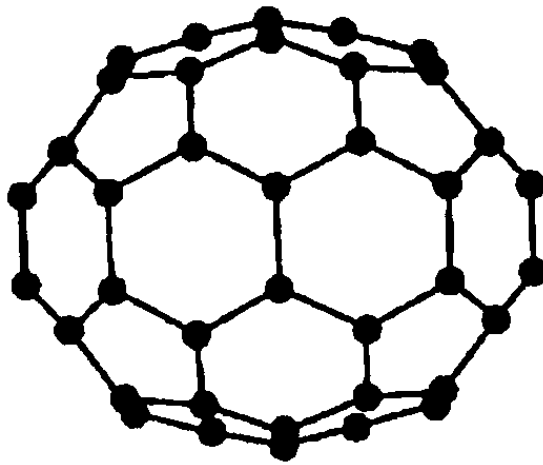
ბუნებაში C₆₀-ის გარდა კიდევ არსებობენ მადალსიმეტრიული ენდოფულერენები, გიპერფულერენები (გიგანტური ფულერენები), რომლებიც წარმოადგენენ ერთმანეთში ჩადგმულ გარსებს, რომელიც ასე აღინიშნება C₆₀@C₂₄₀@C₅₄₀ და ა.შ. დღესდღეობით მათი ელექტროფიზიკური და ქიმიური თვისებები ბოლომდე არაა შესწავლილი. ყურადღებას იპყრობს შეერთების კიდევ ერთი კლასი, ე. წ. ჰეტეროფულერონი, რომლის სტრუქტურა შეკრულია და ნახშირბადის ატომებზე ნაწილობრივ ჩანაცვლებულია სხვა ატომები. მაგალითად, C₅₉B, C₅₈N, C₅₇B₃, C₅₈BN, C₅₉M, სადაც M მეტალია და ა. შ. ფულერენის უჯრედში მოთავსებული ატომი, პრაქტიკულად კარგავს თავის ინდივიდუალურ ქიმიურ თვისებებს. საინტერესოა, აგრეთვე მათი ლეგირება ტუტემიწათა მეტალებით, რომლებიც ადვილად გასცემენ ელექტრონებს. ვაკუუმში 400°C ტემპერატურაზე შესაძლებელია C₆₀-ის კალიუმით ლეგირება. K ჯდება ტეტრაედრში, ფულერენის უჯრედში, ის გასცემს ელექტრონს, მიიღება C₆₀⁻, სადაც ელექტრონები სუსტად არიან დამაგრებულები და მცირე ძაბვაზეც ატარებენ დენს, ანუ ფულერენი ხდება გამტარი.

რიგ ფულერიდებში M₃C₆₀-ში შეიმჩნა ზეგამტარობა, როცა მათში ჩანაცვლებულ იყო ტუტემიწათა მეტალები (K, Na, Rb, Cs) რომელთა ზეგამტარობაში გადასვლის ტემპერატურა T_c ≥ 18 K. ასევე ზეგამტარ CsRuC₆₀-ის ზეგამტარობაში გადასვლის ტემპერატურა – T_c = 33 K.

ფულერენი, გარდა ვარსკვლავთშორისო სივრცისა, მცირე რაოდენობით აღმოჩენილ იქნა ბუნებრივ მინერალებში (შუნგიტების საბადოში) და მეტეორიტებში. სახელწოდება „შუნგიტები“ ეწოდა დასახლება შუნგის გამო, სადაც პირველად აღმოაჩინეს ეს მინერალი. შუნგიტების საბადოში ნახშირის შემცველობა მერყეობს 1-დან 70% -მდე, ხოლო მასში ფულერენი 10⁻³%-ია. დედამიწის პირობებში ფულერენი ოზონისა და უი-გამოსხივების მოქმედებით განიცდის დეგრადაციას, მაგრამ თუ დაცულია რაიმე გარსაცავი ფენით ის დიდხანს ინარჩუნებს თავის სახეს. ფულერენი გვხვდება ვულკანის ამონაფრქვევში, მესის დაცემის ადგილში. ძალიან მცირე რაოდენობით ფულერენს

შეიცავს ნავთის ლამფის და ბუხრის ჭვარტლი. მეტეორიტულ ფულერენებში აღმოჩენილ იქნა გაზი ^3He , რომელსაც აქვს კოსმოსური წარმოშობა. ამით მეტეორიტ აღენდეს წლოვანება შეფასდა 4,6 მილიარდი წლით, რომელიც ბევრად მეტია დედამიწის წლოვანებაზე. მთვარის გრუნტში ფულერენი არ იქნა აღმოჩენილი.

კიდევ უფრო სხვადასხვა თვისებები აქვს C_{70} მოლეკულას, რომლის ფორმა მოგვაგონებს ნესეს ან რეგბის ბურთს და რომელიც გამოსახულია ნახ.37.4-ზე. შეიძლება მათი მოდიფიცირება C_{70} -ის გარსის შიგნით ან გარეთ სხვა ატომის ან მოლეკულის მიერთებით.



ნახ.37.4. C_{70} ფულერენის სტრუქტურის აგების სქემა.

ჰიდროსტატიკური წნევის მოქმედებით, ფოტოქიმიური ადგზნებით და სხვა გარე ფაქტორების მოქმედებით ფულერენების მოლეკულები ურთიერთ ქმნიან კოვალენტურ ბმებს და პოლიმერდებიან. ცნობილია დიმერები $(\text{C}_{60})_2$, $(\text{C}_{70})_2$, C_{60} , C_{70} , ტრიმერები $(\text{C}_{60})_3$, ჯაჭვური და გარსული C_{60} და C_{70} -ის პოლიმერები.

ფულერენისმსგავსი ნივთიერება არაორგანული ნაერთია სხვადასხვა მოლეკულებისგან შეკრული სფერული ან სხვა ფორმით. იაპონელმა მკვლევარებმა დაადგინეს, რომ ნახშირბადისგან განსხვავებით, სილიციუმის ატომებს არ შეუძლიათ შექმნან შეკრული სტრუქტურა. ისინი მხოლოდ ვოლფრამის გარშემო აკეთებენ ჰექსაგონალურ შეკრულ სტრუქტურას. ასეთი სტრუქტურები პოტენციალურად გამოსაყენებელია კვანტურ კომპიუტერებში და ახალი ტიპის ზეგამტარებში. თეორიულად ნაწინასწარმეტყველია აზოტის მოლეკულებისგან შემდგარი ჩაკეტილი N_{20} სტაბილური სტრუქტურის არსებობა და თანამედროვე

ეტაპზე ყველაზე უფრო ენერგომოცულობით ფეთქებად ნივთიერებაზე თითქმის სამჯერ უფრო ძლიერ ფეთქებადი ნივთიერება.

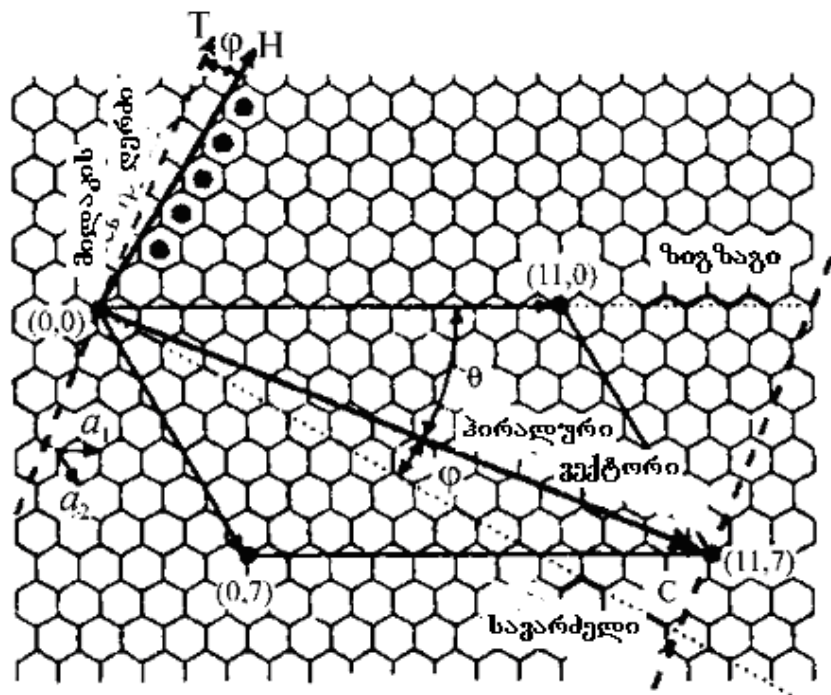
38. ნახშირბადის ნანომილაკები. ჰირალობა.

სფეროიდულ ნახშირბადიან სტრუქტურებთან ერთად ფორმირდება ასევე ცილინდრული, წაგრძელებული სტრუქტურაც, ე. წ. ნანომილაკი, რომელიც გამოირჩევა ფიზიკო-ქიმიური თვისებების მრავალფეროვნებით. ეს პირველად მიიღო 1991 წელს ს. იჯიმიმ. მისი არსებობა და ზოგიერთი თვისებები აღმოჩენამდე თეორიულად იყო ნაწინასწარმეტყველებული. ის შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ცილინდრად შეხვეული გრაფიტის ფურცელი, ანუ გრაფენი – ექვსკუთხედის წვეროებში მოთავსებული ნახშირის ატომებით. ერთშირიან ნანომილაკს აქვს 2 ნმ სიდიდის დიამეტრი და 100 მკმ-მდე სიგრძე, რომელიც კვაზიერთგანზომილებიანია და კარგი ნანომავთულია. ნანომილის ბოლოები შეიძლება იყოს ღია ან დახურული. ნანომილაკის ერთ-ერთი განზომილებითი პარამეტრია „ჰირალობა“, რომელიც მიუთითებს იმ ექვსკუთხედის კოორდინატებს, რომელიც გრაფენის მილად დახვევისას უნდა დაემთხვეს საწყის ექვსკუთხედს. ტერმინი „ჰირალობა“ შემოიღო 1884 წელს ინგლისელმა ფიზიკოსმა ულიამ ტომსონმა (ლორდი კელვინი), მაგრამ ამ ტერმინის გავრცელება მოხდა 1966 წელს შვეიცარიელი ქიმიკოსის ვლადიმირ პრელოვის მიერ.

ნანომილი წარმოდგება წყვილი მთელი რიცხვებით (n,m) , რომელთა ჯამი დიამეტრზე, წრეწირის გასწვრივ ექვსკუთხედების რაოდენობის ტოლია. გრაფენის ორიენტაციის კუთხე მილის დერძის მიმართ განსაზღვრავს ნანომილის გამტარებლობის ხასიათს – მეტალურია თუ ნახევარგამტარული. ნახევარგამტარული მილაკის აკრძალული ზონის სიგანე დამოკიდებულია ჰირალობაზე (შეხვევის კუთხე და მილის დიამეტრი). მეორეს მხრივ, მილის დიამეტრი და შეხვევის კუთხე, ან შეხვევის ბიჯი, ორგანზომილებიანი გრაფენის კრისტალოგრაფიული ელემენტალური უჯრედის ანალოგიაა. მისი ტრანსლაციით მილის გასწვრივ მიიღება ნანომილი (ნახ.38.1).

„შეხვევის ანუ ჰირალური ვექტორი“ $C=na_1+ma_2$, სადაც a_1 და a_2 ჰექსაგონალური უჯრედის ბაზისური ვექტორებია. შეხვევა ისე უნდა მოხდეს, რომ C ვექტორის ბოლო და სათავე ერთმანეთს უნდა დაემთხვეს. თუ გრაფენის ფენის

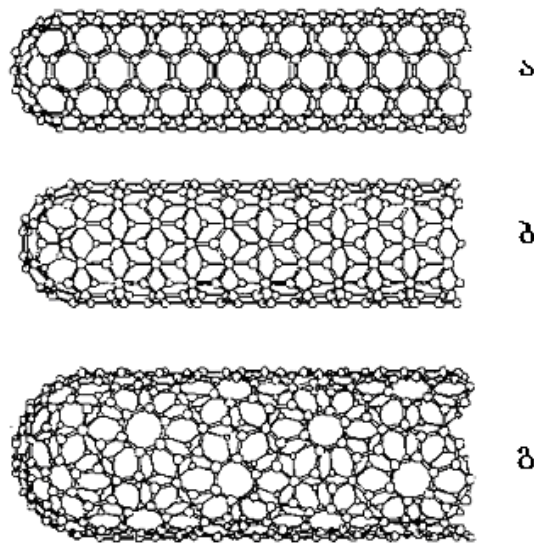
შეხვევისას ჰირალური ვექტორის ბოლოებზე ექვსკუთხედების წყვილი ნანომილის ღერძის მიმართ θ კუთხითაა, რომელიც იცვლება 0-დან 90° -მდე, მაშინ ასეთ ერთშიან ნანომილს ეწოდება ჰირალური. თუ ყოველი ექვსკუთხედის ორი მხარე მილის ღერძის პარალელურია, ასეთ ნანომილს ეწოდება აჰირალური „ზიგზაგის“ ტიპის. აჰირალური „სავარძელის“ ტიპის ნანომილს ყოველი ექვსკუთხედის ორი მხარე მილის ღერძის მართობად აქვს მიმართული. აჰირალურ „ზიგზაგის“ მიმართულებაზე შეხვევისას $m=0$ ან $n=0$, ხოლო „სავარძელზე“ – $n=m$ და ჰირალური მიმართულებით შეხვევისას $m \neq n$, რაც ჩანს ნახ.38.1-დან. T – ტრანსლაციის ვექტორი მიმართულია მილის გასწვრივ და C ვექტორის მართობია. T და C შორის შეხვევის ფართობი ეთანადება ნანომილაკის ერთეულოვან უბანს, რომლის მრავალჯერადი ტრანსლაციით მიიღება ნანომილი.



ნახ.38.1. გრაფენის ჰექსაგონალური ბადის ცილინდრად სხვადასხვა ჰირალურად შეხვევით ნანომილაკის ფორმირების მოდელი: a_1 და a_2 – ორგანზომილებიანი ელემენტალური უჯრედის ბაზისური ვექტორები; θ – მილაკის გასწვრივი ღერძი; – გრაფენის სიმეტრიის ღერძი; – კუთხე მათ შორის; θ – ჰირალური კუთხე.

ჰირალური ინდექსები (n , m) განსაზღვრავენ ნანომილის D დიამეტრს, რომელიც ასე მოიცემა: $D=0,36(m^2+n^2+mn)^{1/2}$, რაზედაც დამოკიდებულია ნანომილაკის ელექტრო, მექანიკური და სხვა თვისებები.

გრაფენის შეხვევა შესაძლებელია მისი სხვადასხვა ღერძის გარშემო, რითაც მიიღება სხვადასხვა ტიპის ნანომილაკი სხვადასხვა მახასიათებლებით. ნახ.38.2-ზე გამოსახულია ასეთი ტიპის სამი შესაძლო ვარიანტი. ნანომილის ზრდის მექანიზმი აქამდე არაა ცნობილი. რადგანაც ერთკედლიანი მილის ზრდისათვის აუცილებელია ნიკელის ან კობალტის კატალიზატორი.



ნახ.38.2. გრაფენის შეხვევის მეთოდზე დამოკიდებული ნახშირბადის ნანომილაკის რამდენიმე შესაძლო სტრუქტურა: სავარძელი (ა), ზიგზაგი (ბ) და ჰირალური (გ).

იდეალური (უღეფექტო) მრავალშრიანი ნახშირბადის ნანომილაკები (მნმ) შედგებიან ურთირთხადგმული, სხვადასხვა დიამეტრების მქონე კოაქსიალური ცილინდრებისგან, ან არიან სხვადასხვა სახის ხვიებები, აქვთ ხახვისებური სტრუქტურა. ყველა შემთხვევაში, ორშრიანი ნახშირბადის ნანომილაკებში (ონმ) შრეებს შორის მანძილი (ვან-დერ-ვაალსის ღრეჩო) ახლოსაა გრაფიტის მესერის მუდმივასთან (0,34 ნმ). სხვადასხვა ფორმის ნანომილაკები ამჟღავნებენ სრულიად განსხვავებულ ელექტრულ, მაგნიტურ, ოპტიკურ თვისებებს. გრაფენის ფურცლის კონკრეტული სქემით შეხვევისგან დამოკიდებულებით ნანომილაკი შეიძლება იყოს მეტალი, ან ნახევარგამტარი. ასე მაგალითად, თუ $|m-n|$ სხვაობნა ჯერადია 3-ის,

ასეთი ნანომილაკები ამჟღავნებენ მეტალურ თვისებებს. მეტალებია ყველა „საგარძლის“ სახის აპირალური ნანომილაკები. ფულერენი და ნანომილაკი ურთიერთ რეაგირებენ და ფორმირდება ახალი უნიკალური სახის სტრუქტურა – ნანომილაკები, რომელთა შიგნით იმყოფება ფულერენი. ასეთ ახალ ნანომილაკებს უწოდებს ნახშირბადული პიპოდები (ნპ) და აღინიშნება C₆₀@ნმ (C₆₀ ფულერენი ნანომილის შიგნით).

პიპოდების შექმნის მექანიზმი დღემდე უცნობია. ვარაუდობენ, მაგალითად, რომ ფულერენი ნანომილაკის შიგნით დიფუნდირებს მისი გახსნილი ბოლოდან ან გადის მისი კედლის დეფექტიდან, ხოლო შემდეგ ვან-დერ-ვაალსის ძალით უკავშირდება შიდა კედელს. გამოთვლებმა აჩვენეს, რომ დიფუზია შესაძლებელია, რადგან ის არ მოითხოვს აქტივაციის დიდ ენერჯიას. მაგრამ პიპოდების მიღება უფრო ალბათიანია კედლის დეფექტში ფულერენის გასვლით.

პიპოდები არაჩვეულებრივები არიან არა მხოლოდ თავიანთი ფორმით, არამედ თვისებებითაც. გახურებისას ისინი ახდენენ არაჩვეულებრივ გარდაქმნებს. მაგალითად, 800°C ტემპერატურამდე გახურებისას C₆₀@ნმ სტრუქტურა არ იცვლება, უფრო მაღლა გახურებისას ორი მეზობელი ფულერენი ერთმანეთს ეკვრის, მიიღება დიმერი, ტრიმერი და შემდეგ გადაიზრდება ნანომილაკიდან წაგრძელებულ ნანოულვაშად და ბოლოს ცილინდრული ფორმის ფრაგმენტად. 1200°C ტემპერატურის შემდეგ, ცალკეული C₆₀ ფულერენები პრაქტიკულად მთლიანად ქრებიან.

უნდა აღინიშნოს, რომ პიპოდებში ფულერენის გარდაქმნები ხდება მხოლოდ მილაკის შიგნით, რომელიც წარმოადგენს უნიკალურ ნანორეაქტორს. სრულიად შესაძლებელია პიპოდებში ამ პროცესების შემდგომმა კვლევებმა შექმნან მათი გამოყენების ფართო პერსპექტივები. მაგალითად, დამზადდეს კოაქსიალური ნანოსადენი – იზოლირებული გარსის შიგნით გამტარი. ასეთი გარსი შეიძლება იყოს ბორის ნიტრიდი BN, რომელიც კარგი იზოლატორია. მასში შევიდეს ფულერენი, ე.ი. შეიქმნას სტრუქტურა C₆₀@BN, შემდეგ გავახუროთ. შედაგად შეიქმნება იზოლატორ BN-ის მილში გაიზრდება მეორე – ნახშირბადის გამტარი მილი.

პიპოდები პერსპექტიული მასალები არიან მიკრო- და ნანოტექნიკაში: ნანოდიოდების, ტრანზისტორების, მასსოვრობის ელემენტების, ლოგიკური სქემების, წყალბადის აკუმულიატორების და სხვა ხელსაწყოთა დასამზადებლად.

მიღების პრობების ოპტიმიზაციამ შესაძლებელი გახადა ნანომილზე მიღებულ ყოფილიყო ფულერენი სიმკვრივე 1 ფულერენი/ნმ-ზე მეტი. ფულერენები

ეკერიან ნანომილაკს ძალიან მყარად: არ წაინაცვლებენ ელექტრომიკროსკოპის ნემსის და ელექტრონული კონის მოქმედებით, არ სცილდებიან 7000°C ტემპერატურამდე გახურებისას და არ იხსნებიან ორგანულ გამხსნელებში, რაც მიუთითებს ნანომილაკთან მათ კოვალენტურ კავშირზე. მათ სამჯერ ნაკლები ძაბვისას აქვს ათჯერ მეტი ემისიური დენები, ვიდრე სწორხედაპირიან ერთფენიან ნანომილაკს.

2004 წელს მეცნიერებმა შექმნეს ნახშირბადის კიდევ ერთი ახალი ფორმა – ფორიანი მყარი მასა, ძალიან მსუბუქი და მაგნიტის მიერ კარგად მიმზიდველი. ეს ნივთიერება მიღებულ იქმნა ნახშირბადის სამიზნის ლაზერით ბომბარდირების მეთოდით. მიღებული მასალის სტრუქტურას ეწოდა ნანოქაფი და მას თვლიან ნახშირბადის მეხუთე ფორმად – გრაფიტის, ალმასის, ფულერენებისა და ნანომილაკების შემდეგ. ნანოქაფი ჰგავს ჭვარტლს და აქვს ძალიან მცირე სიმკვრივე.

ნანოქაფის ერთერთი განსაკუთრებული თვისებაა – მაგნიტის მიერ მიზიდვა, როცა ნახშირბადი არამაგნიტური მასალაა. ეს თვისება და ის, რომ კარგად შთანთქავს ინფრაწითელ სხივებს, ნანოქაფს ხდის ფართოდ გამოყენებად ნივთიერებას მედიცინაში, კერძოდ, ავთვისებიანი სიმსივნის სამკურნალოდ.

საკონტროლო კითხვები:

1. როგორი ბმებია გრაფიტის, ნახშირის და ალმასის მოლეკულებს შორის?
2. რა არის ნახშირბადის ფულერენი და როგორ აღმოაჩინეს?
3. როგორია ფულერენის ზოგადი სტრუქტურა და მისი სახესხვაობა?
4. რა არის ჰილარობა და როგორი სახის ნანომილები ფორმირდებიან?
5. სხვადასხვა პირალობით როგორი გამტარებლობის ნანომილაკები მიიღება?

39. ფულერენის და ნანომილაკის მიღება გრაფიტის ლაზერული აორთქლებით.

ნანოტექნოლოგიის ერთ-ერთი მთავარი მიმართულება და ამოცანაა ნახშირბადის ნანომილაკების სინთეზი, მათი თვისებების კვლევა და პრაქტიკული გამოყენება. მათდამი ინტერესი მიმართულია ორი მხრივ: პირველი ფუნდამენტური ასპექტით, რომ მინიატურული ზომების ნანომილაკებს აქვთ უნიკალური ფიზიკო-ქიმიური თვისებები და მეორე, ამ თვისებების გამო აქვთ ფართოდ გამოყენებითი

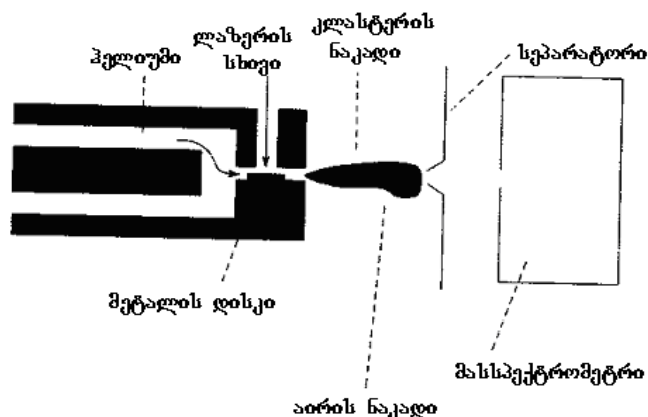
შესაძლებლობები ახალი ტიპის მასალებში და მოწყობილობებში. ნანომილაკების ელექტრული თვისებები, როგორცაა მატარებლების კონცენტრაცია და ძვრადობა, აკრძალული ზონის სიგანე, გამტარებლობა და ა. შ., განისაზღვრება მისი გეომეტრიით, რომლის ძირითადი პარამეტრია ჰირალობა, ანუ გრაფინის ფურცლის კუთხის ორიენტაცია ნანომილაკის ღერძის მიმართ. მაშასადამე, ნანომილაკი წარმოადგენს მინიატურული ობიექტების განსაკუთრებულ კლასს, ელექტრული თვისებების ვარირების ფართო დიაპაზონით და განიხილებიან ნანოელექტრონიკის მომავალ ელემენტებად.

თანამედროვე ეტაპზე შემუშავებულია სხვადასხვა თვისებების მქონე ფულერენების და ნახშირბადის ნანომილაკების მიღების მრავალი მეთოდი, მაგრამ ყველა მათ აქვთ საერთო ის, რომ ფულერენი და ნანომილაკები მიიღებიან ნახშირბადის შემცველი ქიმიური აგრეგატებისგან მაღალი ტემპერატურის პირობებში. ითვლება, რომ ფულერენების მიღება გრაფიტის ორთქლიდან ხდება მათთან ნახშირის ორთქლის ფრაგმენტების თანდათანობითი მიერთებით, რისთვისაც საჭიროა მაღალი ტემპერატურა.

ნახშირბადის სხვადასხვა ალოტროპიული მდგომარეობის მიღებისას ნახშირბადის გაზურ გარემოში, მაღალი ტემპერატურისა და საწყისი პროდუქტების დიდი კონცენტრაციის პირობებში, რეაქცია მიმდინარეობს საკმაოდ ინტენსიურად. ნახშირბადის ატომების მაღალი კონცენტრაცია შესაძლებელია იქნას მიღებული გრაფიტის სუბლიმაციით მასზე მძლავრი სითბური ან პლაზმური ნაკადის, მზის სხივის ან ლაზერის მოქმედებით. გრაფიტის ფენებს შორის ბმის ენერგია 0,29 ევ-ს შეადგენს და მის გასაწყვეტად საჭიროა ~3500K ტემპერატურა. გრაფიტის მაღალტემპერატურაზე გახურებისას არ უნდა ხდებოდეს ამ გარემოს იონიზაცია, ანუ ტემპერატურის წყაროს გარემო არ უნდა ართმევედეს დამატებით ენერგიას. ასეთ გარემოდ აღებულია ჰელიუმი, რომელსაც აქვს მაღალი იონიზაციის ენერგია და მაღალ ტემპერატურაზე არ იონიზირდება. გრაფიტის გასახურებლად გამოიყენება ლაზერი, ენერგიის ნაკადით 10^{12} ვტ/მ² და 1,6მმ ფოკუსირებული სხივის დიამეტრით, რომელიც იძლევა 30000K ტემპერატურას. ამ დროს გამოსავლიანობა 90%-ია. ასეთი დანადგარის სქემა მოცემულია ნახ.39.1-ზე, რომელიც პირველად შექმნა რ. სმოლიმ.

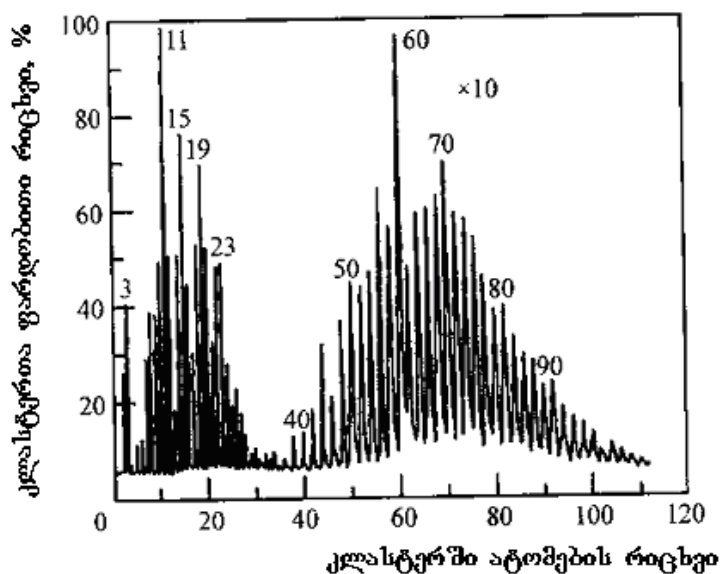
მაღალენერგეტიკული და დიდი ინტენსიობის ლაზერის სხივით ხდება გრაფიტის აორთქლება, გაზური ჰელიუმის ნაკადი წარიტაცებს აორთქლებული ნახშირბადის მცირე ნაწილაკებს მცირე ნახვრეტიან არეში, სადაც ჰელიუმი ფართოვდება, ცივდება ნაკადთან ერთად და კონდენსირდება მცირეატომიან

კლასტერებად. შემდეგ ნაკადი გადის კალორიმეტრით მასს-სპექტრომეტრში, სადაც იზომება მოლეკულის ან კლასტერის მასა. კონდენსირებული ფენა, გრაფიტის ნანონაწილაკებთან ერთად, შეიცავს ფულერენსა და ნანომილაკს.



ნახ.39.1. მეტალის ზედაპირიდან ლაზერული აორთქლებით ნანონაწილაკის მიღების დანადგარის სქემა.

ნახ.39.2-ზე გამოსახულია მასს-სპექტრი, ზემოთაღნიშნული ექსპერიმენტით მიღებული ნახშირბადის სხვადასხვა ატომთა რაოდენობის კლასტერებისათვის.

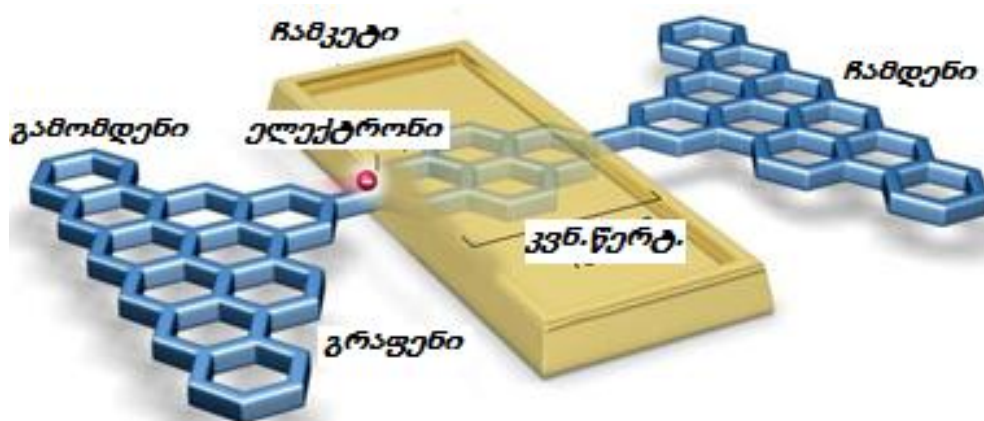


ნახ.39.2. გრაფიტის ლაზერული აორთქლებით მიღებული ნახშირბადის კლასტერის მასს-სპექტრი.

ლაზერული მეთოდის დადებით მხარედ უნდა ჩაითვალოს, აგრეთვე ის რომ, სინთეზირებული ნანომილაკის მახასიათებლები მგრძნობიარენი არიან ლაზერული გამოსხივების პარამეტრების მიმართ. კერძოდ, მიღებული ნანომილაკის დიამეტრი ლაზერული გამოსხივების სიმძლავრის პირდაპირპროპორციულია.

40. ფულერენის და ნანომილაკის თვისებები და გამოყენება.

ნანოსისტემების ბევრი უნიკალური თვისებები განისაზღვრება, ერთი მიმართულებით მაინც, მათი ზომითი შეზღუდვებით. სხვადასხვა თვისებებისათვის (ელექტრული, მექანიკური, მაგნიტური, კვანტური, ქიმიური და სხვა) კრიტიკული ზომები შეიძლება იყოს სხვადასხვა, რაც განისაზღვრება ამ მასალის გეომეტრიულ ზომასა და მასში თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილის თანაფარდობით.



ნახ.40.1. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორი

გრადენის გამოყენების ერთ-ერთი საინტერესო უბანია მისი გამოყენება ერთელექტრონიან ტრანზისტორში (ნახ.40.1), სადაც გამომდენი, არხი და ჩამდენი წარმოადგენს გრადენს.

ნახშირბადის ნანომილაკების ერთ-ერთი საინტერესო თვისებაა, რომ მისი დიამეტრისა და ჰირალობისგან დამოკიდებულებით, ის შეიძლება იყოს მეტალი ან ნახევარგამტარი. ნანომილაკის სინთეზის პროცესში შესაძლებელია მილაკში შერევა, რადაც ნაწილი იყოს ნახევარგამტარული თვისებების, ხოლო დანარჩენი – მეტალურის. ჩვეულებრივ, მეტალური თვისებები ახასიათებთ სავარძლიან სტრუქტურებს. ნახშირბადის ნანომილაკის ელექტრული თვისებების შესასწავლად იყენებენ მასკანირებულ გვირაბულ მიკროსკოპს (მგმ) ლოკალური ელექტრონულ სპექტროსკოპიის რეჟიმში. დიფერენციალური გამტარებლობის ძაბვაზე დამოკიდებულებით დადგინდა, რომ მეტალური გამტარებლობისას სრულდება ომის კანონი, ხოლო ნახევარგამტარულისას – განისაზღვრა აკრძალული ზონის სიგანე, რომელიც შეადგენდა 0,7 ევ-ს. დადგინდა, რომ აკრძალული ზონის სიგანე მილაკის დიამეტრის უკუპროპორციულია და დიამეტრის გადიდებით მიისწრაფის ნულისაკენ. ემპირიულად მოცემულია: $E_g=0,9/d$, სადაც E_g აკრძალული ზონის სიგანეა ევ-ში და d მოლოს დიამეტრი ნმ-ში. ითვლება, რომ E_g იცვლება 0,4 – 1,0 ევ ინტერვალში. ნახშირბადის მეტალურ ნანომილაკს აქვს ძალიან დიდი

ელექტრული გამტარებლობა. დადგენილია, რომ მას შეუძლია გაატეროს კვადრატულ სანტიმეტრზე მილიარდი ამპერი დენი. შესაბამის პირობებში სპილენძის სადენი დნება გამოყოფილი სითბოს ხარჯზე. ნახშირბადის ნანომილაკის ასეთი დიდი გამტარებლობა აიხსნება მათში ძალიან მცირე დეფექტების არსებობით, რაზედაც თითქმის არაა გაბნევა, ანუ ელექტრონები არიან ბალისტიკური. ამიტომ დიდი დენი ნანომილაკს არ ახურებს, როგორც ეს ხდება სპილენძში. ამავე მიზეზით ისინი არიან კარგი სითბოგამტარებიც. ნანომილაკი თითქმის ორჯერ მეტად სითბოგამტარია, ვიდრე ალმასი. ყოველივე ეს იძლევა საშუალებას, რომ ნახშირბადის ნანომილაკები გამოყენებული იყოს სქემებში ელემენტაშორის მიმყვანებად. ნახევარგამტარებლობის ტიპის ერთშრიან ნახშირბადის ნანომილაკებში დენის მატარებლების ძვრადობა აღწავს 15000 სმ²/ვ.წმ მნიშვნელობას, რაც მიუღწეველია ჩვეულებრივ ნახევარგამტარებში.

პირველივე ცდებმა აჩვენა, რომ ნანომილაკი ხასიათდება უნიკალური მექანიკური თვისებებით. ნანომილის გასწვრივ დრეკადობის მოდულის მნიშვნელობა მდებარეობს 1,28 – 1,8 ტპა ინტერვალში. შედარებისათვის უნდა აღინიშნოს, რომ ფოლადისათვის იუნგის მოდული 0.21 ტპა-ია, რაც ნიშნავს, რომ ნახშირბადის ნანომილაკის იუნგის მოდული ათჯერ მეტია, ვიდრე ფოლადისა. ეს ნიშნავს, რომ ნახშირბადის ნანომილი ძნელად უნდა იღუნებოდეს, მაგრამ რადგან მილი ძალიან წვრილია და უდეფექტო ადვილად იღუნება და არ ტყდება. ამის მიზეზი ისიცაა, რომ ნახშირბადის მილის კედლები შედგება ექვსკუთხედებისაგან, გაღუნვისას ის იცვლის თავის ფორმას, მაგრამ არ ირღვევა. მექანიკური მახასიათებლებით მრავალშრიანი ნახშირბადის ნანომილაკებიც უკეთესია ფოლადზე.

ნახშირბადის ნანომილაკის დერძის გასწვრივ მცირე ძაბვის მოდებისას ხდება მისგან ელექტრონების ინტენსიური ემისია, რასაც ეწოდება ველითი ემისია. ეს ეფექტი ადვილად დაიმზირება, როცა ორ პარალელურ ფირფიტას შორის, სადაც ერთ-ერთი ნანომილაკია, მოდებულია მცირე ძაბვა. ამ ეფექტის გამოყენება შეიძლება თხელი სიბრტყული დისკის გასაუმჯობესებლად და ემისიური კათოდების შესაქმნელად.

ნახშირბადის ნანომილაკები შეიძლება გამოყენებულ იქნან ლითიუმით მუხტის გადამტანიან ბატარეებში. გამოთვლებით დადგენილია, რომ მილაკში ნახშირბადის ყოველ ექვს ატომზე შესაძლებელია ლითიუმის ერთი ატომის მოთავსება. ერთ-ერთი საინტერესო შესაძლებლობაა ნახშირბადის ნანომილაკის გამოყენება წყალბადის შესანახად, თბოელემენტების კონსტრუირებისას მომავალი

ავტომობილების წარმოებაში ელექტრო ენერჯის წყაროდ (აკუმულიატორად). მიღებული მაქსიმალური ტევადობა შეადგენს 1200 მლახთ/კგ. ეფექტური გამოყენება ჰპოვეს ნახშირბადის ნანომილაკებმა სუპერკონდენსატორებში, რომელიც წარმოადგენს ელექტროლიტში ჩაშვებულ და ერთმანეთისგან მემბრანა-სეპარატორით გამოყოფილი ორი ელექტროდის სისტემას. მათში გამოიყენება ორმაგი ელექტრული შრის ეფექტი. ნახშირის ნანომილაკებიან სუპერკონდენსატორებში ელექტროდებს შორის მანძილი მცირდება მიკრონიდან ნანომეტრამდე.

შექმნილია ოთახის ტემპერატურაზე მომუშავე ველის ტრანზისტორი, სადაც ჩამკეტად გამოყენებულია ნახშირბადის ნანომილი. მასზე ძაბვის მცირე ცვლილება იწვევს ნანომილის გამტარებლობის 10^6 - ჯერ და უფრო მეტად ცვლილებას, რაც უკეთესია, ვიდრე სილიციუმიან ველის ტრანზისტორებისთვის. ასეთი ტრანზისტორის გადართვის დრო შეადგენს ტერაჰერცებს, რომელიც 1000-ჯერ უფრო სწრაფია ზემოთ აღნიშნულთან შედარებით.

ნახშირბადის ნანომილაკების გამოყენება შესაძლებელია ბიოლოგიურ და სამედიცინო ტექნოლოგიების ინტეგრაციისათვის. ნანომილაკის და ბიომოლეკულის მოდიფიცირების ბიოლოგიური შეთავსების საკითხი, რომელიც საწყის სტადიაშია, სწრაფად ვითარდება. მოდიფიკაცია შესაძლებელია გახსნილი მილაკის შიგნით, ღრუში დეზოქსირიბონუკლეინის მჟავის (დნმ) შეყვანით, რომელსაც შეუძლია C ციტოქრომის ელექტრონის გადატანა. მოდიფიცირების საკითხის გადაწყვეტის შემდეგ შესაძლებელი იქნება ამა თუ იმ ორგანოს უჯრედთან ნახშირბადის ნანომილაკით წამლის საშუალების მიტანა, ისე, რომ არ დაზიანდება ჯანმრთელი უჯრედი.

მრეწველობის ერთ-ერთი დარგი, სადაც წარმატებით გამოიყენება ნახშირის ნანომილაკები, არის – მშენებლობა. ამ მიმართულებით ყურადღება გადატანილია ახალი, უფრო გამძლე, მსუბუქ და იაფ სამშენებლო მასალის შექმნაზე. როგორც ამ თემატიკაზე სხვადასხვა პუბლიკაციის ანალიზი აჩვენებს, დიდი მიღწევები უკვე სახეზეა. კარგი მექანიკური თვისებების მქონე ნახშირის ნანომილის მოცულობით 5%-ის შეყვანით ალუმინში, მისი სიმტკიცე იზრდება ორჯერ, 10%-ის შეყვანით – ექვსჯერ, ხოლო ფოლადის სიმტკიცე იზრდება შვიდჯერ მასში ნანომილაკის – 30% -ის შეყვანისას. აგრეთვე, შექმნილია ანტიმიკრობული თვისების მქონე საღებავი, რომელიც უსაფრთხოა ჯანმრთელობისათვის, გამძლეა გარე ფაქტორების მოქმედების მიმართ და ანტიკოროზიულია.

ნახშირბადის ნანომილაკებს აქვთ უნიკალური ფიზიკო-ქიმიური, ოპტიკური, მექანიკური და სითბური თვისებები. ბევრი მათგანი ბოლომდე არაა შესწავლილი, ბოლომდე არაა ცნობილი მათი ზრდის მექანიზმი. შესაძლებელია ბევრი სხვა თვისებებიც არაა აღმოჩენილი.

საკონტროლო კითხვები

1. აღწერეთ გრაფიტის ლაზერული აორთქლების მეთოდი;
2. დაახასიათეთ ფულერენის მიღების ხერხები;
3. ჩამოთვალეთ ფულერენის და ნანომილაკის ძირითადი თვისებები და გამოყენების სფერო;
4. ჩამოთვალეთ ფულერენის ბუნებრივი წყაროები.

41. ელექტრონული მიკროსკოპიის გაზომვის არსი და მეთოდები

მიკრო- და ნანოზომის ობიექტების შექმნისათვის, ცხადია უნდა იყოს შესაძლებლობა მასალების ატომური შედგენილობის, ფორმის და სტრუქტურის ნანოდონეზე განსაზღვრა. ფართოდ გავრცელებული ოპტიკური მიკროსკოპიის შესაძლებლობები შეზღუდულია, მისი დაბალი გარჩევისუნარიანობის გამო, რომელიც განისაზღვრება ხილული სინათლის ტალღის სიგრძით. ამიტომ, მასთან შედარებით, ელექტრონული ნაკადი უფრო ეფექტურია და გარჩევისუნარიანობა ბევრად მეტი. ნანონაწილაკისათვის „მიკროსკოპიის“ ტერმინის გამოყენება პროცესის არსს სრულად არ ასახავს, უფრო მოხერხებული იქნებოდა ტერმინი „ნანოსკოპია“.

თანამედროვე ეტაპზე არსებობს ნანოსტრუქტურების ანალიზისა და დიაგნოსტიკის მრავალი მეთოდები. ეს მეთოდები უნდა იყოს ნიმუშისათვის არადამრღვევი და ატომური და ელექტრონული სტრუქტურის დიდი სიზუსტით გამსაზღვრელი. ეს მეთოდებია: დიფრაქციული (რენტგენოსტრუქტურული, ელექტრონოგრაფიული); სპექტროსკოპიული (ოვე-ელექტრონული სპექტროსკოპია, იწ-სპექტროსკოპია, მეორადი ელექტრონების მას-სპექტროსკოპია) და რეზონანსული (ელექტრონული პარამაგნიტური, ბირთვული მაგნიტური,

ბირთვული გამა-რეზონანსული). ამ მეთოდებით შესაძლებელია განისაზღვროს ნაწილაკთა სტრუქტურული დარღვევების ხარისხი, ზედაპირული ჩანართების არსებობა, ელექტრონების სიმკვრივეთა განაწილება და ა.შ.

ყველა მიკროსკოპიის ამოცანაა – დამკვირვებელს მისცეს მცირე ობიექტების გადიდებული გამოსახულება იმ ზომამდე, რომ შესაძლებელი იყოს განასვას ამ დეტალების ფიზიკური მახასიათებლები. ასე მაგალითად, ოპტიკური მიკროსკოპი იყენებს სინათლის ნაკადს და ობიექტის სხვადასხვა უბნებს შორის შთანთქმის, არეკვლის და გარდატეხის კოეფიციენტებს შორის სხვაობას. მისი გარჩევის უნარიანობა, რელიეს ოპტიკური ტექნიკის საფუძველზე, განისაზღვრება სინათლის ტალღის სიგრძის ნახევრით. ამიტომ, გარჩევის უნარიანობა პრაქტიკულად შემოსაზღვრულია 200ნმ-ით. შექმნილი სიტუაციიდან გამოსავალია ის, რომ შეიქმნას ხელსაწყო, სადაც გამოყენებულ იქნება ტალღური გამოსხივება უფრო მოკლე ტალღის სიგრძით, ანუ გამოსხივება არატალღური ბუნებით.

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ ელექტრონს აქვს დუალიზმის ბუნება, ანუ ის ნაწილაკთან ერთად არის ტალღა და შეიძლება მისი მართვა ელექტრული და მაგნიტური ლინზებით, ისე როგორც გეომეტრიულ ოპტიკაში სინათლის მართვა ოპტიკური ლინზებით. ამ საფუძვლებს ეყრდნობა ელექტრონული მიკროსკოპიის ძირითადი პრინციპები. აქ სინათლის ნაცვლად გამოიყენება ელექტრონები, რომლებსაც აქვთ ბევრად მოკლე ტალღის სიგრძეები და გარჩევის უნარიანობაც ბევრად გაზრდილია. ელექტრონების გაბნევა ყოველთვის მოხდება, ამიტომ ელექტრულ მიკროსკოპში უნდა იყოს მაღალი ვაკუუმი ელექტრონების მთელ გზაზე.

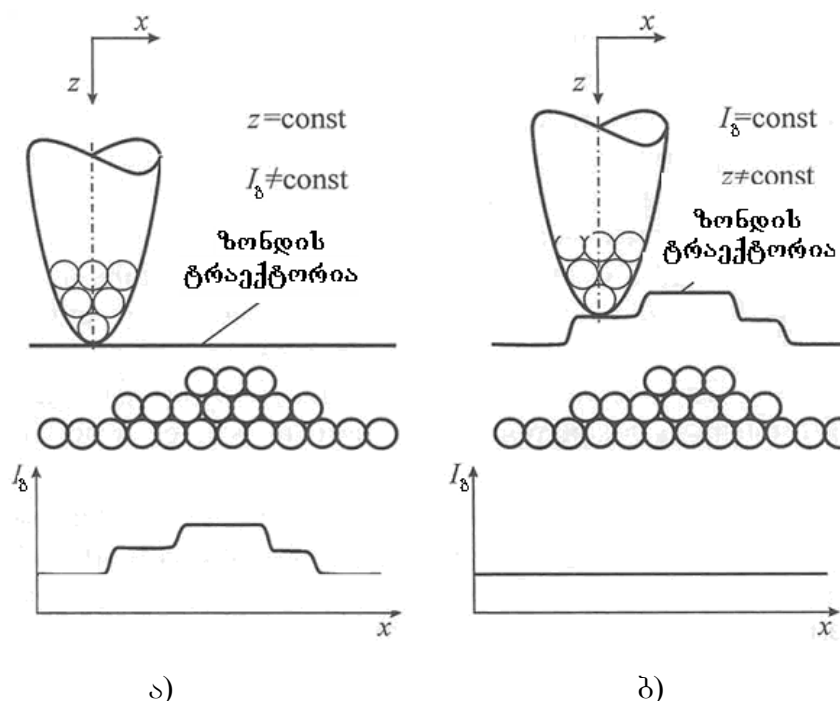
მასკანირებელი ზონდური მიკროსკოპია (მზმ) – ზედაპირის ლოკალური თვისებებისა და მორფოლოგიის შესწავლის ყველაზე თანამედროვე მეთოდია, რომელიც გამოირჩევა დიდი გარჩევის უნარიანობით. შექმნილია მასკანირებელი ზომდერი მიკროსკოპის მთელი სერია – ხელსაწყოები, რომლებშიც გამოსაკვლევი ზედაპირის სკანირება ხდება სპეციალური ნემს-ზონდით (მთელ ზედაპირზე ნამსის გადაადგილებით განსაზღვრული ბიჯით), შედეგად რეგისტრირდება გვირახული დენი (გვირახული მიკროსკოპი). ზონდური მიკროსკოპები არიან არა მარტო გამზომი ხელსაწყოები, არამედ არიან ინსტრუმენტები, რომელთა დახმარებით შეიძლება ფორმირდეს და შექმნას ნანოსრუქტურები.

42. მასკანირებული გვირაბული მიკროსკოპი.

მასკანირებული გვირაბული მიკროსკოპი (მგმ) შექმნეს ბინიგმა და რიორერმა, რისთვისაც 1986 წელს მიენიჭათ ნობელის პრემია. ამ ხელსაწყოს მუშაობა ემყარება მეტალურ ნემსსა და მასთან ახლოს მყოფ გამტარ ნიმუშს შორის გვირაბული დენის აღრიცხვის პრინციპს. ნემსსა და ზედაპირს შორის მანძილი რეგულირდება პიეზოელემენტით.

თუ ეს მანძილი $\sim 1\text{ნმ}$ -ია, მაშინ ზონდსა და ნიმუშს შორის აღიძვრება გვირაბული დენი, რომელიც მკაცრადაა დამოკიდებული ამ მანძილზე. ამ მანძილზე ხდება ნემსის ბოლოზე მყოფ ელექტრონის და ნიმუშის ელექტრონის ტალღური ფუნქციები ურთერთ გადფარვა და ზონდზე მცირე ($0,01 \dots 10$ ვ) ძაბვის მოდებიოსას აღიძვრება გვირაბული დენი ($1 \dots 10^3$ პა). ცხადია, რომ მგმ-ის მუშაობა უნდა ხდებოდეს მაღალი ვიბროიზოლაციისა და მაღალი ვაკუუმის პირობებში, რადგან ვიბრაცია და ჰაერის ერთი მოლეკულაც კი გააკეთებს მოკლე ჩართვას და დენი არ გაიზომება.

გამოიყენება მგმ-ის ორი სახე: სკანირების მუდმივი სიმაღლით, ანუ $z = \text{Const}$, რაც მოცემულია ნახ.42.1 ა)-ზე და გვირაბული მუდმივი დენით, ანუ $I_g = \text{Const}$, რომელიც გამოსახულია ნახ.42.1 ბ)-ზე. განვიხილოთ მათი მუშაობის პრინციპი.



ნახ.42.1. მასკანირებული გვირაბული მიკროსკოპის ორი სახე: სკანირების მუდმივი სიმაღლით (ა) და გვირაბული მუდმივი დენით (ბ).

სკანირების მუდმივი სიმაღლის მიკროსკოპში ძირითადი სიგნალია გვირაბული $I_{\text{გ}}$ დენის სიდიდის დაფიქსირება. ის დამოკიდებულია ზედაპირის ტოპოგრაფიაზე – მასზე არსებული აწეულებების, ჩაწეულებების, ნაკაწრების, საფეხურების (მათ შორის ერთატომიანის), ადსორბირებული ატომების და ვაკანსიების რაოდენობაზე. ზედაპირზე არსებული ატომი, რომელზედაც გადადის ზონდი, განსაზღვრავს გვირაბული დენის სიდიდეს. რადგანაც $I_{\text{გ}}$ დამოკიდებულია Δz -ზე, ამიტომ ზონდიდან სიგნალი ძლიერდება და ჩაიწერება $I_{\text{გ}}$ -ს ცვლილება ზედაპირის ცვლილების მიხედვით.

ამ მეთოდის დადებითი მხარე ისაა, რომ სკანირების სიჩქარეა დიდი, რაც იძლევა საშუალებას დაუკვირდეთ გამოსაკვლევი ზედაპირის ცვლილების დინამიკას. უარყოფით მხარედ ითვლება ის, რომ $I_{\text{გ}}$ დაფიქსირებისათვის ზონდიდან ზედაპირამდე მანძილი უნდა იყოს მცირე, ანუ ზედაპირი უნდა იყოს რაც შეიძლება მკაცრად პარალელური.

ამ მეთოდის ალტერნატიული მეთოდია, როდესაც ზონდის ვარირებით ზედაპირის მიმართ (Δz ყოველთვის მუდმივია) შენარჩუნებულია გვირაბული $I_{\text{გ}}$ დენის სიდიდის მუდმივობა. ვარირება ხორციელდება უკუკავშირის წრედით და შესაბამისი მექანიკური მექანიზმით (პიეზოაკტუატორი). რადგან საჭიროა სიგნალის დამუშავება უკუკავშირის ელექტრონიკით, გაძლიერება და გადაცემა მექანიკურ მექანიზმზე, ამიტომ უნდა მოხდეს უკუკავშირის აწეობა ყოველ გადაადგილებაზე. ეს ამცირებს სკანირების სიჩქარეს, მაგრამ იძლევა საშუალებას ზუსტად დავიცვათ მანძილი ზონდსა და ზედაპირს შორის და შევისწავლოთ სხვადასხვა ტოპოლოგიის ზედაპირები.

არსებობს მგმ-ის რამდენიმე მოდიფიცირებული მეთოდი, ერთ-ერთი ასეთია **ლოკალური სპექტროსკოპია**. ზედაპირის ერთ რომელიმე წარტილზე ზონდის გაჩერებისას, მასში ძაბვის ვარირებით შეიძლება გადაღებულ იქნას გადასასვლელის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი (ვამ). ეს იძლევა საკვლევი ნიმუშის ზედაპირის უბანში ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრის დადგენას.

მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპის მნიშვნელოვანი ნაკლია ის, რომ გამოკვლევისათვის გამოდგება მხოლოდ ელექტროგამტარი მასალები, რადგანაც ზონდსა და საკვლევ ზედაპირს შორის უნდა გაიაროს დენმა. ამიტომ, ის გამოიყენება მეტალების, ნადნობების, ზეგამტარების და ნახევარგამტარების ზედაპირების შესწავლისათვის.

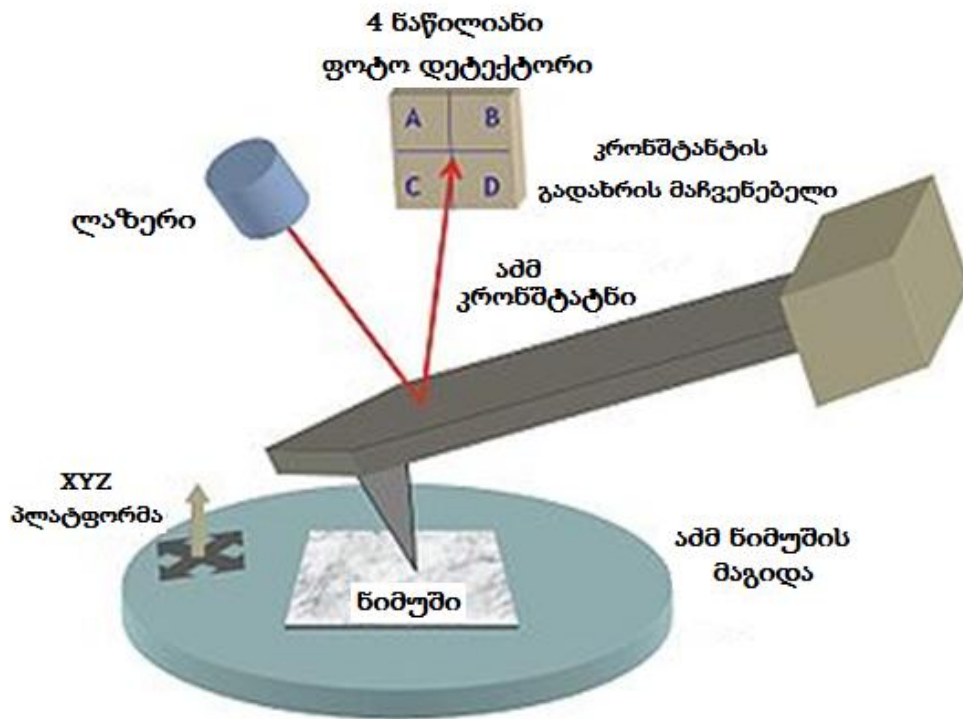
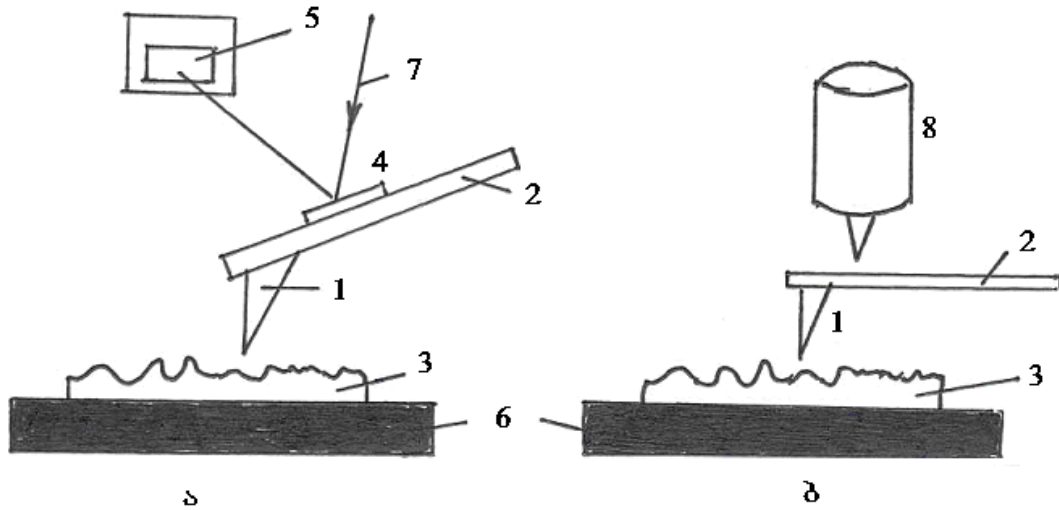
43. ატომურ-ძალური მიკროსკოპია.

ატომურ-ძალური მიკროსკოპია (აძმ) შექმნა ბინინგმა, თანაავტორებთან ერთად, გვირაბული მიკროსკოპიის შექმნიდან რამდენიმე ხანში. ყველა სახის აძმ-ის მუშაობის პრინციპი მდგომარეობს ზონდის და ზედაპირის მცირე მანძილზე ურთიერთმოქმედი ე. წ. დისპერსიული ძალის გაზომვაში. ეს ძალა თვითაღზნებადი, ფლუქტუაციური ძალაა, რომელიც მყისიერად წარმოიქმნება დიპოლური მომენტების შექმნით. შექმნილი დიპოლი ახდენს მეზობელი ატომების ელექტრონული გარსის პოლარიზაციას და მცირე მანძილზე მათში ქმნის ლოკალურ დიპოლურ მომენტს. ინდუცირებული მომენტების მოქმედება მცირე მანძილზე იწვევს ატომების მიზიდვას, რომელიც კიდევ უფრო მიახლოებისას იცვლება განზიდვით, რომელიც გამოწვეულია ელექტრული გარსების მოქმედებით. ასეთი თვითაღზნების ძალების შექმნის მექანიზმი დაამუშავა გასული საუკუნის 30-იან წლებში ინგლისელმა ფიზიკოსმა ლონდონმა და ეწოდა დისპერსიული ურთიერთქმედება.

როგორც წესი, ზონდი თავსდება დრეკადი ფირფიტის ერთ ბოლოზე, რომლის მეორე ბოლო ხისტადაა დამაგრებული (ნახ. 43.1). ორ მოლეკულს შორის მოქმედების ძალა მკვეთრადაა დამოკიდებული მათ შორის მანძილზე. ურთიერთმოქმედი სხეულებია ზონდი (ნახ.43.1-ზე1) და საკვლევი ზედაპირი (ნახ.43.1-ზე2). მათი დაახლოება საჭირო მანძილამდე და სკანირება ხორციელდება პიეზოელექტრული ტრანსლიატორით (ნახ.43.1-ზე6). ძალების აღძვრისას (მიზიდვა ან განზიდვა) შეიცვლება მანძილი ზონდსა და ზედაპირს შორის, რაც დაფიქსირდება ან ფოტოდოდით (ნახ.43.1-ზე5) ან გვირაბული ზონდით (ნახ.43.1-ზე 8). ზონდად შეიძლება იქნას გამოყენებული 5÷50 ნმ-ის დიამეტრის სილიციუმის მონოკრისტალი ან ვოლფრამი.

უკუკავშირის მექანიზმი რეაგირებს ოპტიკური სხივის სვლის ცვლილებას და მოქმედებს პიეზოელექტრულ გარდამქმნელზე, რომელიც არეგულირებს ზედაპირიდან ზონდამდე მანძილს. აძმ-ში საკვლევი ზედაპირის სკანირება ხდება „ზედაპირზე მუდმივი ძალით“ (როგორც მგმ-ში „მუდმივი დენით“). პრეციზიული მართვის პრინციპი, რომელიც დამყარებულია უკუკავშირზე და საკვლევი ზედაპირის რელიეფის ნანოსკოპური გაზომვა აძმ და მგმ-ს აქვთ ერთნაირი.

აძმ შეიძლება გამოყენებულ იქნას ნებისმიერი მასალის (გამტარის, დიელექტრიკის და ნახევარგამტარის) ზედაპირის რელიეფის ნანოდონეზე განსაზღვისათვის. მისი საშუალებით დაიმზირება სტრუქტურული ლოკალური



ბ

ნახ.43.1. ატომურ-ძალური მიკროსკოპის მუშაობის პრინციპი, სიგნალის ფოტოდოდით (ა), გვირაბული ზონდით (ბ) და საერთო (გ) ფიქსაციით: 1-ზონდი (ნემსი); 2-დრეკადი ფირფიტა; 3-საკვლევი ზედაპირი; 4-სარკე; 5-ფოტოდოდო; 6-პიეზოფლექტრული ტრანსლიატორი; 7-ლაზერის სხივი და 8-გვირაბული ზონდი.

დეფექტები, მინარევები, სხვადასხვა ჩართვების საზღვრები, ბიოლოგიური ობიექტები და სხვა ფუნდამენტალური თუ გამოყენებითი ხასიათის ამოცანები.

44. მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპია.

მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი (მსმ) არეგისტრირებს სითბოს განაწილებას ნიმუშის ზედაპირზე. მისი მგრძობიარობაა 50 ნმ, რადგანაც უფრო მცირე მანძილზე ისეთი მაკროსკოპული სიდიდე, როგორც ტემპერატურაა შეუძლებელია. მსმ-ის ზონდი არის, ალბათ, მსოფლიოში ყველაზე მცირე თერმომეტრი: მას შეუძლია გაზომოს ზედაპირის ტემპერატურის ცვლილება გრადუსის 10^{-4} ნაწილის სიზუსტით, რამდენიმე ათეულ ნმ მანძილზე. ზონდი წარმოადგენს 30 ნმ დიამეტრის მონიკელბულ ვოლფრამის მავთულს. W – Ni მუშაობს, როგორც თერმოწყვილი. როცა გამთბარი ზონდის წვერო მიუახლოვდება საკვლევე (მყარ) ნიმუშს, რომელიც სითბოს უფრო კარგი გამტარია, ვიდრე ჰაერი, წვეროს სითბოდანაკარგები გაიზრდება. ის გაცივდება და თერმოწყვილის თერმოელექტრომამოძრავებელი ძალა (თემძ) შემცირდება ღრეჩოს ზომის შეცვლის პროპორციულად. და პირიქით, ზონდის ზედაპირიდან დაცილებისას თემძ იზრდება. მაშასადამე, სითბოს ცვლილება ადგენს ზედაპირის ტოპოლოგიას, ისე როგორც გვირაბულ მიკროსკოპში – დენის ცვლილება. მსმ უფრო ხშირად გამოიყენება ცოცხალ უჯრედში ტემპერატურის კარტოგრაფირებისას.

საკონტროლო კითხვები:

1. რა პრინციპზე მუშაობს მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპი?
2. რა დადებითი და უარყოფითი მხარეები აქვს მასკანირებელ გვირაბულ მიკროსკოპს?
3. რა პრინციპზე მუშაობს ატომურ-ძალური მიკროსკოპი?
4. რა პრინციპზე მუშაობს მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი?

საკითხავი მასალა

45. კავშირი ტალღურ და კვანტურ მოვლენებს შორის

გამოსხივების თეორიიდან მივედით იმ დასკვნამდე, რომ ელექტრონი ნაწილაკიც და ტალღაცაა, ანუ აქვს დუალიზმი. მაშინ, ელექტრომაგნიტური ტალღის გავრცელება და ინტერფერენცია შეიძლება აღიწეროს მაქსველის *ტალღური* თეორიით. მეორეს მხრივ, ამ ენერგიის ნივთიერებაზე მოქმედება შეიძლება აღიწეროს სინათლის კვანტების მოქმედებით, ანუ *ნაწილაკთა* მოქმედებით. რადგანაც ფოტონები ვრცელდებიან სინათლის სიჩქარით, მათი მასა, ენერგია და იმპულსი უნდა განისაზღვრონ რელატივისტური მექანიკით.

აინშტაინის ფარდობითობის თეორიე თანახმად \checkmark სიჩქარით მოძრავი ნაწილაკის მასა:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (45.1)$$

გავამრავლოთ ეს ეფექტური მასა c^2 -ზე და მნიშვნელი გავშალოთ მწკრივად, მაშინ:

$$mc^2 = m_0c^2 + \frac{1}{2}m_0v^2 + \frac{3}{8}m_0\frac{v^4}{c^2} + \dots \quad (45.2)$$

და ჩამოვაყალიბოთ შემდგენაირად: m_0 უძრაობის მასის მქონე ნაწილაკი უკავშირდება m_0c^2 ენერგიას. ნიუტონის მექანიკის თანახმად, $v \ll c$ სიჩქარით მოძრავ ნაწილაკს აქვს $\frac{1}{2}m_0v^2$ კინეტიკური ენერგია. ფოტონისთვის, რომელსაც არა აქვს უძრაობის მასა, სამართლიანია (2.9)-ის მხოლოდ მარცხენა მხარე. ფოტონის ენერგია:

$$E = h\nu = mc^2, \quad (45.3)$$

აქედან ფოტონის მასა:

$$m = \frac{E}{c^2} = h\nu/c^2 = 7,36 \cdot 10^{-51} \nu, \quad \text{კგ} \quad (45.4)$$

ხოლო იმპულსი

$$P = mc = h\nu/c = h/\lambda \quad (45.5)$$

(45.3) და (45.5) განტოლებების თანახმად სინათლე შეიძლება განვიხილოთ ან კორპუსკულარული მიდგომით – ფოტონის ენერგიით და იმპულსით, ან ალვიქვით, როგორც ტალღა – სიხშირით და ტალღის სიგრძით. დე ბროილმა გააკეთა პოსტულირება დუალიზმის შესახებ, რომ კვანტური ტოლობა ენერგიასა და იმპულსს შორის უნივერსალურია და ასეთია:

$$E = h\nu$$

$$P = mv = h/\lambda \quad (45.6)$$

დე ბროილის ამ განტოლებით ნებისმიერი ნაწილაკის მოძრაობა შეიძლება განვიხილოთ, როგორც ტალღური მოვლენა. ნაწილაკის მოძრაობა აღიწერება სტატისტიკური მოვლენით და მისი განაწილება განისაზღვრება ტალღური სურათით.

ასეთი მნიშვნელოვანი დებულება დამტკიცდა ცდით, როცა დაიმზირა ელექტრონების დიფრაქცია ნიკელის მესერზე დევისონის და ჯერმერის მიერ. გამოთვლებმა აჩვენა, რომ გაბნეული ელექტრონების ტალღის სიგრძე უნდა ყოფილიყო:

$$\lambda = h/mv = h/P \quad (45.7)$$

თანახმად დე ბროილის გამონათქვამისა.

ნებისმიერი მძიმე ნაწილაკებიც ამჟღავნებენ დუალიზმს, მაგრამ მათი მოკლე ტალღების გამო ტალღური ბუნების დემონსტრაცია ძნელია. ელექტრომაგნიტური ტალღები შეიცავენ მრავალი ფოტონის სტატისტიკურ ინფორმაციას. ამიტომ გამოსხივების ინტენსიობა, გამოსატული პოტინგის ვექტორით, ფოტონების საშუალო რიცხვია, გამავალი ფართის ერთეულში, დროის ერთეულში, ანუ ფოტონების ნაკადის სიმკვრივე გამრავლებული კვანტის ენერგიაზე:

$$|S| = \bar{N} h\nu, \quad \text{ვტ/მ}^2 \quad (45.8)$$

თუ N ძალიან მცირე რიცხვია, ადგილი აქვს მნიშვნელოვან სტატისტიკურ ფლუქტუაციას და ელექტრომაგნიტური თეორია აზრს კარგავს. მეორე მხრივ, დე ბროილის ტალღა დაკავშირებულია ცალკეული ნაწილაკის ლოკალიზაციასთან. იქ, სადაც ტალღა ძლიერია, ალბათურია, რომ იმყოფებოდეს ნაწილაკი, სადაც სუსტია – ნაწილაკი არაა. სივრცის ნებისმიერ წერტილში დე ბროილის ტალღის

ინტენსიობა ახასიათებს მოცემულ წერტილში ნაწილაკის არსებობის ალბათობას.

ნიუტონის მექანიკა იძლეოდა, რომ თუ მოცემული იყო საწყისი პირობები, დროის ნებისმიერ მომენტში შეიძლებოდა ზუსტად გაგვენახაზდერა ნაწილაკის მდებარეობა და იმპულსი. ახლა აღმოჩნდა, რომ ეს პირობა ეკუთვნის მხოლოდ მაკროსკოპულ სამყაროს. როგორც გეომეტრიული ოპტიკა იცვლება ტალღური ოპტიკით, ასევე ნიუტონის მექანიკა იცვლება ახალი ტალღური მექანიკით. ეს უკანასკნელი ეფუძნება დე ბროილის განტოლებას, როცა ტალღის სიგრძე უთანადდება მოცემული ამოცანის მახასიათებელ რაღაც სიგრძეს.

როდესაც გაზომვისას საქმე გვაქვს მეტრებთან, კილოგრამებთან და წამებთან, დე ბროილის ტალღის სიგრძე უმნიშვნელოა. თუ 1კგ-ის მქონე მასა მოძრაობს 1მ/წმ სიჩქარით, მაშინ (45.7)-ის თანახმად ტალღის სიგრძე:

$$\lambda = h/1 \cdot 1 = 6,623 \cdot 10^{-34}, \text{ მ} \quad (45.9)$$

მეორს მხრივ, ელექტრონის მცირე მას გვაიძულებს გამოვიყენოთ ტალღური (კვანტური) მექანიკა. ელექტრონის ასეთი კვანტური წარმოდგენა კარგად ხსნის რეზერფორდის ატომის სტაციონალურ მდგომარეობებს. თუ მბრუნავი ელექტრონის მდებარეობა აღიწერება ტალღური ალბათობით, ის არსებობს მხოლოდ იმ ორბიტაზე, სადაც ადგილი აქვს მდგარ ტალღას და არ ისპობა დე ბროილის ტალღის ინტერფერენციისას. შესაბამისად, მოთხოვნა იმისა, რომ წყალბადის ატომის წრიული ორბიტის პერიმეტრი უნდა იყოს ტალღის სიგრძის მთელი რიცხვი, გვაძლევს სტაბილურობის პირობას:

$$2\pi r = n\lambda, \text{ სადაც } n = 1, 2, 3, \dots \quad (45.10)$$

თუ ტალღის სიგრძის ნაცვლად შემოვიტანთ დე ბროილის განტოლებით იმპულსს, მაშინ (45.10) უშუალოდ გადავა ბორის როტატორის დაკვანტვის პირობად:

$$Pr = P' = n\hbar \quad (45.11)$$

ეს შედეგი დამაკმაყოფილებელია, მაგრამ ნაწილობრივ ეწინააღმდეგება კვანტურ მექანიკის კანონებს. კერძოდ, შემდეგ დადგინდა, რომ ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპით არ შეიძლება ერთდროულად განვსაზღვროთ იმპულსი და კოორდინატი, რომლებიც შედიან (45.11) ფორმულაში, ბორის

თეორია ხარისხობრივია თავისი აღწერით. რაოდენობრივი აღწერისთვის, რომ გამოვიყენოთ ტალღური კონცეფცია საჭიროა ამოვხსნათ ძირითადი ტალღური განტოლება. ეს ამოცანა პირველად განიხილა და ამოხსნა შრედინგერმა. ფიზიკის ზოგადი კურსიდან ცნობილია ელექტრომაგნიტური ველისთვის ტალღური განტოლებები. $+x$ მიმართულებით არამილევალი ელექტრული და მაგნიტური ბრტყელი ტალღა ასეთი სახით გამოისახება:

$$\begin{aligned} E &= E_0 \exp i\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right), \\ H &= H_0 \exp i\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right) \end{aligned} \quad (45.12)$$

რომელიც მიიღება შემდეგი დიფერენციალური განტოლებების ამოხსნით:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 E &= 0 \\ \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 H &= 0 \end{aligned} \quad (45.13)$$

ანალოგიურად, $+x$ მიმართულებით გაგრცელებული დე ბროილის ტალღისთვის შეიძლება დაიწეროს ფუნქცია:

$$\psi = A \exp i\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right), \quad (45.14)$$

რომელიც ცხადია, შემდეგი ტალღური განტოლების ამონახსნია:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \psi = 0 \quad (45.15)$$

ამ ტალღის სიხშირე დე ბროილის განტოლების თანახმად, განისაზღვრება ნაწილაკის სრული ენერჯიით:

$$E = h\nu, \quad (45.16)$$

იმ დროს, როცა ტალღის სიგრძე მოიცემა იმპულსით ან მისი კინეტიკური ენერჯიით

$$\lambda = \frac{h}{P}, \quad (45.17)$$

$$W = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{P^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

ნაწილაკის კინეტიკური ენერჯია სხვაობაა მისი სრული და პოტენციალური ენერჯიებისა, ანუ

$$W = E - U, \quad (45.18)$$

ამიტომ (45.17)-დან მიიღება

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2m(E - U)} = \frac{(2\pi)^2 \hbar^2}{2m(E - U)} \quad (45.19)$$

(45.15) განტოლებაში (45.19) გამოსახულების შეტანის შემდეგ მიიღება:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (45.20)$$

თუ ნაწილაკი თავისუფლად მოძრაობს ყველა მიმართულებით (და არა მარტო x მიმართულებით), მაშინ $\partial^2 \psi / \partial x^2$ უნდა შეიცვალოს ლაპლასის ოპერატორით და მიიღება **შრედინგერის** ცნობილი **განტოლება**:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (45.21)$$

შრედინგერის განტოლების ამონახსნი იძლევა ψ ტალღური ფუნქციის სივრცეში განაწილების სურათს. მისი აბსოლუტური სიდიდის კვადრატი, ანუ ψ -ს ნამრავლი მის შეუღლებულზე ψ^* სივრცის dV ელემენტში, როგორც ბორნმა აჩვენა, აღნიშნავს ამ ელემენტში ნაწილაკის ყოფნის ალბათობას. ინტეგრალი, ტალღური ალბათობის ინტენსიობიდან მთელ სივრცეში, უნდა იყოს ერთი ტოლი:

$$\int \psi \psi^* dV = 1, \quad (45.22)$$

რადგანაც, ნაწილაკი აუცილებლად იმყოფება სადღაც სივრცეში. ეს ტოლობა იწოდება დე ბროილის ტალღის **ნორმირების პირობად**. ის ითხოვს, რომ ψ ფუნქცია და კოორდინატით მისი მეორე წარმოებული იყვნენ სასრულნი და უწყვეტნი. ეს

ტალღური მექანიკის მნიშვნელოვანი შემოფარგვლაა. გამყოფ საზღვარზე მყოფი წერტილისთვის ეს მოთხოვნა ცნობილია, როგორც *სახაზღვრო პირობა*.

ტალღურ მოვლენებს თუ განვიხილავთ დროზე დამოკიდებულებით, მაშინ შესაბამისი შესწორებები უნდა შევიტანოთ შრედინგერის განტოლებაში. (45.14)-დან:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i\omega\psi \quad (45.23)$$

და დე ბროილის თანახმად

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (45.24)$$

წინა ფორმულას ჩასმით მიიღება:

$$E\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (45.25)$$

(45.25)-ის (45.21)-ში ჩასმის შემდეგ მიიღება შრედინგერის *ტალღური განტოლება*:

$$\nabla^2 \psi - \frac{2m}{\hbar^2} U\psi = i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (45.26)$$

მაქსველის განტოლება სხვადასხვა პირობებში ზუსტად იხსნება. შრედინგერმა დიდი წარმატებით გამოიყენა თავისი განტოლება წყალბადის ატომისთვის, წრფივი ოსცილატორისთვის და სხვა პრობლემებისთვის. ცხადია, ნაწილაკის ტალღური ბუნება, როგორც ზემოთ აღინიშნა, ბუნების კანონია და შრედინგერის განტოლებაზე დაფუძნებულმა კვანტურმა მექანიკამ მოგვცეს მოლეკულური სამყაროს რაოდენობრივი აღწერა. ელექტრომაგნიტური ველის განტოლებისგან განსხვავებით, შრედინგერის განტოლება ზუსტად შეიძლება ამოიხსნას ზოგიერთ შემთხვევაში.

ძირითადი განსხვავება ისაა, რომ ფოტონები ძირითადად ერთმანეთზე არ მოქმედებენ, როცა სხვა ნაწილაკები ერთმანეთზე მოქმედებენ დიდი ძალებით. ასე მაგალითად, სხვა დამუხტული ნაწილაკით შექმნილ კულონურ ველში მოძრავი ელექტრონი ინარჩუნებს თავის სრულ ენერგიას და დე ბროილის ტალღის სიხშირეს. მაგრამ, მისი კინეტიკური ენერგია და შესაბამისად, ელექტრონის ტალღის სიგრძე იცვლება სივრცეში წერტილიდან წერტილამდე. ოპტიკაში საქმე ვვაქვს ერთგვაროვან დიელექტრიკებთან. დე ბროილს ტალღები გადიან გაბნეულ

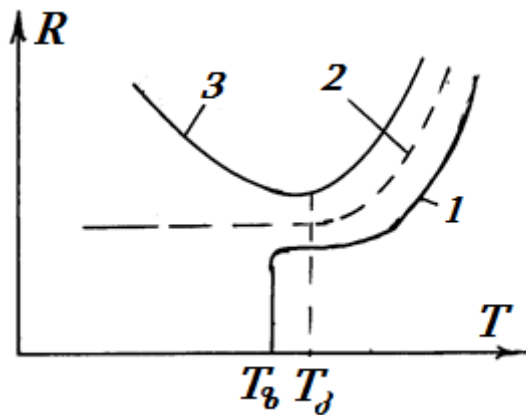
არეებში, სადაც გარდატეხის კოეფიციენტები იცვლებიან წერტილიდან წერტილში. ერთდროულად ვხედავთ კლასიკური მექანიკის ძველ სიძნელებებს: ორი სხეულის პრობლემა შეიძლება ზუსტად გადაიჭრას, ხოლო მრავალი სხეულისა ნაწილობრივ.

საკონტროლო კითხვები:

1. რა კავშირია ელექტრონის მოძრაობასა და მისი ყოფნის ალბათობას შორის?
2. აჩვენეთ კავშირი ტალღურ და კვანტურ მოვლენებს შორის;

46. კონდოს ეფექტი

კლასიკური წარმოდგენის თანახმად, მეტალების ელექტრული წინააღმდეგობა მცირდება ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად, რადგანაც ელექტრონები სულ უფრო მცირედ და მცირედ გაიბნევიან კრისტალური მესერის სითბურ რხევებზე. მაგრამ, დაბალი ტემპერატურის არეში ტემპერატურის შემცირებით შეიმჩნევა წინააღმდეგობის სამი სახით სვლა, რომელიც მოცემულია ნახ.46.1-ზე.



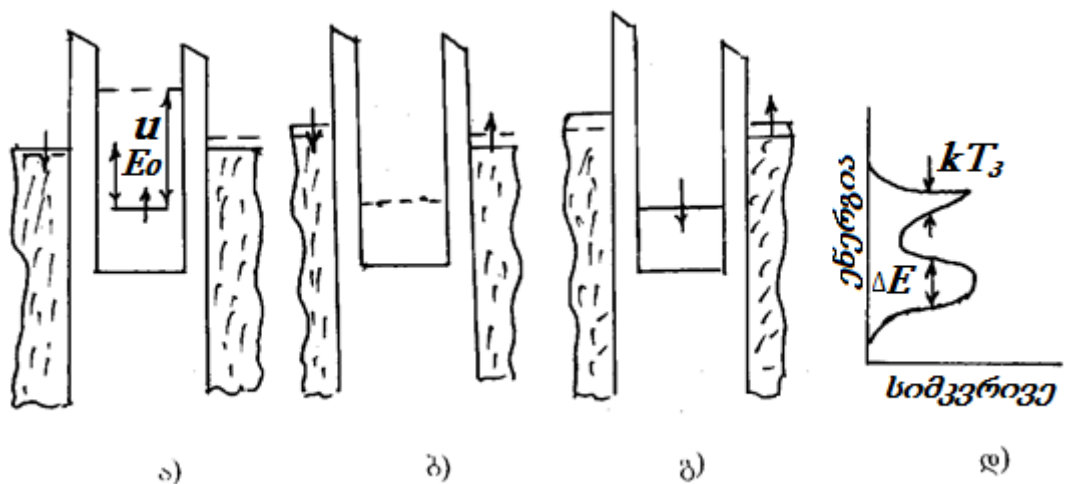
ნახ.46.1. მეტალების წინააღმდეგობის ცვლილების ტიპები (0–10)K ტემპერატურის ინტერვალში: ზეგამტარი (1), გაჯერებულ გამტარიანი (2) და კონდოს ეფექტიანი გამტარი (3).

ზოგიერთი მეტალების (მაგალითად, Pb, Nb) წინააღმდეგობა, ტემპერატურის T_0 ტემპერატურამდე შემცირებისას, მცირდება და შემდეგ ეცემა ნულამდე, ანუ ხდება ზეგამტარი (ნახ.46.1-ის 1), ხოლო ბევრი სუფთა მეტალების (მაგალითად, Cu, Au, Al) წინააღმდეგობა მცირდება – რაღაც ნარჩენ სიდიდემდე (ნახ.46.1-ის 2). მაგრამ,

მცირე მაგნიტური შენაერთების, როგორცაა Fe, Co, Ni, მქონე მეტალების წინააღმდეგობა ძალიან მცირე ტემპერატურაზე იზრდება (ნახ.46.1-ის 3), რასაც ეწოდება კონდოს ეფექტი (Kondo effect) და ეს დაკავშირებულია ნიშუში ყველა ელექტრონების სრული სპინის არანულოვან მნიშვნელობასთან. ეს ეფექტი დაიშორება არა მარტო მაგნიტურ მინარევებიან მეტალებში, არამედ კვანტურ წერტილებშიც. T_K ტემპერატურას, რომლის შემდეგ წინააღმდეგობა კვლავ იზრდება, ეწოდება კონდოს ტემპერატურა.

46.1. მაგნიტურ მინარევებიან მეტალებში კონდოს ეფექტი. კონდოს ეფექტი მაგნიტურ მინარევებიან მეტალებში შეიძლება აიხსნას ანდერსონის მოდელით, რომლის ენერგეტიკული ილუსტრაცია მოცემულია ნახ.46.2-ზე. არამაგნიტურ მეტალში მაგნიტური მინარევის ატომი წარმოადგენს კვანტურ ჭას, რომელსაც მატრიცული მეტალის E_0 ფერმის დონის დაბლა აქვს მხოლოდ ერთი ენერგეტიკული დონე. ეს დონე დაკავებულია ერთი ელექტრონით, ინდივიდუალური სპინით, მაგალითად, ელექტრონის სპინი მიმართულია მაღლა, როგორც ეს დიაგრამაზე ისრითაა ნაჩვენები (ნახ.46.2-ის ა). მინარევი ატომი გარშემორტყმულია მატრიცული მეტალის ატომების მრავალი ელექტრონებით, რომელთათვის ფერმის დონეს ქვემოთ ყველა ენერგეტიკული მდგომარეობები დაკავებულია, ხოლო მაღლა – ცარიელია. როცა ნიშუზე ედება ელექტრული წანაცვლება, მაშინ ელექტრულ ღრუბელში დაკავებული დონეები ადვილად წანაცვლებენ ჭის ორივე მხარეს.

ორმოში, რომელიც ხასიათდება U ენერგიის ჯებირით, კიდევ ერთი ელექტრონის დამატება კულონური ურთიერთქმედებით აკრძალულია. მინარევის ატომიდან ერთი ელექტრონის მოშორებისათვის საჭიროა სისტემა –



ნახ.46.2. მეტალში მაგნიტური მინარევის არსებობისას, ნიშუზე ელექტრული

წანაცვლებისას კონდოს ეფექტის ახსნის ანდერსონისეული მოდელი:
საწყისი (ა), ვირტუალური (ბ) და საბოლოო (გ) მდგომარეობები; (დ) –
ენერჯის სიმკვრივე.

სათვის სულ მცირე E_0 ენერჯის დამატება (ნახ.46.2-ის ა). მაგრამ, ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად, ელექტრონს შეუძლია დატოვოს ორმოში დონე მცირე დროით რიგით h/E_0 , გავიდეს გვირახულად და დაიკავოს ორმოს გარეთ არადიდინით, კლასიკურად აკრძალული ვირტუალური მდგომარეობა (ნახ.46.2-ის ბ) და შემდეგ მის ადგილზე ორმოში ჩაჯდეს მეტალის მატრიცის მრავალი ელექტრონებიდან ერთ-ერთი (ნახ.46.2-ის გ). ახლად მოსულ ელექტრონს შეიძლება ჰქონდეს საწინააღმდეგო მიმართულების სპინი, რაც შეცვლის მინარევის სპინის ჯამურ მიმართულებას. ამის შედეგად ნიმუშის ამ ადგილზე გაჩნდება მინარევის სპინის საწყის და საბოლოო მიმართულებებს შორის განსხვავება.

სპინებით გაცვლა ხარისხობრივად ცვლის სისტემის მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგეტიკულ მახასიათებელს. ერთად მიმდინარე მრავალ ასეთ პროცესებს ეწოდებათ კონდო-რეზონანსული პროცესები. ასეთი რეზონანსი ქმნის ახალ ელექტრონულ მდგომარეობას, რასაც ეწოდება **კონდო მდგომარეობა** ფერმის ენერჯის ტოლი ენერჯით. ეს მდგომარეობა ყოველთვის „რეზონანსშია“ ფერმის დონესთან. რადგანაც, კონდო-მდგომარეობა იქმნება მინარევეული მაგნიტური ატომთან ახლოს ლოკალიზირებულ და მეტალ-მატრიცული თავისუფალ ელექტრონთა შორის გაცვლითი პროცესებით, ამიტომ კონდო ეფექტი წარმოადგენს მრავალი სხეულის ტიპურ ეფექტს. ელექტრონები, რომლებმაც იმოქმედეს მაგნიტურ მინარევთან და მოახდინეს მის ახლოს ლოკალიზაცია, ქმნიან **კონდო-ღრუბელს**. ამათგან ყოველი ელექტრონი მინარევის და ურთიერთ მიმართ ფლობს ინფორმაციას. ასე, რომ ღრუბელში ელექტრონები ურთიერთ კავშირშია.

დაბალტემპერატურულ დიაპაზონში ტემპერატურის შემცირებით წინააღობის ზრდის ფაქტი არის კონდო-მდგომარეობის არსებობის დამადასტურებელი. ეს მდგომარეობა ზრდის ფერმის დონესთან ახლო მყოფ ელექტრონთა გაბნევას. დაბალ ტემპერატურაზე, გამტარებლობის ელექტრონების ჰიბრიდიზაცია მეტალში მაგნიტური მინარევის ატომის ლოკალიზირებულ ელექტრონების სპინებთან

იწვევს ხვედრითი წინააღობის ზრდას. სრული ხვედრითი წინააღობა, როგორც ტემპერატურის ფუნქცია ასე გამოისახება:

$$\rho = AT^5 - B \ln T + C \quad (46.1)$$

სადაც A, B, C – მუდმივები დამოკიდებულია მაგნიტური იონების კონცენტრაციაზე, გაცვლით ენერგიაზე და გაბნევის ძალაზე.

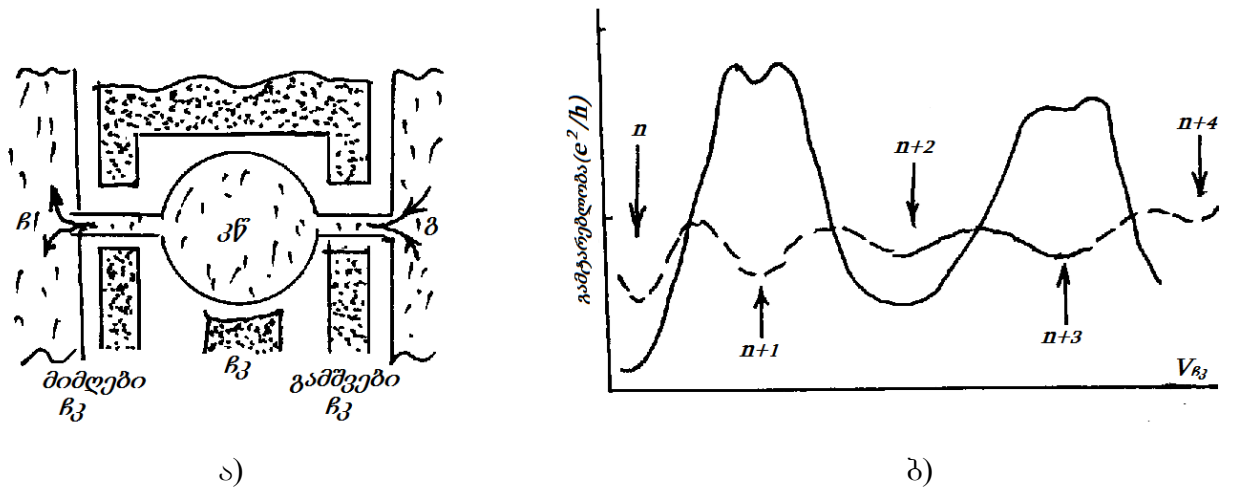
კონდოს ტემპერატურა: $T_j = \sqrt{\Delta E / 2} \exp \pi E_0 (E_0 + U) / \Delta E \quad (46.2)$

სადაც ΔE – მინარევის ენერგეტიკული დონის სიფართოა, გადიდებული ელექტრონული გვირაბგასვლით (ნახ.46.2-ის დ).

კონდო-სისტემისათვის ფარდობა მის აქტიურ R წინააღობასა და აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე R_0 წინააღობას შორის დამოკიდებულია მხოლოდ ტემპერატურებზე, როგორც $R/R_0 = f(T/T_j)$. ყველა მასალა, რომელიც შეიცავს მინარევის სპინებით $1/2$, შეიძლება აღიწეროს იმავე ტემპერატურული დამოკიდებულებით – ფუნქციით $f(T/T_j)$. სისტემა შეიძლება მთლიანად დავახასიათოთ კონდოს ტემპერატურით, მასში შემავალი ΔE , E_0 და U პარამეტრებით.

46.2. კვანტურ წერტილებში კონდოს ეფექტი. კვანტური წერტილი (კწ) სისტემათა მეორე კლასია, სადაც ინფორმაციის გადატანის ტრანსპორტის თვისებაზე დამხერილი იქნას კონდოს ეფექტი. ამ შემთხვევაში სისტემის პარამეტრებზე კონტროლი უფრო მაღალ დონეზეა შესაძლებელი, ვიდრე ეს იყო მაგნიტურ მინარევიდან მოცულობით მეტალში. კვანტური წერტილი შეიცავს მკაცრად განსაზღვრულ რაოდენობის ელექტრონებს და შეიძლება იმოქმედონ, როგორც მაგნიტური მინარევი. ლუწი რაოდენობის ელექტრონებისათვის სრული სპინი შეიძლება იყოს ნული ან მთელი რიცხვი და კენტი რაოდენობისათვის – მთელის ნახევარი. ბოლო შემთხვევა კონდოს ეფექტის კლასიკური მაგალითია. ყველაზე მაღალი ენერჯის მქონე, ერთი ელექტრონის გარდა შეიძლება სხვა ელექტრონები უგულვებელყოთ, ანუ ეს შემთხვევა ექვივალენტურია ერთი ელექტრონის არსებობისა სპინით $s=1/2$.

ჩამკეტიანი კვანტური წერტილი შეიძლება ელექტრულად გადაერთოს „კონდო-სისტემის“ მდგომარეობიდან „არა კონდო-სისტემის“ მდგომარეობაში, მათში ელექტრონების კენტი რიცხვის რაოდენობის – ლუწის შეცვლით (ნახ.46.3 ა).



ნახ.46.3. მმართველი კვ (ა) და მისი გამტარებლობის ცვლილება ძაბვით (ბ):

$$T = \text{---} 0,25K \text{ და } \text{---} 1K.$$

კვანტური წერტილი შეერთებულია ორ ელექტრონების გვირაბგამსვლელ არხთან, რომელთაგან ელექტრონების გაშვების შესაძლებლობა იმართება შესავალ და გამოსავალ ჩამკეტებზე ძაბვის ცვლილებით. კვ-ის კავშირი ელექტრონების გამომდენთან და ჩამდენთან განსაზღვრავს კვ-ის მდგომარეობის ΔE ენერგიას. კვ-ში ელექტრონების რიცხვი და მათი ენერგიის ღონე რეგულირდება ცენტრალურ ჩამკეტზე მოდებული ძაბვით. კონდოს ტემპერატურა შეიძლება შეიცვალოს ჩამკეტზე ძაბვის ცვლილებით, რადგანაც ერთელექტრონიანი მდგომარეობის ენერგია უახლოვდება ფერმის ღონეს.

ერთ-ერთი მთავარი განსხვავება კვანტურ წერტილსა და მაგნიტურ მინარევებთან მოცულობით მეტაღს შორის მდგომარეობს მათში ელექტრონულ მდგომარეობათა ბუნების სახესხვაობაში. მეტაღში ელექტრონული მდგომარეობა – ბრტყელი ტალღებია. მინარევულ ატომებზე მათი გაბნევა იწვევს ელექტრული ტალღების შერევას ნიმუშის სხვადასხვა არეებთან, რაც მასალის წინააღობის გაზრდის მიზეზია.

კვ-ში ყველა ელექტრონი უნდა მოვიდეს მხოლოდ ერთი წერტილის გავლით, რადგან მის გარშემო სხვა ელექტრული გზა არ არსებობს. ელექტროდებზე საწინააღმდეგო ძაბვებისას კონდო-რეზონანსი აადვილებს მდგომარეობისათვის შერევის ხარისხს, რაც ზრდის გამტარებლობას, ანუ წინააღობა მცირდება. მაშასადამე, კვ-ში კონდოს ეფექტს აქვს საწინააღმდეგო სახე, ვიდრე მოცულობით მეტაღში. ნახ.46.3-ის ბ)-ზე მოცემულია კვ-ის გამტარებლობის ცვლილება, სხვადასხვა ტემპერატურაზე, ჩამკეტზე ძაბვის ცვლილებისას, რომლითაც რეგულირდება წერტილში ელექტრონთა რიცხვი. როდესაც კვანტურ წერტილში მოთავსებულია ელექტრონთა წყვილი რაოდენობა, მისი გამტარებლობა იზრდება

ტემპერატურის შემცირებით. ეს მიუთითებს იმაზე, რომ ამ შემთხვევაში კონდო ეფექტს ადგილი არა აქვს. კვანტურ წერტილში ელექტრონთა კენტი რაოდენობისას – დაიმზირება გამტარებლობის ტემპერატურაზე საწინააღმდეგო დამოკიდებულება, რაც გამოსახავს კონდო ეფექტის არსებობას.

კონდო-რეჟიმში მასიური ნიმუშის წინააღმდეგობის მსგავსად, კვანტური წერტილის გამტარებლობაც დამოკიდებულია მხოლოდ ტემპერატურათა ფარდობაზე T/T_c . უმდაბლეს ტემპერატურაზე გამტარებლობა უახლოვდება გამტარებლობის კვანტურ ზღვარს $2e^2/h$. ის ფაქტი, რომ გამტარებლობამ მიაღწია ამ მნიშვნელობას, ნიშნავს, რომ ელექტრონებმა გაიარეს წერტილი სრულად და კონდო ეფექტმა წერტილი გახადა ელექტრონებისათვის მთლიანად გამჭვირვალედ.

კონდოს ეფექტი შეიძლება დამზირებულ იქნას კვანტურ წერტილში ელექტრონების ლუწი რიცხვის რაოდენობის შემთხვევაშიც, მაგრამ ამისათვის ნიმუში უნდა მოთავსდეს მაგნიტურ ველში, ელექტრული მდგომარეობების სპინების მიხედვით გახლეჩისათვის და შესაბამისი ენერგეტიკული დონეების შევსებისათვის.

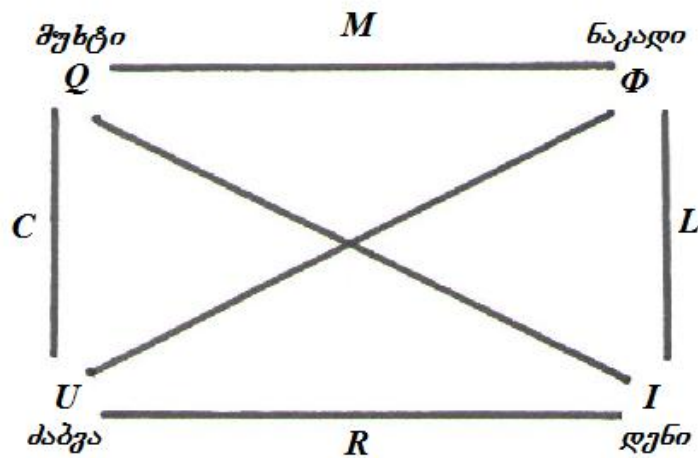
47. მემორისტორი და მისი მუშაობის პრინციპი

გარდამავალი მეტალის ოქსიდებმა დიდი გამოყენება პპოვეს ე.წ. მემორისტორის შექმნაში. მემორისტორი შეიძლება განიხილებოდეს, როგორც ელექტრული წრედის პასიური ელემენტი, რომლის წინააღმდეგობა რაღაც სახით დამოკიდებულია მასში გამავალ მუხტის სიდიდეზე. წრედში ძაბვის გამორთვის შემდეგ მემორისტორი არ იცვლის თავის მდგომარეობას, ანუ ინარჩუნებს წინააღმდეგობის ბოლო მნიშვნელობას და სწორედ აქედან წარმოსდგება მისი დასახელება – (memori resistir) მახსოვრობითი რეზისტორი.

ელექტრობაში ოთხი ძირითადი სიდიდეა: მუხტი (Q), დენი (დენის ძალა, I), ძაბვა (პოტენციალთა სხვაობა, U) და მაგნიტური ნაკადი (Φ). ყველა ეს სიდიდეები წყვილ-წყვილად უკავშირდებიან ერთმანეთს. ასე მაგალითად, დენი დროის ერთეულში მუხტის ნაკადია, ძაბვა და დენი ერთმანეთს უკავშირდება ომის კანონით და ა.შ. აგრეთვე არსებობს სამი მატერიალური ობიექტი, ე.წ. წრედის პასიური ელემენტები, სადაც რეალიზდება ამ სამი სიდიდეებს შორის თანაფარდობა: რეზისტორი – აკავშირებს დენის ძალას და ძაბვას, კონდენსატორი – ძაბვას და მუხტს, ინდუქტიობა – მაგნიტურ ნაკადს და დენის ძალას. ნებისმიერი სირთულის ელექტრული წრედი და მისი ექვივალენტური

სქემა შეიძლება აიგოს ამ პასიური ელემენტების და აქტიური (ტრანზისტორები) ელემენტების კომბინაციით.

გასული საუკუნის 70-იან წლებში ამერიკელმა ფიზიკოსმა ლეონ ჩუამ გამოთქვა ჰიპოთეზა, რომლის თანახმად უნდა არსებობდეს ელექტრო სქემის მეოთხე ბაზური ელემენტი, რომელიც აღწერდა კავშირს მაგნიტურ ნაკადსა და მუხტს შორის. ასეთი ელემენტი არ შეიძლებოდა შემდგარიყო უკვე ცნობილი, სხვა დანარჩენ სამ პასიურ ელემენტთა რაიმე კომბინაციით. მან ამ ელემენტს უწოდა *მემრისტორი*, ანუ „დამამახსოვრებელი“ რეზისტორი (ნახ. 47.1). მისი წინაღობა დამოკიდებულია მასში გამავალ მუხტის სიდიდეზე, ანუ მასში

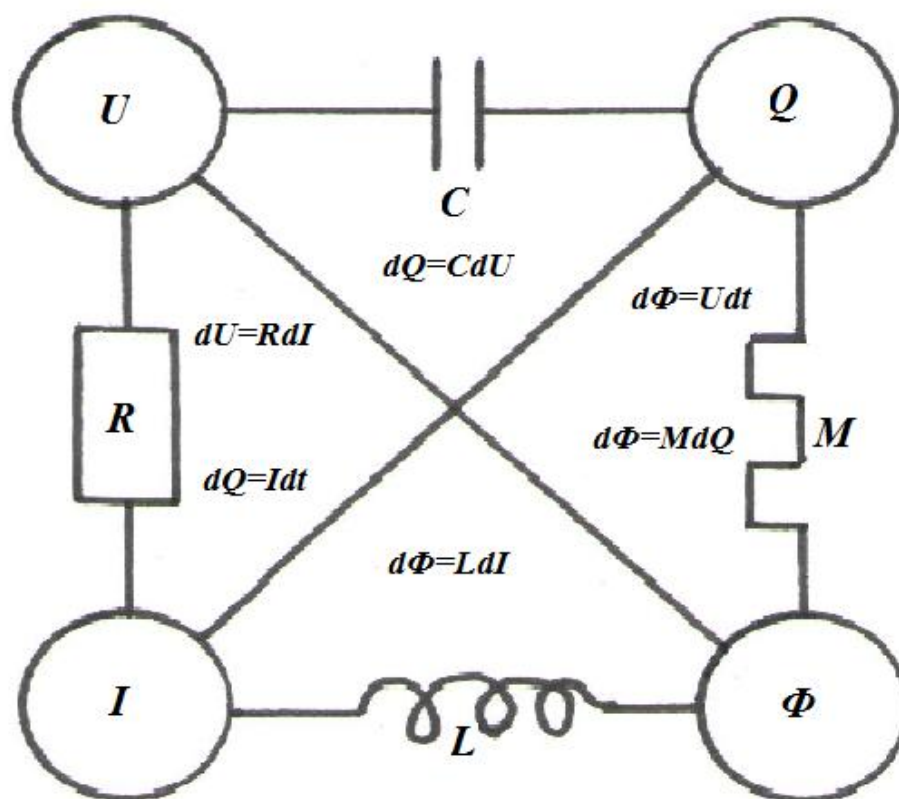


ნახ.47.1. ელექტრული სქემის ბაზური ელემენტები

გამავალ დენის ხანგრძლიობაზე. მემრისტორის მახასითებელია M მემრისტორობა (როგორც რეზისტორისთვის R წინააღმდეგობა), რომლის სიდიდეა მაგნიტური ნაკადის ცვლილების ფარდობა მუხტის ცვლილებასთან. ჩუა გამოვიდა იმ მოსაზრებიდან, რომ ელექტრული წრედის ოთხი ძირითადი სიდიდე (I, V, Q და Φ) ერთმანეთს უნდა უკავშირდებოდნენ ექვსი თანაფარდობით და ცნობილი იყო მხოლოდ ხუთი: $dV=RdI$; $dQ=Idt$; $dQ=CdV$; $d\Phi=LdI$ და $d\Phi=Vdt$. აკლია კავშირი მაგნიტურ ნაკადსა და მუხტს შორის. ამიტომ შემოიღო $d\Phi=MdQ$ (ნახ.47.1). თუ გავითვალისწინებთ ბოლო ფორმულას და მხედველობაში მივიღებთ წინა მე-2 და მე-5-ს, მაშინ გამოვა, რომ:

$$V=M(Q)I \quad (47.1)$$

თუ $M=Const$, მაშინ (47.1) ომის კანონია წრედის უბნისთვის. ზოგადად $M \neq Const$ და დამოკიდებულია მისი მდგომარეობის წინაისტორიაზე, თუ მასში რა რაოდენობის მუხტი გადიოდა.

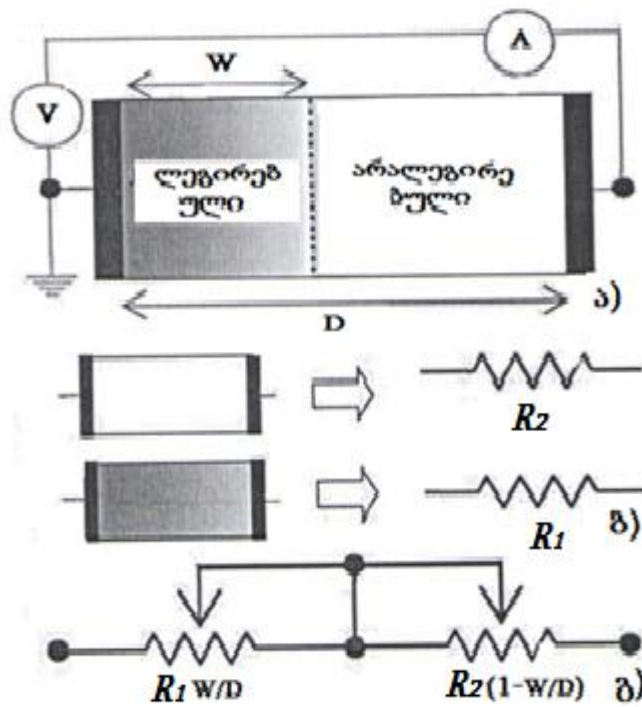


ნახ.47.2. კავშირი ელექტრული წრედის ოთხ სიდიდეს შორის

რამდენიმე წლის წინ ამერიკელ ექსპერიმენტატორთა ჯგუფმა სტენლი ვილიამსის ხელმძღვანელობით შექმნეს მემრისტორი. ის წარმოადგენს პლატინის ელექტროდებს შორის მოთავსებულ ნანოსისქის (<70ნმ) ტიტანის სრული (TiO₂) და არასრული (TiO) ოქსიდური ფენების ერთობლიობას.

მემრისტორის თვისება შეიძლება განხილულ იქნას შემდეგი მოდელით. მისი სრული წინაღობა შედგება ორი ცვლადი რეზისტორის წინააღობათა მიმდევრობით შეერთებისგან (ნახ.47.3). ერთ-ერთი რეზისტორი (TiO₂-ით) დაბალი წინააღობითაა, ანუ ღიაა ($R_{ღ}=R_1$), ხოლო მეორე – დიდი წინააღობით ჩაკეტილია (TiO-თი), ანუ ($R_{ჩ}=R_2$).

TiO₂-ის მხრიდან ელექტროდზე დადებითი ძაბვის მოდებისას იცვლება მისი კრისტალური სტრუქტურა. უანგბადის დადებითი იონები მიემერთებიან TiO-ში, მოხდება წინააღობათა გადანაწილება მათ შორის და საზღვარი TiO₂- TiO გადაიწევს, რომლის სიდიდე და სიჩქარე დამოკიდებულია მუხტის გავლის



ნახ.47.3. მერმისტორის მუშაობის მოდელი

ხანგრძლიობაზე. ამ დროს ძაბვასა და დენს შორის თანაფარდობა ასე გამოისახება:

$$V(t) = \left[R_1 \frac{W}{D} + R_2 \left(1 - \frac{W}{D} \right) \right] I(t) \quad (47.2)$$

სადაც, W - დიდი გამტარებლობის ფენის სისქეა, D - ელექტროდებს შორის მანძილი, ანუ ორივე სისქეთა ფენების ჯამი. ამ დროს დიდი გამტარებლობის მხრიდან საზღვარი წაინაცვლებს კანონით:

$$\frac{dW(t)}{dt} = \mu \frac{R_1}{D} I(t) \quad (47.3)$$

სადაც, μ - იონების ძვრალობაა. (46.3)-ის ინტეგრებით მიიღება:

$$W(t) = \mu \frac{R_1}{D} Q(t) \quad (47.4)$$

(47.4) ფორმულის ჩასმით (47.2) ფორმულაში, (47.1)-ის გათვალისწინებით და რომ $R_1 \ll R_2$, მიიღება:

$$M(Q) = R_2 \left(1 - \frac{\mu R_1}{D^2} \right) Q(t) \quad (47.5)$$

(47.5) ფორმულიდან ჩანს: 1) მემრისტორობა დამოკიდებულია მუხტზე, ანუ მასში გამავალი სრული მუხტის ფუნქციაა; 2) მემრისტორობა მკვეთრად იზრდება ნანოფენების სისქეების შემცირებით; 3) მემრისტორობა დამოკიდებულია, ერთი და იგივე სისქეების შემთხვევაში, გარდამავალი მეტალის ოქსიდების გვარობაზე ($R_1; R_2$) და 4) მემრისტორობა დამოკიდებულია იონების ძვრადობაზე.

ტრადიციული ბაზური პასიური ელემენტების ძირითადი პარამეტრები (R,C,L) მუდმივებია და არიან დამოკიდებულნი მასალის გვარობაზე, სისუფთავეზე, ზომაზე, ტემპერატურაზე და ა.შ. მემრისტორისთვის სიდიდე M, მისი განმარტების თანახმად, მუხტის ფუნქციაა, რაც მოიცემა (47.5) ფორმულით. აქედან ჩანს, რომ როცა დენი ნულია, მაშინ M მუდმივია, მაგრამ თვით ამ მუდმივის მნიშვნელობა დამოკიდებულია იმაზე, თუ რამდენ ხანს გადიოდა დენი მასში, ანუ მის ელემენტში მუხტის რაოდენობა. იმისდა მიხედვით, თუ როგორ რეჟიმში მუშაობს მემრისტორი მიიღება ან რეზისტორი:

$$M = \frac{d\varphi}{dq} = \frac{d\varphi}{dt} \cdot \frac{dt}{dq} = \frac{V}{I} = R \quad (47.6)$$

ან კონდენსატორი:

$$M = \frac{d\varphi}{dq} = \frac{dVdt}{CdV} \Rightarrow \frac{1}{C} \quad (47.7)$$

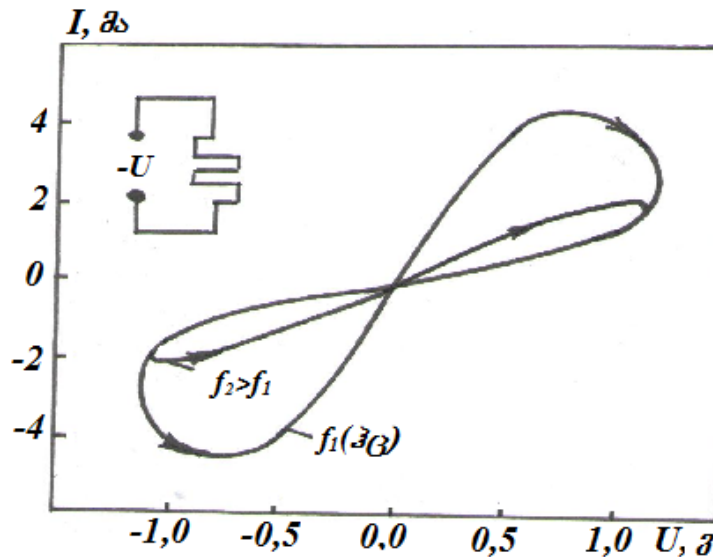
ან ინდუქტიობა:

$$M = \frac{d\varphi}{dq} = \frac{LdI}{dIdt} \Rightarrow L \quad (47.8)$$

ვილიამსმა მემრისტორი შეადარა წყლის მილს, რომელიც იცვლის დიამეტრს მასში წყლის ჭავლის გასვლის მიმართულების მიხედვით. თუ ერთი მხრივ წყლის დინებისას მილი მუდმივად ვიწროვდება, მაშინ მეორე მხრიდან მოძრაობისას – ფართოვდება. თუ ჭავლი გაჩერდა რაღაც მომენტში, მილის დიამეტრიც შენარჩუნდება იმ სიდიდის, როგორც იყო წყლის ჭავლის გაჩერებისას. რაღაც დროის შემდეგ ჭავლის ჩართვისას მილის დიამეტრიც მყისვე, ინერციის გარეშე დაიწყებს ცვლილებას.

ნახ.47.4-ზე გამოსახულია მემრისტორზე დენის დამოკიდებულება ცვლად ძაბვაზე. ზედა კუთხეში მოცემულია მემრისტორის სქემატური აღნიშვნა.

გრაფიკიდან ჩანს, რომ სიხშირის გაზრდით მცირდება ჰისტერეზისის ეფექტი და ზღვარში მიიღება დახრილი წრფე: მემრისტორი გადავიდა ჩვეულებრივ რეზისტორში.



ნახ.47.4. მემრისტორზე დენის დამოკიდებულება ცვლად ძაბვაზე

ეს ფიზიკურად გასაგებია, რადგან წინააღმდეგობის ცვლილება დამოკიდებულია გაკლილ მუხტზე და სიხშირის გაზრდით, ერთ ნახევარპერიოდში გაივლის მუხტი და მეორეში ველარ მოასწრებს გავლას. მილი ვერ ასწრებს გაფართოებას, რომ ის უკვე ვიწროვდება და შესაბამისად მუხტი ნაკლები გაივლის და ბოლოს გაჯერდება. რეზისტორის წინააღმდეგობა განისაზღვრება დენის ძაბვაზე დამოკიდებულების გრაფიკის დახრილობიდან. ნახ.47.4-დან ჩანს, რომ დენის და ძაბვის ნულ მნიშვნელობაზე, დაბალ f_1 სიხშირისას, იკვეთება ორი მრუდი – აღმაავალი დიდი დახრით (მცირე წინაღობა) და დაღმაავალი შედარებით მცირე დახრით (დიდი წინაღობა). ეს ნიშნავს, რომ უძრავობაში მემრისტორის წინაღობა სხვადასხვაა და დამოკიდებულია წინაისტორიაზე.

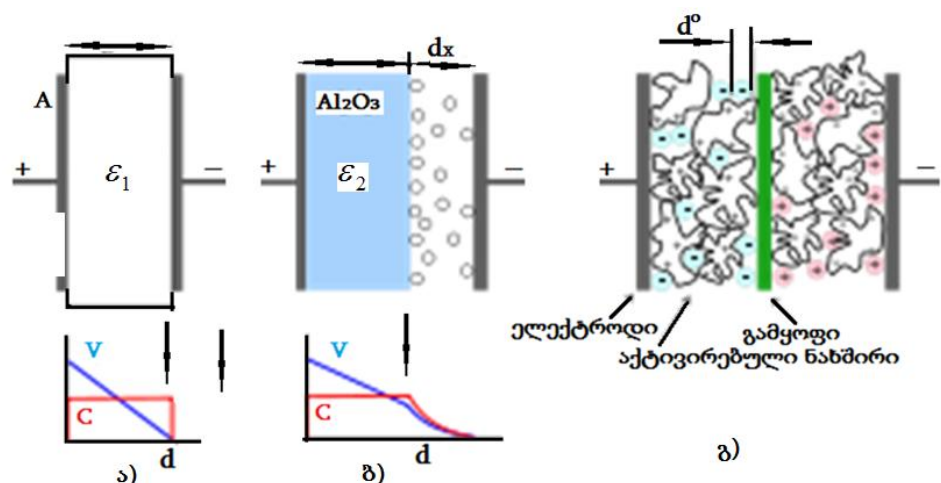
48. იონისტორი (სუპერკონდენსატორი) და მისი მუშაობის პრინციპი

თანამედროვე ეტაპზე მსოფლიო მეცნიერების, ეკონომიკის და ცხოვრების დონის განუხრელი ამაღლება მოითხოვს ენერჯის მოხმარების ზრდას, რომელიც შემოფარგლულია ენერგორესურსების რაოდენობრივი მარაგის სასრულობით. ამიტომ მეცნიერების წინაშე დგას არატრივიალური ამოცანა – მოიძებნოს ახალი, ალტერნატიული ენერჯის წყაროები და შემუშავდეს ახალი ენერგოგადამუშავების ტექნოლოგიები. ენერგორესურსებით უზრუნველყოფის ერთ-ერთი მეთოდია მოხმარებული ენერჯის უტილიზაცია. მაგრამ ზოგიერთი ენერჯის, მაგალითად სითბურისა, მოუხერხებელია და გარდა ამისა, ზოგჯერ

მოითხოვება მცირეგაბარიტიანი ენერჯის წყაროები. რაც გამოიხატება იმაში, რომ თანამედროვე მიკროელექტრონული ხელსაწყოების და მოწყობილობების პროექტირებისას ხშირად დგას მათი სათადარიგო ან ავტონომიური კვების საკითხი. ამიტომ, მათი ელექტროენერჯის მოთხოვნის ხასიათისა და ამოცანის შესრულების მიხედვით გამოიყენება ელექტროლიტური კონდენსატორები, აკუმუკიატორები ან კვების ბატარეები. მაგრამ, ზემოთხამოთვლილი მოწყობილობები ან მათი კომბინაციები, მათი სპეციფიკის გამო, ხშირად გამოუსადეგარია დასმული ამოცანების გადასაწყვეტად.

იონისტორში, ანუ სუპერკონდენსატორში (სკ) ფორმირდება ორმაგი ელექტრული შრე (ოეშ), რომლებიც გამოყოფილნი არიან თხიერი ელექტროლიტით, ხოლო მუხტი გროვდება ჰეტეროგადასასვლელზე ელექტროლიტი/ელექტროდი, ანუ სხვადასხვა ნიშნის მუხტი სივრცულად განცალკევებულია. ოეშ-ის ერთ-ერთ ელექტროდზე გროვდება ჭარბი ელექტრონები და იზიდავენ ელექტროლიტიდან კათიონებს, ხოლო მეორეზე - გროვდება ელექტროლიტის ანიონები. ორივე ოეშ მიმდევრობითაა შეერთებული ელექტროლიტით და მასში კონცენტრირდება მუხტი, ძაბვა და ენერჯია.

ამერიკელმა ქიმიკოსმა რობერტ რაიტმაერმა 1962 წელს მისცა საპატენტოში განაცხადი, სადაც დაწვრილებით იყო აღწერილი “ორმაგი ელექტრული შრის” კონდენსატორში ელექტრული ენერჯის შენახვის პროცესი. ნახ.48.1-ზე გამოსახულია სამი კონდენსატორული კონსტრუქციული სქემის შედარება. თუ ჩვეულებრივ კონდენსატორებში ალუმინის შემონაფენები იზოლირებულია, ტრადიციულად, დიელექტრიკის ფენით, მან აქცენტი გააკეთა უშუალოდ შემონაფენების მასალაზე - ელექტროდებს უნდა ჰქონდეთ სხვადასხვა გამტარებლობა: ერთი ელექტროდი უნდა იყოს იონური გამტარებლობის, ხოლო მეორე - ელექტრონული. მაშასადამე, კონდენსატორის დამუხტვისას უნდა იყოს

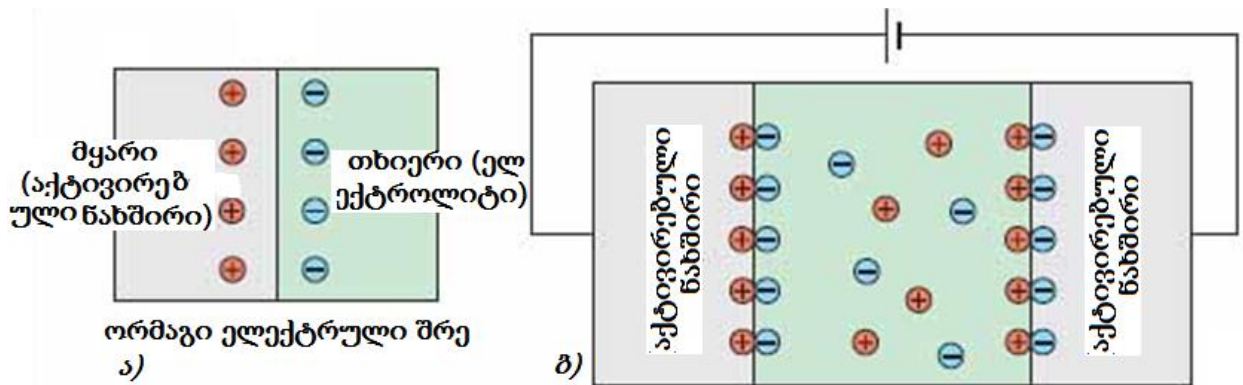


ნახ.48.1. სამი კონდენსატორული კონსტრუქციული სქემის შედარება:

ა)–ელექტროსტატიკური; ბ)–ელექტროლიტური და გ)–იონისტორი

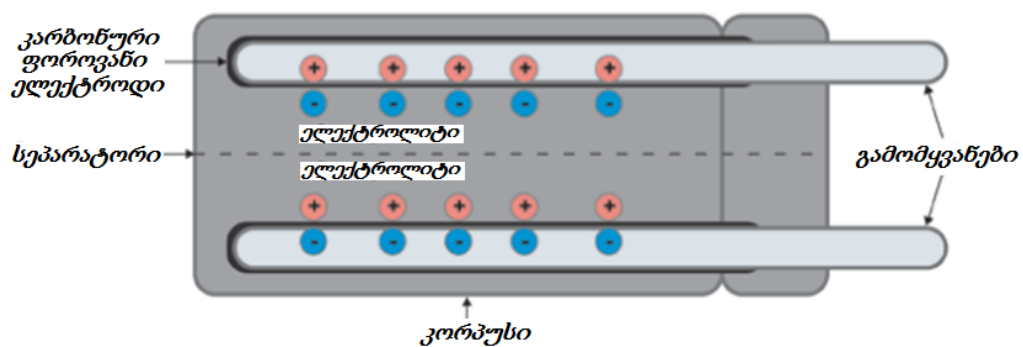
ელექტრონულ გამტარში უნდა ხდებოდეს ელექტრონების და დადებითი ცენტრების განცალკევება და კათიონების და ანიონების – იონურ გამტარში. ელექტრონული გამტარი სასურველია დამზადდეს ფორიანი ნახშირისგან, ხოლო იონური გამტარი – გოგირდმუავას წყალხსნარისგან. ამ შემთხვევაში მუხტი (ორმაგი ფენის სახით) ინახება ასეთი გამტარების გამყოფ საზღვარზე, რომელთაგან ერთი სითხეა. სისტემის ზედაპირული ენერჯის მინიმუმის გამო ხდება გამყოფი ფაზის ზედაპირზე ნაწილაკების ისე ორიენტირება, რომ ფაზის საკონტაქტო არეში წარმოიქმნება ნიშნით საწინააღმდეგო და სიდიდით ტოლი მუხტები, რაც ქმნის ოეშ-ის შექმნას. მისი შექმნის ძირითადი მექანიზმი შეიძლება იყოს: 1) ფაზის შრეში ერთ-ერთი ნიშნის იონების უპირატესი ადსორბცია ან 2) ზედაპირულ შრეში პოლიარონული მოლეკულების ისეთნაირი ორიენტაცია, რომ პოლიარონი არ იშლება, ანუ არ ხდება მუხტითი გაცვლა. ამ დროს ზედაპირული მუხტის განსაზღვრისთვის გამოიყენება წესი, რომლის თანახმად შეხებაში მყოფი ორი ფაზიდან დადებითად იმუხტება ის, რომელსაც აქვს მეტი დიელექტრიკული მუდმივა.

როგორც აღნიშნული იყო, დადებითი და უარყოფითი მუხტები ელექტროდის ზედაპირზე ფორმირდებიან, ქმნიან მათზე მუხტიან ოეშ-ს. გამყოფი საზღვარი იქნება ოეშ (ნახ.48.2 ა)). ეს უბანი და მუხტი იზრდება მაღალი ძაბვის მოდებისას (ნახ.48.2 ბ)). ამ დროს ოეშ-ის სისქე ძალიან მცირეა და მოლეკულის რიგისაა, ანუ $\sim 5 \div 10$ მ. ხშირად, ელექტროდებზე გამოიყენება აქტივირებული ნახშირი (წვრილდისპერსირებული ფრაქციით), დამზადებული სპეციალური ტექნოლოგიით და ორგანული ელექტროლიტი. ელექტროლიტი აღწევს ნახშირის



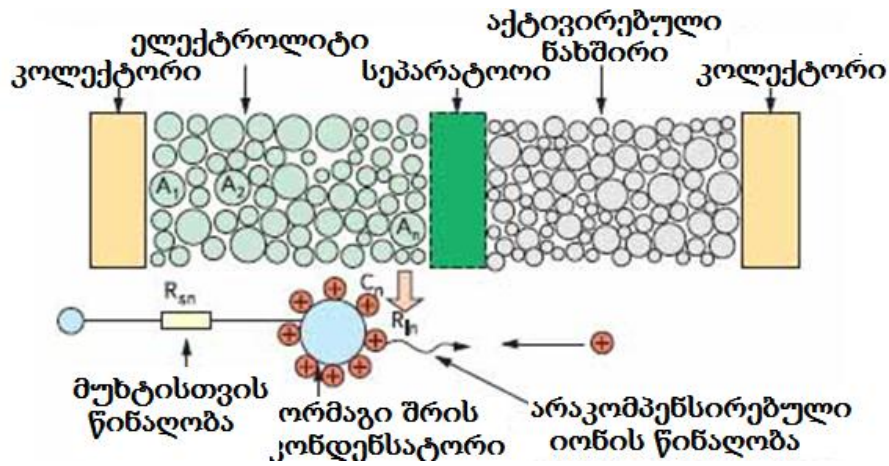
ნახ.48.2. იონისტორში ორმაგიელექტრული შრის აღძვრა (ა) და ძაბვის მოდებისას მუხტის ზრდა

ნაწილაკებს შორის და ამით ელექტროდი “გაჟღენთილია” ელექტროლიტით. შეიძლება წარმოვიდგინოთ, რომ იონისტორის საერთო ტევადობაა დიდი რაოდენობის მცირე ტევადობების ნაერთია, სადაც აქტივირებული ნახშირის ყოველი თავისებური ელექტროდი, აღმგვრელია ოეშ-ის. შეიძლება ითქვას, რომ ულტრაკონდენსატორის ელექტროდები ჩაშვებულია თხიერ ელექტროლიტში და განცალკევებულეებია სეპარატორით (ნახ.48.3). ძაბვის მოდებისას ელექტროლიტის თავისუფალი იონები გადაადგილდებიან საწინააღმდეგო ნიშნის



ნახ.48.3. იონისტორის (ულტრაკონდენსატორის) სტრუქტურა

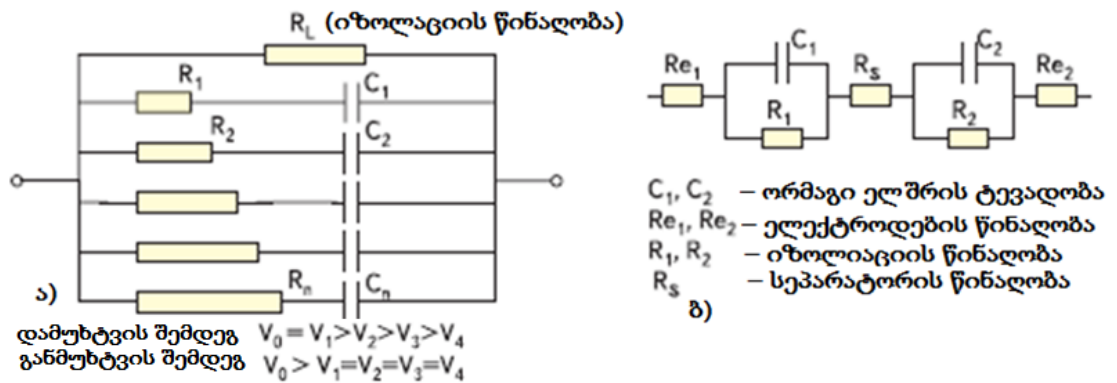
ელექტროდის მხარეს. იონები მასში ვერ შედიან და არ მოქმედებენ ელექტროდის ზედაპირთან დაფარული ნახშირის ელექტროქიმიური ნეიტრალობის გამო. შედეგად შექმნილი ოეშ წარმოადგენს შენახული ენერჯიის წყაროს. აქტიური ელექტროდები შედიან ელექტროლიტთან უანგვა-აღდგენით რეაქციაში და საერთოდ, იონისტორში ენერჯიის დაგროვება ხდება როგორც ოეშ-ით, ასევე შექცევადი ქიმიური რეაქციით. ამ პროცესებში აქტიურად მონაწილეობენ პატარა ნაწილაკის ყველა კონდენსატორები. ამიტომ, იონისტორისთვის შეიძლება გამოყენებულ იქნას ექვივალენტური სქემა, რომელიც გამოსახულია ნახაზ 48.4 - ზე. აქტივირებული ნახშირის ნაწილაკი/ელექტროლიტ აგებულ ყველა პატარა კონდენსატორს ოეშ-ით ექნება ტევადობა C_n და არაკომპენსირებული იონების წინაღობა R_{in} შეიძლება შეიცვალოს იონების სიჩქარით, ელექტროდებს შორის მანძილით და ა.შ. იონისტორი შედგება ორი ელექტროდისგან, გამოყოფილი ელექტროლიტით მასში მოთავსებული იონ გამტარი მემბრანით (სეპარატორი) და ელექტრული



ნახ.48.4. იონისტორის აქტიური შრის აქტივირებული ნახშირი/ ელექტროლიტი სტრუქტურის სქემატური გამოსახვა

ჩართვით. ენერჯის აკუმულაცია ხდება ორივე ელექტროდის ორმაგიშრით, როგორც ორშრიანი ტევადობების ერთობლიობა.

იონისტორის ექვივალენტური სქემა წინააღმდეგობა და მცირე კონდენსატორების



ნახ.48.5. იონისტორის ექვივალენტური სქემა (ა) და მასში ელექტროდების და სეპარატორის გათვალისწინებით (ბ)

პარალელური შეერთებით მოცემულია ნახ.48.5.ა-ბ. R_1, R_2 და R_n - აქტიური ნახშირის ნაწილაკთა შიგა წინააღმდეგობაა, C_1, C_2 და C_n - ოქსიდების ტევადობებია შესაბამისი წინააღმდეგობებისთვის. ნახ.48.5 ბ-ზე მოცემულ ექვივალენტურ სქემაზე, რომელიც ითვალისწინებს ელექტროდების და სეპარატორის წინააღმდეგობებს, V_0 -ის მოდების შემდეგ დაამუხტვის დენი (i) აღიწერება:

$$i = \frac{V}{R} \exp\left(\frac{-t}{RC}\right) \quad (48.1)$$

აღსანიშნავია, რომ დამუხტვის დენის სიდიდის შემცირებით, დამუხტვის დრო იზრდება. რაც შეეხება აკუმულიატორებს, ისინი ინახავენ დიდ ენერგიას, მაგრამ დამუხტვა/განმუხტვის პროცესი საკმაოდ დიდია. სუპერკონდენსატორებისთვის ეს დრო რამდენიმე წამია, მაგრამ მათთვის ელექტრო ენერგიის მარაგი ძალიან მცირეა, რაც აფერხებს მის ფართო გამოყენებას.

კონდენსატორის ტევადობა განისაზღვრება ფორმულით:

$$C = \epsilon_0 \frac{S}{d} \quad (48.2)$$

სადაც, C - კონდენსატორის ტევადობაა, ϵ - დიელექტრიკის დიელექტრიკული მუდმივა, ϵ_0 - ვაკუუმის დიელექტრიკული მუდმივა, S - ელექტროდების ფართი და d - ელექტროდებს შორის მანძილი.

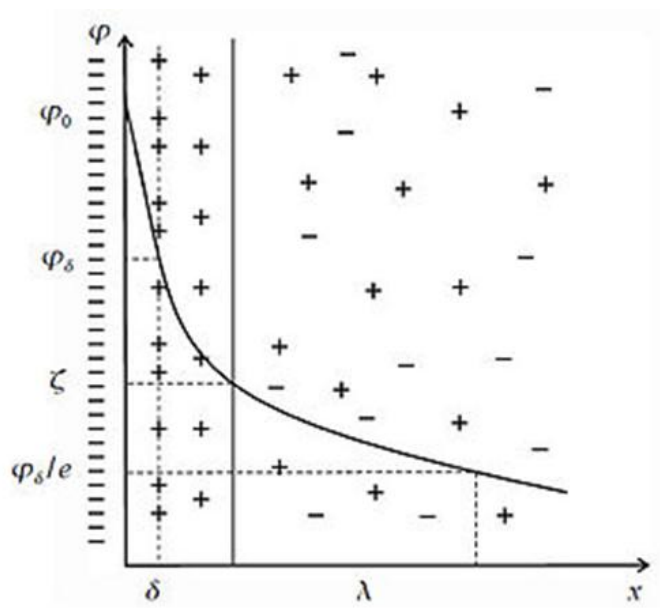
(48.2)-დან ჩანს, რომ ჩვეულებრივ კონდენსატორებში ტევადობის გაზრდა შესაძლებელია ϵ -ის ან S -ის გაზრდით, ან d -ს შემცირებით.

ბოლო დროს, ელექტრული აკუმულიატორების ნაცვლად გამოიყენება კონდენსატორების განსაკუთრებული სახე – სუპერკონდენსატორები (იონისტორები). იონისტორები – ელექტრული მოწყობილობებია, რომლებსაც აქვთ როგორც აკუმულიატორების მახასიათებლები – ელექტრული ენერგიის დიდი მარაგი, ასევე ელექტრული ენერგიის დიდი ტევადობა, ისე, როგორც კონდენსატორებს – დამუხტვა/განმუხტვის მცირე დრო. მის დადებით მხარეებად შეიძლება ჩაითვალოს:

- მცირე ხვედრითი ენერგია, ვიდრე აკუმულიატორებს;
- მოკლე ჩართვისას შიგა კონტაქტების უვნებელყოფა;
- თვითდამუხტვის მეტი სიდიდე ვიდრე აკუმულიატორებს;
- დამუხტვისა და განმუხტვის დენის დიდი მნიშვნელობა;
- ელექტროლიტის მცირე დეგრადაცია;
- მუშაობის დიდი დრო;
- კომპონენტების არატექსიკურობა.

ოქს-ს აქვს ისეთი აგებულება, როგორც ბრტყელ კონდენსატორს. განსხვავებით იდეალურისგან, რეალურად ოქს-ს აქვს დიფუზიური (განრთხმული) აგებულება. თანამედროვე თეორიით, ოქს შედგება ორი ფენისგან: 1) ჰელმჰოლცის ფენა, ანუ აღსორბირებული ფენა, რომელიც უშუალოდ ეკვრის ფაზათაშორის ზედაპირს δ სისქით (ნახ.48.6) და 2) დიფუზიური შრე,

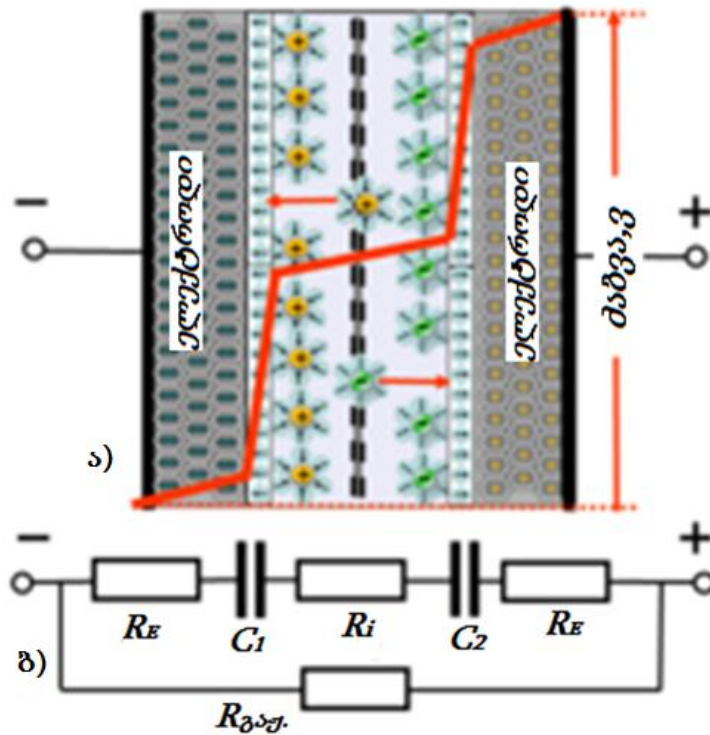
რომელშიცაა მოპირდაპირე იონები λ სისქით (ნახ.48.6), რომელიც დამოკიდებულია სისტემის თვისებებზე.



ნახ.48.6. იონისტორში ორმაგი ელექტრული შრის პოტენციალის აგებულება

ოქმ-ის ელექტრული მახასიათებელია ϕ პოტენციალი, რომელიც შედგება რამდენიმე შემადგენლისგან: 1) ϕ_0 - უშუალოდ ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე; 2) ϕ_δ - დიფუზიური შრის პოტენციალი, რომელიცაა აღსორბციული და დიფუზიურის საზღვარზე, 3) ელექტროკინეტიკური პოტენციალი, ამუ ძეტა-პოტენციალი, რომელიც სრიალის ზედაპირს და რომელიცაა დიფუზიური შრის პოტენციალის ნაწილი. სრიალის ზედაპირი წარმოიქმნება იმის შედეგად, რომ დისპერსიული ნაწილაკების მოძრაობისას დიფუზიურ შრეში უფრო შორს დაცილებულნი ვერ მონაწილეობენ დიფუზიურ მოძრაობაში და არიან გაჩერებულნი. ამიტომ, ჩნდება ნაწილაკთა არაკომპენსირებული ზედაპირული მუხტი და ხდება შესაძლო ელექტროკინეტიკური მოვლენა და 4) $\phi_{x=\lambda}$ პოტენციალი, e -ჯერ (2,7) ნაკლები, ვიდრე ϕ_δ და დიფუზიური შრის სისქის მახასიათებელი.

სიმეტრიულ იონისტორში პოტენციალი მცირდება სიმეტრიულად ორივე ორმაგ შრეში ელექტროდებისა და ელექტროლიტის მიხედვით (ნახ.48.7ა). ასიმეტრიულში, როგორც კონდენსატორების კიბრიდში, ელექტროდებს შორის ძაბვის ვარდნა ასიმეტრიულია. მასში მაქსიმალური ძაბვა შემოსაზღვრულია ელექტროლიტის იონური დაშლის მაქსიმალური დენით. ამ დროს გაჟონვის



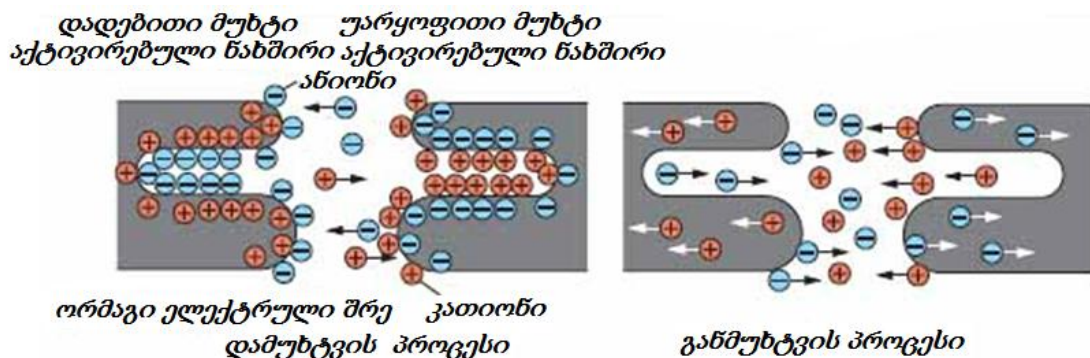
ნახ.48.7. სიმეტრიულ იონისტორში ძაბვის განაწილება და მისი ეკვივალენტური სქემა

დენები უფრო დიდია (ნახ.48.7ბ).

იონისტორის ფიზიკო-ქიმიური მუშაობის პრინციპი. ცნობილია, რომ ჩვეულებრივ კონდენსატორებს შემონაფენებს შორის აქვთ მრავალშრიანი ან მონოლითური დიელექტრიკები. მაგალითად, ალუმინიან ელექტროლითურ კონდენსატორებს დიელექტრიკად აქვთ Al_2O_3 , ტანტალურებს – Ta_2O_5 . იონისტორებს არ აქვთ დიელექტრიკული შრეები, მასში გამოიყენება ოქსიდის შექმნის მექანიზმი, რომელიც მუშაობს, როგორც დამუხტული დიელექტრიკი. დამუხტვა/განმუხტვის პროცესი მიმდინარეობს დადებითი და უარყოფითი ელექტროდების ზედაპირზე ფორმირდებული იონების შრეში, მაგალითად, აქტივირებული ნახშირის ელექტროდებზე (ნახ.48.8). მოდებული ძაბვით ანიონები და კათიონები მოძრაობენ შესაბამის ელექტროდებისკენ, გროვდება მათ ზედაპირზე და ქმნიან ოქსიდს, რომელიც გადამწყვეტია იონისტორის მუშაობისთვის.

იონისტორში გამოიყენებიან, ძირითად ელექტროლიტების ორი ტიპი – წყლიანი (წყალხსნარიანი) და ორანული (არაწყალხსნარიანი). არაწყლიანები გამოსადეგარნი არიან იონისტორის უჯრედზე 3ვ-მდე ძაბვის მოდებაზე, რაც 2-

ჯერ მეტია წყალხსნარიანეთან შედარებით და მუდმივი ძაბვის მოდებისას არ აქვთ გაჟონვის დენი. განსაზღვრული პოლარობის ძაბვის კონკრეტულ დონეზე.



ნახ.48.8. იონისტორის დადებით და უარყოფით ელექტროდებზე ორმაგი ელექტრული შრის შექმნა

ელექტროქიმიური პროცესის გამო გაივლის დენი. ამ ძაბვის სიდიდეს ეწოდება “დაშლის ძაბვა”. ძაბვის შემდგომი ზრდა იწვევს ელექტროლიტის უფრო ინტენსიურად დაშლას, ჩნდება დამატებითი დენი და იონისტორი გამოდის მწყობრიდან. დამუხტვისას იონისტორზე მოდებული ძაბვა არ უნდა აღემატებოდეს დაშლის ძაბვას. ამიტომ დამუხტვისას იონისტორებს რთავენ მიმდევრობით.

იონისტორის ელექტრული და საექსპლუატაციური პარამეტრები.

ტევადობა. როგორც იყო აღნიშნული, იონისტორი წარმოადგენს სხვადასხვა წინააღმდეგობის მქონე მცირე კონდენსატორებისგან შემდგარი ექვივალენტური სქემის სახით (ნახ.48.5). თუ საწყისი მუხტითი ძაბვა ნაკლებია სრული მუხტის ძაბვაზე (V_0), მაშინ ტევადობის გაზომვისას იონისტორზე ძაბვა დაეცემა დაბლა. ეს დაკავშირებულია იმასთან, რომ დიდი შიგა წინააღმდეგობის მცირე კონდენსატორები არ არიან ბოლომდე დამუხტულნი. მაგრამ, დამუხტვის დროის გაზრდით ეს მცირე კონდენსატორები დაიმუხტებიან ბოლომდე და გაიზრდება ტევადობა. იონისტორის ტევადობა განისაზღვრება:

$$C = \frac{I \times t}{V_1 - V_2} \quad (48.3)$$

სადაც C - ელექტრული ტევადობაა (ფ), I - ტესტირების დენი (ა), $V_1 - V_2$ - ძაბვის ტესტური დიაპაზონი (ვ) და t - დრო (წმ). თუ განმუხტვის დენი დიდია ან კონდენსატორი განიმუხტა დიდი დროის განმავლობაში, მაშინ

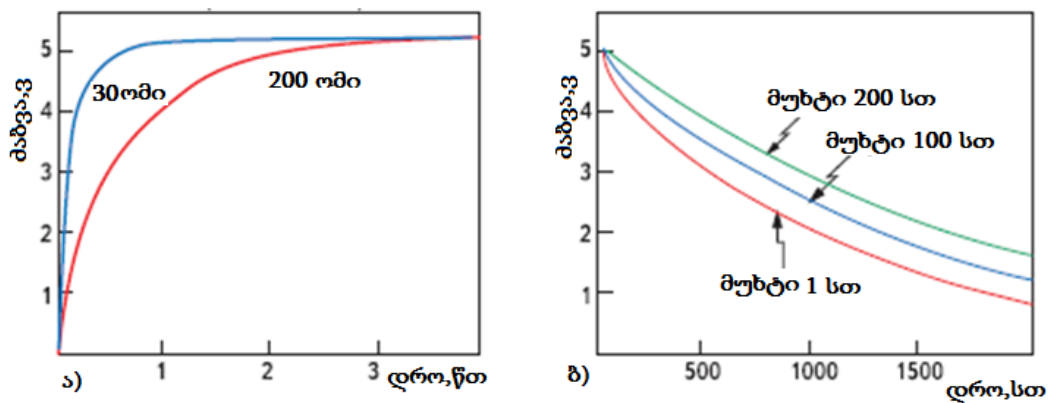
მარეზულტირებელი ტევადობა იქნება მცირე, და პირიქით. ამიტომ, საჭირო გაზომებისთვის უნდა იყოს განმუხტვის დენი 1მა/ფ.

შიგა წინააღმდეგობა იონისტორისთვის, შედარებით ელექტროლიტურებთან, დიდია, რადგან ის შედგება მრავალი სხვადასხვა შიგა წინააღმდეგობის, მცირე კონდენსატორებისგან. წინააღმდეგობების გაზომვები, როგორც წესი, მოიცემა მუდმივ ძაბვაზე და ზუსტი გაზომვებისთვის უნდა გამოვიყენოთ კომპლექსური წინააღმდეგობა (Z , მაგალითად 1კჰც). რადგანაც, ძალიან ძნელია იონისტორში გაჟონვის დენების განსაზღვრა, ამიტომ ხშირად მას დოკუმენტაციაში არ უთითებენ.

მუხტის მახასიათებელი. იონისტორის ეს პარამეტრი რამდენიმე მარტივი დაშვებით შეიძლება ასე წარმოვადგინოთ:

$$V = V_0[1 - \exp(-t / RC)] \quad (48.4)$$

ნახ.48.9-ზე გამოსახულია იონისტორის დამუხტვის ძაბვის დამოკიდებულება დროზე სხვადასხვა წინააღმდეგობისას. წინააღმდეგობის გაზრდით დამუხტვის



ნახ.48.9. იონისტორის დამუხტვისა (ა) და განმუხტვის (ბ) ძაბვის დროზე დამოკიდებულება სხვადასხვა წინააღმდეგობისა და დროის დამუხტვისას

დროც იზრდება. მუდმივი დატვირთვის წინააღმდეგობისა და დენის დროს განმუხტვის დრო ასე წარმოიდგინება:

$$t = \frac{C \times (V_0 - V_1)}{I} \quad (48.5)$$

$$t = -C \times R \times \ln(V_1 / V_0) \quad (48.6)$$

სადაც, t – დროა, C – ტევადობა, V_0 – შიგა დაძაბულობა, $V_1 - (t - \tau)$ -ის შემდეგ ძაბვა, I – დატვირთვის დენი და R – დატვირთვის წინაღობა.

ნახ.48.9 ბ-ზე მოყვანილია იონისტორის განმუხტვის ძაბვაზე დამოკიდებულება სხვადასხვა დროის დამუხტვისას. ჩანს, რომ მაგალითად, დამუხტვის პროცესის ერთი საათიდან 100 საათამდე ცვლილებისას, ძაბვა ფაქტიურად იცვლება 2,5-დან 2,8 ვოლტამდე და ასე, რომ იონისტორის დამუხტვა შეიძლება იყოს სწრაფი.

განმუხტვისა და თვითგანმუხტვის მახასიათებელი. იონისტორის განმუხტვის მახასიათებელი (47.3)-ის გათვალისწინებით ასე შეიძლება წარმოდგინდეს:

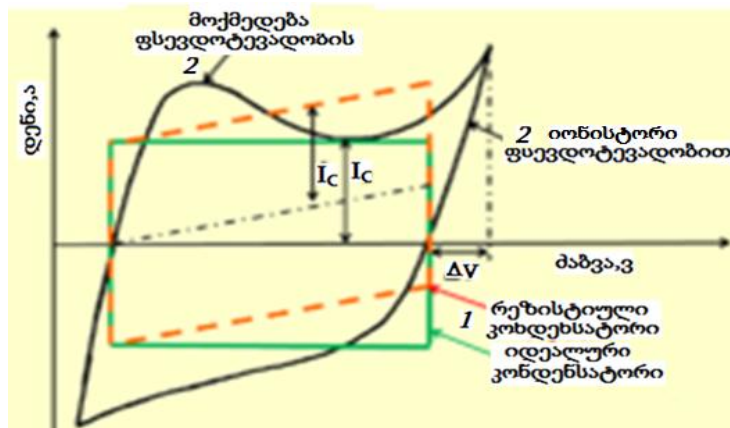
$$t = C \times \frac{V_1 - V_2}{I} \quad (48.7)$$

თვითგანმუხტვის მახასიათებელი კი:

$$V = V_0 \times \exp\left(\frac{-t}{R_L C}\right) \quad (48.8)$$

სადაც, R_L – იზოლაციის წინააღმდეგობაა.

შესამჩნევი განსხვავება დაიმზირება სტატიკურ კონდენსატორისა და იონისტორის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელზე, რომელიც გამოსახულია ნახაზ 48.10-ზე.



ნახ.48.10. იონისტორის ციკლური ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი:
1 – სტატიკური და 2 - ფსევდოტევადობა

იონისტორები, გამოყენებული ელექტროლიტის მასალების მიხედვით, იყოფიან შემდეგ ჯგუფებად: 1) თხევადი, 2) მყარსხეულოვანი, 3) პოლიმერული და 4) ორგანული.

მყარსხეულოვანი ელექტროლიტები – განსაკუთრებული ტიპის იონური კრისტალებია, რომლებიც გამოირჩევიან მაღალი გამტარებლობით. ასეთ

მასალებში გამტარებლობა ხორციელდება არა ელექტრონების მოძრაობით, როგორც სხვა სტრუქტურის კრისტალებში, არამედ სხვადასხვა ნიშნის იონებით, თხიერი ელექტროლიტების მსგავსად. ამიტომ ასევე იონურ კრისტალებს უწოდებენ მყარ დიელექტრიკებს ან სუპერიონურ გამტარებს. სუპერიონურ გამტარებად შეიძლება გამოყენებულ იქნას ისეც როგორცაა, მაგალითად AgI , Ag_4RbI_5 , LiI და ა.შ. მათში იონური ტრანსპორტის პროცესები აღიწერება გადინების (პერკოლაციის) თეორიით. ამ თეორიაში მნიშვნელოვანია “გადინების ალბათობის” არსი, რომელიც განისაზღვრება როგორც ალბათობა იმისა, რომ არის ნებისმიერ წერტილში ინექტირებული სითხე მიადწევს ამ წერტილიდან უსასრულოდ დაშორებულ წერტილს. ცხადია, რომ გადინების თეორიისას სითხის გავრცელების პროცესი შემოფარგლული იქნება ფორიანი არის რაღაც სასრულო უბანში, ანუ ფორიან არეში ეს თეორიას მიახლოებითია.

ასევე პერკოლაციის არსი შეიძლება გადავიტანოთ ნებისმიერ გარემოზე, რომელშიც ხდება მეორის რომელიღაც ნივთიერების გადატანა, რომელთაც ეწოდებათ პერკოლაციური გარემოები. ამ გარემოებისთვის საჭიროა განისაზღვროს გადინების წყარო, სხვადასხვა მდგომარეობაში მყოფი გადინების ელემენტები, ერთი არაგადინებადი (პირველადი), მეორე გადინებადი, ასევე გადინების მეთოდი. ასევე მნიშვნელოვანია ზღბრული გადინება – პერკოლაციური არის გამტარი კომპონენტის მინიმალური კონცენტრაცია.

ჩვეულებრივ, იონური ტრანსპორტი გულისხმობს იონების შემთხვევით გადაადგილებას ვაკანსიური მექანიზმით, ამიტომ პერკოლაციის პროცესი არ შეიძლება განხორციელდეს რეგულარულ კრისტალში. აქედან გამომდინარე, სუპერიონური გამტარები შექმნილი არიან კომპოზიციური მასალებისგან.

უკანასკნელ ხანს ინტენსიურად ისწავლება ვერცხლის იოდანი, როგორც მცირე დისპერსიული კრისტალიტების სუპერიონური გამტარი. ასევე ის გამოიყენება ნანომავთულების სახით. სუპერიონური გამტარი AgI მზადდება ალუმინის ანოდური ოქსიდის საფუძველზე, რომელშიც ლეგირებულია ნანომავთული. მიმდინარეობს სამუშაოები AgI -ში შეცვალონ დიელექტრიკული მუდმივა და შიგა წინააღმდეგობა მასში ტიტანისა და ბისმუტის იონების შერევით.

საკონტროლო კითხვები:

1. რა პრინციპზე მუშაობს მემრისტორი?
2. მიიღეთ მერმისტრობის მუხტის სიდიდეზე დამოკიდებულება;
3. რა ფიზიკო-ქიმიურ პრინციპზე მუშაობს იონისტორი?

საკითხები თანამედროვე ნანოტექნოლოგიებში

1. ნანოტექნოლოგიის არსი, ამოცანები და ტერმინოლოგია
2. საკუთარი ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი
3. n-ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი
4. p-ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი
5. დენის მატარებელთა ძვრადობა
6. ნახევარგამტარის ზედაპირზე დიელექტრიკული ფირის მიღება
7. ფოტოლიტოგრაფია: ფოტორეზისტი და მისი სახეები, ფოტოშაბლონი და მისი კონტროლი, ფოტოლიტოგრაფია SiO_2 -ის მაგალითზე
8. ნახევარგამტარში მინარევის დიფუზია და ლეგირების პროცესები
9. ეპიტაქსიის პროცესებით თხელი ფირების მიღება
10. სქემის ტოპოლოგიის შექმნა და მოდელირება
11. სქემის შექმნა ველის ტრანზისტორის მაგალითზე
12. ინტეგრალური სქემები და მათი კლასიფიკაცია
13. ფოტოლიტოგრაფიის ალტერნატიული მეთოდები
14. ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფია
15. ფეთქებადი ლიტოგრაფია
16. მასკანირებელი ზონდური მიკროსკოპია
17. ნანოლიტოგრაფია
18. ტალღური ფუნქციის არსი
19. ერთელექტრონიანი ატომის ორბიტალები
20. კვანტური რიცხვების არსი
21. მრავალელექტრონიანი ატომის ორბიტალები
22. მოლეკულის აღნაგობა
23. ელემენტთა ქიმიური ბმა
24. ჰომეოპოლარული (კოვალენტური) ბმა
25. ჰეტეროპოლარული (იონური) ბმა
26. მეტალური ბმა
27. მოლეკულური (ვან-დერ-ვაალსის) ბმა
28. წყალბადისებური ბმა
29. ნანოსტრუქტურებში შინაგანი და გარეგანი ზედაპირების როლი
30. ინდივიდუალური ნანონაწილაკები და ნანოსისტემები
31. ნანონაწილაკის გეომეტრიული სისტემა

32. მაგიური რიცხვი
33. ნანონაწილაკის ელექტრული სტრუქტურა
34. მეტალური ნანონაწილაკები
35. ნანოშეზღუდვები: ნანოფირფიტის, ნანომაფთულის და კვანტური
წერტილის ცნებების არსი
36. კრისტალის აგებულება
37. ფულერენი
38. ნახშირბადის ნანომილაკები. ჰირალობა
39. ფულერენის და ნანომილაკის მიღება გრაფიტის ლაზერული
აორთქლებით
40. ფულერენის და ნანომილაკის თვისებები და გამოყენება
41. ელექტრონული მიკროსკოპიის გაზომვის არსი და მეთოდები
42. მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპი
43. ატომურ-ძალური მიკროსკოპი
44. მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი