

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

მაია მეტონიძე

სითბოტევადობისა და სითბოგამტარობის ფიზიკური
ბუნება

წარმოდგენილია დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად

სადოქტორო პროგრამა საინჟინრო ფიზიკა

შიფრი 0404

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტში

თბილისი, 0175, საქართველო

2020 წელი

საავტორო უფლება © 2020 წელი მაია მეტონიძე

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ინფორმატიკისა და მართვის სისტემების ფაკულტეტი

ჩვენ, ქვემოთ ხელისმომწერნი ვადასტურებთ, რომ გავეცანით მაია მეტონიძის მიერ შესრულებულ სადისერტაციო ნაშრომს დასახელებით: "სითბოტევადობისა და სითბოგამტარობის ფიზიკური ბუნება" და ვაძლევთ რეკომენდაციას საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის -----
----- საუნივერსიტეტო სადისერტაციო საბჭოში მის განხილვას დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად.

-----, ----- 2020 წელი

თანახელმძღვანელები: პროფესორი _____ აკაკი გიგინეიშვილი

რეცენზენტი: _____

რეცენზენტი: _____

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

2020 წ.

ავტორი: მაია მეტონიძე

დასახელება: ნანონაწილაკების ფიზიკური თვისებების დამოკიდებულება
მათ ზომებზე

სადოქტორო პროგრამა: -----

ხარისხი: დოქტორის აკადემიური ხარისხი

სხდომა ჩატარდა: -----

ინდივიდუალური პროცენტების ან ინსტიტუტების მიერ
ზემომოყვანილი დასახელების დისერტაციის გაცნობის მიზნით მოთხოვნის
შემთხვევაში მისი არაკომერციული მიზნებით კოპირებისა და გავრცელების
უფლება მინიჭებული აქვს საქართველოს ტექნიკურ უნივერსიტეტს

ავტორის ხელმოწერა

ავტორი ინარჩუნებს დანარჩენ საგამომცემლო უფლებებს და არც
მთლიანი ნაშრომის და არც მისი ცალკეული კომპონენტების გადაბეჭდვა ან
სხვა რაიმე მეთოდით რეპროდუქცია დაუშვებელია ავტორის წერილობითი
ნებართვის გარეშე.

ავტორი ირწმუნება, რომ ნაშრომში გამოყენებული საავტორო
უფლებებით დაცულ მასალებზე მიღებულია შესაბამისი ნებართვა (გარდა
იმ მცირე ზომის ციტატებისა, რომლებიც მოითხოვენ მხოლოდ სპეციფიურ
მიმართებას ლიტერატურციტირებაში, როგორც ეს მიღებულია სამეცნიერო
ნაშრომების შესრულებისას) და ყველა მათგანზე იღებს პასუხისმგებლობას.

ნაშრომი ეძღვნება ჩემი შვილის – ვლადიმერ
კვიტაშვილის ხსოვნას

რეზიუმე

ნანოიდენტაცია არის ერთ-ერთი ყველაზე მნიშვნელოვანი მეთოდი ღრმა და ზედაპირულ ფენების მექანიკური თვისებების შესასწავლად. არსებობს მრავალი ჰიპოთეზა, რომელიც ეხმიანება ამ მკვეთრ გადასვლებს, მაგრამ ეს ჰიპოთეზები არ შეიძლება განმარტავდეს იმ ფაქტს, რომ პრეცესიულ კვლევაში დატვირთვის სიღრმეზე ინტენტრის შეღწევადობის სიღრმეზე დამოკიდებულების დაფიქსირებისას, შეინიშნება ზონები, რომელთაც ინტენსივობის შეღწევადობის სიღრმის მკვეთრი ზრდა აქვთ მუდმივი დატვირთვის მნიშვნელობით.

ერთ კვანტურ მდგომარეობაში ყოფნისას ნანონაწილაკები ზრდის ქიმიური ბმის ენერჯიას (დამაკავშირებელი ზონები), ხოლო მეორეში ამცირებენ მას (ანტიდამაკავშირებელი ზონები). ქიმიური ბმის ენერჯიის დაქვეითება ხდება ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკების საშუალებით (აღზნებული თავისუფალი ელექტრონების და ხვრელების) ამა თუ იმ ატომის მახლობლად. ქიმიური კავშირის მოლეკულური ორბიტალების თეორიის შესაბამისად, რომელიც ვრცელდება მყარ სხეულებსა და სითხეებზე, ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრი შედგება დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ზონებისგან. ნახევარგამტარებში, ეს ზონები ერთმანეთისგან განცალკევებულია ღრმულებით, ხოლო მეტალებში ისინი დახურულია. დამაკავშირებელ ზონაში ელექტრონის არსებობა იზრდება, ხოლო მისი არარსებობა (ხვრელი) ამცირებს ქიმიურ კავშირს. მოცემული ატომის (მოლეკულის) ქიმიური კავშირის სიძლიერე მეზობელ ატომებთან განისაზღვრება დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ ნაწილაკებს შორის განსხვავებით. რაც უფრო მცირეა ეს განსხვავება, მით უფრო სუსტია ქიმიური კავშირი და როდესაც სხვაობა ნულის ტოლია, ქიმიური ბმული ქრება (სუბლიმაცია, აორთქლება, დუღილი).

ამრიგად, ელექტრონის გადასვლა (მეტალებში, გადასვლები ხდება ფერმის დონესა და ანტიდამაკავშირებელ ზონის ძირს შორის - ეს ენერგეტიკული მანძილი მოიხსენიება, როგორც ფსევდო ბადის უფსკრული) ნიშნავს ქიმიური ბმის შემცირებას. ნივთიერება ანუ, თუ ეს არის მყარი სხეული, ის უნდა გახდეს რბილი და გაიზარდოს ზომაში, რაც ექსპერიმენტულად დამტკიცებულია. ელექტრონების გადაცემა შესაძლებელია სხვადასხვა გზით. ნებისმიერ შემთხვევაში, ატომის მოძრაობა ხელს შეუწყობს მისი ქაოტური მოძრაობით, ელექტრონისა და ხვრელის მისვლის შესაძლებლობას გარკვეულ ატომთან ახლოს, n / Na - ის ალბათობით (n არის ანტიანთებითი კვაზიკვლეების კონცენტრაცია, ხოლო Na არის ნივთიერების ატომების მთლიანი კონცენტრაცია) სხვადასხვა β რაოდენობით (ენერჯიის პოტენციური ცვალებადობა) ალბათობით (n / Na) და განსხვავებულად ასუსტებს ქიმიურ კავშირს. რაც უფრო მეტია კონცენტრაცია ანტიდამაკავშირებელი კვაზი ნაწილაკებისა მოცემულ

ტემპერატურაზე, მით უფრო დიდი იქნება ატომური მოძრაობის ალბათობა და უფრო ინტენსიური იქნება დაკვირვების პროცესი. და როდესაც ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკების კრიტიკულ კონცენტრაციას მიაღწევს, $n_k = N_a m^* / Ma$ (m^* არის კვაზი ნაწილაკის-თავისუფალი ელექტრონის ეფექტური მასა, Ma არის ნივთიერების ატომის (მოლეკულის) მასა), იწყება დნობის პროცესი, მიუხედავად იმისა, თუ როგორ წარმოიქმნა ანტიდამაკავშირებელი კვაზი ნაწილაკები.

მოლეკულურ-პოტენციურმა თეორიამ შესაძლებელი გახადა აეხსნა სიმძიმის ცვლილებების ზემოქმედების შედეგად დაფიქსირებული ყველა ის მოვლენა, რომელიც გამოწვეულია სინათლის (ფოტომექანიკური ეფექტი-PME), ელექტრული დენის ან ველის (ელექტრომექანიკური მოქმედებით-EME), ტემპერატურის (თერმომექანიკური ეფექტი-TME) გავლენის ქვეშ. , მაგნიტური ველი (მაგნიტომექანიკური მოქმედება-MME), ანუ მათი დამოკიდებულება მინარევებისაგან გამოწვეული სინათლის, ტემპერატურის, კონცენტრაციის ინტენსივობისა და სპექტრული შემადგენლობისა და ა.შ.

როდესაც ნანოიდენტორი დაუკავშირდა შესწავლილი ნიმუშის ზედაპირს, საკმაოდ მაღალი წნევის არსებობისას, იცვლება ქიმიურ შემადგენლობაზე ელექტრონულ ენერგეტიკულ სპექტრი, რაც გამოიხატება როგორც ენერგეტიკული ზოლების შედარებითი პოზიციის ცვლილებით. სხვადასხვა კრისტალოგრაფიული მიმართულებით, ზოლები სხვაგვარად იცვლება, მაგრამ გარკვეული მიმართულებით, დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ზონები ყოველთვის უახლოვდება ერთმანეთს, ხოლო საწინააღმდეგო კვანძების კონცენტრაცია იზრდება მუდმივ ტემპერატურაზე. კონტაქტის არეალში ხდება ადგილობრივი ზონის დაქვეითება და ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკების კონცენტრაციის მომატება, რაც ხელს უწყობს ატომების (მოლეკულების) მოძრაობას, ანუ წერტილოვანი დეფექტების წარმოქმნას. ამასთან, ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკების კრიტიკულ კონცენტრაციაზე მიღწევისას ხდება ადგილობრივი დნობა, რაც იწვევს მუდმივად დატვირთვის გავლენის ქვეშ დენტის შეღწევადობის სიღრმის მკვეთრ ზრდას. ეს, რა თქმა უნდა, ზრდის კონტაქტის ზონას, რის შედეგადაც ხდება წნევის დაქვეითება და, შესაბამისად, ანტიანთებითი ნაწილაკების კონცენტრაციისას და დნობის პროცესი ჩერდება. ამიტომ, ინცენტრის შეღწევადობის სიღრმის კიდევ უფრო გაზრდის მიზნით, დატვირთვა უნდა გაიზარდოს. დატვირთვის შემდგომი გაზრდით შეიძლება მოხდეს ზემოთ აღწერილი სიტუაცია და შეიძლება მოხდეს დენტის შეღწევადობის სიღრმის ახალი მკვეთრი ზრდა და ა.შ.

ნათელია, რომ დატვირთვის ინტენსივობა, რომლის დროსაც ხდება ინცენტრის შეღწევადობის სიღრმისეული მკვეთრი მატება, ეს დამოკიდებულია მასალის ბუნებასა და დამუშავებაზე, ინდუქტორული წვეტის გეომეტრიაზე, დატვირთვის სიჩქარეზე და ექსპერიმენტის ტემპერატურაზე, რომელიც გავლენას მოახდენს ანტიანთებითი კვაზური

ნაწილაკების წარმოქმნა. ტემპერატურის მატებასთან ერთად, ელექტრონების თერმული გადასვლები ასევე ხელს შეუწყობს ანტიანთებითი კვაზინაწილაკების კრიტიკული კონცენტრაციის მიღწევას. ამრიგად, ქვედა დენზე შეყვანის სიღრმის ღრმა მკვეთრი მატება მოხდება, რაც შეინიშნება ექსპერიმენტულად. დატვირთვის კურსის მატებასთან ერთად, ანტიანთებით მოცული ნაწილაკების წონასწორობის კრიტიკულ კონცენტრაციას დრო არ მივა, რისთვისაც საჭიროა დატვირთვის გაზრდა, რაც შეინიშნება ექსპერიმენტულად. ტრიქსტროპული ეფექტის შესახებ ექსპერიმენტული მონაცემებით ასევე დასტურდება ინცენტრის შეღწევადობის სიღრმის მკვეთრი ზრდის მექანიზმი ადგილობრივი დნობის გამო მუდმივი დატვირთვის მოქმედების ქვეშ: ადგილობრივი ამოფრქვევის შედეგად მასალაში ამორფული ნივთიერების ბუჩქების გამოჩენა. ინტერფეისი, რომელიც მის სტრუქტურაში ძალიან ჰგავს მყარ გაყინვას დნობის შემდეგ.

სიხისტის დამოკიდებულების სიღრმეზე ასახსნელად განვიხილოთ, თუ როგორ იცვლება ქიმიური ბმების სიძლიერე ზედაპირიდან მოცულობამდე. ზედაპირის უკიდურეს ატომებს აქვთ გაჯერებული ქიმიური ბმები - გადაჭარბებული ელექტრონები, რომლებიც მეზობელ მხარეს ატომებს უკავშირებენ. ეს გადაჭარბებული უარყოფითი მუხტის სიმკვრივე მიედინება ატომების კვანძებზე, რომლებიც განლაგებულია ზედაპირის ფენებში და სიღრმეზე მცირდება ნივთიერების უფრო სწრაფი, მცირე და დიელექტრიული მუდმივობით.

ამრიგად, ზედაპირის მიმართ უარყოფითი მუხტის სიმკვრივის ზრდა ზრდის ქიმიური ბმების სიმტკიცეს და, შესაბამისად, სიხისტეს, რაც შეინიშნება ექსპერიმენტულად. ეს მექანიზმი დამტკიცებულია იმით, რომ თუ ჩვენ გარკვეულწილად გავაუმჯობესებთ ანტიანთებით მოცული ნაწილაკების კონცენტრაციას ზედაპირზე, ამით შეამცირებს ქიმიური ბმების სიძლიერეს, ისე, რომ ნიმუშის ზედაპირზე კონცენტრაციის საწინააღმდეგო კვაზი ნაწილაკები იყოს მაქსიმალური და დაეცემა ღრმად ნაყარში ნიმუშის მიხედვით, სიმტკიცე ზედაპირზე უნდა იყოს უფრო დაბალი, ვიდრე სიღრმეში. საწყის პროცესში შესწავლილი ნიმუშის ზედაპირი ერთ შემთხვევაში იყო განათებული ძლიერად შთამნთქმელი მონოქრომატული შუქით, ხოლო მეორეში - თეთრი შუქით, რომელმაც შეაღწია მნიშვნელოვან სიღრმეში. როგორც ფიგურებიდან ჩანს, პირველ შემთხვევაში, ზედაპირზე სიმტკიცე, სადაც კონცენტრაციის საწინააღმდეგო კვანძების კონცენტრაცია მაქსიმალურია, უფრო დაბალია, ვიდრე სიღრმეზე, სადაც ანტიანთებითი კვაზინაწილაკები არ წარმოიქმნება სინათლით. ზედაპირის სიღრმეში სიმკვრივის ზრდის დამოკიდებულება ემთხვევა სინათლის შედეგად წარმოქმნილი ნაწილაკების კონცენტრაციის შემცირებას. მეორე შემთხვევაში, მსუბუქი, რომელიც აღწევს ნიმუშის მთელ შესწავლილ სიღრმეზე, წარმოქმნის ანტიანთებით მოცულ ნაწილაკებს ერთნაირად, ხოლო სიმკვრივის დაქვეითება ხდება თანაბრად მთლიანი ნიმუშის მთელ

სიღრმეში. ეს მონაცემები, ჩვენი აზრით, ცალსახად ასაბუთებს შემოთავაზებული მექანიზმის სისწორეს.

ამრიგად, ნაჩვენებია, რომ გარეგანი ძალის მოქმედების პირობებში, ამ შემთხვევაში ინცენტრული, დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ზონების კონვერტირება და ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკების წარმოქმნა - აღზნებული თავისუფალი ელექტრონები და ხვრელები, რაც ამცირებს ქიმიური ბმების ენერგიას. ეს აადვილებს ატომების ადგილმდებარეობის შეცვლას, რაც დასაწყისში ქმნის წერტილოვან დეფექტებს და იზრდება გარეგანი ძალა, მასალა დნება და იშლება.

Abstract

Nanohydration is one of the most important methods for studying the mechanical properties of deep and surface layers. There are many hypotheses that respond to these sharp transitions, but these hypotheses cannot be explained by the fact that in the pre-study study, when the dependence on the depth of intrusion penetration into the load depth was observed, zones with a sharp increase in intensity penetration depth were observed.

When in one quantum state, nanoparticles increase the energy of the chemical bond (bonding zones), while in the other they reduce it (anti-bonding zones). The chemical bond energy is reduced by means of antiviral quasi-particles (excited free electrons and holes) near this or that atom. According to the theory of molecular orbitals of a chemical bond, which applies to solids and liquids, the energy spectrum of electrons consists of the bonding-anti-bonding and anti-bonding zones. In semiconductors, these zones are separated by holes, while in metals they are closed. The presence of an electron in the bonding zone increases, and its absence (hole) reduces the chemical bond. The chemical bond strength of a given atom (molecule) with neighboring atoms is determined by the difference between the bonding and anti-bonding particles. The smaller this difference, the weaker the chemical bond, and when the difference is zero, the chemical link disappears (sublimation, evaporation, fermentation).

Thus, the transition of an electron (in metals, the transitions between the fermi level and the base of the anti-bond zone - this energy distance is referred to as the pseudo-grid gap) means a reduction in the chemical bond. The substance, that is, if it is a solid body, it must become soft and increase in size, which has been experimentally proven. Electrons can be transmitted in different ways. In any case, the motion of an atom will be facilitated by its chaotic motion, the ability of an electron and a hole to come close to a certain atom, the probability of n / N_a (n is the concentration of anti-inflammatory quasi-molecules, and N_a is the total concentration of substance atoms) (n / N_a) and otherwise attenuates the chemical bond. The higher the concentration of antiviral quasi-particles at a given temperature, the greater the probability of atomic motion and the more intense the observation process. And when the anticonvulsant quasi-particle reaches a critical concentration, $n_k = N_a m^* / M_a$ (m^* is the effective mass of the quasi-particle-free electron, M_a is the mass of the atom (molecule) of the substance), the melting process begins, regardless of how the antiviral quasi-particles are formed.

Molecular-potential theory made it possible to explain all the effects of light changes caused by light (photomechanical effect (PME), electric current or field (electromechanical action (EME)), temperature (thermomechanical effect (TME)), , Magnetic field (magnetomechanical action-MME), ie their dependence on light, temperature, concentration intensity and spectral composition caused by impurities, etc.

When a nanofluidor is connected to the surface of the studied sample, in the presence of a fairly high pressure, the chemical binding electron energy spectrum changes, which is manifested as a change in the relative position of the energy bands. In different crystallographic directions, the bands change differently, but in a certain direction, the connecting and anti-bonding zones always come closer to each other, while the concentration of the opposite nodes increases at constant temperature. In the contact area, the local zone decreases and the concentration of antiviral quasi-particles increases, which

promotes the movement of atoms (molecules), ie the formation of point defects. However, when the critical concentration of antiviral quasars is reached, local melting occurs, which leads to a sharp increase in the depth of penetration of the gun under the influence of constant load. This, of course, increases the contact zone, resulting in a decrease in pressure and, consequently, a decrease in the concentration of anti-inflammatory particles and the melting process. Therefore, in order to further increase the depth of penetration of the center, the load must be increased. A further increase in the load may result in the situation described above, and a new sharp increase in the depth of penetration of the gunpowder may occur, and so on.

It is clear that the intensity of the load at which the deep penetration of the penetration penetrates sharply depends on the nature and processing of the material, the geometry of the inductor drop, the load velocity, and the experimental temperature that will affect the formation of anti-inflammatory quasi-particles. As the temperature increases, the thermal transitions of the electrons will also contribute to the critical concentration of the anti-inflammatory quasars. Thus, a deep sharp increase in the depth of input to the lower current will occur, which is observed experimentally. With the increase of the load rate, the critical concentration of the balance of antiplatelet particles will not take time, for which it is necessary to increase the load, which is observed experimentally. Experimental data on the trixtropic effect also confirm the mechanism of sharp increase in the depth of penetration of the center due to local melting under the action of constant load: the appearance of amorphous shrubs in the material as a result of local eruption. An interface that in its structure is very similar to solid freezing after melting.

To explain the depth of stiffness dependence, consider how the strength of chemical bonds varies from surface to volume. The extreme atoms of the surface have saturated chi-muri bonds - excessive electrons that connect the atoms on the neighboring side. This excessive negative charge density flows to the nodes of the atoms located in the surface layers and decreases in depth with a faster, smaller, and dielectric constant of the substance.

Thus, an increase in the negative charge density with respect to the surface increases the strength of the chemical bonds and, consequently, the hardness that is observed experimentally. This mechanism is proven by the fact that if we somewhat improve the concentration of antipyretic particles on the surface, thus reducing the strength of chemical bonds, so that the quasi-particles against concentration on the sample surface are maximum and fall deep into the bulk, the surface hardness should be lower than the depth. In the initial process, the surface of the sample was illuminated in one case by a strongly absorbing monochromatic light, and in the other by a white light, which penetrated to a considerable depth. As can be seen from the figure, in the first case, the surface hardness, where the concentration of anti-concentration nodes is maximal, is lower than the depth where the anti-inflammatory quasi-particles do not form with light. The dependence of the density increase on the depth of the surface coincides with the decrease in the concentration of the particles produced by the light. In the second case, the light, which reaches the entire studied depth of the sample, generates particles with anti-inflammatory uniforms in the same way, while the density decreases evenly throughout the entire depth of the sample. These data, in our view, unequivocally substantiate the correctness of the proposed mechanism.

Thus, it has been shown that under conditions of external force, in this case the conversion of the focal, connecting and antimatter zones and the formation of antiplatelet quasi-particles - excited free electrons and holes, which reduces the energy of chemical bonds. This makes it easier to change the location of the atoms, which initially creates point defects and increases the external force, the material melts and disintegrates.

შინაარსი

შესავალი	20
ლიტერატურის მიმოხილვა	22
თავი 1. ნანონაწილაკების დახასიათება.....	22
თავი 2. ნანონაწილაკების ელექტრონული სტრუქტურა.....	31
2.1 ქიმიური ბმები მოლეკულებში.....	31
2.2 მყარი სხეულის ელექტრონული სტრუქტურა	33
2.3 კლასტერებისა და ნანონაწილაკების ელექტრონული სტრუქტურა	39
2.4 სამუშაოს მიზანი	43
თავი 3. ნანონაწილაკების მახასიათებელი თვისებების დამოკიდებულება მათ ზომებზე.....	45
3.1 ატომთა გადაადგილების პოტენციური მექანიზმი მყარ სხეულებში.....	47
3.2 მესრის პარამეტრის და დებაის ტემპერატურის ცვლილება ნანონაწილაკების ზომების მიხედვით.....	58
3.2.1 მესრის პარამეტრის ცვლილება სინათლის ზეგავლენით მყარ სხეულებში ...	58
3.2.2 ნანონაწილაკებში მესრის პარამეტრის ცვლილების ფიზიკური ბუნება	60
3.2.3 ნანონაწილაკებში დებაის ტემპერატურის ცვლილება.....	61
დებაის ტემპერატურა, K-ში	62
3.3 ნანონაწილაკების ფაზური მდგომარეობისა და დნობის ტემპერატურის დამოკიდებულება მათ ზომებზე	63
3.3.1 დნობის ფიზიკური მექანიზმი მყარ სხეულებში	63
3.3.2 ნანონაწილაკის ფაზური მდგომარეობა	70
3.3.3 დნობის მექანიზმი ნანონაწილაკებში	71
3.4 ნანომასალების მექანიკური თვისებების დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე.....	75
3.4.1 მყარი სხეულის მიკროსისალის დახასიათება.....	75
3.4.2 ფოტომექანიკური ეფექტის ფიზიკური ბუნება.....	82
3.4.3 სინათლის გავლენა მეტალების მიკროსისალის მნიშვნელობაზე.....	85
3.4.4. ნანომასალების სისალის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე.....	87
3.5 ნანონაწილაკებში დიფუზიის კოეფიციენტის სიდიდის და რეკრისტალიზაციის სიჩქარის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე	93
3.5.1. დიფუზიის ახალი მექანიზმი მყარ სხეულებში	93
3.5.2 ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის მექანიზმი მყარ სხეულებში.....	96
3.5.3. დიფუზიის და რეკრისტალიზაციის ფიზიკური ბუნება ნანომასალებში.....	99

ნახ.32 ნანონაწილაკის ზომის ცვლილება დროის მიხედვით რეკრისტალიზაციის დროს	101
3.6 ნანომასალებში სითბური მოვლენების დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე.....	102
3.6.1. სითბოტევადობის ფიზიკური ბუნება მყარ სხეულებში	102
3.6.2. ნანომასალებში სითბოტევადობის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე.....	109
3.6.3 სითბოგამტარობის ფიზიკური ბუნება მყარ სხეულებში	111
3.6.4 სითბოგამტარობა ნანომასალებში.....	119
დასკვნა.....	121
გამოყენებული ლიტერატურა	124

ცხრილების ნუსხა

ცხრილი 1.	დნობის ტემპერატურაზე ელემენტთა თვითდიფუზიის კოეფიციენტები $D(\text{სმ}^2/\text{წმ})$ მყარ და თხევად მდგომარეობებში.....	49
ცხრილი 2.	ლითონების ნანონაწილაკებში დეზაის ტემპერატურის ფარდობითი ცვლილება კომპაქტურ მყარ მდგომარეობასთან შედარებით.....	62
ცხრილი 3.	დეზაის ტემპერატურის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე.....	62
ცხრილი 4.	სილიციუმზე ოქროს ზედაპირული ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობები.....	97
ცხრილი 5.	სილიციუმში ალუმინის ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტი.....	97
ცხრილი 6.	GaAs-ის ეპიტაქსიურ სტრუქტურებში მოცულობითი დიფუზიის კოეფიციენტები.....	98
ცხრილი 7.	სპილენძის და ნიკელის თვითდიფუზიის კოეფიციენტები....	99
ცხრილი 8.	ნანომასალებსა და მსხვილმარცვლოვანი მასალების სითბოტევადობების მნიშვნელობების შედარება.....	109

ნახაზების ნუსხა

- ნახ.1 საილუსტრაციო სქემა ატომების, მოლეკულების - კლასტერების, კლასტერების-ნანონაწილაკების და დისპერსიული სისტემების (ფხვნილების). N – ატომების რაოდენობა, d – ნაწილაკის დიამეტრი ნმ-ში, % - ზედაპირული ატომების წილი პროცენტებში.....23
- ნახ.2 ნანომასალის ამორფულ ნივთიერებაში ჩართული კრისტალური ნანონაწილაკები. ა)კრისტალური ნანონაწილაკი; ბ) საზღვარზე დაგროვილი ატომები; გ) ამორფული ნივთიერება.....25
- ნახ.3 სხვადასხვა ფორმის ნანონაწილაკების მიკროსურათები ა) პალადიუმის ნანონაწილაკი საფენზე ბ) TiN-ს ნანოფირი გ) რკინის 48 ატომისაგან შედგენილი ხელოვნური მარჯანი Cu-ს საფენზე. მარჯნის რადიუსი 7, 13 ნმ. დ) InAs-ის კვანტური წერტილები GaAs-ის საფენზე; სიმაღლე 6 ნმ, ფუძის დიამეტრი 30 ნმ.....26
- ნახ.4 Si, Ge და InSb მიკროსისალის ცვლილება დატვირთვების მიხედვით დიდ დატვირთვებს უფრო ღრმა კვალი აქვს, საიდანაც ჩანს, რომ სიღრმეში სისაღე ნაკლებია, ვიდრე ზედაპირულ არეში.....27
- ნახ.5 ნადნობის გაცივების სიჩქარის გავლენა Fe-Cr-B შენადნობის H-სისაღეზე.....28
- ნახ.6 ფუნდამენტური პარამეტრების მნიშვნელობების დამოკიდებულება ნანონაწილაკის ზომებზე. ა – მესრის პარამეტრის და ელემენტარული უჯრედის მოცულობა V, ბ – Au-ის დნობის ტემპერატურა - $T_{\text{ფ}}$, გ – V-ის იონიზაციური პოტენციალი I. დ – Se-ის თერმული მოცულობითი გაფართოების კოეფიციენტი.....30
- ნახ.7 ა) წყალბადის მოლეკულის H_2 -ის წარმოქმნის ენერგეტიკული დიაგრამა. E_0 წყალბადის ატომში (H) ელექტრონის ენერგეტიკული დონე. E_1 და E_2 – წყალბადის მოლეკულების (H_2) დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი დონეები. α – კოვალენტური ბმის ენერგია. ბ) ელექტრონის უარყოფითი მუხტის სიმკვრივის განაწილება დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე.....33
- ნახ.8 ატომების დაახლოებისას ჰიბრიდიზებული ორბიტალების წარმოქმნა, მათი დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ ორბიტალებად გახლეჩა და მათგან სათანადო დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ზონების წარმოქმნა.....35
- ნახ.9 დამაკავშირებელი (1) და ანტიდამაკავსირებელი (2) ენერგეტიკული ზონები: ა) ნახევარგამტარი ან დიელექტრიკი; ბ) მეტალი (E_F -ფერმის დონე; E_g -აკრძალული ზონა ნახევარგამტარებში; - E_g -ფსევდოაკრძალული ზონა მეტალებში).....36
- ნახ.10 აკვაზების წარმოქმნის სხვადასხვა საშუალება.....37
- ნახ.11 ნანონაწილაკის ენერგეტიკული სტრუქტურა HOMO – ელექტრონებით დაკავებული უმაღლესი დონე LUMO – ელექტრონებით დაუკავებელი უდაბლესი დონე I – იონიზაციის პოტენციალი Q – ელექტრონისადმი სწრაფვა.....40

- ნახ.12 სხვადასხვა რაოდენობის ატომების შემცველი კლასტერების შესაძლო გეომეტრიული აგებულება.....41
- ნახ.13 ა) Cu-ს ატომის, ბ) კლასტერების და გ) კომპაქტური მყარი Cu-ს ენერგეტიკული მდგომარეობები. Cu-ს ატომების რაოდენობის ზრდასთან ერთად ენერგეტიკული მანძილი დონეებს შორის მცირდება, მაგრამ რჩება დისკრეტული, კომპაქტურ Cu-ში კი ენერგეტიკულ მდგომარეობებს აქვს უწყვეტი სპექტრის სახე.....42
- ნახ.14 ატომის მიერ პოტენციური ბარიერის გადალახვის სქემატური გამოსახულება.....46
- ნახ.15 მიგრაციული აქტის სქემა: ა) დანიშნული (1) ატომის გამოსვლა კვანძიდან; ბ) მეზობელ (5) ატომთან ჰანტელის შექმნა და (2) ატომის გადასვლა (1) ატომის თავისუფალ კვანძში; გ) ჰანტელის დაშლა (1) ატომის კვანძში მოხვედრით და ახალი ჰანტელის შექმნა (5) და (7) ატომებით.....51
- ნახ.16 აკვაზების ერთიდაიგივე რეალური კონცენტრაციის დროს ეფექტური კონცენტრაციის ზრდა ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად ა) კომპაქტურ მყარ სხეულში ნანონაწილაკის ზომის ტოლ არეში სამი აკვაზის ტრაექტორია: ორი მათგანი არიდან გადის. ბ) ნანონაწილაკში სამივე აკვაზის ტრაექტორია მასშია მოთავსებული და ისინი უფრო მეტ ატომებთან გაივლიან, ვიდრე კომპაქტური მყარი სხეულის (ა) შემთხვევაში. გ), დ) – ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად იგივე სამი აკვაზი უფრო მეტ ატომთან აღმოჩნდება. ბ), გ), დ) – ნანონაწილაკის აკვაზები ზედაპირიდან არეკვლის გამო ზედაპირულ ფენაში მყოფ ატომებთან უფრო ხშირად აღმოჩნდებიან.....55
- ნახ.17 ნანონაწილაკებში ენერგეტიკული დონეების განლაგება ზედაპირთან და სიღრმეში. ზედაპირიდან აკვაზების არეკვლის შედეგად ზედაპირულ ატომებთან აკვაზების ყოფნის ალბათობა მეტია, რაც (ა) ნახევარგამტარში მეტად ამცირებს მანძილს დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს (ზონებს) შორის, ვიდრე სიღრმეში. (ბ) მეტალებში აღნიშნული დონეები გადაფარულია და ფსევდოაკრძალული ზონა ზედაპირთან ნაკლებია, ვიდრე სიღრმეში და შესაბამისად, კონცენტრაციაც მეტია.....57
- ნახ.18 ორ ატომს შორის ურთიერთქმედების ენერჯის დამოკიდებულება მათ შორის მანძილზე. რხევის დროს ატომის ნორმალური მდებარეობიდან გადახრის მანძილი $a < a_1$ 59
- ნახ.19 ნივთიერების ტემპერატურის დამოკიდებულება მასზე გადაცემული სითბოს რაოდენობაზე.....64
- ნახ.20 ელექტრონის გადაყვანის სქემატური გამოსახულება დამაკავშირებელი ზონიდან ანტიდამაკავშირებელ ზონაში ელექტრონ-ელექტრონული დაჯახებით (დარტყმითი მექანიზმი). 1 – ელექტრონი, რომელიც ეჯახება ბმულ ელექტრონს და რჩება ანტიდამაკავშირებელ ზონაში; 2 – დარტყმითი მექანიზმით გათავისუფლებული ელექტრონი.....66

- ნახ.21 ნანონაწილაკებში ატომის ერთი რხევის პერიოდის განმავლობაში აკვაზის ხაზოვანი გადაადგილების ორი ზღვრული მნიშვნელობა.....73
- ნახ.22 ნანონაწილაკის ტემპერატურის დამოკიდებულება მის ზომებზე. 1)Si-ს მთლიანი ნანონაწილაკი; 2)Si-ს ნანონაწილაკის ზედაპირული ფენა; 3)Au-ს ექსპერიმენტული შედეგები; 4) Au-ს თეორიული შედეგები.....74
- ნახ.23 ა) კნუპის პირამიდა; ბ) კნუპის პირამიდის ანაბექტის ფორმა, (d-ანაბექტის დიდი დიაგონალი).....76
- ნახ.24 Si-ის მიკროსისალის დამოკიდებულება ინდენტორზე მოდებული დატვირთვის სიდიდეზე: 1 – სიბნელებში; 2 – ლაზერით განათებისას ($h\nu \geq E_g$); აკვაზების კონცენტრაცია მხოლოდ ზედაპირულ ფენაშია; 3 – დიდი ინტენსივობის ლაზერით განათებისას, ე.ი. აკვაზების დიდი კონცენტრაციის დროს ზედაპირზე სისალის მნიშვნელობა ნაკლებია, ვიდრე მოცულობაში; 4 – Si-ის ფილტრში გასული თეთრი სინათლით განათებისას ($h\nu < E_g$), აკვაზები წარმოიქმნება მთელ მოცულობაში.....78
- ნახ.25 ელემენტთა მიკროსისალისა (2) და სისალის (1) პერიოდული ცვლილება ატომური ნომრის მიხედვით.....80
- ნახ.26 კოვალენტური კრისტალების მიკროსისალის დამოკიდებულება ვალენტური კავშირის სიგრძეზე: 1 – ალმასის; 2 – სფალერიტის; 3 – ვიურციტის.....81
- ნახ.27 Si-ს მიკროსისალის ტემპერატურული დამოკიდებულება სიბნელებში (1) და სინათლეში (2,3) – სინათლის ინტენსივობებისას $I_1(2)$ და $I_2(3)$, $I_1 < I_2$ 84
- ნახ.28 მეტალების მიკროსისალის მნიშვნელობის დამოკიდებულება დნობის ტემპერატურაზე. 1 – გაზომილი სიბნელებში; 2 – სინათლით მოქმედებისას.....88
- ნახ.29 ნანომასალის დენადობის ზღვრის დამოკიდებულება მისი შემადგენელი ნანონაწილაკების ზომებზე 1 – არე, რომელიც ემორჩილება ჰოლლ-პეტჩის თანაფარდობას; 2 – ანომალური არე.....88
- ნახ.30 სხვადასხვა დნობის ტემპერატურის მქონე ნანომასალის სისალის დამოკიდებულება მათი შემადგენელი ნანონაწილაკების ზომებზე $T_{დნ}^1 < T_{დნ}^2$90
- ნახ.31 Ge-სა და Si-ში თვითდიფუზიის კოეფიციენტების ტემპერატურული დამოკიდებულება: — ექსპერიმენტული მონაცემები; - თეორიულად გამოთვლილი.....95
- ნახ.32 ნანონაწილაკის ზომის ცვლილება დროის მიხედვით რეკრისტალიზაციის დროს.....101

- ნახ.33 Ga₂ Si₂ და As₂ ჰიპოთეტური მოლეკულების შექმნის სქემატური გამოსახულება და ელექტრონების განაწილება მათ დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე.....106
- ნახ.34 სითბოტევადობების მნიშვნელობების C_p-ს ტემპერატურული დამოკიდებულების კორელაცია ენერგიის საშუალო მნიშვნელობებთან \bar{E} . პერიოდული სისტემის თითოეულ ჯგუფში რაც უფრო ნაკლებია \bar{E} -ს მნიშვნელობა, მით უფრო სწრაფად მატულობს C_p-ს მნიშვნელობა ტემპერატურის ზრდისას.....108
- ნახ.35 სითბოტევადობის ტემპერატურული დამოკიდებულება ნანონაწილაკებისაგან შედგენილ მასალაში მსხვილ ჭარცვლოვან მასალაში.....110
- ნახ.36 მყარი სხეულის სითბოგამტარობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.....112
- ნახ.37 პერიოდული სისტემის IV ჯგუფის ელემენტების სითბოტევადობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.....113
- ნახ.38 პერიოდული სისტემის IV ჯგუფის ელემენტების ტემპერატურაგამტარობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.....114
- ნახ.39 პერიოდული სისტემის IV ჯგუფის ელემენტების სითბოგამტარობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე.....116
- ნახ.40 მყარი სხეულის წარმოდგენა ატომების ერთგანზომილებიანი წყობის საშუალებით. ა) აბსოლუტური სიხისტის მქონე ქიმიური ბმის შემთხვევა; ბ) ძალზე დაბალი სიხისტის მქონე ქიმიური ბმის შემთხვევა.....116
- ნახ.41 სითბოს გადაცემის აქტის მოდელის სქემატური გამოსახულება. ა) სითბოს წყაროს ატომები. ჰორიზონტალური ხაზების სიგრძე სიმბოლურად გამოხატავს მათი კინეტიკური ენერგიის სიდიდეს. ბ) სითბოგამტარის მასალის კრისტალური მესერი და მასში წარმოქმნილი აკვაზის მოძრაობის შესაძლო ტრაექტორია.....118

სამუშაო თავდაპირველად სრულდებოდა ცნობილი ქართველი მეცნიერის ბატონი ალექსი გერასიმოვის ხელმძღვანელობით. სამწუხაროდ, ის აღარაა ჩვენთან. მისი ხსოვნის პატივსაცემად, სამუშაოს დასრულებისას შევეცადე მაქსიმალურად ზუსტად გავყოლოდი ბატონი ალექსის დასახულ გეგმას და მეცნიერულ იდეებს, რომლებიც გადმოცემულია მის შრომებში. ამაში დიდი დახმარება გამიწიეს ბატონი ალექსის კოლეგებმა, სტუ-ს ფიზიკის დეპარტამენტის თანამშრომლებმა, განსაკუთრებით ბატონებმა: აკაკი გიგინეიშვილმა და თემურ ბერიკაშვილმა, რომლებმაც იტვირთეს ჩემი სამუშაოს ხელმძღვანელობა დასკვნით ეტაპზე.

შესავალი

მეოცე საუკუნის ერთ-ერთ ყველაზე დიდ ტექნოლოგიურ მიღწევად ითვლება ნახევარგამტარული ხელსაწყოების შექმნა, რომელთა გამოყენებამ მოიცვა ადამიანის ცხოვრების ყველა სფერო და მნიშვნელოვნად განსაზღვრა ამ საუკუნის სამეცნიერო-ტექნიკური პროგრესი. ოცდამეერთე საუკუნეში ამ პროგრესის ტემპი გარკვეულ წილად დამოკიდებული აღმოჩნდა სხვადასხვა ნივთიერებებისაგან ხელოვნურად შექმნილი 1-100 ნმ-მდე ზომის ნაწილაკების თვისებების გამოყენებაზე. სიტყვა „ნანო“ ბერძნულად ნიშნავს „ჯუჯას“. ამ ულტრადისპერსულ ნაწილაკებს ნანონაწილაკებს უწოდებენ, მათგან შექმნილ ნივთიერებებს კი ნანონივთიერებებს, ხოლო მათი შექმნის მეთოდებს, წარმოებას და გამოყენებას - ნანოტექნოლოგიებს.

ნანონაწილაკები ზომების მიხედვით მოთავსებულია მოლეკულებსა და მყარ სხეულებს შორის და თავისი ფიზიკო-ქიმიური თვისებებით განსხვავდება ორივესგან. როცა ჩვენ ვლაპარაკობთ მყარ სხეულებზე, წარმოვიდგენთ სხეულებს ზომით ათეული მიკრონიდან. თუ ისინი ერთი და იგივე სახის ნივთიერებისაა, ვთვლით, რომ მათი ფიზიკური თვისებები ერთნაირია და ემორჩილება ერთნაირ კანონზომიერებებს. ნანონაწილაკები, ისევე როგორც მყარი სხეულები, მოლეკულებისაგან განსხვავებით, ხასიათდება კოლექტიური თვისებებით. მაგალითად, ფაზური მდგომარეობა, სითბო და ელექტროგამტარებლობა, ოპტიკური და მექანიკური მახასიათებლები, მაგრამ ეს თვისებები დამოკიდებული აღმოჩნდა მათ ზომებზეც. ამან განაპირობა ნანომასალების შექმნის და გამოყენების უნიკალური ტექნოლოგიური შესაძლებლობები.

ნანოტექნოლოგიები უკვე დიდ გავლენას ახდენენ ისეთი დარგების განვითარებაზე, როგორებიცაა: მედიცინა, მიკრობიოლოგია, მასალათმცოდნეობა, სოფლის მეურნეობა, ენერგეტიკა, მიკროელექტრონიკა და სხვა.

„ნანოტექნოლოგია არის ახალი კარიბჭე, რომელსაც შევყავართ სრულიად ახალ სამყაროში“-წერს ცნობილი ამერიკელი მეცნიერი, შვერთებული შტატების ნაციონალურ-სამეცნიერო ფონდის მიკრობიოლოგი რიტა კოლველი.

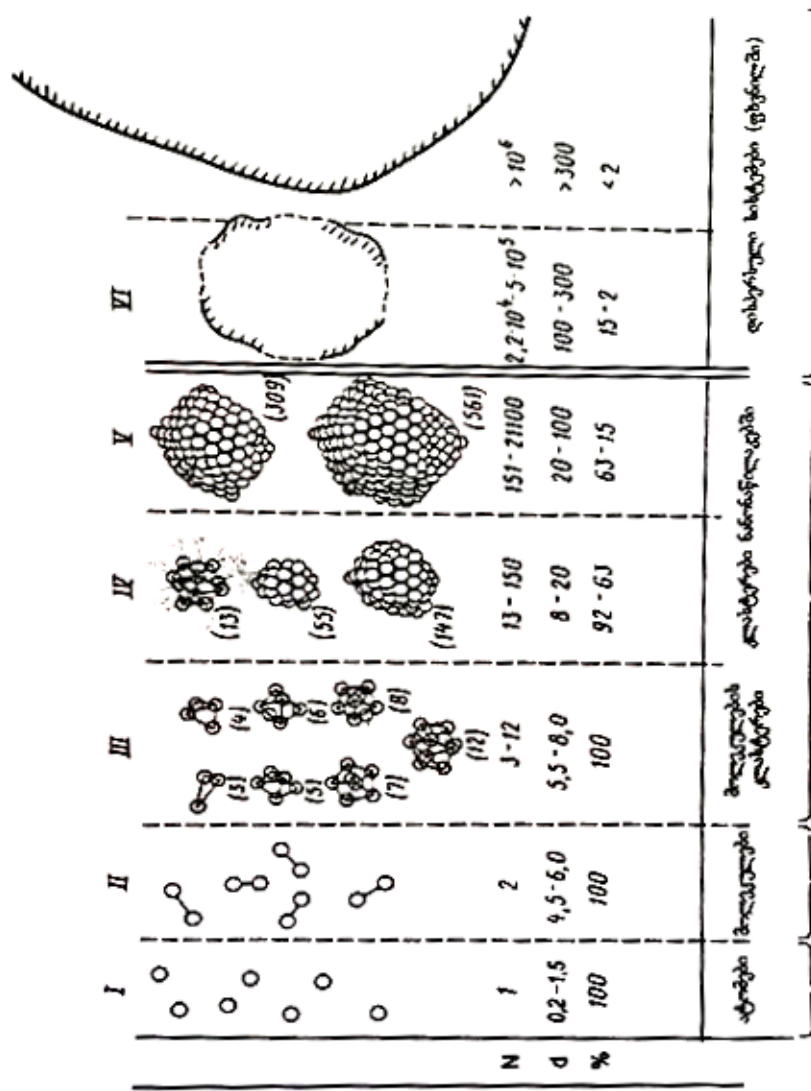
ნანოტექნოლოგიის, როგორც ახალი განვითარებადი დარგის წინაშე მდგარი პრობლემებიდან ერთ-ერთი ძირითადია ნანონაწილაკების თვისებების მათ ზომებზე დამოკიდებულების მექანიზმის დადგენა. ამ დამოკიდებულების ახსნა ტრადიციული მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიის საფუძველზე პრობლემური აღმოჩნდა, მაგრამ კონდენსირებულ გარემოში ატომის გადაადგილების ახალი კონცეფციის გამოყენებით ამ დამოკიდებულების ფიზიკური ბუნების დადგენა შესაძლებელია.

ლიტერატურის მიმოხილვა

თავი 1. ნანონაწილაკების დახასიათება

ნანონაწილაკის პარალელურად სამეცნიერო ლიტერატურაში გამოიყენება ტერმინები: ნანოკრისტალები, ნანოსტრუქტურები, ნანოფაზები, ნანოკომპოზიტები.

ნანონაწილაკი ეს არის ძირითადად მყარ ფაზაში მყოფი ნივთიერება, რომლის ზომები ერთი მიმართულებით მაინც არ აღემატება 100 ნმ-ს და იმყოფება აირად, თხევად, მყარ გარემოში ან მათი შეხების საზღვარზე. ნანონაწილაკის მახასიათებელი ზომა მიახლოებითია, რადგან სხვადასხვა ნივთიერებისათვის ფიზიკო-ქიმიური თვისებების ცვლილება ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად იწყება სხვადასხვა ზომებიდან, 100 ნმ რიგის მახლობლობაში. ნანონაწილაკი შეიძლება არსებობდეს ან განცალკევებული სფეროიდული ან სხვა ფორმით წარმონაქმნის, ან თხელი ფირის, ან რაიმე ფაზაში ჩანართის სახით. 100 ნმ ზომის ნაწილაკის ზედაპირთან მყოფი ატომების წილი მთელი ატომების რამოდენიმე პროცენტს შეადგენს და ზომის შემცირებით იზრდება. ზედაპირთან მოსაზღვრე ატომების რაოდენობა შეიძლება შეფასდეს ფარდობით $3S/L$, სადაც S ზედაპირთან მოსაზღვრე არის სიღრმეა და დაახლოებით 1 ნმ-ია, ხოლო L კი ნაწილაკის ზომაა. ნანონაწილაკის მახასიათებელი ზომები განსაზღვრავენ მათში ატომების ზღვრულ რაოდენობას $N < 10^4$ ატომი. ნახ.1-ზე ნაჩვენებია განსხვავება ნანონაწილაკისა და ულტრადისპერსული ნაწილაკის ატომების რაოდენობასა და ზომებს შორის. მოყვანილი მონაცემებიდან ჩანს, რომ ზედაპირული ატომების წილი მნიშვნელოვნად მეტია ნანონაწილაკებში, ვიდრე ულტრადისპერსულ ნაწილაკებში.



ნახ.1 საილუსტრაციო სქემა ატომების, მოლეკულების-კლასტერების კლასტერების-ნანონაწილაკების და დისპერსიული სისტემების (ფხვნილების). N – ატომების რაოდენობა, d – ნაწილაკის დიამეტრიც ნმ-ში, % - ზედაპირული ატომების წილი პროცენტებში.

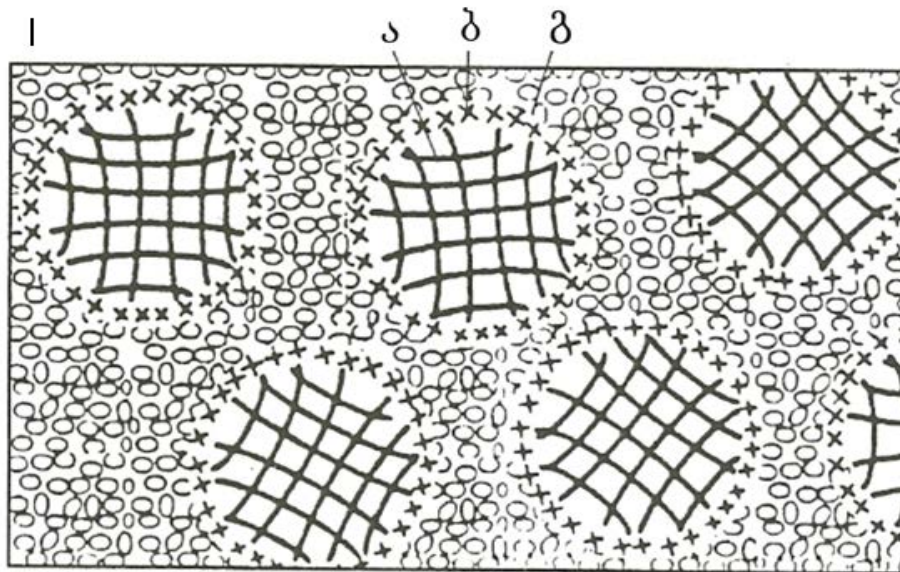
ნანონაწილაკების არსებობისა და მათი თვისებებისათვის დიდი მნიშვნელობა აქვს გარემოს, რომელშიც ისინი იმყოფებიან. იმისათვის, რომ არ მოხდეს ნანონაწილაკების გაერთიანება ერთმანეთთან და უფრო დიდი ნაწილაკების წარმოქმნა, ნანონაწილაკი დაფარული უნდა იყოს ისეთი ატომებით, რომლებიც ხელს შეუშლიან აგლომერაციას. ასეთ ნივთიერებებად ხშირად გამოიყენება ჟანგბადი O, CO, CO₂, H₂O, ეთილენი, ნახშირწყალბადები და სხვა. შეიძლება ითქვას, რომ იმ შემთხვევაში, თუ ნაწილაკები იმყოფებიან ჰაერში, ან რაიმე სხვა გაზში, ყოველთვის

დაფარულნი არიან მსუბუქი ატომების გარსით. მიუხედავად ამ გარსისა, ნანონაწილაკის გარემოსთან ურთიერთქმედების ენერგია საკმაოდ დიდია, განსხვავებით ულტრადისპერსული და დისპერსული ნაწილაკებისაგან ($L > 100$ ნმ), რომელთა გარემოსთან ურთიერთქმედების ენერგია ვან-დერვაალსის შესაბამისი ძალების რიგისაა. ნანონაწილაკების გარემოსთან ურთიერთქმედების ენერგია კი ქიმიური ბმის ენერგიას უახლოვდება, ე. ი. გაცილებით დიდია. ეს გამოწვეულია იმით, რომ ნანონაწილაკებში ზედაპირული ატომების წილის მატებასთან ერთად იზრდება ზედაპირული ენერგია და ისინი აქტიურად ურთიერთქმედებენ ყოველგვარ ქიმიურ ნივთიერებასთან, მათ შორის ინერტულ აირებთან (He, Ar, Ne და ა.შ.). აქედან გამომდინარე შეიძლება დავსკვნათ, რომ ნანონაწილაკებისათვის ინერტული გარემო არ არსებობს. ამ ურთიერთქმედების ენერგია განისაზღვრება ორი მთავარი ფაქტორით: ნანონაწილაკის ზომით (ზედაპირული ენერგიის წვლილით ნაწილაკის საერთო ენერგიაში) და ნანონაწილაკის ქიმიური ნივთიერების ბუნებით.

ნანონაწილაკებისაგან შემდგარ მასალებს ნანომასალებს უწოდებენ. ნანომასალები უნდა შეიცავდნენ ნანონაწილაკების საკმაოდ დიდ რაოდენობას, რათა მათ განსაზღვრონ ნანომასალების თვისებები.

ნანომასალების თვისებების ჩამოყალიბებაში დიდი მნიშვნელობა ენიჭება მასში მყოფი ნანონაწილაკების საზღვრებს გარემო ნივთიერებასთან (ნახ.2). საზღვრებზე ატომების ერთი წყობა იცვლება მეორეთი, რაც უნდა იწვევდეს მექანიკური ძაბვების ველის შექმნას. ამ არეებში ძაბვების ველის ბუნებიდან გამომდინარე, შეიძლება დაგროვდეს ატომები, ვაკანსიები, ან მინარევული ატომები, რაც გამოიწვევს ნანომასალის თვისებების ცვლილებებს.

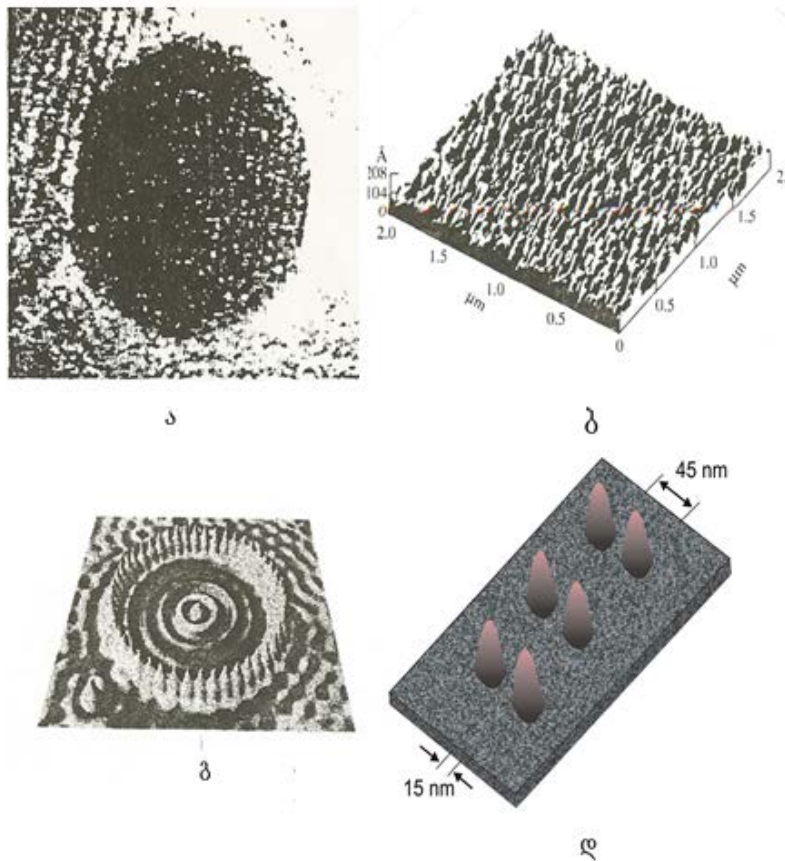
ნანონაწილაკების ფორმების, სრუქტურის, შემადგენლობისა და მისი საზღვრების გამოკვლევა ხდება ისეთი პრეცეზიული მეთოდების მეშვეობით, როგორებიცაა: ოჟე-ელექტრონული სპექტროსკოპია, რენტგენოსტრუქტურული ანალიზი, დიფრაქციული გამჭოლი



ნახ.2 ნანიმასალის ამორფულ ნივთიერებაში ჩართული კრისტალური ნანონაწილაკები. ა) კრისტალური ნანონაწილაკი; ბ) საზღვარზე დაგროვილი ატომები; გ) ამორფული ნივთიერება რომელშიც რამოდენიმე მეტალოპოლიედრი ერთმანეთთან

ელექტრონული მიკროსკოპია, მალლი გარჩევის მასკანირებელი ელექტრონული მიკროსკოპია, ატომური ძალური მიკროსკოპია, მასკანირებელი ტუნელური მიკროსკოპია.

ნანონაწილაკის ირგვლივ არსებული გარემოს ბუნების მიხედვით ნანონაწილაკებს შეიძლება ჰქონდეთ სხვადასხვა ფორმა (ნახ.3). ვაკუუმში ან იზოტროპულ გარემოში ნანონაწილაკებს, როგორც წესი აქვთ სფერული ფორმა, სითხის და აირის გამყოფ ზედაპირზე თხელი ფირის, მყარ სხეულზე სფეროიდის ან პოლიედრის ფორმა, ხოლო მყარ გარემოში მათ შეიძლება ჰქონდეთ სხვადასხვა სახის მორფოლოგია. გარემოზე და ნანონაწილაკების შექმნის ტექნოლოგიაზე არის დამოკიდებული ნანონაწილაკების შინაგანი აღნაგობა-სტრუქტურა. არსებობს ნანონაწილაკების აღნაგობის რამდენიმე მოდელი: 1. სფეროიდული ნაწილაკი, შიდა ნაწილაკის კვაზიკრისტალური



ნახ.3 სხვადასვა ფორმის ნანონაწილაკების მიკროსურათები

ა) პალადიუმის ნანონაწილაკი საფენზე

ბ) TiN-ს ნანოფარი

გ) რკინის 48 ატომისაგან შედგენილი ხელოვნური მარჯანი Cu-ის საფენზე. მარჯანის რადიუსი 7,13 ნმ.

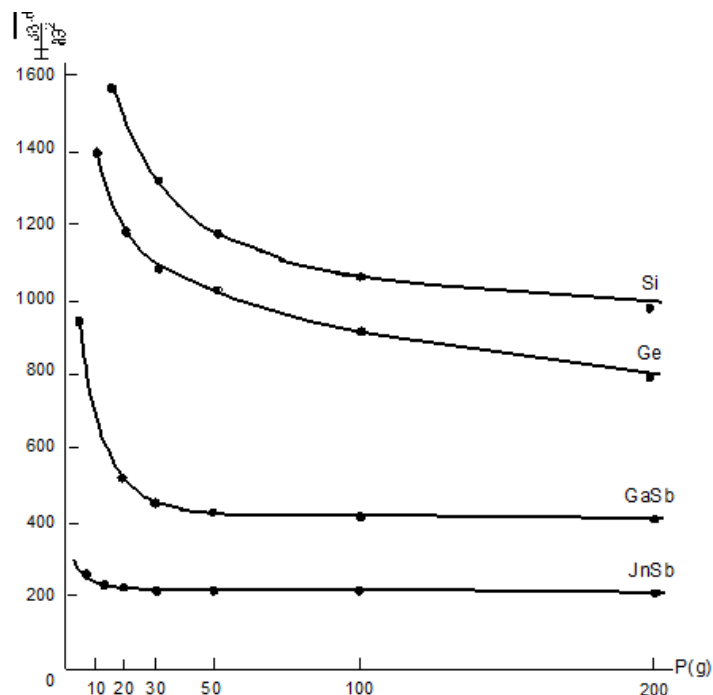
დ) InAs-ის კვანტური წერტილები GaAs-ის საფენზე; სიმაღლე 6 ნმ, ფუძის დიამეტრი 30 ნმ.

აღნაგობით; 2. სფეროიდული აგებულების, რომელშიც ატომები ფენებად ეფარებიან ერთმანეთს; 3. მეტალოპოლიედრები; 4. კლასტერული ნაწილაკი, შეერთებულია ლიგანდებით; 5. ნანომასალებში არის განსხვავებული კრისტალური აღნაგობის ან განსხვავებული ქიმიური შემადგენლობის მქონე ნანოზომების ჩანართები; 6. ეგრეთწოდებული ნანონაწილაკები მატრიცაში.

ნანონაწილაკების მყარი და თხევადი მდგომარეობების განსასხვავებლად მიუღებელია მაკროსკოპული მიდგომა, რომელიც დამყარებულია შორი წესრიგის არსებობა-არარსებობაზე, რადგან ატომების განლაგებაში შორი წესრიგი, არე ნანონაწილაკის ზომისაა. ნანონაწილაკების

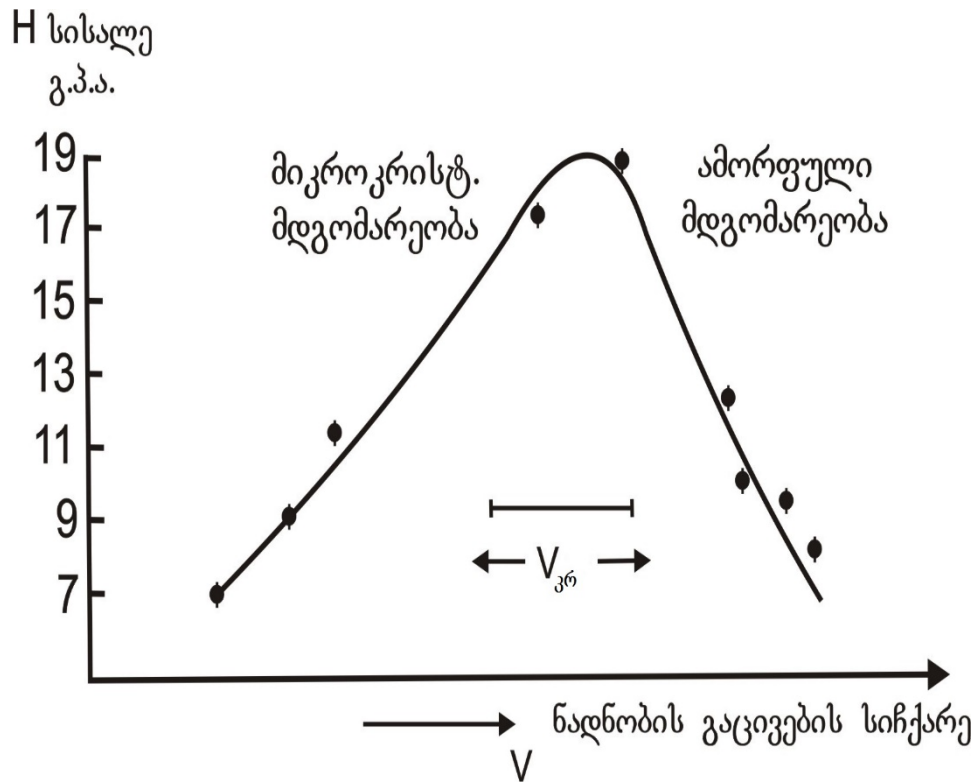
ფაზურ მდგომარეობაზე შეიძლება ვიმსჯელოთ მისი „სირბილის“ ხარისხით. აღმოჩნდა, რომ ნანონაწილაკის ზედაპირული ფენა უფრო რბილია, ვიდრე მისი შიდა ნაწილი, განსხვავებით მასიური მყარი სხეულისაგან, რომლის ზედაპირული ფენა უფრო ხისტია, ვიდრე შიდა ნაწილი (ნახ.4). ნანონაწილაკის ტემპერატურის ზრდის დროს არის ტემპერატურული არე, როცა ნანონაწილაკის შიდა ნაწილი მყარია, ზედაპირული ფენა კი ამორფული ზედაპირიდან ნაწილაკის ცენტრისკენ გადასვლით იზრდება ატომების რხევების საშუალო კვადრატული ამპლიტუდები.

ნანონაწილაკებს შეიძლება ჰქონდეთ დეფექტები: ფორები, ვაკანსიების ან მინარევული ატომების დაჯგუფებები და სხვა. ამ დეფექტების ტიპი და რაოდენობა დამოკიდებულია ნანონაწილაკების მიღების ტექნოლოგიურ პროცესებზე, ნანონაწილაკების სტრუქტურაზე და მის დამახინჯებაზე.



ნახ.4 Si, Ge, InSb მიკროსისალის ცვლილება დატვირთვების მიხედვით დიდ დათვირთვებს უფრო ღრმა კვალი აქვს, საიდანაც ჩანს, რომ სიღრმეში სისალე ნაკლების, ვიდრე ზედაპირულ არეში

ტექნოლოგიური პროცესის გავლენის საჩვენებლად ნახ.5-ზე მოყვანილია ნანომასალის სისალის დამოკიდებულება მისი ნადნობის გაცივების სიჩქარეზე. ჩანს, რომ სიჩქარის მომატებისას კრისტალურობის სრულყოფის ხარისხი ჯერ იზრდება, შემდეგ კი მცირდება.

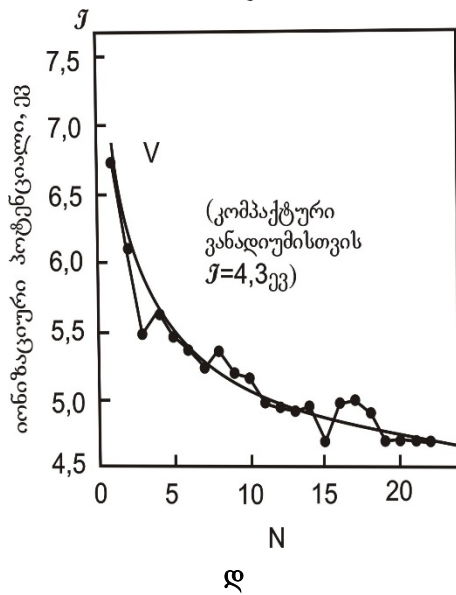
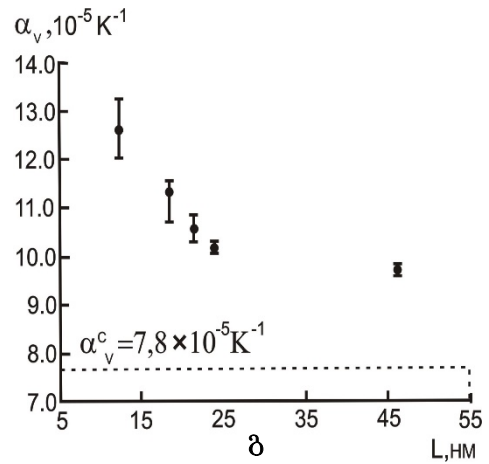
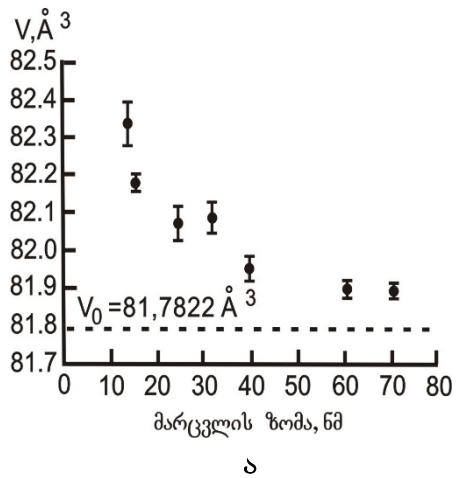
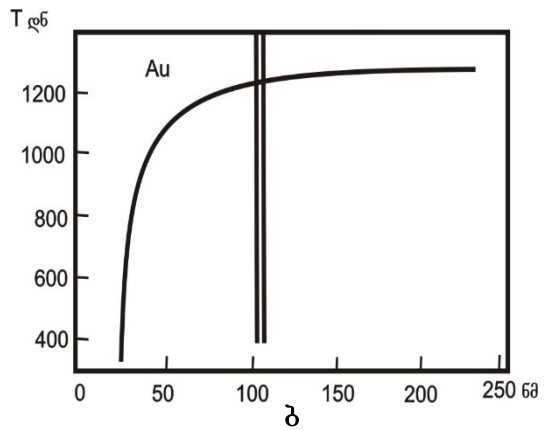
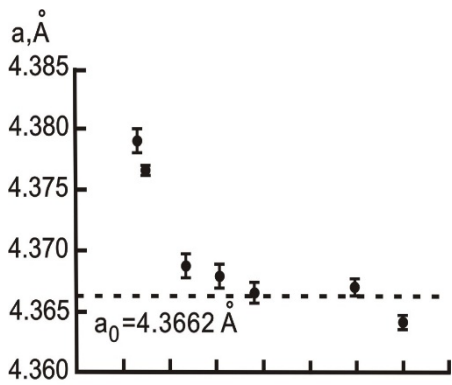


ნახ.5 ნადნობის გაცივების სიჩქარის გავლენა Fe-Cr-B შენადნობის H-სისალზე

მოცემული ქიმიური შემადგენლობის მასიური მყარი სხეულები აღიწერება ფუნდამენტური მახასიათებლებით: დნობის ტემპერატურა, იონიზაციის პოტენციალი, ქიმიური ბმის ენერგია, ფაზური მდგომარეობა, აკრძალული ზოლის სიგანე, მესრის პარამეტრი, რომლებიც ნორმალური წნევის და ველების პირობებში წარმოადგენენ მუდმივ სიდიდეებს. იგივე ქიმიური შემადგენლობის ნანონაწილაკებში კი ასე არ არის.

ნანონაწილაკის ყველაზე მნიშვნელოვანი თვისება არის ის, რომ მისი შემადგენელი ქიმიური ნივთიერების ფუნდამენტური მახასიათებლები და

სხვა ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები: დიფუზიის კოეფიციენტი, მიკროსისალე, სითბოტევადობა, ქიმიური და კატალიტური აქტივობა დამოკიდებულია მათ ზომაზე[1-4](ნახ.6). ამ დამოკიდებულებას სრულყოფილად ვერ ხსნის მყარი სხეულების ბუნებაზე არსებული ტრადიციული წარმოდგენები[5]. ეს წარმოდგენები ვერ ხსნის არა მარტო ნანონაწილაკების თვისებების ზომაზე დამოკიდებულებას, არამედ მყარ სხეულებში დამზერილ ზოგიერთ მოვლენას[6]. სამუშაოებში [7-11] მოყვანილია ახალი წარმოდგენები მყარ სხეულებში მიმდინარე პროცესების მექანიზმების შესახებ, რომელთა საშუალებით თვისობრივად იხსნება ნანონაწილაკების ზოგიერთი თვისებების ზომაზე დამოკიდებულება.



ნახ. 6 ფუნდამენტური პარამეტრების მნიშვნელობების დამოკიდებულება ნანონაწილაკის ზომებზე.

ა – მესრის პარამეტრის და ელემენტარული უჯრედის მოცულობა V

ბ – Au-ის დნობის ტემპერატურა - $T_{დ6}$

გ – V-ის იონიზაციური პოტენციალი I .

დ – Se-ის თერმული მოცულობითი გაფართოების კოეფიციენტი.

თავი 2. ნანონაწილაკების ელექტრონული სტრუქტურა

ნანონაწილაკების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები განსხვავდება ერთის მხრივ, ატომებისა და მოლეკულების და მეორეს მხრივ, ამ ატომების ან მოლეკულებისაგან შემდგარი კომპაქტური მყარი სხეულის თვისებებისაგან, რომლებიც ხასიათდება კოლექტიური თვისებებით (ფაზური მდგომარეობები და მათი ერთმანეთში გადასვლის ტემპერატურები, ელექტრო და სითბოგამტარობა, ზეგამტარობა და სხვა).

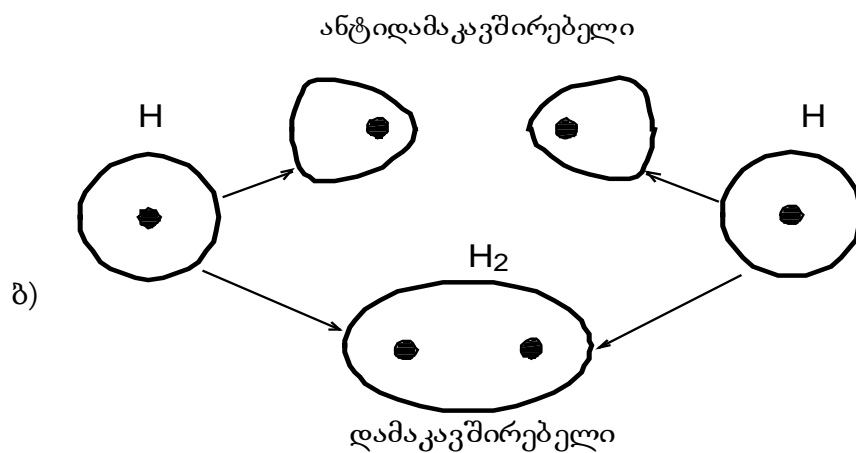
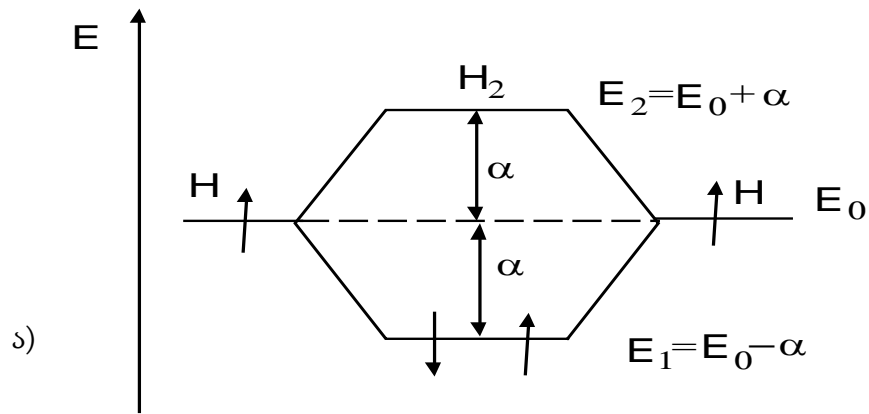
მოცემული ქიმიური ნივთიერების აგრეგატული მდგომარეობა და მისი მახასიათებელი პარამეტრები და თვისებები (ატომთაშორისი მანძილი, აკრძალული ზონის სიდიდე, სითბოტევადობა, დიფუზიის კოეფიციენტი, ელექტრონის გამოსვლის მუშაობა და სხვა) განისაზღვრება ქიმიური ბმის სიძლიერით, რომელიც სამივე აგრეგატულ მდგომარეობაში სხვადასხვაა (მყარ მდგომარეობაში მისი მნიშვნელობა მეტია, ვიდრე თხევადში, გაზურში კი თითქმის ნულის ტოლია). ნანონაწილაკების თვისებების მათ ზომებზე დამოკიდებულება აშკარად მიგვიჩვენებს იმაზე, რომ ნანონაწილაკების ზომების შეცვლასთან ერთად უნდა იცვლებოდეს ქიმიური ბმების სიძლიერე. ამ დამოკიდებულების გასაგებად აუცილებელია გავერკვეთ თუ რა სახისაა ქიმიური ბმების ბუნება მოლეკულებსა და მასიურ მყარ სხეულებში.

2.1 ქიმიური ბმები მოლეკულებში

განვიხილოთ ეს საკითხი ორატომიანი მოლეკულებისათვის წყალბადის მაგალითზე. წყალბადის ორი ატომის მიახლოების დროს ხდება მათი ელექტრონული ღრუბლების გადაფარვა და თითოეული ატომის ელექტრონი განიცდის მეორე ატომის ბირთვის და ელექტრონის ზემოქმედებას, რის შედეგად იცვლება მათი ენერგეტიკული მდგომარეობები. ამ უკანასკნელის მისაღებად უნდა ამოიხსნას შრედინგერის განტოლება არსებული ურთიერთქმედების

გათვალისწინებით. ამისათვის იყენებენ ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის (LCAO) მეთოდს. ელექტრონების ენერჯისათვის იგი გვაძლევს ორ მნიშვნელობას $E=E_0 \pm \alpha$ სადაც E_0 არის წყალბადის თავისუფალი ატომის ელექტრონის ენერჯია, ხოლო α - ე.წ. კოვალენტური ბმის ენერჯია (ნახ.7ა). მოლეკულის შემადგენელი ატომების ელექტრონების კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი არ იცვლება, ხდება მათი ენერგეტიკულად განცალკევება, ანუ გახლეჩა. ეს დონეები უკვე ორივე ატომის სისტემას ეკუთვნის და ამიტომ მათ მოლეკულური დონეები ეწოდებათ. ნახ.7ბ-ზე სქემატურად მოცემულია ელექტრონული სიმკვრივის განაწილება მიღებულ მოლეკულურ დონეებზე; ჩანს, რომ დაბალ დონეზე ელექტრონების ყოფნისას მათი სიმკვრივე ატომებს შორის დიდია და ატომების დადებითად დამუხტულ ბირთვებს მიიზიდავს. მაღალ დონეზე ანალოგიური სიმკვრივე ბევრად მცირეა, ვიდრე მეორე მხარეს-არა ატომთა შორის. ამიტომ ამ შემთხვევაში ატომები განიზიდებიან.

დაბალი ენერჯის მქონე ენერგეტიკულ დონეს უწოდებენ დამაკავშირებელ ენერგეტიკულ დონეს, რადგან მასზე მყოფ ელექტრონებს უფრო დაბალი ენერჯია აქვს, ვიდრე თავისუფალ ატომში და ისინი ქმნიან ქიმიურ ბმას. მაღალი ენერჯის მქონე დონეს უწოდებენ ანტიდამაკავშირებელ დონეს, რადგან მასზე მყოფი ელექტრონები ბმას ასუსტებენ. წყალბადის ატომების ორივე ელექტრონი, ენერჯის მინიმუმისა და პაულის პრინციპის თანახმად, დაიკავებს ქვედა დონეს, რის გამოც წყალბადის ერთად მყოფ ორ ატომს უფრო ნაკლები ენერჯია აქვს, ვიდრე ცალ-ცალკე თავისუფალ მდგომარეობაში მყოფ ატომებს, რის გამოც წარმოიქმნება მოლეკულა, ამიტომ ბუნებაში წყალბადი ჩვეულებრივ მხოლოდ მოლეკულურ მდგომარეობაში არსებობს.



ნახ. 7 ა) წყალბადის მოლეკულის H_2 -ის წარმოქმნის ენერგეტიკული დიაგრამა. E_0 - წყალბადის ატომში (H) ელექტრონის ენერგეტიკული დონე. E_1 და E_2 - წყალბადის მოლეკულების (H_2) დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი დონეები. α - კოვალენტური ბმის ენერგია.

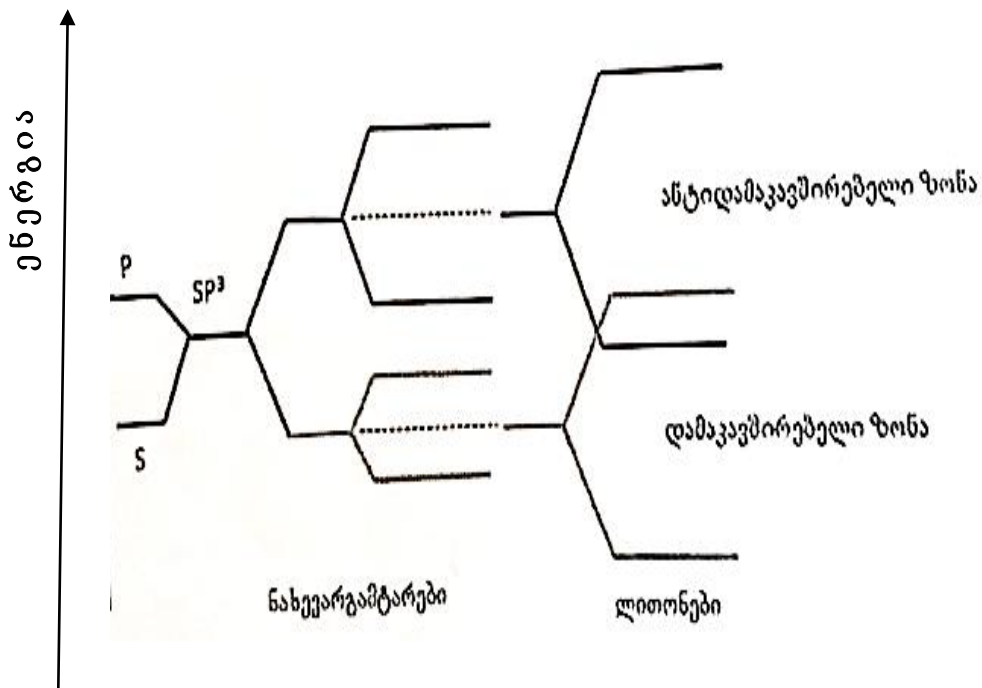
ბ) ელექტრონის უარყოფითი მუხტის სიმკვრივის განაწილება დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე.

2.2 მყარი სხეულის ელექტრონული სტრუქტურა

მყარი სხეულის ელექტრონული სტრუქტურის დასადგენად იგი შეიძლება განვიხილოთ როგორც უამრავი ატომისაგან შედგენილი დიდი მოლეკულა და მის მიმართ გამოვიყენოთ მიდგომა ატომებს შორის ქიმიური ბმის წარმოქმნის შესახებ. ასეთ მიდგომას იყენებენ კვანტურ ქიმიაში და

ცდილობენ მყარი სხეულების თვისებების აღწერას მისი შემადგენელი ატომების ან მოლეკულების თვისებების საფუძველზე[12].

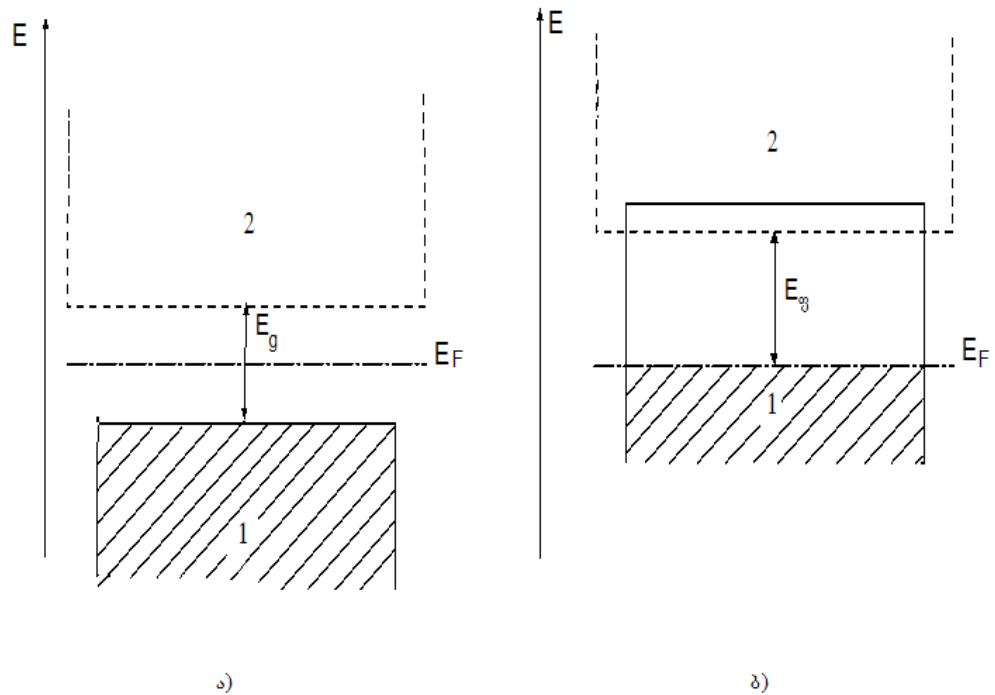
მრავალი ატომის დაახლოების, ანუ მყარი სხეულის შექმნის დროს მათი ენერგეტიკული დონეები ერთიანდება ე.წ. ზონებად[12, 15], რომლებიც ორატომიანი მოლეკულების მდგომარეობის ანალოგიურია. განსხვავება მხოლოდ ისაა, რომ დონეების ერთ დამაკავშირებელ და ერთ ანტიდამაკავშირებელ მდგომარეობებად გახლეჩის ნაცვლად ატომების დონეები გაიხლიჩება ზონებად (ნახ.8). უნდა აღინიშნოს, რომ ელექტრონული ზონური სტრუქტურით აღიწერება ასევე მყარი სხეულების ნაღონების ელექტრონული მდგომარეობები [13]. ნახევარგამტარებსა და დიელექტრიკებში დამაკავშირებელი (ანუ ვალენტური) და ანტიდამაკავშირებელი (ანუ გამტარობის) ზონები ერთმანეთისაგან გამოყოფილია აკრძალული ზონით, ხოლო ლითონებში ისინი გადაფარულია. სინათლის, ტემპერატურისა და სხვა საშუალებით ელექტრონის გადასვლა დამაკავშირებელი ზონიდან ანტიდამაკავშირებელ ზონაში (გარდა იმისა, რომ ნახევარგამტარებსა და დიელექტრიკებში ზრდის გამტარობას) ასევე იწვევს ქიმიური ბმის შემცირებას, რადგან ელექტრონი ხდება ანტიდამაკავშირებელი, ხოლო დამაკავშირებელ ზონაში ელექტრონების რიცხვი მცირდება და ჩნდება ხვრელი. ამ დროს წარმოქმნილი კვაზი ნაწილაკები ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკებია, რომლებიც იწვევს ყველა იმ ატომის ქიმიური ბმის შემცირებას, რომლებთანაც ისინი მოხვდებიან თავიანთი ქაოსური მოძრაობის დროს (სრული დასახელება „არადამაკავშირებელი კვაზი ნაწილაკი“, რომელსაც ჩვენ შემდეგ ხშირად გამოვიყენებთ, შევცვალოთ რაიმე აბრევიატურით, მაგალითად, „აკვაზი“). ნახევარგამტარებისაგან განსხვავებით, რომლებშიც ქიმიური ბმის შესუსტება გამტარობაში მონაწილე ელექტრონებისა და ხვრელების საშუალებით ხდება, ლითონებში, ზონების შეუვსებლობის გამო, გამტარობაში მონაწილე ელექტრონები დაბალ ტემპერატურაზე იმავე ზონაში რჩება და ლითონის ქიმიური ბმის ცვლილებზე თითქმის არ



ნახ.8 ატომების დაახლოებისას ჰიბრიდიზებული ორბიტალების წარმოქმნა, მათი დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ ორბიტალებად გახლეჩა და მათგან სათანადო დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ზონების წარმოქმნა

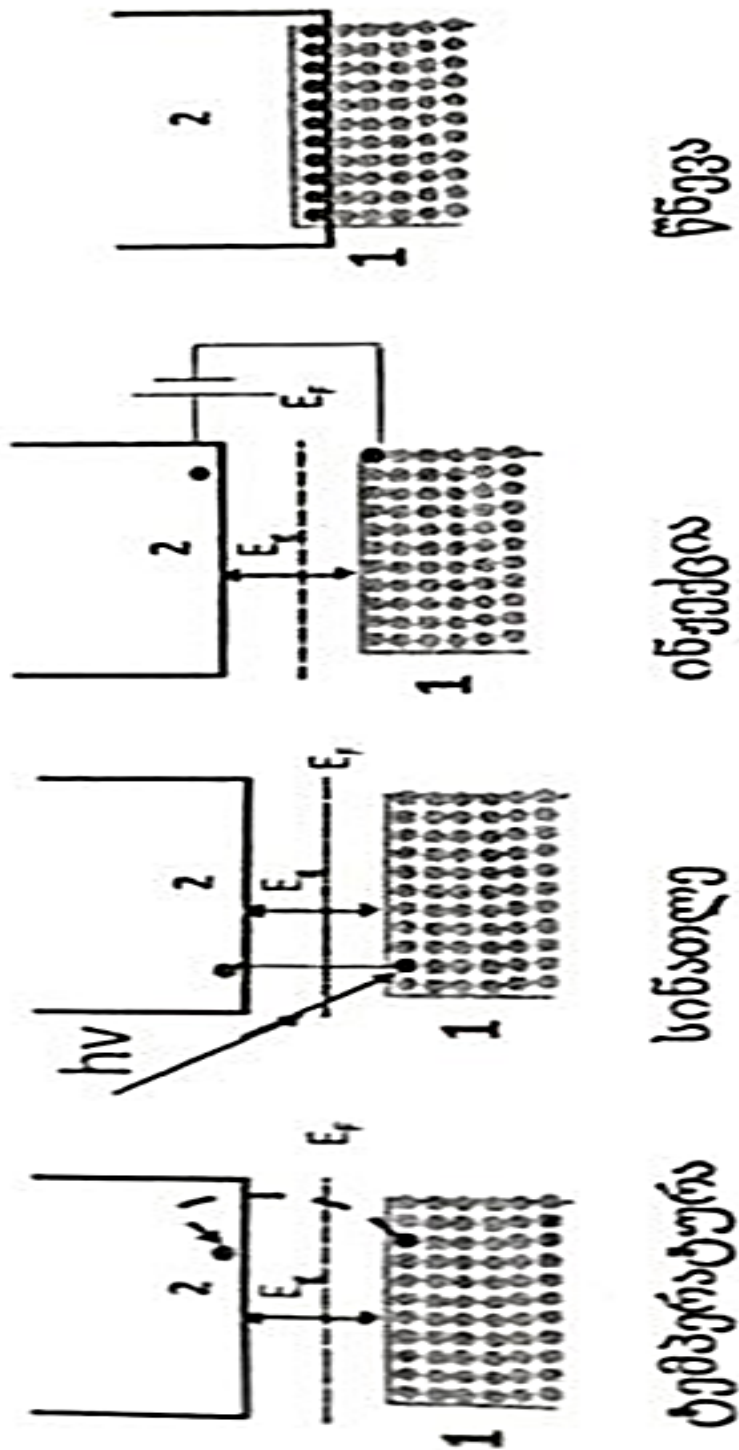
რეაგირებს. ტემპერატურის მომატებით ხდება მათი გადასვლა იმავე დამაკავშირებელი ზონის უფრო მაღლა მდებარე დონეებზე, რაც არ მოქმედებს გამტარობის ცვლილებაზე, მაგრამ იწვევს ქიმიური ბმის შემცირებას. ამ შემთხვევაში ელექტრონების გადასვლა უნდა მოხდეს ფერმის დონეს ქვემოთ არსებული დონეებიდან. მაშინ ენერგეტიკული მანძილი ფერმის დონიდან ანტიდამაკავშირებელი ზონის ქვედა კიდემდე არის ის მანძილი, რომელიც საჭიროა გადალახოს ელექტრონმა, რომ მოხვდეს ანტიდამაკავშირებელ ზონაში. ამ ენერგეტიკულ მანძილს შეიძლება ვუწოდოთ ფსევდოაკრძალული ზონა(ნახ.9).

ატომის ბმის სიძლიერე მეზობელ ატომებთან კონდენსირებულ გარემოში დამოკიდებულია მის დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე მყოფი ელექტრონების რაოდენობაზე. აკვაზების წარმოქმნა ამ სხვაობას ამცირებს, ე. ი. ასუსტებს იმ ატომთა ქიმიურ ბმებს, რომლებთანაც აღმოჩნდება თავისი სითბური მოძრაობის დროს, რითაც უადვილებს მათ გადაადგილებას, ამიტომ მყარი სხეული რბილდება[13].



ნახ. 9 დამაკავშირებელი (1) და ანტიდამაკავშირებელი (2) ენერგეტიკული ზონები: ა)ნახევარგამტარი ან დიელექტრიკი; ბ)მეტალი (E_F -ფერმის დონე; E_g -აკრძალული ზონა ნახევარგამტარებში; - E_ϕ -ფსევდოაკრძალული ზონა მეტალებში).

აკვაზების წარმოქმნა შესაძლებელია სინათლის, ტემპერატურის, წნევის, ინჟექციის, ელექტრო და მაგნიტური ველების ზემოქმედებით[13] (ნახ.10). თუ მოყვანილი ატომების ადგილმონაცვლეობის შემოთავაზებული მექანიზმი რეალურია, მაშინ მყარი სხეული ათერმიულად (ტემპერატურის მომატების გარეშე) უნდა დარბილდეს. ექსპერიმენტები ადასტურებს, რომ მყარი სხეულის დარბილება შესაძლებელია არა მარტო სინათლის საშუალებით, არამედ სხვა, ათერმიული (ტემპერატურის მომატების გარეშე) ზემოქმედებების დროსაც[13], რისი ახსნაც მოლეკულურ-კინეტიკურ თეორიას არ შეუძლია. მოლეკულურ-პოტენციური თეორიის აქტუალობა კი დასტურდება იმით, რომ მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიისაგან განსხვავებით, იგი თვისობრივად ხსნის კონდენსირებულ გარემოში ატომის გადაადგილებასთან დაკავშირებულ ცნობილ ფიზიკურ მოვლენებს.



ნახ.10 აკვაზების წარმოქმნის სხვადასხვა საშუალება

მოლეკულურ-პოტენციური თეორიის თანახმად, რაიმე საშუალებით წარმოქმნილი აკვაზები ამცირებს ქიმიური ბმის ენერგიას. ქიმიიდან კი ცნობილია, რომ ქიმიური ბმის ენერგიის შემცირება იწვევს ატომებს შორის

მანძილის გაზრდას, ანუ სხეულის გაფართოებას. მაშასადამე, თუ მყარ სხეულს დავასხივებთ ისეთი სინათლით, რომელიც წარმოქმნის აკვაზებს, იგი უნდა გაფართოვდეს მისი ტემპერატურის მომატების გარეშე. მოლეკულურ-პოტენციური თეორიის ეს წინასწარმეტყველება დადასტურდა ექსპერიმენტებით[13], რომლებსაც მოლეკულურ-კინეტიკური თეორია ვერ ხსნის.

აკვაზების არსებობა და მათ მიერ ქიმიური ბმების ენერჯის შემცირება ექსპერიმენტულად მტკიცდება ისეთი ეფექტებით, როგორიცაა ფოტომექანიკური ეფექტი (ფმე) - მყარი სხეულის (ნახევარგამტარები, დიელექტრიკები, ლითონები) სისალის შემცირება სინათლის ზემოქმედების დროს, ელექტრომექანიკური ეფექტი (ემე) - ნახევარგამტარების სისალის შემცირება ელექტრული ველის ან ელექტროდენის ზემოქმედებით, მაგნიტურ-მექანიკური ეფექტი (მმე) - ნახევარგამტარების სისალის შემცირება მაგნიტური ველის ზემოქმედების შედეგად, მინარევებით ლეგირების მექანიკური ეფექტი (მლმე) - ნახევარგამტარების სისალის შემცირება მისი მინარევებით ლეგირების შედეგად. ყველა ეს ეფექტი დაკავშირებულია ატომების ადგილმონაცვლეობასთან ტემპერატურის ცვლილების გარეშე[13].

რეალურ ნახევარგამტარებში ყოველთვის არის დეფექტები და მინარევული ატომები, რომლებსაც, უმრავლეს შემთხვევაში, შეაქვთ ლოკალური ენერგეტიკული დონეები აკრძალულ ზონაში, მათი დიდი კონცენტრაციის შემთხვევაში წარმოიქმნება მინარევული გამტარებლობის ზონები. დონორულ დონეებს და მათგან შემდგარ მინარევულ ზონებს შეესაბამება ანტიდამაკავშირებელი მდგომარეობები, ხოლო აქცეპტორულ დონეებს-დამაკავშირებელი. ამრიგად, ანტიდამაკავშირებელ დონეზე ლოკალიზებული ელექტრონი და დამაკავშირებელ დონეზე ხვრელი, აკვაზებს წარმოადგენენ.

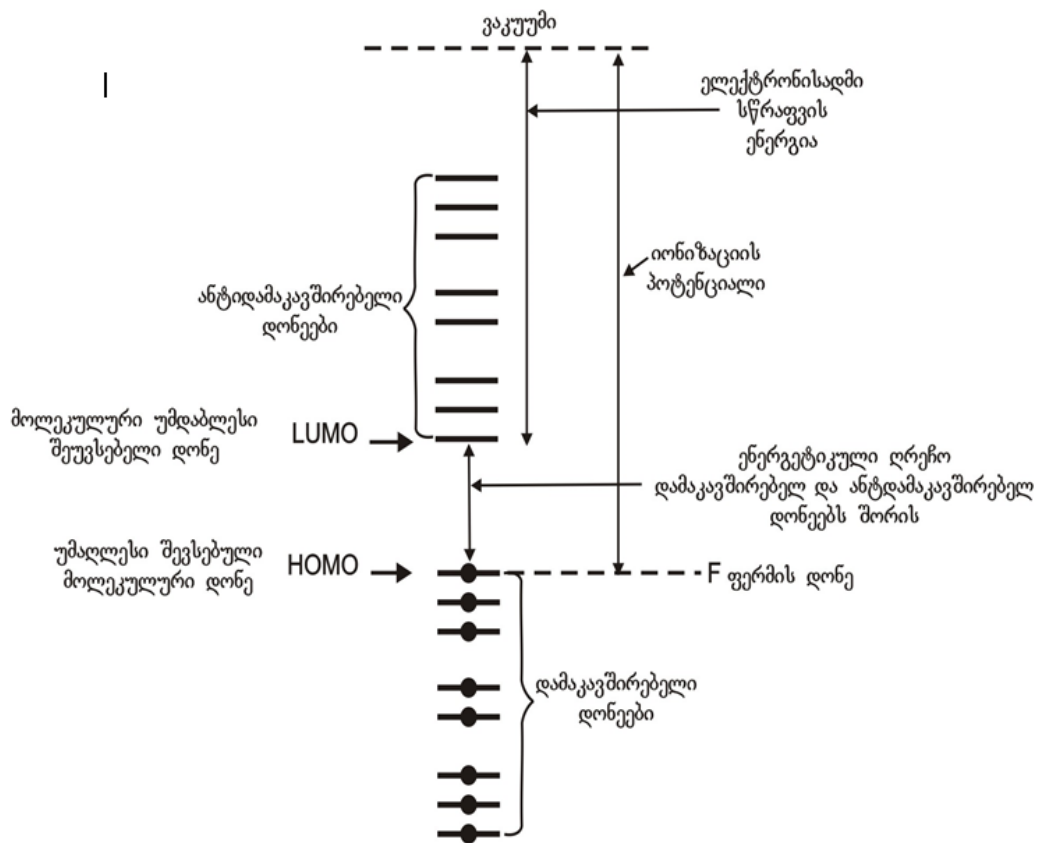
2.3 კლასტერებისა და ნანონაწილაკების ელექტრონული სტრუქტურა

ნანონაწილაკების ელექტრონული აგებულების საკითხის გასარკვევად თავიდან გავეცნოთ წარმოდგენებს კლასტერების ელექტრონული აგებულების შესახებ. კლასტერები არის ერთი სახის ელემენტის ატომებისაგან შედგენილი სტრუქტურის მქონე მოლეკულური შენაერთები. კლასტერში ატომების რაოდენობა n შეიძლება იცვლებოდეს 2-დან დაახლოებით 100-მდე. დიდი ზომის კლასტერები უკვე წარმოადგენენ ნანონაწილაკებს. ასე რომ, დიდი კლასტერები მოიცავს მცირე ზომის ნანონაწილაკებს. კლასტერებისათვის, ისევე როგორც ნანონაწილაკებისათვის, დამახასიათებელია ენერგეტიკული პარამეტრების (იონიზაციის პოტენციალები - IP, ელექტრონისადმი სწრაფვის ენერგია - E_A , ენერგეტიკული ღრეჩო - უმაღლეს შევსებულ (HOMO) და უდაბლეს თავისუფალ (LUMO) მოლეკულურ ორბიტალებს შორის (ნახ.11) და გეომეტრიული აგებულების (ჯაჭვი, ციკლი, პირამიდა, პოლიედრი) (ნახ.12) ცვლილება ატომების რაოდენობის ზრდასთან ერთად.

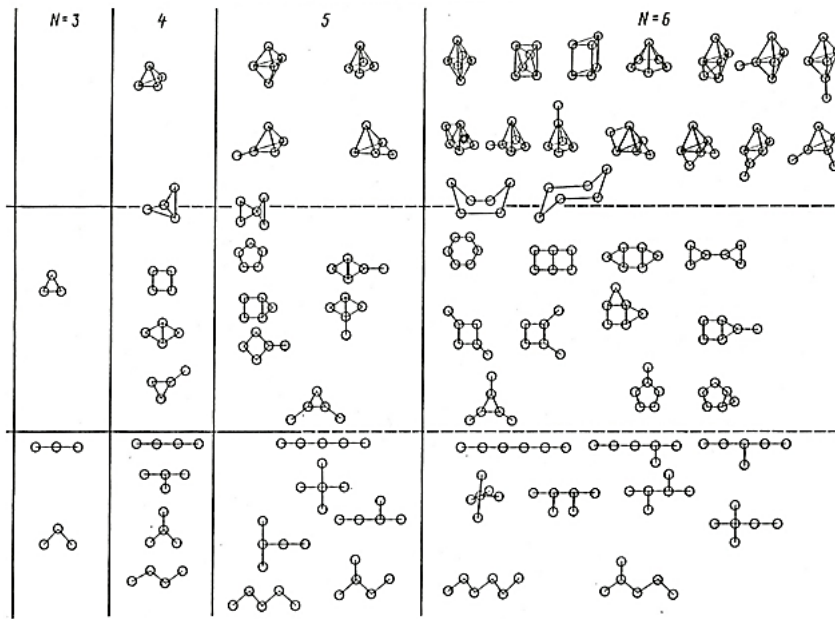
მაგალითად, Ag -ის ატომის IP=7,6 ევ, Ag₅₅-ს კლასტერის 6,1 ევ, ხოლო კომპაქტური ვერცხლისთვის ელექტრონის გამოსვლის მუშაობა დაახლოებით 4,3 ევ-ია, რომელსაც კომპაქტური ნივთიერებისათვის IP-ს აზრი აქვს.

კლასტერების ელექტრონული სტრუქტურისა და გეომეტრიული აგებულების აღსაწერად შექმნილია თეორიული კვანტურმექანიკური მეთოდები, მაგრამ მათი საშუალებით გამოთვლილი პარამეტრები არ ემთხვევა ექსპერიმენტულ შედეგებს. მიუხედავად ამისა, უნდა აღინიშნოს, რომ ყველა ისინი კლასტერის ენერგეტიკული აგებულებისათვის იძლევა [17] ენერგეტიკული დონეების დისკრეტულ სპექტრს. ენერგეტიკული სპექტრის დისკრეტულობა იწვევს იმას, რომ ალბათობა, რომ ენერგეტიკული დონე დაკავებულია ელექტრონით არის დისკრეტული, რაც ძალზე განსხვავდება

ფერმის განაწილების უწყვეტი ფუნქციისაგან, რომელიც მიღებულია

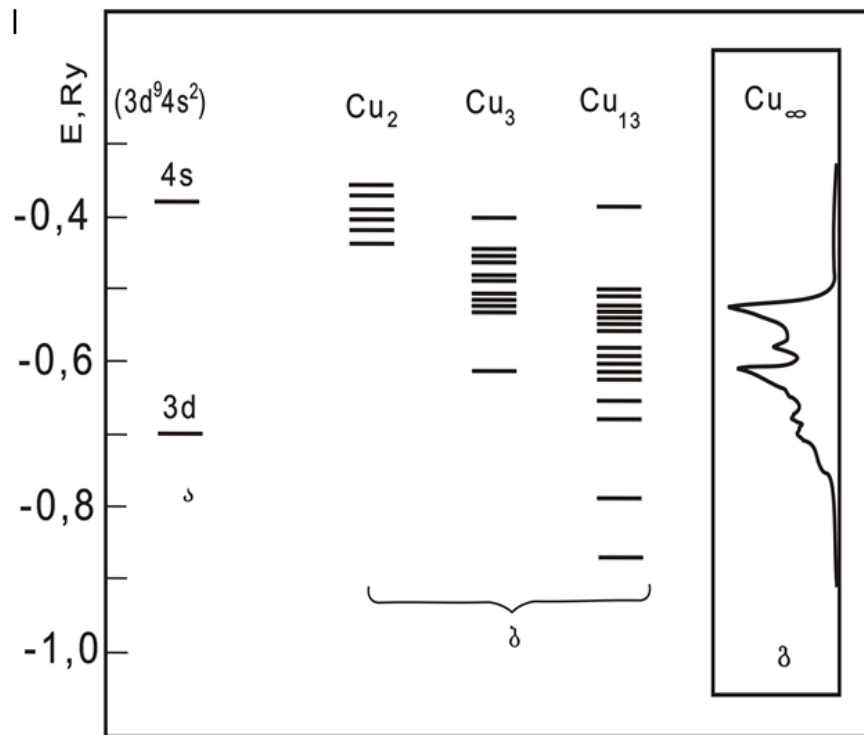


ნახ.11 ნანონაწილაკის ენერგეტიკული სტრუქტურა
 HOMO – ელექტრონებით დაკავებული უმაღლესი დონე
 LUMO – ელექტრონებით დაუკავებელი უმაღლესი დონე
 I – იონიზაციის პოტენციალი
 Q – ელექტრონისადმი სწრაფვა



ნახ. 12 სხვადასხვა რაოდენობის ატომების შემცველი კლასტერების შესაძლო გეომეტრიული აგებულება

კომპაქტური მყარი სხეულის შემთხვევაში. კლასტერებში და ნანონაწილაკებში ატომების რაოდენობის ზრდასთან ერთად მცირდება დონეებს შორის ენერგეტიკული მანძილი, რაც ეთანხმება ექსპერიმენტზე დამზერილ ტენდენციებს (ნახ.13). ენერგეტიკული ღრეო HOMO-სა და LUMO-ს შორის, რომელსაც აკრძალული ზონის აზრი აქვს, კლასტერში ატომების რაოდენობის ზრდასთან ერთად მცირდება და 100 ატომზე მეტი მეტალური ატომებისაგან შედგენილი კლასტერებისათვის ხდება მისი გაქრობა, მაგრამ ჯერ კიდევ Ag_{55} -ს კლასტერისათვის აკრძალული ზონის სიგანე 0,2 ევ-ია, Ag_{79} -სთვის კი - 0,1 ევ, რაც მათ ნახევარგამტარულ თვისებებზე მიუთითებს. გვინდა აღვნიშნოთ, რომ HOMO-ს ენერგეტიკულ მდგომარეობას აიგივებენ ფერმის დონესთან, ენერგეტიკული მანძილი კი ვაკუუმში HOMO-დან ელექტრონის ენერგეტიკულ დონემდე, განსაზღვრავს იონიზაციის პოტენციალს, ხოლო ვაკუუმის დონიდან LUMO-ს დონემდე, ელექტრონისადმი სწრაფვის ენერგიას (ნახ.11).



ნახ.13

ა) Cu-ს ატომს; ბ) კლასტერების და გ) კომპაქტური მყარი Cu-ს ენერგეტიკული მდგომარეობები. Cu-ის ატომების რაოდენობის ზრდასთან ერთად ენერგეტიკული მანძილი დონეებს შორის მცირდება, მაგრამ რჩება დისკრეტული, კომპაქტურ Cu-ში კი ენერგეტიკულ მდგომარეობებს აქვს უწყვეტი სპექტრის სახე

აღვნიშნოთ, რომ ყველა გამოთვლების შედეგად მიიღება დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი მოლეკულური ორბიტალები, რაც ძალზე მნიშვნელოვანია, რადგან ეს წარმოდგენები საჭიროა ნანონაწილაკების თვისებების ზომაზე დამოკიდებულების ასახსნელად.

მცირე ზომის ნანონაწილაკებისათვის (100-ზე ნაკლები ატომების რაოდენობით) დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი მოლეკულური ორბიტალები განცალკევებული არიან LUMO-ს და HOMO-ს შორის ენერგეტიკული ღრეჩოთი, რომელიც მეტალური ატომების რაოდენობის ზრდასთან ერთად ქრება და ხდება დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი დონეების (შემდგომში ზონების) გადაფარვა ისე, როგორც კომპაქტური მეტალების შემთხვევაში.იმის მიხედვით, თუ

რამდენი ვალენტური ელექტრონი აქვს კლასტერს და რამდენი დამაკავშირებელი მოლეკულური ორბიტალი, ვალენტური ელექტრონები შეიძლება განლაგდნენ მხოლოდ დამაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალებზე ან შეიძლება დაიკავონ ანტიდამაკავშირებელი მოლეკულური ორბიტალების ნაწილი.

რ. კუბომ [16] გააკეთა დაშვება ნანონაწილაკის ელექტრონიტრალობის შესახებ, რაც იმას ნიშნავს, რომ ნანონაწილაკში ელექტრონი იმყოფება გაუმჭოლი კედლების მქონე, ჩაკეტილ R რადიუსიან სივრცეში, რომელთან მისვლის შემდეგ იგი აირეკლება და ელექტრონის გამოსაყვანად ამ სივრციდან უნდა დაიხარჯოს დაახლოებით $e^2/2R$ ენერგია (e - ელექტრონის მუხტი, R - ნანონაწილაკის რადიუსი). რ. კუბოს მიერ შექმნილი თეორიული მეთოდით მიღებული შედეგი ყველაზე ახლოს იმყოფება ექსპერიმენტულ მონაცემებთან. კლასტერში მუხტის განაწილების გამოთვლების შედეგად ნაჩვენებია იყო, რომ კლასტერის, ნანონაწილაკის ზედაპირულ ფენაში არის ჭარბი უარყოფითი მუხტი რომელიც გადმოდინებულია ნაწილაკის შინაგანი (შიგა) ფენებიდან.

განხილული მასალის ანალიზი საშუალებას გვაძლევს გავაკეთოთ შემდეგი დასკვნა ნანონაწილაკების ელექტრონული სტრუქტურის შესახებ: ჯერჯერობით არ არსებობს სრულყოფილი თეორია, რომელიც დამაკმაყოფილებლად აღწერს ექსპერიმენტულ შედეგებს.

2.4 სამუშაოს მიზანი

ნანოტექნოლოგიების სწრაფად განვითარებადი დარგის წინაშე მდგარი ფიზიკო-ქიმიური ბუნების პრობლემებიდან ერთ-ერთი ძირითადია ნანონაწილაკების ფიზიკური თვისებების მათ ზომებზე დამოკიდებულების ზოგადი ახსნა.

ამ დამოკიდებულების ახსნა მყარი სხეულების ფიზიკისათვის ტრადიციული და ფართოდ გამოყენებადი მოლეკულურ-კინეტიკური

თეორიის საფუძველზე მთელ რიგ შემთხვევებში რთულია და მოითხოვს განახლებულ მიდგომას.

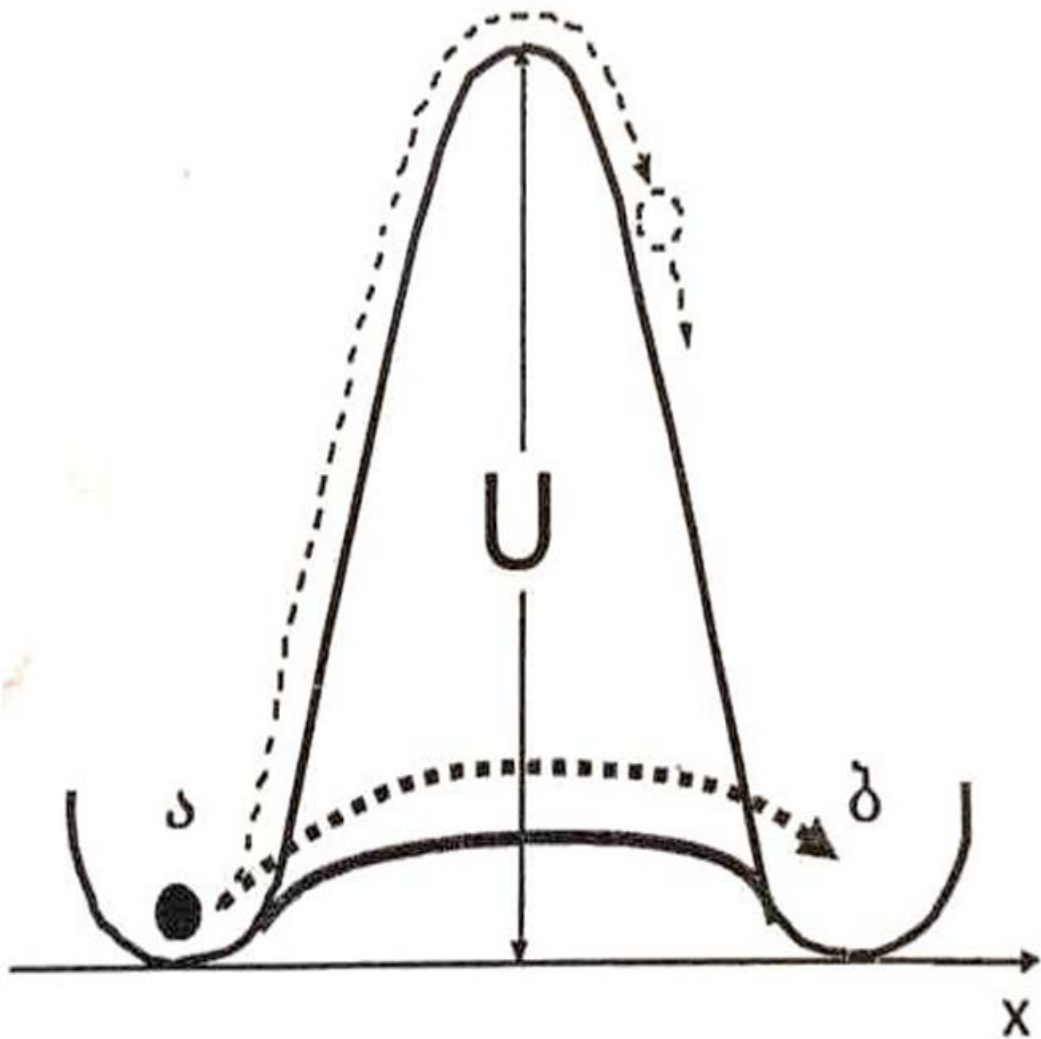
აღმოჩნდა, რომ კრისტალურ მესერში ატომების გადაადგილების მექანიზმის აღწერისას, ქიმიური ბმების ანუ ფაქტიურად ელექტრონული სტრუქტურის ლოკალურ არეში ცვლილებაზე დაფუძნებული მიდგომის გამოყენებით, შესაძლებელი ხდება ნანონაწილაკების რიგი ფიზიკური თვისებების მათ ზომებზე დამოკიდებულების არაწინააღმდეგობრივი თვისობრივი ახსნა.

აქედან გამომდინარე, სამუშაოს ძირითადი მიზანია, ბატონ ალექსი გერასიმოვის მიერ ჩამოყალიბებული და განვითარებული მიდგომების, კერძოდ, თერმული ან სხვა ათერმული, ზემოქმედების შედეგად მყარი სხეულის ლოკალურ არეებში ქიმიური ბმების დამახინჯების საფუძველზე და ჩვენ ხელთ არსებული ექსპერიმენტულ მასალაზე დაყრდნობით, გავანალიზოთ და თვისობრივად ავხსნათ სითბური, მექანიკური, ოპტიკური, ფაზური პროცესების დინამიკის თავისებურებანი ნანომასალებსა და ნანონაწილაკებში; ე. ი. არატრივიალური გარკვეულ წილად ახალი მიდგომების ბაზაზე თვისობრივად მაინც ავხსნათ ნანონაწილაკების მახასიათებელი ფიზიკური თვისებების დამოკიდებულება მათ ზომებზე.

თავი 3. ნანონაწილაკების მახასიათებელი თვისებების დამოკიდებულება მათ ზომებზე

მყარი სხეულის მახასიათებელი პარამეტრების მნიშვნელობები მოცემული წნევისა და ველების პირობებში მუდმივია, ხოლო მათი ულტრა მცირე ნაწილაკების და ნანონაწილაკების პარამეტრების მნიშვნელობები დამოკიდებულია მათ ზომებზე. ეს ნანონაწილაკების თვისებაა, რომელსაც დამაკმაყოფილებლად ვერ ხსნის მყარი სხეულების შესახებ არსებული ფიზიკური წარმოდგენები. აქვე უნდა აღვნიშნოთ, რომ მიუხედავად მრავალი თეორიული გამოთვლისა, არსებული ფიზიკური წარმოდგენები მყარ სხეულებშიც კი ვერ აღწერს ატომურ დონეზე ზოგიერთ ექსპერიმენტულ ფაქტს, რომლებიც დაკავშირებულია ატომის გადაადგილებასთან. მაგალითად, პირველი გვარის ფაზურ გადასვლებს, დაბალტემპერატურულ სტიმულირებულ პროცესებს და სხვა.

სამუშაო [13,14]-ში შემოთავაზებულია კონდენსირებულ გარემოში ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლის ახალი წარმოდგენები, რომლებიც ხსნის დღეისათვის დამზერილ ყველა ექსპერიმენტულ ფაქტს, როგორც მაღალ, ისე დაბალ ტემპერატურებზე [13]. ახალი წარმოდგენების მიხედვით კონდენსირებულ გარემოში ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლისათვის საჭიროა მოცემული ატომის ქიმიურ ბმებში მონაწილე ელექტრონების კვანტური მდგომარეობის ისეთი ცვლილება, რომელიც შეამცირებს ქიმიური ბმის ენერგიას, ე. ი. პოტენციური ენერგიის ბარიერის სიმაღლეს იმდენად, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე შესაძლებელი გახდეს ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლა (ნახ.14). ამ ახალ წარმოდგენებზე აგებულ თეორიას ჩვენ პირობითად ვუწოდეთ



ნახ. 14 ატომის მიერ პოტენციური ბარიერის გადალახვის სქემატური გამოსახულება

მოლეკულურ-პოტენციური თეორია (მპთ), რომლის მიხედვით კონდენსირებულ გარემოში ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლისათვის უნდა შემცირდეს მისი ბმის პოტენციური ენერგია, განსხვავებით მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიისა (მკთ), რომელიც საჭიროებს მოცემულ ატომთან კინეტიკური ენერგიის გაზრდას. ახალი თეორიის აღსაწერად აუცილებელია, რომ კონდენსირებულ გარემოში ქიმიურ ბმებში მონაწილე ელექტრონები შეიძლება იმყოფებოდეს ორ განსხვავებულ კვანტურ მდგომარეობაში: დამაკავშირებელში, როცა ისინი

ზრდიან ქიმიური ბმების ენერგიას და ანტიდამაკავშირებელში, როცა ისინი ამცირებენ ამ ენერგიას. ეს შედეგი გამომდინარეობს კონდენსირებულ გარემოში ელექტრონების ენერგეტიკული მდგომარეობის აღმწერი ზონური თეორიიდან, რომელიც მიიღება ძლიერად ბმული ელექტრონის მიახლოებაში გამოთვლებისათვის ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის მეთოდის გამოყენებით [12]. ამ შემთხვევაში მყარ სხეულს მიიჩნევენ მრავალი ატომისაგან შემდგარ დიდ მოლეკულად.

დაბალი ენერგიის მქონე ენერგეტიკულ დონეს უწოდებენ დამაკავშირებელ ენერგეტიკულ დონეს, რადგან მასზე მყოფ ელექტრონებს უფრო დაბალი ენერგია აქვს და ისინი ქმნიან ქიმიურ ბმას. მაღალი ენერგიის მქონე დონეს უწოდებენ ანტიდამაკავშირებელ დონეს, რადგან მასზე მყოფი ელექტრონები ბმას ამცირებს.

შემოთავაზებულია და ახსნილია თეორიულად და ექსპერიმენტულად [14] კონდენსირებულ გარემოში ატომის გადაადგილების ახალი დამატებითი წარმოდგენები, რომლის თანახმად ატომის გადაადგილება უმთავრესად განისაზღვრება მისი ქიმიური ბმების მდგომარეობით. ამ უკანასკნელის ცვლილება კი შესაძლებელია სახვადასხვა საშუალებით, ხოლო ტემპერატურა წარმოადგენს ერთ-ერთ მათგანს. ქვემოთ მოყვანილი იქნება მყარ სხეულებში ატომთა გადაადგილების ახალი მექანიზმი.

ნანონაწილაკების ფიზიკური პარამეტრების მნიშვნელობების მათ ზომებზე დამოკიდებულების ასახსნელად გამოვიყენებთ ამ ახალ წარმოდგენებს.

3.1 ატომთა გადაადგილების პოტენციური მექანიზმი მყარ სხეულებში

კონდენსირებულ გარემოში ატომის გადაადგილებასთან ანუ ძვრადობასთან დაკავშირებულ ფიზიკურ მოვლენათა (პირველი გვარის ფაზური გადასვლები, დიფუზია, სიბლანტე და სხვა) აღსაწერად,

დღეისათვის უმეტესად გამოიყენება მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიის წარმოდგენები, რომელთა მიხედვით, იმისათვის რომ მოცემულმა ატომმა (მოლეკულამ) შეიცვალოს თავისი ადგილმდებარეობა, აუცილებელია მასთან წარმოქმნას სათანადო სიდიდის კინეტიკური ენერჯის ფლუქტუაცია, რომელიც საკმარისი იქნება პოტენციური ენერჯის ბარიერის გადასალახავად [14] (ნახ.14).

ბარიერის სიმაღლე განპირობებულია მოცემული ატომის მეზობელ ატომებთან ქიმიური ბმების ენერჯის სიდიდით. ბოლო წლების კვლევების შედეგად აღმოჩნდა ატომების გადაადგილებასთან დაკავშირებული ახალი ცდისეული ფაქტები, რომლებსაც მოლეკულურ-კინეტიკური თეორია ვერ ხსნის [13]. სრულიად გამოუსადეგარია იგი დაბალ ტემპერატურებზე მიმდინარე პროცესების აღსაწერად, კერძოდ, სტიმულირებული დაბალტემპერატურული დიფუზიის და ნახევარგამტარებში კრიოგენულ ტემპერატურებზე შექმნილი რადიაციული დეფექტების მოძრაობისა და ურთიერთქმედების ასახსნელად. ამ თეორიის მიხედვით, მოცემული ატომის ადგილმდებარეობის შეცვლის ალბათობა

$$W \sim \exp(-U/kT)$$

ტემპერატურის შემცირებით ძალზე სწრაფად მცირდება და ოთახის ტემპერატურასთან შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე უკვე ნულს უახლოვდება (U არის ბარიერის სიმაღლე, T - აბსოლუტური ტემპერატურა, k - ბოლცმანის მუდმივა), რაც იმას ნიშნავს, რომ ატომები ადგილმდებარეობას არ უნდა იცვლიდნენ, ექსპერიმენტის დროს კი მათი გადაადგილება დაიზიარება [13]. მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიის გამოყენება შესაძლებელია მაღალ $T > 0,3T_{\text{დფ}}$ ($T_{\text{დფ}}$ ნივთიერების დნობის ტემპერატურაა). გარდა ამისა მისი გამოყენება მარალი ტემპერატურის არეში ზოგირთი ფიზიკური მოვლენის აღწერისას პრობლემებს აწყდება, ამჟღავნებს შინაგან წინააღმდეგობებს და ამის გამო მოლეკულურ - კინეტიკური თეორია თვისებრივადაც ვერ ხსნის ბევრ ისეთ ექსპერიმენტულ ფაქტს [13], როგორცაა მაგალითად: 1.მყარი სხეულის გაფართოება

სინათლის მოქმედებით ტემპერატურის მომატების გარეშე; 2.პირველი გვარის ფაზური გადასვლების მიკროსკოპული მექანიზმი; 3.ნივთიერებების მყარ მდგომარეობაში სხვადასხვა ატომის დიფუზიის კოეფიციენტების მნიშვნელობების ერთმანეთისაგან ძალზე დიდი (რამდენიმე რიგით) განსხვავება, ხოლო თხევად მდგომარეობაში ყველანაირი ატომის დიფუზიის კოეფიციენტების მნიშვნელობების ერთმანეთისაგან მცირე განსხვავება (ცხრილი1); 4.მყარი სხეულის დარბილება ტემპერატურის მომატების გარეშე სინათლის, ელექტრული დენის, მაგნიტური ან ელექტრული ველის მოქმედების დროს.

ცხრილი 1

დნობის ტემპერატურაზე ელემენტთა თვითდიფუზიის კოეფიციენტები D(სმ²/წმ) მყარ და თხევად მდგომარეობებში

N	ელემენტი	დნობის ტემპერატურა T, K	დიფუზიის კოეფიციენტი მყ.მდგ.-ში	დიფუზიის კოეფიციენტი თხ.მდგ.-ში
1	Li	454	$9,4 \cdot 10^{-8}$	$6,6 \cdot 10^{-5}$
2	Na	371	$2,4 \cdot 10^{-7}$	$3,6 \cdot 10^{-5}$
3	Cu	1356	$5,4 \cdot 10^{-8}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$
4	Ag	1234	$5,2 \cdot 10^{-9}$	$2,4 \cdot 10^{-5}$
5	Au	1336	$5,4 \cdot 10^{-9}$	$2,1 \cdot 10^{-5}$
6	Mg	923	$2,6 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-5}$
7	Al	933	$1,6 \cdot 10^{-7}$	$7,2 \cdot 10^{-5}$
8	Cd	594	$6 \cdot 10^{-9}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$
9	Tl	577	$1,2 \cdot 10^{-9}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$
10	Sn	505	$3,4 \cdot 10^{-11}$	$6,3 \cdot 10^{-5}$
11	In	430	$9,5 \cdot 10^{-10}$	$1,6 \cdot 10^{-5}$
12	Pb	600	$3,6 \cdot 10^{-10}$	$4,6 \cdot 10^{-5}$
13	Si	1683	$5,6 \cdot 10^{-12}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$
14	Ge	1210	$1,1 \cdot 10^{-12}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$
15	Sb	904	$1,9 \cdot 10^{-10}$	$3,8 \cdot 10^{-5}$
16	Te	723	$6 \cdot 10^{-11}$	$3,1 \cdot 10^{-5}$
17	Fe	1803	$2 \cdot 10^{-7}$	$2,7 \cdot 10^{-5}$
18	Co	1765	$1,4 \cdot 10^{-9}$	$4 \cdot 10^{-5}$

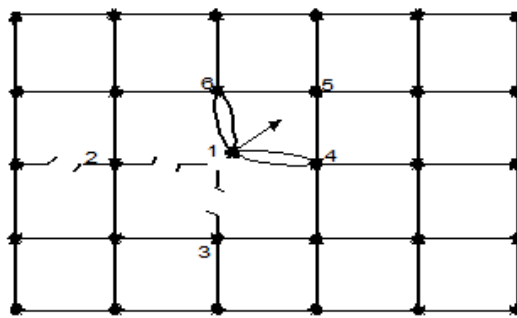
ატომის ბმის სიძლიერე მეზობელ ატომებთან კონდენსირებულ გარემოში დამოკიდებულია დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე მყოფი ელექტრონების თანაფარდობაზე. აკვაზები ცვლიან ამ თანაფარდობას, ე.ი. ურთიერთქმედების პოტენციურ ენერგიას და ასუსტებენ იმ ატომთა ქიმიურ ბმებს, რომლებთანაც აღმოჩნდებიან თავის სითბური მოძრაობის დროს, რითაც უადვილებენ ატომებს ადგილმონაცვლეობას, ე.ი. ხელს უწყობენ მიგრაციულ პროცესს კონდენსირებულ გარემოში.

განვიხილოთ მიგრაციის ახალი შესაძლო მექანიზმი კარგად შესწავლილ Ge და Si ნახევარგამტარებში,[6, 8]შემდეგ კი ამ მექანიზმის გამოყენება სხვა ნახევარგამტარების, მეტალებისა და მათი ნადნობების შემთხვევაში.

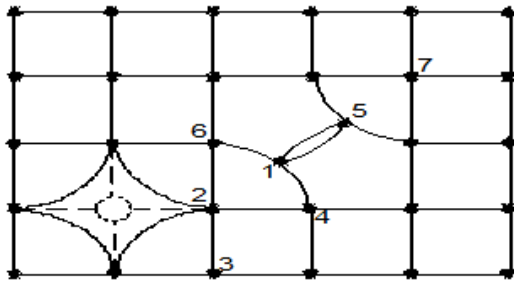
მიგრაციული ნახტომი აღიწერება მოდელით, რომელიც გულისხმობს შემდეგ ელემენტარულ აქტებს (ნახ.15): დანიშნული ატომის გამოსვლა კრისტალური მესრის კვანძიდან, რაც რომელიმე მეზობელ ატომთან ჰანტელის (ჰანტელურს უწოდებენ ისეთ კვანძთაშორისო მდგომარეობას, როცა ორი ატომი იმყოფება გარკვეულ მანძილებზე თავისუფალ კვანძთან, მას ყველაზე ნაკლები პოტენციური ენერგია შეესაბამება, ვიდრე სხვა კვანძთაშორისო მდგომარეობებს) შექმნის ტოლფასია და ერთ-ერთი მეზობელი ატომის გადასვლა განთავისუფლებულ კვანძში. ეს ორი თანმიმდევრული აქტი ფრენკლის ტიპის დეფექტის შექმნის ეკვივალენტურია. ჰანტელის დაშლის შედეგად „დანიშნული“ ატომის მოხვედრა ახალ კვანძში, ხოლო მეორე ატომის მიერ ახალი ჰანტელის შექმნა.

ყველა ეს აქტი განიხილება როგორც თანმიმდევრული, ამიტომ ელემენტარული მიგრაციული ნახტომის ალბათობა წარმოადგენს მათი ალბათობების ნამრავლს.

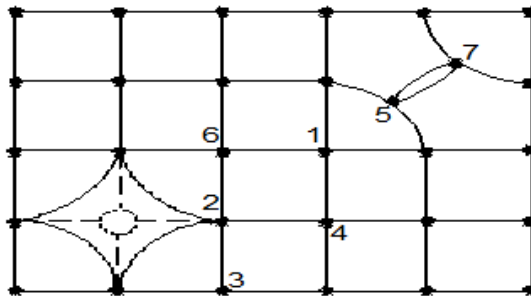
ვთქვათ, ნახევარგამტარში რაიმე გზით გაჩენილია აკვაზები, მაშინ მოცემულ ატომთან, განსაზღვრული ალბათობებით, შეიძლება იმყოფებოდეს აკვაზების სხვადასხვა რაოდენობა. ალმასის მესრის მქონე ნახევარგამტარებში თითოეულ ატომზე მოდის ოთხი დამაკავშირებელი ელექტრონი. მოცემული ატომის მაქსიმალური ბმის ძალა მეზობელ ატომებთან დამოკიდებულია აკვაზების რაოდენობაზე მის მახლობლად. დავუშვათ, რომ Ge-სა და Si-ში მოცემულ ატომთან, რომლის გადაადგილებასაც ჩვენ ვაკვირდებით (დანიშნული ატომი), რომელიმე



ა



ბ



გ

ნახ.15 მიგრაციული აქტის სქემა: ა) დანიშნული (1) ატომის გამოსვლა კვანძიდან; ბ) მეზობელ (5) ატომთან ჰანტელის შექმნა და (2) ატომის გადასვლა (1) ატომის თავისუფალ კვანძში; გ) ჰანტელის დაშლა (1) ატომის კვანძში მოხვედრით და ახალი ჰანტელის შექმნა (5) და (7) ატომებით.

ერთი მხრიდან მოვიდა ორი აკვაზი (ნახ.15ა) და ორი ბმა შესუსტდა, მაშინ ატომებს შორის მანძილი 2-1 და 3-1 იზრდება, ხოლო დანარჩენი ორი ბმა, სადაც უარყოფითი მუხტის სიმკვრივე მეტია, თავისკენ გადაქაჩავს დანიშნულ ატომს და იგი ამ ჯამური მოქმედების შედეგად აღმოჩნდება კვანძთაშორის მდგომარეობაში, სადაც მაშინვე ქმნის ჰანტელურ კვანძთაშორისო მდგომარეობას (5) ატომთან. წარმოიქმნება კვანძთაშორისი ატომი და ვაკანსია. მაგრამ წერტილოვანი დეფექტების წყვილი ვერ იქნება სტაბილური, ვინაიდან ვაკანსიასთან უახლოეს მანძილზე მყოფი კვანძთაშორისი ატომი, დამაკავშირებელი ელექტრონის ჩაჭერის შემთხვევაში, აღადგენს დამაკავშირებელი ელექტრონების სიმკვრივეს და მიიზიდება კვანძისაკენ. აქედან გამომდინარე, წარმოქმნილი წყვილის სტაბილიზაციისათვის აუცილებელია τ (ატომის რხევის პერიოდი) დროის განმავლობაში მეზობელი ატომის გადასვლა ვაკანტურ კვანძში; ამისათვის კი აუცილებელია, რომ ამ ატომის ბმა შემდეგი კოორდინაციული სფეროს ატომებთან შემცირდეს მინიმუმ ნორმალური ბმის მნიშვნელობამდე (რადგანაც დამაკავშირებელი მუხტის გადანაწილების გამო ამ ბმის სიდიდე გაზრდილი იყო), რათა ეს გადასვლა (ნახ.15ბ) განხორციელდეს ფონონების დახმარებით. ამასთან, აუცილებელია მოცემულ ატომთან მაქსიმალური ენერჯის მქონე ფონონების არსებობა იმ რაოდენობით, რომელიც დნობის ტემპერატურაზე მათი საშუალო რიცხვის ტოლია, რადგანაც სტრუქტურის ყველაზე მეტი ცვლილება მიმდინარეობს სწორედ დნობის ტემპერატურაზე.

ატომის გამოსვლა კვანძთაშორის და მეზობელი ატომის გადასვლა ვაკანსიაში თანმიმდევრული მოვლენებია და ფრენკელის ტიპის დეფექტის წარმოქმნის ალბათობა იქნება მათი ალბათობების ნამრავლი:

$$W_{\text{დექ}} = W_{\text{გამ}} \cdot W_{\text{გად}}$$

სადაც $W_{\text{გამ}}$ კვანძიდან გამოსვლის ალბათობაა, ხოლო $W_{\text{გად}}$ - მეზობელი ატომის ვაკანსიაში გადასვლის ალბათობა. $W_{\text{გამ}}$ განისაზღვრება მოცემულ ატომთან ერთდროულად ორი აკვაზის არსებობით ერთ ატომზე მოსულ მოცულობაში $V_a = 1/N_a$, სადაც N_a ატომების კონცენტრაციაა.

ერთი აკვაზის მოხვედრის ალბათობა V_a მოცულობაში იქნება $2n/N_a$, ამასთან, $n_e=n_h=n_i$, სადაც n_e და n_h , ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაციაა. τ დროის განმავლობაში V_a მოცულობაში აკვაზის მოხვედრის ალბათობა მიიღება $2n_i/N_a$ ალბათობის გამრავლებით იმ ატომების რიცხვზე, რომელთანაც τ დროის განმავლობაში მივა ეს კვაზინაწილაკი, ანუ სიდიდეზე $n_{\text{შეგ}} = \tau/t$. აქ $t=(t_e+t_h)/2W_a$ არის მოცულობაში კვაზინაწილაკების ყოფნის საშუალო დროა: $t_{e,h}=2r_{a}/v_{e,h}$, ორი კვაზინაწილაკის ერთდროული მოხვედრის ალბათობა V_a მოცულობაში τ დროის განმავლობაში იმ პირობით, რომ ერთი კვაზინაწილაკი V_a -ში უცდის მეორეს t დროის განმავლობაში იქნება:

$$W_{\text{გამ}}=2n_{\text{შეგ}}^2(n_i/N_a)^2$$

$W_{\text{გად}}$ ალბათობა განისაზღვრება, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, V_a მოცულობაში τ დროის განმავლობაში ანტიდამაკავშირებელი კვაზინაწილაკის მოსვლით და ატომთან მაქსიმალური ენერჯის მქონე ფონონების იმ რაოდენობის არსებობით, რომელიც ტოლია მათი საშუალო როცხვისა $T=T_{\text{დნ}}$ -ის ტემპერატურის დროს. თუ უკანასკნელი პირობის განხორციელების ალბათობას აღვნიშნავთ $W_{\text{გ}}$ -ით

$$W_{\text{გად}}=2n_{\text{შეგ}}^2(n_i/N_a)^2W_{\text{გ}}$$

$W_{\text{გ}}$ -ის გამოსათვლელად უნდა გავითვალისწინოთ, რომ მაღალი ტემპერატურის პირობებში $T \gg T_D$, სადაც T_D დებაის ტემპერატურაა. $n_{\text{გ}}$ - ფონონების რიცხვის არსებობის ალბათობა თითოეულ ატომთან შეიძლება გამოითვალოს პუასონის განაწილებით.

იმისათვის, რათა ატომის ადგილმდებარეობის შეცვლის ერთი დიფუზური აქტი განხორციელდეს, კვანძში მყოფი დანიშნული ატომი (1), უნდა გადაადგილდეს სხვა კვანძში.

ჰანტელის დაშლისა და ატომის (1) კვანძში მოხვედრის ალბათობა შეიძლება გამოვთვალოთ იმ შეხედულების საფუძველზე, რომ ჰანტელის მდგომარეობაში მყოფ ატომს აქვს ოთხი ბმა. ამიტომ ვვარაუდობთ, რომ მის დასაშლელად აუცილებელია ორი ბმის გაწყვეტა; ამ შემთხვევაში ამ

პროცესის ალბათობა გამოისახება ისევე, როგორც ატომის კვანძიდან გამოსვლის შემთხვევაში, მხოლოდ იმ განსხვავებით, რომ, ვინაიდან ჰანტელი წარმოადგენს დეფექტს, მის მახლობლად კვაზინაწილაკის აღმოჩენის ალბათობის შეფასებისას აუცილებელია, გავითვალისწინოთ α მამრავლი, რომელიც პირველ მიახლოებაში შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ, როგორც დეფექტის მიერ დარღვეული $V_{ფფ}$ მოცულობის ფარდობა ერთ რეგულარულ ატომზე მოსულ მოცულობასთან $V_{ფფ} / V_a$, მაშინ

$$W_{ჰან} = 2\alpha^2 n_{ფფ} (n_i / N_a)^2$$

ზემოთ ჩამოთვლილი პროცესები თანმიმდევრულია, ამიტომ რეგულარული ატომის მიგრაციული აქტის ალბათობას ექნება შემდეგი სახე:

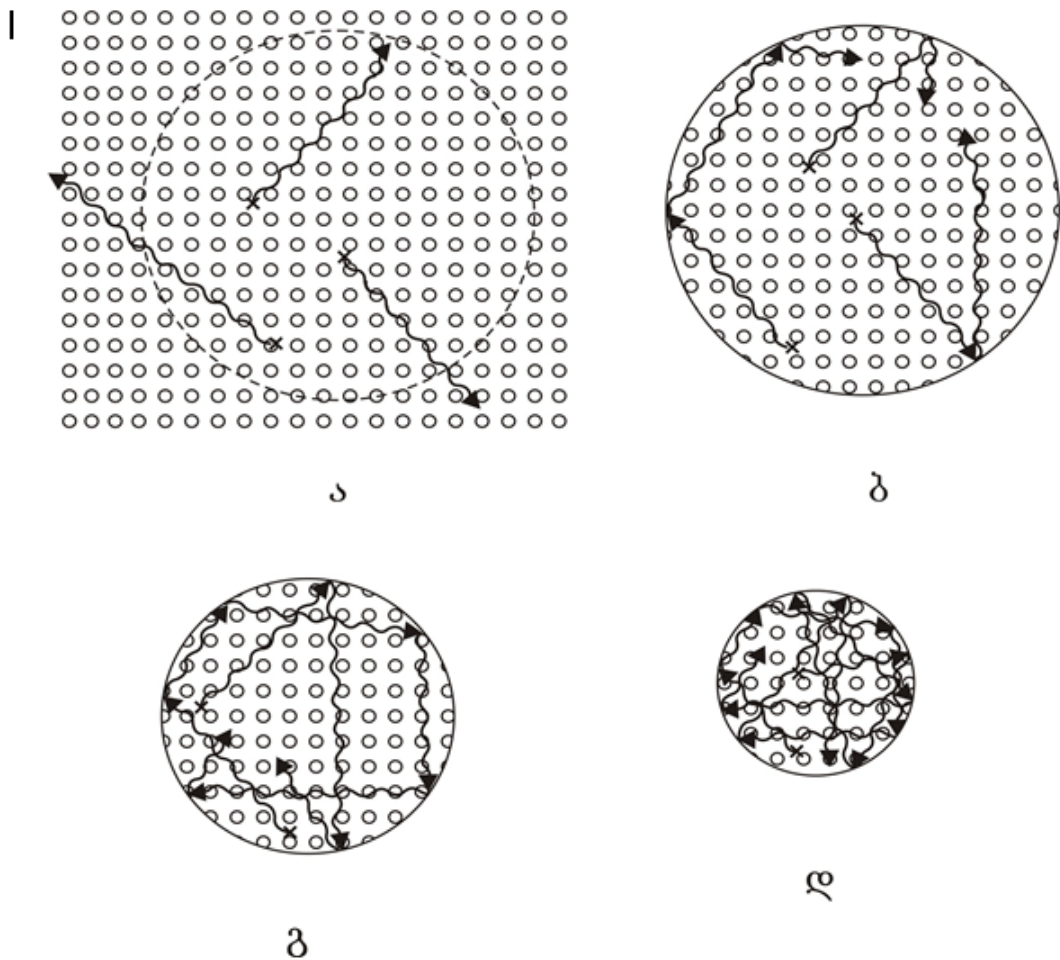
$$W_{მიგ} = W_{გამ} \cdot W_{გად} \cdot W_{ჰან} = 8\alpha^2 n_{ფფ}^5 (n_i / N_a)^6 W_{ფფ}$$

საიდანაც ჩანს, რომ იგი ძლიერად არის დამოკიდებული აკვაზების კონცენტრაციაზე. კონცენტრაციის შეცვლა შეიძლება სხვადასხვა გზით და არ აქვს მნიშვნელობა, თუ რა საშუალებით არის მიღებული აკვაზები: ტემპერატურით, სინათლით, ინჟექციით და ა. შ.

ზემოთ მოყვანილი ატომის გადაადგილების პოტენციური მექანიზმი სამართლიანია ნანონაწილაკებისთვისაც მათი ელექტრონული სტრუქტურიდან გამომდინარე სპეციფიკის გათვალისწინებით.

ნანონაწილაკების შემთხვევაში ანტიდამაკავშირებელ დონეზე რაიმე გზით გადაყვანილი ელექტრონი-აკვაზი იმოდრავებს ანტიდამაკავშირებელ დონეზე თავისუფლად, თუ ამ დონეებს შორის ენერგეტიკული მანძილი kT -ს რიგისაა, რაც რეალიზდება ოთახის ტემპერატურაზე.

გავიხსენოთ, რომ $A_{გ79}$ ენერგეტიკული დრეჩო არის 0,1 ევ, ხოლო შემდეგი აღზნებული დონე პირველი აღზნებული დონიდან დაცილებული იქნება n^{-2} -ჯერ ნაკლები ანუ 0,01 ევ ენერგიით. აკვაზი მოძრაობის დროს მიაღწევს ნანონაწილაკის ზედაპირს შიგნიდან და აირეკლება მისგან. ზედაპირიდან აკვაზების არეკვლის გამო ისინი ვერ გადიან ნანონაწილაკიდან, განსხვავებით კომპაქტურ სხეულში მოთავსებული იგივე მოცულობის არიდან (ნახ. 16), ამიტომ, აკვაზები



ნახ.16 აკვაზების ერთიდაიგივე რეალური კონცენტრაციის დროს ეფექტური კონცენტრაციის ზრდა ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად

ა) კომპაქტურ მყარ სხეულში ნანონაწილაკის ზომის ტოლ არეში სამი აკვაზის ტრაექტორია: ორი მათგანი არიდან გადის.

ბ) ნანონაწილაკში სამივე აკვაზის ტრაექტორია მასშია მოთავსებული და ისინი უფრო მეტ ატომებთან გაივლიან, ვიდრე კომპაქტური მყარი სხეულის (ა) შემთხვევაში.

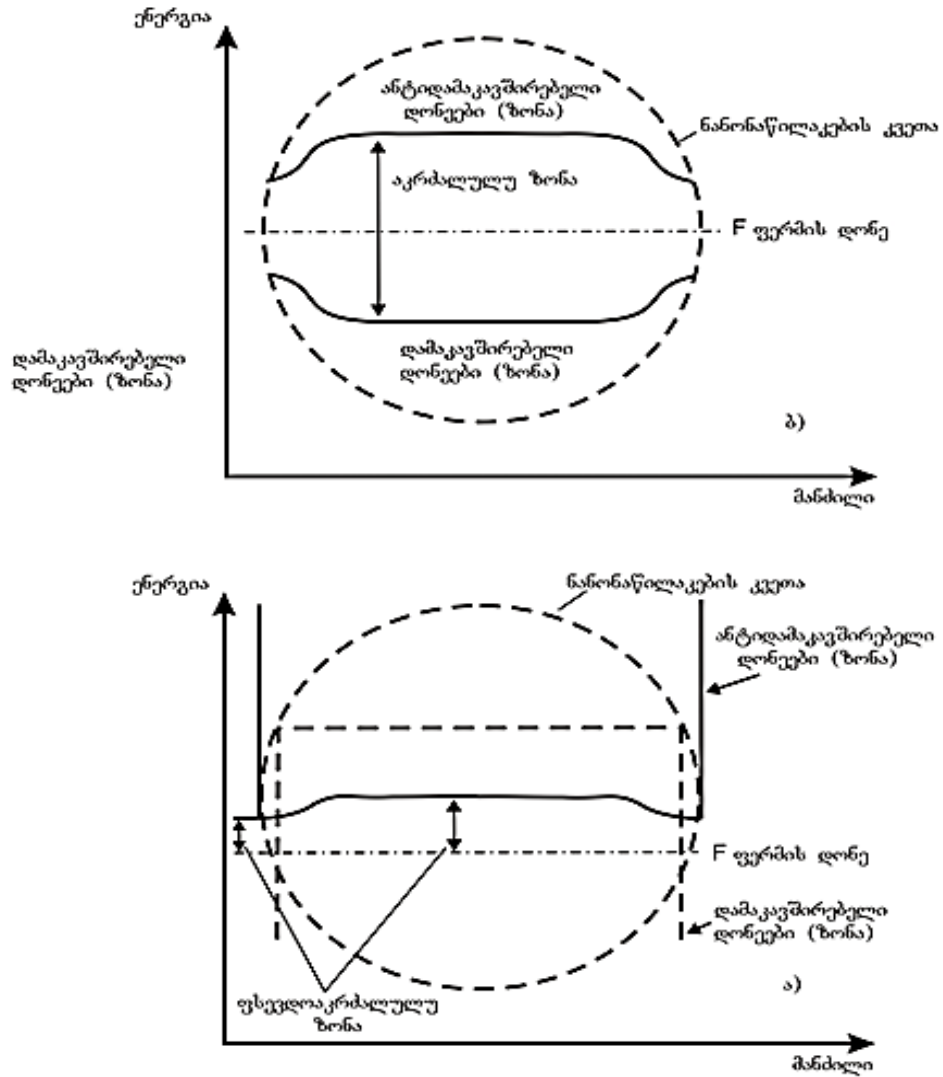
გ), დ) – ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად იგივე სამი აკვაზი უფრო მეტ ატომთან აღმოჩნდება.

ბ), გ), დ) – ნანონაწილაკის აკვაზები ზედაპირიდან არეკვლის გამო ზედაპირულ ფენაში მყოფ ატომებთან უფრო ხშირად აღმოჩნდებიან.

ნანონაწილაკში მოთავსებულ ატომებთან უფრო ხშირად აღმოჩნდებიან, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულში, რაც ზრდის მათი ბმების შემასუსტებელ ზემოქმედებას. ეს შეიძლება გამოიხატოს ეფექტური კონცენტრაციით, რომელიც რეალურზე მეტია იმდენად, რამდენად მეტჯერაც აღმოჩნდება

მოცემულ ატომთან ნანონაწილაკში აკვაზი, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულში, ატომის რხევის პერიოდის ტოლი დროის განმავლობაში. შედეგად, ნანონაწილაკის ზედაპირულ ფენაში მყოფი ატომები განიცდიან აკვაზის შემასუსტებელ ზემოქმედებას ორჯერ ან მეტჯერ ატომის ერთი რხევის პერიოდის განმავლობაში (ნახ. 16).

აკვაზების ერთნაირი კონცენტრაციის დროს ნანონაწილაკებში მათი ზომების სიმცირის გამო აკვაზები უფრო ხშირად მიაღწევენ და აირეკლებიან ზედაპირიდან. შედეგად, მათი ქიმიური ბმები უფრო შესუსტებული იქნება, ვიდრე შიდა ნაწილში მყოფი ატომებისა. ბმების შესუსტება იწვევს აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს შემცირებას (ნახ.17) და მოცემულ ტემპერატურაზე ელექტრონების გადასვლის ინტენსივობის გაზრდას, რაც განაპირობებს აკვაზების ჭარბ კონცენტრაციას ნანონაწილაკის ზედაპირულ ფენაში და აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს მნიშვნელობის შემდგომ შემცირებას. მიიღება ერთი ნივთიერების საინტერესო ენერგეტიკული სტრუქტურა, რომელსაც აქვს აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს სხვადასხვა მნიშვნელობა, ზედაპირთან უფრო მცირე, ვიდრე შუაგულში (ნახ.17). ნანონაწილაკის ასეთი ელექტრონული სტრუქტურა განაპირობებს ზედაპირულ ფენაში აკვაზების სიჭარბეს და ამ ფენის მეტ სირბილეს შიდა არესთან შედარებით. აქედან გამომდინარე, ზედაპირულ ფენაში ატომების გადაადგილება უფრო ადვილია, ვიდრე ნანონაწილაკის შიდა არეში. გასაგებია, რომ ნანონაწილაკების ზომების შემცირებასთან ერთად ეფექტური კონცენტრაცია მატულობს. აქედან გამომდინარე, ატომის გადაადგილების აღმწერ ფორმულაში რეალური კონცენტრაციის ნაცვლად აღებული უნდა იყოს ეფექტური კონცენტრაცია, რომელიც ნანონაწილაკის კონკრეტული ზომის და მოცემული ნივთიერების შემთხვევისთვის უნდა იქნას გამოთვლილი.

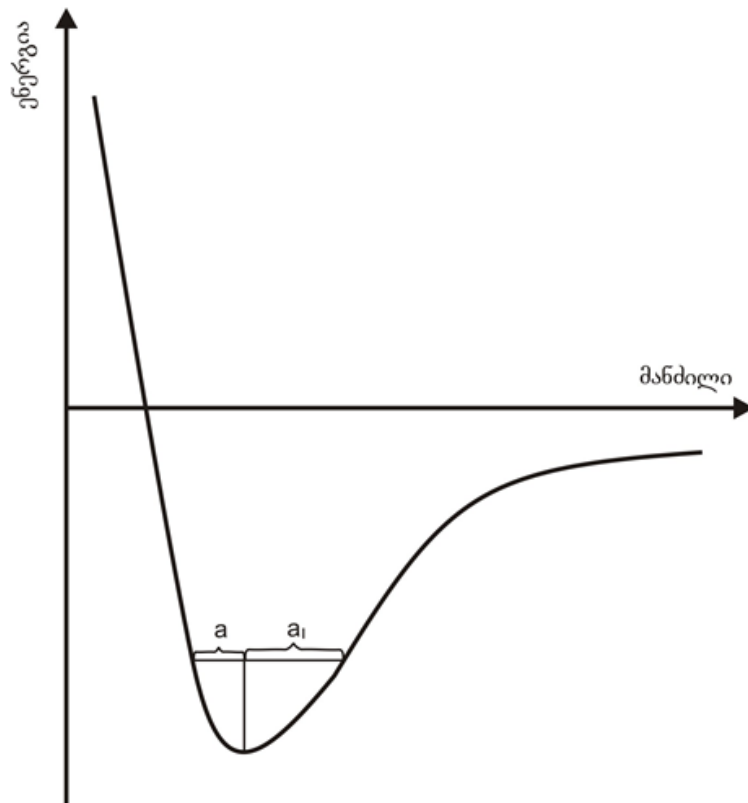


ნახ.17 ნანონაწილაკებში ენერგეტიკული დონეების განლაგება ზედაპირთან და სიღრმეში. ზედაპირიდან აკვაზების არეკვლის შედეგად ზედაპირულ ატომებთან აკვაზების ყოფნის ალბათობა მეტია, რაც (ა) ნახევარგამტარში მეტად ამცირებს მანძილს დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს (ზონებს) შორის, ვიდრე სიღრმეში. (ბ) მეტალებში აღნიშნული დონეები გადაფარულია და ფსევდოაკრძალული ზონა ზედაპირთან ნაკლებია, ვიდრე სიღრმეში და შესაბამისად, კონცენტრაციაც მეტია.

3.2 მესრის პარამეტრის და დეზაის ტემპერატურის ცვლილება ნანონაწილაკების ზომების მიხედვით

3.2.1 მესრის პარამეტრის ცვლილება სინათლის ზეგავლენით მყარ სხეულებში

ცნობილია, რომ მყარი სხეულის ტემპერატურის მომატებით ხდება მისი გაფართოება, რაც გამოწვეულია მესრის პარამეტრის გაზრდით. ტრადიციული წარმოდგენების თანახმად, მესრის პარამეტრი იზრდება ატომების რხევის ანჰარმონიული შემადგენლის ხარჯზე, რომლის მიხედვით რხევის დროს წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრა ატომების დაშორებისას მეტია, ვიდრე მათი დაახლოებისას (ნახ.18). ახალი წარმოდგენების თანახმად, მესრის პარამეტრის გაზრდა განპირობებულია ატომების გადაადგილებით ქიმიური ბმების შესუსტების გამო მათი პირვანდელი წონასწორობის მდგომარეობიდან. ატომების გადაადგილება კი გამოწვეულია ტემპერატურით წარმოქმნილი აკვაზების მიერ ქიმიური ბმების შესუსტებით, რადგან ცნობილია, რომ ქიმიური ბმის შესუსტება ავტომატურად ნიშნავს ატომთაშორისი მანძილის ზრდას. გამოთქმული დებულების თანახმად, იგივე უნდა მოხდეს დაბალ ტემპერატურაზეც ათერმული ზემოქმედების შედეგად აკვაზების სათანადო კონცენტრაციის წარმოქმნით. განვიხილოთ სინათლის მოქმედება მესრის პარამეტრზე Si-ის კრისტალში. სამუშაოში [19, 63] გაზომილ იქნა Si-ის მესრის პარამეტრის ცვლილება სინათლის ზემოქმედების დროს. კრისტალის ტემპერატურის მატება არ აღემატებოდა 150°C -ს. გამოკვლეული იყო Si-ის ნიმუშები ლეგირებული Sb-ით $2,3 \cdot 10^{13} \text{ სმ}^{-3}$ კონცენტრაციით და ზედაპირის ორიენტაციით (100). გამოყენებული იყო პრეცეზიული გაზომვის რენტგენო-დიფრაქციული მეთოდი მესრის პარამეტრის ეტალონის საშუალებით. ნიმუშის ტემპერატურის კონტროლისათვის გამოიყენებოდა თერმოწყვილი. განათება ხდებოდა სინდიყიანი ნათურით. ჩატარებული იყო საკონტროლო



გაზომვები სიბნელეში, როცა ნიმუშის ტემპერატურა სპეციალური ღუმელის გამოყენებით ისეთივე იყო, როგორც განათების დროს. აღმოჩნდა, რომ

ნახ.18 ორ ატომს შორის ურთიერთქმედების ენერჯიის დამოკიდებულება მათ შორის მანძილზე. რხევის დროს ატომის ნორმალური მდებარეობიდან გადახრის მანძილი $a < a_1$

სინათლით განათებისას მესრის პარამეტრი $a_{სინ} = 5,43089 \text{ \AA}$ ხოლო იგივე ტემპერატურაზე სიბნელეში – $5,43067 \text{ \AA}$, ე.ი. ცვლილება შეადგენდა $2,2 \times 10^{-4} \text{ \AA}$, როცა გაზომვის ცდომილება იყო $5 \times 10^{-5} \text{ \AA}$. ჩატარებული იყო მესრის პარამეტრის ფარდობითი ცვლილების თეორიული გამოთვლები ჰარმონიულ მიახლოებაში, აკვაზების მოცემული კონცენტრაციისათვის [22, 21]. მესრის პარამეტრის ფარდობითი ცვლილებისათვის მიღებული იყო გამოსახულება

$$\Delta d/d \sim \sqrt{n_{\lambda} / N_a} \sqrt{m^* / M_a}$$

სადაც d არის მესრის პარამეტრის მნიშვნელობა სიბნელეში Δd მესრის პარამეტრის ცვლილება განათების შედეგად, n_{λ} სინათლის ზემოქმედებით წარმოქმნილი აკვაზების კონცენტრაცია, m^* ელექტრონის და ხვრელის გასაშუალოებული ეფექტური მასა, M_a - Si-ს ატომის მასა. თეორიული გამოთვლის შედეგები დამაკმაყოფილებლად დაემთხვა ექსპერიმენტულს. მოყვანილი ფორმულიდან ჩანს, რომ ერთადერთი ცვლადი არის n_{λ} , ხოლო დანარჩენი წევრები მუდმივი სიდიდეებია და სხეულის გაფართოება დამოკიდებულია მხოლოდ აკვაზების კონცენტრაციაზე მიუხედავად იმისა, თუ რა გზით არის ისინი წარმოქმნილი. ამრიგად, შეიძლება დავასკვნათ, რომ ანჰარმონიული მიახლოების გამოყენების გარეშე შეიძლება აიხსნას სხეულის გაფართოება სხვადასხვა ზემოქმედების შედეგად. სინათლით ზემოქმედების შემთხვევაში წარმოქმნილი აკვაზები ასუსტებენ ქიმიურ ბმებს, რის გამოც მანძილი ატომებს შორის იზრდება. თერმიული ზემოქმედების დროს იგივე ხდება ტემპერატურით წარმოქმნილი აკვაზებით.

3.2.2 ნანონაწილაკებში მესრის პარამეტრის ცვლილების ფიზიკური ბუნება

ნახ.6–ზე მოყვანილია ნანონაწილაკების მახასიათებელი პარამეტრების დამოკიდებულება ნანონაწილაკის ზომებზე [1-4]. მაგალითად, ჩანს, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე ნაწილაკების ზომების შემცირებასთან ერთად იზრდება მესრის პარამეტრი და ეს ზრდა სუპერწრფივად არის დამოკიდებული ნანონაწილაკის ზომის შემცირებაზე. ამ დამოკიდებულების ახსნა შეიძლება, თუ გამოვიყენებთ მოსაზრებებს აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის შესახებ. მოცემულ ტემპერატურაზე ნანონაწილაკებში ეფექტური კონცენტრაცია უფრო მეტად ასუსტებს ქიმიურ ბმებს, ვიდრე რეალური კონცენტრაცია იგივე მოცულობის კომპაქტურ მყარ სხეულში. აკვაზების კონცენტრაციის მატება, სინათლით ზემოქმედების შემთხვევაში, იწვევს ატომებს შორის მანძილის ზრდას, ე. ი. მესრის

პარამეტრის ზრდას, რაც დაიმზირება ექსპერიმენტზე ნანონაწილაკების შემთხვევაში. მესრის პარამეტრის ზრდის სუპერწრფივი დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომების შემცირებასთან ერთად აიხსნება იმით, რომ აკვაზების ეფექტური კონცენტრაცია იწვევს აკრძალული ენერგიების ღრეჩოს სიდიდის შემცირებას, ეს კი ექსპონენციალურად ზრდის რეალურ წონასწორულ კონცენტრაციას, რომელიც განსაზღვრული ეფექტურობით ამცირებს ქიმიური ბმების ძალას და შედეგად იზრდება მესრის პარამეტრი. ზოგიერთი ნივთიერების ნანონაწილაკებში მესრის პარამეტრის ზრდა სხვადასხვა კრისტალოგრაფიული მიმართულების გასწვრივ სხვადასხვანაირი სიდიდით მატულობს. ეს შეიძლება გამოწვეულია სათანადო კრისტალოგრაფიული მიმართულების გასწვრივ ანტიდამაკავშირებელი დონეების არაერთნაირი განლაგებით ენერგეტიკულ სკალაზე. იმ მიმართულებებში, რომლებშიც ანტიდამაკავშირებელი დონეები უფრო ახლოს არიან განლაგებულნი დამაკავშირებელ დონეებთან, თავს იყრიან აკვაზები და მათი მოქმედებაც მეტია, რაც იწვევს ატომთა შორის მანძილის ცვლილების ანიზოტროპიას [22].

3.2.3 ნანონაწილაკებში დეზის ტემპერატურის ცვლილება

ნანონაწილაკებში მათი ზომების შემცირებასთან ერთად მცირდება დეზის ტემპერატურა (ცხრილი 2, 3)

ამის ახსნა შესაძლებელია ნანონაწილაკებში აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის არსებობის გათვალისწინებით. მართლაც, როგორც იყო ნაჩვენები, ეფექტური კონცენტრაცია ამცირებს ატომებს შორის ქიმიური ბმების ძალას, ე.ი. კვაზიდრეკადი ძალის კოეფიციენტის β -ს მნიშვნელობას. ცნობილია თერმული გაფართოების კოეფიციენტის α -ს დამოკიდებულება კვაზიდრეკადი ძალის კოეფიციენტზე [23]. $\alpha \sim 1/\beta a^2$, სადაც a არის მესრის პარამეტრი, რომლის ცვლილება ნიმუშის სინათლით დასხივებისას ფიქსირდება განათებით ექსპერიმენტულად. ამავე დროს, ცნობილია დეზის ტემპერატურის θ დამოკიდებულება β -ზე: $\theta^2 \sim \beta$. აქედან გამომდინარე,

მესრის პარამეტრის ფარდობითი ცვლილება შეიძლება მიახლოებით გამოისახოს დეზის ფარდობითი ტემპერატურის ცვლილებით

$$\Delta\alpha/a_0 \sim 2\Delta\theta/\theta_0, \quad \Delta\alpha = \alpha - a_0 \quad \text{და} \quad \Delta\theta = \theta - \theta_0,$$

სადაც, a_0 და θ_0 არის შესაბამისად, მესრის პარამეტრის და დეზის

ცხრილი 2

ლითონების ნანონაწილაკებში დეზის ტემპერატურის ფარდობითი ცვლილება კომპაქტურ მყარ მდგომარეობასთან შედარებით

მეტალი	ნაწილაკის ზომა	Θ_{Dp}/Θ_{D0}
Ag	20	0,75
Ag	20	0,75-0,83
Al	15-20	0,5-0,67
In	2,2	0,8
Pb	2,2	0,87
Pb	3,7	0,9
Pb	6,0	0,92
V	3,8	0,83
V	6,5	0,86
Pd	3,0	0,64-0,83
Pd	6,6	0,67-0,89

ცხრილი 3

დეზის ტემპერატურის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე

Ag-ის ნაწილაკის ზომა (ნმ)	დეზის ტემპერატურა, K-ში
13±2	118,8
19±1	122,1
21±2	130
24±2	133,1
46±4	134
კომპაქტური კრისტალი	135,9

ტემპერატურის საწყისი მნიშვნელობები, ხოლო α და θ მნიშვნელობები რაიმე ზემოქმედებისას (ტემპერატურა, სინათლე, წნევა და სხვა). თუ, მაგალითად სინათლის საშუალებით, გავზრდით აკვაზების კონცენტრაციას, შედეგად გაიზრდება ატომებს შორის მანძილი, ანუ მესრის პარამეტრის მნიშვნელობა, ისევე, როგორც თერმულად წარმოქმნილი აკვაზების გავლენის შედეგად. ამრიგად, ზოგად შემთხვევაში თერმული გაფართოების კოეფიციენტის ნაცვლად უნდა ვიგულისხმოთ აკვაზების ზემოქმედების შედეგად მიღებული გაფართოების კოეფიციენტი. აკვაზების წარმოქმნის საშუალებად სინათლის გამოყენების შემთხვევაში a_0 და θ_0 არის მნიშვნელობები სიბნელეში, ხოლო a და θ კი განათების შემთხვევაში. სინათლის ზემოქმედებით მესრის პარამეტრის ცვლილების დასადგენი ცდისთვის დებაის ტემპერატურის შემცირება დაახლოებით 50 გრადუსი აღმოჩნდა [20,21], [13].

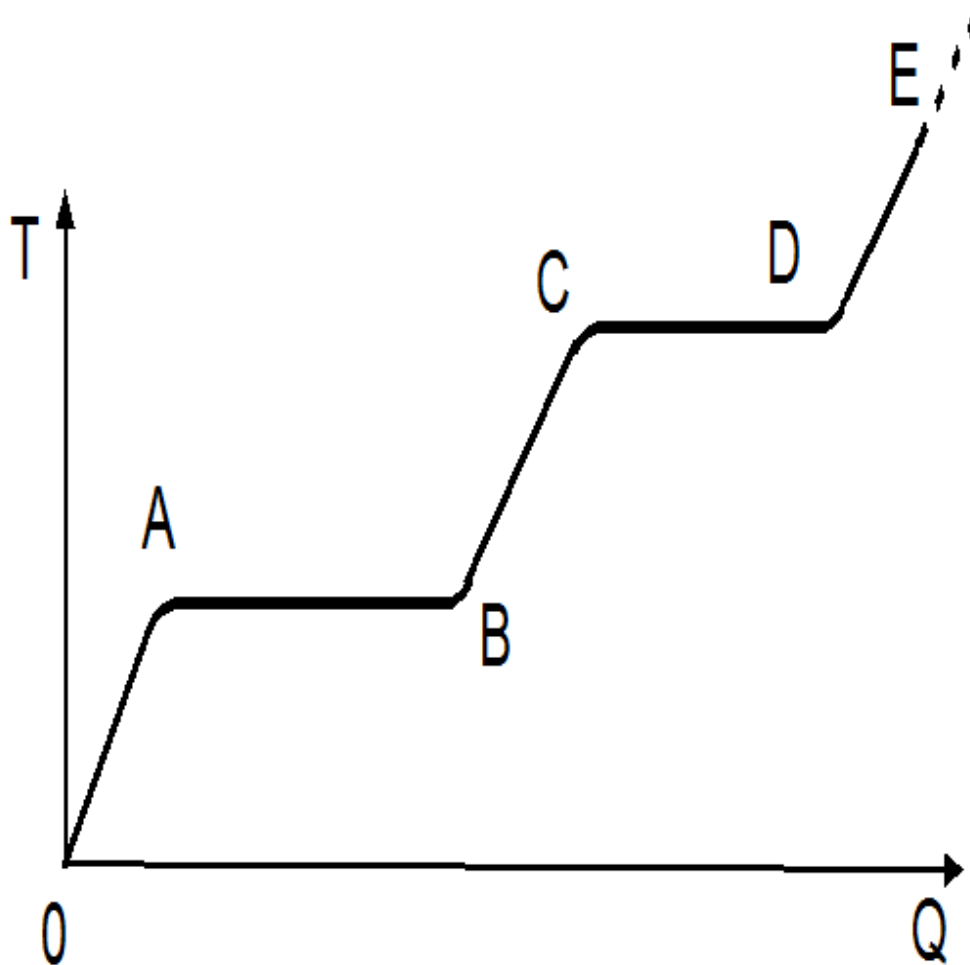
3.3 ნანონაწილაკების ფაზური მდგომარეობისა და დნობის ტემპერატურის დამოკიდებულება მათ ზომებზე

3.3.1 დნობის ფიზიკური მექანიზმი მყარ სხეულებში

ნივთიერების აგრეგატული ან ფაზური მდგომარეობის ცვლილებას, რომელიც სითბოს გადაცემის ან წართმევის შედეგად ხდება I გვარის ფაზური გადასვლები ეწოდება (დნობა, გამყარება, დუღილი, კონდენსაცია, სუბლიმაცია, იონების ემისია). ეს მოვლენები კარგად არის შესწავლილი, მაგრამ არ არსებობს მათი მექანიზმი ატომურ დონეზე. ცნობილი ამერიკელი ფიზიკოსი დ. გუდსტაინი წერს: „დნობა და დუღილი - ერთი შეხედვით ადვილად გასაგები მოვლენები, ჩიხში აქცევენ მეცნიერებს, რადგან დღემდე არ არსებობს მათი დამაკმაყოფილებელი ახსნა მიკროსკოპულ დონეზე“ [24].

ნივთიერების ტემპერატურის მასზე გადაცემულ სითბოს რაოდენობაზე დამოკიდებულების სქემატური გრაფიკიდან (ნახ.19) ჩანს,

I



ნახ.19 ნივთიერების ტემპერატურის დამოკიდებულება მასზე
გადაცემული სითბოს არაოდენობაზე

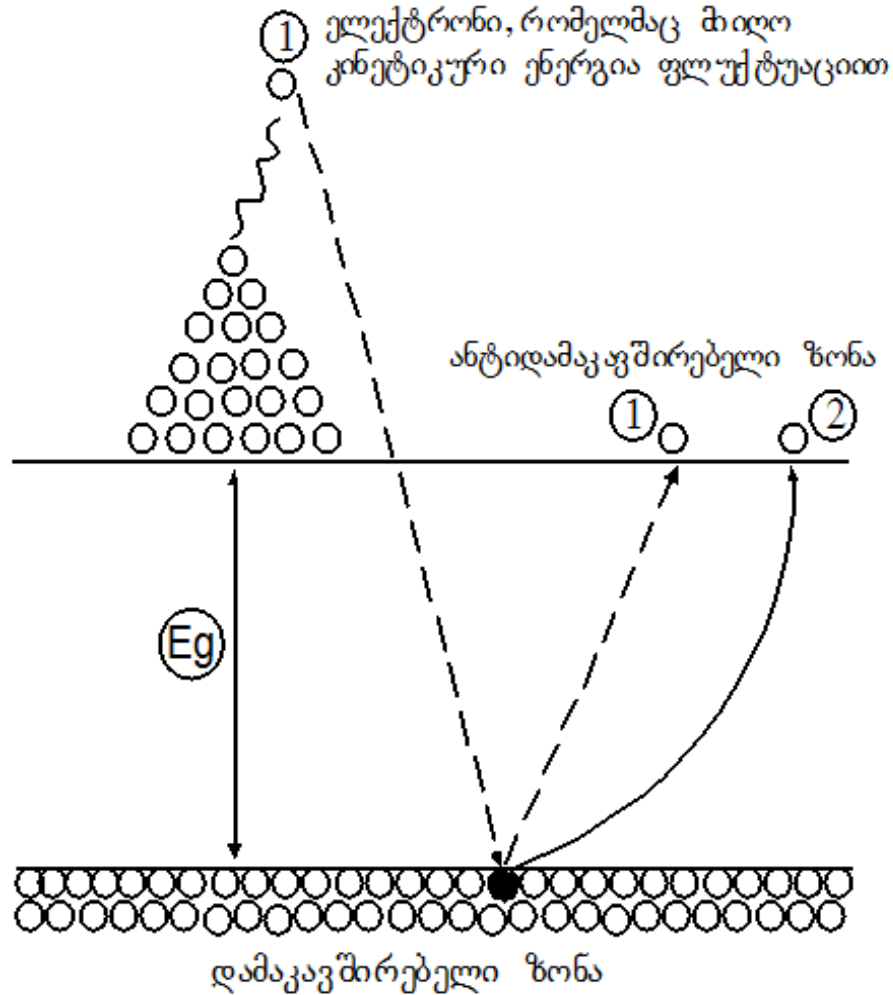
რომ ნივთიერების ტემპერატურა მატულობს გადაცემული სითბოს რაოდენობის ზრდასთან ერთად (OA უბანი) გარკვეულ ტემპერატურამდე ($T_{ფ5}$), რის შემდეგ მისი ტემპერატურა აღარ იცვლება, მიუხედავად იმისა, რომ გრძელდება სითბოს გადაცემა (უბანი AB), თანაც ნივთიერება A წერტილში არის მყარი, ხოლო B წერტილში უკვე თხევადია, ტემპერატურა კი ორივე წერტილში ერთნაირია. ითვლება, რომ AB მონაკვეთზე, სადაც არა აქვს ადგილი ტემპერატურის მომატებას, სითბოს სახით მიწოდებული ენერგია იხარჯება ქიმიური ბმების რღვევაზე. [23]ექსპერიმენტულად

დადგენილია, რომ A და B წერტილებში ბმის ენერგიები მხოლოდ $5 \div 10\%$ -ით განსხვავდება, ხოლო რენტგენოსტრუქტურული ანალიზით ნაჩვენებია, რომ B წერტილში ახლო წესრიგი ანუ მოცემულ ატომთან მეზობელი ატომების განსაზღვრული მდებარეობა არაა დარღვეული, მაგრამ უკვე თავს იჩენს ნივთიერების მექანიკური არასტაბილურობა, ამიტომ ძალზე მნიშვნელოვანია განვიხილოთ, თუ რა პროცესები მიმდინარეობს მყარ სხეულში, როდესაც მას სითბოს გადაცემით [6,10].

სითბოს გადაცემასთან ერთად იზრდება ნივთიერების ატომების კინეტიკური ენერგია, ე.ი. ტემპერატურა. ამასთან ერთად ხდება ელექტრონების გადასვლა დამაკავშირებელი ზონიდან ანტიდამაკავშირებელში. თითოეულ გადასვლას შეესაბამება ელექტრონის გაჩენა ანტიდამაკავშირებელ ზონაში და ხვრელისა – დამაკავშირებელ ზონაში. ამ დროს იცვლება ელექტრონის პოტენციური ენერგია და მისი სივრცული განაწილება[64].

სითბო, რომელიც გადაეცემა სხეულს, მასში ვრცელდება მძიმე (ატომური) და მსუბუქი (ელექტრონული) ქვესისტემების საშუალებით და ელექტრონების გადასვლა ვალენტურიდან გამტარებლობის ზონაში შეიძლება მოხდეს ორი ხერხით: 1) ატომურ-ატომური დაჯახებების შედეგად ატომის მიერ მიღებული კინეტიკური ენერგიის ფლუქტუაციის ხარჯზე და 2) ელექტრონ-ელექტრონული დაჯახებების შედეგად ელექტრონის მიერ მიღებული კინეტიკური ენერგიის ფლუქტუაციის ხარჯზე (დარტყმითი მექანიზმი)[65]. ელექტრონების ქაოსური მოძრაობის გამო, რაღაც ალბათობით, რომელიმე ელექტრონს უჩნდება აკრძალულ ზონაზე E_g -ზე მეტი კინეტიკური ენერგია და როცა ეს ელექტრონი დაეჯახება ბმულ ელექტრონს, გადასცემს მას E_g ენერგიას, გაათავისუფლებს მას და ამავე დროს თვითონაც დარჩება თავისუფალი. ამრიგად, მისი კინეტიკური ენერგიის E_g -ს ტოლი ნაწილი გადაეცა ბმულ ელექტრონს, რომელიც გადავიდა დამაკავშირებელი ორბიტალიდან ანტიდამაკავშირებელზე,

თვითონ კი დაკარგა E_g -ს ტოლი კინეტიკური ენერგია, ე. ი. „გაცივდა“, მაგრამ დარჩა ანტიდამაკავშირებელ ზონაში (ნახ.20). ამრიგად, მოხდა კინეტიკური



ნახ.20 ელექტრონის გადაყვანის სქემატური გამოსახულება დამაკავშირებელი ზონიდან ანტიდამაკავშირებელ ზონაში ელექტრონ-ელექტრონული დაჯახებით (დარტყმითი მექანიზმი). 1 - ელექტრონი, რმელიც ეჯახება ბმულ ელექტრონს და რჩება ანტიდამაკავშირებელ ზონაში; 2 - დარტყმითი მექანიზმიტ გათავისუფლებული ელექტრონი.

ენერგიის გარდაქმნა პოტენციურ ენერგიად ისე, რომ ატომების კინეტიკური ენერგია არ შეიცვალა. საწყის ეტაპზე, მიუხედავად იმისა, რომ თავისუფალი მატარებლები ბევრად მსუბუქნი არიან, ვიდრე ატომები და მათი სიჩქარე

მოცემულ ტემპერატურაზე გაცილებით მეტია, ვიდრე ატომებისა, პირველი პროცესის ალბათობა სჭარბობს მეორისას იმის გამო, რომ ატომების კონცენტრაცია არის $\sim 10^{22}$ სმ⁻³, ხოლო თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაცია მრავალი რიგით ნაკლებია. მაგრამ აკვაზების კონცენტრაციის ზრდასთან ერთად მატულობს მე-2 პროცესის ალბათობა და აკვაზები სითბოს სახით მიღებული კინეტიკური ენერგიის სულ უფრო მეტ ნაწილს ხარჯავენ ახალი აკვაზების წარმოქმნაზე.

დნობის ტემპერატურის მიღწევის შემდეგ სხეულისათვის გადაცემული სითბო აღარ იწვევს ტემპერატურის ზრდას იმის გამო, რომ დროის ერთეულში გადაცემული კინეტიკური ენერგია (სითბოს გადაცემის სიჩქარე) უტოლდება ამავე დროში დარტყმითი მექანიზმით თავისუფალი მატარებლების აკვაზების წარმოქმნაზე დახარჯულ კინეტიკურ ენერგიას. თუ სითბოს გადაცემის სიჩქარე მეტია, ვიდრე მისი ხარჯვა, მოხდება მყარი სხეულის გადახურება. სიჩქარეთა უკუთანაფარდობის დროს კი — გადაცივება. იმის გამო, რომ ფლუქტუაციები წარმოიქმნება სივრცულად არათანაბრად, მყარი სხეულის ზოგიერთ უბნებში დნობა დაიწყება უფრო ადრე.

დროის ერთეულში ატომური სისტემის მიერ გადატანილი სითბოს რაოდენობა არის $kTn_a v_a$ ხოლო თავისუფალი მატარებლების ანუ აკვაზების მიერ — $kTn_e v_e$, სადაც kT არის ნაწილაკზე მოსული საშუალო კინეტიკური ენერგია, n_e და N_a შესაბამისად აკვაზებისა და ატომების კონცენტრაციაა, ხოლო v_e და v_a — მათი საშუალო სითბური სიჩქარეები. რადგან $v_e > v_a$, ერთი და იგივე რაოდენობის სითბოს გადასატანად თავისუფალი მატარებლების - აკვაზების ნაკლები კონცენტრაციაა საჭირო, ვიდრე ატომებისა. ამ კონცენტრაციის განსაზღვრა შესაძლებელია ტოლობიდან:

$$kTn_{კრ}v_e = kTn_a v_a$$

აღმოჩნდა, რომ ამ ტოლობას ადგილი აქვს დნობის ტემპერატურის მახლობლად და $n_{კრ}$ არის კრიტიკული კონცენტრაცია, ამ ტემპერატურებზე უფრო დაბლა კი $kTn_e v_e < kTn_a v_a$, ხოლო დნობის ტემპერატურაზე, როცა

$n_e > n_{kT}$, პირიქით, $kT n_e v_e > kT N_a v_a$. ამ შემთხვევაში E_g -ზე მეტი ენერგიის მქონე ფლუქტუაციის წარმოქმნა აკვაზებში უფრო ალბათურია, ვიდრე ატომების ქვესისტემაში, რადგან $v_e > v_a$.

გამოვთვალოთ Si-ის მაგალითზე აკვაზების რა რაოდენობაა საჭირო მთელი გადაცემული სითბოს აკვაზებს შორის გასანაწილებლად ისე, რომ ატომებს არაფერი დარჩეთ. თუ ატომის ერთი რხევის დროის განმავლობაში ატომთან, რომელმაც მიიღო დამატებითი ენერგია, აუცილებლად მივათავისუფალი აკვაზი, მაშინ მას გადაეცემა ატომის შესაბამისი საშუალო ენერგიის მნიშვნელობაზე მეტი კინეტიკური ენერგია, რომელიც სწრაფად გადანაწილდება აკვაზებს შორის და დაიხარჯება ახალი თავისუფალი მატარებლების წარმოქმნაზე.

ამრიგად, “თავისუფალი” ელექტრონის კინეტიკური ენერგიის ხარჯზე მოხდა ბმული ელექტრონების გადაყვანა გამტარებლობის ზონაში ისე, რომ ატომის კინეტიკური ენერგია არ შეიცვალა. გამოვთვალოთ თუ აკვაზების რა კონცენტრაციაა საჭირო, რომ მთელი გადაცემული სითბო გადანაწილდეს ელექტრონებზე. ატომის ერთი რხევის პერიოდის $\tau \approx 5 \cdot 10^{-13}$ წმ-ის განმავლობაში თავისუფალი აკვაზი, რომლის საშუალო სიჩქარე დნობის ტემპერატურის მახლობლად არის $v \approx 5 \cdot 10^7$ სმ/წმ, გაივლის მანძილს $S = v\tau \approx 2,5 \cdot 10^{-5}$ სმ. თუ მას გავყოფთ ატომებს შორის მანძილზე, მივიღებთ ატომების რაოდენობას, რომელსაც „შემოურბენს“ თავისუფალი აკვაზი τ დროში (~ 1000). ე. ი. ყველა $5 \cdot 10^{22}$ სმ⁻³ ატომთან τ დროის განმავლობაში, თავისუფალი აკვაზის მისასვლელად საჭიროა $\sim 10^{19}$ სმ⁻³ აკვაზი. იგივე სიდიდეს მივიღებთ ზემოთ მოყვანილი ფორმულიდან, თუ მასში ჩავსვამთ სითბური მოძრაობის საშუალო სიჩქარის შემდეგ მნიშვნელობებს: „თავისუფალი“ აკვაზებისთვის – $(m^* v_e^2)/2 = 3kT/2$, ატომებისათვის – $(M v_a^2)/2 = kT/2$. აქედან მივიღებთ:

$$n_{kr} = N_a (m^*/M_a)^{1/2}$$

სადაც m^* — ელექტრონებისა და ხვრელების გასაშუალოებული გამტარებლობის ეფექტური მასაა, M -მესრის ატომთა მასა, N_a -ატომების

კონცენტრაცია. კონცენტრაციას, რომლის მიღწევისას მთელი გადაცემული სითბო ხმარდება ელექტრონ-ელექტრონული დაჯახებების (დარტყმითი მექანიზმი) საშუალებით ახალი თავისუფალი მატარებლების აკვაზების წარმოქმნას, კრიტიკული კონცენტრაცია ეწოდება. ყველა ნახევარგამტარს გააჩნია თავისი კრიტიკული კონცენტრაციის მნიშვნელობა (მაგ. Si-ისთვის $n_{კრ} = 6 \cdot 10^{19} \text{ სმ}^{-3}$, Ge-ისთვის - $2 \cdot 10^{19}$, GaAs- $4 \cdot 10^{18}$), რომლის მნიშვნელობები, ორივე მეთოდით გამოთვლილი, ემთხვევა თავისუფალი მატარებლების (აკვაზების) ექსპერიმენტულად გაზომილ კონცენტრაციას ტემპერატურაზე, რომელიც ძალზე ახლოა მათი დნობის ტემპერატურასთან. ეს მეტყველებს იმაზე, რომ დნობის პროცესის დაწყებისათვის მნიშვნელოვანია არა ტემპერატურა, არამედ $n_{კრ}$, რომლის მიღწევა შეიძლება სხვადასხვა საშუალებით. ე. ი. თუ რაიმე ზემოქმედებით მივიღებთ $n_{კრ}$ -ს, დნობა შეიძლება დაიწყოს ტემპერატურაზე $T < T_{დნ}$, რაც დასტურდება ექსპერიმენტულად [6, 25, 26].

ამრიგად, ვაჩვენეთ, რომ სხეულის გასადნობად საჭიროა თავისუფალი მატარებლების (აკვაზების) განსაზღვრული (კრიტიკული) კონცენტრაცია და თუ რაიმე სხვა გზით შევძლებთ ამ კონცენტრაციის მიღწევას, დნობა შეიძლება დაიწყოს დნობის ტემპერატურასთან შედარებით უფრო დაბალ ტემპერატურაზე.

B წერტილში (ნახ.19) ყოველ 5-9 არაიონიზებულ ატომზე მოდის ერთი იონიზირებული ატომი. შეიძლება ეს თანაფარდობა უფრო მცირეც იყოს. მაშინ E_g -ს (E_g არის აკრძალული ზონა ნახევარგამტარებში, ხოლო ფსევდოაკრძალული ზონა - მეტალებში) ტოლი ენერგიის ფლუქტუაცია არ არის საკმარისი იმისათვის, რომ მოახდინოს უკვე ერთხელ იონიზებული ატომის მეორადი იონიზაცია (მეორად იონიზაციას სჭირდება გაცილებით მეტი ენერგია) და იგი გადაეცემა მოცემული ატომის რხევას, რომელიც გადაუნაწილებს ამ ენერგიას მეზობელ ატომებს, ისინი კი, თავის მხრივ, მთელ სხეულს, რაც ნიშნავს ტემპერატურის თანდათანობით მომატებას.

B წერტილის შემდგომ ტემპერატურის ზრდასთან ერთად გრძელდება ანტიდამაკავშირებელი და დამაკავშირებელი ზონების მოძრაობა ერთმანეთის მიმართ [16]. ამიტომ მეორადი იონიზაციის ენერგია მცირდება, მაშინ როდესაც ფლუქტუაციის (კინეტიკური ენერგიის, რომელიც ტოლია ატომების მეორადი იონიზაციის ენერგიისა), სიხშირე გახდება ისეთი, რომ კინეტიკური ენერგიის პოტენციურში (ახალი აკვაზების წარმოქმნა) გადასვლის სიჩქარე, ე. ი. „გაცივება“ გაუტოლდება სითბოს „შემოდინების“ სიჩქარეს, ისევე, როგორც დნობის დროს, ტემპერატურა აღარ გაიზრდება (C წერტილი). იმ ატომებს, რომელთა მახლობლადაც მოხდა ფლუქტუაცია, ოთხი სავალენტო ელექტრონიდან ორი ელექტრონი ექნებათ დამაკავშირებელ ორბიტალზე და ორიც — ანტიდამაკავშირებელზე. ასეთი ტოლობა კი ნიშნავს, რომ ქიმიური ბმა მათ შორის არ არსებობს და ეს ატომები ერთმანეთისგან განიზიდება, ე. ი, ამ ადგილას გაჩნდება გაზის ჩანასახი. ჩანასახების ზრდასთან ერთად იწყება დუღილი, ე. ი. ატომების თხევადი ფაზიდან აიროვანში გადასვლა-აორთქლება.

3.3.2 ნანონაწილაკის ფაზური მდგომარეობა

ნანონაწილაკის ზედაპირიდან აკვაზების არეკვლის გამო ზედაპირულ ფენაში მყოფი ატომები განიცდიან ატომის ერთი რხევის პერიოდის განმავლობაში აკვაზის შემასუსტებელ შემოქმედებას გაცილებით მეტჯერ, ვიდრე შიდა არის ატომები

აკვაზების ერთნაირი კონცენტრაციის დროს ნანონაწილაკებში მათი ზომების სიმცირის გამო აკვაზები უფრო ხშირად მიაღწევენ საზღვრებს და აირეკლებიან ზედაპირიდან, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულებში, შედეგად მათი ქიმიური ბმები უფრო შესუსტებული იქნება, ვიდრე შიდა ნაწილში მყოფი ატომებისა. ბმების შესუსტება იწვევს აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს მნიშვნელობის შემცირებას (ნახ.17) და მოცემულ ტემპერატურაზე ელექტრონების გადასვლის ინტენსივობის გაზრდას, რაც განაპირობებს აკვაზების ჭარბ კონცენტრაციას ნანონაწილაკის ზედაპირულ ფენაში და

აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს შემდგომ შემცირებას. მიიღება, როგორც უკვე იყო აღნიშნული, ერთი ნივთიერების საინტერესო ენერგეტიკული სტრუქტურა აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს სხვადასხვა მნიშვნელობით, ზედაპირთან უფრო მცირე, ვიდრე შუაგულში (ნახ.17). ნანონაწილაკის ასეთი ელექტრონული სტრუქტურა განაპირობებს ზედაპირულ ფენაში აკვაზების სიჭარბეს და ამ ფენის მეტ სირბილეს შიდა არესთან შედარებით.

3.3.3 დნობის მექანიზმი ნანონაწილაკებში

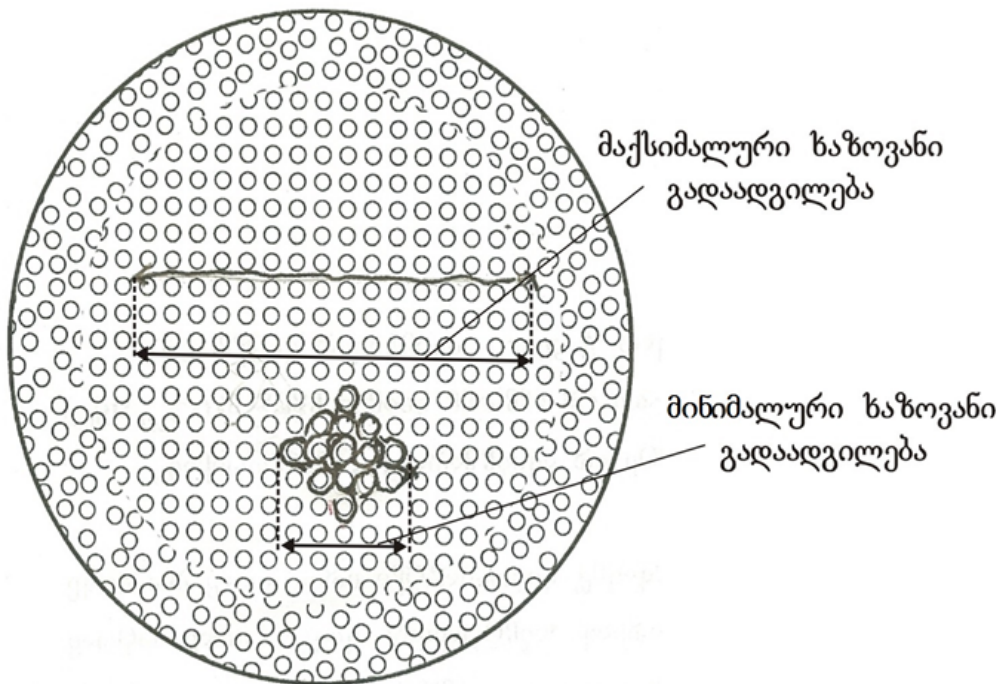
ნანონაწილაკების დნობის ტემპერატურის დამოკიდებულება მათ ზომებზე მოყვანილია ნახ.ნბ-ზე. ამ ფიზიკურად საინტერესო თვისების ასახსნელად გავიხსენოთ, რომ განხილული თეორიის თანახმად, ნანონაწილაკებში აკვაზების მიერ ქიმიური ბმების შესუსტება ხდება უფრო მეტად, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულებში, რაც რაოდენობრივად ეფექტური კონცენტრაციის ცნების შემოყვანით არის გათვალისწინებული. ასევე აღნიშნულია, რომ ნანონაწილაკის ზომის შემცირებასთან ერთად იზრდება მათი ეფექტური კონცენტრაცია და რომ ზედაპირული ფენის ატომებთან აკვაზების ყოფნის ალბათობა ზედაპირიდან არეკვლის გამო მეტია, ვიდრე ნანონაწილაკის შიდა არეში მდებარე ატომებთან, რაც იწვევს ზედაპირული ფენის მეტად დარბილებას. ასევე ვთვლით, რომ მყარი სხეულის დნობა იწყება აკვაზების კრიტიკული კონცენტრაციის მიღწევის შემდეგ, ხოლო კრიტიკული კონცენტრაციაა მაშინ, როცა ატომის ერთი რხევის τ დროის განმავლობაში ნანონაწილაკში ყველა ატომთან ასწრებს მისვლას აკვაზი. ეფექტური კონცენტრაცია კრიტიკულის მნიშვნელობას აღწევს მით უფრო დაბალი რეალური კონცენტრაციის დროს, რაც ნაკლებია ნანონაწილაკის ზომა, საკმარისი რეალური კონცენტრაცია კი დნობის ტემპერატურაზე უფრო დაბალ ტემპერატურებზე მიიღწევა. აქედან გამომდინარე, რაც უფრო მცირე ზომისაა ნანონაწილაკი, მით უფრო დაბალ ტემპერატურაზე იწყება მისი დნობა. ნანონაწილაკის ზედაპირული ფენიდან

აკვაზების არეკვლის გამო ამ ფენის დნობა იწყება უფრო ადრე, ამიტომ განსაზღვრულ ტემპერატურაზე მიიღება ნანონაწილაკის ისეთი მდგომარეობა, როცა მისი ზედაპირი გამდნარია, ხოლო შიდა ნაწილი მყარი.

მოყვანილი მოსაზრებების საფუძველზე მოვახდინოთ ნანონაწილაკების დნობის ტემპერატურის მათ ზომებზე დამოკიდებულების უხეში რაოდენობრივი შეფასება. დნობის დაწყების აუცილებელ პირობას წარმოადგენს აკვაზების ისეთი კრიტიკული კონცენტრაციის არსებობა, რომ ატომის ერთი რხევის განმავლობაში ყველა ატომთან მივიდეს ელექტრონი და წაიღოს ატომისაგან რხევის ის დამატებითი ენერგია, რომელიც მან მიიღო სხეულზე გარედან სითბოს მიწოდების სახით. თუ ნანონაწილაკის ზომა (დიამეტრი) იმ მანძილზე ნაკლებია, რომელსაც ატომის რხევის პერიოდის განმავლობაში გაივლის აკვაზი, მაშინ ნანონაწილაკის ზედაპირიდან არეკვლის გამო იგი ატომებთან უფრო ხშირად მივა, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულში (იხ. ნახ.16), რაც ზრდის მის მიერ ქიმიური ბმების შესუსტების ეფექტურობას. გამოვთვალოთ აკვაზის განარბენის წრფივი პროექციის საშუალო მნიშვნელობა და შევადაროთ იგი ნანონაწილაკის დიამეტრს, რათა განვსაზღვროთ აკვაზის ზედაპირიდან არეკვლის რაოდენობა [8]. საშუალოს გამოსათვლელად საჭიროა განისაზღვროს აკვაზის განარბენის მინიმალური და მაქსიმალური მნიშვნელობები და გაიყოს ორზე. მინიმალური სიგრძე იქნება იმ სფეროს დიამეტრის ტოლი, რომელშიც აკვაზი შემოუვლის ყველა ატომს, მაქსიმალური კი, თუ იგი იმოდრავებს ნონაწილაკში სწორხაზოვნად (ნახ.21).

ნანონაწილაკის ზედაპირიდან არეკვლის საშუალო რაოდენობას მივიღებთ $K=L/D$, სადაც L – აკვაზის ტრაექტორიის საშუალო მნიშვნელობაა, D -ნანონაწილაკის დიამეტრი. თუ კომპაქტურ მყარ სხეულში აკვაზის შემასუსტებელ მოქმედებას ჩავთვლით 1-ის ტოლად, მაშინ ეფექტური კონცენტრაციის შემთხვევაში აკვაზის შემასუსტებელი მოქმედება იქნება $(1+K)$ -ჯერ მეტი. გარდა ამისა, რადგან ეფექტური კონცენტრაცია მეტად

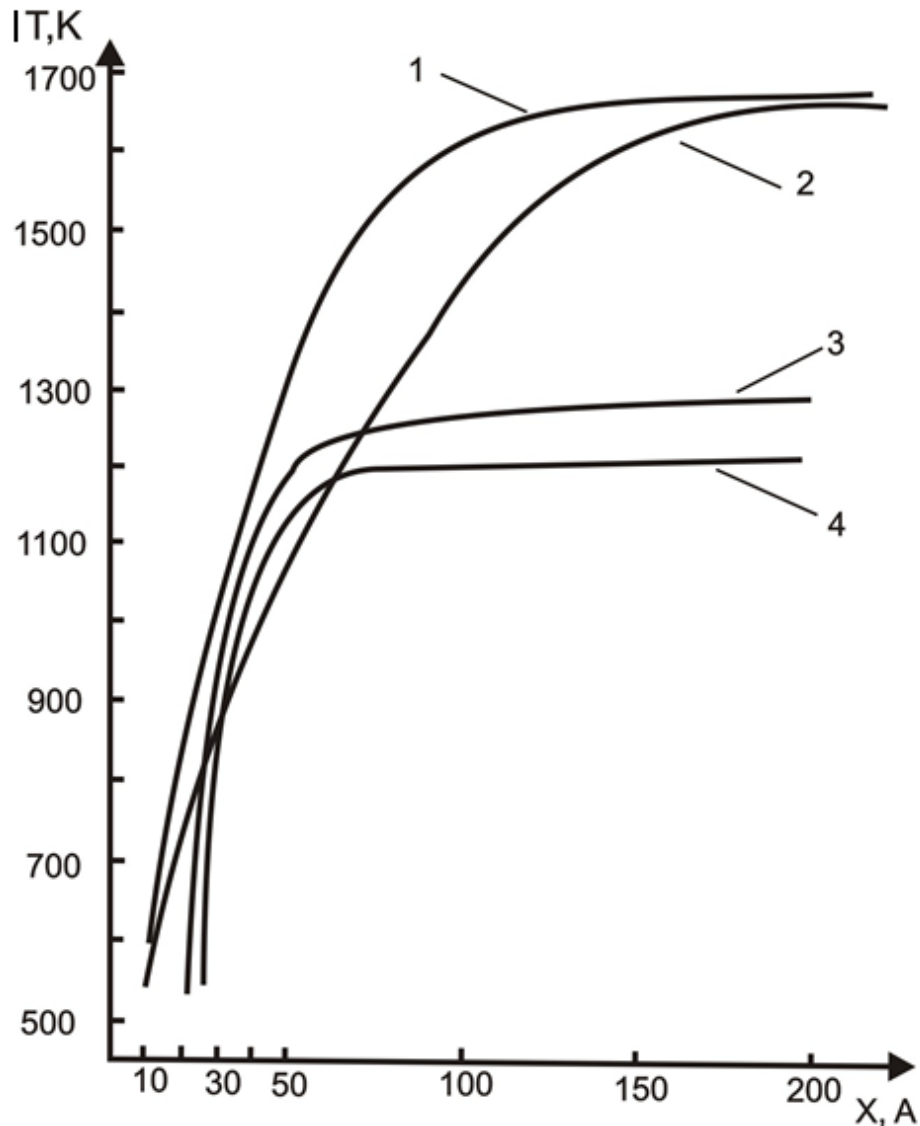
ასუსტებს ქიმიურ ბმებს, საჭიროა გავითვალისწინოთ ის ფაქტი, რომ აკვაზები, ასუსტებენ რა ქიმიურ ბმებს, ასევე ამცირებენ აკრძალულ ზონას



ნახ. 21 ნანონაწილკებში ატომის ერთი რხევის პერიოდის განმავლობაში აკვაზის ხაზოვანი გადაადგილების ორი ზღვრული მნიშვნელობა

(უფრო ზოგადად რომ ვთქვათ, ენერგეტიკულ მანძილს დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს შორის) სიდიდით: $\Delta E = -(1,5 \pm 2)n^{-3}10^{-8}$ ევ, სადაც n აკვაზების კონცენტრაციაა. ეს სათანადოდ გამოიწვევს რეალური კონცენტრაციის ზრდას და იგი ტოლი იქნება $n_n = A e^{-(E_g - \Delta E)/2kT}$. ამრიგად, ნანონაწილაკში რეალური კონცენტრაცია მოცემულ ტემპერატურაზე უფრო მეტია, ვიდრე კომპაქტურ ნახევარგამტარში. ამ კონცენტრაციებს შორის სხვაობა $\Delta n = n_n - n_0$, სადაც n_n არის აკვაზების კონცენტრაცია ნანონაწილაკში, ხოლო n_0 – კომპაქტურ მყარ სხეულში. ამრიგად, ნანონაწილაკში ეფექტური კონცენტრაცია გამოისახება $n_{ეფ} = (1+K)n_0 + \Delta n$ ფორმულით. დნობა ნანონაწილაკში დაიწყება მაშინ, როცა $n_{ეფ}$ გაუტოლდება $n_{კრ.}$ -ს შესაბამისი $n_0 = (n_{ეფ} - \Delta n)/(1+K)$ დროს. მოცემულ ნივთიერებაში კონცენტრაციის ტემპერატურაზე დამოკიდებულების მრუდებიდან შეიძლება განვსაზღვროთ $n_{კრ.}$ -ს ტოლი $n_{ეფ.}$ -ს შესაბამისი n_0 -ს ტემპერატურა, რომელიც

ნანონაწილაკის დნობის ტემპერატურა იქნება. ნახ.22-ზე მოყვანილია ამ პროცედურით გამოთვლილი დნობის ტემპერატურის ნანონაწილაკის



ნახ.22 ნანონაწილაკის ტემპერატურის დამოკიდებულება მის ზომებზე

- 1) Si-ის მთლიანი ნანონაწილაკი;
- 2) Si-ის ნანონაწილაკის ხედაპირული ფენა;
- 3) Au-ის ექსპერიმენტული შედეგები;
- 4) Au-ის თეორიული შედეგები.

ზომებზე დამოკიდებულების მრუდი, რომელიც საკმაოდ კარგად ემთხვევა ექსპერიმენტზე დამზერილ შედეგს [27].

ზედაპირული ფენის დნობის ტემპერატურის მნიშვნელობის გამოსათვლელად უნდა გავითვალისწინოთ ის ფაქტი, რომ აკვაზები არეკვლის გამო ზედაპირულ ატომებთან 2-ჯერ უფრო მეტი დროის განმავლობაში იმყოფებიან, ამიტომ უხეში შეფასებით შეიძლება ჩავთვალოთ, რომ დნობა ნანონაწილაკის ზედაპირულ ფენაში დაიწყება უფრო დაბალ ტემპერატურაზე, ვიდრე დანარჩენ არეში (ნახ.22), რადგან დნობის დაწყებისათვის საჭირო რეალური კონცენტრაცია ზედაპირულ ფენაში

$$n_{0\phi}=(n_{\text{კრ}}-2\Delta n)/(1+2K) < n_0=(n_{\text{კრ}}-\Delta n)/(1+K).$$

ამრიგად, ნაჩვენებია, რომ ქიმიური ბმების შესუსტებაზე აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის გავლენის გათვალისწინება ნანონივთიერების შემადგენელი ნაწილაკების ზომების შემცირებისას კარგად აღწერს დნობის ტემპერატურის დამოკიდებულებას ნანონაწილაკის ზომებზე.

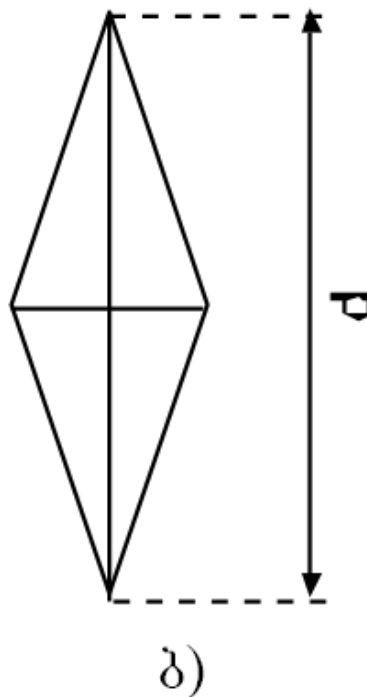
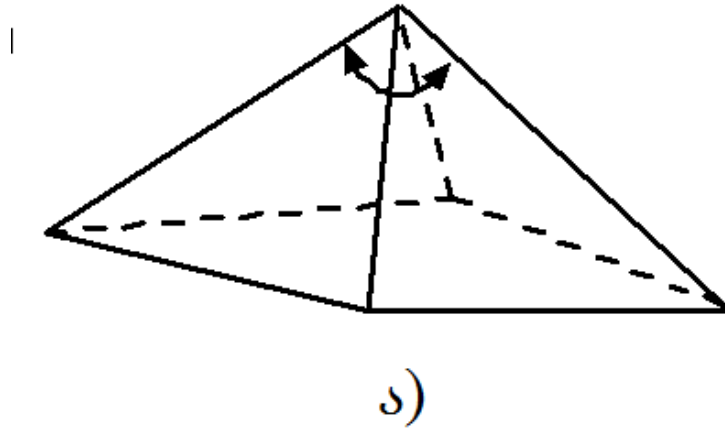
3.4 ნანომასალების მექანიკური თვისებების დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე

3.4.1 მყარი სხეულის მიკროსისალის დახასიათება

სისალის გაზომვას მცირე სიდიდის დატვირთვების გამოყენებით უწოდებენ მიკროსისალის მეთოდს. აღნიშნულ მეთოდში ინდენტორი [19, 32], რომელიც, ჩვეულებრივ, ოთხწახნაგა პირამიდის ფორმის ალმასისაგან არის დამზადებული (ნახ.23), მცირე დატვირთვის ზემოქმედების შედეგად ინერგება გამოსაკვლევ კრისტალში. ჩანერგვის პროცესი მიმდინარეობს მანამ, სანამ გარე ძალა არ გაწონასწორდება შინაგანი რეაქციის ძალებით, რომლებიც ამ დროს კრისტალში წარმოქმნება. წარმოქმნილი დეფორმაციის შედეგად, ინდენტორის აწევის შემდეგ ნიმუშზე რჩება ანაბეჭდი. რაც მეტია ანაბეჭდის ზომა მოცემულ დატვირთვაზე, მით ნაკლებია მიკროსისალე. მიკროსისალის ზუსტი მნიშვნელობების მისაღებად საჭიროა გამოვიყენებულ იქნას შედეგების დამუშავების სტატისტიკური მეთოდი,

ამიტომ საშუალოს გამოსათვლელად საჭირო ანაბეჭდების რიცხვი შეადგენს რამდენიმე ათეულს.

მიკროსისალის ფიზიკური არსი შემდეგში მდგომარეობს: ეს არის საშუალო კონტაქტური წნევა ანაბეჭდის ზედაპირზე, ან დეფორმაციის

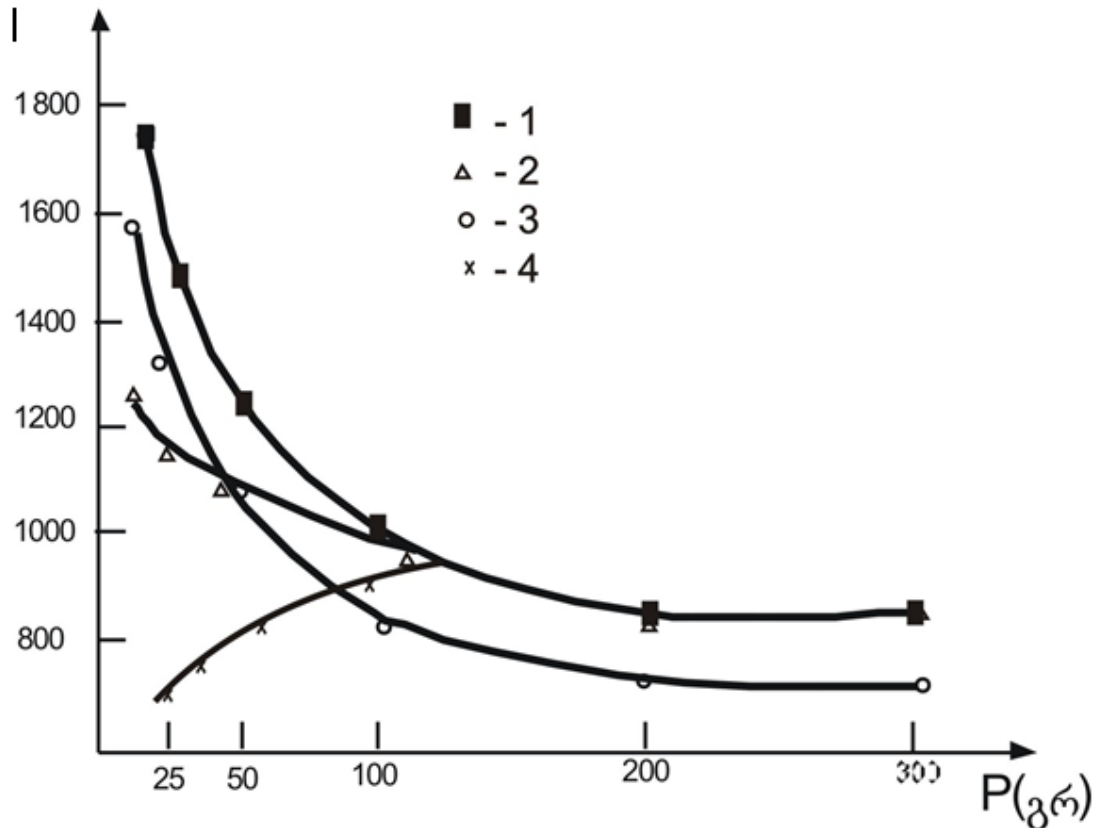


ნახ.23 ა) კნუპის პირამიდა; ბ) კნუპის პირამიდის ანაბეჭდის ფორმა, (d-ანაბეჭდის დიდი დიაგონალი)

საშუალო კუთრი მუშაობა იდენტორის მიერ გამოდევნილი მოცულობის ერთეულზე [32, 33]. აღსანიშნავია, რომ მოცემული ნივთიერებისათვის მიკროსისალე არ წარმოადგენს ფიზიკურ კონსტანტას, რადგან მისი მნიშვნელობა დამოკიდებულია გაზომვის მეთოდზე. ზოგადად, იგი წარმოადგენს ინტეგრალურ მახასიათებელ სიდიდეს, რომელიც განისაზღვრება საკვლევი ნივთიერების ისეთი მექანიკური მახასიათებლებით, როგორცაა პლასტიკურობა, დრეკადობა, სიმტკიცე და ა.შ. მიკროსისალეს მაქსიმალური მნიშვნელობა გააჩნია (ნახ.24) ინდენტორების (ჩანერგვის) საწყის ეტაპზე (ე. ი. ჩანერგვის მცირე სიღრმეების შემთხვევაში) [32]. ჩანერგვის სიღრმის ზრდასთან ერთად (ანუ ანაბეჭდის ზომების ზრდასთან ერთად) სისალე თანდათანობით მცირდება. გაზომვის შედეგები, რომლებიც მოყვანილია ნახ.4-ზე (Si, Ge, GaSb და InSb სუფთა კრისტალებისათვის) და ნახ.24-ზე მიუთითებენ, რომ მიკროსისალის მნიშვნელობა ზედაპირულ ფენაში მეტია, ვიდრე სიღრმეში.

სამუშაო [14]-ში შემოთავაზებულია კონდენსირებულ გარემოში ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლის ახალი წარმოდგენები, რომლებიც ხსნის დამზერილ ბევრ ექსპერიმენტულ ფაქტს, როგორც მაღალ, ისე დაბალ ტემპერატურებზე [13]. ახალი წარმოდგენების მიხედვით კონდენსირებულ გარემოში ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლისათვის საჭიროა მოცემული ატომის ქიმიურ ბმებში მონაწილე ელექტრონების კვანტური მდგომარეობის ისეთი ცვლილება, რომელიც შემცირებს ქიმიური ბმის ენერგიას, ე. ი. პოტენციური ენერგიის ბარიერის სიმაღლეს იმდენად, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე შესაძლებელი გახდეს ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლა (ნახ.14). ამ ახალ წარმოდგენებზე აგებულ თეორიას ჩვენ პირობითად ვუწოდეთ მოლეკულურ-პოტენციური თეორია (მპთ), რომლის მიხედვით კონდენსირებულ გარემოში ატომის (მოლეკულის) ადგილმდებარეობის შეცვლისათვის უნდა შემცირდეს მისი პოტენციური ენერგია, განსხვავებით მოლეკულურ-კინეტიკური თეორიისა (მკთ), რომელიც საჭიროებს

მოცემულ ატომთან კინეტიკური ენერჯის გაზრდას. ამ თეორიის აღსაწერად აუცილებელია, რომ კონდენსირებულ გარემოში ქიმიურ ბმებში მონაწილე ელექტრონები შეიძლება იმყოფებოდეს ორ განსხვავებულ კვანტურ მდგომარეობაში:



ნახ.24 Si-ის დამოკიდებულება იდენტორზე მოდებული დათვითვის სიდიდდეზე:

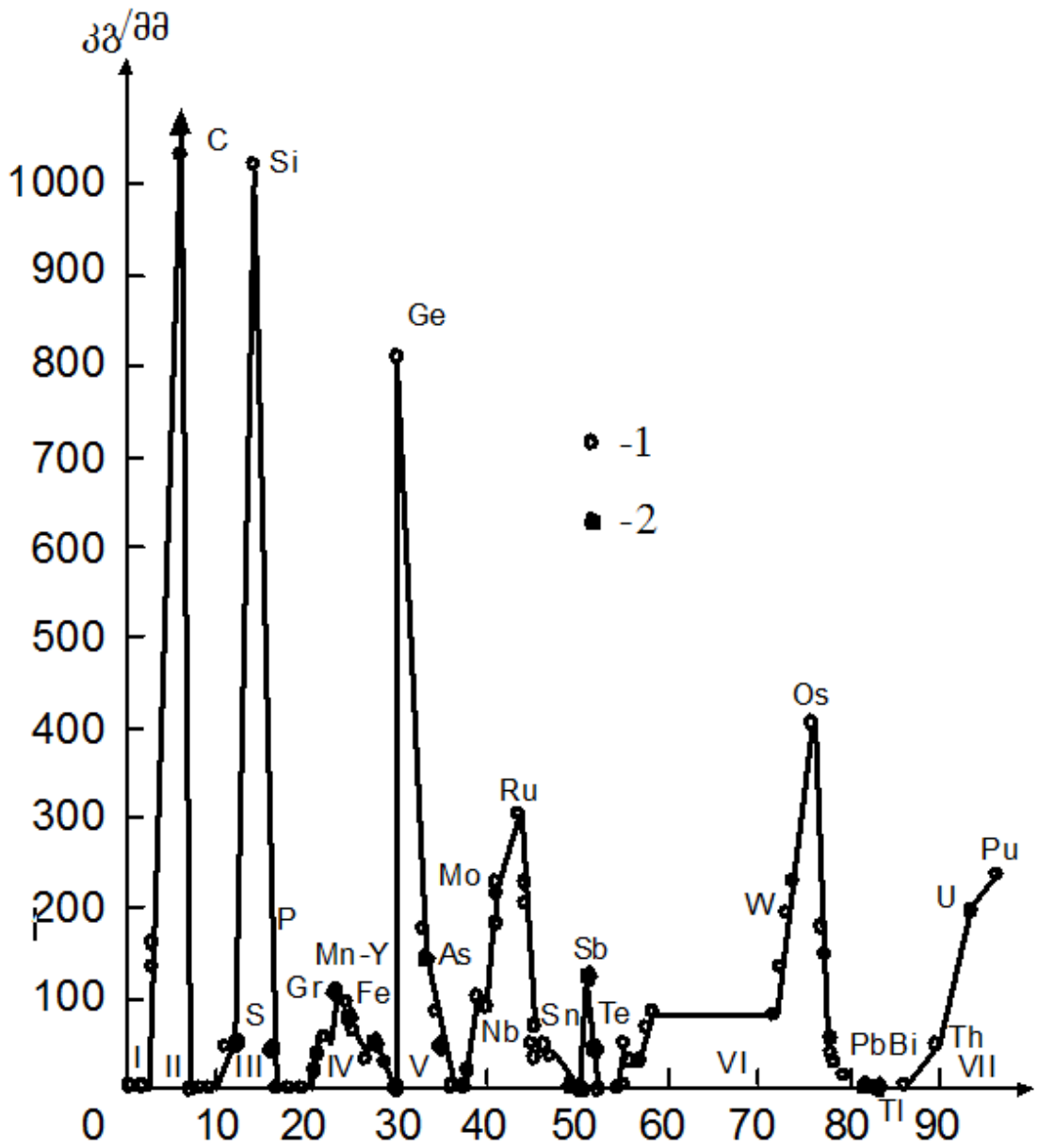
- 1 - სიბნელეში
- 2 - ლაზერით განათებისას ($h\nu \geq E_g$)
- 3 - დიდი ინტენსივობის ლაზერით განათებისას, ე.ი. აკვაზების დიდი კონცენტრაციის დროს ზედაპირზე სისალის მნიშვნელობა ნაკლებია, ვიდრე მოცულობაში
- 4 - Si-ის ფილტრში გასული თეთრი სინათლით განათებისას ($h\nu \geq E_g$), აკვაზები წარმოიქმნება მთელ მოცულობაში.

დამაკავშირებელში, როცა ისინი ზრდიან ქიმიური ბმების ენერჯიას და ანტიდამაკავშირებელში, როცა ისინი ამცირებენ ამ ენერჯიას. ეს შედეგი გამომდინარეობს კონდენსირებულ გარემოში ელექტრონების ენერჯეტიკული მდგომარეობის აღმწერი ზონური თეორიიდან, რომელიც

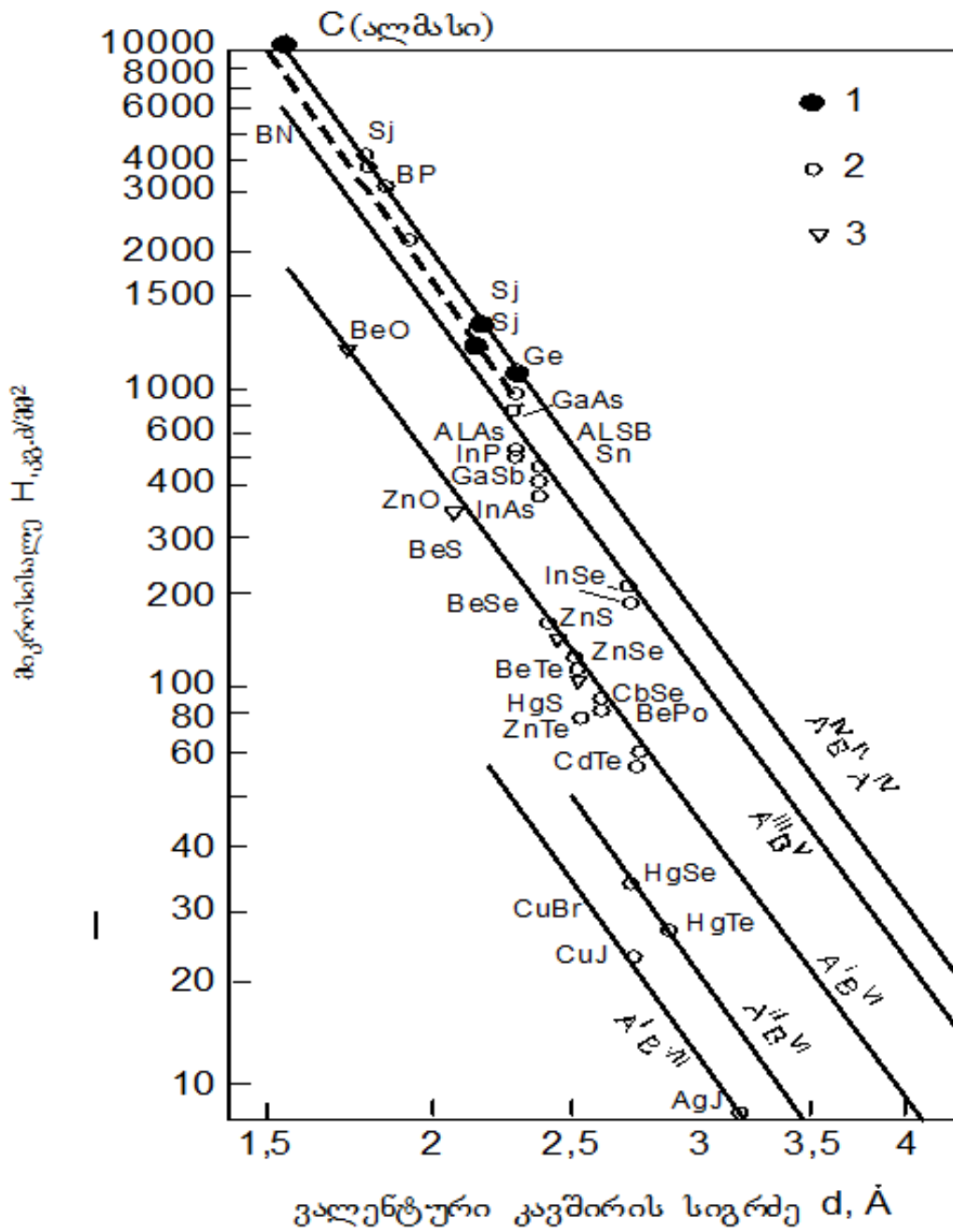
მიიღება ძლიერად ბმული ელექტრონის მიახლოებაში გამოთვლებისათვის ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის მეთოდის გამოყენებით [14]. ამ შემთხვევაში მყარ სხეულს მიიჩნევენ მრავალი ატომისაგან შემდგარ დიდ მოლეკულად.

დაბალი ენერგიის მქონე ენერგეტიკულ დონეს უწოდებენ დამაკავშირებელ ენერგეტიკულ დონეს, რადგან მასზე მყოფ ელექტრონებს უფრო დაბალი ენერგია აქვს და ისინი ქმნიან ქიმიურ ბმას. მაღალი ენერგიის მქონე დონეს უწოდებენ ანტიდამაკავშირებელ დონეს, რადგან მასზე მყოფი ელექტრონები ბმას ამცირებს. 25-ე ნახაზზე წარმოდგენილია მიკროსისალის პერიოდული ცვლილების ატომურ ნომერზე დამოკიდებულების მრუდი. ამ დამოკიდებულებიდან ჩანს, რომ სისალის მთავარი მაქსიმუმები შეესაბამება კოვალენტურ კრისტალებს: C-ს, Si-ს და Ge-ს; მეხუთე პერიოდში Sb-ს; მეექვსე პერიოდში Bi-ს, რომელთაც ახასიათებთ კოვალენტური კავშირები და არა Sn-სა და Pb-ს, რომლებიც ამჟღავნებენ ლითონურ ხასიათს. მიკროსისალის დამოკიდებულება ვალენტური კავშირის სიგრძეზე ალმასის ტიპის ნახევარგამტარებისათვის, მოყვანილია 26-ე ნახაზზე, საიდანაც ჩანს, რომ ატომთაშორის მანძილის ზრდასთან ერთად მიკროსისალის მნიშვნელობები წრფივად მცირდება. მიკროსისალე ახასიათებს კრისტალების მექანიკურ სიმტკიცეს ანუ მესრის წინააღმდეგობას პლასტიკური დეფორმაციებისა და რღვევის მიმართ, რაც ატომებს შორის ქიმიური ბმებით არის განპირობებული.

აკვაზების არსებობის და მათ მიერ ქიმიური ბმის შესუსტების პირდაპირ ექსპერიმენტულ დასაბუთებას იძლევა მყარი სხეულის სისალეზე სინათლის გავლენით გამოწვეული ცვლილებების შესწავლა. აქვე წინასწარ აღვნიშნავთ, რომ ამ ზემოქმედების ან ტემპერატურის გავლენის შედეგად სისალის ცვლილებას საფუძვლად უდევს ერთი და იგივე მოვლენა, კერძოდ, მათ მიერ აკვაზების წარმოქმნა, რასაც ქვემოთ განვიხილავთ.



ნახ.25 ელემენტთა მიკროსისაღისა (2) და სისაქლის (1) პერიოდული ცვლილება ატომური ნომრის მიხედვით



ნახ.26 კოვალენტური კრისტალების მიკროსისალის დამოკიდებულება
 ვალენტური კავშირის სიგრძეზე:
 1 – ალმასის; 2 – სფალერიტის; 3 – ვიურციტის

3.4.2 ფოტომექანიკური ეფექტის ფიზიკური ბუნება

ფოტომექანიკური ეფექტი არის ზედაპირული სისალის ცვლილება განათების შედეგად [35]. ამ მოვლენას უკავშირებენ დისლოკაციების გათავისუფლებას და მათი მოძრაობის გაადვილებას მოქმედი მექანიკური ძაბვის ველში [32], ფმე-ის დისლოკაციური მიდგომის ახსნის დიდი წინააღმდეგობაა ის, რომ ფმე-ის სიდიდე ძლიერ უნდა იყოს დამოკიდებული საკვლევ ნიმუშში არსებულ დისლოკაციათა რაოდენობაზე, მაგრამ ექსპერიმენტზე ეს გავლენა არ დაიშვია.

აღმოჩნდა, რომ მიკროსისალის შემცირება დამოკიდებულია მუხტის მატარებელთა კონცენტრაციაზე [28, 36, 37]

აღსანიშნავია, რომ ფმე-ს ბუნება ტრადიციული მექანიზმით არ აიხსნება.

ნაშრომებში [6, 7, 8, 9, 10, 11] მოყვანილი ახალი წარმოდგენები მყარ სხეულებში ატომთა გადაადგილების შესახებ საშუალებას იძლევა აღიწეროს ფმე-ის ფიზიკური მექანიზმი ატომურ დონეზე და აიხსნას მასთან დაკავშირებული ყველა ექსპერიმენტული შედეგი.

მიკროსისალის გაზომვისას ინდენტორის ზეწოლის გავლენით ხდება მასალის რღვევა და, როგორც შედეგი, გამოსაკვლევ ნივთიერების გარკვეული მასის გადაადგილება. თუ სინათლის ზემოქმედებით ხდება ნახევარგამტართა დარბილება და, შესაბამისად მიკროსისალის სიდიდის შემცირება, ეს ნიშნავს ნივთიერების ამ მასის გადაადგილების გაადვილებას, რაც საბოლოო ჯამში გამოწვეულია ატომთა ერთმანეთის მიმართ გადაადგილების უნარის გაზრდით, ე. ი. ატომთაშორისი ურთიერთქმედების ცვლილებით.

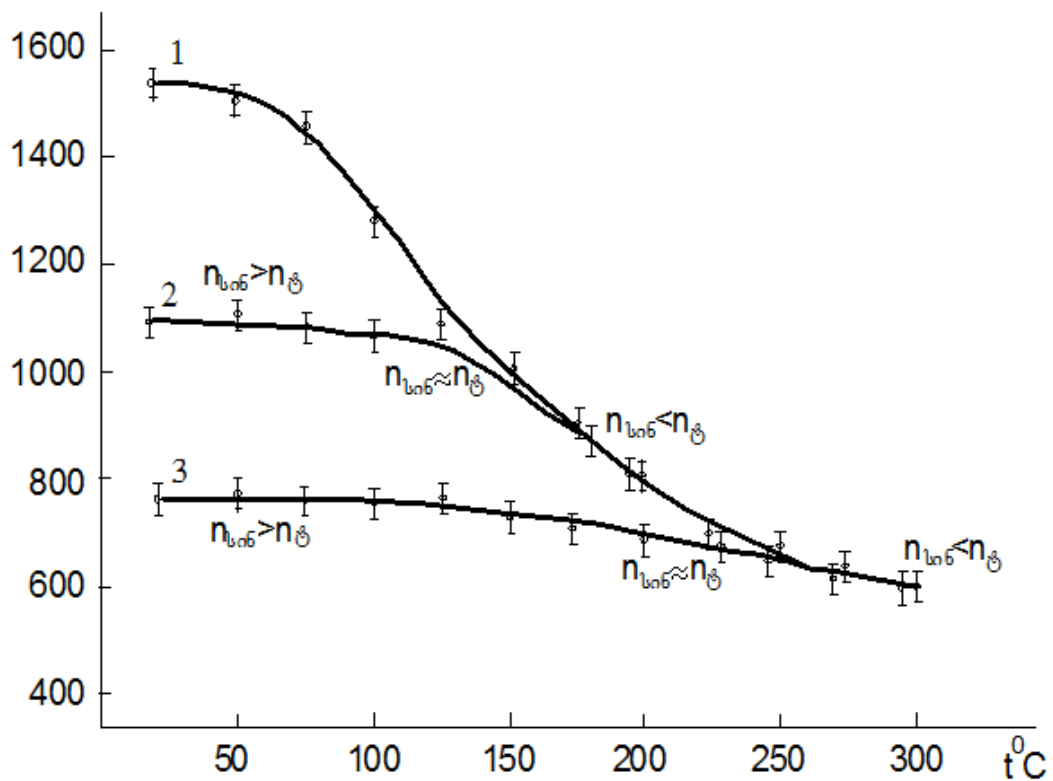
ელექტრონის ყოველ გადასვლას დამაკავშირებელი ზონიდან ანტიდამაკავშირებელ ზონაში თან ახლავს აკვაზების წარმოქმნა. რაც უფრო მეტი იქნება კრისტალში აგზნებით წარმოქმნილი აკვაზები, რომლებიც მათი სითბური მოძრაობისას აღმოჩნდებიან მესრის ატომის მახლობლად, მით მეტად შემცირდება ბმის ენერგია და ატომებს მიენიჭებათ ერთმანეთის

მიმართ გადაადგილების დამატებითი თავისუფლება, რაც ბუნებრივია გამოიწვევს ნივთიერების დარბილებას.

ამრიგად, ქიმიური ბმის სიდიდის შეცვლა ხდება აკვაზების ზემოქმედების შედეგად, რაც მტკიცდება ამ ცვლილებათა სიდიდის კორელაციით აკვაზების კონცენტრაციასთან [28-30, 36]. მაგალითისათვის ნახ.24-ზე მოყვანილია მიკროსისალის შემცირება სხვადასხვა ენერჯის კვანტების მქონე სინათლით განათების შემთხვევაში [36]. ნახაზიდან ჩანს, რომ $h\nu > E_g$ ენერჯის კვანტებით განათების შემთხვევაში მიკროსისალე მცირდება ინდენტორის ჩანერგვის მხოლოდ იმ არეში (დატვირთვის ზრდასთან ერთად იზრდება ინდენტორის ჩანერგვის სიღრმე), სადამდეც მოცემული სინათლე აღწევს მისი შონთქმის კოეფიციენტის შესაბამისად (მრუდი 2). დიდი ინტენსივობის, ანუ აკვაზების დიდი კონცენტრაციის დროს ზედაპირზე მიკროსისალის მნიშვნელობა ნაკლებია, ვიდრე დიდ სიღრმეებზე მოცულობაში (მრუდი 3). $h\nu \leq E_g$ ენერჯის კვანტები შთაინთქმებიან მხოლოდ ინდენტორის მიერ შექმნილ დეფექტურ არეში და ამიტომ ისინი მოქმედებენ ცდაში გამოყენებული ყველა დატვირთვის შესაბამისი ჩანერგვის სიღრმეზე (მრუდი 4).

ფმე-ს ახალი მექანიზმის თანახმად, მს-ის ცვლილება კორელირებს აკვაზების კონცენტრაციის ცვლილებასთან. აქედან გამომდინარე, შეიძლება დავასკვნათ, რომ ნიმუშის გახურებისას მს-ის შემცირება ხდება, ძირითადად აკვაზებით, რომელთაც ტემპერატურა წარმოქმნის, ამიტომ ჩატარებულ იქნა მს-ის ტემპერატურული დამოკიდებულებების ექსპერიმენტული კვლევები Si-ის კრისტალში, როგორც სიბნელეში, ისე სხვადასხვა ინტენსივობის თეთრი სინათლის ზემოქმედებისას.

ფმე-ს ტემპერატურული დამოკიდებულების კვლევის [34] შედეგები მოცემულია ნახ.27-ზე. მრუდი 1 შეესაბამება მს-ის ტემპერატურულ დამოკიდებულებას სიბნელეში, ხოლო მე-2 და მე-3 მრუდები კი შესაბამისად I_1 და I_2 ($I_1 < I_2$) ინტენსივობების სინათლით განათებისას. სინათლისა და ტემპერატურული მრუდების შერწყმის წერტილის



ნახ.27 Si-ის მიკროსისალის ტემპერეტურული დამოკიდებულება სიბნელეში (1) და სინათლეში (2,3) - სინათლის ინტენსივობისას I_1 (2) და I_2 (3), $I_1 < I_2$

მდებარეობა დამოკიდებულია განათების ინტენსივობაზე. განსაზღვრულ ტემპერატურულ არეში ტემპერატურა ვერ ახდენს გავლენას განათებული ნიმუშის მს-ზე. შემდგომ ორივე შემთხვევაში დაიმზირება გარკვეული ტემპერატურული დამოკიდებულება და ტემპერატურის შემდგომი მომატებისას ფმე ქრება. ამრიგად, განათების ინტენსივობის ზრდისას ხდება გაუნათებელი და განათებული (ფმე) ტემპერატურული მრუდების შერწყმის წერტილის გადაადგილდება უფრო მაღალ ტემპერატურულ არეში.

აკვაზების კონცენტრაციების გაზომვებმა და გამოთვლებმა აჩვენეს, რომ განათებული ნიმუშის მს-ის ტემპერატურული დამოკიდებულების ჰორიზონტალურ უბანზე ნიმუშის ზედაპირზე სინათლით წარმოქმნილი აკვაზების სტაციონარული კონცენტრაცია $n_{სინ}$ ყოველთვის აღემატება ტემპერატურით წარმოქმნილი აკვაზების კონცენტრაციას $n_{ტ}$ ($n_{სინ} > n_{ტ}$), რის

გამოც ტემპერატურა არ მოქმედებს მს-ის მნიშვნელობაზე. იმ უბანზე, სადაც, განათებული ნიმუშის მს-ის ტემპერატურული დამოკიდებულება დაიმზირება, ეს კონცენტრაციები თანაზომადია ($n_{\text{სინ}} \approx n_{\text{ტ}}$), ხოლო ტემპერატურული და სინათლის მრუდების შერწყმის წერტილის შემდეგ უფრო მაღალ ტემპერატურებზე ტემპერატურით წარმოქმნილი $n_{\text{ტ}}$ აღემატება სინათლით წარმოქმნილ $n_{\text{სინ}}$ ($n_{\text{ტ}} > n_{\text{სინ}}$) და ამიტომ ტემპერატურა მოქმედებს მს-ს ცვლილებაზე. ამრიგად, არის ნაჩვენები, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე, ე.ი. როცა ფონონების წვლილი ერთნაირია, ნივთიერების დარბილების სიდიდე დამოკიდებულია მხოლოდ აკვაზების კონცენტრაციაზე, მიუხედავად იმისა, რა საშუალებით არიან წარმოქმნილი ისინი — სინათლით თუ ტემპერატურით.

3.4.3 სინათლის გავლენა მეტალების მიკროსისალის მნიშვნელობაზე

დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ზონები მეტალებშიც არსებობენ, რომელთა შორის შესაძლოა განხორციელდეს ელექტრონთა კვანტური გადასვლები [12]. ეს ზონები გადაფარულია, ამიტომ ენერგეტიკული შუალედი (მანძილი) დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს შორის შეიძლება დახასიათდეს $T=0^{\circ}\text{K}$ -ზე ფერმის დონესა და ანტიდამაკავშირებელი ზონის ფსკერს შორის ენერგეტიკული მანძილით (ნახ.9), რომელსაც ეწოდება ფსევდოაკრძალული ზონა ან ფსევდოდრეჩო $E_{\text{ფ}}$, ამიტომ სინათლის ზეგავლენით ელექტრონების გადასვლა დამაკავშირებელი ზონის დონეებიდან ანტიდამაკავშირებელი ზონის დონეებზე შეიძლება მოხდეს სინათლის შთანთქმის შემთხვევაში, რამაც შესაბამის სიღრმეზე უნდა უზრუნველყოს მეტალებში ფმე-ის არსებობა. ელექტრონის გადასვლა დამაკავშირებელი ზონიდან

ანტიდამაკავშირებელში ასუსტებს ქიმიურ ბმას, როგორც ამას ადგილი აქვს ნახევარგამტარებში.

მეტალების შემთხვევაში ელექტრონების გადასვლა დამაკავშირებელ ზონაში შედარებით ღრმა დონეებიდან თავისუფალ მაღალ დონეებზე აგრეთვე შეამცირებს ბმის ენერგიას, მაგრამ ბმა სუსტდება ნაკლებად, ვიდრე დამაკავშირებელი დონიდან ანტიდამაკავშირებელზე, ნახევარგამტარებსა და დიელექტრიკებში ასეთივე გადასვლისას. ისევე როგორც ნახევარგამტარებში, მნიშვნელობა არა აქვს იმას, თუ რა სახის ზემოქმედებით განხორციელდება ეს გადასვლები. სინათლის საშუალებით ელექტრონების გადასვლის შემთხვევაში, იმავე ზონის შედარებით მაღალ დონეებზე მათი თერმალიზაცია ანუ უკან დაბრუნება ხდება $\sim 10^{-14}$ წმ-ის განმავლობაში, ხოლო სხვა ზონის ფსკერზე მოხვედრის შემთხვევაში ისინი ყოვნდებიან $\sim 10^{-11}$ წმ-ის განმავლობაში, რაც მნიშვნელოვნად მეტია, ვიდრე ატომების რხევის პერიოდი $\sim 10^{-13}$ წმ. ამიტომ თუ ელექტრონთა ამ გადასვლებს განვახორციელებთ სინათლის საშუალებით მუდმივ ტემპერატურაზე, ქიმიური ბმის ენერგია უნდა შემცირდეს და, როგორც შედეგი, მოიმატებს ატომების ერთმანეთის მიმართ გადაადგილების ალბათობა, რამაც უნდა გამოიწვიოს მს-ის მნიშვნელობის შემცირება, ე.ი. ადგილი ექნება ფოტომექანიკურ ეფექტს. მაგრამ სინათლის ზეგავლენა შესამჩნევი იქნება მხოლოდ იმ შემთხვევაში (ისევე როგორც ნახევარგამტარებისთვის), როდესაც ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე სინათლის ზემოქმედებით გადაყვანილი ელექტრონების კონცენტრაცია იქნება თანაზომადი ან მეტი, ვიდრე მოცემულ ტემპერატურაზე სითბოს საშუალებით გადაყვანილი ელექტრონების კონცენტრაცია. აქედან გამომდინარე, იმ მეტალებში, რომელთაც აქვთ დიდი ფსევდოდორეჩო, სინათლის გავლენა ოთახის ტემპერატურაზე იქნება შესამჩნევი: რაც მეტია ფსევდოდორეჩო, მით ნაკლები იქნება ანტიდამაკავშირებელ ზონაში ტემპერატურის ზემოქმედებით წარმოქმნილი ელექტრონების

კონცენტრაცია და მეტი იქნება სინათლით გამოწვეული მათი ფარდობითი ცვლილება.

ამ მოსაზრებების დასამტკიცებლად გამოკვლეულ იქნა სინათლის გავლენა შემდეგი მეტალების მს-ების მნიშვნელობებზე: Fe, Ti, V, Cr, Mo, W [29]. ამ მეტალების მონოკრისტალური ნიმუშები იჭრებოდა [67] ზედაპირის ორიენტაციით, რომელიც განისაზღვრებოდა რენტგენოდიფრაქციული მეთოდით.

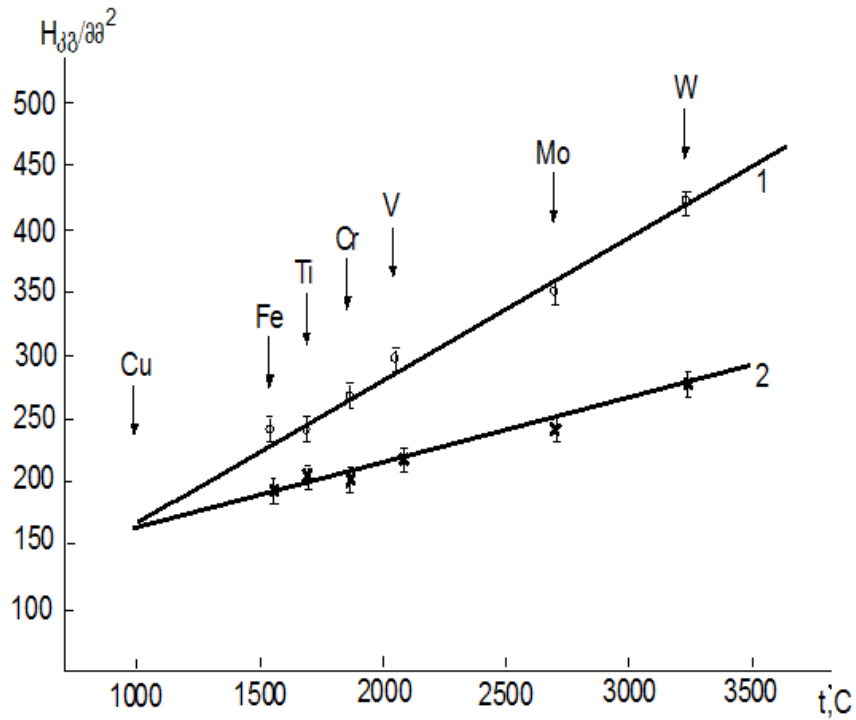
ნახ.28-ზე მოყვანილია გამოკვლეული მეტალების მიკროსისალების მნიშვნელობები სიბნელეში და ერთნაირი ინტენსივობის თეთრი სინათლის გავლენის შედეგად; ჩანს, რომ რაც უფრო მაღალია მეტალის დნობის ტემპერატურა $T_{\text{დნ}}$ და დიდია $E_{\text{გ}}$, ($T_{\text{დნ}}$ კორელირებს $E_{\text{გ}}$ -ს მნიშვნელობასთან), მით მეტია განათების ფარდობითი წვლილი, ე. ი. მეტია ფმე.

ფმე მეტალებში დაიშორება იმ შემთხვევაში, როცა დამაკავშირებელი ზონის ღრმა დონეებიდან სინათლით გადაყვანილი ელექტრონების კონცენტრაცია ზემოთ მდებარე დონეებზე ან ანტიდამაკავშირებელ ზონაში თანაზომადია ან მეტია იმ ელექტრონების კონცენტრაციაზე, რომლებიც გადაყვანილი არიან ტემპერატურით იმავე დონეებზე, ანუ ადგილი აქვს მეტალის დარბილებას.

3.4.4. ნანომასალების სისალის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე

სხვადასხვა მეთოდებით მიღებული ნანომასალების მიკროსისალის გამოკვლევამ აჩვენა საერთო ტენდენცია, რომ ნანონაწილაკის ზომების შემცირებით ნანომასალის სისალე ჯერ იზრდება და შემდეგ მცირდება [2, 3](ნახ. 29).

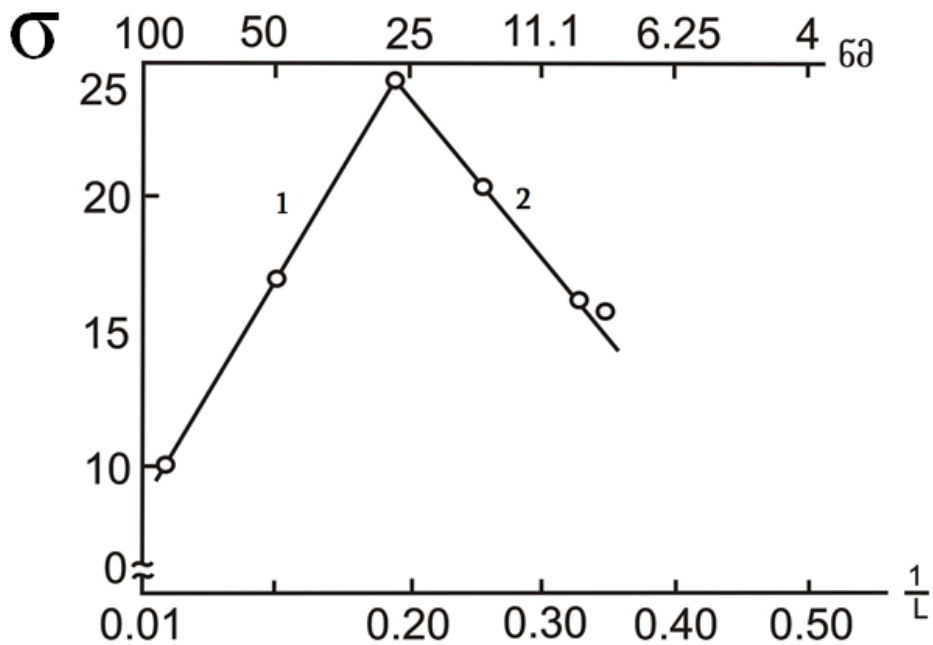
ნახაზიდან ჩანს, რომ ნანომასალებისათვის მიკროსისალის მაქსიმალური მნიშვნელობა 2-3-ჯერ აღემატება იგივე ნივთიერების კომპაქტური მყარი სხეულის მიკროსისალის მნიშვნელობას. ნანომასალის



ნახ.28 მეტალების მიკროსისალის მნიშვნელობის დამოკიდებულება დნობის ტემპარატურაზე.

1 - გაზომილი სიბნელეში

2 - სინათლით მოქმედებისას



ნახ.29 ნანომასალის დენადობის ზღვრის დამოკიდებულება მისი შემადგენელი ნანონაწილაკების ზომებზე

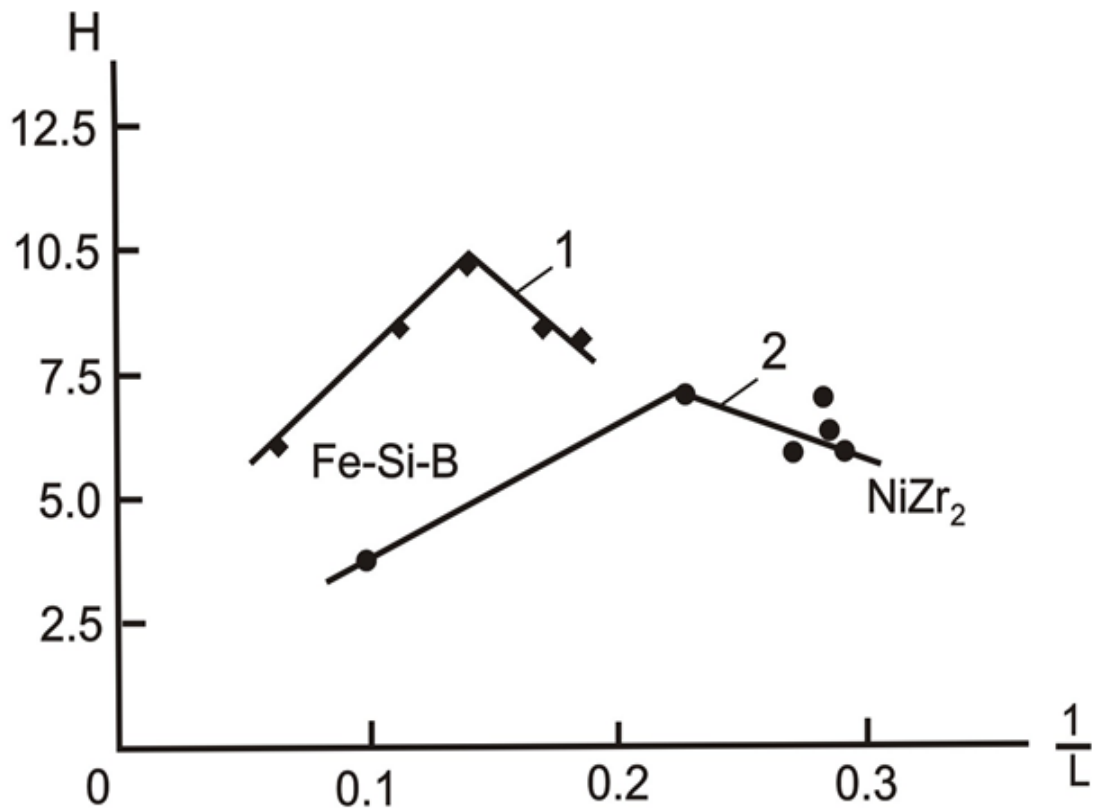
1 - არე, რომელიც ემორჩილება ჰოლლ-პეტჩის თანაფარდობას;

2 - ანომალური არე;

მიკროსისალის მნიშვნელობის ზრდის უბანი აღიწერება ეგრეთ წოდებული ჰოლლ-პეტჩის ემპირიული თანაფარდობით: $H=H_0+KL^{-1/2}$ სადაც H არის ნანომასალის სისალე, H_0 - კომპაქტური ნივთიერების სისალე, K - პროპორციულობის ანუ ჰოლლის კოეფიციენტი, L - ნანონაწილაკების საშუალო ზომა. მიკროსისალის ზრდა ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად აიხსნება ნაწილაკში დისლოკაციების რაოდენობის კლებით მათი ზომების შემცირებასთან ერთად, რაც დამტკიცებულია რენტგენული და ელექტრონულ-მიკროსკოპული გამოკვლევებით. მიკროსისალის შემცირების უბანი, არსებულ წარმოდგენებში ანომალიად ითვლება და ახსნა არ აქვს. მოყვანილი ატომის გადაადგილების ახალი მექანიზმის საფუძველზე ეს ფენომენი ადვილად აიხსნება [6-11, 38].

ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ მიკროსისალის მნიშვნელობას განსაზღვრავს ატომის გადაადგილების შესაძლებლობა, რაც უფრო ადვილია ატომის გადაადგილება, მით ნაკლებია მიკროსისალე, ატომის გადაადგილება კი განისაზღვრება მოცემულ ატომთან აკვაზების არსებობით და არ აქვს მნიშვნელობა იმას, თუ რა გზით არიან ისინი წარმოქმნილნი. რაც მეტია მათი კონცენტრაცია, მით მეტია ატომის გადაადგილების შესაძლებლობა და ნაკლებია მიკროსისალე. ნანონაწილაკის განსაზღვრული ზომებიდან დაწყებული, მასში ვლინდება ეფექტური კონცენტრაცია, რომელიც ზრდის ატომის გადაადგილების შესაძლებლობას და არბილებს ნანონაწილაკს. დანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად, როგორც ნაჩვენები იყო ზემოთ, იზრდება აკვაზების ეფექტური კონცენტრაცია და შესაბამისად, მცირდება მიკროსისალე. იგივე მსჯელობით აიხსნება ნანომასალებში ექსპერიმენტულად დადგენილი დენადობის ზღვრის ნანონაწილაკის ზომებზე დამოკიდებულების ანომალური სვლა. ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად დენადობის ზღვარი ჯერ იზრდება, ჰოლლ-პეტჩის თანაფარდობის მიხედვით: $\sigma = \sigma_0 + KL^{-1/2}$, (σ_0 - დენადობის ზღვარი და σ_0 შინაგანი დამაბულობა, რომელიც ეწინააღმდეგება პლასტიკურ ძვრას სხეულში), შემდეგ კი მცირდება (ნახ.29)

მეტალებში ფსევდოაკრძალული ზონის სიგანე კორელირებს დნობის ტემპერატურასთან [29]. აქედან რაც მეტია ფსევდოაკრძალული ღრეჩო, მით ნაკლებია მოცემულ ტემპერატურაზე აკვაზების კონცენტრაცია. ნანონაწილაკებში კი რაც ნაკლებია რეალური კონცენტრაცია, მით ნაკლებია ეფექტური კონცენტრაცია, ამიტომ დნობის მაღალი ტემპერატურის მქონე ნივთიერებების ნანონაწილაკების ზომები უნდა იყოს უფრო ნაკლები, რომ მრავალი არეკვლის საშუალებით ეფექტურმა კონცენტრაციამ მიაღწიოს სათანადო საჭირო სიდიდეს[38]. ნახ.30-დან ჩანს, რომ NiZr₂-ის, ანომალია



ნახ.30 სხვადასხვა დნობის ტემპერატურის მქონე ნანომასალის სისხლის დამოკიდებულება მათი შემადგენელი ნანონაწილაკების ზომებზე $T_{დნ}^1 < T_{დნ}^2$

იწყება უფრო მცირე ზომის ნანონაწილაკების დროს, ვიდრე Fe-Mo-Si-B-ში, რომლის დნობის ტემპერატურა ნაკლებია, ვიდრე NiZr₂-ის[40].

ნანონაწილაკებში სისალის ტემპერატურაზე დამოკიდებულების (შემცირების) მრუდს აქვს უფრო ციცაბო სახე, ვიდრე კომპაქტური მყარი სხეულების შემთხვევაში [41-43]. ტემპერატურის ზრდასთან აკვაზების სიჩქარის მომატება ნანონაწილაკებში ზრდის ზედაპირიდან მათი არეკვლის სიხშირეს და შედეგად, ეფექტურ კონცენტრაციას. ამ უკანასკნელის მომატება კი ამცირებს ენერგეტიკულ ღრეჩოს (დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს შორის ენერგეტიკულ მანძილს), რაც ზრდის აკვაზების რეალურ კონცენტრაციას ისე, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე რეალური კონცენტრაცია ნანონაწილაკში მეტია, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულში, რაც ეფექტური კონცენტრაციის არსებობასთან ერთად ნანონაწილაკში განაპირობებს მიკროსისალის მნიშვნელობის უფრო მკვეთრ შემცირებას ტემპერატურის ზრდასთან ერთად, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულში.

ნანონაწილაკების მექანიკური თვისების ყველა ცვლილება აიხსნება ნანონაწილაკებში აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის ცვლილებით. ნანონაწილაკის ზომების შემცირებასთან ერთად მცირდება იუნგის მოდული, ძვრის მოდული და მოცულობითი დრეკადობა, ეს ყველაფერი განპირობებულია ნანონაწილაკის დარბილებით, რაც გამოწვეულია აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის ზრდით ნანონაწილაკების ზომების შემცირებასთან ერთად.

მყარ სხეულებს ახასიათებთ ეგრეთ წოდებული ზეპლასტიურობა, რომლის არსი არის ის, რომ მოცემული ნივთიერებების მყარი სხეული განსაზღვრულ ტემპერატურაზე მოდებული სათანადო დატვირთვის დროს კი არ ირღვევა, არამედ პლასტიურად დეფორმირდება. ნანომასალებში, რომლებიც შედგება რაიმე ნივთიერებისა და მასში ჩართული ნანონაწილაკებისაგან ზეპლასტიურობას ადგილი აქვს 300-400° C-ით უფრო დაბალ ტემპერატურებზე, მაგრამ უფრო მაღალი დატვირთვების დროს, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულში [44]. ზეპლასტიურობის ტემპერატურის შემცირება განპირობებულია ნანონაწილაკებში აკვაზების ეფექტური

კონცენტრაციის წარმოქმნით, რაც იწვევს დარბილებას, ხოლო მექანიკური დატვირთვის მნიშვნელობის მომატება გამოწვეულია იმით, რომ ნანონაწილაკთა შორის მყოფ ნივთიერებებში მოცემულ დაბალ ტემპერატურაზე აკვაზების რეალური კონცენტრაცია არ არის საკმარისი პლასტიურობისათვის. მოდებული დიდი დატვირთვა წარმოშობს საკმარის წნევას, რომელიც ამცირებს ენერგეტიკულ მანძილს დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ ზონებს შორის, რაც რეალურ კონცენტრაციას ზრდის საკმარის სიდიდემდე ნანონაწილაკთაშორისო არეში და ნანომასალაში ხორციელდება ზეპლასტიურობა [38].

მყარი სხეულის სათანადო დატვირთვის დროს შეიძლება ადგილი ჰქონდეს პლასტიკურ ძვრას-მისი ერთი ნაწილის მეორის მიმართ „გასრიალებას“, სათანადო კრისტალოგრაფიული სიბრტყის გასწვრივ. ნანომასალებში პლასტიკური ძვრა ხდება დატვირთვების გაცილებით დაბალი მნიშვნელობებისას [2,3,45], რაც გამოწვეულია ნანონაწილაკებში აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის არსებობით. განვიხილოთ მიზეზი, თუ რატომ ხდება ასეთი სრიალი. ნანონაწილაკებში, როგორც იყო აღნიშნული, პლასტიკური დეფორმაცია ვერ აიხსნება დისლოკაციების მოძრაობით, ამ უკანასკნელთა ნანონაწილაკში არ არსებობის გამო. მაშ როგორ ხორციელდება პლასტიკური ძვრა ნანონაწილაკებში ატომურ დონეზე ნანომასალაზე დატვირთვის მოდების დროს წარმოიქმნება წნევა ნანონაწილაკებზე, რომელთა კრისტალოგრაფიული ორიენტაცია, სავარაუდოდ, ქაოსურადაა განაწილებული. სიბრტყეში, რომელშიც აღმოჩნდება უფრო მეტი ნანონაწილაკი ისეთი ორიენტაციით, რომ მასზე მოქმედი წნევა ანუ მექანიკური ძაბვა იწვევს დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს შორის ენერგეტიკული მანძილის შემცირებას, მაშინ ამ სიბრტყეში აკვაზების რეალური და ეფექტური კონცენტრაცია იქნება მეტი და პლასტიკური ძვრა განხორციელდება სწორედ ასეთი თვისებების მქონე კრისტალოგრაფიულ სიბრტყეებში. აქვე უნდა აღვნიშნოთ, რომ რადგან ნანომასალებში ნანონაწილაკები არ არიან

იზოლირებულნი, არის სასრული ალბათობა იმისა, რომ ნანონაწილაკის საზღვართან მისული აკვაზი გადალახავს ამ საზღვარს და გადავა ნაწილაკთაშორისო სივრცეში, ე. ი. ნანონაწილაკები არის ამ სივრცის აკვაზებით მომარაგების წყარო. აკვაზების დამატებითი ინჟექტირებული კონცენტრაცია აადვილებს ატომების ერთმანეთის მიმართ გადაადგილებას [38].

ამგვარად, შეიძლება ითქვას, რომ ნანომასალების მექანიკური თვისებების ცვლილება აიხსნება აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის ცვლილებით ნანონაწილაკებში. ნანონაწილაკების ზომების კლებით ხდება მისი „დარბილება“, ე. ი. მცირდება მასალის იუნგის მოდული, სიხისტე და სხვა.

3.5 ნანონაწილაკებში დიფუზიის კოეფიციენტის სიდიდის და რეკრისტალიზაციის სიჩქარის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე

3.5.1. დიფუზიის ახალი მექანიზმი მყარ სხეულებში

დიფუზიის კოეფიციენტის გამოსახულების მისაღებად 3.1-ში გამოთვლილი ატომის მიგრაციული აქტის ალბათობა უნდა გავამრავლოთ, ეგრეთ წოდებულ “აღრევის სიჩქარეზე” [5, 31] V_{ad} , სადაც d არის ატომთა შორის მანძილი, ჩავთვალოთ, რომ $d=2r_a$ და $r_a=(3H_a/4\pi)^{1/3}$, H_a — ატომზე მოსული მოცულობა, ხოლო $V_s=\sqrt{kT/M_a}$ ატომის საშუალო სითბური სიჩქარე, M_a — ატომის მასა, მაშინ

$$D=16\alpha^2 r_a v_s n^* \exp^5(n_{აკ}/N_a)^6 W_{გ}$$

ფორმულაში შემავალ ყველა სიდიდეს აქვს ფიზიკური აზრი და შესაძლებელია ავიღოთ ლიტერატურიდან ან გამოვთვალოთ იმ პირობებისათვის, რომლის დროსაც ტარდება დიფუზია. როგორც ამ გამოსახულებიდან გამომდინარეობს, დიფუზიის კოეფიციენტის ცვლილებაში ძირითადი წვლილი შეაქვს ანტიდამაკავშირებელი

კვაზინაწილაკების კონცენტრაციას n_{33} , რომელიც შეიძლება ვცვალოთ სხვადასხვა გზით: ტემპერატურით, სინათლით, ინჟექციით, წნევით და ა.შ., ამიტომ ის აღწერს როგორც თერმულ, ისე ყველა სტიმულირებულ დიფუზიურ პროცესს. თერმული დიფუზიის შემთხვევაში აკვაზების კონცენტრაციის დამოკიდებულება დიფუზიის T ტემპერატურაზე გამოსახება ფორმულით $n_i = \sqrt{N_c N_v} \cdot e^{-E_g/kT}$ [23]. თუ მას ზემოთ მოყვანილ ფორმულაში შევიტანთ, მივიღებთ

$$D = A \alpha^2 n_{Sem}^{\beta-1} \frac{(N_V N_A)^{5/2}}{N_A^5} e^{-\frac{\beta E_g}{2kT}} = D_0 e^{-\frac{\beta E_g}{2kT}}$$

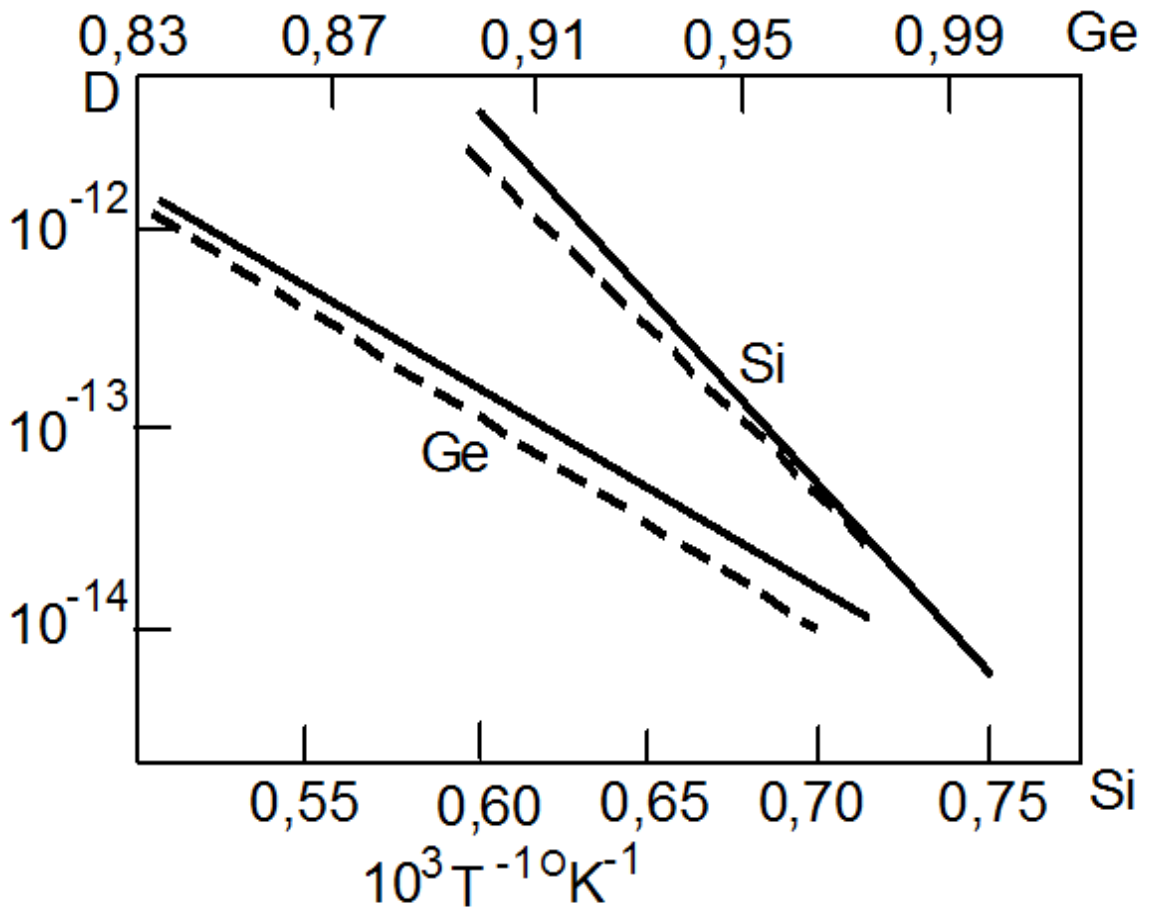
ფრენკელის ტრადიციულ ფორმულას თერმული დიფუზიის კოეფიციენტისათვის, რომელშიც აქტივაციის ენერგიას წარმოადგენს $U = \beta E_g$, ჩანს, რომ დიფუზიის კოეფიციენტის სიდიდე და ტემპერატურული დამოკიდებულება ძირითადად განისაზღვრება ტემპერატურაზე აკვაზების წარმოქმნის ექსპონენციური დამოკიდებულებით. აქედან ცხადია, რომ დიფუზიის ფრენკელის თეორია ჩვენ მიერ შემოთავაზებული დიფუზიის მექანიზმთან წინააღმდეგობაში არ მოდის [6-10].

ნახ.31-ზე მოცემულია თვითდიფუზიის კოეფიციენტის ტემპერატურული დამოკიდებულებები შესაბამისად Ge-სა და Si- ში, რომლებიც მიღებულია ცდების შედეგად და გამოთვლილია მოცემული ფორმულით. როგორც ნახაზიდან ჩანს, დამთხვევა საკმარისად კარგია, რაც მიუთითებს შემოთავაზებული მექანიზმის შესაძლებლობაზე.

მინარევული დიფუზიის შემთხვევაში შეიძლება გამოვიყენოთ ზემოთ მოყვანილი თვითდიფუზიის ზოგადი ფორმულის მსგავსი გამოსახულება, ოღონდ თითოეული მინარევისათვის უნდა განისაზღვროს α და მინარევის დამაკავშირებელი ელექტრონების ეფექტური რიცხვი β ცდის პირობებისათვის. აღსანიშნავია, რომ მინარევული ატომების დიფუზიის შემთხვევაში უნდა გავითვალისწინოთ არა მარტო ვალენტური ელექტრონების რაოდენობა, არამედ მინარევული ატომის ძირითადი ნივთიერების ატომებთან რეალურად არსებული ქიმიური ბმები ცდის

პირობებში. ამ ბმების უხეში შეფასებისათვის შეიძლება გამოვიყენოთ (მაგალითად, აქცეპტორების შემთხვევაში) ატომების ლოკალური დონეების ენერგეტიკული მანძილების (დონეებიდან ანტიდამაკავშირებელ ზონამდე) ჯამი. რაც ნაკლები იქნება ის $4E_g$ (საკუთარი ატომის ბმის ენერგია)-ზე, მით მცირე უნდა იყოს მინარევული ატომის ბმის ენერგია. β განსაზღვრავს n_i/N_s წევრის მაჩვენებელს და შესაბამისად ძლიერად მოქმედებს D-ს სიდიდეზე და მის ტემპერატურულ დამოკიდებულებაზე:

$$D = A\alpha^2 n_i^{1-\beta} (n_i/N_s)^\beta$$



ნახ.31 Ge-სა და Si-ში თვითდიფუზიის კოეფიციენტების ტემპერატურული დამოკიდებულება:
 — ექსპერიმენტული მონაცემები;
 ---- თეორიულად გამოთვლილი

თვითდიფუზიის შემთხვევაში $\alpha=1$ და $\beta=6$. ყოველი ტიპის მინარევული ატომის და დიფუზიის კონკრეტული პირობებისათვის უნდა განისაზღვროს α და β მნიშვნელობები.

3.5.2 ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის მექანიზმი მყარ სხეულებში

ფოტოსტიმულირებული დიფუზია შესწავლილი იყო მინარევების: Au-ის Si-ის ზედაპირზე [62], Al-ის Si-ში [47] Ag-ისა[49] და Cd-ის GaAs-ში[47]. ექსპერიმენტები ტარდებოდა იმპულსური ფოტონური დამუშავების დანადგარზე, რომელიც საშუალებას იძლევა, რათა იმართებოდეს შემდეგი პარამეტრები: ნიმუშის დასხივების დრო, ინტენსივობა, დასხივების სპექტრი, ნიმუშის ტემპერატურა [66].

ოქროს ზედაპირული ფოტოსტიმულირებული დიფუზია შესწავლილი იყო n-ტიპის კრისტალურ სილიციუმზე [62]. ვაკუუმური დაფენის მეთოდით ცივ საფენზე დატანილი იყო 10^{-7} მ სისქის ოქროს ფენა. ფოტონური დასხივება ხდებოდა 77K-ზე, დასხივების დროს ნიმუშები იმყოფებოდნენ თხევადი აზოტის გარემოში. სინათლით დასხივების განმავლობაში ნიმუშების საწყისი ტემპერატურა იზრდებოდა 40K-ით.

გახურების ან იმპულსური ფოტონური ზემოქმედების შედეგად ხდებოდა ოქროს ფენის საწყისი მკვეთრი საზღვრის წანაცვლება სილიციუმის ზედაპირზე. ამ წანაცვლების სიდიდის გაზომვები ხდებოდა მასკანირებელ ელექტრონულ მიკროსკოპზე. ოქროს ზედაპირული ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობა 100K ტემპერატურაზე აღმოჩნდა 5 რიგით მეტი, ვიდრე თერმული დიფუზიის კოეფიციენტისა $T=900K$ -ზე (ცხრილი 4)

ცხრილი 4 სილიციუმზე ოქროს ზედაპირული ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობები

დასხივების სიმძლავრე P, ვტ/სმ ²	დასხივების ხანგრძლივობა T, წმ	Al-ის ფსდ კოეფიციენტი D, სმ ² /წმ	თერმული დიფუზიის კოეფიციენტი D(T), სმ ² /წმ	ნიმუშის ტემპერატურა T, °C
87	1	$8,4 \cdot 10^{-9}$	$6 \cdot 10^{-59}$ გამოთვლილი ექსტრაპოლაციით	37
0	0	0	$4,5 \cdot 10^{-13}$ გაზომილი	1200

ცხრილი 5 სილიციუმში ალუმინის ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტი

სიბრტყე	მიმართულება	დიფუზიის კოეფიციენტი (სმ ² /წმ)	
		თერმული დიფუზია $t_{\text{გამოწვ}}=33$ წმ	ფოტოსტიმულირებული დიფუზია $t_{\text{დასხ}}=2$ წმ
		T=900k	T=100k
(110)	<110>	$1,2 \cdot 10^{-12}$	$4,2 \cdot 10^{-7}$
	<110>	$4,3 \cdot 10^{-13}$	$1,7 \cdot 10^{-7}$

ალუმინის ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის შესასწავლად Si-ში [49], Si-ის ნიმუშები სხივდებოდა Al-ით დაუფარავი ზედაპირის მხრიდან. დასხივების შემდეგ მიღებული მინარევის დიფუზიის კოეფიციენტი მოყვანილია ცხრილ 5-ში, საიდანაც ჩანს, რომ ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტს დაახლოებით ოთახის ტემპერატურაზე უფრო მაღალი მნიშვნელობა აქვს, ვიდრე თერმული დიფუზიის კოეფიციენტს 1200°C-ზე.

GaAs-ის ეპიტაქსიურ სტრუქტურებში მოცულობითი დიფუზიის შესასწავლად ნიმუშების ზედაპირის ერთ მხარზე თერმული ($T=100^{\circ}\text{C}$) დაფრქვევის მეთოდით დაფენილი იყო ვერცხლი ან კადმიუმი.

თეთრი სინათლით დასხივება ხდებოდა იმ მხრიდან, რომელიც არ იყო დაფარული Ag-ით ან Cd-ით. დასხივების დროს ნიმუშების მაქსიმალური ტემპერატურა არ აღემატებოდა 300 K. შედეგები მოყვანილია ცხრილ 6-ში, საიდანაც ჩანს, რომ თერმული დიფუზიის კოეფიციენტთან შედარებით ფოტოსტიმულირებული დიფუზიის კოეფიციენტი მრავალი რიგით მეტია. ზემოთ მოყვანილი ექსპერიმენტული მონაცემები ამტკიცებს, რომ დიფუზური ნახტომის ელემენტარული აქტი განპირობებულია არა მოცემული ატომის კინეტიკური ენერჯის ფლუქტუაციით, არამედ მოცემული ატომის მეზობელ ატომებთან ბმის პოტენციური ენერჯის ფლუქტუაციით, რაც მიიღწევა მოცემულ ატომთან აუცილებელი რაოდენობის აკვაზების მოსვლით.

ცხრილი 6

GaAs-ის ეპიტაქსიურ სტრუქტურებში მოცულობითი დიფუზიის კოეფიციენტები

დიფუზია GaAs-ის ეპიტაქსიალურ ფირებში	ფოტოსტიმულირე ბული დიფუზიის კოეფიციენტი D , $\text{სმ}^2/\text{წმ}$	თერმული დიფუზიის კოეფიციენტი D , $\text{სმ}^2/\text{წმ}$	ნიმუშის ტემპერატურა T , $^{\circ}\text{C}$
Ag-ის დიფუზია ეპიტ. ფირებში 0,1	$4,8 \cdot 10^{-7}$	10^{-16} გამოთვლილი ექსტრაპოლირებით	300
Cd-ის დიფუზია ეპიტ. ფირებში 1 წმ	$6,6 \cdot 10^{-8}$	$\sim 10^{-39}$ გამოთვლილი ექსტრაპოლირებით	300

სპილენძის და ნიკელის თვითდიფუზიის კოეფიციენტები

მასალა	დიფუზიის კოეფიციენტი, მ ² /წმ, 393K
ნანო-Cu	$1,8 \cdot 10^{-17}$
კომპაქტური Cu	$1,3 \cdot 10^{-31}$
მარცვლოვანი Cu	$1,7 \cdot 10^{-19}$
ზედაპირზე Cu	$1,4 \cdot 10^{-16}$
ნანო-Ni	$1 \cdot 10^{-10}$
კომპაქტური Ni	$1,2 \cdot 10^{-25}$
მარცვლოვანი Ni	$3 \cdot 10^{-12}$

3.5.3. დიფუზიის და რეკრისტალიზაციის ფიზიკური ბუნება ნანომასალებში

ნანომასალებში დიფუზიის შესწავლამ აჩვენა, რომ დიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობა მათში გაცილებით მეტია, ვიდრე კომპაქტურ მყარ სხეულებში და წვრილ მარცვლოვან მასალებში (მასალა, რომელიც შედგება ნანონაწილაკებზე უფრო დიდი, მაგრამ მაინც მცირე ზომის მარცვლებისაგან) [50-56].

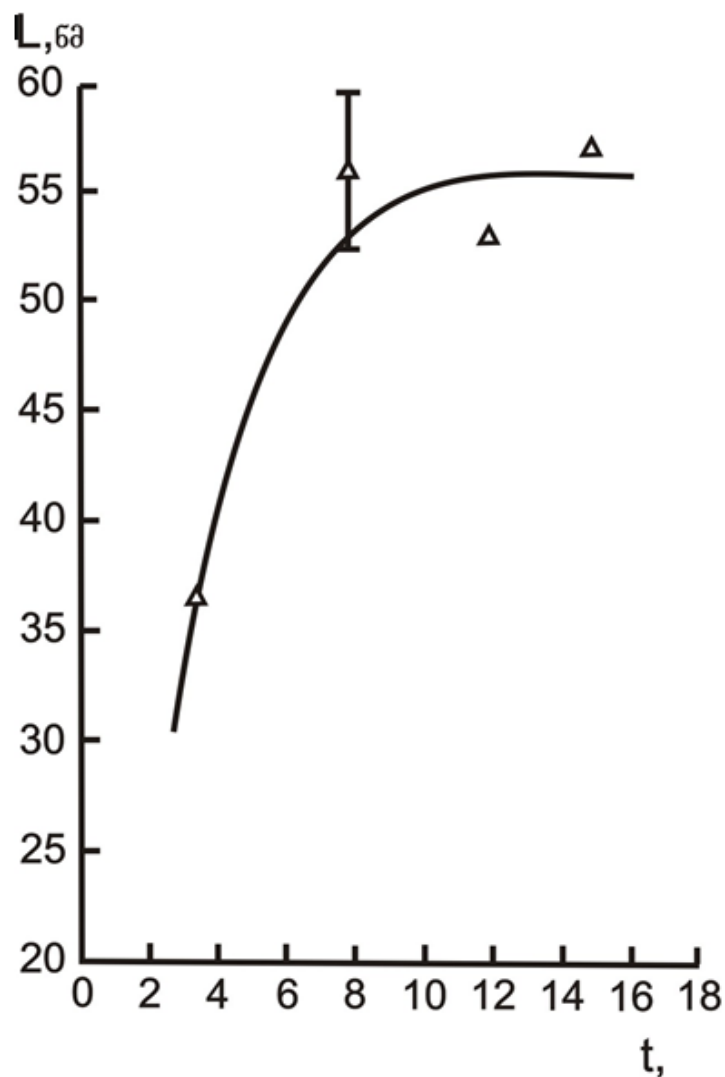
ცხრილ 7-ში მოყვანილია სხვადასხვა მეთოდით მიღებული Cu[53] და Ni[56] ერთნაირ პირობებში გაზომილი თვითდიფუზიის კოეფიციენტები ნანომასალებში, მარცვლოვან მასალებში და კომპაქტურ მყარ სხეულებში, საიდანაც ჩანს, რომ ნანომასალებში თვითდიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობა მეტია, იგივე ითქმის მინარევების დიფუზიის შემთხვევაში. მაგალითად, ოქროს დიფუზიის კოეფიციენტი ნიკელის ნანომასალაში $0,2 \div 0,3 T_{\text{დნ}}^{-2}$ -ზე ($T_{\text{დნ}}$ - დნობის ტემპერატურა) $14 \div 16$ რიგით მეტია, ვიდრე ჩვეულებრივ კომპაქტურ პოლიკრისტალურ Ni-ში. იგივეს აქვს ადგილი ზემოთ მოყვანილ კომპაქტურ მყარ სხეულებში ფოტოსტიმულირებული

დიფუზიის დროს. ფოტოსტიმულირების შედეგად დიფუზიის კოეფიციენტის [47-49] მნიშვნელობის ზრდა განპირობებულია სინათლით წარმოქმნილი დამატებითი აკვაზების გაჩენით. ამ ორი მოვლენის ასეთი მსგავსება ცალსახად მიგვითითებს იმაზე, რომ ნანონასალებში დიფუზიის კოეფიციენტის დიდი მნიშვნელობა განპირობებული უნდა იყოს ნანონაწილაკებში აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის არსებობით. აქედან გამომდინარე, დიფუზიის კოეფიციენტის ზემოთ მოყვანილ გამოსახულებაში აკვაზების კონცენტრაციისათვის უნდა ავიღოთ ეფექტური კონცენტრაცია, რომელიც რეალურ კონცენტრაციაზე მოცემული ტემპერატურისა და ნანონაწილაკის განსაზღვრული ზომისათვის γ -ჯერ მეტია $n_{\text{ფგ}} = \gamma n_0$. დიფუზიის კოეფიციენტის გამომსახველ ფორმულაში ამ კონცენტრაციის შეტანა დიფუზიის კოეფიციენტს გაზრდის γ^β -ჯერ.

ამრიგად, ზედაპირულ ფენაში მაგალითად, სილიციუმში ეფექტური კონცენტრაციის მომატება 10-ჯერ, გამოიწვევს თვითდიფუზიის კოეფიციენტის 10^6 -ჯერ გაზრდას, რადგან სილიციუმში თვითდიფუზიისათვის $\beta=6$. ეფექტური კონცენტრაციის ზრდა სუპერწრფივად არის დამოკიდებული ნანონაწილაკების ზომების შემცირებაზე და ტემპერატურის ზრდაზე, ამიტომ ერთიდაიგივე ნივთიერებაში დიფუზიის კოეფიციენტის მნიშვნელობები მინარევული ან საკუთარი ატომებისათვის მოცემულ ტემპერატურაზე ნანონაწილაკების შემთხვევაში მრავალი რიგით მეტი იქნება, ვიდრე ჩვეულებრივი ზომის ნიმუშებში.

ცნობილია, რომ რეკრისტალიზაცია განპირობებულია დიფუზიური ტიპის პროცესებით [57-59], ამიტომ მისი ფიზიკური ბუნება იგივეა, როგორც ზემოთ აღწერილი დიფუზიურისა. ნანონასალებში რეკრისტალიზაციის პროცესი, ე.ი. ნანონაწილაკების ზომების მომატება ტემპერატურის მომატებასთან ერთად მიმდინარეობს ბევრად უფრო სწრაფად, ვიდრე მარცვლოვან მასალებში. სიჩქარეთა სხვაობა მით მეტია, რაც მეტად განსხვავდება ნანონაწილაკებისა და მარცვლების ზომები

ერთმანეთისაგან[60, 61]. ნანომასალის რეკრისტალიზაციის სიჩქარე დროის მიხედვით თანდათან მცირდება ნანონაწილაკების რეკრისტალიზაციისას მათი ზომების ზრდის შედეგად და ხდება ისეთი, როგორც მარცვლოვან მასალებში (ნახ.32). ეს გამოწვეულია აკვაზების ეფექტურობის შემცირებით, ანუ ეფექტური კონცენტრაციის ჯერ შემცირებით და მერე გაქრობით. ნანომასალის ფოროვანობის გაზრდით იზრდება რეკრისტალიზაციის სიჩქარე[46, 62].



ნახ.32 ნანონაწილაკის ზომის ცვლილება დროის მიხედვით რეკრისტალიზაციის დროს

3.6 ნანომასალებში სითბური მოვლენების დამოკიდებულება

ნანონაწილაკების ზომებზე

ნანომასალების ისეთი მნიშვნელოვანი სითბური თვისებები, როგორც არის სითბოტევადობა და სითბოგამტარებლობა, დამოკიდებულია მათი შემადგენელი ნანონაწილაკების ზომებზე. ეს დაკავშირებული უნდა იყოს ნანონაწილაკების სტრუქტურული და ელექტრონული აღნაგობის სპეციფიკასთან [2, 40, 41]. ამ კავშირის დამყარება რთულდება იმის გამო, რომ სითბოგამტარობის და სითბოტევადობის ცნობილი მექანიზმები არ არის სრულყოფილი, რადგან ისინი ხშირად თვისობრივადაც კი ვერ ხსნიან ზოგიერთ ექსპერიმენტულ ფაქტს. შემოთავაზებული თეორიები [23] ნაწილობრივ აღწერენ ექსპერიმენტზე დამხერილ ტენდენციებს, მაგრამ მყარი სხეულების შესახებ იმ დროისათვის არსებული საკმაოდ მწირი ინფორმაციის გამო შეუძლებელი იყო უფრო ღრმად, ატომურ დონეზე, განვეითარებინათ წარმოდგენები ამ მოვლენების ფიზიკური ბუნების შესახებ. წარმოდგენებს ქიმიური ბმების შესახებ დიდი მნიშვნელობა აქვს მყარი სხეულის ფიზიკო-ქიმიური ბუნების გასაგებად. ამიტომ მათ მიერ ექსპერიმენტზე იმ დროისათვის დამხერილი ტენდენციების აღწერა დიდი მიღწევაა. ქვემოთ მოყვანილია იქნება წარმოდგენები სითბოტევადობის და სითბოგამტარებლობის ბუნებაზე მყარ სხეულებში ქიმიური ბმების თვისებების გათვალისწინებით, რომელიც საშუალებას იძლევა შეიქმნას ხსენებული მოვლენების განახლებული თეორია, რომელიც ცხადია არ არის სრულყოფილი და დასრულებული, მაგრამ გამოსადეგია ნანომასალებში ამ მოვლენების ფიზიკური ბუნების თვისობრივი გაგებისთვის.

3.6.1. სითბოტევადობის ფიზიკური ბუნება მყარ სხეულებში

ამჟამად დაგროვილია მონაცემები ყველა მარტივი მყარი სხეულის (მარტივი ეწოდება მყარ სხეულს, რომელიც შედგება ერთი სახის ქიმიური ელემენტისაგან) სითბოტევადობის ტემპერატურული დამოკიდებულების

შესახებ [42], საიდანაც ჩანს, რომ მათი უმრავლესობისათვის დიულონგის და პტის კანონი არ სრულდება, ხოლო აინშტაინის და დეზაის თეორიები რიგ შემთხვევებში რაოდენობრივად ვერ აღწერენ ამ დამოკიდებულებას [23]. ითვლება, რომ ეს იმის გამო ხდება, რომ ორივე თეორია ეყრდნობა ჰარმონიულ მიახლოებას, რასაც რეალურ კრისტალებში ადგილი არ აქვს, რადგან ატომები ერთმანეთთან დაკავშირებულია ქიმიური ბმებით და მათი განხილვა, როგორც დამოუკიდებელი ოსცილატორებისა სწორი არ არის. ანჰარმონიულობის განხილვამაც მნიშვნელოვანი შედეგი ვერ მოიტანა, მიუხედავად უამრავი თეორიული გამოთვლისა. სითბოტევადობის ბუნების დასადგენად სასურველია მხედველობაში იყოს მიღებული მყარი სხეულის ატომებს შორის ქიმიური ბმების თვისებები, რაზეც მიგვითითებს ის ფაქტი, რომ მარტივი მყარი სხეულების სითბოტევადობების მნიშვნელობებს ახასიათებთ ისეთივე პერიოდულობის კანონი, რომელსაც ემორჩილება ის ქიმიური ელემენტები [15, 43, 44], რომელთაგან შედგება ეს მყარი სხეულები. ეს კანონი არის მენდელეევის ქიმიური ელემენტების თვისებების პერიოდულობის ცნობილი კანონი [18]. სავარაუდოდ, ამ ორ პერიოდულობას შორის კორელაცია გამოწვეულია იმით, რომ ატომებს მათთვის დამახასიათებელი თვისებები გადააქვთ მყარ სხეულებში, რომლებსაც ისინი ერთმანეთთან ქიმიური ბმებით შეერთებისას წარმოქმნიან [12]. ქიმიური ბმები განსხვავებულია არა მარტო სხვადასხვა მყარ სხეულებში, არამედ ისინი თითოეულ მათგანში სხვადასხვანაირად იცვლება კონკრეტული ზემოქმედების (ტემპერატურა, წნევა, სინათლე) შედეგად. ამ ფაქტორების გათვალისწინება აუცილებელია მყარი სხეულების სითბოტევადობის ფიზიკური ბუნების დასადგენად [44]. ცნობილია, რომ სითბო, რომელიც მყარ სხეულს გადაეცემა, მთლიანად რომ იხარჯებოდეს მისი კინეტიკური ენერჯის გაზრდაზე, მაშინ ყველა მყარ სხეულს ექნებოდა სითბოტევადობის ერთნაირი მნიშვნელობა და იგი ტემპერატურის მომატებით არ შეიცვლებოდა. სინამდვილეში კი ყველა ქიმიურ ელემენტს მყარ მდგომარეობაში აქვს სითბოტევადობის სხვადასხვა მნიშვნელობა,

რომელიც ტემპერატურის მომატებით განსხვავებულად იზრდება. მაშასადამე, მყარ სხეულზე გადაცემული სითბოს ნაწილი გადადის პოტენციურ ენერგიაში. ამაზე მეტყველებს ის ფაქტი, რომ მყარი სხეულების სითბოტევადობა იმ ტემპერატურაზე, რა ტემპერატურაზეც ხდება ატომური სტრუქტურის ცვლილება, ყოველთვის აღემატება სითბოტევადობას, რომელ ტემპერატურაზეც ამ ცვლილებას ადგილი არ აქვს [15, 39, 42]. პოტენციური ენერგიის მატება კი განპირობებულია ატომთა ადგილმდებარეობის წანაცვლებით მათი ნორმალური მდებარეობიდან, რომელიც მათ აქვთ აბსოლუტურ ნულზე. ატომების მდებარეობის ცვლილება შეუძლებელია ქიმიური ბმის დეფორმაციის გარეშე. ქიმიური ბმის დეფორმაციის ქვეშ ვგულისხმობთ მისი სიგრძის და სივრცული განაწილების ცვლილებას რაიმე ზეგავლენის შედეგად OK-ზე არსებულ მდგომარეობასთან შედარებით. სითბოს გადაცემის დროს ამ დეფორმაციაზე დახარჯული ენერგია აკუმულირდება და შემდეგ მისი გაცივების დროს დეფორმაციის რელაქსირების შედეგად გამოიყოფა სითბოს სახით. დაბალ ტემპერატურებზე ქიმიური ბმა ძლიერია, ამიტომ მისი დეფორმირება გაძნელებულია და თითქმის მთელი გადაცემული სითბოს რაოდენობა გადადის ატომების რხევების კინეტიკურ ენერგიაში, რის გამოც სხეულის ერთი გრადუსით გასათბობად საჭიროა ნაკლები სითბო (სითბოტევადობა ნაკლებია), ვიდრე უფრო მაღალ ტემპერატურებზე, სადაც ქიმიური ბმები შესუსტებულია, მათი დეფორმაცია უფრო ადვილია და სხეულზე მიწოდებული ენერგია უფრო ადვილად გადადის პოტენციურ ენერგიაში, ვიდრე ატომების რხევის კინეტიკურ ენერგიაში (სითბოტევადობა დიდია).

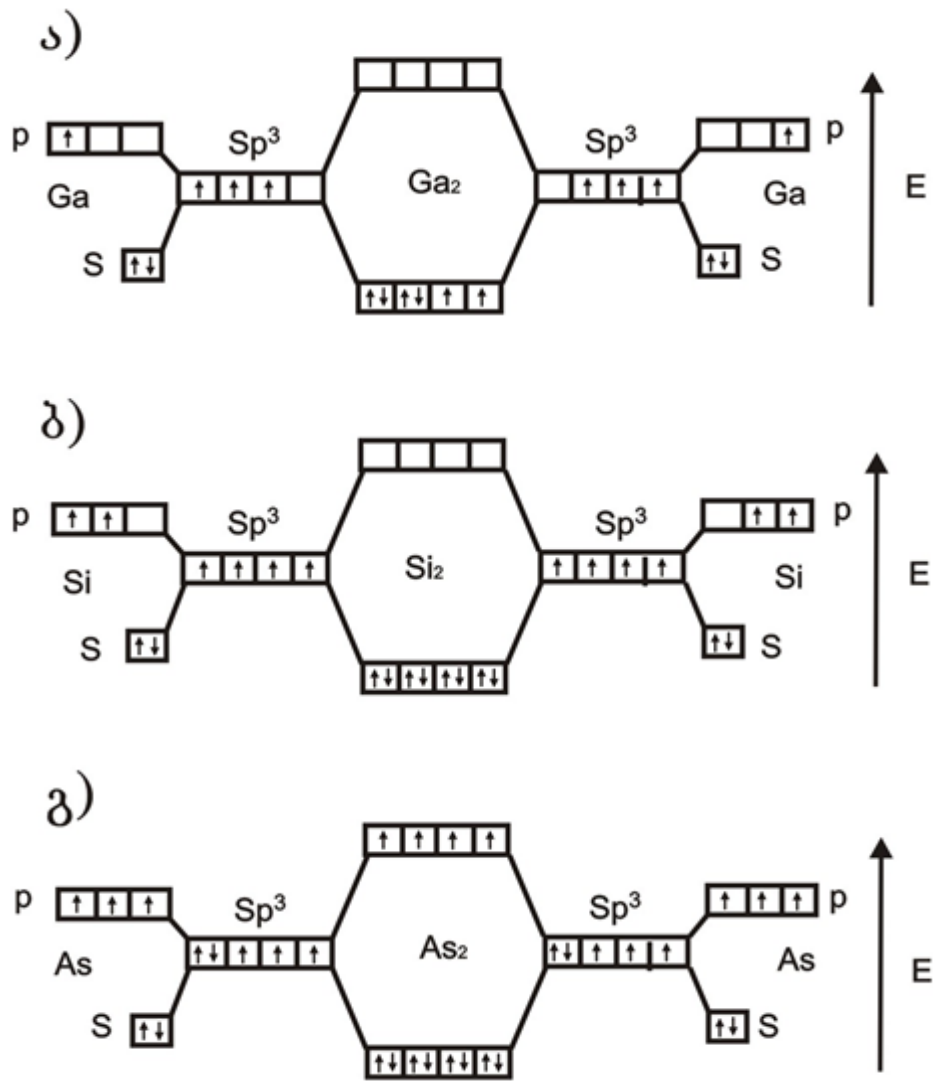
ცნობილია, რომ მყარი სხეულების ქიმიური ბმების თვისებები განპირობებულია მათი შემადგენელი ატომების ელექტრონული სტრუქტურებით[12]. მარტივი მყარი სხეულების სითბოტევადობების მნიშვნელობების პერიოდულობის კორელაცია მათი შემადგენელი ატომების თვისებების ცვლილებასთან მიგვითითებს იმაზე, რომ ამ ატომების ვალენტური ელექტრონების შრეების თვისებები, რომლებიც

წარმოქმნიან ქიმიურ ბმებს, მნიშვნელოვან როლს თამაშობს სითბოტევადობის ბუნებაში. ბუნებრივია ვივარაუდოთ, რომ რაც უფრო ძლიერად, ხისტად არიან დაკავშირებულნი ვალენტური ელექტრონები თავიანთ იონურ გულარებთან, მით ნაკლებია მყარ სხეულში ქიმიური ბმის დეფორმაციის ალბათობა და გადაცემული სითბოს მით მეტი წილი მიდის ატომების კინეტიკური ენერჯიის გაზრდაზე, ე.ი. ერთი გრადუსით გასათბობად მით ნაკლები სითბოა საჭირო და სითბოტევადობაც მით ნაკლებია. ვალენტური ელექტრონების იონურ გულართან კავშირის სიძლიერის გამოსახატად შეიძლება გამოყენებული იყოს მყარ სხეულში ერთი ატომის მოცულობაზე მოსული ვალენტური ელექტრონების ბმის საშუალო ენერჯიის სიმკვრივე E , რომელიც გამოითვლება, როგორც ვალენტური ელექტრონების იონიზაციის საშუალო ენერჯიის I -ს ფარდობა მყარი სხეულის ატომის V_a მოცულობაზე:

$$E=I/V_a, \text{ სადაც } (\bar{I} = \frac{\sum_{i=1}^n I_i}{n}) \text{ } | \text{ } i \text{ - არის } i \text{ - რი ვალენტური ელექტრონის}$$

იონიზაციის პოტენციალი, n - ვალენტური ელექტრონების რაოდენობა [15]. ეს სიდიდე ახასიათებს იზოლირებულ ატომს. ატომის ქიმიურ ბმაში მონაწილეობის გასათვალისწინებლად ამ სიდიდის გამოთვლის დროს აუცილებელია მხედველობაში იყოს მიღებული ვალენტური ელექტრონების განაწილება ქიმიური ბმის დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებს შორის, რაც განსაზღვრავს ენერჯიას მყარი სხეულის ელექტრონული სტრუქტურის აღწერის დროს. იგი განიხილება, როგორც დიდი მოლეკულა. განვიხილოთ უმარტივესი შემთხვევა, S და P ელექტრონების მქონე ელემენტების ჰიპოთეტური ორატომიანი მოლეკულის წარმოქმნა. მათ შორის ქიმიური ბმა ხორციელდება sp^3 ჰიბრიდიზაციის საშუალებით. ნახ.33 - დან ჩანს, რომ სამვალენტიანი და ოთხვალენტიანი ელემენტებისთვის ორივე ატომის სავალენტო ელექტრონი თავსდება მხოლოდ დამაკავშირებელ ორბიტალებზე, ხუთვალენტიანი ელემენტების შემთხვევაში უკვე ანტიდამაკავშირებელ

ორბიტალზე ორი ელექტრონია, ე. ი. ერთ ატომზე მოდის ერთი ანტიდამაკავშირებელი ელექტრონი, ექვს და შვიდ ვალენტური ელემენტებისათვის ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე იქნება შესაბამისად, ოთხი და ექვსი ელექტრონი, ე. ი. ერთ ატომზე მოსულია შესაბამისად, ორი და სამი. თითოეული ანტიდამაკავშირებელი ელექტრონი აბათილებს ერთი



ნახ.33 Ga_2 , Si_2 და As_2 ჰომოთეტური მოლეკულების შექმნის სქემატური გამოსახულება და ელექტრონების განაწილება მათ დამაკავშირებელ და ანტიდამაკავშირებელ დონეებზე

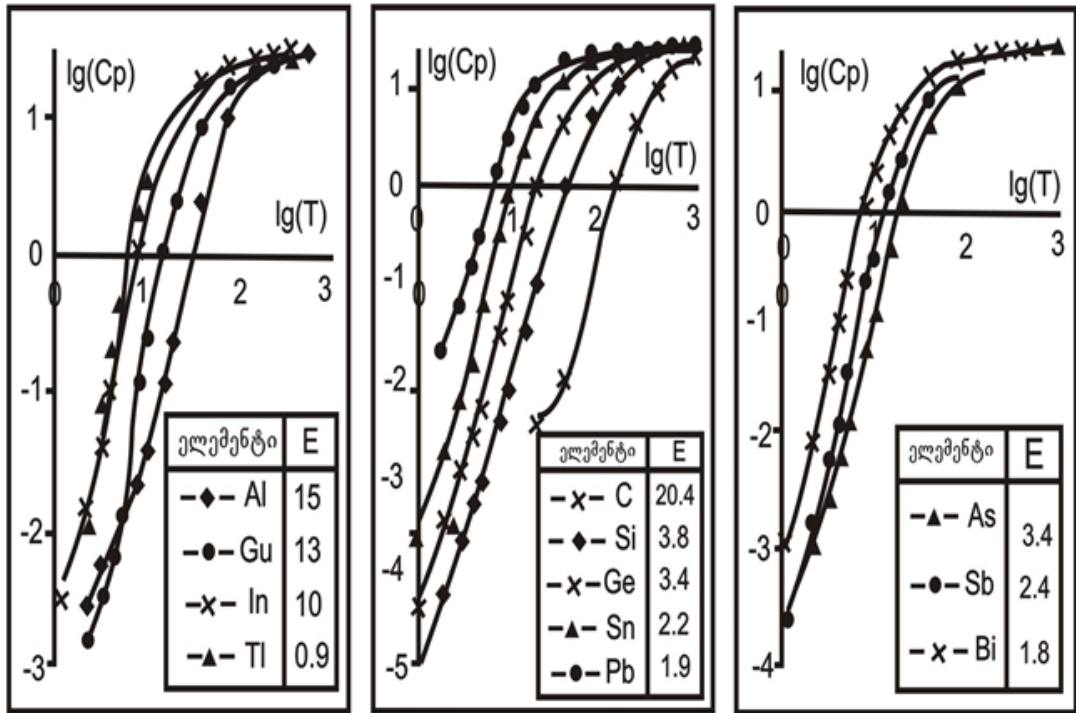
დამაკავშირებელი ელექტრონის ბმას და ასუსტებს ელექტრონებს შორის სიხისტეს იზოლირებულ ატომთან შედარებით. ამიტომ მყარი სხეულისათვის იონიზაციის საშუალო პოტენციალი I-ს გამოთვლის დროს

ეს შემდეგნაირად უნდა იყოს გათვალისწინებული: იონიზაციის პოტენციალების ჯამს უნდა გამოაკლდეს იონიზაციის საშუალო პოტენციალი I იმდენჯერ (α), რამდენი ანტიდამაკავშირებელი ელექტრონიც მოდის ერთ ატომზე და გაიყოს ისევ ვალენტური ელექტრონების რაოდენობა n -ზე. მენდელეევის პერიოდული სისტემის I, II, III და IV ჯგუფის ელემენტებისათვის $\alpha=0$, ხოლო V, VI და VII ჯგუფის ელემენტებისათვის შესაბამისად 1, 2 და 3-ს.

ნახ. 34-ზე მოყვანილია სითბოტევადობის - (C_p)-ს მნიშვნელობების ტემპერატურული დამოკიდებულება მესამე, მეოთხე და მეხუთე ჯგუფის ელემენტებისათვის და მათი შესაბამისი დამაკავშირებელი ელექტრონების ენერგიების სიმკვრივეების საშუალო მნიშვნელობები \bar{E} [43]. მათი შედარებიდან ჩანს, რომ რაც მეტია \bar{E} -ს მნიშვნელობები, მით ნაკლებია სითბოტევადობა, ე. ი. რაც უფრო ხისტადაა ბმული ვალენტური ელექტრონები თავის იონურ ბირთვთან, მით ნაკლებია ქიმიური ბმების დეფორმაციის ალბათობა და მით ნაკლები სითბო იხარჯება სხეულის ერთი გრადუსით გათბობისათვის, ე. ი. ნაკლებია სითბოტევადობა. ამ მსჯელობიდან გამომდინარე, მყარი სხეულის სითბოტევადობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე შეიძლება გამოვსახოთ შემდეგი ფორმულით: $C_p = C_{p0} e^{-U/kT}$, სადაც $C_{p0} = 3Nk$ არის მყარი სხეულის სითბოტევადობის მნიშვნელობა იმ შემთხვევაში, როცა ადგილი არა აქვს ქიმიური ბმის დეფორმაციას და მთელი გადაცემული სითბო გადადის რხევების ენერგიაში, ხოლო $\exp(-U/kT)$ არის ქიმიური ბმის დეფორმაციის ალბათობა, აქ k - ბოლცმანის მუდმივა, T -აბსოლუტური ტემპერატურა, U - დეფორმაციის აქტივაციის ენერგია, რომელიც უნდა კორელირებდეს \bar{E} -სთან. მათი ურთიდადამოკიდებულების ცხადი სახე ნაოვნია არ არის, მაგრამ მათი ურთიერთკავშირის შესახებ მეტყველებს შემდეგი ფაქტი:

აღმოჩნდა, რომ ნახ. 34-ზე მოყვანილი სითბოტევადობის ტემპერატურაზე დამოკიდებულების ექსპერიმენტული მრუდები აღიწერება სამ ტემპერატურულ ინტერვალში U -ს სამი სხვადასხვა

მნიშვნელობის მქონე ექსპონენციალური ფუნქციებით, მაგრამ ამ სამივე უზნისათვის ადგილი აქვს U -ს და \bar{E} -ს შორის შემდეგ თანაფარდობას: თუ ზემოთ მოყვანილი $C_p = f(T)$ ფორმულით პერიოდული სისტემის რომელიმე ელემენტისათვის მოცემული ჯგუფიდან, ექსპერიმენტული მრუდიდან



ნახ.34 სითბოტევადობების მნიშვნელობების C_p -ს ტემპერატურული დამოკიდებულების კორელაცია ენერჯის საშუალო მნიშვნელობებთან \bar{E} . პერიოდული სისტემის თითოეულ ჯგუფში რაც უფრო ნაკლებია \bar{E} -ს მნიშვნელობა, მით უფრო სწრაფად მატულობს C_p -ს მნიშვნელობა ტემპერატურის ზრდისას.

განვსაზღვრავთ U -ს მნიშვნელობას და ამავე ჯგუფის სხვა ელემენტისათვის ავიღებთ U_2 -ს მნიშვნელობას იმდენად მეტს ან ნაკლებს, რამდენადაც მათი \bar{E} -ს მნიშვნელობები მეტია ან ნაკლებია ერთმანეთზე და ამ U_2 -ს მნიშვნელობას ჩავსვამთ $C_p = f(T)$ ფორმულაში, მაშინ ამ გზით გამოთვლილი $C_p = f(T)$ მრუდი სათანადო ტემპერატურულ ინტერვალში დაემთხვევა ექსპერიმენტულს. ზემოთ მოყვანილი მსჯელობა სამართლიანია

პერიოდული სისტემის ყველა ელემენტისათვის მათი ვალენტობის გათვალისწინებით.

3.6.2. ნანომასალებში სითბოტევადობის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე

ნანომასალების სითბოტევადობა იზრდება მისი შემადგებელი ნანონაწილაკების ზომების შემცირებასთან ერთად(ცხრილი 8).

ნახ.35-ზე მოყვანილია ნანონაწილაკებისგან და მარცვლებისგან შედგენილი მასალების სითბოტევადობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე; ჩანს, რომ 400K-მდე ნანომასალის სითბოტევადობა მეტია, შემდეგ კი უტოლდება მარცვლოვანი მასალის სითბოტევადობას[2]. ამ ექსპერიმენტული ფაქტების ასახსნელად გამოვიყენოთ ზემოთ ჩამოყალიბებული ახალი წარმოდგენები მყარი სხეულების სითბოტევადობის ფიზიკური ბუნების შესახებ.

ცხრილი 8

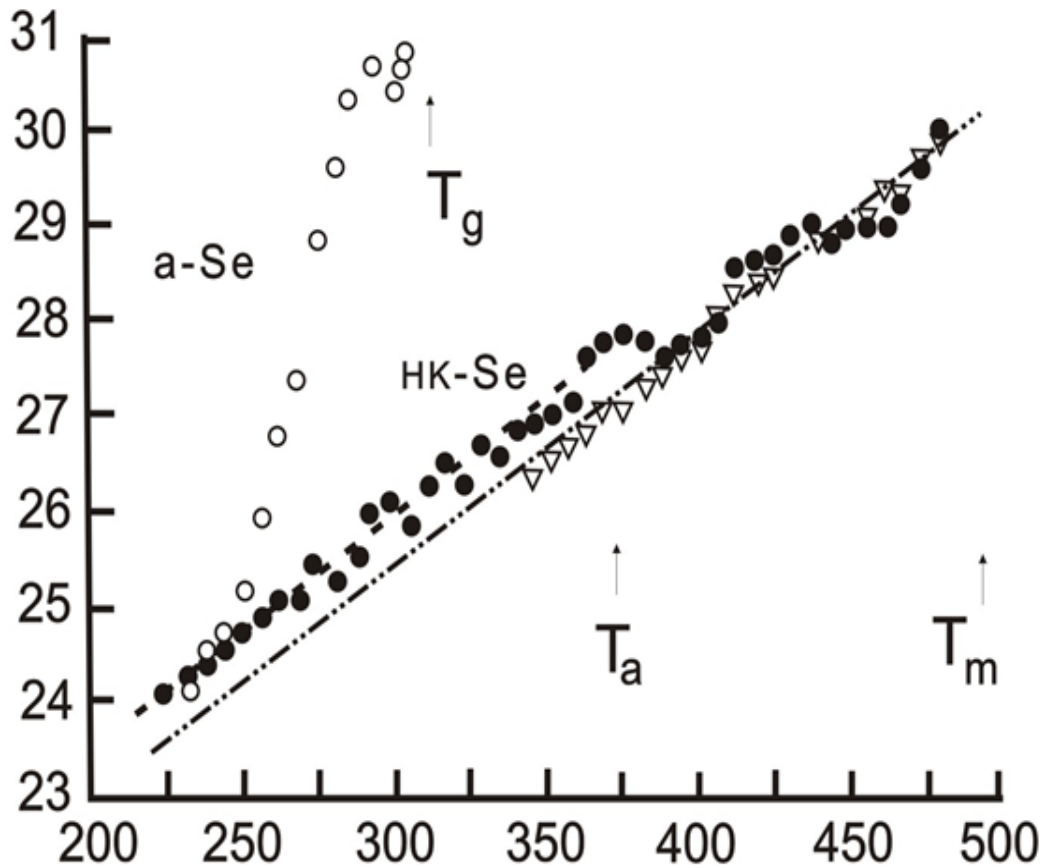
ნანომასალებსა და მსხვილმარცვლოვანი მასალების სითბოტევადობების მნიშვნელობების შედარება

ნივთიერება	ნანონაწილაკის ზომა L, ნმ	სითბოტევადობა C_p (ჯ/მოლი)	მსხვილმარცვლოვანი > 100 ნმ
Pd	6	37	25
Cu	8	26	24
Se	10	24,5	24,1
Ru	15	28	23

კერძოდ, ის რომ, რაც ნაკლებია ვალენტური ელექტრონების ზმის სიხისტე მათ იონურ გულართან, მით მეტია სითბოტევადობის მნიშვნელობა და რომ მყარ სხეულებში ქიმიური ზმის სიხისტე მცირდება ანტიდამაკავშირებელი ელექტრონების გაჩენით.

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ ნანომასალებში ნანონაწილაკების გარკვეული ზომებიდან დაწყებული წარმოიქმნება აკვაზების ეფექტური

C_p



ნახ.35 სითბოტევადობის ტემპერატურული დამოკიდებულება

○ - ნანონაწილაკებისაგან შედგენილ მასალაში

● - მსხვილ მარცვლოვან მასალაში

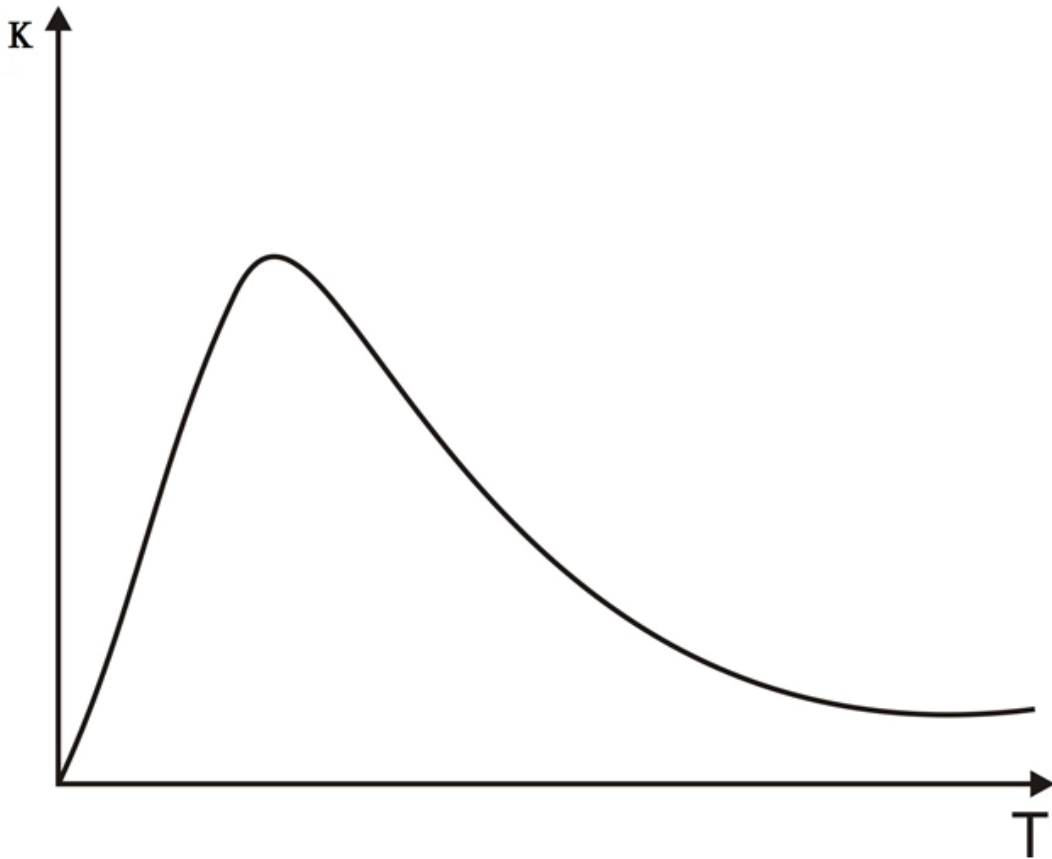
კონცენტრაცია, რომელიც ასუსტებს ქიმიურ ბმებს, რაც ასევე ნიშნავს ქიმიური ბმის სიხისტის შემცირებას და ნანონაწილაკების ზომების შემცირებასთან ერთად ეს კონცენტრაცია იზრდება. ნანონაწილაკებში ეფექტური კონცენტრაციის გამო ქიმიური ბმის სიხისტის შემცირება იწვევს ქიმიური ბმების დეფორმაციის ალბათობის ზრდას და როგორც შედეგი, სითბოტევადობის მნიშვნელობის მატებას. ნანომასალის და მარცვლოვანი მასალის სითბოტევადობის ერთნაირი მნიშვნელობა 400K-ის ზემოთ იხსნება

იმით, რომ ამ ტემპერატურის მიღწევისას ნანონაწილაკების ზომები რეკრისტალიზაციის გამო ისე იზრდება და ეფექტური კონცენტრაცია იმდენად მცირდება, რომ იგი უკვე გავლენას ვეღარ ახდენს ქიმიურ ბმეზე.

3.6.3 სითბოგამტარობის ფიზიკური ბუნება მყარ სხეულებში

სითბოგამტარობა მყარ სხეულებში რეალიზდება ატომური და ელექტრონული ქვესისტემებით და მისი კოეფიციენტი გამოისახება ფორმულით $K = C_p v l / 3$, სადაც l -არის ფონონის ან ელექტრონის თავისუფალი განარბენი, ხოლო v -ბგერის სიჩქარე მყარ სხეულში მესერული სითბოგამტარობის შემთხვევაში ან ელექტრონის სიჩქარე ელექტრონული სითბოგამტარებლობის დროს [15, 42]. აქედან გამომდინარე მიღებულია, რომ მოცემული ნივთიერების K -ს (სითბოგამტარობის კოეფიციენტის) ცვლილება განპირობებულია თავისუფალი განარბენის ცვლილებით, რაც განპირობებულია ფონონების, ან ელექტრონების გაბნევის სხვადასხვა მექანიზმით. ამიტომ მეცნიერები, რომლებიც ცდილობენ დაადგინონ სითბოგამტარობის ფიზიკური ბუნება, იკვლევენ გაბნევის მექანიზმებს. მიუხედავად მრავალი თეორიული შრომისა, სითბოგამტარობის ფიზიკური ბუნება მყარ სხეულებში ჯერ-ჯერობით სრულყოფილად დადგენილი არ არის. სითბოგამტარობის ტემპერატურაზე დამოკიდებულებას აქვს რთული სახე: დაბალ ტემპერატურებზე ის ტემპერატურის მომატებით სწრაფად იზრდება და შემდეგ არათანაბარი სიჩქარით მცირდება (ნახ. 36). სხვადასხვა მარტივ მყარ სხეულებში ამ ცვლილების ტემპერატურული არე და სიჩქარე სხვადასხვაა და არსებული წარმოდგენებით სრულყოფილად ვერ აიხსნება. ეს იმაზე მიუთითებს, რომ მოყვანილი უნდა იყოს განახლებული წარმოდგენები, რომლებზე დაყრდნობითაც უფრო სრულყოფილად იქნება შესაძლებელი ამ რთული ფიზიკური მოვლენის აღწერა.

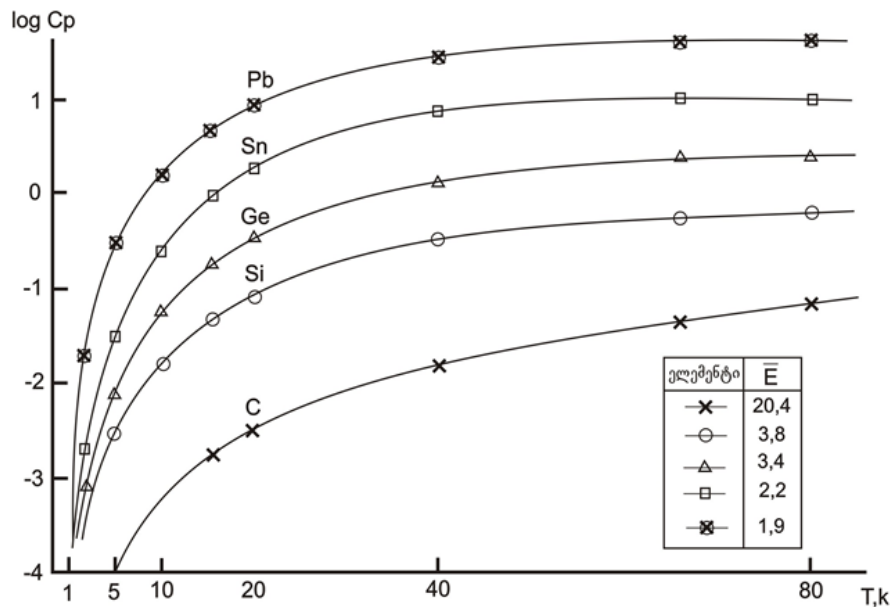
სითბოგამტარობა მყარ სხეულებში ხორციელდება ერთი ატომიდან მეორეზე ენერგიის გადაცემის საშუალებით. ატომები კი ერთმანეთთან



ნახ.36 მყარი სხეულის სითბოგამტარობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

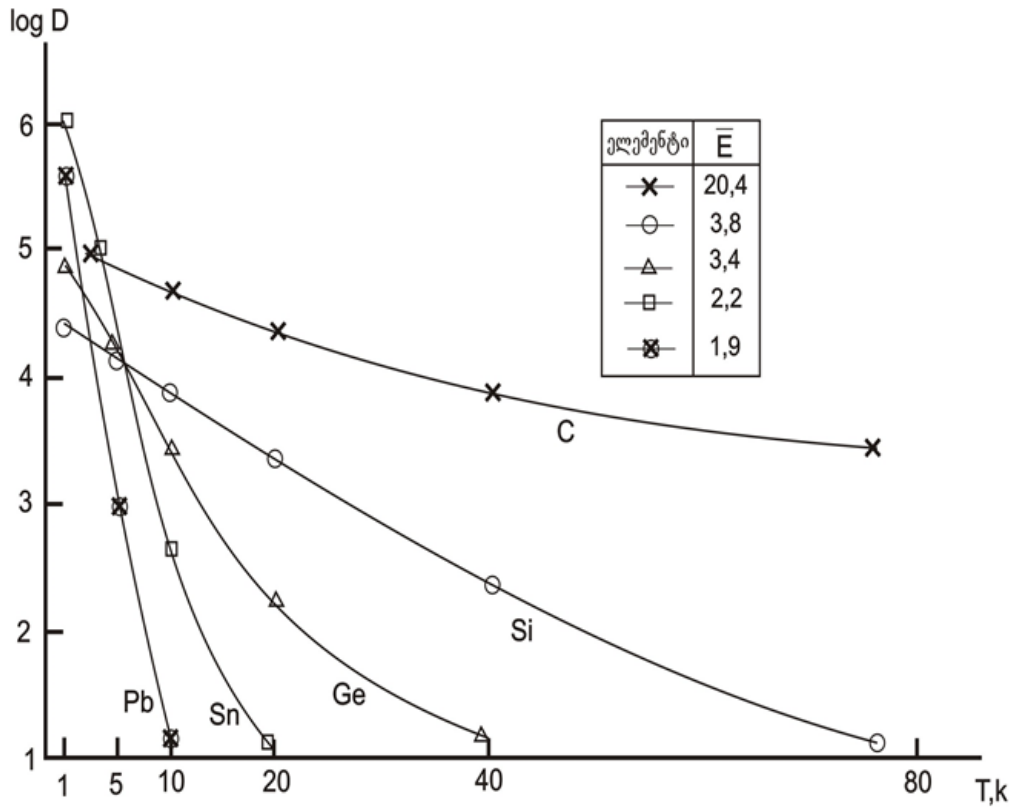
დაკავშირებულნი არიან ქიმიური ბმებით, ამიტომ მათი როლი სითბოგამტარობის პროცესში მნიშვნელოვანი უნდა იყოს. ზემოთ განხილული იყო ქიმიური ბმის დეფორმაციის როლი სითბოტევადობის ფიზიკურ ბუნებაში. ქიმიური ბმის დეფორმაციის დასახასიათებლად განვიხილეთ ვალენტური ელექტრონების ბმის საშუალო ენერგიის სიმკვრივე \bar{E} , რომელსაც ვუწოდებთ ქიმიური ბმის სიხისტე. იგი კარგ კორელაციაშია სითბოტევადობების მნიშვნელობებთან. კერძოდ, რაც ნაკლებია სიხისტე, მით სწრაფად იზრდება C_p -ს მნიშვნელობა, მაგრამ სითბოგამტარობის \bar{E} -სთან შედარება გამწვანებულია, რადგან სხვადასხვა ელემენტების სითბოტევადობების მნიშვნელობების თანაფარდობა სხვადასხვა ტემპერატურულ არეებში ზოგჯერ დიამეტრალურად განსხვავდება. ერთ ტემპერატურულ არეში ერთი ელემენტის სითბოტევადობის მნიშვნელობა შეიძლება იყოს მეტი მეორისაზე, სხვა ტემპერატურულ არეში კი, პირიქით. მაგალითად, $1 \div 130K$ ინტერვალში

სპილენძის სითბოგამტარობა მეტია, ვიდრე ვერცხლის და მხოლოდ უფრო მაღალ ტემპერატურებზე თანაფარდობა იცვლება საპირისპიროზე. სითბოგამტარობის კოეფიციენტი განისაზღვრება ორი მოვლენით: სითბოტევადობით C_p და სითბოს გადატანით, რომელიც აღიწერება დიფუზიის კოეფიციენტით $D=vl/3$, ამ სიდიდეს აგრეთვე ტემპერატურაგამტარობას უწოდებენ. ორივე ამ მოვლენის ტემპერატურული დამოკიდებულება ერთმანეთის საპირისპირო ხასიათისაა. აბსოლუტური 0K-დან ტემპერატურის მომატებით C_p მნიშვნელობა იზრდება (ნახ. 37), ხოლო D -სი კი კლებულობს თავისი



ნახ.37 პერიოდული სისტემის IV ჯგუფის ელემენტების სითბოტევადობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

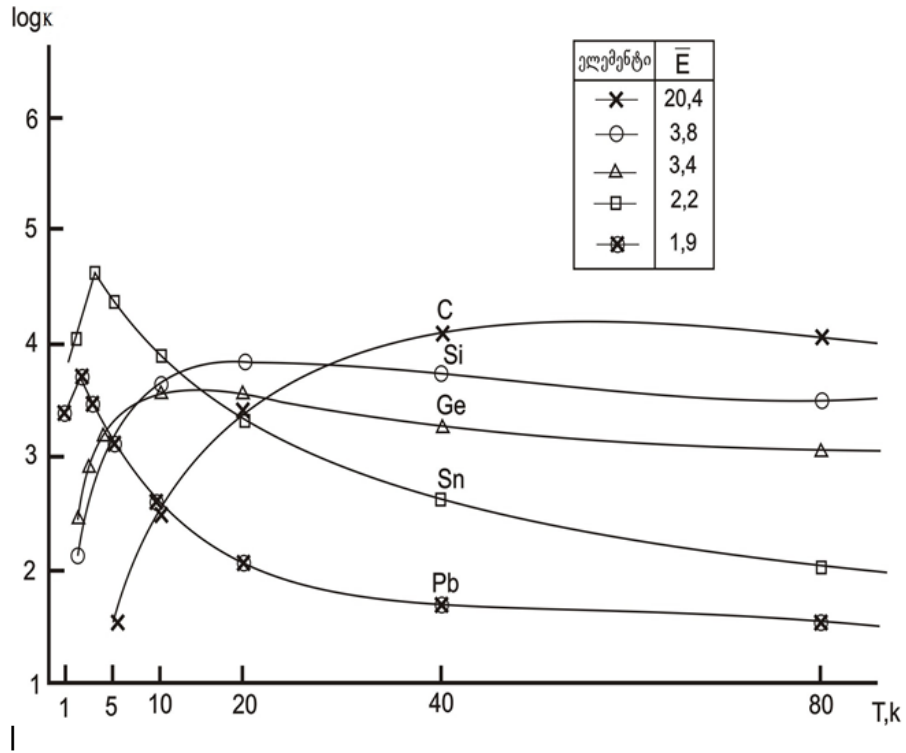
მაქსიმალური მნიშვნელობიდან, რომელიც ყველაზე დაბალ ტემპერატურაზე არის დაფიქსირებული (ნახ. 38), ხოლო სითბოგამტარობის კოეფიციენტი, რომელიც მათ ნამრავლს წარმოადგენს ($K = C_p D$), ჯერ იზრდება და მერე მცირდება (ნახ. 36). სხვადასხვა ნივთიერებებისათვის C_p ,



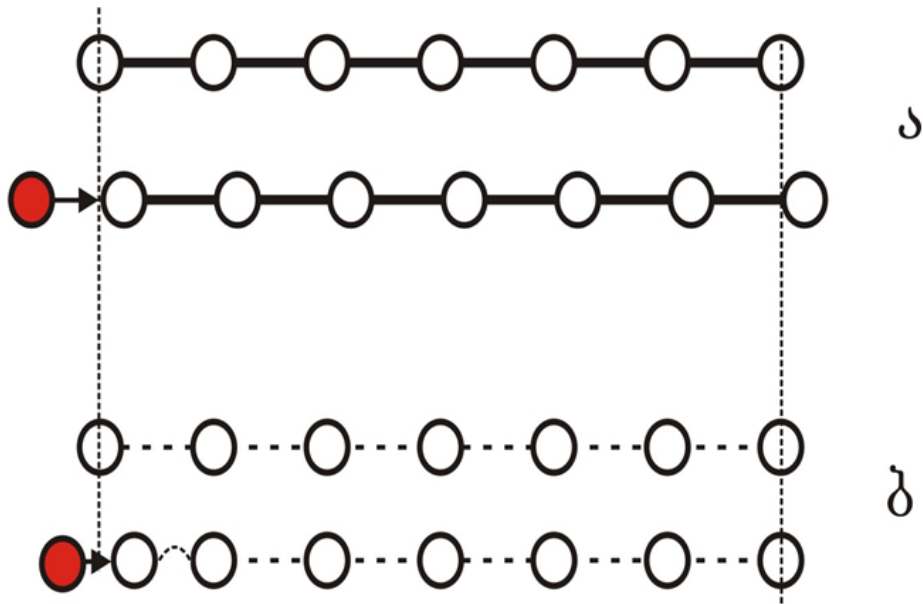
ნახ.38 პერიოდული სისტემის IV ჯგუფის ელემენტების ტემპერატურაგამტარობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

D და K ცვლილების სიჩქარეები სრულიად გზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ C_p -ს მნიშვნელობის ტემპერატურასთან ერთად ზრდა განპირობებულია ქიმიური ბმების დეფორმაციით და რხევების ინტენსივობის მატებით, ტემპერატურის ცვლილების მთელ არეში C_p -ს ანსხვავებულია, მაგრამ ისინი კორელირებენ ქიმიური ბმების სიხისტესთან. ზემოთ ნაჩვენები იყო, რომ C_p -ს მნიშვნელობის ტემპერატურასთან ერთად ზრდა განპირობებულია ქიმიური ბმების დეფორმაციით და რხევების ინტენსივობის მატებით, ტემპერატურის ცვლილების მთელ არეში C_p -ს მნიშვნელობა იზრდება და გადის ნაჯერობაზე (ნახ.37). D-ს შემცირება კი გამოწვეულია მხოლოდ ქიმიური ბმების დეფორმაციით, ანუ სიხისტის შემცირებით, D-ს შემცირება ტემპერატურის მომატებით, რომ ქიმიური ბმების დეფორმაციის ალბათობის ზრდით არის გამოწვეული იქიდანაც ჩანს, რომ ტემპერატურის მომატებით იზრდება

ტემპერატურული გაფართოების კოეფიციენტი [15], რაც ცალსახად ქიმიური ბმების დაგრძელებით (დეფორმაციით) არის გამოწვეული. ე.ი. C_p -ს მნიშვნელობის ზრდა დასაწყისში უფრო დიდია, ვიდრე D -ს შემცირება, ამიტომ K - ძალზე დაბალ ტემპერატურებზე ჯერ იზრდება და შემდეგ მცირდება (ნახ. 39). ე.ი. K -ს მნიშვნელობის კლება განპირობებულია D -ს შემცირებით. აღმოჩნდა, რომ პერიოდული სისტემის მოცემული ჯგუფის ელემენტისთვის რაც ნაკლებია \bar{E} -ს მნიშვნელობა, მით უფრო დაბალ ტემპერატურაზე იწყება D -ს შემცირება, მიმდინარეობს უფრო სწრაფად და მიიღწევა K -ს მაქსიმუმი (ნახ.39). ეს კორელაცია სამართლიანია ელემენტების პერიოდული სისტემის ყველა ჯგუფისათვის [42, 43]. ზემოთ მოყვანილი მსჯელობიდან გამოდის, რომ \bar{E} -ს ენიჭება გადამწყვეტი როლი სითბოგამტარობის პროცესში. მაგრამ \bar{E} მოცემული ელემენტისათვის მუდმივი სიდიდეა, ხოლო C_p , D და K ტემპერატურის მიხედვით იცვლება. \bar{E} ცალკეული ატომის მახასიათებელი სიდიდეა, რომელიც იცვლება, როცა ატომი ქიმიურ ბმას წარმოქმნის. ქიმიური ბმები კი სუსტდება ტემპერატურის მომატებით. აქედან გამომდინარე შეიძლება დავასკვნათ, რომ D -ს და K -ს მნიშვნელობების შემცირება ტემპერატურის ზრდასთან ერთად განპირობებულია ქიმიური ბმების სიხისტის შესუსტებით. აუცილებელია დავადგინოთ სიხისტის ტემპერატურაზე დამოკიდებულების მექანიზმი. საილუსტრაციოდ განვიხილოთ სითბოს გადაცემის უმარტივესი მოდელი. წარმოვიდგინოთ ორი მყარი სხეული, შედგენილი ატომების ჯაჭვის სახით, ანუ ერთნაირი ხაზოვანი წყობისაგან, დაუშვათ, რომ ერთში ისინი დაკავშირებულნი არიან აბსოლუტური სიხისტის მქონე ქიმიური ბმებით, მეორეში ძალიან მცირე სიხისტის ბმებით (ნახ. 40). გადასაცემი სითბო წარმოვიდგინოთ ატომის სახით, რომელიც ეჯახება წყობის განაპირა ატომს. პირველ შემთხვევაში იმპულსი გადაეცემა ჯაჭვის (წყობის) ბოლო ატომს დაჯახების დროის განმავლობაში, ე. ი. ძალზე



ნახ.39 პერიოდული სისტემის IV ჯგუფის ელემენტების სითბოგამტარობის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე



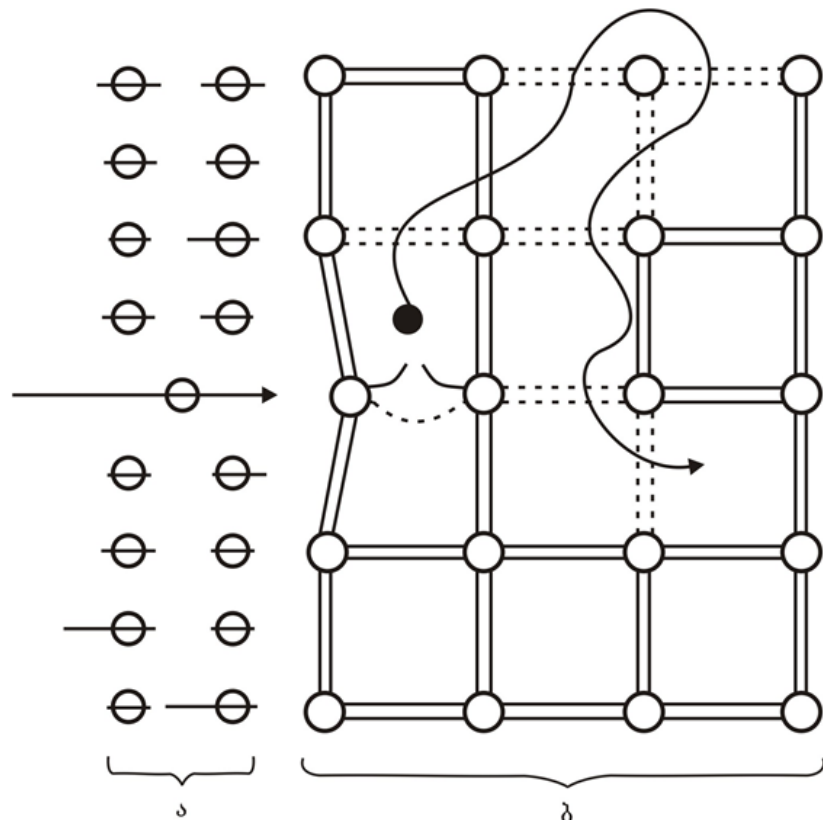
ნახ.40 მყარი სხეულის წარმოდგენა ატომების ერთგანზომილებიანი წყობის საშუალებით.

- ა) აბსოლუტური სიხისტის მქონე ქიმიური ბმის შემთხვევა
- ბ) ძალზე დაბალი სიხისტის მქონე ქიმიური ბმის შემთხვევა

სწრაფად. მეორე შემთხვევაში ძალიან ნელა, რადგან მთელი ენერგია დაიხარჯება და დრო წავა პირველი და მეორე ატომის ქიმიური ბმების დეფორმაციაზე და ა. შ. პირველ შემთხვევაში ადგილი ექნება უსასრულო სითბოგამტარობას, მეორე შემთხვევაში მას თითქმის არ ექნება ადგილი. ეს ორი ზღვრული მაგალითი გვიჩვენებს, რომ ქიმიური ბმის დეფორმაციას უნდა ჰქონდეს დიდი მნიშვნელობა სითბოგამტარობის პროცესში.

ითვლება, რომ ატომებს შორის ქიმიური ბმების შესუსტების მიზეზი არის ატომების რხევების კინეტიკური ენერგიის მატება ტემპერატურის გაზრდის შედეგად, მაგრამ განახლებული მიდგომების თანახმად, ქიმიური ბმების შესუსტება ხორციელდება აკვაზების გაჩენით, რომლებიც შეიძლება წარმოქმნილი იყოს ნებისმიერი გზით: ტემპერატურით (რხევებით), სინათლით, წნევით და ა. შ. განვიხილოთ სითბოგამტარობის დროს წარმოქმნილი აკვაზების მოქმედების მოდელი D-ზე და K-ს ტემპერატურულ ცვლილებაზე.

სითბოს გადაცემის პროცესის დროს სითბოს წყაროს ატომები მათი კინეტიკური ენერგიის ფლუქტუაციის გამო სითბოს გადამცემ ნივთიერებას (საკვლევ ნიმუშს) ეჯახებიან სხვადასხვა ენერგიით (ნახ. 41). მათ შორის განსაზღვრული ალბათობით აღმოჩნდება ატომი ისეთი ენერგიით, რომელიც საკმარისია სითბოს გადამცემ მასალაში გადაიყვანოს ელექტრონი დამაკავშირებელი ზონიდან ანტიდამაკავშირებელ ზონაში, ანუ წარმოქმნას აკვაზი, რომელიც ასუსტებს ქიმიურ ბმას, იმ ატომისა, რომელთანაც ის აღმოჩნდება. მეტალების შემთხვევაში ელექტრონების გადასვლა არა მარტო ანტიდამაკავშირებელ ზონაში, არამედ ფერმის დონიდან მის მაღლა მყოფ დამაკავშირებელ დონეებზე უკვე ამცირებს ქიმიურ ბმას. (ამით არის გამოწვეული, რომ მეტალებში D-ს მნიშვნელობის ვარდნა უფრო სწრაფად მიმდინარეობს, ვიდრე ნახევარგამტარში და დიელექტრიკებში. მაგალითისათვის შევადაროთ Sn და Pb-ი Ge-ს და Si-ი C-ს (ნახ.38). დაბალ ტემპერატურებზე დიელექტრიკებში აკვაზის წარმოშობის ალბათობა ძალზე მცირე, მაგრამ მაინც სასრული სიდიდეა. მიუხედავად იმისა, რომ ამ



ნახ.41 სითბოს გადაცემის აქტის მოდელის სქემატური გამოსახულება.
 ა) სითბოს წყაროს ატომები. ჰორიზონტალური ხაზების სიგრძე სიმბოლურად გამოხატავს მათი კინეტიკური ენერჯის სიდიდეს.
 ბ) სითბოგამტარის მასალის კრისტალური მესერი და მასში წარმოქმნილი აკვაზის მოძრაობის შესაძლო ტრაექტორია

ტემპერატურებზე აკვაზების კონცენტრაციის მნიშვნელობა ნულთან ახლოა, ისინი მაინც თამაშობენ მნიშვნელოვან როლს, რადგან მათი მოქმედების არე ძალზე მცირეა და ამ არის მოცულობიდან გამოთვლილი ეფექტური კონცენტრაცია საკმარისი იქნება, რომ შეცვალოს ამ არის ქიმიური ბმების სიხისტე (ნახ. 41). კინეტიკური ენერჯის ფლუქტუაციით წარმოქმნილი ერთი აკვაზი უკვე ცვლის ამა თუ იმ ატომს (რომელსაც დაეჯახა სითბოს წყაროს ატომი) და მის მეზობელს შორის ქიმიური ბმის სიხისტეს, მაგრამ აკვაზი თავისი არსებობის დროის განმავლობაში რეკომბინაციამდე აღმოჩნდება გაცილებით მეტ ატომებთან ზედაპირულ არეში და შეამცირებს მათ შორის სიხისტეს.

შევაფასოთ ქიმიური ბმის ენერჯის სიხისტის შემცირება ტემპერატურის მატებით. ნაჩვენები იყო, რომ ატომებს შორის ქიმიური ბმის ენერჯია სუსტდება მათ შორის აკვაზის გაჩენის შედეგად. ერთი აკვაზის გაჩენის ალბათობაა $W = Ae^{-E_g/kT}$, სადაც E_g არის სითბოს გამტარი, საკვლევი მასალის აკრძალული ან ფსევდოაკრძალული ზონა, ხოლო T - სითბოს წყაროს ტემპერატურა, k -ბოლცმანის მუდმივა. თუ ერთი აკვაზი ქიმიური ბმის ენერჯიას ამცირებს $E_g/2$ სიდიდით, მაშინ ატომის V_α მოცულობაზე მოსული შემასუსტებელი ენერჯის სიმკვრივე იქნება $E_g/2V_\alpha$, რომლითაც შემცირდება \bar{E}_0 , ამ შემთხვევაში $\bar{E} = E_0 - E_g/2V_\alpha Ae^{-E_g/kT}$.

გავარკვიოთ, თუ როგორ არის \bar{E} დაკავშირებული D -ს პარამეტრებთან. დავუშვათ $D = vl$, სადაც v არის რხევის საშუალო სიჩქარე, l -ატომთა შორის მანძილი. აბსოლუტური სიხისტის დროს l_0 არ იცვლება (ნახ. 40), ხოლო ქიმიური ბმის დეფორმაციის დროს იგი მცირდება. დეფორმაციის ალბათობა შეიძლება გამოვხატოთ $\exp(-(\bar{E}_0 - \bar{E})/(kT)^l)$, სადაც $(kT)^l$ არის ერთი ატომის მოცულობაზე მოსული კინეტიკური ენერჯის სიმკვრივე $(kT)^l = kT/V$, მაშინ $D = vl_0 e^{-(\bar{E}_0 - \bar{E})/kT}$, საიდანაც ჩანს, რომ D ძლიერ არის დამოკიდებული \bar{E} -ს ცვლილებაზე.

ამგვარად გამოდის, რომ აკვაზების წარმოქმნით მცირდება ტემპერატურაგამტარობა და შესაბამისად, სითბოგამტარობაც.

3.6.4 სითბოგამტარობა ნანომასალებში

ნანომასალებში სითბოტევადობის შესახებ მონაცემები ერთმანეთისაგან განსხვავდება იმისდა მიხედვით, თუ რა ტექნოლოგიით არის დამზადებული ნანომასალა, რა ზომებისაა მისი ნანონაწილაკები და მთელი ნანომასალის რა ნაწილს იკავებენ ისინი. მაგრამ ამ ექსპერიმენტულ მონაცემს საერთო აქვს ის, რომ სითბოგამტარობის მნიშვნელობები ნანომასალებში ნაკლებია, ვიდრე იგივე ქიმიური შემადგენლობის კომპაქტურ მასალაში. იგივე ახასიათებს ტემპერატურაგამტარობას,

მაგალითად, Ag-ს ნანომასალის შემადგენელი ნანონაწილაკების ზომებით 20-47 ნმ, ტემპერატურაგამტარობის მნიშვნელობა გაცილებით ნაკლებია, ვიდრე კომპაქტური ვერცხლის [46]. ამ ფაქტების ახსნა შეიძლება ნანონაწილაკებში არსებული აკვაზების ეფექტური კონცენტრაციის გამოყენებით. აკვაზების ეფექტური კონცენტრაცია ნანონაწილაკებში ასუსტებს ქიმიურ ბმებს, ანუ მათ სიხისტეს მეტად, ვიდრე ნანონაწილაკის ზომის მქონე კომპაქტური მასალის მოცულობაში რეალური კონცენტრაცია. ქიმიური ბმის სიხისტის შემცირებით კი, როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, მცირდება ტემპერატურაგამტარობა და სითბოგამტარობა.

დასკვნა

1. კრისტალურ მესერში ატომების გადაადგილების მექანიზმის აღწერისას ქიმიური ბმების ანუ ფაქტიურად ელექტრონული სტრუქტურის ლოკალურ არეში ცვლილებაზე დაფუძნებული სადისერტაციო ნაშრომში გაანალიზებული ახალი მიდგომის გამოყენებით შესაძლებელია ნანონაწილაკების და ნანომასალების ფიზიკური თვისებების მათ ზომებზე დამოკიდებულების არაწინააღმდეგობრივი თვისობრივი ახსნა.
2. ზონური სტრუქტურა აღწერს ნივთიერების ქიმიურ და ფიზიკურ თვისებებს. ანტიდამაკავშირებელი (გამტარობის) ზონაში გადასული ელექტრონი და დამაკავშირებელ (ვალენტურ) ზონაში გაჩენილი ხვრელი, წარმოადგენენ ანტიდამაკავშირებელ კვაზინაწილაკებს, ისინი ასუსტებენ იმ ატომების ქიმიურ ბმებს, რომლებთანაც აღმოჩნდებიან მესერში სითბური გადაადგილებისას. ნანონაწილაკების ზონური სტრუქტურის სპეციფიკა აღწერს მათი მახასიათებელი თვისებების დამოკიდებულებას ზომებზე; რაც უფრო მცირეა ნანონაწილაკი, მით უფრო ძლიერია ზომითი ფაქტორის გავლენა როგორც ზონურ სტრუქტურაზე, ისე აკვაზების წარმოქმნასა და კონცენტრაციაზე და შესაბამისად, ფიზიკურ თვისებებზე.
3. კონდენსირებულ გარემოში თერმული ან სხვა ზემოქმედების შედეგად აკვაზების გაჩენა ასუსტებს რა ქიმიურ ბმებს, ამცირებს ატომების გადაადგილების პროცესის პოტენციურ ჯგებირს და ამით აადვილებს მესერის რეგულარული ატომების გადაადგილებას (მიგრაციას). ცალკეული მიგრაციული აქტის ალბათობა, გამოთვლების თანახმად, ფრიად მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული აკვაზების წონასწორულ კონცენტრაციაზე. ანალოგიურად იხსნება ატომების მიგრაციასთან დაკავშირებული სხვა ფიზიკური თვისებების დამოკიდებულება აკვაზების კონცენტრაციაზე.

4. ნანონაწილაკების ზონურ სტრუქტურაზე წარმოდგენების თანახმად, აკრძალული ზონა დიელექტრიკებსა და ნახევარგამტარებში და ფსევდოაკრძალული ლითონებში, უფრო ვიწროა, ვიდრე კომპაქტურ მასალაში. ეს ნიშნავს, რომ აკვაზების წონასწორული კონცენტრაცია ნანონაწილაკებში უფრო მაღალია. ასევე აკვაზი ნანონაწილაკში მოძრაობისას მისი საზღვრიდან „აირეკლება“ და რჩება მასში განსხვავებით კომპაქტური სხეულის ისეთივე მოცულობის არისაგან. ამგვარად, ნანონაწილაკების ზომების შემცირებისას იზრდება აკვაზების ეფექტური კონცენტრაცია, რაც ზრდის მათ ეფექტურ შემასუსტებელ მოქმედებას ქიმიურ ბმებზე და სათანადოდ აძლიერებს გავლენას მასალის ფიზიკურ თვისებებზე.
5. კრისტალური მესრის პარამეტრების ზრდა (სხეულის გაფართოვება) განპირობებულია არა მარტო ნორმალური რხევების ამპლიტუდის ზრდით თერმული ზემოქმედებისას, არამედ აკვაზების კონცენტრაციის ზრდითაც, განურჩევლად კვაზინაწილაკების გენერაციის ხარისხისა. ნანონაწილაკების ზომების კლებისას მესრის პარამეტრის ზრდა განისაზღვრება აკვაზების კონცენტრაციის ექსპონენციალური მატებით აკრძალული ენერგეტიკული ღრეჩოს შემცირებისას. ეს კი ამცირებს ქიმიური ბმების ენერგიას და სიგრძეს. შედეგად მატულობს ნანონაწილაკების მესრის პარამეტრი და მცირდება მასალის დეზაის ტემპერატურა.
6. ნანონაწილაკებსა და ნანომასალებში თერმული, დასხივების, ინჟექციის, მექანიკური დაწნევის და სხვა ზემოქმედების შედეგად აკვაზების წარმოქმნა და მაღალი წონასწორული და ეფექტური კონცენტრაცია მნიშვნელოვან გავლენას ახდენს ატომების ქიმიური ბმის ენერგიაზე, სიხისტესა და სიგრძეზე. ამ პარამეტრების გათვალისწინება საშუალებას გვაძლევს აღვწეროთ შემდეგი ფიზიკური თვისებების დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე, მოვიყვანოთ მათი განხორციელების

ატომური მექანიზმები, პროცესების პოტენციური ჯებირების ცვლილება, ავსახოთ ანალიზური ფორმულების საშუალებით

- მესრის პარამეტრის და დეზაის ტემპერატურის, ასევე სითბოტევადობის, სითბოგადაცემის, ფაზური მდგომარეობის და დნობის ტემპერატურის დამოკიდებულება ნანონაწილაკების ზომებზე;
- ატომების მესერში გადაადგილების გაადვილების, დიფუზიის კოეფიციენტის და რეკრისტალიზაციის სიჩქარის, სისალის, დენადობის, სიხისტის, ფოტომექანიკური ეფექტის, პლასტიურობისა და ძვრის მოდულების დამოკიდებულება ნანონაწილაკის ზომებზე.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. S.P. Gubin. What is a nanoparticle? Trends in the development of nanochemistry and nanotechnology. Usp. Chem. Nauk., № 3, 2002. C. 23-31.
2. R. A. Andrievskii, A. M. Glezer. Dimensional effects in nanocrystalline materials. Mechanical and physical properties. Phys. Met. Metalloved., 2000. V. 89, p.91-105.
3. R. A. Andrievskii, A. M. Glezer. Strength of nanostructures. Usp. Phys. Nauk. 2009. v.179, p. 337-358.
4. Jer. Ramsden. Nanotechnology: An Introduction. Published by Elsevier, 2011. 296 p.
5. J. I. Frenkel. Statistical Physics. 1948 , Moscow-Leningrad, Published by “The Academy of Sciences of the USSR”, 760 p.
6. A. B. Gerasimov. Fundamentals of Low-Temperature Technology of Production of Semiconductor Devices. 2005, Tbilisi: Tbilisi Univ. Press. 235 p.
7. Gerasimov A.B –Electron-hole mechanism of atomic motion in a solid state. Proceedings of the Fourth International Conference. Materials Science Forum Vols., New-York, 1990, v.65-66, p.47-51.
8. A.B. Gerasimov. Introduction to Nanotechnology. Tbilisi, 2009, 185 p.
9. A.B. Gerasimov, M.T. Vepkhvadze. Electron – Potential Theory of Substance. Tbilisi, 2017. (in press)
10. A.B. Gerasimov. Principles of the molecular-potential theory. 2nd International Conference “Nanotechnologies” Nano-2012, Tbilisi, Georgia, September 2012, p.160-170
11. A.B. Gerasimov, M.T. Vepkhvadze. Dependence of the fundamental properties of nanoparticles associated with the movement of an atom on the size of nanoparticles. SCIENCE AND TECHNOLOGY. Tbilisi. 2015. №3 (720), p. 16-32
12. W.A. Harrison. Electronic Structure and the Properties of Solids. The Physics of the Chemical Bond. 1980, San Francisco: W.H Freeman & Co.
13. ალექსი გერასიმოვი. ნახევარგამტარული ხელსაწყოების შექმნის დაბალტემპერატურული ტექნოლოგიის საფუძვლები. თბ, 2005.
14. „მეცნიერება და ტექნოლოგიები“. 2014, N1 (714), გვ. 23-38.
15. Physical quantities. Reference Book. Moscow, atomizdat. 1976. p.1008.
16. R.J. Kubo. Phys. Soc. Jpn. 1962. v.17, p.975. R. Kubo, A. Kawabata, S. Kobayashi. Ann. Rev. Mater. Sci. 1984. V.14, p.49
17. Я.А. Угай. Введение в химию полупроводников. Москва, “ Высшая школа,” 1975. 302с.
18. Н. Л. Глинка. Общая химия. Москва, 2003. 623 с.
19. G.D. Chiradze. Thesis- Ph.D. mat. Sciences .Tbilisi, TSU, 1992.
20. Gerasimov A.B , Gogua Z.G., Gogua G.Z., “Physical mechanism of expansion of semiconductors under the light”, Bulletin of the Georgian Academy of Sciences, 170, №1, 2005, 61-62

21. A.B. Gerasimov, G.D. Chiradze, Z.G. Gogua. Widening of Si under the impact of illumination. Ukr.J.Phys. 2006, V.51, №8, p.785-787.
22. A.B. Gerasimov, Physical nature of size dependence of nanoparticles properties. Nano Studies, 2010, №1, p.47-96.
23. P.V. Pavlov, A.F.Khokhlov. Physics of the solid. Moscow, “ Higher School,” 2000. 494p.
24. D.Goodstein. The phonon atom effect. Physics Abroad, A, 1988. c. 196-213.
25. New York Academy of Sciences. Members edition. January/February 2000.
26. Gerasimov A.B.,Gogoladze I.A., Tsertsvadze A.A. Formation of a “cold liquid” when a substance is irradiated with a laser.- Letters in JTF, 1982, vol.8, issue 17, p. 1035-1037.
27. Gerasimov A., Bibilashvili A, D. Buachidze, I.Lomidze, R.Kazarov, D.Kimeridze. The Physical Nature of the Size Dependence of Nanoparticles Melting Temperature. Bulletin of the Georgian Academy Of Sciences, 172, №2, 2005, 233-236.
28. Gerasimov A.B., Chiradze G.D ., Kutivadze N.G. On the Physical Nature Of a Photomechanical Effect . // Semiconductors, 2001, v. 35, №1, c.70-73.
29. Gerasimov A.B., Kutelia E.R ., Chiradze G.D., Bokhochadze Z.G., Kimeridze D.A., Ratiani T.K. Effect of light on the microhardness of metals.// Physics and Chemistry of Materials Processing, 2003, №4, p.5-7.
30. Gerasimov A.B., Chiradze Z.G., Kutivadze N.G. (1998) Sbornik nauchnykh trudov, Intelekt , 3: 24-27.
31. A.L. Polyakova . FTT, 1967, No. 9, p.1164-1166.
32. Glazov V.M., Vigdorovich V.N.- Microhardness of metals and semiconductors.- Moscow, Metallurgy, 1969, p.246.
33. Трефилов В. И. Милъман Ю.В.-В книге – Вопросы металлов и металловедения – Киев , из-во АН УССР, 1963, с.17.
34. A. Gerasimov, G. Chiradze, N. Kutivadze, A. Bibilashvili, Z. Bokhochadze – Physical Nature of Thermomechanical Effect – Proceedings of Tbilisi University, Physics, 1999, v.333., №34, p.79-85
35. Kuczynski G.C., Hochman R.H. – Phys. Rev., 1957, v.108. p.946-949.
36. Gerasimov A.B., Chiradze G.D. Spectral dependence of the photomechanical effect in silicon. Communications of the AN of the GSSR, 1991, v.142, N1, p.61-63.
37. Bokhochadze ZG, Effect of the mode of forming a print on the evaluation of the magnitude of the photomechanical effect. FTT, vol. 40, No.3, 1998, pp.503-505.
38. G.Ciradze, A. Gerasimov, G.Kvesitadze, M. Vepkhvadze. Cemical bonds in the hardness of nanomaterials. Bulletin of the Georgian Academy of Sciences, vol.10, no.2, 2016, p.105-110.
39. Koch C.C., et al. MRS Bull. 24 (2) 1999. P.54.
40. Lu K. Mafter. Sci, Eng. R16, 1996. p. 161-164.
41. Guermazi M., Hjfler H., Hahn H., Averbak R. J. Amer. Cer. Soc., v.74, 1991. p.2672-2674.

42. Huang Z., Gu L.Y., Weertman J.R. Scripta Mater. v.37. 1997.p. 1071-1075.
43. V.A. Pozdnyakov, Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2007, 71, 1708.
44. Mc Fadden S. X., et al. Nature, 398 684, 1999.
45. A. M. Glezer, Deformation and fracture of materials 2006, 9, p.30.
46. B.I.Boltaks, Diffusion and Point Defects in Semiconductors. Leningrad, Nauka, 1972. 384 p.
47. Gerasimov A.B., Gochaleishvili N.G., Lomidze I.J., Maziashvili E.N., Samadashvili Z.D., Kazarov R.E., Vardosanidze L., Klibadze M. "Photostimulated Diffusion of Ag and Cd in Epitaxial Structures of GaAs" Bulletin of Georgian Academy of Sciences, 2002, v.166, №2, p.267-272.
48. Gerasimov A.B., Bibilashvili A.P.,Kazarov R.E., Kvantaliani I.O.,Lomidze I.J. Physical principles of photostimulated processes for creating semiconductor devices and integrated circuits. Bulletin of ANASA, 2004, v.7, No.1, p.149-153.
49. A.B.Gerasimov, R.Kazarov. Incoherent light-induced diffusion of aluminum into silicon. Ukr.J.Phys. 2006. V.51, N9.
50. Gleiter H. Nanostructured materials. Progress in Materials Science. 1989. V.33, p. 223-315.
51. Wurschum R., Kubler A. et al .Ann. Chim. Fr.1996. v.21, p.471-482.
52. Gleiter H. Diffusion in nanostructured metals. Phys. Stat. Sol. 1992. v. 172 B, p. 41-50.
53. Dickenscheid W., Birringen R., Gleiter H. et. al. Investigation of self-diffusion in nanostructured Cu by NMR. Solid state Commun. 1991.v.79.p. 683-686.
54. Larilov L.N. Diffusion processes in nanocrystalline materials. Metallophysics and New Technologies. 1995. v .17, No. 1, p. 3-29.
55. Klotsman S.M. Diffusion in nanomaterials. FMM. 1993. vol. 75, Iss. 4,p.3-29.
56. Bokshstein B.S., Breze G.D., Kurkin PV, Trusov L.I. Diffusion in nanocrystalline Ni. Izv. HIGH SCHOOLS, Black metallurgy. 1994. №1, p. 49-53.
57. Gerasimov A.B. Bibilashvili A.P. Bokhochadze Z.G. Vepkhvadze M.T. Kimeridze D.A. Samatashvili Z.D. Tvaliashvili P.E. Microscopic mechanism of solid-state epitaxy of amorphized layers. Physics and Chemistry of Materials Processing, 2001,N3, p.49-55.
58. Gerasimov A.B. Bibilashvili A.P. Bohochadze Z.G. Vepkhvadze M.T. Kimeridze D.A, Kushitashvili Z.Sh. Samadashvili Z.D. Microscopic mechanism of stimulated epitaxial growth of amorphized layers, Physics and Chemistry of Materials Processing, 2001, No. 6, p. 62-68.
59. A.B. Gerasimov, Z.G. Bokhochadze, I.J. Lomidze, T.K. Ratiani, Z.D. Samadashvili, "Mechanism of formation and decomposition of precipitates in semiconductors", Bulletin of the Georgian Academy of Sciences, v.168,№1, 2003, p.38-40.
60. H.Gleiter ,Materials with ultrafine grain size, In: Proc. 2d Riso Int. Symp. Metall. Mater. Sci.Roskilde, Densmark, RISO Nat. Lab, 1981, 15.
61. V.Y. Gertsman, R.Birringer. Scripta Metal . Mater. 1994, 30, p.577

62. Gerasimov A.B. Bibilashvili A.P. Bokhochadze Z.G., Melkadze T.E., Tsaava M.G. "Mechanism of photostimulated surface-diffusion", FCOM, №2, 2000, p.5-8.
63. . I.G.Gverdsiteli, A.B. Gerasimov, Z.V.Djibouti, G.D.Chiradze. Effect of illumination on the lattice parameter of single-crystal silicon. Proceedings of the Tbilisi State University (Physics). 1991, vol.306, p.203-205.
64. Gerasimov A.B., Bibilashvili A.P., Chiradze G.D., Kutivadze N.G., Bokhochadze Z.G. The Influence of Isotropization of Chemical Bonds on Anisotropy of Photomechanical Effect. Bulletin of the Georgian Academy of Sciences, 1998, v. 157, №3, p.396-399.
65. Ryvkin S.M.-Photoelectric phenomena in semiconductors-1963. Moscow, Fizmatgiz, p.494.
66. T.Y. Abashidze, A.B.Gerasimov, Z.V.Djibouti, G.R.Kapanadze, D.A.Kelekhshashvili, M.A.Cuprava. Installation of pulsed photonic processing of materials of solid- state electronics/UIFO-3/. Technical information. Ser. Instrument making. GruzNIINTI. Tbilisi. 1988.№ 2. 1-5
67. V.Kon. Electronic structure of the substance- wave density functionals. Uspekhi Fizicheskikh Nauk, 2002, v.172, No.3, p.336-348.