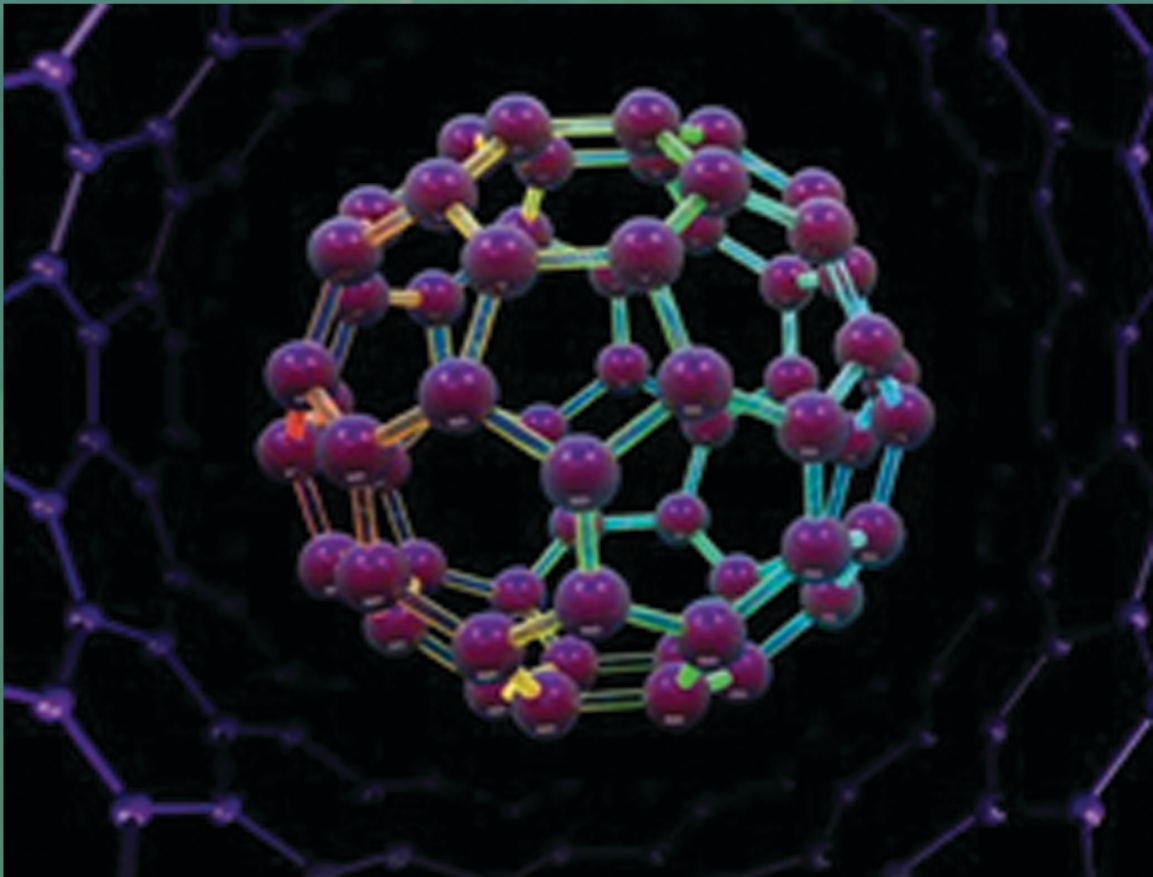


ამირან ბიბილაშვილი

თანამედროვე ნანოტექნოლოგიები  
ახალი მასალები და ხელსაწყოები





**თანამედროვე ნანოტექნოლოგიები,  
ახალი მასალები და ხელსაწყოები**



ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

**ამირან გიბილაშვილი**

**თანამედროვე ნანოტექნოლოგიები,  
ახალი მასალები და ხელსაწყოები**



**უნივერსიტეტის  
გამომცემლობა**

წინამდებარე სახელმძღვანელოში განხილულია ნანოტექნოლოგიის ის ძირითადი საკითხები, რომელთა ცოდნა აუცილებელია მკითხველთათვის, რომ უფრო ღრმად შეისწავლონ ცალკეული დარგების ნანოტექნოლოგიები და ნანოტექნოლოგიები. ეს ეხება ისეთ დარგებს, როგორცაა ფიზიკა, ქიმია, ბიოლოგია და მედიცინა. ნანოტექნოლოგიის უკეთ გაგების მიზნით, მოცემულია მიკროტექნოლოგიის ზოგიერთი ძირითადი საკითხები, მიკროდან ნანოზე გადასვლის ძირითადი სიძნელებები და თავისებურებანი; გაანალიზებულია ახალი მასალების მიღების, შესწავლის და გამოყენების ძირითადი არეალები; განხილულია ნანოსისტემებში ქიმიური ბმის სახეები, მათში შინაგანი და გარეგანი ზედაპირების როლი, კვანტური ეფექტების ის ძირითადი ფუნდამენტური მოვლენები, რომლებსაც ეყრდნობა ნანოელექტრონიკა; მათზე აგებული ზოგიერთი ისეთი ნანოხელსაწყობის მუშაობის პრინციპები, როგორცაა ერთელექტრონიანი და რეზონანსული ტრანზისტორები, აარონოვ-ბომის ხელსაწყო, კვანტური წერტილის კონდოს ეფექტზე მომუშავე ხელსაწყო, მემრისტორი და იონისტორი (სუპერკონდენსატორი). მოცემულია კვანტური ჰოლის ეფექტის არსი, როგორც მაგნიტური ველის ელექტრულ ნანოსისტემებზე გავლენის კერძო შემთხვევა; განხილულია ნანო, ანუ „მაღალი ტექნოლოგიების“ გამოყენების პერსპექტივები.

სახელმძღვანელო განკუთვნილია შესაბამისი მიმართულების სტუდენტებისა და დოქტორანტებისთვის. ის სასარგებლო იქნება ნანოტექნოლოგიებით დაინტერესებული ყველა მკითხველისთვისაც.

რედაქტორი – ფიზიკა-მათემატიკის მეცნიერებათა  
დოქტორი, პროფესორი **ზურაბ ჯიბუტი**

რეცენზენტები: ფიზიკის აკადემიური დოქტორი,  
ასოცირებული პროფესორი **თამარ ჭელიძე**  
ფიზიკის აკადემიური დოქტორი,  
ასისტ. პროფესორი **თეიმურაზ ნადარეიშვილი**

*გამოცემულია ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის  
საუნივერსიტეტო-საგამომცემლო საბჭოს გადაწყვეტილებით.*

*Published by decision of Ivane Javakhishvili Tbilisi State University Publishing Board.*

© ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის  
სახელმწიფო უნივერსიტეტის გამომცემლობა, 2021

ISBN 978-9941-491-22-1 (pdf)

# შ ი ნ ა ა რ ს ი

შესავალი ..... 9

## I. ნანოტექნოლოგიის არსი, პრინციპები, წინაისტორია და პერსპექტივები

<b>1. ნანოტექნოლოგიის არსი, ამოცანები და ტერმინოლოგია</b> .....	11
1.1. საკუთარი ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი .....	14
1.2. ელექტრონული გამტარებლობის (n) ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი .....	16
1.3. ხვრელური გამტარებლობის (p) ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი .....	18
1.4. დენის მატარებლების ძვრადობა .....	20
1.5. ნახევარგამტარის ზედაპირზე დიელექტრიკული ფირების მიღების პროცესები .....	21
1.6. ფოტოლიტოგრაფია: ფოტორეზისტი და მისი სახეები; ფოტოშაბლონი, მისი მიღება და კონტროლი .....	24
1.7. ნახევარგამტარში მინარევის დიფუზიისა და ლეგირების პროცესები .....	28
1.8. ეპიტაქსიით თხელი ფირების მიღება .....	32
1.9. სქემის შექმნა ველის ტრანზისტორის მაგალითზე .....	35
1.10. ტოპოლოგიის შექმნა და ხელსაწყო მოდელირება .....	36
1.11. ინტეგრალური სქემები და მათი კლასიფიკაცია .....	38
<b>2. მიკროდან ნანოტექნოლოგიაზე გადასვლის თავისებურებანი</b> .....	41
2.1. ფოტოლიტოგრაფიის ალტერნატიული მეთოდები .....	45
2.1.1. ნანოლიტოგრაფია - ელექტრო-სხივური, იონურ-სხივური, რენტგენული, პლაზმური, ფეთქებადი ლიტოგრაფიები .....	46
2.1.2. ლაზერულ-ინტერფერენციული ლიტოგრაფია .....	48
2.1.3. ნანობეჭვდა - მელნით ბეჭვდა, ნაჭდით ბეჭვდა .....	49
2.2. სკანირებული ზონდური მიკროსკოპია .....	51
<b>3. ატომური ორბიტალები და მოლეკულის აღნაგობა</b> .....	54
3.1. ატომური ორბიტალების და ტალღური ფუნქციის არსი .....	54
3.2. კავშირი ტალღურ და კვანტურ მოვლენებს შორის .....	62
3.3. ერთელექტრონიანი ატომის ორბიტალი .....	66

3.4. მრავალელექტრონიანი ატომის ორბიტალები .....	73
3.5. მოლეკულის აღნაგობა .....	76
<b>4. ელემენტთა ქიმიური ბმა .....</b>	<b>78</b>
4.1. ქიმიური ბმის სახეები .....	79
4.1.1. ჰომეოპოლარული (კოვალენტური) ბმა .....	79
4.1.2. ჰეტეროპოლარული (იონური) ბმა .....	84
4.1.3. მეტალური ბმა .....	86
4.1.4. მოლეკულური (ვან-დერ-ვაალსის) ბმა .....	87
4.1.5. წყალბადისებური ბმა .....	88
<b>5. ნანოსტრუქტურებში შინაგანი და გარეგანი ზედაპირების როლი .....</b>	<b>89</b>
5.1. ნანონაწილაკის გეომეტრიული სტრუქტურა .....	95
5.2. მაგიური რიცხვი .....	97
5.3. ნანონაწილაკების ელექტრული სტრუქტურა .....	98
5.4. მეტალური ნანონაწილაკები .....	102
<b>6. ზომითი კვანტური შეზღუდვები: კვანტური ორმოს, მილაკის და წერტილის ცნებების არსი .....</b>	<b>105</b>
6.1. ელექტრონის მოძრაობის თავისებურებანი კვანტური შეზღუდვებისას .....	107
<b>II. ნანოელექტრონიკის ფიზიკური საფუძვლები</b>	
<b>7. ნანოელექტრონიკის საფუძვლების ფუნდამენტური მოვლენები .....</b>	<b>112</b>
7.1. კვანტური შეზღუდვები .....	112
7.2. ბალისტიკური ტრანსპორტი და კვანტური ინტერფერენცია.....	121
7.3. განუზღვრელობის პრინციპი .....	125
7.4. დენის მატარებლების გვირაბგასვლა .....	127
7.4.1. ნაწილაკთა გაბნევა მართკუთხა, უსასრულო სიგანის პოტენციური ჯებირიდან .....	129
7.4.2. ნაწილაკთა გაბნევა მართკუთხა, სასრულო სიგანის პოტენციური ჯებირიდან .....	132
<b>III. ახალი მასალები</b>	
8.1. კრისტალის აგებულება.....	135
8.2. ინდივიდუალური ნანონაწილაკები და ნანოსისტემები .....	137



<b>9. ნახშირბადის ნანოსისტემები .....</b>	<b>140</b>
9.1. ნახშირბადისეული კავშირები .....	140
9.2. ფულერენი .....	143
9.3. ნახშირბადის ნანომილაკები .....	148
9.4. ფულერენის და ნანომილაკების მიღება .....	154
9.4.1. გრაფიტის ელექტრო-რკალური გაფრქვევა .....	155
9.4.2. გრაფიტის ლაზერული აორთქლება .....	155
9.4.3. ნახშირბადშემცველი ორთქლისგან ქიმიური დაფენა .....	156
9.5. ფულერენის და ნანომილაკის თვისებები და გამოყენება.....	157
<b>10. ელექტრონული მიკროსკოპიის გაზომვის არსი და მეთოდები.....</b>	<b>161</b>
10.1. მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპი .....	162
10.2. ატომურ-ძალური მიკროსკოპია .....	164
10.3. მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი .....	165
<b>IV.ზოგიერთი კვანტური ეფექტები და მათზე შექმნილი ხელსაწყოები</b>	
<b>11. ერთელექტრონული გვირაბგასვლა. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორი .....</b>	<b>167</b>
11.1. ერთგვირაბული გასვლა .....	168
11.2. ორგვირაბული გასვლა .....	169
11.3. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მუშაობის პრინციპი და პარამეტრები .....	171
<b>12. რეზონანსული გვირაბგასვლა .....</b>	<b>173</b>
12.1. რეზონანსულ გვირაბგასვლაზე შექმნილი დიოდი .....	176
12.2. რეზონანსულ გვირაბგასვლაზე შექმნილი ტრანზისტორი .....	178
<b>13. კვანტური ჰოლის ეფექტი .....</b>	<b>180</b>
13.1. დაბალგანზომილებიანი მყარსხეულოვანი ნანოსტრუქტურები .....	182
13.2. ელექტრონული სისტემა მაგნიტურ ველში .....	185
13.3. მთელრიცხვიანი კვანტური ჰოლის ეფექტი .....	188
13.4. წილადობრივი კვანტური ჰოლის ეფექტი .....	190
13.5. კვანტური ჰოლის ეფექტების ხარისხობრივი ინტერპრეტაცია .....	191
13.6. სპინური ჰოლის ეფექტი .....	196
<b>14. აარონოვ-ბომის ეფექტი და მასზე შექმნილი ხელსაწყო .....</b>	<b>198</b>
14.1 წრიული ინტერფერენციული ტრანზისტორი .....	200

<b>15. კონდოს ეფექტი .....</b>	<b>202</b>
15.1. მაგნიტურმინარევეზიან მეტალებში კონდოს ეფექტი .....	203
15.2. კვანტურ ნერტილში კონდოს ეფექტი .....	205
<b>16. მემრისტორის მუშაობის პრინციპი და პარამეტრები .....</b>	<b>207</b>
<b>17. იონისტორი (სუპერკონდენსატორი) მუშაობის პრინციპი და     პარამეტრები .....</b>	<b>211</b>
<b>რეკომენდირებული ლიტერატურა .....</b>	<b>222</b>

*„შეიძლება ეს ელექტრონები მთელი სამყაროა ხუთი კონტინენ-  
ტით, ხელოვნებით, შემეცნებით და ომებით! ან კიდევ, ყოველი ატომი  
გალაქტიკაა ასი პლანეტით, რაც აქაა, იქ ყველაფერი შეკუმშული სა-  
ხითაა და აგრეთვე ის, რაც იქაა – აქ არაა“.*

**ვ. ბრიუსოვი**

## შესავალი

მიკროელექტრონიკის განვითარება, რომელიც განსაზღვრავს მეცნიერების და ტექნიკის სხვა დარგების პროგრესს, ძირითადად, განპირობებულია მიკროელექტრონული სისტემების სწრაფქმედებისა და ინტეგრაციის ხარისხის გაზრდით. ამ მიმართულებით პროგრესი მიიღწევა ინტეგრალური მიკროსქემის (იმს) ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირებისა და ფუნქციონალური ქმედების გაზრდით. მაგრამ ამ ტენდენციის განვითარების გზაზე არსებობს ფიზიკური, ტექნოლოგიური და ენერგეტიკული წინაღობები, რომელთა გადალახვის მცდელობამ შექმნა ახალი მიმართულება – ნანოელექტრონიკა. დღემდე გადაუჭრელია ბევრი საკითხი, დაკავშირებული ისეთ ფიზიკურ პრობლემებთან, როგორიცაა ელემენტთაშორისი შეერთებები, რომლებიც იმს-ში ფართობის თითქმის 90%-ს იკავებენ. მიკროდან ნანოელექტრონიკაზე გადასვლის მიზნით იმს-ის ელემენტების მინიატურიზაციის საკითხი დღესდღეობით მეტად აქტუალურია.

რამდენიმე რიგით ზომების შემცირება პრაქტიკულად ცვლის ნანოელემენტის მუშაობის ფიზიკური მექანიზმების საფუძვლებს. მაგალითად, ნანოელემენტში ელექტრონი გამოიყენება არა, როგორც დენის გადამტანი ნაწილაკი, არამედ, როგორც ტალღა; მიკროელემენტისთვის დამახასიათებელი დრეიფის და დიფუზიის პროცესები საერთოდ არ არსებობს ნანოელექტრონული ელემენტის მისაღებად. ნანოელექტრონული ელემენტი შედგება კვანტური ორმოებისა და პოტენციური ჯებირებისაგან. ასეთი ელემენტის ენერგეტიკული სპექტრი დამოკიდებულია სტრუქტურის ზომაზე და ერთი ელექტრონის დამატება ან გამოკლება არსებითად ცვლის ენერგეტიკულ სურათს. იმს შედგება რეზისტორების, კონდენსატორების, დიოდების, ტრანზისტორების სტრუქტურული კომპონენტებისაგან. ნანოელექტრონიკაში სტრუქტურულ კომპონენტებს მრავალფუნქციური დანიშნულება აქვთ და ისინი რთულ დინამიკურ ფუნქციებს ასრულებენ.

ნანოელექტრონიკა წარმოადგენს მიკროელექტრონიკის ლოგიკურ გაგრძელებას. მყარსხეულოვანი საინფორმაციო ხელსაწყოების ზომები შემცირდა მიკროდან ( $10^{-6}$  მ) ნანომდე ( $10^{-9}$ მ). ნანოელექტრონიკაში ელემენტების ტიპური ზომები შეადგენს 10-100 ნმ-ს. მყარსხეულოვანი ელექტრონული ხელსაწყოს ზომის ნანომეტრული უზნის ზომასთან მიახლოებისას თავს იჩენს ელექტრონის კვანტური თვისებები.

ნანოელექტრონიკა – მეცნიერების და ტექნიკის ის დარგია, რომელიც შეისწავლის და იკვლევს ნანომეტრული ზომის ელემენტებს, მათ შექმნას და გამოყენებას. ასეთი ხელსაწყოების ფუნქციონირების საფუძველი კვანტური ეფექტებია. აღსანიშნავია, რომ ნანოელექტრონიკის და ნანოტექნოლოგიის შექმნა არაა განპირობებული

მხოლოდ ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირებით ნანომასშტაბამდე. ძირითადი ფაქტორია ნანომასალებისთვის სრულიად ახალი, უნიკალური თვისებების გამოვლენა, რომელთა ახსნა კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში შეუძლებელია და საჭიროებს კვანტური ფიზიკის ჩართვას. ახალი პროცესების კვლევისა და ახსნისთვის საჭიროა ახალი იდეები, ახალი მიდგომები, ახალი გამზომი აპარატურა და ტექნოლოგიური მონოპოლიზაციები.

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

ტერმინი „ნანომასალა“ და „ნანოსტრუქტურა“ შემოღებულია იმ შემთხვევისთვის, როცა ობიექტის ხაზოვანი ზომა ერთი მიმართულებით მაინცაა ნანომეტრული დიაპაზონის. აღსანიშნავია, რომ სტრუქტურები ორგანოზომილებიანი, ერთგანზომილებიანი და ნულგანზომილებიანია, რადგანაც მათი ზომები ერთი, ორი ან სამი მიმართულებით განსაზღვრულ „კრიტიკულ“ მნიშვნელობაზე ნაკლებია. ამ „კრიტიკული“ მნიშვნელობის ქვემოთ სტრუქტურა ამ მიმართულებაზე (მიმართულებებზე) სრულიად განსხვავებულ თვისებებს ავლენს ვიდრე კომპაქტური, მოცულობითი (სამგანზომილებიანი) მასალა, რომლისგანაცაა ის დამზადებული.

# I. ნანოტექნოლოგიის არსი, პრინციპები, წინაისტორია და პერსპექტივები

## 1. ნანოტექნოლოგიის არსი, ამოცანები და ტერმინოლოგია

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

ზოგადად შეიძლება ითქვას, რომ **ნანოელექტრონიკა** ნამოიშვა წინამორბედი მეცნიერებებისგან. კერძოდ, **ელექტრონიკა** მეცნიერების, ტექნიკისა და წარმოების სფეროა, რომელიც მოიცავს ელექტრონული ხელსაწყოების დამუშავებას, კვლევასა და წარმოებას.

**მიკროელექტრონიკა** ელექტრონიკის ნაწილია და მოიცავს პრინციპულად ახალი ტიპის ელექტრონული ხელსაწყოების – ინტეგრალური სქემების შექმნას, კვლევასა და გამოყენების არეებს. თავის მხრივ, ინტეგრალური სქემა რამდენიმე ურთიერთდაკავშირებული კომპონენტის, ელემენტის (ტრანზისტორები, დიოდები, რეზისტორები, კონდენსატორები და ა.შ.) ერთობლიობაა მიკრომეტრის რიგის ზომებით ( $1\text{მკმ}=10^{-6}\text{მ}$ ), დამზადებული ერთ ტექნოლოგიურ ციკლში, ერთ ქვესაფენზე და ასრულებს განსაზღვრულ ოპერაციულ ფუნქციას (სიგნალის გარდაქმნა, შენახვა და გადაცემა). ტერმინი „**ინტეგრალური სქემა**“ გამოხატავს ცალკეული კომპონენტების, ელემენტების კონსტრუქციულად ერთ ხელსაწყოში გაერთიანებას (ინტეგრაციას) და ასრულებს უფრო რთულ ფუნქციას, ვიდრე ცალკეული მასში შემავალი ეს ელემენტები.

მიკროელექტრონული ხელსაწყოების შემდგომი განვითარების პროცესი მჭიდროდაა დაკავშირებული მისი შემადგენელი ელემენტების და კომპონენტების მინიატიურზაციასა და საიმედოობის ხარისხის ამაღლებასთან. ამ მოვლენებმა განსაზღვრა **ნანოელექტრონიკის**, როგორც მეცნიერებისა და ტექნიკის დარგის ჩამოყალიბება. ის ქმნის, იკვლევს და იყენებს ნანომეტრული ზომის (1-დან 100 ნმ-მდე) ელექტრონულ სისტემებს და ხელსაწყოებს, რომელთა ფუნქციონალურ საფუძვლებშია

კვანტური ეფექტები. ამრიგად, ნანოელექტრონიკა მიკროელექტრონიკის ერთგვარი გაგრძელებაა.

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

ქვემოთ მოყვანილია ზომითი დამოკიდებულება ნანო და უფრო მაღალმეტრული განზომილების საგნებსა და ელემენტებს შორის.

ატომი	ნანომილი	სინათლე	ადამიანის ↑ თმა	ავტომობილი ↑	ქალაქი ↑
	0,4 . . 0,8	30			
$1\text{\AA}$	16მ	1მკმ	1მმ	1მ	1კმ
$10^{-10}\text{მ}$	$10^{-9}\text{მ}$	$10^{-6}\text{მ}$	$10^{-3}\text{მ}$		$10^3$

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

მიკროელექტრონიკის განვითარება, რომელიც განსაზღვრავს მეცნიერების და ტექნიკის სხვა დარგების პროგრესს, ძირითადად, განპირობებულია მიკროელექტრონული სისტემების სწრაფქმედებისა და ინტეგრაციის ხარისხის გაზრდით. ამ მიმართულებით პროგრესი მიიღწევა ინტეგრალური მიკროსქემის (იმს) ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირებისა და ფუნქციონალური ქმედების გაზრდით. მაგრამ ამ ტენდენციის განვითარების გზაზე არსებული მთელი რიგი წინაღობების გადალახვის მცდელობამ შექმნა ახალი მიმართულება – ნანოელექტრონიკა. მიკროდან ნანოელექტრონიკაზე გადასვლის მიზნით იმს-ის ელემენტების მინიატიურზაციის საკითხი დღესდღეობით მეტად პრობლემატურია, მაგრამ – საბოლოოდ მისაღწევია. ისიც გასათვალისწინებელია, რომ რამდენიმე რიგით ზომების შემცირება, პრაქტიკულად, მთლიანად ცვლის ნანოელემენტის მუშაობის ფიზიკური მექანიზმების საფუძვლებს. მაგალითად, ნანოელემენტში ელექტრონი გამოიყენება არა, როგორც დენის გადამტანი ნაწილაკი, არამედ, როგორც ტალღა. ნანოელექტრონიკა წარმოადგენს მიკროელექტრონიკის ლოგიკურ გაგრძელებას. საინფორმაციო ხელსაწყოები შემცირდა მიკროდან ( $10^{-6}$  მ) ნანოზომამდე ( $10^{-9}$ მ). ნანოელექტრონიკაში ელემენტების ტიპური ზომები შეადგენს 10 – 100 ნმ-ს.

აღსანიშნავია, რომ ნანოელექტრონიკის და ნანოტექნოლოგიის შექმნა არაა განპირობებული მხოლოდ ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირებით ნანომასშტაბამდე. ძირითადი ფაქტორია ნანომასალების სრულიად ახალი, უნიკალური თვისებების გამოვლენა, რომელთა ახსნა კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში შეუძლებელია და საჭიროებს უფრო რთული ფიზიკის ჩართვას. მაგალითად, როგორც ცნობილია, ოქროს მასალა არ იჟანგება, მაგრამ ნანორაოდენობის ოქროს თვლადი ატომები (დაახლოებით 70 – 80 ატომი) ძალიან სწრაფად (ფეთქებადად) იჟანგება. ახალი პროცესების კვლევისა და ახსნისთვის საჭიროა ახალი იდეები, ახალი მიდგომები, ახალი გამზომი აპარატურა და ტექნოლოგიური მოწყობილობები.

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

- ა) ქვესაფენი (ნახევარგამტარი) და მის ზედაპირზე ჟანგის მიღების პროცესები;
- ბ) ფოტოლიტოგრაფია: ფოტორეზისტი და მისი სახეები; ფოტოშაბლონი, მისი მიღება და კონტროლი;
- გ) ნახევარგამტარში დიფუზიისა და ლეგირების პროცესები;
- დ) ნახევარგამტარზე ეპიტაქსიით თხელი ფირების მიღება;
- ე) ფოტოლიტოგრაფიის სრული პროცესი;
- ვ) ტოპოლოგიის შექმნა და ხელსაწყოს მოდელირება;
- ზ) ნანოლიტოგრაფიის სხვადასხვა სახეები, დაფუძნებულნი ელექტრონის ტალღური მოქმედების ბუნებაზე;
- თ) მიკრო და ნანოხელსაწყოების მუშაობის ფიზიკური პროცესები და მათი შექმნის თავისებურებანი;
- ი) მიკრო და ნანოხელსაწყოების კლასიფიკაცია ტექნოლოგიური და ფუნქციონალური თვალსაზრისით.

ნანოტექნოლოგიის პრინციპების შესწავლისთვის, გავვერკვიოთ ზოგიერთი ტერმინის არსში:

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

**ფოტორეზისტი** – ორგანული, ბლანტი სითხეა, რომელიც ულტრაიისფერი სხივის მოქმედებით იცვლის სრუქტურას, რის შედეგადაც იცვლება გამხსნელი მჟავის მიმართ მედეგობა, ანუ ულტრაიისფერი სხივების ლოკალური დასხივებით ამონამვლა მოხდება ლოკალურად, სასურველი არეების მიხედვით;

**ფოტოშაბლონი** – არის ბრტყელ-პარალელურიანი მინის ან კვარცის ფირფიტა, დაფარული საჭირო კონფიგურაციით ულტრაიისფერი სხივისთვის გაუმჭვირვალე  $Gf_2O_3$  ან  $Fe_2O_3$  შრით;

**ფოტოლიტოგრაფია** – პროცესია, როცა ფოტორეზისტის, ფოტომაბლონის, ქიმიური მჟავებისა და გამხსნელების მეშვეობით ქვესაფენის ზედაპირზე გადადის ფოტომაბლონიდან საჭირო სურათი;

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

**დიფუზია** – მაღალტემპერატურული ( $1100^{\circ}\text{C}$ ) პროცესია, როცა ქიმიური ელემენტის მინარევის კონცენტრაციის გრადიენტით ხორციელდება საფენში ამ ელემენტის შეყვანა;

**ლეგირების პროცესშიც** ხდება საფენში მინარევული ელემენტის შეყვანა უფრო დაბალ ტემპერატურაზე ვიდრე დიფუზიის დროს, რომელიც ხდება მისი დასხივებისას მაღალენერგეტიკული ენერგიის მქონე ამ ელემენტის იონებით;

**ინტეგრალური მიკროსქემა (იმს)** – არის ტრანზისტორების, დიოდების, რეზისტორების (ნანალობების) და კონდენსატორების (იმს-ის აქტიური და პასიური ელემენტები) ერთობლიობა, შექმნილი საჭიროების მიხედვით, რომელიც ფორმირდება ერთ ტექნოლოგიურ პროცესში, ერთ საფენზე და ასრულებს საჭირო ფუნქციას;

ფოტომაბლონის შექმნამდე ხდება იმს-ის **მოდელირება** მისი მომავალი ფუნქციონალური დანიშნულების მიხედვით – ტრანზისტორების, რეზისტორების და კონდენსატორების ურთიერთკომფორტული განლაგება, ანუ **ტოპოლოგიის** შექმნა. **ნანოტექნოლოგია** – მეცნიერების ახალი მიმართულებაა, რომელიც განსაზღვრული რაოდენობის ატომების და მოლეკულების მანიპულაციით აწყობს და ქმნის სასურველი სტრუქტურის მასალებს და ხელსაწყოებს. მას შეუძლია მიიღოს სასურველი ნანოობიექტები და ნანოსტრუქტურები ხელოვნური სინთეზით, რომელთა მსგავსიც არ არსებობს საერთოდ ბუნებაში, შექმნას ჯერ არნახული სიმძლავრის და სისწრაფის კომპიუტერები და საინფორმაციო საშუალებების სხვა ხელსაწყოები. უახლოეს ათწლეულში მისი სამეცნიერო-ტექნიკური განვითარების ტემპი შობს **ნანორევოლუციას** და კარდინალურად შეიცვლება ადამიანის მოღვაწეობის ყველა სფერო. ნანოტექნოლოგია, რომელსაც ხშირად უწოდებენ „მაღალ ტექნოლოგიებს“, ემყარება სამეცნიერო და ექსპერიმენტულ საფუძვლებს. ის წარმოადგენს დისციპლინათაშორისო მეცნიერებას და მსოფლიოს ბევრ ქვეყანაში აღიარებულია სახელმწიფოს განვითარების პრიორიტეტულ მიმართულებად.

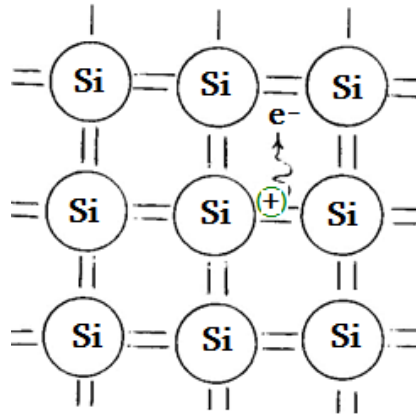
## 1.1. საკუთარი ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი

*ნახევარგამტარები ის მასალებია, რომელთა გამტარებლობა* მოთავსებულია მეტალურ ( $10^4 \div 10^6$   $\text{ომი}^{-1}\text{სმ}^{-1}$ ) და დიელექტრიკულ ( $10^{-3} \div 10^{-5}$   $\text{ომი}^{-1}\text{სმ}^{-1}$ ) გამტარებლობებს შორის. ძალიან დიდია მათი მნიშვნელობა ტექნიკასა და ყოფაცხოვრებაში. ისინი წარმოადგენენ, ძირითადად, იმს-ის საფენებს ან ასრულებენ სხვადასხვა ფუნქციებს.

ნახევარგამტარები, ძირითადად, მოთავსებულია მენდელეევის სისტემის მე-4 ჯგუფში, – ისეთები, როგორიცაა გერმანიუმი (Ge) და სილიციუმი (Si). განვიხილოთ სუფთა, მინარევების გარეშე, ნახევარგამტარული მასალა, მაგალითად, სილიციუმი, რომლის კვანძებში მხოლოდ სილიციუმის ატომებია. მის ატომს აქვს გარე შრეზე 4 სავალენტო ელექტრონი და მოლეკულის შექმნისას სილიციუმის ყოველი მოცულო-

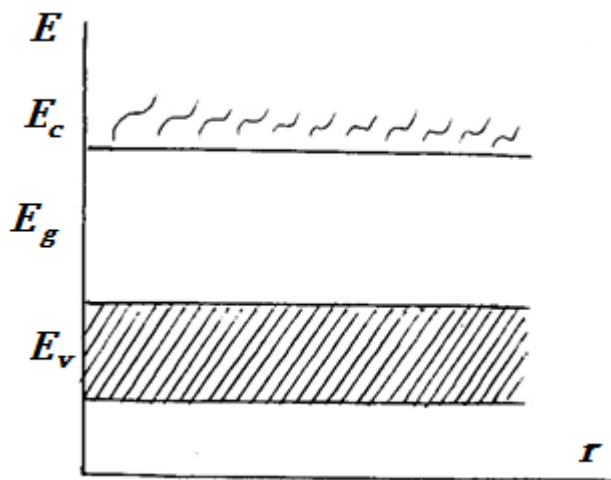


ბითი ატომი გარშემორტყმულია 8 ელექტრონით, რითაც ხდება ყველა ბმის გაჯერება, ხოლო ზედაპირზე იქნება ერთი გაუნწყვილებელი ბმა (ნახ.1.1). ასევე ნახევარგამტარულ მასალას ქმნიან მენდელეევის სისტემის მე-3 და მე-5 ჯგუფის ელემენტები შეერთებისას, მაგალითად, გალიუმი (Ga) და არსენიდი (დარიშხანი As) – GaAs; მე-2 და მე-6 ჯგუფის - ცინკი (Zn) და გოგირდი (S) – ZnS და ა.შ. მოლეკულის შექმნისას, მათი ყოველი ატომიც გარშემორტყმულია 8 ელექტრონით.



**ნახ.1.1.** საკუთარი ნახევარგამტარის სქემატური წარმოსახვა

აბსოლუტურ ნულ გრადუს ტემპერატურაზე ყველა სავალენტო ელექტრონი იმყოფება ბმაში, ენერგეტიკულად ყველა ელექტრონი ერთნაირია, არაა უპირატესი რომელიმე მათგანი. ყოველი ენერგეტიკული ზონა შეიცავს მრავალ ცალკეულ ენერგეტიკულ დონეს. ცხადია, რომ სასრული ზომის კრისტალში დონეთა შორის მანძილი ატომების რიცხვის უკუპროპორციულია. რადგან კრისტალში  $10^{22} \div 10^{23}$  სმ<sup>-3</sup> ატომია, მაშინ მათ მიერ შექმნილი ენერგეტიკული დონეები ერთმანეთისგან დაშორებული იქნება  $10^{-22} \div 10^{-23}$  ევ-ით, ე.ი. ზონა იქნება კვაზიუწყვეტი. ელექტრონები მათზე განლაგდება პაულის პრინციპით და იქნება სასრული რაოდენობის. საჭირო იქნება სრულიად მცირე ენერგეტიკული ზემოქმედება, რომ ელექტრონი გადავიდეს ზემო დონეზე, თუ იქ იქნება თავისუფალი ადგილი. ამიტომ მათი ენერგეტიკული განლაგებისას ყველა ელექტრონის ენერგეტიკული დონე იქნება მკვეთრად მიკრული ერთმანეთზე, რაც შექმნის უწყვეტ სპექტრს, ე.წ. **სავალენტო** ზონას (ნახ. 1.2-ზე  $E_v$ ). ასეთი ნახევარგამტარი მასზე გარე ძაბვის მოდებისას დენს არ გაატარებს, რადგან არაა დენის თავისუფალი მატარებლები – ელექტრონები. დენის თავისუფალი მატარებლების შექმნისთვის საჭიროა ბმის განწყვეტა, ანუ მისგან ელექტრონის „მოგლეჯა“, რისთვისაც საჭიროა ენერგიის გარკვეული რაოდენობის დახარჯვა ( $E_g$ ). ამ ენერგიაზე უფრო მცირე სიდიდის ენერგიის მოდებისას თავისუფალი ელექტრონები არ მიიღება, ანუ მათ ექნებათ **აკრძალული** არე, ზონა (ნახ. 1.2-ზე  $E_g$ ). ამ ენერგიის ზემოთ მიიღება თავისუფალი ელექტრონები, რომლებსაც შეუძლიათ მონაწილეობა მიიღონ გამტარებლობაში და ისინი აქ ქმნიან **გამტარებლობის** ზონას (ნახ. 1.2-ზე  $E_c$ ).



ნახ.1.2. ნახევარგამტარის ენერგეტიკული ზონები

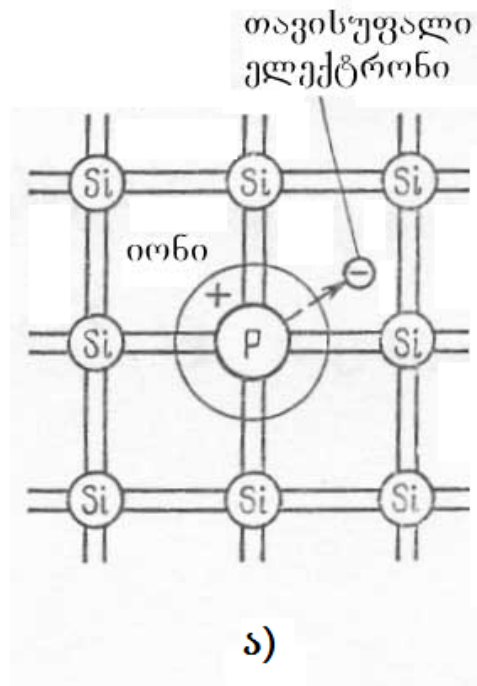
ნახევარგამტარმა ეს  $E_g$  ენერგია შეიძლება მიიღოს სხვადასხვა გზით, მაგალითად, სითბოთი ან სინათლით, მაშინ გამტარებლობის ზონაში მოხდება ელექტრონი და ის სავალენტო ზონაში ტოვებს ცარიელ ადგილს, ანუ ხვრელს. ხვრელის მუხტი იქნება ელექტრონის მუხტის საწინააღმდეგო – „დადებითი“. შესაბამისად, გამტარებლობის ზონაში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

აკრძალული ენერგიის სიდიდე დამოკიდებულია სტრუქტურის, ატომთა ბმის, მასალის სახეზე და ამიტომ ის განსხვავდება ნახევარგამტარული მასალისთვის.

### 1.2. ელექტრონული გამტარებლობის ( $n$ ) ტიპის ნახევარგამტარი და მისი ენერგეტიკული სპექტრი

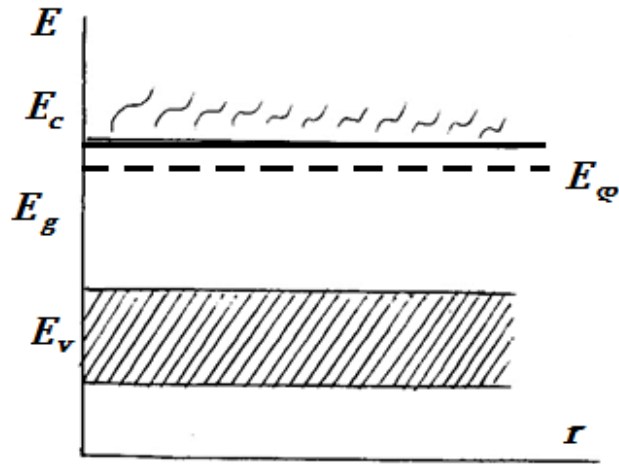
რეალურად ნახევარგამტარში ყოველთვის არსებობს მინარევული ცენტრები, ანუ უცხო ატომები, რომლებსაც უცხო ატომების სახით ვხვდებით ნახევარგამტარის კრისტალში – ჩანაცვლებითი (კვანძებში) და ჩანერგვითი (კვანძთა შორის). ასეთ შემთხვევაში გამტარებლობა განპირობებულია მინარევული ატომებით და ეწოდება მინარევული გამტარებლობა. განვიხილოთ ჩანაცვლებითი მარტივი ცენტრები, რომელთა მოქმედება დამოკიდებულია ჩანაცვლებული ატომის ვალენტობაზე. მაგალითად, თუ სილიციუმში შევიყვანთ V ჯგუფის ელემენტს (მაგალითად, ფოსფორს – P-ს), რომელსაც აქვს ხუთი სავალენტო ელექტრონი, მაშინ ხუთიდან ოთხი სავალენტო ელექტრონი მონაწილეობს მეზობელი სილიციუმის ატომების ბმაში (ნახ.1.3.) და ქმნის მყარ გარსს, შემდგარს რვა ელექტრონისგან. ამ კომბინაციიდან მე-9 ელექტრონი (ანუ ფოსფორის მე-5 ელექტრონი) იქნება სუსტად ბმული ხუთვალენტოვა-

ნის ბირთვთან, შესაძლებელია ადვილად მოსწყდეს მას და გახდეს თავისუფალი. ამიტომ მინარევული ატომი გახდება ერთჯერადად დადებითად დამუხტული იონი, რომელიც იქნება უძრავი.



ნახ.1.3. n- ტიპის სილიციუმი

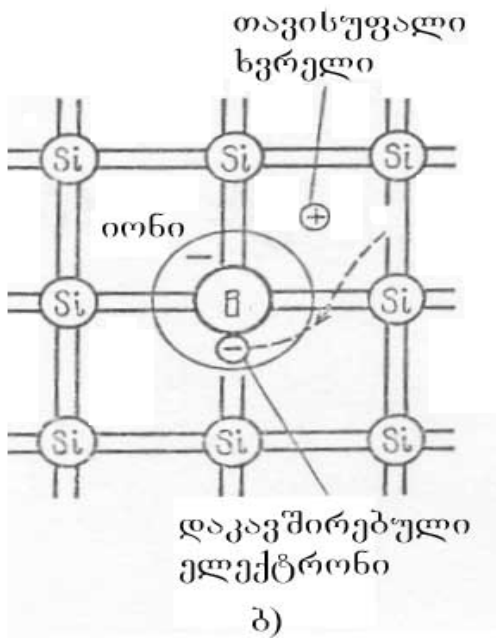
ენერგეტიკულად, ამ ელექტრონის მოწყვეტის ენერგია იქნება ბევრად მცირე, ვიდრე საკუთარი ნახევარგამტარის შემთხვევაში თავისუფალი ელექტრონის მიღება და, შესაბამისად, მისი ენერგეტიკული დონე იქნება გამტარებლობის ზონასთან ახლოს აკრძალულ ზონაში, რაც მოცემულია ნახ. 1.4-ზე. ასეთი მინარევული ნახევარგამტარი არის ელექტრონული ტიპის, ხოლო მინარევი – დონორული (გამცემი) ტიპის. შესაძლებელია, რომ გამტარებლობის ზონაში თავისუფალ ელექტრონებს, შექმნილს მინარევული ატომებით, რომლებსთვისაც საჭიროა მცირე ენერგია, დაემატოს თავისუფალი, საკუთარი ელექტრონები, გადმოსული სავალენტო ზონიდან და გამტარებლობა უფრო მეტად იქნება ელექტრონული. ასეთი ნახევარგამტარი არის ელექტრონული, ანუ  $n$  - ტიპის. მინარევს, რომელიც აძლევს ელექტრონებს მესერს, ეწოდება დონორული. ამ დროს, თუ დონეზე ზის ელექტრონი, ის დამუხტულია უარყოფითად და თუ არ ზის, იონიზებულია – ნეიტრალურია. ამიტომ, გამტარებლობის ზონაში ელექტრონების კონცენტრაცია  $n = p + N_d^+$ , სადაც იონიზებული დონორების კონცენტრაცია  $N_d^+ = N_d - n_d$ . ზოგადად,  $p \ll N_d^+$  და  $n \approx N_d^+$ .



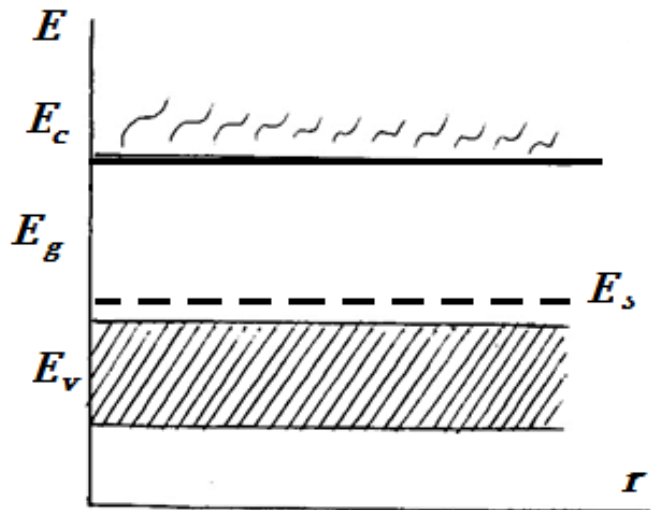
ნახ.1.4. ელექტრონული ტიპის (n) ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი

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

როგორც აღვნიშნეთ, რეალურად ნახევარგამტარში ყოველთვის არსებობს მინარევული ცენტრები, ანუ უცხო ატომები ნახევარგამტარის კრისტალში – ჩანაცვლებითი (კვანძებში) და ჩანერგვითი (კვანძთა შორის). ასეთ შემთხვევაში გამტარებლობა განპირობებულია მინარევული ჩანაცვლებული ატომებით და ეწოდება მინარევული გამტარებლობა. განვიხილოთ ჩანაცვლებითი მარტივი ცენტრები, რომელთა მოქმედება დამოკიდებულია ჩანაცვლებული ატომის ვალენტობაზე. მაგალითად, თუ სილიციუმში შევიყვანთ მე-3 ჯგუფის ელემენტს (მაგალითად, ბორს), მაშინ სამივე სავალენტო ელექტრონი მონაწილეობს მეზობელი სილიციუმის ატომების ბმვაში (ნახ.1.5) და რვა ელექტრონიანი მყარი გარსის შექმნისთვის აკლია ერთი ელექტრონი. ამ ბმის შექმნისთვის შეიძლება ელექტრონი მოვიდეს სილიციუმის სხვა მეზობელი ბმიდან. მაშინ მიიღება უარყოფითი, უძრავი იონი კვანძში და ხვრელი სავალენტო ზონაში, ანუ მიიღება ხვრელების სიჭარბე. ასეთი ნახევარგამტარია ხვრელური, ანუ p- ტიპის. ასეთი ტიპის მინარევი აქცეპტორულია – ნეიტრალურია, როცა მასზე არ ზის ელექტრონი და უარყოფითად დამუხტულია, როცა მასზე ზის ელექტრონი (ნახ.1.6).



ნახ.1.5. p-ტიპის სილიციუმი



ნახ.1.6. ხვრელური ტიპის (p) ნახევარგამტარის ენერგეტიკული სპექტრი

ზოგადად, შეიძლება საკუთარს დამატოს აქცეპტორული და იყოს გამტარებლობა შერეული, მაგრამ რადგანაც საკუთარი ალგზნება ბევრად ნაკლებია აქცეპტორულზე, ამიტომ ხვრელების კონცენტრაცია  $p \approx N_a$ .

#### 1.4. დენის მატარებლების ძვრადობა

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

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

თუ ნახევარგამტარულ ნიმუშზე მოდებულია საკმაოდ მცირე მუდმივი ელექტრული ველი რაღაც დაძაბულობით, მაშინ ქაოსურ მოძრაობასთან ერთად გაჩნდება ელექტრონების და ხვრელების ურთიერთსაწინააღმდეგოდ მიმართული მოძრაობის სიჩქარის მდგენელი. ეს სიჩქარე იწოდება გამტარებლობის დრეიფული სიჩქარის საშუალოდ. გარე ველის მოქმედებით  $m^*$  ეფექტური მასის და  $e$  მუხტის მატარებელი ელექტრონი იმოძრაებს აჩქარებით:  $a = eE / m^*$ . ამ რიცხობრივ ფორმულაში ეფექტური  $m^*$  მასა არაა გრავიტაციული, თავისუფალი ელექტრონის მასა, თუმცა მას აქვს მასის განზომილება. ის შემოყვანილია მყარი სხეულის კრისტალის პერიოდულ პოტენციალურ ველში ელექტრონის მოძრაობის გამარტივებული აღწერისთვის და

გამოისახება:  $m^* = \hbar^2 / \frac{d^2 E}{dk^2}$ , სადაც  $\hbar$  პლანკის დაყვანილი მუდმივაა,  $k$  ტალღური ვექტორია და  $E(k)$  კრისტალში ველის დისპერსიის კანონია.

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

$$\mu = \frac{e\bar{\tau}}{m^*} = \frac{\bar{v}_{დრ}}{E} \quad (1.1)$$

მას უწოდებენ მუხტის მატარებლის **ძვრადობას**. ეს რიცხობრივად ტოლია ერთეულოვან ველში მიღებული დრეიფული სიჩქარისა. მისი განზომილებაა  $\text{სმ}^2/\text{ვ}\cdot\text{წმ}$ . მატარებლის ძვრადობა არის ერთ-ერთი მთავარი პარამეტრი ნახევარგამტარული მასალისთვის და ძალიან დიდი გავლენა აქვს უშუალოდ მასზე შექმნილი სქემის პარამეტრებზე, კერძოდ, მის სწრაფქმედებაზე. ელექტრონისთვის ძვრადობა უარყოფითი სიდიდეა, ხვრელისთვის კი – დადებითი.

(1.1) ფორმულა გვაძლევს საშუალებას, გავანალიზოთ ძვრადობის დამოკიდებულება ნახევარგამტარული მასალის ზოგიერთი პარამეტრისგან. ძვრადობა დამოკიდებულია ელექტრონის თავისუფალი განარბენის საშუალო დროზე, ანუ მესერის რაღაც დეფექტზე გაბნევისას ორ მეზობელ დაჯახებას შორის მანძილზე. ნახევარგამტარში რაც ნაკლები დეფექტია, მით მეტია თავისუფალი განარბენის მანძილის სიგრძე. ნახევარგამტარში ელექტრონების გაბნევა ხდება, ძირითადად, მინარევულ

ატომებზე და მესერის სითბურ რხევებზე. ამიტომ ელექტრონების ძვრადობა უდიდესი უნდა იყოს სუფთა ან მცირედ ლეგირებულ ნახევარგამტარში დაბალ ტემპერატურაზე. მინარევული ატომების კონცენტრაციის გაზრდისას და ტემპერატურის მატებასთან ერთად, ძვრადობა უნდა მცირდებოდეს. ძვრადობა უკუპროპორციულია მატარებლის მასისა. აქედან ჩანს, რომ რადგან სხვადასხვა ნახევარგამტარს აქვს სხვადასხვა ეფექტური მასები, ამიტომ განსხვავებულია ძვრადობებიც. ასევე, რადგან ელექტრონის მასა ნაკლებია ხვრელის მასაზე, ამიტომ  $\mu_n > \mu_p$ .

### საკონტროლო კითხვები:

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

### 1.5. ნახევარგამტარის ზედაპირზე დიელექტრიკული ფირების მიღების პროცესები

სილიციუმის ზედაპირზე მყოფი ატომები თავიანთი ბუნებით განსხვავდებიან მოცულობაში მყოფი ატომებისგან. მოცულობაში ატომები ერთმანეთს უკავშირდებიან განწყვილებული ელექტრონებით, ხოლო ზედაპირზე მყოფ ატომებს აქვთ ერთი გაუნწყვილებელი ბმა (ნახ.1.1) ამიტომ ისინი ცდილობენ, როგორმე შეავსონ ეს ელექტრონებით ან მოცულობიდან, ან უფრო ადვილად – გარე ატმოსფეროდან. ამიტომ სილიციუმის ზედაპირზე რეალურად ყოველთვისაა „საკუთარი ჟანგი“ მიღებული გარე ატმოსფეროდან დამჯდარი ატომებით: ჟანგბადით, აზოტით თუ სხვა აირებით. ამიტომ, პროცესის სრული კონტროლისთვის საჭიროა, სილიციუმზე სქემის ფორმირებისთვის ტექნოლოგიის დანყების წინ ქიმიურად გასუფთავდეს ასეთი ჟანგისგან.

დიელექტრიკული ფირები აუცილებელი შემადგენელი ნაწილებია იმს-ის წარმოებაში. ეს ფირები გამოიყენება როგორც პასიური, ასევე აქტიური ელემენტების ფორმირებაში. დიელექტრიკული ფირები გამოიყენება გამტარ ფენებს შორის იზო-

ლაციისთვის, ნიღბის სახით დიფუზიის ან ლეგირების შემთხვევაში სქემის ჰერმეტიზაციისა და პასივირებისთვის მისი არასასურველი მინარევებისგან, ჩამკეტქვეშა დიელექტრიკად – ველით ტრანზისტორებში, დიელექტრიკად – ფენოვან კონდენსატორებში და ა.შ. მის ხარისხსა და სრულყოფაზეა დამოკიდებული იმს-ის წარმოების ტექნოლოგიის ხარისხი და, საბოლოო ვარიანტში – იმს-ის პარამეტრები. ამიტომ დიელექტრიკული ფირების წინაშე დგას მკაცრი მოთხოვნები. ისინი უნდა იყოს:

- 1) კარგი იზოლაციის მქონე, მცირე გამტარებლობის;
- 2) მცირე ფორიანობის;
- 3) კარგი დამცველუნარიანი;
- 4) ქვესაფენთან მაღალი ადგეზიის ხარისხით;
- 5) მდგრადი პარამეტრებით გარე ფაქტორების ზემოქმედების მიმართ;
- 6) ქიმიურად ადვილად დასამუშავებელი მჟავების და ტუტეების მიმართ;
- 7) მცირე ზედაპირული მდგომარეობებით ნახევარგამტართან გამყოფ საზღვარზე;
- 8) რადიაციულად მდგრადი.

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

ეს მეთოდი მარტივია, მიმდინარეობს რეაქციით  $Si + O_2 (1150^{\circ}C) = SiO_2$ , არ მოითხოვს რთულ ტექნოლოგიურ აპარატურას და იძლევა ხარისხიან ორჟანგს (დიელექტრიკულ ფენას). სილიციუმის ორჟანგს ( $SiO_2$ ) და სილიციუმს ერთმანეთთან ახლოს აქვთ ტემპერატული გაფართოების კოეფიციენტების მნიშვნელობები და ამიტომ ტემპერატურის ცვლილებისას მათ გამყოფ საზღვარზე არ ჩნდება მექანიკური დარღვევები,  $Si - SiO_2$  გამყოფ საზღვარზე მცირეა მუხტის ზედაპირულ მდგომარეობათა სიმკვრივე,  $SiO_2$  ადვილად და სელექციურად მუშავდება მჟავაში, სადაც არ ფუჭდება  $Si$ -ის ზედაპირი, ის კარგად იცავს  $Si$ -ის ზედაპირს უცხო მინარევებისგან და ა.შ. ყოველივე ამან განაპირობა სილიციუმის თერმული დაჟანგვის ტექნოლოგიის ფართო გამოყენება მიკრო- და ნანოხელსაწყოების შექმნაში.

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



ორივე შემთხვევაში, თერმული დაჟანგვის პროცესი მიმდინარეობს სამი სტადი-  
ით: 1) დამჟანგავის ადსორბცია დასაჟანგი ფირფიტის ზედაპირზე; 2) დამჟანგავის  
გასვლა მზარდ დიელექტრიკულ ფირში და 3) დამჟანგავის რეაქცია სილიციუმის  
ატომებთან გამყოფ საზღვარზე  $Si - SiO_2$ .

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

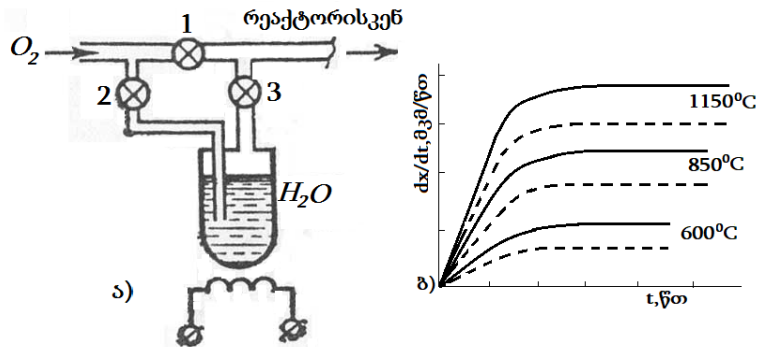
ჟანგბადის იზოტოპის გამოყენებამ ცდაზე აჩვენა, რომ ჟანგის ზრდა მიმდინარე-  
ობს  $Si$ -ში,  $Si - SiO_2$  გამყოფ საზღვარზე და არა  $SiO_2$ -გაზის საზღვარზე.

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

ეს კანონი არ სრულდება დაჟანგვის პროცესის დასაწყისში, როცა ხდება ადსორ-  
ბცია დამჟანგველის სილიციუმის ზედაპირზე.

აქედან ჩანს, რომ ჟანგის ზრდის სიჩქარე სისქის ზრდასთან ერთად ეცემა:

$$\frac{dx}{dt} \sim \frac{k_2}{2x}. \text{ მართლაც, ასეთი დამოკიდებულება ცდაზეც შეიმჩნევა (ნახ.1.7.ბ).}$$



**ნახ.1.7.** „მშრალი“ და „სველი“ ჟანგბადის მიმღები დანადგარის როტამეტრი  
(ა 1, 2 და 3 ონკანები) და, შესაბამისად,  $SiO_2$ -ის ზრდის სიჩქარეები სხვადასხვა  
ტემპერატურაზე (ბ ----- „სველი“ და - - - „მშრალი“ დაჟანგვისას)

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

$$x^2 = 21,2t \cdot \exp\left(-\frac{1,33}{kT}\right) \quad (1.2)$$

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

პროცესის დადებით მხარედ უნდა ჩაითვალოს ის, რომ „მშრალი“ დაჟანგვით მიღებული ფირი  $SiO_2$  დიდი სიმკვრივისაა ( $2,27 \text{ გ/სმ}^3$ ). მართლაც, აქტივაციის დიდი ენერგია იწვევს ჟანგბადის იონების დიდი სიმკვრივით ჩანცობას ჟანგში. მაგრამ ეს პროცესი ხასიათდება შედარებით ხანგრძლივობით, რაც აიხსნება ჟანგბადის იონების მცირე დიფუზიის კოეფიციენტით  $SiO_2$ -ში და დაჟანგვის პროცესის დიდი აქტივაციის ენერჯით.

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

„სველი“ დაჟანგვისას  $SiO_2$  ფირის სისქის დამოკიდებულება დაჟანგვის ტემპერატურაზე და დროზე მოიცემა შემდეგი ემპირიული ფორმულით:

$$x^2 = 7,26t \cdot \exp\left(-\frac{0,8}{kT}\right) \quad (1.3)$$

სადაც  $x$  - ჟანგის სისქეა,  $t$  - დაჟანგვის დრო,  $k$  - ბოლცმანის მუდმივა,  $T$  - ტემპერატურა და  $0,8$ (ევ) პროცესის აქტივაციის ენერგია.

(1.2) და (1.3) ფორმულების შედარებამ აჩვენა, რომ „სველი“ დაჟანგვის დროს დაჟანგვის აქტივაციის ენერგია უფრო დაბალია, ვიდრე „მშრალი“ დაჟანგვისას. ამიტომ „სველი“ დაჟანგვისას ჟანგის ზრდის სიჩქარე უფრო მეტია (ნახ.1.7ბ) და მიღებული ფირების სიმკვრივე უფრო ნაკლებია, ვიდრე „მშრალი“ დაჟანგვისას. გარდა ამისა, ჟანგის ზრდის სიჩქარეებს შორის განსხვავება იმითაცაა გამოწვეული, რომ დიფუზიის კოეფიციენტები  $SiO_2$ -ში ასეთია:

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

პრაქტიკამ აჩვენა, რომ პირველი და მეორე მეთოდის ურთიერთშენაცვლება იძლევა შედარებით კარგ შედეგს. ამიტომ ხარისხიანი ჟანგის მიღებისთვის დაჟანგვა მიმდინარეობს 15 წთ „მშრალ“ ჟანგბადში, შემდეგ „სველ“ ჟანგბადში 1 სთ და შემდეგ – კვლავ „მშრალში“ 15წთ. ამ შემთხვევაში მიიღება  $SiO_2$  ფირი სისქით  $\sim 0,45$  მკმ კარგი დამცავი თვისებებით.

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

იმს-ის შექმნაში ლიტოგრაფიას უკავია წამყვანი როლი. ლიტოგრაფიის პროცესი ნიშნავს შაბლონიდან სურათის დიდი სიზუსტით გადატანას ფირფიტის ზედაპირზე. მისი საშუალებით ხდება „ფანჯრების“ გახსნა ნიღბის ფირფიტაში, რომელშიც ხდება

მინარევის დიფუზია, ან ლეგირება, შემდეგ დიელექტრიკული ფირებისთვის საჭირო ფორმის და ზომის მიცემა და მეტალიზაცია.

ფოტოლიტოგრაფია დაფუძნებულია ფოტომგრძობიარე პოლიმერული მასალის – **ფოტორეზისტის** გამოყენებაზე, რომელიც შეიძლება იყოს პოზიტიური ან ნეგატიური. ფოტოლიტოგრაფიაში გამოყენებული ფოტორეზისტები მგრძობიარენი არიან ულტრაიისფერი გამოსხივების მიმართ 310-450 ნმ ტალღის სიგრძის ინტერვალში. მათში შეყვანილია სპეციალური მინარევი ფირფიტის ზედაპირზე მათი ადგეზიის გაუმჯობესებისთვის და მაღალ ტემპერატურაზე მჟავების და ტუტეების მოქმედების შედეგობის ხარისხის ამაღლებისთვის.

პოზიტიური ფოტორეზისტის დასხივების სტადიაზე ხდება მოლეკულებში ქიმიური ბმის განწყვეტა შთანთქმული გამოსხივების კვანტის შედეგად, მიიღება მოლეკულის დაშლა (დესტრუქცია) და თავისუფალი რადიკალი. ამის შედეგად გასხივებული არეების შედეგობა გამხსნელის მიმართ მცირდება. გამხსნელის მიმართ რეაქციისას მიიღება ადვილად აქროლადი ნაერთი, რაც საერთო ჯამში იწვევს ფოტორეზისტის მთლიანად მოცილებას ზედაპირიდან. ფირფიტის ზედაპირზე მიღებული ლოკალური არეები იმეორებენ ფოტოშაბლონის სურათს. ნეგატიური ფოტორეზისტის შემთხვევაში ხდება პირიქით – დასხივებული არეები ხდება უფრო მედეგი გამხსნელის მიმართ და სურათი ზედაპირზე მიიღება შებრუნებული.

ფოტოშაბლონის სურათის ფირფიტის ზედაპირზე ეს პროცესი მიმდინარეობს სამ სტადიად: 1) ფოტოშაბლონის გავლით ფოტორეზისტის ექსპონირება, ანუ ულტრაიისფერი სხივებით დასხივება; 2) სურათის გამჟღავნება ქიმიურ ნაერთში და  $(80-100)^{\circ}C$  ტემპერატურაზე (5-7) წთ. გახურება, ანუ გამაგრება, რაც იძლევა ლოკალურად დამცველი ნიღბის შექმნას და 3) ფირფიტის დაუცველ არეებში მისი ზედაპირის მოწამვლა.

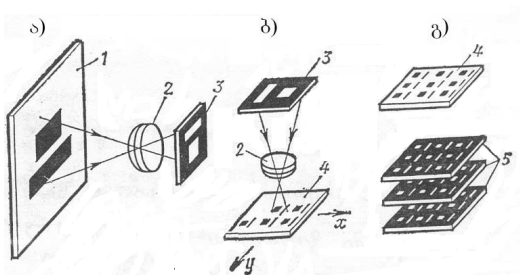
ყოველი ამ სტადიის პროცესში მოქმედებს ფაქტორები, რომლებიც ამახინჯებს ფოტოშაბლონის სანყის სურათს. მაგალითად, ექსპონირებისას ადგილი აქვს დიფრაქციას, სინათლის გარდატეხას და არეკვლას, რაც ცვლის სურათის ელემენტების ზომებს და იწვევს მისი ნაპირების განრთხმას. გამჟღავნების და გამაგრების პროცესში შეიძლება მოხდეს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

ფოტოლიტოგრაფიაში **ფოტოშაბლონი** არის ძირითადი ინსტრუმენტი. მისი საშუალებით ხდება ფოტორეზისტის ლოკალური დასხივება და იმს-ის ტოპოლოგიის ზუსტი გადატანა ფირფიტის ზედაპირზე. იმს-ის შექმნისთვის საჭიროა მრავალჯერადი ფოტოლიტოგრაფია სხვადასხვა სურათის ფოტოშაბლონების, ანუ ფოტოშაბლონის კომპლექტის გამოყენებით. ის არის ბრტყელ-პარალელურიანი მინის ან

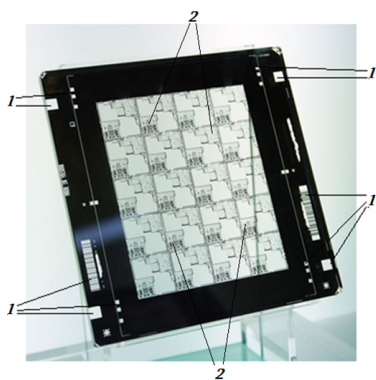
კვარცის ფირფიტა, დაფარული საჭირო კონფიგურაციით ულტრაიისფერი სხივის-თვის გაუმჭვირვალე  $Gr_2O_3, Fe_2O_3$  შრით.

ფოტომაბლონის კომპლექტის დამზადების პროცესი იწყება იმს-ის ტოპოლოგიური ნახაზის – ფოტოორიგინალის შექმნით შესაბამისი შრეების მიხედვით. ნახ.1.8-ზე მოცემულია ფოტომაბლონის შექმნის პროცესი ერთი შრისთვის. სქემის ფოტომაბლონის კომპლექტისთვის ტოპოლოგია იხაზება კოორდინოგრაფით სპეციალურ თხელ ფირფიტაზე დიდი სიზუსტით, მასშტაბით 500:1. ორიგინალის ზომები მცირდება ფოტოლინზე 50-ჯერ და მიიღება შუამდგომი შაბლონი. ეს უკანასკნელი, თავის მხრივ, კიდევ მცირდება ფოტოლინზე მასშტაბით 1:1 და სპეციალური ლინზით ხდება მისი მულტიპლიკაცია (გამრავლება) განსაზღვრული ბიჯით მთელ ზედაპირზე.

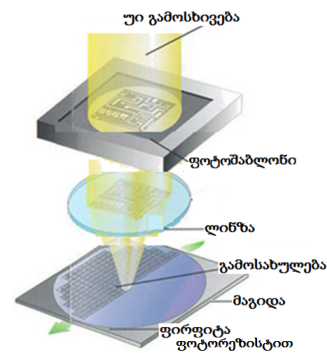
ამით მიიღება ეტალონური ფოტომაბლონი, რომლის შემდეგ მზადდება სამუშაო შაბლონი. იმს-ის შექმნისას საჭიროა მრავალჯერადი ფოტოლიტოგრაფია შესაბამისი ფოტომაბლონის გამოყენებით. ამიტომ არსებითია ფოტომაბლონის ზუსტი შეთავსება ფირფიტაზე წინა ფოტოლიტოგრაფიით შექმნილ სურათთან. წინააღმდეგ შემთხვევაში იმს არ იმუშავებს. ამიტომ ზუსტი შეთავსებისთვის ყოველ ფოტომაბლონზე გათვალისწინებულია სპეციალური ნიშნები (შეთავსების წერტილები, სურათი 1.1), რომლებიც მათზე ზუსტად მეორდება და გადადის ფირფიტის ზედაპირზე. ფოტომაბლონის დადებისას ზედაპირზე ათავსებენ წინა ლიტოგრაფიით მიღებულ ნიშნებს და ამ ფოტომაბლონის ნიშნებს – ერთმანეთს და ამით აღწევენ შეთავსების სიზუსტის გაზრდას.



ნახ.1.8. ფოტომაბლონის შექმნის პროცესი



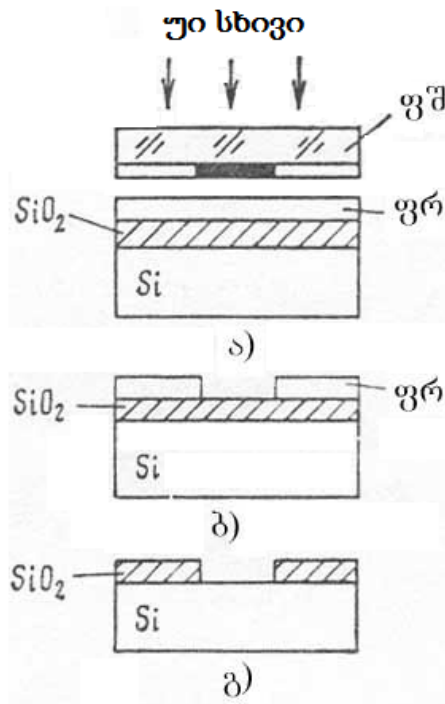
სურ.1.1. ფოტომაბლონი: 1-შეთავსების წერტილები და 2-  $Gr_2O_3; Fe_2O_3$



სურ.1.2. ფოტოგრაფიის პროცედურის წარმოსახვა

ზოგადად, შეიძლება დავასკვნათ: ფოტოლიტოგრაფია, ანუ ოპტიკური ლიტოგრაფია არის პროცესი, სადაც გამოიყენება ულტრაიისფერი (უი) დასხივებისადმი მგრძობიარე ფოტორეზისტი. ფოტოლიტოგრაფიის პროცესში ხდება ფოტორეზისტის ლოკალური, ფოტოშაბლონის გავლით, დასხივდება უი სხივებით (სურ.1.2) მასზე ქიმიური ზემოქმედებისთვის და, შესაბამისად, სასურველი სურათის გადასატანად საფენის ზედაპირზე.

განვიხილოთ  $SiO_2$  ნიღბის მაგალითზე ფოტოლიტოგრაფიის პროცესის ძირითადი ეტაპები, რომელიც გამოსახულია ნახაზ 1.19-ზე.  $Si$ -ის საფენზე შექმნილ  $SiO_2$ -ის ზედაპირს ქიმიურად ასუფთავებენ და გაცხიმავენ, შემდგომში ფოტორეზისტის კარგი ადგეზიისთვის. ათავსებენ ცენტრიფუგაზე, ზედაპირის ცენტრში აწვეთებენ რამდენიმე წვეთ ფოტორეზისტის ხსნარს, რომელიც ბრუნვისას განირთხმება მთელ ზედაპირზე  $\sim 1$  მკმ სისქით და შემდეგ აშრობენ ღუმელში  $100^\circ C$ -ზე  $5 \div 10$  წთ-ის განმავლობაში. ფირფიტაზე დებენ ფოტოშაბლონს (ნახ.1.9ა) სურათით ფოტორეზისტისკენ (ფრ) და სინათლით (ულტრაიისფერი სხივი) ასხივებენ, შემდეგ მას აშორებენ. პოზიტიური ფრ-ისას ხდება დასხივებული ნაწილის ამონამვლა ქიმიური გამხსნელით (ნახ.1.9ბ). ამის შემდეგ წამლავენ  $SiO_2$  მჟავით, რომელიც არ მოქმედებს ფრ-ზე. ფრ-ს აშორებენ ტოლუოლით, რომელიც არ მოქმედებს  $Si$  და  $SiO_2$ -ზე (ნახ.1.9გ). ამით ხდება ფოტოშაბლონზე ჩვენთვის სასურველი სურათის გადატანა სილიციუმის ზედაპირზე.



ნახ.1.9. ფშ-ით ტექნოლოლიური პროცესი

## 1.7. ნახევარგამტარში მინარევის დიფუზიისა და ლეგირების პროცესები

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

1) *მინარევის თერმული დიფუზია*. მაღალ ტემპერატურაზე ( $-800 \div 1150^{\circ}\text{C}$ ) ნახევარგამტარის ზედაპირის გავლით მინარევეული ატომები ვრცელდება მის მოცულობაში სითბური მოძრაობის შედეგად.

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

$$N_{\text{ვაკ}} = N \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1.4)$$

სადაც  $N$  კრისტალის კვანძებში მყოფი ატომების რიცხვია,  $E$  - ვაკანსიის შექმნის აქტივაციის ენერგია,  $k$  - ბოლცმანის მუდმივა და  $T$  - აბსოლუტური ტემპერატურა. სითბური რხევების მოქმედებით მინარევეულ ატომს შეუძლია დაიკავოს ყოველი მეზობელი ვაკანსიის ადგილი და ასე გადაადგილდეს კრისტალში. კვანძიდან ვაკანტურ კვანძში მინარევეული ატომის გადასვლის  $W$  ალბათობა დამოკიდებულია მეზობლად ვაკანსიის არსებობის ალბათობაზე და პოტენციალური ჯებირის გადალახვის ალბათობაზე, რომელიც არსებობს ატომსა და ვაკანსიის ადგილს შორის:

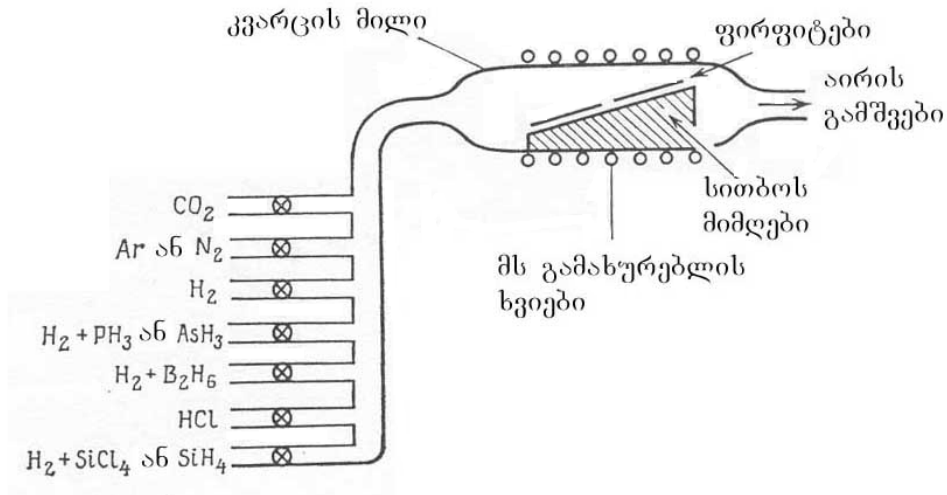
$$W \sim e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (1.5)$$

სადაც  $\Delta E$  დიფუზიის პროცესის აქტივაციის ენერგიაა, რომელიც შეიცავს ვაკანსიის გაჩენისა და მინარევეული ატომის ვაკანსიაში ჩაჯდომის ენერგიებს.

დიფუზიის დანადგარის სქემა მოცემულია ნახ.1.10.-ზე, სადაც შესაძლებელია, შენაცვლებით, როგორც n-, ასევე p-ტიპის უბნების მიღების პროცესების ჩატარება. თერმული დიფუზიის პროცესი ტარდება კვარცის ლუმელებში, რომლის გახურება ხდება მაღალსიხშირული წყაროთი და სადაც მისაბმელ აპარატში იქნება შესაბამისი მინარევი ნაერთთან ერთად, რომელიც არის, მაგალითად,  $AsH_3$ ,  $B_2H_6$ ,  $BBr_3$  ან  $POCl_3$ .

სილიციუმში ბევრი მინარევეული ატომი დიფუნდირებს კვანძთა შორის და ჩერდება მათში, ე.ი. ქმნის ჩანერგვის მყარ ხსნარებს. რადგანაც ატომის კვანძთა შორის გადასვლის ალბათობა უფრო მეტია, ვიდრე კვანძიდან კვანძში, ამიტომ მინარევის

ჩანერგვის დიფუზია უფრო სწრაფად მიმდინარეობს, ვიდრე ჩანაცვლების. დიფუზიის მეთოდით ნახევარგამტარში შეიძლება შევიყვანოთ მინარევი მოცემულ მაღალ ტემპერატურაზე, ზღვრულ გამხსნელობაზე ნაკლები კონცენტრაციით და ოთახის ტემპერატურამდე გაცივებისას იქნება ზღვრული. ნივთიერების დიფუზიური გადატანის პროცესების აღწერა შესაძლებელია ფიკის კანონებით.



ნახ.1.10. დიფუზიის დანადგარის სქემა

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

$$F = -D \frac{dN}{dx} \quad (1.6)$$

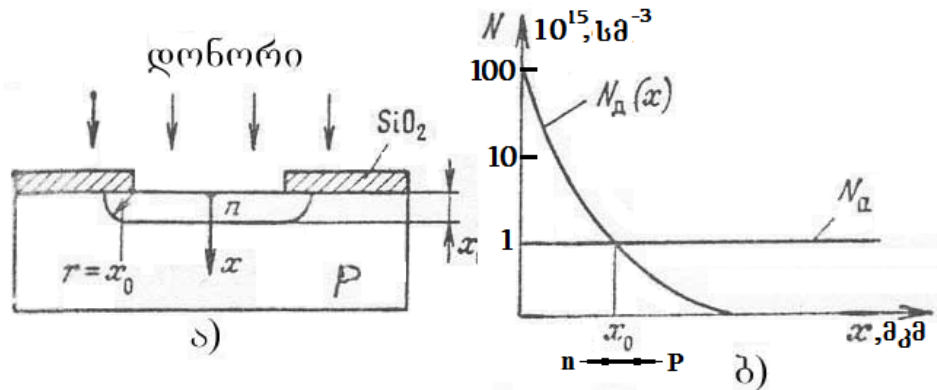
სადაც,  $D$  - დიფუზიის კოეფიციენტი, რომელიც რიცხობრივად ტოლია მინარეული ატომების რაოდენობისა, გამავალი დროის ერთეულში დიფუზიის მიმართულების მართობ ფართის ერთეულში, როცა მინარეული კონცენტრაციის გრადიენტი  $\frac{dN}{dx}$  ერთის ტოლია. ნიშანი მინუსი მიუთითებს, რომ დიფუზია მიდის კონცენტრაციის შემცირების მიმართულებით.

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

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} \quad (1.7)$$

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

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



ნახ.1.11. დიფუზიის პროცესი (ა)  
და მინარევის განაწილება სიღრმეში (ბ)

როგორც წესი, სილიციუმში მინარევის დიფუზია ხდება ლოკალურად,  $\text{SiO}_2$ -ის ნიღაბის გამოყენებით, სისქით  $\sim 0.5 \mu\text{m}$ . ნახ.1.11-ზე გამოსახულია დიფუზიის პროცესი (ა) და მინარევის განაწილება სიღრმეში (ბ). მინარევის კონცენტრაცია მაქსიმალურია ზედაპირზე და ეცემა ფირფიტის მოცულობაში (ნახ.1.11.ბ).  $x_0$  მანძილს, სადაც მინარევი, დონორული კონცენტრაცია ემთხვევა საფენში აქცეპტორულ  $N_a$  კონცენტრაციას, ეწოდება დიფუზიური შრის სისქე. ამ შემთხვევაში  $x_0$  ეთანადება  $p-n$  გადასასვლელის საზღვარს.

2. იონური ლეგირება. იონური ლეგირება არის ტექნოლოგიური პროცესი, როცა, ფირფიტის ზედაპირის მინარევის იონების ბომბარდირებით ხდება მინარევის შეყვანა ნიმუშში.

შემოთ განხილულ თერმული დიფუზიის პროცესს აქვს რიგი ნაკლოვანებები, რითაც მისი ფართო გამოყენება შეზღუდულია. მაგრამ მათ შორის გამორჩეულია ის, რომ ადგილი აქვს მინარევის შესვლას ნიღაბის ქვეშ, რაც იწვევს ზომის დამახინჯებას.

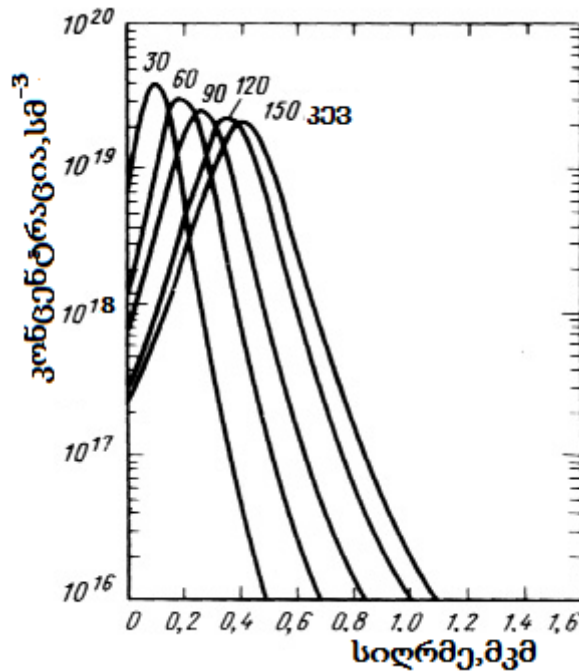
ამიტომ გამოიყენება ნახევარგამტარის სხვა ელემენტთა იონებით ლეგირება. ნახევარგამტარის კრისტალში მინარევის იონის შეყვანისთვის საჭიროა განსაზღვრული ენერგია, რომელსაც ის ღებულობს გარე ელექტრული ველიდან რამდენიმე ასეული კილოვოლტი ძაბვისას. იონური ლეგირების დანადგარში წინასწარ ღებულობენ მალეგირებელი ნივთიერების იონს ელექტრული და მაგნიტური ძალების მოქმედებით, აჩქარებენ სასურველ ენერგიამდე და გამოსასვლელზე ათავსებენ სა-



მიზნეს. ნახევარგამტარის, როგორც სამიზნის, ტემპერატურა არის ოთახის ან ახურებენ იმ ტემპერატურამდე, რომ მოხდეს დიფუზიის პროცესის აქტივაცია და შეყვანილი მინარევის გადანაწილება. როგორც დიფუზიის დროს, იონური ლეგირებისას ნახევარგამტარის ელექტრული გამტარებლობის ტიპის შეცვლა ხდება მინარევის ჩანაცვლებისას მესერის კვანძებში. ამ დროს მინარევის კონცენტრაციის მაქსიმუმი მდებარეობს ნახევარგამტარის სიღრმეში (ნახ.1.12), რომლის რეგულირება შესაძლებელია იონის ენერგიით. თუ იონური ნაკადი მიმართულია ქვესაფენის ზედაპირის მართობულად, მაშინ ლეგირებული არის კონფიგურაცია ზუსტად ემთხვევა ნიღბის კიდის საზღვარს და გვერდით ლეგირებას ადგილი არა აქვს.

იონური ლეგირება (იმპლანტაცია) იძლევა საშუალებას:

- 1) ზუსტად და განმეორადებულად განხორციელდეს მალეგირებელი იონის ჩანაცვლება მესერის კვანძებში იონური ნაკადის დენისა და დასხივების დროს კონტროლირებით;
- 2)  $p - n$  გადასვლის სიღრმის მიღების დიდი სიზუსტე (0,02მკმ-მდე);
- 3) პროცესის განხორციელების სისწრაფე (რამდენიმე წთ-ში) დანადგარის ჯგუფური ჩატვირთვისას კარგი განმეორადოვნებით;



**ნახ.1.12.** იონური ლეგირებისას ენერგიის მიხედვით მინარევის განაწილება სიღრმეში

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

მიუხედავად ამისა, იონურ ლეგირებას აქვს ზოგიერთი ნაკლოვანებები:

1) იონური ლეგირების შემდეგ საჭიროა ფირფიტის გამოწვა ( $650^{\circ}\text{C}$ ) მინარევის აქტივიზაციისა და მიღებული რადიაციული დეფექტის გაქრობისთვის;

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

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

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

პრაქტიკულად დიფუზია და იონური ლეგირება ხორციელდება ფირფიტის ზედაპირზე ლოკალურად  $\text{SiO}_2$  ან  $\text{Si}_3\text{N}_4$ -ის ნიღბების გამოყენებით, სისქით 0,5მკმ, რომელიც აღემატება ამ მასალებში იონების განარბენის შესაძლო მანძილებს.

### საკონტროლო კითხვები:

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

### 1.8. ეპიტაქსიით თხელი ფირების მიღება

ეპიტაქსია – ეს არის პროცესი, როცა მონოკრისტალურ (ნახევარგამტარის) ქვესაფენზე ეფინება (ნახევარგამტარის) ატომები და დაფენილი ფირი აგრძელებს ქვესაფენის სტრუქტურას და მის კრისტალოგრაფიულ ორიენტაციას. ხშირ შემთხვევაში ქვესაფენის და ფირის მასალა ერთნაირია (ჰომოეპიტაქსია), მაგრამ შეიძლება იყოს სხვადასხვა მასალა ახლომყოფი კრისტალური სტრუქტურით (ჰეტეროეპიტაქსია), მაგალითად, სილიციუმის ფირი საფირონზე. ეპიტაქსიური ფირი მიიღება ქვესაფენის ზედაპირის მთელ ფართობზე თანაბრად. პრაქტიკულად დიდი მნიშვნელობა

აქვს შემთხვევას, როცა ეპიტაქსიის პროცესში ხდება მინარევის, როგორც მალეგირებული ელემენტის შერჩევა. ქვესაფენის სხვადასხვა გამტარებლობის ტიპზე შეიძლება სხვადასხვა გამტარებლობის ტიპის ეპიტაქსიური ფირის მიღება. ამდენად, შეიძლება მივიღოთ ეპიტაქსიური ფირი ხვედრითი წინალობის დიდ დიაპაზონში, დამოუკიდებლად ქვესაფენის ხვედრითი წინალობისა. ეს იძლევა საშუალებას, მივიღოთ  $p-n$ ,  $n^+ - n$ ,  $p^+ - p$  და  $n^+ - p$  გადასასვლელები. ამიტომ ეპიტაქსიურ-პლანარული ტექნოლოგიით მიღებული თხელი ეპიტაქსიური ფირი ( $\sim 2-10$ მკმ), გაზრდილი ქვესაფენზე სისქით  $\sim 300$ მკმ., თამაშობს გადამწყვეტ როლს მიკრო- და ნანოტექნოლოგიაში.

ნახევარგამტარის ატომების წყაროს აგრეგატული მდგომარეობის მიხედვით, ეპიტაქსიური პროცესი იყოფა გაზურ, თხევად და მყარი ფაზის პროცესებად.

სილიციუმის ტექნოლოგიაში გავრცელება პოვა გაზურ-ფაზურმა ეპიტაქსიამ, როგორც მარტივმა პროცესმა და მისაღებმა სერიულ წარმოებაში. ამ დროს სილიციუმის და მინარევის ატომები გამოიყოფა შესაბამისი ორთქლისმაგვარი შენაერთიდან ქიმიური რეაქციის შედეგად და ეფინება სილიციუმის ქვესაფენს. ეპიტაქსიური ფენის ხარისხი განისაზღვრება შენაერთიდან გამოყოფილი სილიციუმის და მინარევის ატომების პირობით და ქვესაფენის ზედაპირის მდგომარეობით. ამისთვის მნიშვნელოვანია, უპირველეს ყოვლისა, რომ მესერის დაშენებაში მონაწილეობდნენ ცალკეული ატომები და არა მათი ჯგუფები (აგლომერატები), წინასწარ შეერთებულნი დაფენამდე. შესაბამისად, ქიმიური რეაქციის ხასიათი უნდა იყოს ჰეტეროგენური, ანუ შენაერთიდან სილიციუმის და მინარევის ატომის გამოყოფის შემდეგ კვლავშეერთება უნდა ხდებოდეს ქვესაფენის ზედაპირზე და არა აიროვან ფაზაში. სანყისი რეაგენტი ისე უნდა იყოს შერჩეული, რომ რეაქციის გვერდითი პროდუქტების მოლეკულები მოცემულ ტემპერატურაზე ადვილად ადსორბირდებოდეს ქვესაფენის ზედაპირიდან და არ აჭუჭყიანებდეს მიღებულ ფერს.

აღბათობა იმისა, რომ დაფენილი ატომი დაიკავებს მისთვის ხელსაყრელ მდგომარეობას, შესაბამის თავისუფალი ენერჯიის მინიმუმს, იზრდება ატომების ძვრადობის გაზრდით, ანუ ქვესაფენის ტემპერატურის ზრდით. ზედაპირზე ადსორბირებული ატომების დიდი სიმკვრივისას იზრდება მათ შორის მოქმედება და, შესაბამისად, მცირდება მათი ძვრადობა. აქედან გამოდის, რომ ეპიტაქსიური ფირის უფრო სრულყოფილი სტრუქტურა მიიღება სხვა დანარჩენი პირობების მუდმივობისას, ფირის ზრდის დაბალი სიჩქარეებისას.

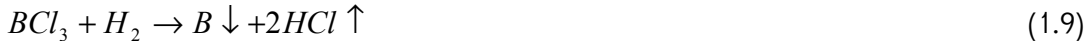
ეპიტაქსიური ფირის სრულყოფილი სტრუქტურის ფორმირებაში მნიშვნელოვანი წვლილი შეაქვს ქვესაფენის ფირფიტის ზედაპირს. დისლოკაციები, ნაპრალები და ქვესაფენის ზედაპირზე არსებული სხვა სახის დეფექტები აუარესებენ მზარდი ფირის სტრუქტურას. ამ ეპიტაქსიამდელი დეფექტების ნაწილობრივი შემცირება შეიძლება ზედაპირის წინასწარი ქიმიური მონამვლით. ეპიტაქსიის პროცესში წარმოიშობა დეფექტი, ე.წ. ჩანცობის დეფექტი. ამ დეფექტის წარმოშობის მიზეზია ის, რომ გამყოფ საზღვარზე ფირფიტა-ეპიტაქსიური ფირი მიიღება მექანიკური დაძაბულობა, გამონვეული ფირფიტისა და ფირის ლეგირების ხარისხისა და მესერის მუდმივის განსხვავებით. ეს დეფექტები იზრდება ფირის ზრდასთან ერთად, ერთდებიან და

ქმნიან სხვადასხვა სახის ბლოკების ფირში. ყოველივე ეს ამცირებს ფირის სტრუქტურის სრულყოფის ხარისხს.

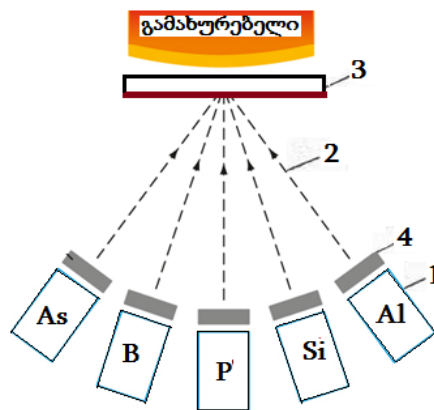
შენაერთიდან სილიციუმის გამოყოფისთვის გამოიყენება ალდგენითი და პიროლიზური რეაქციები. ალდგენითი რეაქციის დროს იყენებენ სილიციუმის ტეტრაქლორიდს -  $SiCl_4$ , ხოლო პიროლიზის დროს სილანს -  $SiH_4$ . ტემპერატურა პიროლიზის დროს უფრო დაბალია, ვიდრე ალდგენისას, მაგრამ სილანი ადვილად ალდება და ტოქსიკურია, ამიტომ მისი შენახვისა და ხმარებისთვის საჭიროა სპეციალური ჭურჭელი და დანადგარები. ამის გამო უფრო ხშირად გამოიყენება ალდგენითი რეაქციები.  $SiCl_4$ -ის გაშლით ეპიტაქსისას რეაქციის განტოლება ასეთია:



ეს პროცესი მიმდინარეობს ფირფიტების ზედაპირებთან ახლოს. აქ წყალბადი გამოიყენება, როგორც გაზმატარებელი, რომელსაც მიაქვს ნარევი ფირფიტის ზედაპირამდე. ეპიტაქსიური ფირის ლეგირებისთვის გამოიყენება ან  $BCl_3$  (აქცეპტორულისთვის), ან ფოსფინი  $PH_3$ , ან არსინი  $AsH_3$  (დონორულისთვის):



(1.8) განტოლებით მიღებული  $Si$ -ის ატომები აღსორბირდებიან ფირფიტის ზედაპირზე, განიცდიან მასზე მიგრაციას, ერთდებიან კრისტალური მესერის კვანძებში და ფირი მიიღება ფირფიტის სტრუქტურის გაგრძელებით. (1.9)-ით მიღებული დონორული ან აქცეპტორული ატომები თავსდებიან, შესაბამისად, კვანძებში და იძლევიან შესაბამისი ტიპის გამტარებლობის ეპიტაქსიურ ფირებს. მაღალი ტემპერატურის გამო მინარევეები გადის ქვესაფენშიც და, პირიქით, ქვესაფენიდან ამოდის ფირში. ამიტომ გამყოფი საზღვარი ფირფიტა-ეპიტაქსიური ფირი არ არის მკვეთრი. უფრო მკვეთრი საზღვრისა და ფირის თხელი სისქის მიღებისთვის გამოიყენება მოლეკულურ-სხივური ეპიტაქსია (ნახ.1.13). ის დაფუძნებულია ეპიტაქსიური მასალის ნაკადისა და ქვესაფენის მასალის ურთიერთქმედებაზე.



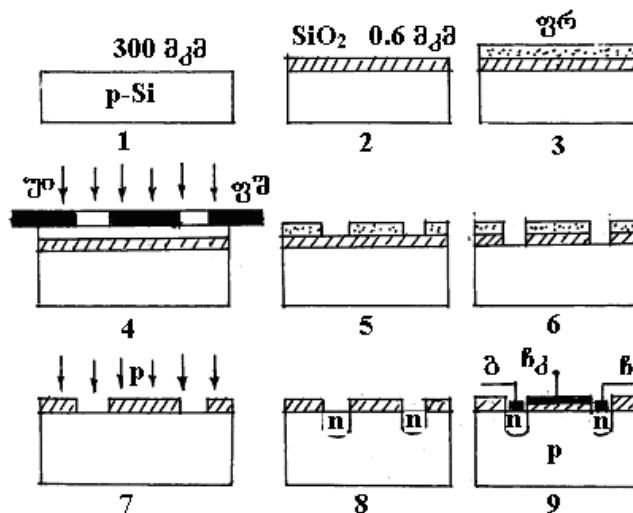
**ნახ.1.13.** მოლეკულურ-სხივური ეპიტაქსიის დანადგარის სქემა:

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

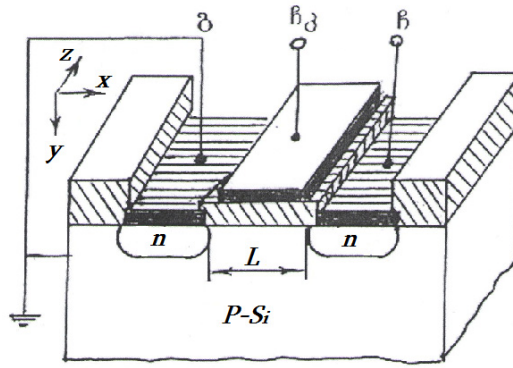
ეპიტაქსიური პროცესი მიმდინარეობს  $\sim 10^{-7}$ პა ვაკუუმში, ქვესაფენის ტემპერატურა შედარებით დაბალია  $\sim 600^{\circ}\text{C}$ . ვაკუუმის ხუფის შიგნითაა როგორც ძირითადი, აგრეთვე, მალეგირებელი ელემენტების დამჭერების სპეციალური ჭურჭელი (ნახ.1.13 1). შეიძლება მათი აორთქლება ტემპერატურით ან ლაზერის სხივით. აორთქლება შეიძლება ერთი ან ორი ამორთქლებლიდან, რითაც შესაძლებელია ქვესაფენზე მონოფირის ან ლეგირებული ფირის დატანა. ეპიტაქსიური ფირის სისქის რეგულირება შეიძლება დროის მიხედვით საფარის რეგულირებით (ნახ.1.13-ის 4). წყაროს ტემპერატურის ან ლაზერის სხივის სიმძლავრის და ქვესაფენის ტემპერატურის რეგულირებით შეიძლება მივიღოთ სასურველი ქიმიური შედგენილობის და სტრუქტურის ეპიტაქსიური ფირი.

### 1.9. სქემის შექმნა ველის ტრანზისტორის მაგალითზე

ნახ.1.14-ზე მოცემულია ველის ტრანზისტორის მიღების ტექნოლოგიური მარშრუტი. საფენად აღებულია სილიციუმის ფირფიტა სისქით 300 მკმ, p-ტიპის, 4,5 ომი•სმ კუთრი წინალობით, ინმინდება ქიმიურად (ნახ.1.14-ის 1). იჟანგება თერმულად  $\sim 0,6$  მკმ სისქემდე ისე, როგორც აღწერილია ამ თავის §1.5-ში (ნახ.1.14-ის 2). შემდეგ ეფინება ფოტორეზისტი (ნახ.1.14-ის 3), ტარდება ფოტოლიტოგრაფიის პროცესი (ნახ.1.14-ის 4-6) გამომდენი და ჩამდენი არეების მიღებისთვის იმ პირობებით, როგორც აღწერილია §1.3-ში. ამის შემდეგ ტარდება ფოსფორის დიფუზია (ნახ.1.14 8), როგორც აღწერილია ამ თავის § 1.7-ში. მთლიანად იხსნება ჟანგი, კვლავ იჟანგება 0,1 მკმ სისქემდე, ხდება ფოტოლიტოგრაფია ჩამკეტქვეშა დიელექტრიკის ფორმირებისთვის, ეფინება მეტალი, მაგალითად ალუმინი, ტარდება ფოტოლიტოგრაფია გამომყვანების და საკონტაქტო ფართობების მისაღებად (ნახ.1.14-ის 9), რომლის საბოლოო სახე მოცემულია ნახ.1.15-ზე.



ნახ.1.14. ველის ტრანზისტორის მიღების ტექნოლოგიური მარშრუტი



ნახ.1.15. ველის ტრანზისტორის საბოლოო სახე

### 1.10. ტოპოლოგიის შექმნა და ხელსაწყოს მოდელირება

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

1. დიდი ინტეგრაციის ქვესაფენის ზედაპირზე ნახევარგამტარული იმს-ის ყველა ელემენტის ურთიერთმიმართება უნდა იყოს რაც შეიძლება მჭიდრო. მაგრამ ამ დროს იზრდება ელემენტებს შორის პარაზიტული კავშირები, სითბოცვლა და საკუთარი ხმაურის დონე;

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

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

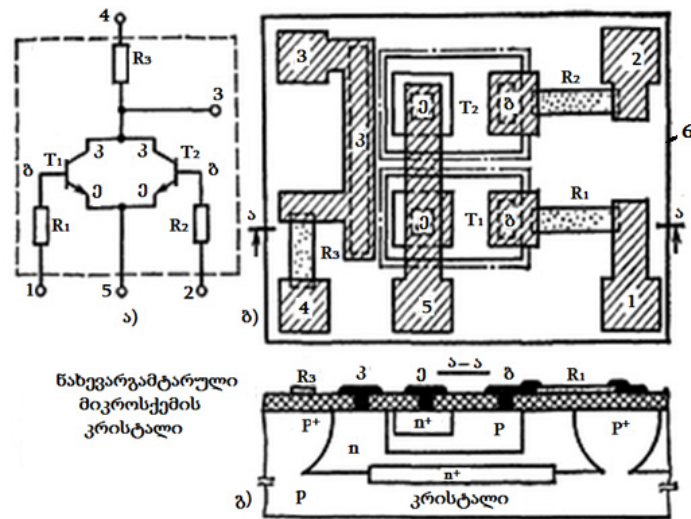
- საწყისი მონაცემების მიღება და შეთანხმება;
- იმს-ის ელემენტების სტრუქტურის გამოთვლა და სიზუსტე;
- ქვესაფენზე ან მის მოცულობაში სქემური ელემენტების განლაგება და კვანძთაშორისო შეერთებების შედგენა;
- ტოპოლოგიის წინასწარი ვარიანტის შექმნა;
- მიღებული ტოპოლოგიის ოპტიმიზაცია, ანუ შესწორებები (თუ საჭიროა)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

იმს-ის ტოპოლოგიის შემუშავებას იწყებენ საერთო ელექტრული, კონსტრუქციული და ტექნოლოგიური მონაცემების მიღებით და მათი ურთიერთშეთანხმებით. საწყისი ელექტრული მონაცემები ითვალისწინებს ელექტრული სქემის შედგენას საჭირო ელექტროფიზიკური პარამეტრებით, იმს-ის ელემენტებისთვის განსაზღვრული ზომების და სტატიკური და დინამიკური პარამეტრების მიცემას. კონსტრუქციული მონაცემები გულისხმობს იმს-ის ელემენტების განლაგებას კრისტალის ზედა-

პირზე, მათი შეერთების, კონტაქტური ფართების ზომების განსაზღვრას და კორპუსის გამომყვანებთან მათ შეთანხმებას. ყველა ზომა მოიცემა სპეციალურ ნახაზზე იმ მასშტაბით, რა მასშტაბითაც შემდეგ გამოიხაზება ცალ-ცალკე იმს-ის ტოპოლოგიური ნახაზები შრეების სახით, რომელთა შემცირების შემდეგ განსაზღვრული მასშტაბით მზადდება ფოტოშაბლონის კომპლექტი.

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

იმს-ის ტოპოლოგიის შექმნა რთული პროცესია და საჭიროებს დიდ სიზუსტეს დაწყებული ქვესაფენის დაჟანგვიდან, დამთავრებული კრისტალის კორპუსში ჩასმამდე. ამიტომ აუცილებელია, ფოტოშაბლონის კომპლექტში სხვადასხვა ფენის შაბლონის ურთიერთშეთანხმებისთვის გაკეთდეს შეთავსების ნერტილები. ამ ნერტილებს ტოპოლოგიაში უნდა ჰქონდეს განსაზღვრული ადგილი. ნახ.1.16-ზე მოცემულია იმს სტრუქტურა პრინციპული ელექტრული სქემით, შესაბამისი იმს-ის სახით ჭრილში და შესაბამისი ტოპოლოგიური ნახაზით პლანარული ტექნოლოგიით მისაღებად. საწყისი ელექტრული მონაცემებით ითვლება აქტიური ( $T$ ) და პასიური ( $R$ ) ელემენტების ელექტროფიზიკური პარამეტრები, მათთან თანხმდება კომპონენტთაშორისო სადენების და საკონტაქტო ფართის პარამეტრები. ამის შემდეგ იხაზება პრინციპული ელექტრული სქემა (ნახ.1.16 ა). იმს-ის კონსტრუირებისას აუცილებელია აქტიური და პასიური ელემენტების, მეტალის სადენის და საკონტაქტო ფართის გეომეტრიული ზომის დადგენა და ურთიერთგანლაგება ისე, რომ რაც შეიძლება ნაკლები გადაკვეთის ნერტილები წარმოიშვას სადენების შეერთებისას (ნახ.1.16 ბ). შემუშავებულ ტოპოლოგიაში უნდა იყოს გათვალისწინებული შემოჭრის ხაზი (ნახ.1.16 ბ-ზე 6), რომელზეც ხდება მიღებული საბოლოო კრისტალის შემოჭრა (ნახ.1.16 გ) ცალკეული იმს-ის კრისტალების მისაღებად.



**ნახ. 1.16.** ნახევარგამტარული სქემის ტოპოლოგია: ელექტრული სქემა (ა), ტოპოლოგიური ნახაზი(ბ) და სქემა განხორციელებული კრისტალში (გ)

ნახაზ 1.16 გ-ზე გამოსახულია კრისტალზე მიღებული სქემა ტოპოლოგიის და შესაბამისი ფოტოშაბლონის კომპლექტის შექმნის შემდეგ. კარგად ჩანს ტექნოლოგიური პროცესების თანმიმდევრობა, რომელიც განსაზღვრულია შესაბამისი ტექნოლოგიური მარშრუტით.

### 1.11. ინტეგრალური სქემები და მათი კლასიფიკაცია

ინტეგრალური სქემები, დამზადების და ტექნოლოგიური მიღების თვალსაზრისით, იყოფა: ნახევარგამტარულ, ფიროვან და ჰიბრიდულ სქემებად.

**ნახევარგამტარულ** ინტეგრალურ სქემაში მისი ელემენტები მოთავსებულია ქვესაფენ ნახევარგამტარის ზედაპირისნინა არეში. ამ შემთხვევაში ელემენტები განლაგებულია ერთ სიბრტყეში, გამოიყვანებით ქვესაფენის ზედაპირზე, ანუ შექმნილია პლანარული ტექნოლოგიით. ასეთი სქემები მიჩნეულია თანამედროვე მიკროელექტრონიკის ძირითად სქემებად.

**ფიროვანი** სქემები მიკროსქემებია, სადაც ელემენტები შექმნილია დიელექტრიკული ქვესაფენის ზედაპირზე დაფენილი სხვადასხვა სახის ფირებით. ეს შეიძლება იყოს თხელ ( $1\pm 2$  მკმ) და სქელფიროვანი ( $5\pm 20$  მკმ) სქემები. ფიროვანი სქემები შეიცავს მხოლოდ პასიურ ელემენტებს. ამიტომ ასეთი სქემების ფუნქციები შემოსაზღვრულია.

**ჰიბრიდული** ინტეგრალური სქემა არის სქემა, სადაც ფიროვანი და დისკრეტული სქემებია გაერთიანებული ერთ დიელექტრიკულ ქვესაფენზე. დისკრეტული ელემენტები დაწებებულია და შეერთებები მათსა და ფიროვან ელემენტებს შორის არის სივრცულად გამტარებით. ამიტომ აქტიურ ელემენტებს უწოდებენ დაკიდებულ ელემენტებს.

კიდევ გვხვდება ერთი სახის შერეული ინტეგრალური სქემა, სადაც აქტიური ელემენტები ფორმირდება ნახევარგამტარის ზედაპირისნინა არეში და პასიურ ელემენტზე – ფირების სახით მის ზედაპირზე.

ინტეგრალური მიკროსქემის (იმს) შექმნის ტექნოლოგიური დონის შეფასების ერთ-ერთი ძირითადი კრიტერიუმია ინტეგრაციის ხარისხი. ის გვიჩვენებს ინტეგრალური სქემის სირთულის ხარისხს, რომელიც ხასიათდება კრისტალში (უცხოურ ლიტერატურაში იხმარება chipirun) ინტეგრალური ტექნოლოგიით შექმნილ ელემენტთა რიცხვით. ინტეგრაციის ხარისხის გამოსახატავად ხმარობენ ხარისხის რიცხვს  $k = \lg N$ , სადაც  $N$  - ელემენტთა რიცხვია კრისტალში.  $k$ -ს მნიშვნელობის მიხედვით, ინტეგრალურ სქემებს ყოფენ დაბალი ინტეგრაციის ( $k \leq 1$ , ანუ  $N \leq 10$ ), საშუალო ინტეგრაციის ( $k \leq 2$ ), დიდი ინტეგრაციის ( $k \leq 3$ ) და ზედიდი ინტეგრაციის ( $k > 3$ , ანუ  $N > 100$ ) სქემებად.

ნებისმიერი სახის ინტეგრალური სქემისთვის ძირითადი და ყველაზე რთული ელემენტი არის ტრანზისტორი. მათი მუშაობის ფიზიკური პრინციპების მიხედვით, ტრანზისტორები იყოფა ბიპოლარულ და უნიპოლარულ (ველის) ტრანზისტორებად. ჰიბრიდულ ინტეგრალურ სქემაში გამოიყენება უკოორპუსო დისკრეტული ბიპოლარული და ველის ტრანზისტორები. ნახევარგამტარულ ინტეგრალურ სქემაში გამოყენებული ეს ტრანზისტორები შექმნილია პლანარული ტექნოლოგიით და სქემა მოთავსე-



ბულია ჰერმეტიულად შესაბამის კორპუსში. გარე ზემოქმედებისგან დაცვის მიზნით, ყველა ინტეგრალური სქემა დახურულია ჰერმეტიულად. კორპუსიანი სქემა ჰერმეტიულად იხურება ვაკუუმში, ხოლო უკორპუსო – ებოქსიტიტ ან სპეციალური ლაკით.

ფუნქციონალური დანიშნულების მიხედვით, ინტეგრალური სქემები იყოფა ციფრულ (ლოგიკურ), ანალოგურ (წრფივ) და ანალოგურ-ციფრულ სქემებად, მონყობილობაში მათი გამოყენების მოთხოვნისა და ფართო და სპეციალური მოხმარების სქემების შესაბამისად.

ციფრული სქემის საფუძველია ტრანზისტორული გასაღები – მეტალი კონტაქტის გასაღები. მისთვის დამახასიათებელია ორი მდგრადი მდგომარეობა: გახსნილი და ჩაკეტილი. მარტივი გასაღების ბაზაზე იგება უფრო რთული სქემები: ლოგიკური, ბისტაბილური, ტრიგერული და ა.შ.

ანალოგური სქემის საფუძველია უბრალო გამაძლიერებლის უჯრედი – კასკადები ან საფეხურები. გამაძლიერებელი კასკადის საფუძველზე იგება უფრო რთული (მრავალკასკადიანი) გამაძლიერებლები, სტაბილიზატორები (დენის ან ძაბვის), სიხშირის გარდამქმნელები (მოდულატორები, დეტექტორები), სინუსოიდალური რხევების გენერატორები და ა.შ. ასეთ სქემებს ხშირად უწოდებენ წრფივს ან კვაზინწრფივს.

მოსახერხებელი იქნება ციფრული და ანალოგური სქემების სპეციფიკასა და ხარისხობრივი განსხვავების შესახებ ცნობილი იყოს მათი ე.წ. გარდამავალი მახასიათებლის განხილვისას. ეს მახასიათებელი იძლევა კავშირს შესავალ და გამოსავალ ძაბვებს შორის.

იმისდა მიხედვით, თუ რა კონსტრუქციის და ფუნქციონალური დანიშნულების საფუძველზე რომელი იმს მზადდება, ტექნოლოგიური პროცესების რიცხვი და მიმდევრობა არის სხვადასხვა. ეს ოპერაციები გაერთიანდა დამოუკიდებელ ტექნოლოგიურ ეტაპებად, რომლებიც შეიძლება დაიყოს სამ ძირითად ჯგუფად:

პირველი – წინასწარი სამუშაოების მიზანია, მიიღოს ნახევარგამტარული მონოკრისტალური ძელაკი – განსაზღვრული ელექტროგამტარებლობის ტიპის და ხვედრითი წინალობით; ძელაკის დაჭრა ფირფიტებად და მათი ზედაპირების დამუშავება მექანიკურად და ქიმიურად; მაკროდეტალის კორპუსის შექმნა.

მეორე – დამუშავებითი, აერთიანებს ყველა იმ ოპერაციას, რომელიც საჭიროა იმს-ის სტრუქტურის ფორმირებისათვის. ყველა ამ პროცესის დასრულების შემდეგ საკონტროლო ფირფიტაზე შემონმდება პროცესის ხარისხი.

მესამე – აკრება და კონტროლში შედის ერთ ფირფიტაზე მიღებული იმს-ების განცალკევება, ანუ ფირფიტის დაჭრა განსაზღვრულ ხაზებზე, მათი ჩანებება კორპუსში, სადენების შეერთება კორპუსთან ოქროს სადენებით, ჰერმეტიზაცია, მექანიკური და კლიმატური გამოცდა იმს-ის პარამეტრებზე და მარკირება.

განსაკუთრებული მნიშვნელობა აქვს, სამივე ჯგუფის პროცესების ჩატარების ბოლოს იყოს ფირფიტადან იმს-ის რაც შეიძლება დიდი პროცენტული გამოსავალი, მისი პარამეტრების განმეორადობა და სტაბილურობა. ამისთვის საჭიროა ყველა პროცესი ჩატარდეს სუფთა კლიმატურ ატმოსფეროში და ამ დროს გამოყენებული ყველა კომპონენტი – გაზი, ქიმიური რეაქტივები და სითხეები – იყოს ტექნიკურად სუფთა.

კლიმატური ატმოსფეროს სისუფთავე მოიცავს ტემპერატურის მუდმივობას, სინოტივის სტაბილურობას და ჰაერის 1მ<sup>3</sup> მოცულობაში მტვრის ნაწილაკების რაც შეიძლება მცირე რაოდენობის არსებობას.

ატმოსფეროს ტემპერატურა, პირველ რიგში, მოქმედებს ფოტოლიტოგრაფიის ხარისხზე და ტექნოქიმიურ პროცესებზე. ტემპერატურის ცვლილებით იცვლება ფოტორეზისტორის სიბლანტე და ქიმიური პროცესების ჩატარების სიჩქარეები, რაც უარყოფითად მოქმედებს საბოლოო პროცენტულ გამოსავალზე და იმს-ის პარამეტრების განმეორებადობაზე.

სინოტივის ცვლილებისას ხდება ფირფიტის ზედაპირზე ჰაერიდან სხვადასხვა მოლეკულების ადსორბცია, რაც ქმნის არაკონტროლირებად და არასასურველ შენაერთებს ზედაპირზე, ასევე დიფუნდირებენ მოცულობაში. აღსანიშნავია, რომ ჰაერიდან წყლის მოლეკულების ადსორბცია უფრო ინტენსიურია, ვიდრე სხვა მოლეკულების, ამიტომ სასურველია, ჰაერის სინოტივე რაც შეიძლება ნაკლები იყოს, მაგრამ არანაკლები სანიტარული ნორმის 30%-ისა.

ჰაერის ჰიგიენა ხასიათდება მტვრიანობით, რაც გულისხმობს 1 ლიტრ ჰაერში 0,5 მკმ-ზე ნაკლები ზომის მტვრის ნაწილაკის რაოდენობით. მტვრის ნაწილაკმა დამზადებული იმს-ის ზედაპირზე მოხვედრისას შეიძლება გამოიწვიოს მასში მოკლე ჩართვა, გარღვევა და ა.შ.

ზემოთ ჩამოთვლილი მოთხოვნების დასაკმაყოფილებლად იქმნება სპეციალური ოთახები, რომლებშიც მოთავსებულია ყველა ტექნოლოგიური დანადგარი და ტარდება იმს-ის შექმნის ყველა პროცესი.

იმს-ის შექმნაში დიდი მნიშვნელობა აქვს სამუშაო წყლის სისუფთავეს. ის გამოიყენება ყველა ქიმიური პროცესის რეაგენტების განმენდა-დასუფთავებისთვის. წყალს წინასწარ ასუფთავებენ სხვადასხვა იონებისა და კოლოიდური ხსნარებისგან დისტილაციის და დეიონიზაციის მეთოდების გამოყენებით, სადაც იხმარება სპეციალური ფილტრები და დანადგარ-მონყობილობები უი სხივების დამუშავებით. წყლის სისუფთავეს განსაზღვრავენ მისი მოცულობის ხვედრითი წინააღმდეგობით. მისი 1 ლ-ის მოცულობის ხვედრითი წინააღმდეგობა უნდა იყოს (10-18) მომი, როცა ჩვეულებრივისთვის - (3-6) კომ-ია.

### საკონტროლო კითხვები:

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

## 2. მიკროდან ნანოტექნოლოგიაზე გადასვლის თავისებურებანი

მიკროელექტრონიკის განვითარების ძირითადი ტენდენციაა ინტეგრაციის ხარისხის და იმს-ის სწრაფქმედების გაზრდა. მან თავისი განვითარების გზაზე დღემდე გაიარა რამდენიმე ეტაპი. გასული საუკუნის 50-იან წლებში გამოგონებულ იქნა პირველი ნახევარგამტარული (ბიპოლარული) ტრანზისტორი (ჯ. ბარდინი, უ. ბრატაინი, უ. შოკლი – 1956 წელს ნობელის პრემია). 60-იან წლებში შემოთავაზებული იყო ინტეგრალური სქემის შექმნის კონცეფცია, აგრეთვე, მონოკრისტალური სილიციუმის ზედაპირზე პირველად დამზადდა მდნ-ველის ტრანზისტორი ჩამკეტქვეშა  $\text{SiO}_2$  დიელექტრიკით. 70-იან წლებში შემუშავდა p- და n-არხიანი მდნ-ტრანზისტორების შექმნის ტექნოლოგია. მათი გაერთიანებით შეიქმნა ე.წ. კომპლემენტარული მდნ ხელსაწყო, რომელიც დღესაც ითვლება დიდი ინტეგრალური სქემის ძირითად შემადგენელ ნაწილად.

სილიციუმზე იმს-ის პლანალური ტექნოლოგიის ათვისების შემდეგ, მისი სრულყოფა და წარმოება განუხრელად იზრდება. ბოლო 50 წლის განმავლობაში შენარჩუნებულია მურის კანონი, რომლის თანახმად, ამ პერიოდში ყოველ წელიწად-ნახევარში იმს-ში ელემენტთა რიცხვი ორჯერ იზრდება. ამას ეთანადება, შესაბამისად, ცალკეული მასში შემავალი ელემენტების ზომების ყოველმხრივი შემცირება, სწრაფქმედების გაზრდა, ენერგომოხმარებისა და ღირებულების შემცირება.

იმს ელემენტების რიცხვის (პირველ რიგში, ტრანზისტორების რიცხვის) ექსპონენციალურმა ზრდამ მოგვცა ის, რომ მარტო 2005 წელს მთლიანად იქნა წარმოებული  $\sim 10^{19}$  ტრანზისტორი (დედამინის ყოველ მოსახლეზე 1 მილიარდი ცალი ტრანზისტორი), რაც სამი რიგით მეტია მსოფლიოში ყოველწლიურად წარმოებულ ხორბლის მარცვალზე. შესაბამისად, ერთი მარცვლის და 1000 ტრანზისტორის ფასები ერთნაირია.

მაშასადამე, თითქმის ნახევარი საუკუნის განმავლობაში მიკროელექტრონიკა ვითარდება ძალიან სწრაფად, კომპაქტურად, მოწყობილობების ღირებულების შემცირებით. მაგრამ ამ ტენდენციის შემდგომი გაგრძელების გზაზე გვხვდება სხვადასხვა ხარისხის ფუნდამენტური სიძნელები, რომლებიც, ძირითადად, ელემენტების ზომების შემცირებასთანაა დაკავშირებული. მინიატიურიზაციის გზაზე არის ისეთი საზღვრები, რომელთა გადალახვაც შესაძლებელია ალტერნატიული მეთოდებით, მაგრამ იმის იქით, უკვე არის შემოსაზღვრულობა, შეზღუდვები, რომლებსაც ალტერნატივა არა აქვს.

ძირითადად, ფუნდამენტური სიძნელებია: ტექნოლოგიური (ფოტოლიტოგრაფია), ფიზიკური (თერმოდინამიკა, ელექტროდინამიკა და კვანტური მექანიკა) და ენერგეტიკული (ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრი).

იმს-ის შექმნის ტექნოლოგიაში ფოტოლიტოგრაფიის პროცესი არის საფუძველი და, ამასთანავე, ყველაზე ძვირი. ფოტოლიტოგრაფიაში გამოყენებული ულტრაიისფერი გამოსხივება არ არის გამოსადეგი 100ნმ ზომების ქვემოთ, რადგან ამ ზომის ფოტომაბლონი მოსალოდნელია სხივის დიფრაქცია. ამრიგად, იმს-ის ინტეგრაციის შემდგომი გაზრდისა და მინიატიურიზაციის გზაზე საჭიროა ლიტოგრაფიის გარჩე-

ვის უნარიანობის გაზრდა, რომელიც გამოისახება რელიეს თანაფარდობით  $d = \frac{\kappa\lambda}{A}$ ,

სადაც მუდმივი  $k=0,6$ -ს;  $\lambda$  – გამოყენებული გამოსხივების ტალღის სიგრძე და  $A$  გამოყენებული ოპტიკის მუდმივაა, რომლის მაქსიმალური მნიშვნელობა რეალურ პირობებში ტოლია  $0,8$ -ის. აქედან ცხადია, რომ გარჩევისუნარიანობის გაზრდისთვის ( $d$ -ს შემცირებისათვის) საჭიროა შევამციროთ  $\lambda$ . ამ მიზნით შეიძლება გამოვიყენოთ ფოტოლიტოგრაფიის ალტერნატიული მეთოდები – რენტგენული და ლაზერული ლიტოგრაფია. ლაზერული ლიტოგრაფია იძლევა საშუალებას, შეიქმნას ელემენტი  $10$ ნმ და უფრო მცირე ზომით. შეიძლება ექსიმერული ლაზერების გამოყენება, მაგრამ უნდა აღინიშნოს, რომ გამოსხივების  $\lambda \leq 200$ ნმ-ით ჰაერით შთაინთქმება, ამიტომ ასეთი გამოსხივებისთვის საჭიროა ვაკუუმი.

დღემდე გადაუჭრელია ბევრი საკითხი, რომელიც დაკავშირებულია ფიზიკურ სიძნელეებთან. უპირველეს ყოვლისა, ესაა კომპონენტთაშორისო შეერთების პრობლემა: თანამედროვე იმს-ში ფართის მხოლოდ  $20\%$  უკავია ელემენტებს, ხოლო დანარჩენი  $80\%$  – მათ შორის შეერთებებს. დღესდღეობით შესაძლებელია ნანომეტრული მასშტაბის ტრანზისტორული სტრუქტურის შექმნა, ხოლო მათი ინტეგრაციისა და ჯგუფური ტექნოლოგიის შექმნის საკითხი გადაუჭრელია. ეს იმიტაა გამოწვეული, რომ კომპონენტთაშორისო მეტალიზაციის ზომების (განივკვეთის) შემცირება იწვევს მასში დენის გავლისას გახურებას (ჯოულის სითბოს გამოყოფა), რაც იწვევს სითბოართმევის პირობების წინა მხარეზე წამოწევას.

ელექტროდინამიკური შეზღუდვები განპირობებულია სქემაში კონდენსატორების და მასალის ინერციულობასთან, რაც აფერხებს დენის და ძაბვის სწრაფ შეცვლას ერთიდან მეორე მდგომარეობაში ხელსაწყოს გადართვისას. ინფორმაცია მუშავდება და ინახება სქემაში ცალკე ბიტების (ლოგიკური „ნული“ და „ერთი“) სახით, რომელიც ფიზიკურად ხორციელდება დენის, ძაბვის ან მუხტის გადაცემით ან შენახვით სქემის განსაზღვრულ წერტილში. მუხტის მატარებლების მოძრაობის და ელექტრომაგნიტური ტალღის გავრცელების სიჩქარის სასრულობა სქემაში იძლევა დამატებით შემოფარგვლას მისი სწრაფქმედების მიმართ.

კვანტურ-მექანიკური შეზღუდვა ვლინდება ელემენტის ზომის შემცირებისას ატომურ მასშტაბამდე იმით, რომ შესამჩნევი ხდება ატომური და ელექტრონული დისკრეტულობა ნაწილაკთა გადატანისა და ურთიერთქმედების დროს. ზომის მიახლოება ელექტრონის დე ბროილის ტალღის სიგრძესთან იწვევს ელექტრონული სპექტრის დეფორმაციას და დისკრეტულობას, ნივთიერების ელექტრული, მაგნიტური და ოპტიკური თვისებების შეცვლას. მასის შემცირება (შესაბამისად, ნაწილაკის  $P$  იმპულსის და  $E$  ენერჯიის) იწვევს მისი მდებარეობის ( $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ ) განუსაზღვრულობის გაზრდას და მოცემული მდგომარეობის არსებობის გახანგრძლივებას

( $\Delta t$ ) ჰაიზენბერგის განუსაზღვრულობის პრინციპის შესაბამისად:  $\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$  და

$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ . უწყვეტი სპექტრის ტრანსფორმაცია, განაწილება, მდგომარეობა, დამახასიათებელი მოცულობითი სხეულისათვის, გადასული დისკრეტულ სპექტრში მცი-

რე ზომის ობიექტებისთვის, გვეხმარება ახალი პრინციპებისა და ხერხების შექმნაში ციფრულ ტექნიკაში ნანოხელსაწყოების მართვისთვის. რამდენიმე რიგით ზომების შემცირება პრაქტიკულად ცვლის ნანოელემენტის მუშაობის ფიზიკურ საფუძველს. ნანოელემენტში გამოიყენება უკვე არა ელექტრონი, როგორც ელექტრული მუხტის გადამტანი ნაწილაკი, არამედ მისი ტალღური ფუნქცია.

ნანოელექტრონული ელემენტი, როგორც წესი, შედგება კვანტური ორმოებისა და პოტენციალური ჯებირების ერთობლიობისაგან. ასეთი ელემენტების ენერგეტიკული სპექტრი დამოკიდებულია ზომებზე. შედარება მიკროელექტრონული და ნანოელექტრონული ელემენტის შექმნასა და ფუნქციონირებაში მოცემულია ცხრ. 2.1-ში, ხოლო მათი ზომები ცხრ. 2.2-ში:

ცხრილი 2.1:

**ზოგიერთი პარამეტრებით მიკრო და ნანოელექტრონიკის შედარება**

№	მიკროელექტრონიკა	ნანოელექტრონიკა	
		3	4
1.	ძირითადი მასალა Si და CaAs	1.	ფოტომაბლონში მგრძნობიარობის (ზომის) შეზღუდვა მასში სინათლის დიფრაქციით
2.	დიელექტრიკის ფორმირება $T=(700-1150)^{\circ}C$	2.	ელექტრონის ტალღის სიგრძე $\lambda \sim 0,8$ მკმ
3.	ფოტოლიტოგრაფია	3.	XXX
4.	ლოკალური დიფუზია ( $T=1150^{\circ}C$ ) ან იონური ლეგირება (გამონვა $T=700^{\circ}C$ )	4.	XXX
5.	იმს-ის ელემენტები: ტრანზისტორი, დიოდი, რეზისტორი, კონდენსატორი	5.	XXX
6.	q მუხტის გადამტანი m მასის ნაწილაკები	6.	m და q $\rightarrow$ e-ის ტალღით
7.	დენი – დრეიფული და დიფუზიური	7.	XXX
8.	იმს-ში „შესავალი“ და „გამოსავალი“ დაცილებულია სივრცულად	8.	„შესავალი“ და „გამოსავალი“ დაცილებულია დროში
9.	იმს მდგრადი მდგომარეობა – ლოგიკური „1“ ან „0“	9.	ლოგიკური „1“ და „0“ $\rightarrow$ სპინით
10.	მასალები: ლეგირებული ნახევარგამტარები, დიელექტრიკები, მეტალები	10.	ახალი მასალები ( $C_{60}$ , $C_{70}$ , $N_{20}$ , ნანამილაკები, ნანონერტილები, ნანორგანიკები,...)

11.	იმს-ის ინტეგრაციის ხარისხი – 8	11.	ინტეგრაციის ხარისხი – 10
12.	ტაქტის სიხშირე – 10 გჰც	12.	ტაქტის სიხშირე 10 ტჰც
13.	რობოტის შექმნა	13.	ნანობატის შექმნა მიკრობის ზომის (ნანომეტრის რიგის)
14.	კომპიუტერში ინფორმაციის გარდაქმნა, დამუშავება და შენახვა	14.	უინერციო, მცირე ზომის კომპიუტერის შექმნა
15.	მეხსიერება – 50 მგბაიტი (2.ი)	15.	ბატო » ბაიტზე (2 <sup>ი</sup> )
		16.	მასალებში მაგიური რიცხვი – ზომა ცვლის თვისებებს და ელექტრონის სპექტრს.
		17.	მასალის მიღება „ზემოდან“ და „ქვემოდან“
		18.	ბუნებაში არარსებული მასალის მიღება
		19.	მოხმარების მცირე ენერგოდანახარჯები

მიუხედავად იმისა, რომ ნანოელექტრონიკა არის 21-ე საუკუნის მეცნიერება, მიკროელექტრონიკა მაინც რჩება ერთ-ერთ პრიორიტეტულ მიმართულებად, ხოლო ნანოელექტრონიკა არის მიკროელექტრონიკის ლოგიკური გაგრძელება.

ცხრილი 2.2.

### ნანოტექნიკის ობიექტის ტიპური ზომები

გამოყენების სფერო	პროცესები	ზომები, ნმ
ელექტრონიკა	ელექტრ. ტალღის სიგრძე	10 ... 100
	ელექტრ. თავისუფ. განარბ.	1 ... 100
	გვირაბგასვლა	1 ... 10
	ტრანზისტორის ჩამკეტი	50 ... 80
	სქემაში თხელი ფენები	5 ... 15
	კვანტური ჭა	1 ... 100
ოპტიკა	ოპტიკურ ბოჭკოში ტალღა	10 ... 100
	მეტალში სკინ-შრის სისქე	10 ... 100
	ულტრაიისფ. გამოსხივება	10 ... 100
	რენტგენის გამოსხივება	0,01 ... 10
	დისლოკაციები	1 ... 10
	ფირის მარცვლის ზომა	1 ... 10
	მინარ. კლასტერი, პრეციპიტატი	0,1 ... 10
	ფაზათა საზღვარი	1 ... 10

მასალები	სუბსტრუქტურული უჯრედი	10 .. 80
	ზედაპირის წინა შრე	1 ... 50
	ზედაპირის სიმქრქალე	0,1 .. 10
	ფულერენის დიამეტრი	1
	ნანომილაკის დიამეტრი	1 ... 100
	ნანოსტრუქტურა	10 ... 80
მოლეკულური ბიოლოგია	ბაქტერია	100 ... 1000
	ვირუსი	20 ... 300
	რიბოსომას დიამეტრი	20
	სისხლის უჯრედი	2 ... 100
	დნმ-ის დიამეტრი	20
	მემბრანის სისქე	10

## 2.1. ფოტოლიტოგრაფიის ალტერნატიული მეთოდები

მიკროსქემის მინიატიურზაცია სრულადაა დამოკიდებული ფოტოშაბლონის ხაზის ზომაზე, რომელზეც, თავის მხრივ, დამოკიდებულია ფოტორეზისტში სელექციურად ქიმიურად ამონამლული არის ზომა.

ნებისმიერი ფოტოლიტოგრაფიული დანადგარის ძირითადი მახასიათებელია მისი წარმადობა, რომელიც ლიმიტირებულია გამოსხივების წყაროს ინტენსივობით და რეზისტის მგრძნობიარობით. ასევე, მაღალწარმოებადი ლიტოგრაფიისთვის გადამწყვეტი მნიშვნელობა აქვს შაბლონის მდგრადობას ტემპერატურის და მექანიკური დატვირთვის მიმართ.

ფოტოლიტოგრაფიაში გამოყენებული ოპტიკური მეთოდი მოსახერხებელი და მარტივია, მაგრამ იძლევა მინიატიურზაციის ფიზიკურ ზღვარს ~ 100 ნმ-ს (რეზისტის ულტრაიისფერი სხივით ექსპონირებისას). ასე რომ, ინტეგრალური სქემის ინტეგრაციის ხარისხის გაზრდის და მინიატიურზაციის გზაზე ყველაზე ვიწრო ადგილია ლიტოგრაფია – დიდი მგრძნობიარობით და მცირე ხაზებით. მინიატიურზაციისთვის საჭიროა ფოტოშაბლონში შუქგამტარი არის ზომის შემცირება. განსზღვრული ტალღის სიგრძისას ამ ზომის შემცირება რაღაც სიდიდის ქვემოთ ინვევს ამ სხივის დიფრაქციას და, შესაბამისად, მგრძნობიარობის შემცირებას და ფოტორეზისტზე არის გაშლას (განრთხმას). მგრძნობიარობის გაზრდის ერთ-ერთ გზად რჩება  $\lambda$ -ის შემცირება. ულტრაიისფერი სხივის გამოყენებისას ( $\lambda$  ძევს ინტერვალში 436 – 365 ნმ). ნანოლიტოგრაფიაში შეიძლება გამოიყენებოდეს უფრო მოკლე ტალღიანი სხივები ან ალტერნატიული მეთოდები. უფრო მოკლე ტალღიანი სხივებად შეიძლება გამოიყენებოდეს რენტგენის, ელექტრონების, იონების ნაკადი და ლაზერის სხივები. ამასთანვე, უნდა შეიჩქეს შესაბამისი მგრძნობიარობის რეზისტის. შეიძლება ოპტიკური ფოტოლიტოგრაფიის მგრძნობიარობის გაუმჯობესება ღრმა, ვაკუუმური ულტრაიისფერი სხივის გამოყენებით, მაგრამ მან ვერ პოვა ტექნოლოგიაში გამოყენება მისი სირთულისა და დიდი ენერგოდანახარჯების გამო. ამ მხრივ, ლაზერული წყაროები უფრო პერსპექტიულია პრაქტიკულ ნანოლიტოგრაფიაში.

### 2.1.1. ნანოლიტოგრაფია

ა) ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფია მოსახერხებელია სქემის მასიური წარმოებისათვის. ის შეიძლება განხორციელდეს ორი მეთოდით: 1) პროექციული – გაშლილი, არაფოკუსირებული ელექტრონების ნაკადით, როცა საფენის მთელი ზედაპირი სხივდება ერთდროულად და 2) წერტილოვანი – კარგად ფოკუსირებული ნაკადით. პირველ შემთხვევაში საჭიროა ნილაბი-შაბლონი, როგორც ოპტიკური ფოტოლიტოგრაფიისას, ხოლო მეორე შემთხვევაში ნილაბი-შაბლონი არაა საჭირო და დასხივების მართვა ხორციელდება უშუალოდ ელექტრონების წყაროს დანადგარიდან.

ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფიის დანადგარი შედგება ვაკუუმური წყობილისგან ელექტრონების წყაროს, ელექტრონების ამაჩქარებელი სისტემის, მაგნიტური ლინზების და საფენის ზედაპირის ელექტრონული სხივის სკანირების სისტემისგან. ელექტრონული სხივის ფორმირების სისტემა უზრუნველყოფს ელექტრონების ნაკადის შექმნას 20-100 კევ ენერგიით და ფოკუსირებას ნაკადის დიამეტრის 1-1,5 ნმ ზომით. სკანირება რეგულირდება კომპიუტერით, რომლის საშუალებით ელექტრონული სხივი შეიძლება ჩაქრეს და აინთოს, ე.ი. მოხდეს ზედაპირზე ლოკალური ამონამკვლეობი. რეზისტად უფრო ხშირად გამოიყენება პოლიმერული მასალა პოლიმეთილმეთაკრილატი (პმმკ), რომლის სტრუქტურა ჯაჭვისებური ნაერთია. ელექტრონებით დასხივებისას ჯაჭვი წყდება, მოკლდება და ადვილად იხსნება ქიმიურ გამმჟღავნებელში. დასხივებისადმი მგრძობიარობაა  $5 \cdot 10^{-4}$  კ/სმ<sup>2</sup>. მისი გარჩევისუნარიანობა  $R=6$  ნმ, როცა ის მჟღავნდება ულტრაბგერით. ორგანულ ნეგატიურ რეზისტად გამოიყენება კალიქსარენი, რომელიც პლაზმაში მდგრადია, მისი მოლეკულა არის წრიული, თითოეული ბენზოლის ფორმისაა და მათ შორის ძლიერი ბმაა, გლუვი ზედაპირით, თითქმის 20-ჯერ ნაკლებად მგრძობიარენი ელექტრონული დასხივების მიმართ, ვიდრე პმმკ. ამ რეზისტის გარჩევისუნარიანობა  $R=10$  ნმ.

ნანოლიტოგრაფიაში გამოიყენება აგრეთვე ორგანული ნაერთები, როგორიცაა  $\text{SiO}_2$  და  $\text{AlF}_3$ , ლეგირებული  $\text{LiF}$ -ით და  $\text{NaCl}$ -ით. მათი გარჩევისუნარიანობა  $R=56$  ნმ, ელექტრონებისადმი მგრძობიარობაა  $0,1$  კ/სმ<sup>2</sup>.

უკანასკნელ ხანს დიდი ინტერესი გამოიწვია პროექციულმა ელექტრო-სხივურმა ლიტოგრაფიამ. ეს მიიღება, როცა ფირების დასხივება ხდება მკაცრად ფოკუსირებული ელექტრონული სხივით ოთახის ტემპერატურაზე. მაგალითად, სილიციუმზე ხელსაწყობის დამზადებისთვის ხდება ნანოპროფილირება  $\text{SiO}_2$ -ზე. ოქსიდი დასხივების ადგილიდან ორთქლდება და შეიძლება სილიციუმის ზედაპირზე მივიღოთ სასურველი სურათი. ყოველივე ეს შესაძლებელია ჩატარდეს ვაკუუმში და შემდგომი პროცესები გაგრძელდეს იქვე, ვაკუუმის დარღვევის გარეშე. თუ სხივი მკაცრად არაა ფოკუსირებული, მაშინ ოქსიდის ზედაპირი იმუხტება და სხივი ფართოვდება. უარყოფით მხარედ ითვლება ისიც, რომ ელექტრონულ სხივში მაღალ ენერგიებზე ხდება კულონური განზიდვა, რაც იწვევს სხივის გაფართოებას.

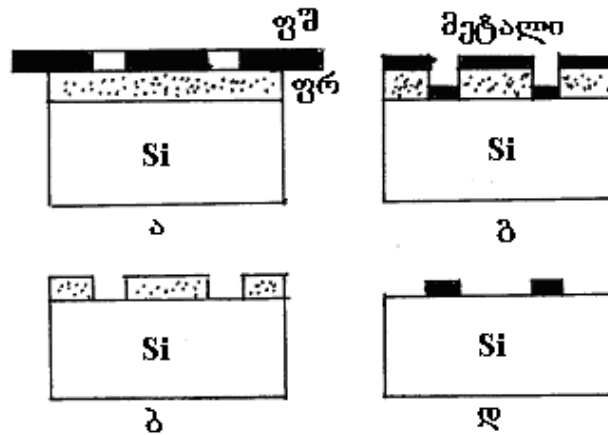
ბ) იონურ-სხივური ლიტოგრაფია მსგავსია ელექტროსხივური ლიტოგრაფიისა, ოღონდ აქ გამოიყენება  $\text{He}^+$  იონები, რომელთა ტალღის სიგრძე  $\lambda=5 \cdot 10^{-5}$  ნმ 100კვ ძაბვაზე, როცა იმავე ძაბვაზე ელექტრონებისათვის  $\lambda=4 \cdot 10^{-3}$  ნმ. ეს იძლევა საშუალებას,



გავაუმჯობესოთ გარჩევისუნარიანობა და რეზისტის სქელ ფირებში მოვახდინოთ გამოსახულების ექსპონირება. შეიძლება ლიტოგრაფია ჩატარდეს ზედაპირზე, ფოკუსირებული 5-10 ნმ დიამეტრის სხივით, რომ არ იქნას გამოყენებული შაბლონი. მასიური წარმოებისთვის იონურ-სხივური ლიტოგრაფია ფერხდება იმიტომ, რომ დანადგარი არის ძვირადღირებული და დიდი, იონები ინვევენ საფენის სტრუქტურის რადიაციულ დარღვევებს და ამიტომ უფრო გავრცელებულია ელექტროსხივური ლიტოგრაფია.

**გ) რენტგენული ლიტოგრაფია** შეიძლება ჩატარდეს  $\lambda = 16\text{მ}$  ტალღის სიგრძის ფოტონების ნაკადით, რომელთა მისაღებად გამოიყენება სინქროტრონული გამოსხივება, რაც ხდის ამ პროცესს მოუხერხებელს. აგრეთვე, არაა შესაძლებელი რენტგენული სხივის ფოკუსირება და, შესაბამისად, შაბლონის გარეშე პროცესის ჩატარება. მიღებული მინიმალური ზომები 50-70 ნმ-ია.

**დ) პლაზმური ლიტოგრაფია** ითვლება ერთ-ერთ ყველაზე პერსპექტიულ მეთოდად, მაგრამ ჯერჯერობით გამოიყენება ლაზერის წყაროდ პლაზმის გაზური განმუხტვა, რაც დაკავშირებულია ვაკუუმთან და იძლევა ტალღას  $\lambda = 106\text{მმ}$ , ცთომილებით  $\Delta\lambda = 0,5\text{ნმ}$  და გამოსხივების სიმძლავრით 100 ვტ. არავაკუუმური ლაზერის წყაროების გამოიყენება ამ მეთოდს ხდის პერსპექტიულად.

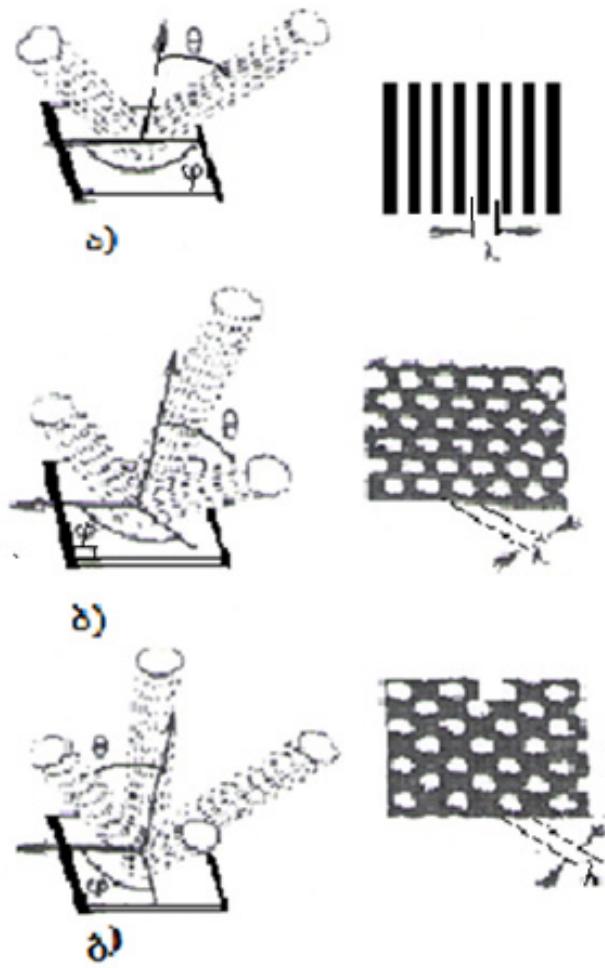


ნახ. 2.1. ფეთქებადი ლიტოგრაფიის პროცესი

**ე) ფეთქებადი ლიტოგრაფია** გამოიყენება, ძირითადად, მეტალური ფირებისთვის, როცა ძნელია მისი ქიმიური მონამვლა. ეს პროცესი გამოსახულია ნახ.2.1-ზე: რეზისტის, სისქით 1მკმ, ფორმირდება საფენის ზედაპირზე (ა), იხსნება რეზისტის სასურველ უბნებში (ბ), ეფინება მეტალი, სისქით 0,3 – 0,4 მკმ (მაგ., ოქრო) მთლიანად, მთელ ზედაპირზე (გ), ხდება სტრუქტურის დამუშავება აქტიურ ორგანულ გამხსნელში (მაგ., აცეტონში), რაც ინვევს რეზისტის და, შესაბამისად, მის ზემოთ მეტალის შრის მოცილებას და მიიღება სასურველი მეტალის სურათი საფენის ზედაპირზე (დ). ასეთი სახით მიღებული მეტალის ლოკალური ფირები შეიძლება გამოვიყენოთ ნანოელექტრონულ ხელსაწყოებში ელემენტებად ან ნიღბებად ხელსაწყოს დამზადების შემდგომ პროცესებში.

### 2.1.2. ლაზერულ-ინტერფერენციული ლიტოგრაფია

მრავალ სხვა პერსპექტიულ ლიტოგრაფიულ მეთოდებს შორის გამოირჩევა ნანოლიტოგრაფიის ერთ-ერთი – ლაზერულ-ინტერფერენციული ლიტოგრაფიის სახე, რომელიც დამყარებულია ლაზერული სხივების კომბინაციურ ინტერფერენციაზე. ამ მეთოდით შესაძლებელია შეიქმნას ერთგვაროვანი ნანომესერი, ნანოსტრუქტურების წყობილები სამკუთხედური ან კვადრატული სიმეტრიებით. ნახაზ 2.2-ზე გამოსახულია ლაზერული სხივების ზედდებით შექმნილი ინტერფერენციული მეთოდით ერთგვაროვანი ნანომესერის და ნანოსტრუქტურების წყობილების მიღების სქემა.



**ნახ.2.2.** ლაზერული სხივების ზედდებით შექმნილი ინტერფერენციული მეთოდით ერთგვაროვანი ნანომესერის და ნანოსტრუქტურების წყობილების მიღების სქემა. ა) ორი სხივი და ნანომესერი; ბ) სამი სხივი და სამკუთხა სიმეტრიული სტრუქტურა და გ) ოთხი სხივი და კვადრატული სიმეტრიული სტრუქტურა

ერთგვაროვანი ნანომესერის პერიოდი (ნახ.2.2ა) განისაზღვრება თანაფარდობით:

$$\lambda_2^* = \frac{\lambda}{2} \sin \theta \quad (2.1)$$

როცა  $\varphi = \pi$ , სადაც  $\lambda^*$  მესერის პერიოდია,  $\lambda$  - ლაზერის გამოსხივების ტალღის სიგრძე,  $\theta$  - ლაზერის დაცემის კუთხე.

სამი ლაზერის სხივის მოქმედებისას სამკუთხა სიმეტრიული სტრუქტურის (ნახ.2.2ბ) პერიოდი განისაზღვრება თანაფარდობით:

$$\lambda_3^* = \frac{2\lambda}{3} \sin \theta \quad (2.2)$$

როცა  $\varphi = 2\pi/3$

კვადრატულ-სიმეტრიული სტრუქტურა (ნახ.2.2გ) შეიძლება ფორმირდეს ოთხი ლაზერული სხივის მოქმედების შედეგად, რომლის პერიოდი განისაზღვრება თანაფარდობით:

$$\lambda_4^* = \frac{\sqrt{2}\lambda}{2} \sin \theta \quad (2.3)$$

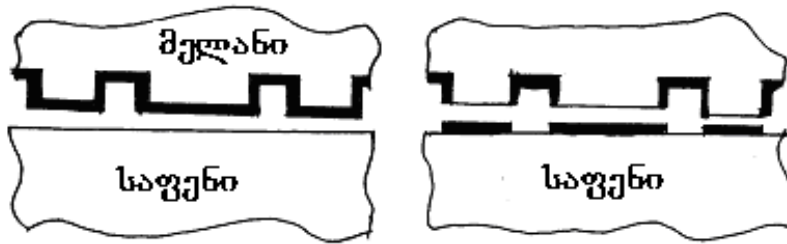
როცა  $\varphi = \pi/2$ .

ლაზერულ-ინტერფერენციული ლიტოგრაფიის შედეგების ანალიზი აჩვენებს, რომ ამ მეთოდით დღესდღეობით დისკრეტული ნანოელემენტების შექმნის წარმოება შეჩერებულია, რამდენიმე ტექნოლოგიური და ტექნიკური ამოცანის გადაუწყვეტლობის გამო. მათ შორის გამოირჩევა: 1) შეთავსების სიზუსტე; 2) საჭირო ღრიჭობის უზრუნველყოფა; 3) რეზისტული ნიღბის მასალის შერჩევა და 4) მასალების მიკრომინარევის ჩართვებისგან განმეხდა.

### 2.1.3. ნანობეჭდური ლიტოგრაფია

ეს პროცესი ახალი მიმართულებაა ლიტოგრაფიის ტექნოლოგიაში, რომელიც აერთიანებს მარტივ, იაფფასიან მგრძნობიარობას ნანომეტრულ უბანში და მაღალი წარმადობის პროცესებს. აქ არ გამოიყენება რაიმე სახის გამოსხივება, ამიტომ ადგილი არა აქვს დიფრაქციულ მოვლენებს და, შესაბამისად, ლიტოგრაფიული პროცესები უფრო ზუსტია. გამოიყენება ნანობეჭდვის ორი ხერხი:

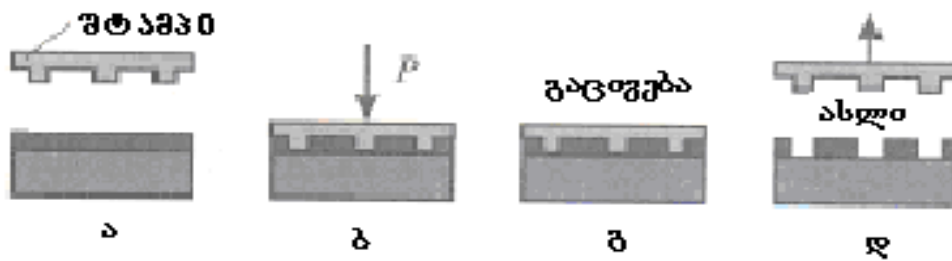
**ა) მელნით ბეჭდვაში** მელნის სახის რეზისტის მასალა დაიტანება სათანადო სურათის ელასტიკურ შტამპზე (ნახ.2.3ა). შემდეგ შტამპს მექანიკურად მცირე წნევით ახებენ საფენის ზედაპირს, რომელზეც შტამპის მოცილების შემდეგ რჩება მონომოლეკულური ფენა (ნახ.2.3ბ). მიღებული მელნით ნახატი გამოიყენება ნიღბად შემდგომი ოპერაციისთვის. უფრო ხშირად, შტამპის მასალად გამოიყენება პოლიდიმეთილსილოქსანი (პდმს), ხოლო მელნის მასალად – თიოლი, ან მისგან წარმოებული სხვა ნივთიერება.



ნახ.2.3. ნანობეჭდვა: შეხებამდე (ა) და შეხების შემდეგ (ბ)

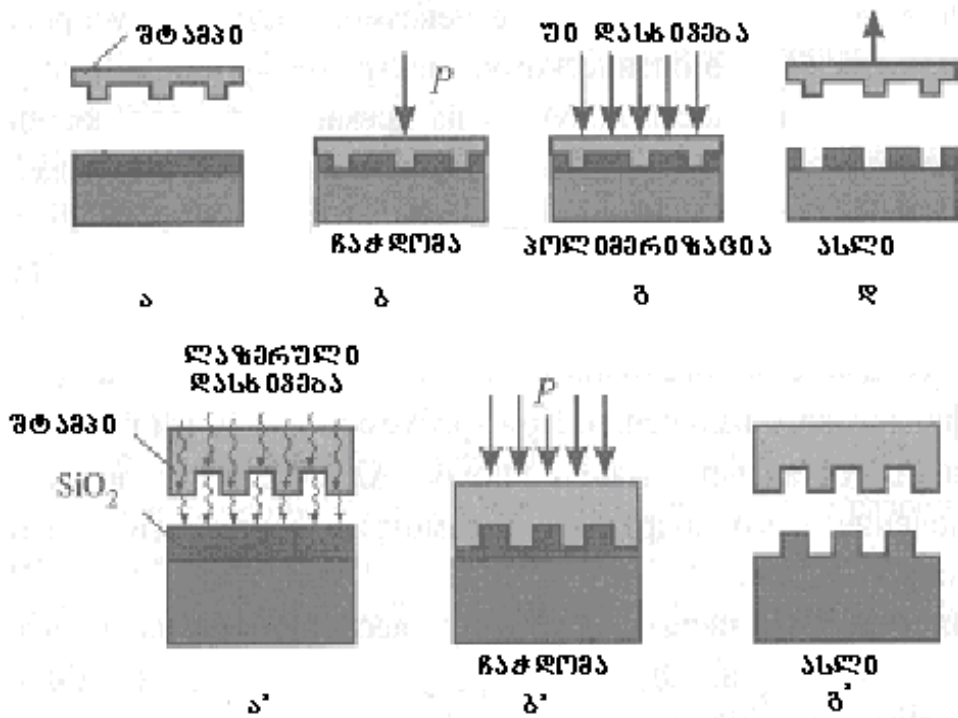
შტამპზე მოქმედი მექანიკური ძაბვა უარყოფითად მოქმედებს სურათის ფორმირებაზე და შეთავსებაზე, განსაკუთრებით, მრავალჯერადი ხმარებისას. გარდა ამისა, გარშემო ატმოსფეროს ტემპერატურის ცვლილებით იცვლება ელასტომერის (შტამპის მასალა) ზომები და, შესაბამისად, სურათიც. ამის თავიდან აცილება შეიძლება არა უწყვეტი ელასტომერის გამოყენებით, არამედ 10 მკმ-ის სისქის ფირის დაფენით მყარ საფენზე, მაგალითად, სილიციუმზე. მელნის სურათის დიფუზიური განრთხმები ხდება შტამპის საფენთან კონტაქტისას. ეს ძნელად კონტროლდება. უნდა იყოს კარგი ადგეზია საფენზე დარჩენილ მელანსა და საფენს შორის. წინააღმდეგ შემთხვევაში, შტამპის ალების შემდეგ შესაძლებელია მელნის აორთქლება, ანუ გადასვლა გაზურ ფაზაში. კარგი ადგეზია, ანუ მელნის დიფუზია საფენის ზედაპირზე, აუმჯობესებს გარჩევისუნარიანობას. ამისათვის მელნის მასალაში (თიოლი) შეჰყავთ მძიმე მოლეკულები. პროცესის გარჩევისუნარიანობაა 100 ნმ.

**ბ) ნაჭდით ბეჭდვის** იდეა მდგომარეობს იმაში, რომ სათანადო სურათის მქონე ხისტი შტამპი ინერგება საფენზე წინასწარ დაფენილ თერმოპლასტიკურ პოლიმერის ფენაში, ოთახის ტემპერატურაზე უფრო მაღალ ისეთ ტემპერატურაზე, როცა პოლიმერი რბილდება. ეს პროცესი გამოსახულია ნახ.2.4-ზე. შტამპის ზედაპირს აქვს საჭირო სურათის ფორმა ფანჯრებით (ნახ.2.4.ა). საფენი იფარება თერმოპლასტიკური პოლიმერის ფენით და ხურდება იმ ტემპერატურამდე, რომელიც უზრუნველყოფს მის დარბილებას (მინის მდგომარეობაში გადასვლის ტემპერატურა). მასში ინერგება შტამპი (ნახ.2.4ბ), ცივდება სისტემა იმ ტემპერატურამდე, რომ პოლიმერი გამყარდეს, შემდეგ იღებენ შტამპს (ნახ.2.4გ). დარჩენილ თხელი ფენის პოლიმერს აშორებენ ქიმიურად ან პლაზმა-ქიმიურად. ამ სახით მიღებულ რეზისტის ფენას (ნახ. 2.4.დ) იყენებენ ნიღბად შემდეგი პროცესებისთვის.



ნახ.2.4. ნაჭდითი ბეჭდვის პროცესი

ნაჭდითი ბეჭდვის ლიტოგრაფიის ზოგიერთი მოდიფიკაცია მოცემულია ნახ.2.5-ზე: პოლიმერის მასალად უფრო ხშირად გამოიყენება ტრადიციულ ელექტრო-სხივურ ლიტოგრაფიაში გამოყენებული პმმკ მასალა. მისი დარბილების ტემპერატურაა  $105^{\circ}\text{C}$ , ქმნის კარგ სურათს  $190 - 200^{\circ}\text{C}$  მექანიკური ჩანერგვისას.  $50^{\circ}\text{C}$ -ზე შტამპის განშორებისას არ ეკვრის მას და ქმნის საფენთან კარგ ადგეზიას. პროცესის გარჩევისუნარიანობაა 10 ნმ.



ნახ.2.5. ნაჭდითი ბეჭდვის მოდიფიკაციური სახე

ზოგადად, ნანობეჭდვის მეთოდი არის ხისტი შტამპის მექანიკური ჩაჭედვა პოლიმერში. ამიტომ შტამპზე სურათი უნდა იყოს შექმნილი დიდი გარჩევისუნარიანობის მქონე ტექნოლოგიით, მაგალითად, ელექტრო-სხივური ლიტოგრაფიით ან სკანირების ზონდით.

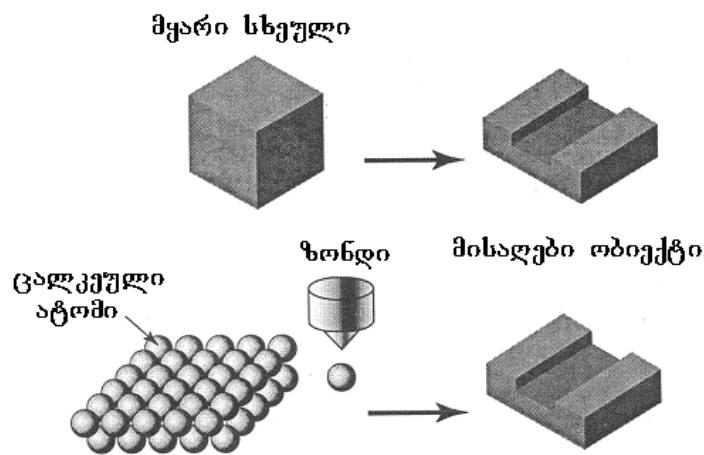
## 2.2. სკანირებული ზონდური მიკროსკოპია

სკანირებული ზონდური მიკროსკოპია შეიძლება გამოვიყენოთ ელექტრონებით რეზისტის მექანიკური, ლოკალური მოდიფიკაციისათვის უკონტაქტო და კონტაქტიან რეჟიმებში მუშაობისას. ამ მეთოდს აქვს მაღალი გარჩევისუნარიანობა (1–10ნმ), რეჟიმი მარტივად განხორციელებადია. პროცესი ტარდება ელექტრონულ მიკროსკოპზე და რეზისტის მოდიფიკაციისთვის საჭიროა მიკროსკოპის ზონდი ახორციელებდეს ელექტრონების ეფექტურ ინჟექტირებას. ამისთვის „ნანოკალამი“, დამზადებული ან დაფარული სილიციუმის ნიტრიდით, კვლავ ოქროთი იფარება. სკანირების უკონტაქტო რეჟიმში მუშაობისას ზონდზე ედება 5-20 ვ-ის სიდიდის

უარყოფითი ძაბვა. სკანირების პროცესში მანძილი ზონდი-საფენი და ზონდიდან ელექტრონების ნაკადი მუდმივი სიდიდეებია. შესაძლებელია, ელემენტის მინიმალური ზომა 30 ნმ-ზე მცირე მივიღოთ.

რეზისტის ექსპონირებისას დაბალენერგეტიკული ელექტრონების გამოყენება გამორიცხავს მათ არეკვლას რეზისტ-საფენ გამყოფ საზღვრიდან და მნიშვნელოვნად ამცირებს მეორადი ელექტრონების წარმოქმნას. ორივე ეს ეფექტი მნიშვნელოვნად აუმჯობესებს ამ მეთოდის გარჩევისუნარიანობას მაღალ-ენერგეტიკულ ელექტრო-სხივურ ლიტოგრაფიასთან შედარებით.

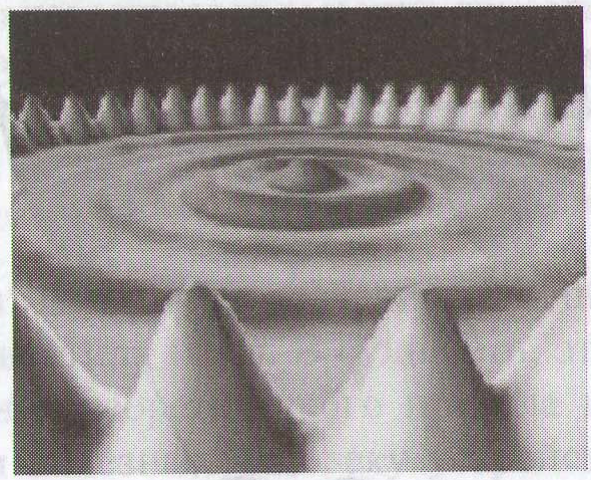
მიკროსკოპის კონტაქტურ რეჟიმში მუშაობისას ხდება რეზისტის ან უშუალოდ საფენის ზედაპირის მექანიკური მოდიფიკაცია, მათში არხების, ღრმულების ფორმირება და ა.შ. ამ შემთხვევაში ზონდი არის, როგორც წერტილოვანი ინსტრუმენტი და პირდაპირი მექანიკური დამუშავება ხდება დიდი სიზუსტით. ამ პროცესის უარყოფითი მხარე ისაა, რომ დიელექტრიკზე მოდიფიკაციისას დიელექტრიკი იმუხტება და სხივი აირეკლება, რაც აუარესებს ამოჭმული არხის ხარისხს. ზოგადად, სასურველი ობიექტის მიღება შესაძლებელია ორი გზით, რომლებსაც პირობითად ჰქვიათ ტექნოლოგიები „ზემოდან – ქვემოთ“ და „ქვემოდან – ზემოთ“ (ნახაზ 2.6). მიმართულება „ზემოდან – ქვემოთ“ გულისხმობს მასიური სხეულის ზომების შემცირებას მიკრო- და ნანომეტრულ მასშტაბამდე მექანიკური ან სხვა სახის დამუშავებით. მაგალითისთვის შეიძლება განვიხილოთ მასიური ნახევარგამტარული მასალა, რომლის ფოტოლიტოგრაფიული დამუშავებით მიიღება ხელსაწყო. უკანასკნელი მონაცემებით, სინათლის ყველაზე მოკლე ტალღით დამუშავებული ზომა 100 ნმ-ია. უნდა აღინიშნოს, რომ ეს ტექნოლოგია რთულია, მოითხოვს დიდ დროს და ძვირადღირებულ დანადგარებს, რის გამოც ფართომასშტაბიან წარმოებაში გამოუსადეგარია.



**ნახ. 2.6.** მასალის დამუშავების ორი მთავარი ნანოტექნოლოგიური პრინციპი

ტექნოლოგიის „ქვემოდან – ზემოთ“ იდეა მდგომარეობს იმაში, რომ უშუალოდ ატომების ან მოლეკულების შესაბამისი კონფიგურაციის აწყობით მიიღება სასურველი ნანოობიექტი. შეიძლება ითქვას, რომ ეს ტექნოლოგია იძლევა მასალის ეკო-

ნომიას წინასთან შედარებით და მისი შებრუნებულია. „ქვემოდან – ზემოთ“ ტექნოლოგიის ტიპური მაგალითია ატომების ცალობით დადება კრისტალის ზედაპირზე მასკანირებული გვირაბული მიკროსკოპით. ასეთი მანიპულაციის მაგალითი მოცემულია ნახ. 2.7-ზე, სადაც სპილენძის ზედაპირზე წრიულადაა განლაგებული რკინის ატომები.



**ნახ.2.7.** სპილენძის ზედაპირზე რკინის ატომების წრიული განლაგება

„ქვემოდან – ზემოთ“ ტექნოლოგიის დახმარებით შესაძლებელია ერთმანეთზე დავანწყოთ არა მარტო ცალკეული ატომები, არამედ ატომთა შრეები. დღესდღეობით ეს მეთოდი ხასიათდება ძალიან მცირე ეფექტურობით და წარმადობით, მაგრამ მას აქვს დიდი მომავალი.

### საკონტროლო კითხვები:

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

### 3. ატომური ორბიტალები და მოლეკულის აღნაგობა

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

მიკრონაწილაკის ტალღური თვისებების გამო ელექტრონების ურთიერთქმედება უნდა განვიხილოთ არა, როგორც წერტილოვანი მუხტებისა, არამედ მუხტებისა, რომლებიც განრთხმულნი არიან არეში რაღაც ღრუბლის სახით. ატომები ერთდებიან მხოლოდ მაშინ, როცა ამ შეერთებით მცირდება სისტემის სრული ენერგია, რაც გამოვლინდება ბირთვებს შორის სივრცეში ელექტრონების რიცხვის სიმკვრივის გაზრდით. ამ სიმკვრივეთა გადაფარვის სიდიდეზეა დამოკიდებული მოლეკულის (მთლიანად ნივთიერების) ფიზიკური და ქიმიური თვისებები. თავის მხრივ, გადაფარვის სიდიდე დამოკიდებულია თითოეული ატომის შიგნით ელექტრონთა კვანტურ მდგომარეობაზე, ანუ ატომურ ორბიტალებზე.

#### 3.1. ატომური ორბიტალების და ტალღური ფუნქციის არსი

ნივთიერების ატომური აღნაგობის იდეა წარმოიშვა ძალიან დიდი ხნის წინათ, დაახლოებით მე-2 საუკუნეში ჩვენს წელთაღრიცხვამდე და ატომი მიიჩნეოდა, როგორც განუყოფელი ნაწილაკი თითქმის 22 საუკუნე. მე-19 საუკუნეში ექსპერიმენტებმა აჩვენა, რომ ატომი რთული სისტემაა და შედგება სხვადასხვა ნაწილაკებისგან. მე-20 საუკუნეში ექსპერიმენტულად დადგინდა, რომ ელექტრონი არის ყველა ატომის შემადგენელი ნაწილაკი, მისი მუხტია  $1,6 \times 10^{-19}$  კ და მასა შეადგენს  $9,1 \times 10^{-31}$  კგ-ს.

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

პლანკმა წამოაყენა იდეა, რომ სინათლის გამოსხივება და შთანთქმა ხდება მხოლოდ ენერგიის სასრული პორციებით, რომელსაც მან კვანტი უწოდა. კვანტის ენერგია დამოკიდებულია სიხშირეზე  $E = h\nu$ , სადაც  $h$  პლანკის მუდმივაა ერთნაირი



ყველა სიხშირისათვის და ტოლია  $6,6 \times 10^{-34}$  ჯ.ნმ. მისი განზომილებაა ქმედების განზომილება, ანუ ენერჯიის განზომილება გამრავლებული დროზე. ეს სიდიდე მნიშვნელოვანია ფიზიკაში.

პლანკის ფორმულა თავის თავში შეიცავს ენერგეტიკული დონეების დისკრეტულობას (წყვეტილობას) სინათლის გამომსხივებელშიც. მის მიერ სინათლის კვანტის გამოსხივება ხდებოდა ერთი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან ( $E_2$ ) მეორეზე ( $E_1$ ) გადასვლისას:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu \quad (3.1)$$

მოგვიანებით აინშტაინმა აჩვენა კვანტური თეორიის უნივერსალობა არა მხოლოდ სინათლის გამომსხივებელი და მშთანთქმელი სხეულებისთვის, არამედ, საერთოდ, ნებისმიერი გამოსხივებისთვის. მის თანახმად, ელექტრომაგნიტური გამოსხივება, ერთი მხრივ, არის ნაწილაკთა ნაკადი (კორპუსკულარული) ფოტონების სახით, რომელიც ვრცელდება სინათლის სიჩქარით და აქვს  $h\nu$  ენერჯია. კორპუსკულარული თეორიის საფუძველზე აიხსნა ფოტოეფექტის ბუნება. ხოლო მეორე მხრივ, გამოსხივება არის ტალღური ბუნების, რაზეც მეტყველებს ელექტრომაგნიტური გამოსხივებისას ჩატარებული ინტერფერენციის და დიფრაქციის ცდები. ამდენად დადგინდა გამოსხივების ორმაგი კორპუსკულარულ-ტალღური ბუნება (დუალიზმი ტალღა-ნაწილაკი).

ბორმა გააერთიანა რეზერფორდის ატომის აგებულება და კვანტური თეორია. თავისი თეორია მან ჩამოაყალიბა პოსტულატების სახით, რომელთა საფუძველია კლასიკური მექანიკის კანონებში შეყვანილი კვანტური მექანიკის კანონები, არსებითად წინა კლასიკური კანონებით ამკრძალავი.

ბორის პოსტულატები ასეთია:

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

2) ატომი ასხივებს მხოლოდ მაშინ, როცა ელექტრონი გადადის ერთი სტაციონარული მდგომარეობიდან ( $E_1$ )-დან მეორეზე ( $E_2$ ) და მათ შორის ენერჯიების სხვაობა იქნება  $\nu$  სიხშირის ფოტონის გამოსხივების ენერჯია:

$$E = h\nu = E_1 - E_2 \quad (3.2)$$

ეს პირობა გამოდის ენერჯიის შენახვის კანონიდან.

3) ატომში ყველა შესაძლო მდგომარეობიდან გადასვლა ხორციელდება მხოლოდ იმ ელექტრონისთვის, რომლისთვისაც მოძრაობის რაოდენობის მომენტი  $M$ ,

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$  -ის მთელი რიცხვის ჯერადაა, ანუ

$$M = n\hbar = n \frac{h}{2\pi} \quad (3.3)$$

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

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

რადგან ელექტრონის მოძრაობის მომენტი იკვანტება:

$$M = m_e v r = n \hbar \quad (3.4)$$

სადაც  $m_e$  ელექტრონის მასაა,  $v$  - ელექტრონის მოძრაობის სიჩქარე და  $r$  - ორბიტის რადიუსი.

ორბიტაზე ელექტრონის ბრუნვისას ცენტრიდანული ძალა კომპენსირდება კულონის მიზიდვის ძალით, ანუ:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2 Z}{r^2} \quad (3.5)$$

სადაც,  $Ze$  ბირთვის მუხტია და  $e$  - ელექტრონის მუხტი,  $m_e$  - ელექტრონის მასა (3.4) და (3.5)-დან

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e e^2 Z} \quad (3.6)$$

სადაც,  $n = 1, 2, 3, \dots$  მთელი რიცხვებია.

თუ (3.6) გამოსახულებაში ჩავსვამთ  $Z = 1$  და  $n = 1$ , მაშინ მივიღებთ წყალბადის ატომის უმცირესი ორბიტის (ბირთვთან ახლო) რადიუსს, რომელიც რიცხობრივად არის  $0.52835 \text{ \AA}$ . (3.6)-დან ჩანს, რომ ატომში ელექტრონის ორბიტის რადიუსები იკვანტება და ღებულობს  $n$ -ის ჯერად მნიშვნელობებს.  $a_0 = 0.0529 \text{ ნმ}$  ბორის პირველი ორბიტის რადიუსი მიღებულია ატომურ სკალაში სიგრძის ერთეულად.

განვსაზღვროთ ატომში ელექტრონის ენერგია. სრული  $\mathcal{E}$  ენერგია ტოლია კინეტიკური  $E$  და პოტენციალური  $U$  ენერგიების ჯამისა. პოტენციალური ენერგია განპირობებულია ელექტრონის ბირთვთან ურთიერთქმედებით და ტოლია  $U = -eV$ , სადაც  $V$  პოტენციალია ბირთვის იმ ადგილში, სადაც იმყოფება ელექტრონი. თუ ბირთვის მუხტია  $Ze$ , მაშინ

$$U = -\frac{Ze^2}{r_n} \quad (3.7)$$

უარყოფითი ნიშანი მიუთითებს მიზიდვას.

$$\text{სრული ენერგია } E = T + U = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{r_n} \quad (3.8)$$

$$(3.5)\text{-დან } m_e v_n^2 = \frac{Ze^2}{r_n}, \text{ ანუ } m_e v_n^2 = 2T = \frac{Ze^2}{r_n} = -U$$

მაშინ (3.8) ასე გადაინერება:

$$E = T + U = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} - \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} \quad (3.9)$$

ანუ

$$E = -T = \frac{1}{2} U \quad (3.10)$$

სრული ენერჯიის უარყოფითი ნიშანი განპირობებულია პოტენციალური ენერჯიის ათვლის ენერჯიით. პოტენციალური ენერჯიის ნულოვანი დონე ეთანადება ელექტრონის ენერჯიას, როცა ის იმყოფება ბირთვიდან უსასრულოდ დიდ მანძილზე. ელექტრონის სრული ენერჯია ყოველთვის უარყოფითია და ბირთვთან მიახლოებისას მისი სრული ენერჯია იზრდება აბსოლუტური მნიშვნელობით. ელექტრონის

კინეტიკური ენერჯია  $+\frac{Ze^2}{2r_n}$  მცირდება ორბიტის რადიუსის გაზრდისას და იზრდება

მისი შემცირებისას. ასე რომ, დიდ ორბიტას ეთანადება დიდი სრული და დიდი პოტენციალური ენერჯიები, ხოლო კინეტიკური ენერჯია კი მცირეა (ნიშნის გათვალისწინებით).

(3.6) და (3.9)-დან მივიღებთ ელექტრონის  $n$ -ურ ორბიტაზე სრულ ენერჯიას:

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (3.11)$$

(3.11)-დან ჩანს, რომ ელექტრონის ენერჯია იკვანტება, რომ ის იცვლება არა უწყვეტად, არამედ  $n^2$ -ის უკუპროპორციულად.

(3.2)-ის და (3.11)-ის თანახმად გვაქვს:

$$h\nu_n = E_n - E = \frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{K^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.12)$$

წყალბადის ატომის სპექტრის ხაზის ტალღური რიცხვისთვის ემპირიულად იყო მიღებული:

$$\tilde{\nu} = \frac{\nu}{C} = R \left( \frac{1}{K^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.13)$$

სადაც,  $R$  რიდბერგის მუდმივაა,  $C$  - სინათლის სიჩქარე და  $n = K + 1$  - მუდმივი რიცხვები.

(3.12) და (3.13) შედარება იძლევა კარგ შედეგს და ვლებულობთ:

$$R = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2 h C} = \frac{m_e e^4}{4\pi C \hbar^3} \quad (3.14)$$

(3.12)-დან გამოდის, რომ როცა  $K = 1$ , მიიღება ლაიმანის სერია,  $K = 2$  ბალმერის სერია,  $K = 3$  პაშენის სერია.

ამრიგად, ბალმერის მიერ წყალბადის ატომის სპექტრალურ ხაზში კანონზომიერების დადგენიდან 28 წლის შემდეგ ეს მოვლენა თეორიულად ახსნა ბორმა. ზოგადად დადგინდა, რომ ყოველი ელემენტის ატომი გამოასხივებს და შთანთქმავს ელექტრომაგნიტურ ტალღას მხოლოდ განსაზღვრული სიხშირით, რაც ნიშნავს, რომ ატომის ენერგია შეიძლება შეიცვალოს არა ნებისმიერად მცირე სიდიდით, არამედ ნახტომისებურად, განსაკუთრებული დისკრეტული სიდიდით.

შემდგომში ბორის თეორიის მოდიფიცირება შეძლო ზომერფელდმა. მან დაამტკიცა ბორის თეორიაში, კეპლერის კანონებზე დაყრდნობით, რომ ელექტრონები მოძრაობენ ბირთვის გარშემო ელიფსურ ორბიტაზე და წრიული ტრაექტორიები არიან კერძო შემთხვევაში. წრიულ ორბიტაზე მოძრაობისას ელექტრონის მდგომარეობა განისაზღვრება მხოლოდ პოლარული  $\phi$  კუთხით (ერთი თავისუფლების ხარისხი), ხოლო ელიფსზე მოძრაობისას – დამატებით  $r$  რადიუს-ვექტორით (ორი თავისუფლების ხარისხი). ელიფსზე მოძრაობისას შემოდის პარამეტრად დიდი და პატარა  $a$  და  $b$  ნახევარღერძები. შესაბამისად, შემოვიდა ორი კვანტური  $n_r$  და  $n_\phi$  რიცხვები.  $a, b$  და  $E$  -სთვის ზომერფელდმა მიიღო:

$$a_{n_r, n_\phi} = \frac{\hbar^2}{2m_e Z e^2} (n_r + n_\phi)^2 = a_0 (n_r + n_\phi)^2 \quad (3.15)$$

$$b_{n_r, n_\phi} = \frac{\hbar^2}{2m_e Z e^2} (n_r + n_\phi) n_\phi = a_0 (n_r + n_\phi) n_\phi \quad (3.16)$$

$$E_{n_r, n_\phi} = -\frac{m e^4 Z^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{(n_r + n_\phi)^2} \quad (3.17)$$

სადაც  $a_0$  არის ბორის პირველი ორბიტის რადიუსი.

თანაფარდობა  $a \geq b$  და  $n_r + n_\phi \geq n_\phi$  ეთანადება ელიფსურ და წრიული ორბიტის შემთხვევებს. მართლაც, როცა  $n_r = 0$ , მაშინ  $a = b$  და (3.15), (3.16) ემთხვევა (3.6), ხოლო (3.17) კი (3.9)-ს ბორის წრიული ორბიტებისათვის.

ამრიგად, მთავარი კვანტური რიცხვი  $n$  შეიძლება გამოვხატოთ ჯამის სახით  $n_r + n_\phi = n$ .  $n_r$  და  $n_\phi$  შესაკრებები, შესაბამისად, იწოდებიან რადიალურ და აზიმუტალურ კვანტურ რიცხვებად. მდგომარეობა შეიძლება დავახასიათოთ ორი ( $n_r$  და  $n_\phi$ ) კვანტური რიცხვით, მაშინ აღვნიშნოთ  $n_\phi = k$ -ით.  $k$ -მ შეიძლება მიიღოს მთელი რიცხვითი მნიშვნელობები, გარდა ნულისა, მაშინ  $b = 0$ , მიიღება სწორი ხაზი და ელექტრონი დაეჯახება ბირთვს, რაც არ შეიძლება. მთავარი კვანტური რიცხვი აქაც, როგორც წინათ, მიიღებს მნიშვნელობებს  $n = 1, 2, 3, \dots$ , თანაც  $k \leq n$ .

ელიფსის ნახევარღერძები  $a$  და  $b$ , აგრეთვე, ენერგია და მოძრაობის რაოდენობის მომენტი გამოვსახოთ  $n$  და  $k$  კვანტური რიცხვებით:

$$a_{n,k} = a_0 n^2 \quad (3.18)$$

$$b_{n,k} = a_0 n k \quad (3.19)$$

$$E_{n,k} = -\frac{me^4 Z^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (3.20)$$

$$M_\varphi = \hbar k \quad (3.21)$$

წყალბადის ატომის ძირითად მდგომარეობას ეთანადება  $n=1$ , მაშინ  $k \leq n$ -ის თანახმად,  $k$  მიიღებს მხოლოდ ერთ  $k=1$  მნიშვნელობას. ამ შემთხვევაში (3.18) და (3.19)-ის თანახმად,  $a_{11} = b_{11} = a_0$ , ანუ მოძრაობა იქნება ერთ წრიულ ორბიტაზე. შემდეგ უფრო მაღალ ორბიტაზე  $n=2$ -ზე მოძრაობა იქნება ორ ტიპზე: ერთი, როცა  $k=2$ , მაშინ  $a_{22} = b_{22} = 4a_0$ , და მეორე, როცა  $k=1$ , მაშინ  $a_{21} = 4a_0$  და  $b_{21} = 2a_0$ , ანუ მოძრაობა ელიფსზე. როცა  $n=3$ , მოძრაობაა სამ კვანტურ წრიულ ორბიტაზე,  $k=1,2,3$  -  $a_{33} = 9a_0$ , ხოლო  $b_{33} = 9a_0$  მოძრაობა არის წრეწირზე,  $a_{32} = 9a_0$ , ხოლო  $b_{32} = 6a_0$  და  $a_{31} = 9a_0$ , ხოლო  $b_{31} = 3a_0$ . ბოლო ორი იქნება მოძრაობა ელიფსზე და ა.შ.

ბორი-ზომერფილდის თეორიამ ვერ ახსნა  $H_2^+$ -ის არსებობა. ამ თეორიაში ელექტრონი განიხილებოდა მხოლოდ, როგორც ნაწილაკი (კორპუსკულარული). დე ბროილმა დაუშვა, რომ, გარდა ფოტონისა, კორპუსკულარულ-ტალღური დუალიზმი აქვს სხვა ნაწილაკებსაც.  $m$  მასის და  $v$  სიჩქარით მოძრავი ელექტრონის ტალღური თვისება ხასიათდება ტალღის სიგრძით, ისევე როგორც ფოტონისთვის:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (3.22)$$

ესაა დე ბროილის ტალღის სიგრძე. დე ბროილის თეორიის სისწორე დამტკიცდა ელექტრონების გაბნევისას მესერზე. თუ მისი სიჩქარეა  $v=10^8$  მ/წმ, მაშინ მისი ტალღის სიგრძე, (3.22)-ის თანახმად,  $\lambda \approx 7 \times 10^{-8}$  სმ, ანუ ატომის ზომის რიგისაა. ელექტრონების დიფრაქციაზე დამყარებულია ელექტრონოგრაფია – ნივთიერების სტრუქტურის გამოკვლევის მეთოდი.

ამრიგად, ელექტრონისთვის საჭირო გახდა ახალი კვანტური თეორიის შექმნა. ბორის თეორია იყო წარმატებული, რადგან მან მოგვცა ელექტრონის მოძრაობის ფიზიკური სურათი ატომში და მისი ენერჯის განსაზღვრის მეთოდი. ახალი თეორიის შექმნაში გამოჩნდა სიძნელე, რომელიც დაკავშირებული იყო თვით ელექტრონის ბუნებასთან. ეს სიძნელე განპირობებული იყო ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპის არსებობასთან, რომლის თანახმად შეუძლებელია, ერთდროულად ზუსტად განსაზღვროთ ელექტრონის კოორდინატი და იმპულსი. მაგალითად, თუ ელექტრონი მოძრაობს აბსოლუტურ ვაკუუმში განსაზღვრული სიჩქარით (იმპულსით) და გვინდა რაღაც მომენტში განვსაზღვროთ მისი მდებარეობა, საჭიროა ის „დავინახოთ“ მიკროსკოპით. ამისთვის ამ მდებარეობაში ელექტრონმა უნდა აირეკლოს ფოტონი, რომელიც მოხვდება მიკროსკოპში. მაგრამ ფოტონის ელექტრონზე დაჯახე-

ბის შემდეგ, მისი მიკროსკოპში მოსვლამდე, ელექტრონი გადაადგილდა, შეიცვალა სიჩქარე (იმპულსი). რაც მეტია ფოტონის  $h\nu$  ენერგია, მით ზუსტად გავიგებთ ელექტრონის მდებარეობას, მაგრამ მით მეტად შეიცვლება ელექტრონის სიჩქარე (იმპულსი) და მით მეტი იქნება მისი განსაზღვრის ცდომილება. განუზღვრელობის პრინციპი მათემატიკურად ასე ჩაინერება:

$$\Delta x \Delta P_x \geq \hbar \quad (3.23)$$

სადაც  $\Delta x$  ნაწილაკის განუზღვრელობაა  $x$  კოორდინატში მოცემულ მომენტში,  $\Delta P_x$  – იმპულს-ვექტორის პროექციის განუზღვრელობაა  $x$  კოორდინატზე იმავე მომენტში.

(3.23)-ის მსგავსად შეიძლება ჩავწეროთ:

$$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m} \quad (3.24)$$

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

ასევე შეიძლება დავწეროთ, რომ

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (3.25)$$

(3.23) და (3.25)-ით დამაკავშირებელ წყვილებს, იმპულსს და კოორდინატს, ასევე ენერგიას და დროს, უწოდებენ შეუღლებულ ცვლადებს.

მიკრონაწილაკთა განსაკუთრებული მოქმედებების განხილვიდან გამომდინარე, შეიძლება გაკეთდეს შემდეგი მნიშვნელოვანი დასკვნები:

- 1) მიკროსამყაროზე ჩვენი შეცნება (ნაწილაკთა მდებარეობა, სიჩქარე ა.შ.) ატარებს ალბათურ ხასიათს.
- 2) მოძრაობის ტრაექტორიის არსი კარგავს აზრს.
- 3) მიკრონაწილაკთა ენერგია არავითარ პირობებში არ შეიძლება ნულის ტოლი იყოს, რადგანაც  $E = 0$  -ის შემთხვევაში მისი კოორდინატები და იმპულსი იქნებოდა ზუსტად განსაზღვრული, რაც ეწინააღმდეგება განუზღვრელობის პრინციპს.
- 4) განუზღვრელობის პრინციპი არის ფიზიკურად რეალური. ეს ნიშნავს, რომ შემცირება (გაზრდა) ერთ-ერთი შეუღლებული ცვლადისა აუცილებლად იწვევს მეორე ცვლადის გაზრდას (შემცირებას).

ამრიგად მოცემულ მომენტში მიკრონაწილაკის მდებარეობის განმსაზღვრელი ტრაექტორიის ცნება აზრს კარგავს. ასევე აზრს კარგავს მისი სიჩქარის ცნებაც. მაშინ, აზრი აქვს მიკრონაწილაკის მოცემულ მომენტში, მოცემულ ადგილზე ყოფნის ალბათობას და აღინერება სტატისტიკური მახასიათებლებით. შენარჩუნდება მიკრონაწილაკის ისეთი მახასიათებლები, როგორცაა მასა, ენერგია, იმპულსის მომენტი. რადგან ელექტრონი ტალღური ბუნებისაა, მისი მდგომარეობის აღწერისათვის უნდა იყოს ტალღური ტიპის განტოლება. ამოცანა ასეთია: გვაქვს ერთი ელექტრონი

$m$  მასით, მოძრავი ძალურ ველში. ელექტრონის პოტენციალური  $V$  ენერგია არის ველის მახასიათებელი და  $V(x, y, z)$  ფუნქცია მოცემულია. ელექტრონის სრული ენერგია არაა დამოკიდებული დროზე. მაგალითად, ელექტრონის მოძრაობა ატომში ბირთვის დადებით ველში. სრული ენერგია  $E = T + V = Const$ .

ამოცანის მიზანია სივრცის განსაზღვრულ უბანში მოიძებნოს ელექტრონის ყოფნის ალბათობა. ეს ალბათობა ხასიათდება რაღაც  $\Psi(x, y, z)$  ფუნქციით, რომელსაც ეწოდება ტალღური ფუნქცია და საჭიროა მისი პოვნა. ტალღური ფუნქციის პოვნა შესაძლებელია მიკრონაწილაკის მოძრაობის ტალღური განტოლებიდან. ასეთია შრედინგერის განტოლება, რომელიც აღწერს  $\Psi$  ტალღური ფუნქციის ცვლილებას სივრცეში იმ  $V$  ველზე დამოკიდებულებით, რომელშიც მოძრაობს ელექტრონი.

ტალღური  $\Psi$  ფუნქციის ფიზიკური არსის გაგებისთვის წარმოვიდგინოთ, რომ სივრცეში მოცემულია  $(x, y, z)$  წერტილი და მის გარშემო  $dv = dx dy dz$  მცირე მოცულობა. წერტილში იყო  $\Psi(x, y, z)$  ფუნქცია.  $dv$  მოცულობაში ელექტრონის მოხვედრის ალბათობა იქნება  $\psi^2 dv$ , ანუ  $dv$ -ში ელექტრონის ყოფნის დროის ნაწი-

ლი.  $\frac{\psi^2 dv}{dv} = \psi^2$  იქნება ელექტრონის ყოფნის ალბათობა მოცულობის ერთეულში,

ანუ ალბათობის სიმკვრივე, ელექტრონთა სიმკვრივე. ელექტრონის ტალღური თვისება ნიშნავს, რომ ყოველ ნებისმიერ მომენტში ელექტრონი შეიძლება იყოს ნებისმიერ წერტილში სხვადასხვა ალბათობით. ასე რომ, ელექტრონული ღრუბელი, რომლის სიმკვრივე სხვადასხვა წერტილში არის სხვადასხვა, ეთანადება ელექტრონულ სიმკვრივეს. ყველა ელექტრონული ღრუბლისთვის შეიძლება გავავლოთ ნებისმიერი რაოდენობის ზედაპირები, სადაც  $\Psi^2 = Const$ . სასაზღვრო ზედაპირი ტალღური ფუნქციის კვადრატის ერთნაირი მნიშვნელობის მქონე უბნის შემომსაზღვრავია, მის შიგნით ელექტრონის სიმკვრივის უმეტესი ნაწილია თავმოყრილი (მაგალითად, 80% ან 90%). სასაზღვრო ზედაპირი განსაზღვრავს ელექტრონული ღრუბლის ფორმას. საკვანძო ზედაპირი არის ზედაპირი, სადაც ტალღური ფუნქციის კვადრატი ნულის ტოლია. თუ  $\Psi$  ფუნქციას გავამრავლებთ  $-1$ -ზე,  $\Psi^2$  არ შეიცვლება. ალბათობა ინარჩუნებს თავის სიდიდეს.

ტალღური ფუნქციისთვის სამართლიანია სუპერპოზიციის პრინციპი (ზედდება). თუ მიკროსისტემა აღინერება  $\Psi_1$  და  $\Psi_2$  ფუნქციებით, მაშინ  $\Psi$  ტალღური ფუნქცია ტოლია მათი ჯამის ან სხვაობისა, ანუ მათი წრფივი კომბინაცია ასევე განსაზღვრავს სისტემის მდგომარეობას:

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 \quad (3.26)$$

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

$$\Psi^2 = (C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2)^2 = C_1^2 \Psi_1^2 + C_2^2 \Psi_2^2 + 2C_1 C_2 \Psi_1 \Psi_2 \quad (3.27)$$

(3.27) განტოლების ბოლო წევრი აღნიშნავს ალბათობების ზედდებას.

შრედინგერის განტოლებაში ჰარმონიულადაა გათვალისწინებული მიკრონაწილაკის ორმაგი ბუნება და არის ატომის და მოლეკულის აღნაგობის ძირითადი საფუძველი. ის განსაზღვრავს ტალღური ფუნქციის ცვლილებას სივრცეში მიკრონაწილაკზე გარე ძალებისგან დამოკიდებულებით. ტალღური ფუნქცია, ნაპოვნი ტალღური განტოლებიდან, შეიცავს უგანზომილებო სიდიდეებს – კვანტურ რიცხვებს, რომლებიც ლეზულობენ მთელ რიცხვით მნიშვნელობებს, ანუ ელექტრონის მდგომარეობა ატომში განისაზღვრება კვანტური რიცხვებით. სრული ენერგია განისაზღვრება ამ კვანტური რიცხვებით და იკვანტება. კინეტიკური ენერგია ელექტრონისთვის არ შეიძლება ნულის ტოლი იყოს, მის ათვლის სათავედ იღებენ მინიმალურ ენერგიას და უწოდებენ ნულოვანს.

### 3.2. კავშირი ტალღურ და კვანტურ მოვლენებს შორის

წინა პარაგრაფიდან გამომდინარე, გამოსხივების თეორიიდან მივედით იმ დასკვნამდე, რომ ელექტრონი ნაწილაკიც და ტალღაცაა, ანუ აქვს დუალიზმი. მაშინ, ელექტრომაგნიტური ტალღის გავრცელება და ინტერფერენცია შეიძლება აღინეროს მაქსველის ტალღური თეორიით. მეორე მხრივ, ამ ენერგიის ნივთიერებაზე მოქმედება შეიძლება აღინეროს სინათლის კვანტების მოქმედებით, ანუ ნაწილაკთა მოქმედებით. რადგანაც ფოტონები ვრცელდება სინათლის სიჩქარით, მათი მასა, ენერგია და იმპულსი უნდა განისაზღვროს რელატივისტური მექანიკით.

აინშტაინის ფარდობითობის თეორიის თანახმად,  $v$  სიჩქარით მოძრავი ნაწილაკის მასაა:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}} \quad (3.28)$$

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

$$mc^2 = m_0c^2 + \frac{1}{2}m_0v^2 + \frac{3}{8}m_0\frac{v^4}{c^2} + \dots \quad (3.29)$$

და ნაწილაკისთვის და ტალღისთვის შედარებები ჩამოვაცალიბოთ შემდეგნაირად:  $m_0$  უძრაობის მასის მქონე ნაწილაკი უკავშირდება  $m_0c^2$  ენერგიას. ნიუტონის

მექანიკის თანახმად,  $v \ll c$  სიჩქარით მოძრავ ნაწილაკს აქვს  $\frac{1}{2}m_0v^2$  კინეტიკური ენერგია. ფოტონისთვის, რომელსაც არა აქვს უძრაობის მასა, სამართლიანია (3.29)-ის მხოლოდ მარცხენა მხარე. ფოტონის ენერგია:

$$E = h\nu = mc^2, \quad (3.30)$$

აქედან ფოტონის მასა:

$$m = \frac{E}{c^2} = h\nu / c^2 = 7,36 \cdot 10^{-51} \nu, \text{ კგ} \quad (3.31)$$



ხოლო იმპულსი:

$$P = mc = h\nu/c = h/\lambda \quad (3.32)$$

(3.30) და (3.32) განტოლებების თანახმად, სინათლე შეიძლება განვიხილოთ ან კორპუსკულარული მიდგომით – ფოტონის ენერგიით და იმპულსით, ან ალვიქვით, როგორც ტალღა – სიხშირით და ტალღის სიგრძით. დე ბროილის პოსტულირებით დუალიზმის შესახებ, კვანტური ტოლობა ენერგიასა და იმპულსს შორის უნივერსალურია და ასე გამოისახება:

$$E = h\nu$$

$$P = m\nu = h/\lambda \quad (3.33)$$

დე ბროილის ამ განტოლებით ნებისმიერი ნაწილაკის მოძრაობა შეიძლება განვიხილოთ, როგორც ტალღური მოვლენა. ნაწილაკის მოძრაობა აღინერება კლასიკური კანონებით და მისი განაწილება განისაზღვრება ტალღური სურათით.

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

$$\lambda = h/m\nu = h/P \quad (3.34)$$

თანახმად დე ბროილის გამონათქვამისა.

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

$$|S| = \bar{N} h\nu, \text{ ვტ/მ}^2 \quad (3.35)$$

თუ  $N$  ძალიან მცირე რიცხვია, ადგილი აქვს მნიშვნელოვან სტატისტიკურ ფლუქტუაციას და ელექტრომაგნიტური თეორია აზრს კარგავს. მეორე მხრივ, დე ბროილის ტალღა დაკავშირებულია ცალკეული ნაწილაკის ლოკალიზაციასთან. სივრცის ნებისმიერ წერტილში დე ბროილის ტალღის ინტენსივობა ახასიათებს მოცემულ წერტილში ნაწილაკის არსებობის ალბათობას.

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

როდესაც გაზომვისას საქმე გვაქვს მეტრებთან, კილოგრამებთან და წამებთან, დე ბროილის ტალღის სიგრძე უმნიშვნელოა. თუ 1კგ-ის მქონე მასა მოძრაობს 1მ/წმ სიჩქარით, მაშინ (3.34)-ის თანახმად, ტალღის სიგრძე:

$$\lambda = h/1 \cdot 1 = 6,623 \cdot 10^{-34} \text{ მ} \quad (3.36)$$

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

$$2\pi r = n\lambda, \text{ სადაც, } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.37)$$

თუ ტალღის სიგრძის ნაცვლად შემოვიტანთ დე ბროილის განტოლებით იმპულსს, მაშინ (3.37) უშუალოდ გადავა ბორის როტატორის დაკვანტვის პირობად:

$$Pr = P' = n\hbar \quad (3.38)$$

ეს შედეგი დამაკმაყოფილებელია, მაგრამ ნაწილობრივ ეწინააღმდეგება კვანტური მექანიკის კანონებს. კერძოდ, შემდეგ დადგინდა, რომ ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპით არ შეიძლება ერთდროულად განვსაზღვროთ იმპულსი და კოორდინატი, რომლებიც შედიან (3.38) ფორმულაში, ბორის თეორია ხარისხობრივია თავისი აღწერით. რაოდენობრივი აღწერისთვის ტალღური კონცეფცია რომ გამოვიყენოთ, საჭიროა ამოვხსნათ ძირითადი ტალღური განტოლება. ეს ამოცანა პირველად განიხილა და ამოხსნა შრედინგერმა. ფიზიკის ზოგადი კურსიდან ცნობილია ელექტრომაგნიტური ველისთვის ტალღური განტოლებები.  $+x$  მიმართულებით არამილევადი ელექტრული და მაგნიტური ბრტყელი ტალღა ასეთი სახით გამოისახება:

$$E = E_0 \exp i(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x), \quad (3.39)$$

$$H = H_0 \exp i(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x)$$

რომელიც მიიღება შემდეგი დიფერენციალური განტოლებების ამოხსნით:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 E = 0 \quad (3.40)$$

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

ანალოგიურად,  $+x$  მიმართულებით გავრცელებული დე ბროილის ტალღისთვის შეიძლება დაინეროს ფუნქცია:

$$\psi = A \exp i\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right), \quad (3.41)$$

რომელიც, ცხადია, შემდეგი ტალღური განტოლების ამონახსნია:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \psi = 0 \quad (3.42)$$

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

$$E = h\nu, \quad (3.43)$$

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

$$\lambda = \frac{h}{P}, \quad (3.44)$$

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

ნაწილაკის კინეტიკური ენერგია სხვაობაა მისი სრული და პოტენციალური ენერგიებისა, ანუ

$$W = E - U, \quad (3.45)$$

ამიტომ (3.44)-დან მიიღება:

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2m(E - U)} = \frac{(2\pi)^2 \hbar^2}{2m(E - U)} \quad (3.46)$$

(3.42) განტოლებაში (3.46) გამოსახულების შეტანის შემდეგ მიიღება:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (3.47)$$

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

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (3.48)$$

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

$$\int \psi \psi^* dV = 1, \quad (3.49)$$

რადგანაც ნაწილაკი აუცილებლად იმყოფება სადღაც სივრცეში. ეს ტოლობა იწოდება დე ბროილის ტალღის **ნორმირების პირობად**. ის ითხოვს, რომ  $\psi$  ფუნქცია და

მისი მეორე წარმომავალი კოორდინატით იყვენენ სასრულნი და უწყვეტნი. ეს ტალღური მექანიკის მნიშვნელოვანი შემოფარგვლაა. გამყოფ საზღვარზე მყოფი ნერტილისთვის ეს მოთხოვნა ცნობილია, როგორც *სასაზღვრო პირობა*.

ტალღურ მოვლენებს თუ განვიხილავთ დროზე დამოკიდებულებით, მაშინ შესაბამისი შესწორებები უნდა შევიტანოთ შრედიინგერის განტოლებაში. (3.41)-დან:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i\omega \psi \quad (3.50)$$

და დე ბროილის თანახმად,

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (3.51)$$

(3.50) ფორმულაში ჩასმით მიიღება:

$$E\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.52)$$

(3.52)-ის (3.48) ფორმულაში ჩასმის შემდეგ მიიღება შრედიინგერის *ტალღური განტოლება*:

$$\nabla^2 \psi - \frac{2m}{\hbar^2} U\psi = i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.53)$$

მაქსველის განტოლება სხვადასხვა პირობებში ზუსტად იხსნება. შრედიინგერმა დიდი წარმატებით გამოიყენა თავისი განტოლება ნყალბადის ატომისთვის, ნრფივი ოსცილატორისა და სხვა პრობლემებისთვის. ცხადია, ნანოლაკის ტალღური ბუნება, როგორც ზემოთ აღინიშნა, ბუნების კანონია და შრედიინგერის განტოლებაზე დაფუძნებულმა კვანტურმა მექანიკამ მოგვცა მოლეკულური სამყაროს რაოდენობრივი აღწერა. ელექტრომაგნიტური ველის განტოლებისგან განსხვავებით, შრედიინგერის განტოლება ზუსტად შეიძლება ამოიხსნას ზოგიერთ შემთხვევაში.

ძირითადი განსხვავება ისაა, რომ ფოტონები, ძირითადად, ერთმანეთზე არ მოქმედებენ, როცა სხვა ნანოლაკები, პირიქით, ერთმანეთზე მოქმედებენ დიდი ძალებით. მაგალითად, სხვა დამუხტული ნანოლაკით შექმნილ კულონურ ველში მოძრავი ელექტრონი ინარჩუნებს თავის სრულ ენერგიას და დე ბროილის ტალღის სიხშირეს, მაგრამ მისი კინეტიკური ენერგია და, შესაბამისად, ელექტრონის ტალღის სიგრძე იცვლება სივრცეში წერტილიდან წერტილამდე. ოპტიკაში საქმე გვაქვს ერთგვაროვან დიელექტრიკებთან. დე ბროილის ტალღები გადიან გაბნეულ არეებში, სადაც გარდატეხის კოეფიციენტები იცვლებიან წერტილიდან წერტილში. ერთდროულად ვხედავთ კლასიკური მექანიკის ძველ სიძნელეებს: ორი სხეულის პრობლემა შეიძლება ზუსტად გადაიჭრას, ხოლო მრავალი სხეულისა – ნანოლობრივ.

### 3.3. ერთელექტრონიანი ატომის ორბიტალი

განვიხილოთ შრედიინგერის განტოლების ამონახსნი ნყალბადის ატომში, სადაც ერთი ელექტრონია, მოძრავი ერთი პროტონის ველში. ამოცანა მდგომარეობს იმაში,

რომ განისაზღვროს ატომის სხვადასხვა წერტილში ელექტრონის ტალღის „ამპლიტუდა“, ამ წერტილების მდებარეობა შეიძლება იყოს დეკარტეს კოორდინატებში  $(x, y, z)$  წერტილით მოცემული, სადაც ცენტრი გადიოდეს ატომის ბირთვში. უფრო მოსახერხებელია, წერტილის მდებარეობა მოცემული იყოს პოლარულ კოორდინატებში. პოტენციალური ველი სფერულად სიმეტრიულია, ანუ ყველა მიმართულებით ერთნაირია და განისაზღვრება მხოლოდ ბირთვიდან მანძილით ( $r$ -ით). ზოგადად, ელექტრონის მდებარეობა განისაზღვრება  $r$  რადიუს-ვექტორით, განედის  $\vartheta$  და გრძედის  $\varphi$  კუთხეებით. ამიტომ შრედინგერის განტოლების ამონახსნი შეიძლება დაინეროს ორი ფუნქციის ნამრავლის სახით, ერთი – რადიალური  $R(r)$  ფუნქციისა და მეორე – კუთხური ფუნქციის  $Y(\vartheta, \varphi)$  სახით:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi) \quad (3.54)$$

ტალღური ფუნქციის რადიალური ნაწილი ახასიათებს ელექტრონის ყოფნის ალბათობას ბირთვიდან  $r$  მანძილზე, ხოლო კუთხური ნაწილი – მის მდებარეობას სხვადასხვა მიმართულებით.

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

$$\Phi = a \sin m\varphi \quad (3.55)$$

ეს ფუნქცია არასდროს გადააჭარბებს  $a$ -ს, ანუ სასრულია, უწყვეტია სინუსის უწყვეტობის გამო. ერთი მნიშვნელობისაა მხოლოდ მაშინ, როცა  $m$  მთელი რიცხვია. ცხადია, (3.55) მაშინაა შრედინგერის განტოლების ამონახსნი, როცა  $m$  ტოლია  $0; \pm 1; \pm 2$  და ა.შ.

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

ტალღური ფუნქცია  $\Psi_{n,l,m}$  აღწერს ელექტრონის განსაზღვრულ მდგომარეობას, როცა მოცემულია სამივე კვანტური რიცხვი. ერთელექტრონიან ტალღურ ფუნქციას, როცა მოცემულია სამი  $n, l, m$  კვანტური რიცხვი, ეწოდება ატომური ორბიტალი (აო). ამიტომ, როცა ამბობენ, რომ ელექტრონი იმყოფება რაღაც განსაზღვრულ

აო-ზე, იგულისხმება, რომ ელექტრონის მდგომარეობის შესაბამისი ტალღური ფუნქცია არის ცნობილი, ანუ მოცემულია ყველა კვანტური რიცხვის მნიშვნელობები.

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

მოვიყვანოთ აო-ის აღნიშვნის ცხრილი 3:

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

წყალბადის ატომში ელექტრონის ენერგია იკვანტება და განისაზღვრება მთავარი კვანტური რიცხვით, (3.11) ფორმულის თანახმად. ენერგიის ნულოვან დონედ მიღებულია ენერგია, როცა ელექტრონი ბირთვისგან დაშორებული უსასრულოდ დიდ მანძილზე. როცა ლაპარაკია აო-ის ენერგიაზე, იგულისხმება ამ ორბიტალზე მყოფი ელექტრონის ენერგია.

წყალბადის ატომის ერთადერთი ელექტრონი მიისწრაფვის, დაიკავოს უმცირესი ენერგიის მქონე  $1s$  ორბიტალი. ამ დროს ატომი არის ყველაზე უფრო მდგრად მდგომარეობაში, ანუ ე.წ. ძირითად მდგომარეობაში. ატომური სისტემის ძირითად მდგომარეობაში ელექტრონის სრული ენერგია არის მინიმალური. ყველა ორბიტალს, ერთნაირი მთავარი კვანტური რიცხვებით, აქვს ერთნაირი ენერგია. ერთნაირი ენერგიის მქონე მდგომარეობები ატომში გადაგვარებულია. ერთი და იმავე ენერგიის მდგომარეობათა რიცხვი განსაზღვრავს გადაგვარების ჯერადობას. მაგალითად,  $n=1$  დონეს აქვს 2 აო ერთნაირი ენერგიით და ის ორჯერადად გადაგვარებულია,  $n=2$  დონე – 4-ჯერადად,  $n=3$  - 9-ჯერადად და ა.შ. წყალბადის ატომში, ძირითადი მდგომარეობის გარდა, ყველა მდგომარეობა გადაგვარებულია. წყალბადის ატომში ელექტრონი შეიძლება იყოს ნებისმიერ წერტილში, მაგრამ მისი ყოფნის ალბათობა სხვადასხვა ადგილში სხვადასხვაა. რაც მეტია ბირთვიდან მანძილი, მით მცირეა მისი ბირთვთან ბმის ენერგია. მთავარი კვანტური  $n$  რიცხვი განსაზღვრავს ელექტრონის ბირთვთან დაშორებას, ანუ ორბიტალის ზომას. იმ წერტილებში, სადაც ელექტრონის ყოფნის ალბათობა ნულია, ტალღური ფუნქციაც ნულია. წერტილების გეომეტრიულ ადგილს, სადაც ელექტრონის ყოფნის ალბათობა ნულია, ეწოდება საკვანძო ზედაპირი. საკვანძო ზედაპირი შეიძლება იყოს ბრტყელი, სფერული და ა.შ.

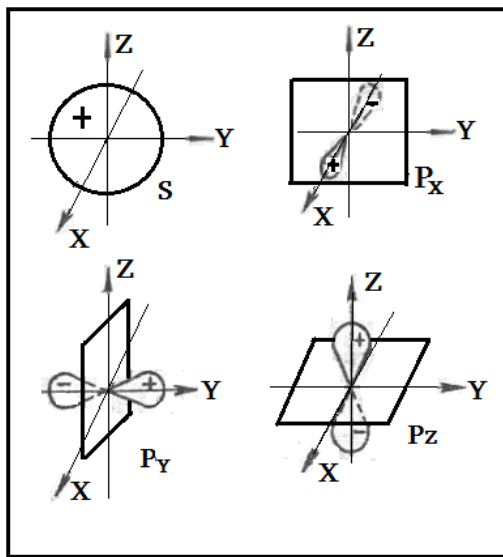
ატომს არა აქვს მკაცრი საზღვარი, ელექტრონს არა აქვს ტრაექტორია, ორბიტა, მაგრამ აქვს ყოფნის ალბათობა – განსხვავებული სხვადასხვა ადგილებში. ამიტომ

შეიძლება ვთქვათ, რომ ბირთვის გარშემო ელექტრონული ღრუბელი არის სხვადასხვა სიმკვრივით, რომლის ზომას განსაზღვრავს მთავარი კვანტური რიცხვი.

ორბიტალური კვანტური  $l$  რიცხვი განსაზღვრავს ელექტრონული ღრუბლის სახეს, ანუ აო-ის ფორმას. ალბათობის რადიალური განაწილება ვერ ასხვავებს ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივის განაწილებას მიმართულების მიხედვით, რომელიც მოიცემა შესაბამისი სასაზღვრო ზედაპირით. სასაზღვრო ზედაპირი არის ზედაპირი, რომელიც საზღვრავს ერთნაირი ალბათობის მქონე არეებს და რომლის შიგნით არის ალბათობის მაქსიმუმი (მაგ., 80%; 75% და ა.შ.). ის განსაზღვრავს ღრუბლის ფორმას ყველა  $l = 0$  ორბიტალისთვის, ანუ ძირითადი  $1s$  და ადგზნებული  $2s, 3s$  და ა. შ. ( $n = 2, 3$ ) მდგომარეობებისთვის ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობა სივრცეში ყველა მიმართულებით ერთნაირია. ეს ნიშნავს, რომ  $s$ -ორბიტალი ბირთვის მიმართ სფერულად სიმეტრიულია (სასაზღვრო ზედაპირია სფერო). ბირთვიდან მანძილი მით მეტია, რაც მეტია  $n$ .  $s$ -ორბიტალებისთვის ბირთვში გამავალი საკვანძო ზედაპირები არ გვაქვს (ის გადაკვეთს აუცილებლად სასაზღვრო ზედაპირს). ცხადია, საკვანძო ზედაპირების რაოდენობა იქნება  $n$ , ხოლო სფერული საკვანძო ზედაპირებისა –  $(n - 1 - l)$ . მაგალითად,  $n = 1$ -სთვის საკვანძო ზედაპირია უსასრულობაში, სფერული გამავალი ბირთვში – ნული,  $n = 2$  - სფერულია 1, და ა.შ.

განვიხილოთ ორბიტალების ფორმები.

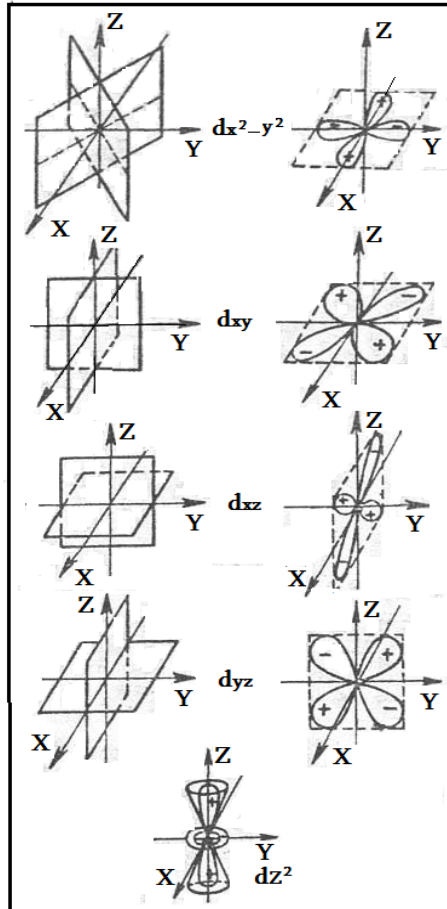
როგორც ვიცით,  $ns$  ორბიტალის შემთხვევაში ( $n = 1, 2, \dots$ )  $s$ -ორბიტალს არ აქვს საკვანძო ზედაპირი გამავალი ბირთვში ( $l = 0$ ) და აქვს სფერული სიმეტრია. მის შიგნით ელექტრონის აღმოჩენის ალბათობაა  $\int \Psi^2 d\Psi = 1$ , ანუ ის აკმაყოფილებს ყველგან ნორმირების პირობას და არის დადებითი. სასაზღვრო ზედაპირი არის სფერო (ნახ.3.1).



ნახ.3.1. S და P ორბიტალების ფორმები

$np$  ორბიტალებს ( $n = 2, 3, \dots$ ) აქვთ ერთი საკვანძო ზედაპირი ( $l = 1$ ), გამავალი ბირთვში.  $p_x$ -სთვის ეს იქნება სიბრტყე  $x = 0$ ,  $p_y$ -სთვის -  $y = 0$  და  $p_z$ -სთვის -  $z = 0$ .  $p_x$  იქნება  $x$  ღერძზე და აქვს ჰანტელის ფორმა. მისი ნიშანი იქნება  $x$  ღერძის შესაბამისი ნიშანი. ასევე  $p_y$  და  $p_z$ -სთვის (ნახ.3.1).

$nd$  ორბიტალებს ( $n = 3, 4, \dots$ ) აქვთ ორ-ორი საკვანძო ზედაპირი ( $l = 2$ ), გამავალი ბირთვში  $d_{x^2-y^2}$ -სთვის საკვანძო ზედაპირს ვპოულობთ პირობიდან  $x^2 - y^2 = 0$ . აქედან ერთი ზედაპირია  $x = y$ , მეორე  $x = -y$ . ეს სიბრტყეები ერთმანეთს კვეთენ  $z$  ღერძზე და გადიან საკოორდინატო სისტემის ბისექტრისებზე (ნახ.3.2).  $d_{x^2-y^2}$  - ორბიტალი მდებარეობს  $xy$  სიბრტყეზე და აქვს ოთხი განწეილი მარყუჟის ფორმა, რომლებიც მდებარეობენ  $x$  და  $y$  ღერძებზე. ნიშანი  $x$ -ის მიმართ  $y = 0$  დადებითი ( $x^2 > 0$ ),  $y$ -ის მიმართ ( $x = 0$ ) უარყოფითი ( $-y^2 < 0$ ).



**ნახ.3.2.**  $d$  - ორბიტალების ფორმები ბირთვში გამავალი ზედაპირებით



$d_{xy}$  -ის საკვანძო ზედაპირია ( $xy = 0$ ) ( $x = 0$ ) და  $y = 0$ . ეს ზედაპირები კვეთენ  $z$  ღერძზე და გადიან  $x$  და  $y$  ღერძებზე.  $d_{xy}$  ორბიტალი მდებარეობს  $xy$  საკოორდინატო სიბრტყეში,  $xy$  კუთხეების ბისექტრისებზე და ა.შ. ყველა სხვა  $d$  ორბიტალ-ბისთვის – როგორც ნახ.3.2-ზეა გამოსახული. ყველა ატომური ორბიტალი არის ბირთვის მიმართ ცენტრალურად სიმეტრიული.

ორბიტალური კვანტური  $l$  რიცხვი განსაზღვრავს ატომური ორბიტალის ფორმას და ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტს –  $M$  -ს. ენერჯიის მსგავსად, ისიც იკვანტება და დამოკიდებულია  $l$ -ზე:

$$M = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (3.56)$$

თუ  $l = 0$ , მაშინ  $M = 0$ , თუ  $l = 1$ , მაშინ  $M = \hbar\sqrt{2}$  და ა.შ.

ელექტრონის მოძრაობის რაოდენობის მომენტს, რომელიც განპირობებულია ბირთვის გარშემო მისი მოძრაობით, უწოდებენ აგრეთვე ელექტრონის ორბიტალურ კუთხურ მომენტსაც. ის ვექტორია და მიმართულია ელექტრონის მოძრაობის სიბრტყის მართობულად, ხოლო სიდიდე მოიცემა (3.56)-ით.

იკვანტება არა მარტო  $M$ , არამედ მისი პროექცია რომელიმე გამოყოფილ მიმართულებაზე, მაგალითად,  $z$  ღერძზე, დამოკიდებული  $m$  მაგნიტურ კვანტურ რიცხვზე:

$$M_z = \hbar m \quad (3.57)$$

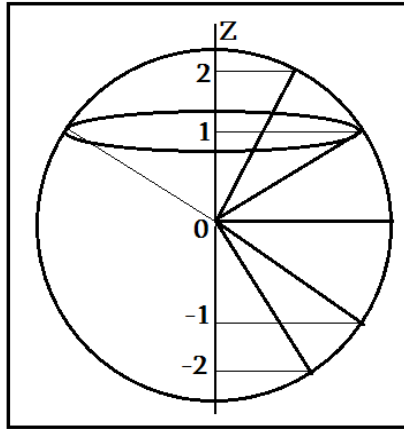
მიმართულების გამოყოფა შეიძლება გარე ველით. მაშინ ორი დანარჩენი მიმართულება ( $x$  და  $y$ ) ემორჩილება ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპს. მაგალითისთვის განვიხილოთ, როცა  $l = 2$ , მაშინ  $m = -2, -1, 0, 1, 2$  და  $\hbar$ -ის ერთეულებში მიიღება ნახ.3.3-ზე გამოსახული სურათი.

რადგანაც ელექტრონი დამუხტულია და აქვს ორბიტალური კუთხური მომენტი, მაშინ მას ექნება აგრეთვე ორბიტალური მაგნიტური მომენტიც, რომელიც იქნება მიმართული ორბიტალური კუთხური მომენტის სანინაალმდეგოდ და ისიც დაიკვანტება. ატომურ სისტემაში მაგნიტური მომენტის ერთეულია ბორის მაგნეტონი

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}. \text{ ანალოგიურად ორბიტალური კუთხური მომენტისა:}$$

$$\mu = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad (3.58)$$

$$\mu_z = \mu_B m \quad (3.59)$$



**ნახ.3.3.** ორბიტალური კუთხური მომენტის სივრცული აკვანტვა d-ორბიტალისათვის ( $l=2$ )

კვანტური მექანიკის თანახმად, წყალბადის ატომისთვის მკაცრადაა განსაზღვრული დისკრეტული მნიშვნელობები ენერგიისთვის, მოძრაობის რაოდენობის ორბიტალური მომენტისთვის და გამოყოფილ მიმართულებაზე მისი გეგმილისთვის. თავის მხრივ, ეს სიდიდეები განსაზღვრულია შესაბამისი კვანტური რიცხვებით  $n, l$  და  $m$ -ით.

ამ სამი კვანტური რიცხვით ვერ აიხსნა ზოგიერთი ექსპერიმენტული მონაცემი. მაგალითად, აღმოჩნდა, რომ წყალბადის ატომის სპექტრის ყოველი ხაზი იხლიჩება ორად, ანუ არის დუბლეტი. ამ ფაქტის ახსნისთვის ულენბეკმა და გაუდსმიტმა დაუშვეს, რომ ელექტრონს აქვს საკუთარი კუთხური მომენტი და მისი შესაბამისი მაგნიტური მომენტი (ორბიტალური მოძრაობისაგან დამოუკიდებლად). მათ საკუთარ მომენტს სპინი უწოდეს, რადგანაც ელექტრონი მოძრაობს საკუთარი ღერძის გარშემო. ელექტრონის სპინი არის მუდმივი სიდიდე. ეს ისეთი ფუნდამენტური სიდიდეა, როგორიც ელექტრონის მასა, მუხტი.

სპინური კუთხური მომენტის სიდიდე  $M_s$  განისაზღვრება მუდმივი კვანტური რიცხვით  $s = \frac{1}{2}$  და ტოლია:

$$M_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} = const \quad (3.60)$$

ანალოგიურად ორბიტალური კუთხური მომენტისა, სპინური კუთხური მომენტიც და მისი გეგმილი გამოყოფილ  $z$  მიმართულებაზე იკვანტება:

$$M_{sz} = \hbar m_s \quad (3.61)$$

$m_s$  იცვლება  $-s$ -დან  $+s$ -მდე. რადგან  $s = \frac{1}{2}$ , ამიტომ  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ .

მაშასადამე, ელექტრონის მდგომარეობა განსაზღვრულია, თუ მოცემულია ოთხი კვანტური რიცხვი  $n, l, m$  და  $s$ . მაშინ წყალბადის ატომის ძირითადი  $1s$  მდგომარეობა ორჯერადად გადაგვარებულია, რადგან მასზე შეიძლება იყოს ორი მდგომარეობა.

მარეობა:  $1; 0; 0; +\frac{1}{2}$  და  $1; 0; 0; -\frac{1}{2}$ . ეს მდგომარეობები ენერგიებით მცირედ განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან, რაც იწვევს წყალბადის ატომის სპექტრის ხაზის გახლეჩას.

### 3.4. მრავალელექტრონიანი ატომის ორბიტალები

მრავალელექტრონიან ატომში არის ბირთვი და  $z$  ელექტრონი. ყოველი ელექტრონი განიცდის ბირთვისგან მიზიდვას და სხვა ელექტრონისგან განზიდვას. განზიდვის ენერგიის ზუსტად განსაზღვრა რთულია და ტალღური განტოლების ამოხსნა ზუსტად არ არის შესაძლებელი. ამიტომ ის მიახლოებით იხსნება, რისთვისაც დაშვებულია განზიდვის ენერგიის მცირე მიზიდვის ენერგიასთან შედარებით. მაშინ ყოველი ელექტრონი არის დამოუკიდებელი ერთმანეთისგან და ის იმყოფება ისეთსავე ფორმის და სიმეტრიის განსაზღვრულ ორბიტალზე, როგორცაა წყალბადის ატომში და განისაზღვრება ოთხივე  $n, l, m$  და  $s$  კვანტური რიცხვებით.

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

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

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

3) **ჰუნდის წესით**, ატომურ ორბიტალებზე ელექტრონები ისწრაფვიან მოთავსდნენ ისე, რომ შეინარჩუნონ პარალელურსპინიანი ელექტრონების უდიდესი რიცხვი. ასეთ კონფიგურაციას ეთანადება უმცირესი ენერგია. ეს დაკავშირებულია პარალელურსპინიან ორ ატომს შორის ელექტრონების გაცვლასთან (გამომდინარე ელექტრონების განურჩევადობიდან), რაც იწვევს ენერგიაში მოგებას. მაგალითად, ფოსფორის შემთხვევაში, რომელსაც აქვს სულ 15 ელექტრონი,  $1s$  ატომურ ორბიტალზე განლაგდება ( $n = 1; l = 0; m = 0$ ) ორი ელექტრონი  $(1s)^2$ . ხარისხში რიცხვი მიუთითებს მასზე ელექტრონების რაოდენობას. შეივსება  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$  და  $3p^3$ -ში იქნება სამი ელექტრონი პარალელური სპინით. ამ ჩანაწერში მონაწილეობს მთავარი და ორბიტალური კვანტური რიცხვი და ელექტრონების რიცხვის გამომხატველი რიცხვი ხარისხში. ასეთი ჩანაწერა ატომის ელექტრონული ფორმულა.

4) **კლერკოვსკის წესი**, რომლის თანახმად, ორბიტალები ივსება ელექტრონებით მთავარი და ორბიტალური კვანტური რიცხვების ჯამის ზრდის მიხედვით. თუ ეს  $(n + l)$  ჯამი ტოლია, მაშინ ელექტრონი ავსებს იმ ორბიტალს, რომელზედაც მცირეა  $n$ . მაგა-

ლითად,  $4s < 3d < 4p$ .  $4s$ -ისთვის  $(n+l) = 4$ ;  $3d$ -ისთვის – 5 და  $4p$ -ისთვის – 5. ჯერ ივსება  $4s$ , შემდეგ –  $3d(n=3)$  და შემდეგ –  $4p(n=4)$ . გავანალიზოთ მისი არსი.

ბირთვის  $z$  მუხტის გადიდებით იზრდება ელექტრონის და ბირთვის მიზიდვის ენერგია. ელექტრონის მოსაცილებლად მეტი ენერგიაა საჭირო, ანუ ატომური ორბიტალის ენერგია მცირდება. მოცემული ატომისათვის ( $z = Const$ ) დიდი მთავარ-კვანტურიანი  $n$ -რიცხვიანი ელექტრონი შორსაა ბირთვიდან, მათი მიზიდვა მცირეა და, შესაბამისად, აქვს უფრო მაღალი ენერგია. ამ დროს მთავარი ეფექტი არის მოქმედება არა ელექტრონის ენერგიაზე (ან ელექტრონის ბირთვიდან მოშორებაზე), არამედ ბირთვის მუხტის ეკრანირებაზე შიგა ელექტრონებით (მცირე  $n$ -იანის მქონე ელექტრონების მიერ). მაგალითად, ფოსფორისთვის 10 შინაგანი ელექტრონი ხდება გარე სამი ელექტრონის ( $3p^3$ ) ეკრანირება. შესაძლებელია გარე ელექტრონი რაღაც პირობებში შევიდეს, შეაღწიოს შინაგან ელექტრონიან ღრუბელში და მიუახლოვდეს ბირთვის, სადაც მისი მიზიდვა გაიზრდება და შეიცვლება ეფექტური მუხტი, თითოეული  $3s$  ელექტრონისთვის  $\sim 2$  გახდება. მოცემული შრის ელექტრონის ბირთვთან შეღწევის ეფექტი მცირდება  $l$ -ის გაზრდით. შესაძლებელია ერთი შრის ორბიტალებს ჰქონდეს სხვადასხვა ენერგიები. მაგალითად, ენერგიების მიხედვით,  $3s < 3p < 3d$ . მაგრამ უფრო რთული მდგომარეობაა სხვადასხვა შრეების ელექტრონების ენერგიებს შორის. თუ მოცემულ ატომურ ორბიტალზე რომელიმე ატომურ ორბიტალს აქვს მცირე  $n$ , მაგრამ დიდი ორბიტალური კვანტური რიცხვი, მაშინ შეიძლება ამ ორბიტალის ენერგია გახდეს უფრო დიდი მოცემული ორბიტალის ენერგიაზე. მაგალითად, ყოველთვის  $3p < 4s$ , მაგრამ ზოგჯერ  $3d > 4s$ . ორბიტალების შევსება ელექტრონებით იქნება ენერგიის მინიმუმის პრინციპით. მათი შევსების თანმიმდევრობა ემორჩილება კლერკოვსკის წესს.

საჭიროა განვიხილოთ ატომის „გარე ელექტრონები“ და „სავალენტო ელექტრონები“. ატომის გარე ელექტრონები – ესაა ელექტრონები მაქსიმალური მთავარი კვანტური რიცხვით, სავალენტო ელექტრონები კი ქიმიურ ბმაში. მონაწილე ელექტრონებია.

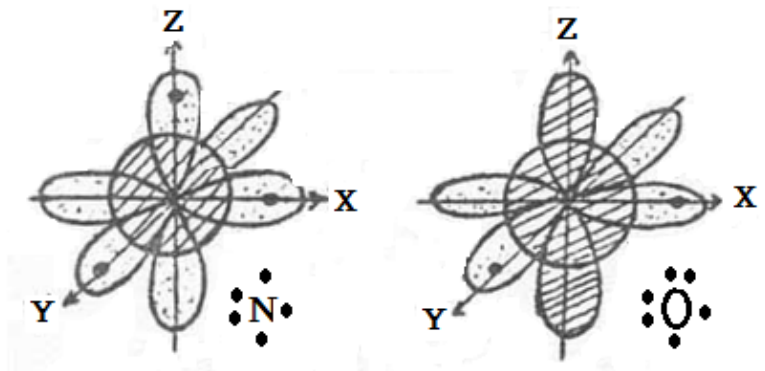
თვალსაჩინოებისთვის ატომურ ორბიტალებს გამოსახავენ ელექტრონული კონფიგურაციით – უჯრედით, ე.წ. კვანტური უჯრედით- $1s$ , შიგნით ელექტრონის სპინის გამომხატველი ისრით.

მაგალითად:



ატომის ელექტრონულ კონფიგურაციაში ივსება თანმიმდევრობით დაბალი ( $n + l$ )-დან მაღალისაკენ კლერკოვსკის წესით, პაულის პრინციპისა და ჰუნდის წესის გათვალისწინებით. სრული კონფიგურაცია  $Si$  ატომისათვის იქნება  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ . ატომთა ელექტრონული კონფიგურაციები შეიძლება გამოისახოს ე.წ. ორბიტალური სქემების საშუალებით. ნახ. 3.4-ზე დაშტრიხული ორბიტალი შეესაბამება ელექტრონულ წყვილს, დაუშტრიხავი კი – კენტ ელექტრონს.

გაგანალიზოთ ვალენტოვნობის საკითხი. ელემენტის ვალენტობას განსაზღვრავს გაუნწყვილებელი სპინების რიცხვი. იმ შემთხვევაში, თუ ერთიდაიგივე მთავარი კვანტური რიცხვის ფარგლებში შესაძლებელია ელექტრონთა წყვილის შემცველი ორბიტალიდან ერთი ელექტრონის ვაკანტურ ორბიტალზე გადასვლა, მაშინ გაუნწყვილებელი სპინების რაოდენობა და, შესაბამისად, ელემენტის ვალენტოვნობა გაიზრდება.



ნახ.3.4. აზოტის და ჟანგბადის ატომების ორბიტალური კონფიგურაციები

ელემენტის ვალენტობა იცვლება, როცა ელექტრონი გადადის ერთ შრეზე, სხვადასხვა დონეებზე ელექტრონის გაცვლისას. შესაძლებელია ელექტრონი გადავიდეს ბმული მდგომარეობიდან ( $E > 0$ ) თავისუფალ მდგომარეობაში (ატომის იონიზაცია), რომელსაც ყოველთვის თან ახლავს ენერგიის დახარჯვა. ამ დროს მიიღება დადებითად დამუხტული იონი და თავისუფალი ელექტრონი.

იონიზაციის ენერგია არის ენერგია, რომელიც საჭიროა დაიხარჯოს იმისთვის, რომ ძირითად მდგომარეობაში მყოფი ნეიტრალური ატომიდან ელექტრონი მოსცილდეს და გადავიდეს უსასრულობაში. იონიზაციის ენერგიას გამოსახავენ ელექტროვოლტებში. ეს ენერგია ყოველთვის დადებითია, რადგან აო-ის ენერგია მცირდება. იონიზაციის ენერგიას ხშირად უწოდებენ იონიზაციის პოტენციალს. მაგრამ რადგან იგულისხმება პოტენციალთა სხვაობა ვოლტებში, ამიტომ იონიზაციის ენერგია  $E_i$  (ევ) და იონიზაციის პოტენციალი  $I_i$  (ვ) რიცხობრივად თანხვედნილია. მრავალელექტრონიანი ატომის შემთხვევაში შესაძლებელია ელექტრონის თანდათან მოცილება, შემდეგ – მეორესი, მესამესი და ა.შ. შესაბამისად, მიიღება პირველი, მეორე და ა.შ. იონიზაციების ენერგიები. ყოველი ატომისთვის შემდეგი იონიზაციის ენერგია იზრდება, რაც დაკავშირებულია შექმნილ იონზე დადებითი მუხტის გაზ-

რდასთან. ეს იმას ნიშნავს, რომ ყოველი ელექტრონის მოცილებისას მცირდება აო-ის ენერგია და იზრდება ბირთვთან მიზიდვის ენერგია.

ბევრ ატომს აქვს თვისება, მიიერთოს ელექტრონი, რომელიც გამოიხატება სიდიდით – სწრაფვა ელექტრონისკენ. სწრაფვა ელექტრონისკენ არის ის ენერგია, რომელიც გამოიყოფა ნეიტრალური (თავისუფალი) ატომის მიერ ელექტრონის მიერთებისას. ამ დროს ატომი იმუხტება უარყოფითად. მისი სიდიდის ზუსტად გაზომვა ძნელია და ყველა ელემენტისთვის არაა ცნობილი. ის არის უარყოფითი მნიშვნელობის. მრავალელექტრონიან ატომში ყოველი შემდეგი სწრაფვისას ელექტრონისკენ ენერგია აბსოლუტური მნიშვნელობით იზრდება, რაც უკავშირდება აო-ის ენერგიის ზრდას. იონიზაციის პოტენციალი და სწრაფვა ელექტრონისკენ ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი პარამეტრია ყველა ელემენტისთვის.

### 3.5. მოლეკულის აღნაგობა

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

ელექტრონების ასეთი ორიენტაცია დაკავშირებულია ელექტრონების გაცვლასთან ორ ატომს შორის, რომელიც არის ელექტრონების განურჩევლობის პრინციპის შედეგი. ეს, სიმარტივისთვის, განვიხილოთ წყალბადის მოლეკულის მაგალითზე. შორს მყოფი წყალბადის ატომები არ რეაგირებს ერთმანეთზე. ადრე თავიანთი ბირთვის ველში მოძრავი ელექტრონების ურთიერთქმედება შესაძლებელია მათი რაღაც მანძილზე დაახლოებისას. რადგან ატომების მდგომარეობები იკვანტება, მაშინ მოლეკულის მდგომარეობებიც დაიკვანტება და დახასიათდება კვანტური რიცხვებით. მოლეკულაში კვანტური რიცხვები უფრო რთულია. თუმცა არის ნაწილობრივი ანალოგია. მაგალითად, მოლეკულაში იხმარება „მოლეკულური ორბიტა“; ატომებში მაგნიტური კვანტური  $m$  რიცხვი არის მოძრაობის რაოდენობის მომენტის გეგმილი გამოყოფილ მიმართულებაზე – მდგენელის საზომი ( $\hbar$  ერთეულებში). ორი ატომის შემთხვევაში შემოჰყავთ კვანტური რიცხვი  $\lambda$ , დამახასიათებელი მოძრაობის რაოდენობის მომენტის მდგენელი ორი ატომის ცენტრების შემაერთებელ ხაზზე, რომელიც ტოლია  $\lambda\hbar$ . ისე, როგორც  $l$ -ისთვის, მოლეკულაში  $\lambda = 0; 1; 2; \dots$ , ასევე, შემოღებულია აღნიშვნები ასოებით  $\sigma, \pi, \delta$  და ა.შ. მოლეკულაში ელექტრონს აქვს სპინი, ტოლი  $\pm \frac{1}{2}$ -ისა. დანარჩენი კვანტური რიცხვები რთულად განიმარტება. მოლეკულაშიც სამართლიანია პაულის პრინციპი და ჰუნდის წესი.

როდესაც წყალბადის ორი ატომი ერთმანეთისგან შორსაა, თითოეული ხასიათდება  $1s_1$  და  $1s_2$  მდგომარეობებით. ამასთან,  $1s_1$  და  $1s_2$  ურთიერთშექცევადია, განურჩევლობის პრინციპით. მოლეკულური ორბიტალი, (3.26) ფორმულის თანახმად, იქნება:

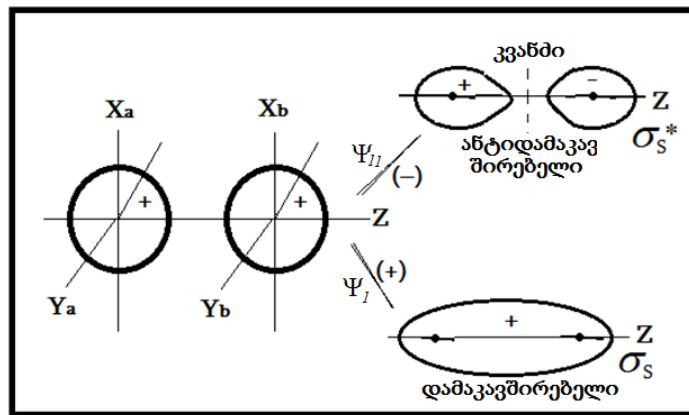
$$\Psi = C_1 1s_1 + C_2 1s_2 \quad (3.62)$$

რადგანაც ურთიერთშექცევადია, ამიტომ  $C_1^2 = C_2^2$ , ანუ  $C_1 = \pm C_2 = \pm C$ . შესაბამისად მიიღება, რომ:

$$\Psi_I = C(1s_1 + 1s_2) \quad (3.63a)$$

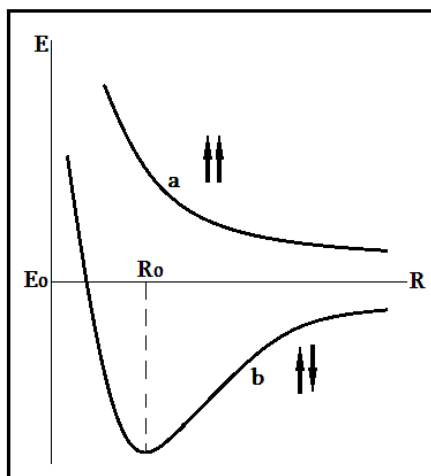
$$\Psi_{II} = C(1s_1 - 1s_2) \quad (3.63b)$$

ორი დამოუკიდებელი ატომური ორბიტალიდან მივიღეთ ორი მოლეკულური ორბიტალი.  $\Psi_I$ -ის შემთხვევაში დადებითი  $S$  ფუნქციები იკრიბება (აო გადაიფარება) და  $|\Psi_I|^2$  ბირთვებს შორის სივრცეში იზრდება, ანუ ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე იზრდება. ამას მივყავართ სისტემის ენერჯიის შემცირებამდე, ანუ ორი ატომის კავშირის შექმნამდე. ასეთი მოლეკულური ორბიტალი (მო) არის **დამაკავშირებელი**. ეს მოცემულია ნახ. 3.5-ზე და აღნიშნულია  $\sigma_s$ -ით.  $\Psi_{II}$ -ს ფუნქციის შემთხვევაში ბირთვებს შორის არეში არის საკვანძო სიბრტყე. ასეთი სისტემის ენერჯია იზრდება და კავშირი ატომებს შორის არ მყარდება. ასეთი ორბიტალია **ანტიდამაკავშირებელი** და აღინიშნება  $\sigma_s^*$ -ით.



ნახ.3.5. მოლეკულური ორბიტალების წარმოქმნა ორი წყალბადის 1S ატომებისაგან

მაშასადამე, წყალბადის მოლეკულის წარმოქმნა დამოკიდებულია შესაერთებელი ატომების მიახლოების მანძილზე. მდგრადი მოლეკულის შექმნა მოითხოვს, რომ გასაერთიანებელი ატომების სპინები იყოს ანტიპარალელური (სინგლეტურ მდგომარეობაში). ამ დროს ატომების მიახლოების მანძილები ხასიათდება მინიმუმის ენერჯიით (ნახ.3.6), ხოლო ატომების სპინების პარალელობისას (ტრიპლეტური მდგომარეობა) ენერჯიას მინიმუმი არ გააჩნია, რაც იწვევს ანტიდამაკავშირებელი ორბიტალის წარმოქმნას.



**ნახ.3.6.** ორი ატომისაგან შემდგარი წყალბადის მოლეკულის ენერგიის დამოკიდებულება ატომთა შორის მანძილზე ორი სხვადასხვა სპინური მდგომარეობისათვის

### საკონტროლო კითხვები:

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

## 4. ელემენტთა ქიმიური ბმა

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



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

ამრიგად, ქიმიური ბმის დროს წარმოიშობა ურთიერთქმედება ორ ან რამდენიმე ატომს შორის, რომლებიც ქმნიან მდგრად სისტემებს და უზრუნველყოფენ მაკავშირებელი ატომების ელექტრონული გარსის თავისებურ გადაწყობას.

#### 4.1. ქიმიური ბმის სახეები

ატომების შეერთებით წარმოიქმნება რთული სისტემები. ეს სისტემები შეიძლება შედგებოდეს ჰომეო ან ჰეტეროატომგულებისგან, მდგრადი ან არამდგრადი სხვადასხვა ფაზურ მდგომარეობაში. მოცემულ პირობებში, მრავალატომიანი სისტემა მდგრადია ნიშნავს, რომ არ ხდება თავისთავად დაშლა ცალკეულ ატომებად ან რაიმე ნაწილებად და რომ მას არ შეუძლია კვლავ შეერთებები ან რეაქციაში მონაწილეობა. ყოველივე ამას განსაზღვრავს ბმის სახე ორ ან მრავალ ატომს შორის.

##### 4.1.1 ჰომეოპოლარული (კოვალენტური) ბმა

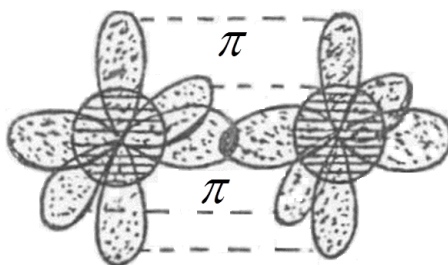
კოვალენტური ბმის დროს ატომების მოლეკულური გაერთიანება ხდება ელექტრონებით, რომლებიც ქმნიან საერთო წყვილებს თითოეული ატომისთვის. უარყოფითად დამუხტული ელექტრონული ღრუბლის სიმკვრივე არის მაქსიმალური დადებითად დამუხტულ ბირთვებს შორის. კოვალენტური ბმის წარმოქმნა შეიძლება წარმოდგენილ იქნას, როგორც ატომური ორბიტალების,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

კოვალენტური ბმის თეორიაში არსებობს კვანტურ-მექანიკური ამოცანის ორი მიდგომა: ვალენტური კავშირების მეთოდი და მოლეკულური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის მეთოდი.

**ა) ვალენტურ კავშირებში** მარტივი ბმები ხორციელდება ერთი ელექტრონული წყვილით, მაგალითად,  $H_2, HCl, F_2$  ბმები ერთნაირი და მარტივია. ასეთია  $\sigma$ -ბმა. ამ დროს ის მიმართულია ბირთვის შემაერთებელ სწორ ხაზზე და მასზე არ გადის საკვანძო სიბრტყე. ასეთი ერთი ბმა წარმოიქმნება მრავალელექტრონიან ბმაშიც. რადგან  $\sigma$ -ბმა ღერძულად სიმეტრიულია, ამიტომ შესაძლებელია ატომების თავისუფა-

ლი ბრუნვა ამ ღერძის გარშემო. ატომებს შორის ერთი  $\sigma$ -ბმის განხორციელება არ ნიშნავს იმას, რომ მათ შორის არ წარმოიქმნას სხვა ბმა. ბმას, რომელიც ხორციელდება ორი და მეტი ელექტრონული წყვილით, ახასიათებენ ჯერადობით (რიგით). ჯერადობა შეიძლება იყოს ორჯერადი, სამჯერადი და ა.შ. ჯერადი ბმა შეიცავს ერთ  $\sigma$ -ბმას,  $\pi$ -ბმას და ზოგჯერ  $\delta$ -ბმასაც.

$\pi$  ბმა არის ბმა, როცა ბმის ხაზზე გადის ერთი საკვანძო სიბრტყე. მაგალითად, განვიხილოთ სამმაგი ბმა აზოტის მოლეკულაში.  $2P$ -ში მოთავსებულ ელექტრონებში ერთ-ერთის გადაფარვისას მიიღება ერთი  $\sigma$  - ბმა, დანარჩენი ორი -  $2P$ -ორბიტალების გადაფარვით - ორი  $\pi$  ბმა (ნახ.4.1).  $\pi$  ბმა წარმოიქმნება ბირთვების შემადგენელი ღერძის ორივე მხარეს.

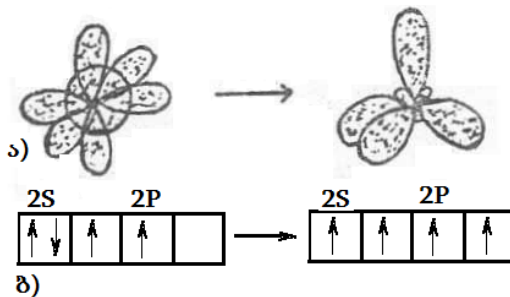


**ნახ.4.1.** აზოტის მოლეკულის წარმოქმნის მოლეკულური სქემა

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

ნახშირბადატომმა სამი ბმა უნდა წარმოქმნას ერთმანეთის მიმართ მართებული  $2P$ -ორბიტალით, ხოლო ერთი ბმა - სფერული  $2s$  ორბიტალით. ეს არ ასახავს რეალურად მეთანის გეომეტრიას. ამიტომ მათ დაუშვეს, რომ ბმებს წარმოქმნიან არა „სუფთა“  $2P$  და  $2s$  მდგომარეობები, არამედ „შერეული“, მათი გადანაწილების ოთხი ეკვივალენტური ჰიბრიდული ორბიტალი (ნახ.4.2. ა).

ნახ. 4.2 ბ-ზე მოცემულია ასეთი  $SP^3$  ჰიბრიდიზაცია. ამ დროს  $S$ -ში ერთი ელექტრონია,  $P$ -ში - სამი. ასევე ადგილი აქვს  $SP^2$  ჰიბრიდიზაციას სამი თავისუფალი ბმით, ერთი  $S$ -ში, 2 -  $P$ -ში.  $SP$  ჰიბრიდიზაციისას  $S$ -დან გადადის 1 ელექტრონი  $P$ -ში.



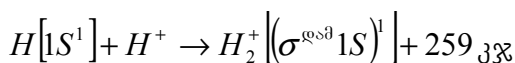
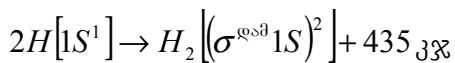
**ნახ.4.2.**  $SP^3$  ჰიბრიდიზაციის სქემა

**ბ) მოლეკულური ორბიტალების წრფივი კომბინაციის (მოწკ) მეთოდში** იგულისხმება, რომ მოლეკულა არის ბირთვების და ელექტრონების ერთიანი სისტემა. ამ სისტემაში ერთი ელექტრონი მიიზიდება ყველა ბირთვით და განიზიდება ყველა ელექტრონით.

მოლეკულური ორბიტალების ერთობლიობა განსაზღვრავს მოლეკულის ელექტრონულ კონფიგურაციას. ის იგება იმ პრინციპით, რა პრინციპითაც მრავალელექტრონიანი ატომის ელექტრონული კონფიგურაცია (ენერგიის მინიმუმი, პაულის პრინციპი, ჰუნდის და კლეჩკოვსკის წესები). თუ გვაქვს რამდენიმე ატომისაგან შემდგარი მოლეკულა და ცნობილია ატომის ტალღური ფუნქციები, მაშინ მოლეკულის ტალღური ფუნქცია არის მასში შემავალი ატომების ტალღური ფუნქციების წრფივი კომბინაცია. მაშასადამე, ყოველი ელექტრონი მოლეკულაში იმყოფება განსაზღვრულ ატომურ ორბიტალზე. განსხვავება მხოლოდ იმაშია, რომ მოლეკულაში ორბიტალი არის ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაცია და არის მრავალცენტრული, როცა ატომში ერთცენტრიანია.

ბმები  $\sigma$ ,  $\pi$  და  $\delta$  წრფივი კომბინაციებით მიიღება ისე, როგორც მოლეკულური ორბიტალები მოლეკულური ორბიტალების რიცხვი წრფივ კომბინაციაში მონაწილე საწყისი ატომური ორბიტალების რიცხვის ტოლია. მოლეკულურ ორბიტალებშიც არის ძირითადი და აღგზნებული მდგომარეობები. ელექტრონის ძირითადი მდგომარეობიდან აღგზნებულში გადასაყვანად საჭიროა ენერგიის დახარჯვა, ხოლო პირიქით – გამოიყოფა კვანტის სახით. ყველა მოლეკულას აქვს მკაცრად განსაზღვრული ენერგეტიკული დონეების ერთობლიობა, ამიტომ ყველა მოლეკულას ექნება თავისი სპექტრი, რაც მტკიცდება ექსპერიმენტზე.

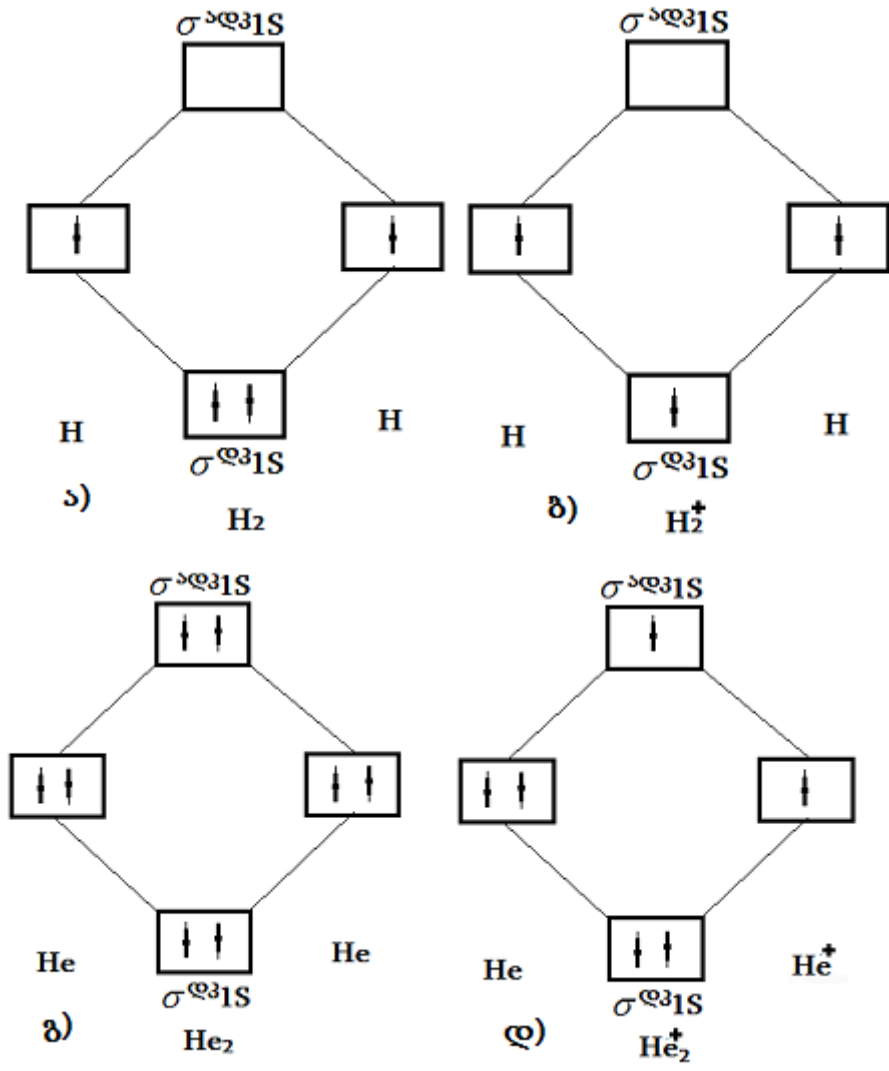
1s ატომის ორბიტალიდან ელექტრონის გადასვლას მოლეკულის დამაკავშირებელ ორბიტალზე, რის შედეგადაც მიიღება ბმა, თან სდევს ენერგიის გამოყოფა, ხოლო მოლეკულის ანტიდამაკავშირებელ ორბიტალზე – ენერგიის ხარჯვა. შესაბამისად,  $\sigma_{\text{დამაკ}} 1s$  -ზე ელექტრონის ენერგია უფრო დაბალია, ვიდრე  $\sigma_{\text{ანტიდამაკ}} 1s$  -ზე. მიახლოებით შეიძლება ჩაითვალოს, რომ 1s -დან ელექტრონის გადასვლისას დამაკავშირებელ მოლეკულურ ორბიტალზე გამოიყოფა იმდენივე ენერგია, რამდენიც საჭიროა 1s -დან ელექტრონის გადასაყვანად მოლეკულის ანტიდამაკავშირებელ ორბიტალზე. აქედან გამომდინარე, მოლეკულის შექმნისას გამოიყოფა იმდენივე ენერგია რამდენიც საჭიროა მოლეკულის დასაშლელად. ეს ენერგია განსაზღვრავს ატომებს შორის სიმტკიცეს, ანუ ბმის ენერგიას. მაგალითად:



– რომელთა ენერგეტიკული დიაგრამა მოცემულია ნახ.4.3 ა, ბ და დ-ზე. ბმის სიმტკიცეს განსაზღვრავს ენერგიების სხვაობა – დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ორბიტალების ენერგიები, დამოკიდებულნი მათზე მყოფი ელექტრო-

ნების რიცხვთა სხვაობაზე (ჯერადობაზე). ჯერადობა განისაზღვრება დამაკავშირებელი ელექტრონების და ანტიდამაკავშირებელი ელექტრონების სხვაობის წყვილით. მაგალითად,  $H_2$ -ში ერთჯერადი ბმაა.

ნახ. 4.3გ-ზე მოცემულია  $He[1S^2] + He[1S^2]$  ბმა. ჯერადობის მიზეზით,  $He_2$  დამაკავშირებელში ორი ელექტრონია და ანტიდამაკავშირებელშიც – ორი, ანუ ნული ჯერადობის ბმაა და ეს მოლეკულა არ იქნება მდგრადი, რაც მართლაც ბუნებაში არ დაიმზირება ჰელიუმის მოლეკულა.

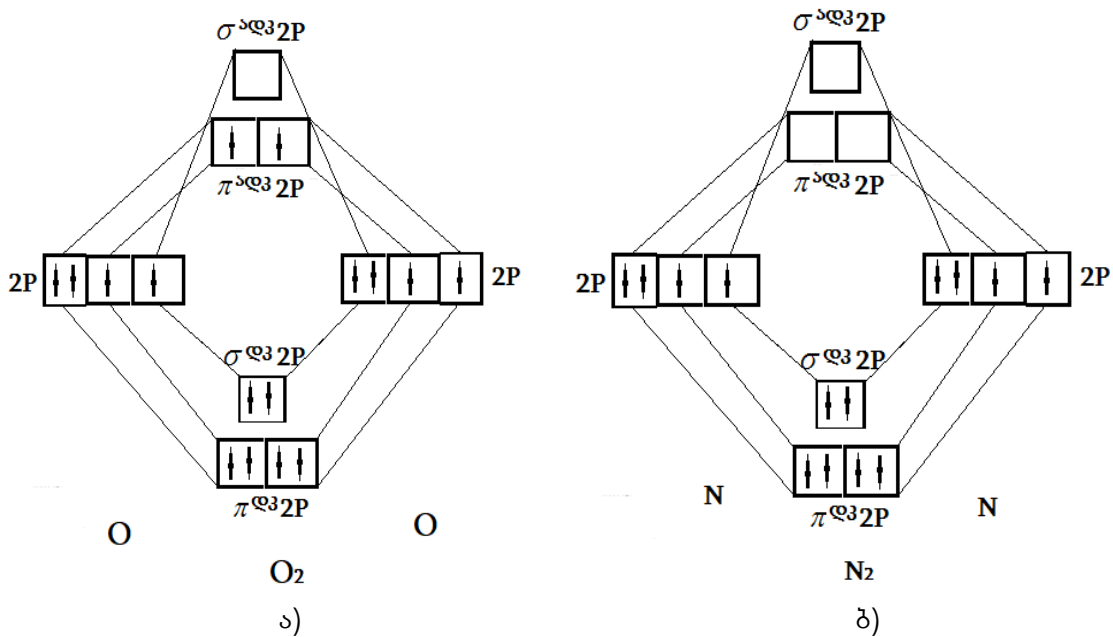


**ნახ.4.3.** ჰომეოატომებისაგან შედგენილი მოლეკულური ორბიტალების ენერგეტიკული დიაგრამა

თუ რომელიმე ბმაში 6 ელექტრონია დამაკავშირებელში და 2 – ანტიდამაკავშირებელში, მაშინ სხვაობა 4-ია, რაც ეთანადება ორმაგ ჯერადობას და ასეთი მოლეკულა მდგრადია.

მეორე პერიოდის ელემენტების ჰომეოატომურ ბმაში შემოდის, გარდა  $\sigma$ -ბმისა,  $\pi$ -ბმაც. მაგალითად, აზოტისა და ჟანგბადისთვის გარე შრეზეა  $2S^2 2P^3$  და  $2S^2 2P^4$ , შესაბამისად. ბმაში მონაწილეობს  $2P$ -ელექტრონები, რადგან  $1S$  და  $2S$ -ელექტრონების მოქმედება ძალიან მცირეა. მყარდება ერთი  $\sigma$  და  $2\pi$  - ბმა. აზოტის მოლეკულაში არის 6 ელექტრონი დამაკავშირებელ ორბიტაზე და ნული – ანტიდამაკავშირებელზე, ამიტომ არის ბმის სამმაგი ჯერადობა. ჟანგბადის მოლეკულაში 6 ელექტრონია დამაკავშირებელში და 2 გაუნწყვილებელი – ანტიდამაკავშირებელში, ამიტომ ჯერადობა არის ორმაგი. უნდა აღინიშნოს, რომ გაუნწყვილებელი ბმა იძლევა პარამაგნიტურ თვისებას, რაც შეიმჩნევა  $O_2$ -სთვის ექსპერიმენტზე.

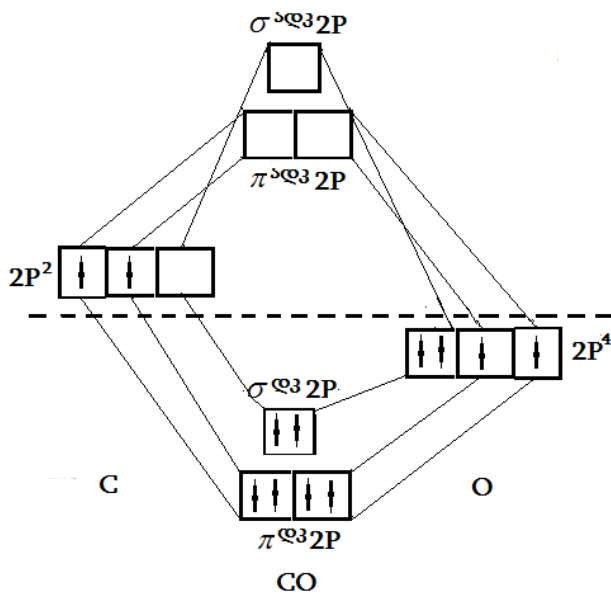
ჟანგბადისა და აზოტისთვის შესაბამისი ელექტრონული კონფიგურაციები მოცემულია ნახ.4.4-ზე. ნახაზიდან გამომდინარე,  $N_2$ -ის სიმტკიცე მეტი უნდა იყოს, ვიდრე  $O_2$ -სა. მართლაც,  $N_2$ -ის დისოციაციის ენერგიაა 943კჯ/მოლ, ხოლო  $O_2$ -სა – 494კჯ/მოლ.  $O_2$ -დან ერთი ელექტრონის წასვლამ ანტიდამაკავშირებელი ორბიტიდან უნდა გაზარდოს ბმის სიმტკიცე, მართლაც,  $O_2^+$ -სთვის ანტიდამაკავშირებელში არის ერთი ელექტრონი და ჯერადობა 2-დან გაიზარდა 2,5-მდე, შესაბამისად,  $O_2^+$  დისოციაციის ენერგია გახდა 642კჯ/მოლ. ამრიგად, ანტიდამაკავშირებელ ორბიტაზე ელექტრონის არსებობა ასუსტებს ბმას.



**ნახ.4.4.** ჟანგბადის (ა) და აზოტის (ბ) ატომებისაგან შედგენილი მოლეკულური ორბიტალების ენერგეტიკული დიაგრამა

ორი ჰეტეროატომური ატომებისაგან შემდგარი მოლეკულის ორბიტალის ელექტრონული კონფიგურაციის მიღებისთვის უნდა იქნას გათვალისწინებული ამ ატომ-

მეზის ორბიტალების ენერჯის სხვაობა. მაგალითისთვის განვიხილოთ  $CO$  მოლეკულის ელექტრონული კონფიგურაცია. ბმაში მონაწილეობს  $C$ -სთვის  $2P^2$  და  $O$ -სთვის  $2P^4$  ელექტრონები. მათი კონფიგურაციის სურათი მოცემულია ნახ.4.5-ზე.



**ნახ.4.5.** ნახშირბადის და ჟანგბადის ატომებისაგან შემდგარი მოლეკულური ორბიტალების ენერჯეტიკული დიაგრამა

ატომების  $2P$  ელექტრონების ენერჯეტიკა სხვადასხვაა. ჟანგბადის ატომის ბირთვის მუხტი მეტია, ვიდრე ნახშირბადის ატომის ბირთვის მუხტი. ამიტომ ჟანგბადის ატომებში  $2P$  ელექტრონები უფრო ძლიერად მიიზიდება ბირთვის მიერ, რასაც ეთანადება უფრო დაბალი ენერჯია.  $CO$ -ში 6-ვე ელექტრონი მოთავსებულია დამაკავშირებელ ორბიტაზე და იქმნება სამმაგი ბმა, ისე, როგორც  $N_2$ -ში. ამით აიხსნება  $CO$ -ისა და  $N_2$ -ის ერთნაირი თვისებები. მაგალითად,  $CO$ -სთვის დისოციაციის ენერჯიაა  $1076 \text{ კჯ/მოლ}$ , ბირთვებს შორის მანძილი  $N_2$ -ში  $0.110 \text{ - ნმ}$ ,  $CO$ -ში  $- 0.113 \text{ ნმ}$ , დნობის ტემპერატურა  $N_2$ -ში  $- 63\text{K}$ ,  $CO$ -ში  $- 68\text{K}$ , დუღილის ტემპერატურა  $N_2$ -ში  $- 77\text{K}$ ,  $CO$ -ში  $- 82\text{K}$  და ა. შ.

#### 4.1.2 ჰეტეროპოლარული (იონური) ბმა

ქიმიურ ბმაში შეიძლება მონაწილეობდეს ორი ერთნაირი ატომი. ამ დროს ყოველი ატომის გარსის მუხტი იქნება სიმეტრიული და ატომის ეფექტური მუხტი იქნება ნულის ტოლი. ასეთი ბმა არის არაპოლარული. როცა ბმა შედგენილია სხვადასხვა ატომებისაგან, მაშინ ელექტრული ღრუბელი გადაწეულია ერთ-ერთი ატომის მხარეს და იქმნება დიპოლი,  $\mu = lq$ , სადაც  $l$  ცენტრიდან გადაწევის მანძილია. ასეთი ბმა

არის პოლარული. ასეთ შემთხვევაში არაპოლარული ბმა იქნება ნულის ტოლი დიპოლური მომენტი.

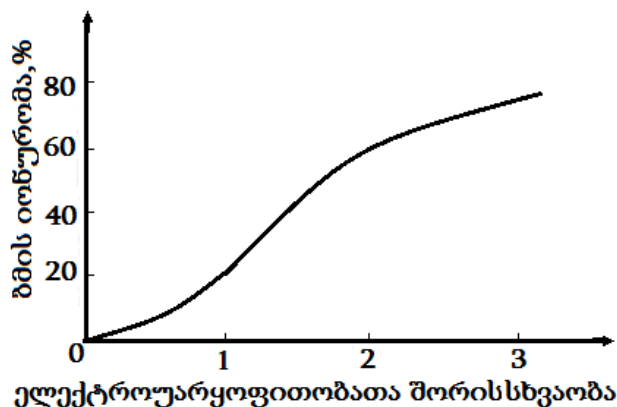
ორ მაკავშირებელ ატომისთვის ელექტრული ღრუბლის თავის მხარეს გადაწევის ახასიათებენ სიდიდით, რომელსაც ეწოდება **ელექტროუარყოფითობა**. ეს არის პირობითი სიდიდე და შემოიღო პოლინგმა. ელექტროუარყოფითობის სკალის ფიზიკური არსი წარმოადგინა მალიკენმა, რომლის თანახმად, ატომის ელექტროუარყოფითობა  $A$  არის მისი იონიზაციის ენერჯისა და ელექტრონებისადმი სწრაფვის (იხ. §3.4.) საშუალო არითმეტიკული:

$$A = \frac{1}{2}(I_i + F) \quad (4.1)$$

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

იონური ბმის დროს არ ხდება ერთი ატომიდან მეორეზე ელექტრონების სრული გადაცემა, არამედ დაიმზირება ელექტრონული ღრუბლის წანაცვლება უფრო მეტი ელექტროუარყოფითობის მქონე ატომისკენ. იონური ბმა არსებითად – ესაა ძლიერად პოლარიზებული კოვალენტური ბმა.

იონური ბმა, უმეტესად, მყარდება ისეთ ატომებს შორის, რომელთა ელექტროუარყოფითობები ერთმანეთისგან დიდად განსხვავებულია. თუმცა თანამედროვე კვანტური თეორიის წარმოდგენით, არ არსებობს 100%-იანი იონური ბმა, რომელიც გამონვეულია ელექტრონის დუალისტური ბუნებით.

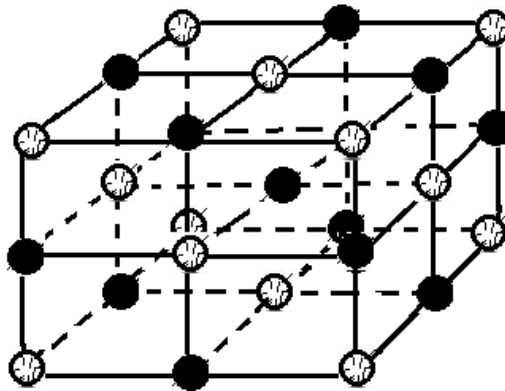


**ნახ.4.6.** ბმის იონურობის კავშირი მის წარმომქმნელ ატომთა ელექტროუარყოფითობებს შორის სხვაობასთან

პოლინგმა შეიმუშავა იონური ბმის კრიტერიუმი, რომლის თანახმად, იონური ბმის წარმომქმნელ ატომებს შორის უნდა იყოს ელექტროუარყოფითობის სხვაობა. ელექტროუარყოფითობის ცხრილი: Li – 1.0; Be – 1.5; C – 2.5; N – 3.0; O – 3.5; F – 4.0; Na – 0.9; Al – 1.5; Si – 1.8; Cl – 3; Ka – 0.8; Ga – 1.6; Ge – 1.8; As – 2.0; Br – 2.8; Cs – 0.7; I

– 2.5; და ა.შ. ნახ.4.6-ის მიხედვით ნათლადაა წარმოდგენილი ბმის იონურობა მისი წარმომქმნელი ელემენტების ელექტროუარყოფითობის სხვაობის მიმართ. მაგალითად,  $\chi_{Cl} - \chi_{Na} = 2.1$  და ბმა  $\approx 60\%$ -ით იონურია.

იონმა შეიძლება მიიზიდოს იონი სანინაალმდეგო მუხტით და ნებისმიერი მიმართულებით, ამიტომ იონური ბმა არაა მიმართული (არ გააჩნია მიმართულება). მოლეკულის გეომეტრიული მოდელის წარმოდგენა შეიძლება სიმეტრიით: ერთნიშნის იონები ლაგდებიან რაც შეიძლება შორს ერთმანეთისგან. იონური ნაერთები ქმნიან კრისტალურ მესერს, სადაც სიმეტრიის სიბრტყეთა გადაკვეთის კვანძებში განლაგებულია კათიონები და ანიონები. იონური თეორია ვერ ხსნის მოლეკულის სპექტრს და მაგნიტურ თვისებებს, ამიტომ ის ისაზღვრება მხოლოდ ტუტე ჰალოგენების შეერთებით. მაგალითად:  $NaCl$ .



ნახ.4.7. ნატრიუმის ქლორის კრისტალური მესრის სქემა

• -  $Na^+$ , o -  $Cl^-$

ნახ.4.7-დან ჩანს თითოეული კათიონის ( $Na^+$ ) ირგვლივ განლაგებული ექვსი ანიონი ( $Cl^-$ ) და პირიქით. მაშინ ამბობენ, რომ  $NaCl$  კრისტალის კოორდინაციული რიცხვი არის 6 (იონურ კრისტალურ მესერში მოცემული ნიშნის იონების გარშემო რამდენი საპირისპირო ნიშნის იონია). ენერგია, რომელიც საჭიროა ერთი მოლი კრისტალის აირად იონებად დასაშლელად, კრისტალური მესრის ენერგია ეწოდება. მით მეტია ეს ენერგია, რაც მცირეა იონის რადიუსი და მეტია მუხტი.

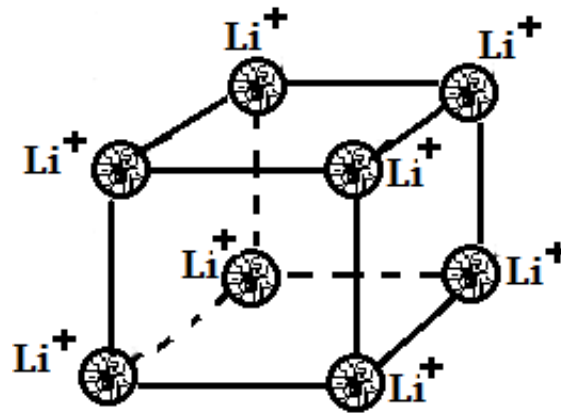
### 4.1.3 მეტალური ბმა

მეტალური თვისებები გააჩნია ზოგიერთ ნივთიერებას, რომელიც არის კონდენსირებული. ყველა ნივთიერება, რომელიც კონდენსირებულია მყარ მეტალურ მდგომარეობაში, არაა მეტალი. მეტალის თვისებას განსაზღვრავს მეტალური ბმა. მეტალის კრისტალურ მესერში (კვანძებში) განლაგებულია მეტალის კათიონები, ხოლო მათ შორის მოძრაობს თავისუფალი ელექტრონები – ე.წ. ელექტრონული გაზი. კვან-



ძთა შორის იონებისა და ელექტრონების მიზიდვით განპირობებულია მეტალის მთლიანობა, სიმტკიცე.

მეტალური ბმა, მცირე მიახლოებით, შეიძლება განვიხილოთ, როგორც კოვალენტური ბმა, რადგან ის ემყარება გარე სავალენტო ელექტრონების გაერთიანებას. მეტალური ბმის სპეციფიკა ისაა, რომ კრისტალის ყველა ატომი მონაწილეობს ელექტრონების გაერთიანებაში და გაერთიანებული ელექტრონები თავისი ატომების გარშემო არ ლოკალიზდებიან, არამედ თავისუფლად გადაადგილდებიან მთელი მესრის შიგნით, რითაც ქმნიან “ელექტრონულ გაზს”. რადგანაც არ აქვთ ლოკალური ბმები, მეტალური კრისტალები (იონურისგან განსხვავებით) არ ირღვევიან ატომების მდებარეობის შეცვლისას, ე.ი. მათი თვისებაა პლასტიკურობა დეფორმაციისას. თავისუფალი ელექტრონების არსებობის გამო მეტალები ხასიათდებიან დიდი ელექტრო და სითბოგამტარობით, აგრეთვე – დიდი საკოორდინაციო რიცხვით (ატომთან უახლოესი ატომების რიცხვი), ამიტომ, რომ შექმნან ლოკალური ორელექტრონიანი ბმა, როგორც ნესი, აკლიათ სავალენტო ელექტრონები, ე.ი. არის ელექტროდეფიციტური სტრუქტურა. მაგალითად, განვიხილოთ პერიოდული სისტემის პირველი მეტალი – ლითიუმის კრისტალური მესრის აგებულება. მისი საკოორდინაციო რიცხვი არის 8, ლითიუმის ატომი მხოლოდ ერთ ელექტრონს მისცემს ბმის განსახორციელებლად. ამიტომაც ელექტრონების დეფიციტი (ნახ.4.8).



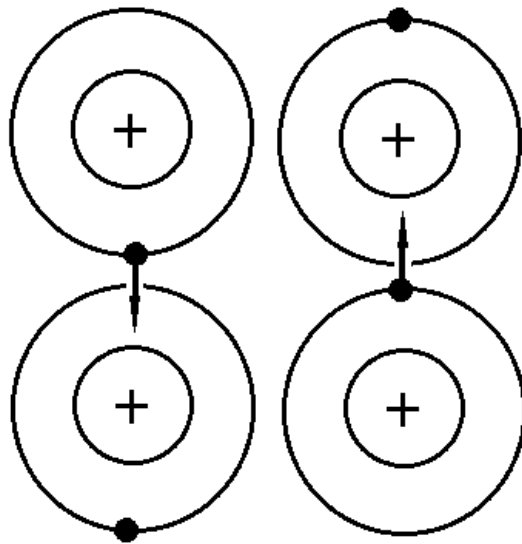
ნახ.4.8. ლითიუმის კრისტალური მესრის სქემა

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

#### 4.1.4. მოლეკულური (ვან-დერ-ვალსის) ბმა

მოლეკულური (ვან-დერ-ვალსის) ბმა დაიშორება რიგ ნივთიერებებისთვის მოლეკულებს შორის, რომელთა შიგამოლეკულური ბმა კოვალენტურია. მოლეკულათა შორის მიზიდვა არსებობს, როცა სავალენტო ელექტრონები ისეთ ურთიერთმდებარეობაში არიან (კერძოდ, ერთმანეთისგან მაქსიმალურად შორს), რომ ელექტრონე-

ბის მიზიდვა ბირთვებით მეტია, ვიდრე ელექტრონების განზიდვა სხვადასხვა ატომიდან. დროის ნებისმიერ მომენტში ელექტრონები ერთმანეთისგან უფრო შორს არიან და მაქსიმალურად ახლოს არიან ბირთვთან. ეს ძალები ელექტრული ხასიათისაა და მოქმედებენ, როგორც დიპოლის მიზიდვის ძალები. ხდება ორიენტაციული მოქმედება (დიპოლი-დიპოლი) პოლარულ მოლეკულებს შორის. პოლარული მოლეკულების დიპოლები ისე ორიენტირდებიან, რომ სანინაალმდეგო ნიშნის პოლუსები იზიდავენ ერთმანეთს, პოლარული და არაპოლარული მოლეკულების შემთხვევაში არაპოლარულში ინდუცირდება დიპოლი და მოქმედებაა დიპოლი-ინდუცირებული დიპოლი (ნახ.4.9). ინდუცირებული დიპოლი იზიდავს შესაბამის პოლუსს (პოლარული მოლეკულის დიპოლი). გარდა ამისა, ყველა შემთხვევაში გვაქვს დისპერსიული მოქმედება, ანუ მოქმედება სწრაფად შექმნილ და სწრაფადვე გამქრალ დიპოლებზე. ასეთი დიპოლების სინქრონული გაჩენა და გაქრობა წარმოშობს მათ შორის მიზიდულობას. ეს ბმა აღიძვრება თითქმის ყოველი ნაწილაკისთვის, მაგრამ ის ძალიან სუსტია, რამდენიმე რიგით ნაკლებია კოვალენტურ და იონურ ბმეებზე. მოლეკულური ბმა, რადგან ორიენტირებულია, ძალიანაა დამოკიდებული ტემპერატურაზე, ამიტომ მოლეკულური კრისტალები ხასითდებიან მცირე დნობის ტემპერატურით. მაგალითად, სანთლის (პარაფინის) დნობის ტემპერატურაა  $50 \pm 52^{\circ}\text{C}$ .



ნახ.4.9. მოლეკულური ბმის შექმნის სქემა

#### 4.1.5 წყალბადისებური ბმა

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

წყალბადის ატომი დაკავშირებული დიდ ელექტროუარყოფითობის მქონე  $X$  ატომთან მოქმედებს ასევე დიდი ელექტროუარყოფითობის მქონე  $Y$  ატომთან, რო-

მელსაც არა აქვს განუყოფელი ელექტრონწყვილი. ასეთი წყალბადის ბმის ენერგია (რომელიც საჭიროა მის მოსაწყვეტად) ძალიან მცირეა –  $8 \div 40$  კჯ/მოლ. წყალბადის ატომი, რომელიც დაკავშირებულია უფრო მეტ ელექტროუარყოფით ატომთან, პოლარიზებულია, ანუ დამაკავშირებელი ელექტრონული წყვილი გადაწეულია მეტი ელექტროუარყოფითი ატომისაკენ. ამიტომ წყალბადის ატომის მდგომარეობა უახლოვდება  $H^+$ -ის მდგომარეობას, ე.ი. პროტონს. მას კი არ გააჩნია ელექტრული ღრუბელი და მიიზიდება მეორე ატომის ელექტრული ღრუბელით და ინერგება მასში. სწორედ ასეთი წყალბადისებური ბმა ხორციელდება დიდი ელექტროუარყოფითობის მქონე  $F, O_2, N_2, Cl, S, C$  და ა.შ. ელემენტებს შორის. ამ დროს მიიღება წრფივი სტრუქტურა  $X - H \cdots Y$ . შეიძლება მივიღოთ სიმეტრიული ბმა  $X - H - X$ . ზოგადად,  $H - Y$  ბმის გაძლიერება ასუსტებს  $X - H$  ბმას. ყინული და წყალი არის სტრუქტურა, სადაც მოლეკულათაშორისო ბმა არის წყალბადისებური. თუ ნივთიერება თავის გამხსნელთან ქმნის წყალბადისებურ ბმას, მაშინ გამხსნელობა იზრდება.

### საკონტროლო კითხვები:

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

### 5. ნანოსტრუქტურებში შინაგანი და გარეგანი ზედაპირების როლი

ნანონანილაკებში, მოცულობასთან შედარებით, ატომების უმეტესი წილი მოდის ზედაპირზე. ცხადია, რომ სხეულის ზედაპირისწინა თხელ არეში ( $\sim 16$ მ) ატომების წილი, ანუ ხვედრითი ზედაპირი  $\alpha$  იზრდება ნივთიერების შემადგენელი ნანილაკების  $R$  ზომის შემცირებასთან ერთად, რადგანაც  $\alpha = S/\rho V = R^2/\rho R^3 = 1/\rho R$ , სადაც  $S$  ნანილაკის ზედაპირია,  $\rho$  – სიმკვრივე, ხოლო  $R$  – მისი ხაზოვანი ზომა. ხვედრითი ზედაპირის სიდიდის განზომილებაა  $მ^2/გ$ .  $d$  წიბოს მქონე კუბის ზედაპირის ფართობია  $6d^2$  და

მოცულობა –  $d^3$ , მაშინ ხვედრითი ზედაპირი  $\alpha=S/V=6/d$ .  $d$  დიამეტრის სფეროს ზედაპირის ფართობია  $\pi d^2$  და მოცულობა –  $\pi d^3/6$ , რაც იძლევა  $\alpha=S/V=6/d$ . ცილინდრს  $d$  დიამეტრით და  $L$  სიგრძით აქვს მოცულობა  $V= \pi d^2 L/4$ . ზღვარში, როცა  $L \ll d$  არის დისკო, რომლის ორივე მხრის ფართობის ჯამია  $S=\pi d^2/2$ , რაც იძლევა  $\alpha=S/V=2/d$ . ანალოგიურად, გრძელი ცილინდრის, ანუ  $d$  დიამეტრის მავთულის შემთხვევაში  $L \gg d$ , ფართობი  $S=\pi d L$  და ხვედრითი ზედაპირი  $\alpha=S/V=4/d$ . ასე რომ, ერთი და იმავე  $\rho$  სიმკვრივის ნივთიერების სხვადასხვა ფორმისთვის ხვედრითი ზედაპირი სხვადასხვაა, კერძოდ, კუბისთვის –  $\alpha=S/\rho V=6 \cdot 10^3/\rho d$ ; სფეროსთვის –  $\alpha=S/\rho V=6 \cdot 10^3/\rho d$ ; თხელი ფირფიტისთვის –  $\alpha=S/\rho V=2 \cdot 10^3/\rho d$  და მავთულისთვის –  $\alpha=S/\rho V=4 \cdot 10^3/\rho d$ , სადაც  $d$  იზომება ნმ-ში, ხოლო  $\rho$  – გ/სმ<sup>3</sup>. ნახევარგამტართა სიმკვრივე ძირითადად ძვეს ინტერვალში  $2 \div 8$  გ/სმ<sup>3</sup>, კერძოდ, CaAs –სთვის  $\rho=5,32$  გ/სმ<sup>3</sup>. შესაბამისად, მისთვის ხვედრითი ზედაპირები იქნება:

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

ცხრილიდან ჩანს, რომ ხვედრითი ზედაპირების მნიშვნელობა დამოკიდებულია ნანონანწილაკის ზომაზე და ფორმაზე. სფეროს ხვედრითი ზედაპირი მეტია, ვიდრე მავთულის და ფირფიტის, რადგან სფეროს მათ შორის უკავია მინიმალური მოცულობა. გავანალიზოთ კუბის და სფეროს ხვედრითი ზედაპირების შემთხვევა და დავუშვათ, რომ  $R$ -რადიუსიანი სფეროს მოცულობა ისეთივეა, როგორც  $a$  ნიბოს მქონე კუბისა, მაშინ  $4/3 \cdot \pi R^3 = a^3$  და  $a = (4\pi/3)^{1/3} R$ , რაც იძლევა, რომ ერთი და იმავე მოცულობისას  $\alpha_{\text{კუბ.}} = 1,24 \alpha_{\text{სფერ.}}$ . ამიტომ ერთი და იმავე მოცულობისას კუბს აქვს 24%-ით მეტი ხვედრითი ზედაპირი, ვიდრე სფეროს. თუ ტოლი აქვთ ზედაპირები, მაშინ  $\pi d^2 = 6a^2$ , საიდანაც  $d=1,4a$ .  $R$ -რადიუსიანი სფეროსა და  $R$ -რადიუსიან და  $L$  სიგრძის ცილინდრს შორის  $4\pi R^3/3 = \pi R^2 L$  და ვღებულობთ:  $L=1,3R$ . ტოლი ხვედრითი ზედაპირებისას ცილინდრის ნიბოს სიგრძე 30%-ით მეტი უნდა იყოს სფეროს დიამეტრზე.

ხვედრითი ზედაპირის გაზრდა, გარდა ნანწილაკის ზომის შემცირებისა, შესაძლებელია სიმკვრივის შემცირებით, ანუ ფორიანობის გაზრდით. ეს შესაძლებელია მოცულობით მასალაში წვრილი სიცარიელების შექმნით. ზოგიერთი მასალა, მაგალითად ცეოლიტი, მათი მიღების პროცესში სხვადასხვა გარე ფაქტორების მოქმედებისას, ფორმირდება მარცვლების სახით, შიგა

სიცარიელებით (ფორებით). ეს ფორები ხშირად არიან ნმ-ული ზომის და გამოდინ ზედაპირზე. ამ შემთხვევაში ნანონანწილაკის გარე ზედაპირს ემატება შიგაც და ზედაპირის საერთო ფართი იზრდება.

ზოგადად, კატალიზისთვის საჭიროა საფენი ზედაპირის დიდი ფართობით. თუ ეს საფენი ფოროვანია, მაშინ კატალიზატორის მოლეკულები ეკვრიან საფენის ზედაპირს და ინვევენ ქიმიურ რეაქციაში კატალიზურ ეფექტს. რაც მეტია ფორი, მით

მეტი ზედაპირია და პროცესიც უფრო ეფექტურია. შესაძლებელია ზოგიერთი არაკატალიზატორული მოლეკულა ან ნაერთი მიუერთდეს ზედაპირს, შეამციროს ფორის დიამეტრი, ანუ ამით ამცირებს აქტიური ზედაპირის ფართს და, შესაბამისად, ამცირებს კატალიზურ ეფექტს.

ცნობილია აგრეთვე, რომ ზედაპირზე დისოცირებული ატომების თვისებები განსხვავდება მოცულობითი ატომების თვისებებისაგან, რადგან ზედაპირული ატომები უშუალოდ უკავშირდებიან გარშემო მყოფ ატმოსფეროს ატომებს, ვიდრე მოცულობითი. გარდა ამისა, ზედაპირზე ატომების გაუჯერებელი ბმების გამო შეიძლება მივიღოთ მათი სხვანაირი რეკონსტრუქცია და განლაგება, ამიტომ შესაძლებელია ზედაპირზე განლაგდნენ გარშემო ატმოსფეროში მყოფი ატომები ან მოლეკულები და შეიქმნას ზედაპირული „ჟანგის“ ფენა, მოცულობით ატომებთან მოგროვდნენ სეგრეირებული ატომები, ვაკანსიები და ა. შ. უკანასკნელთა გამხსნელობა მოცულობაში და გამყოფ საზღვრთან ახლოს იქნება სხვადასხვა, რაც ქმნის ნონასწორულ კონცენტრაციათა სხვაობას და, შესაბამისად, ორმაგ ელექტრულ შრეს.

დამატებით თავისებურებებს ავლენენ მონოატომური, ნივთიერების ჩანასახის მარცვლის ატომები, მოცულობის და სწორი ზედაპირის ატომებთან შედარებით ნაკლები საკოორდინაციო რიცხვის გამო. ეს შეიძლება მკვეთრად ზრდის ზედაპირის ქიმიურ და კატალიზურ აქტივობას, ელექტრო-ფიზიკურ თვისებებს და ა. შ. ზედაპირი წარმოადგენს დენის მატარებლების ჩამჭერს, ჩნდება ზედაპირული ლოკალური დონეები (ტამის ან შოკლის) აკრძალულ ზონაში.

ყოველივე ეს ერთად ქმნის საფუძველს, რომ ზედაპირისწინა უბანი განვიხილოთ, როგორც ნივთიერების ახალი მდგომარეობა, რასაც შეისწავლის საგანი „ზედაპირების ფიზიკა“. პლანალური ტექნოლოგიის განვითარებას, სქემის მინიატიურისზაციასა და მემბრანული ტექნოლოგიის განვითარებასთან ერთად, ეს საგანი გადაიქცა ნანოტექნოლოგიის საფუძველად.

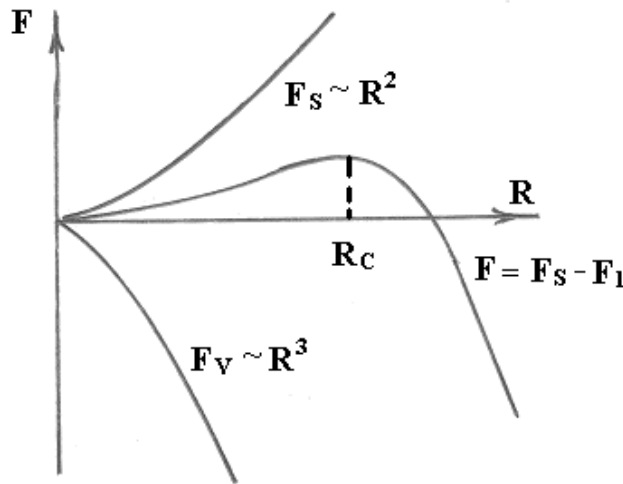
აღსანიშნავია აგრეთვე, რომ ზედაპირზე ხდება კრისტალური სტრუქტურის დეფექტების დიდი ნაწილის თავმოყრა ძალური გამოსახულებით და სხვათა მოქმედებით. ძალური გამოსახულება გამოთვლის მეთოდი, როცა წარმოდგენით გამყოფი საზღვრის მეორე მხარეს სიმეეტრიით განიხილება ზუსტად ისეთივე ობიექტი სანინალმდეგო ნიშნის მუხტით. ის ეცემა ზედაპირიდან დაშორებისას, მაგრამ, როცა ნაწილაკის ზომა საკმაოდ მცირეა, მას შეუძლია მოცულობიდან ზედაპირზე ამოქაჩოს დეფექტები და მოცულობა გახადოს სტრუქტურულად და ქიმიურად უფრო სრული. ამრიგად, თვისებრივად ყოველთვის განირჩევა ზედაპირისწინა უბანი და მოცულობა ერთმანეთისაგან.

გაზური და თხიერი ფაზებიდან კრისტალიზაციის პროცესისას, მოლეკულურ-სხივური ეპიტაქსისას, მყარ სხეულში პოლიმორფული და სხვა ფაზური გარდაქმნებისას დიდ როლს თამაშობს ახალი ფაზის წარმოქმნის ჩანასახი და მისი შემდგომი ზრდა. ამ პროცესის მიკროსკოპული მექანიზმი გადაცივებულ სითხეში ან გაზში დეტალურად დღემდე არაა ცნობილი.

არჩევენ **ჰომოგენურ** და **ჰეტეროგენურ** ფაზწარმოქმნებს. ჰეტეროგენური პროცესის დროს წარმოქმნაში მონაწილეობას ღებულობს მატრიცულ ფაზაში ან მის ახლოს ზედაპირზე უკვე შექმნილი არაერთგვაროვნებები. ეს შეიძლება იყოს მტვრის

ნანილაკი, გაზის ბუმტები სითხეში, ელექტრულად დამუხტული ობიექტები, ჭურჭლის კედლის ხაოიანობა და ა. შ. ასეთი ალგზნების გარეშე ფაზნარმოქმნა ჰომოგენურია.

განვიხილოთ მარტივი შემთხვევა – იზოტროპული ჰომოგენური ფაზნარმოქმნა ერთკომპონენტიანი ნანილაკის ორთქლიდან კონდენსაციისას და ხსნარიდან კრისტალიზაციისას. ამ შემთხვევაში ახალი ფაზის ნანილაკები გამოიყოფა ძირითადი ფაზიდან, ხასიათდება განსაზღვრული ზედაპირული ენერგიით და აქვს სფერული ფორმა. ატომების ან მოლეკულების გადასვლას ახალი ფაზის ზედაპირით სიღრმეში თან ახლავს ქიმიური  $\mu$  პოტენციალის ცვლილება. რაც მეტი ახალი  $N$  ატომი გადავა ახალ ფაზაში, მით უფრო მეტად შეიცვლება გიბსის თერმოდინამიკური პოტენციალი. როგორც ცნობილია, თვითდინების პროცესები მიმდინარეობს თერმოდინამიკური პოტენციალის შემცირების გზით. კონდენსირებულ მდგომარეობაში ატომის ან მოლეკულის ქიმიური პოტენციალი უფრო მცირეა, ვიდრე გაზში, ხსნარში და ნადნობში. ამიტომ ფაზური გადასვლის საჭირო პირობაა სისტემის ორთქლი – სითხე ან სითხე – მყარი სხეული გადაჯერება და გადაცივება წონასწორული ხაზის დაბლა. ასევე ცხადია, რომ კრისტალის ზრდისთვის, და არა გახსნისათვის, საჭიროა, კრისტალიზაციის ცენტრს ჰქონდეს ზომა კრიტიკულ  $R_c$ -ზე მეტი. ეს გასაგებია, თუ გავანალიზებთ ახალი ფაზის წანაზრდის მოდელში თავისუფალ ენერგიაში მოგებას და წაგებას გამყოფი ზედაპირის გაჩენასა და მასთან დაკავშირებულ დამატებით ენერგიას (ნახ.5.1).



**ნახ.5.1.** თავისუფალი ენერგიის დამოკიდებულება ახალი ფაზის ზომაზე

სფერული წაზრდისას თავისუფალი ენერგია იცვლება, როგორც  $R^3$ , ხოლო ზედაპირულისას –  $R^2$ . ამიტომ მათი სხვაობა იძლევა მრუდს მაქსიმუმით. რეალური ნივთიერებისათვის ეს მაქსიმუმი არის ზომებში 1-10 ნმ-ის ფარგლებში, რაც ეთანადება წანაზრდში რამდენიმე ერთეულიდან რამდენიმე ათასეული ატომის არსებობას. ამრიგად, კრისტალიზაციის ცენტრები – მცირეატომიანი კლასტერები ან ნანონანილა-

კებია. ნანაზარდები  $R_c$  ზომით არის კრიტიკული, რადგანაც ფაზის ზრდა ხდება მაშინ, როცა  $R > R_c$ . ნანაზარდი, როცა  $R < R_c$  იხსნება ან ორთქლდება გარშემო ატმოსფეროში. ეს მოდელი ასახავს მხოლოდ ფაზის ზრდის დასაწყისს. რეალურად ის რთულდება სხვადასხვა ფაქტორებით, კერძოდ, მცირეატომიანი კლასტერი ხასიათდება განსაზღვრული მონესრიგების ხარისხით და ანიზოტროპულობით. მათ გადაწყვეტა ფაზის ზრდა სფერულობიდან. სხვადასხვა ნიბოზე სხვადასხვაა ზედაპირული ენერგიები და ამიტომ განსხვავდება საერთო მაკროსხეულის ზედაპირული ენერგიებისგან. ეს გასათვალისწინებელია გიბსის ენერგიის განსაზღვრისას, როცა ხდება ყველა ნიბოებისთვის ენერგიების აჯამვა.

სიტუაცია უფრო რთულდება, როცა ახალი ფაზა ფორმირდება მყარი მატრიცის შიგნით. ახალი და ძველი ფაზები განსხვავდებიან ჩანცობის სიმკვრივით, კრისტალოგრაფიის სიმეტრიით, თერმული გაფართოების კოეფიციენტით და ა. შ. რის შედეგადაც აღიძვრება დრეკადი დაძაბულობები და დამატებითი ენერგიები, რომლებიც უნდა გავითვალისწინოთ გიბსის პოტენციალში. უფრო დანვრილებით განხილვისას ასევე გასათვალისწინებელია სხვადასხვა სტრუქტურული დეფექტების, დისლოკაციების, ჩანცობის დეფექტების და ა.შ. არსებობა.

ბევრ პრაქტიკულ შემთხვევაში ჰომოგენურის დაწყებამდე ხდება ჰეტეროგენურის ჩამოყალიბება სხვადასხვა არაერთგვაროვნებებზე გადაცივებულ არეში, გამონვეული ჭურჭლის კედლებით, ქვესაფენით და ა. შ. ამ არაერთგვაროვნების ზომები უნდა იყოს  $R_c$ -ის რიგის, ანუ ნანოზომებში. ეს ნიშნავს, რომ ხელოვნურად შექმნილი კრისტალიზაციის ცენტრი არსებითად ცვლის კრისტალიზაციის პროცესს. ქვესაფენის პარამეტრებისგან დამოკიდებულებით შესაძლებელია სრულიად განსხვავებული ზედაპირისნინა ნანოსტრუქტურები, რომლებმაც ფართო გამოყენება პოვეს პრაქტიკაში. სურათის სრული წარმოდგენისთვის საჭიროა ახალი ფაზის წარმოქმნის კინეტიკის მიკროსკოპული ასპექტის განხილვა, მაგრამ ხშირად ეს არის სადისკუსიო, მაგალითად, ნანომილის ფორმირება და ზრდა.

ნანონაწილაკებში, ნანოკრისტალურ მასალებში, ნანოკომპოზიციებში ფაზურ გადასვლებზე დიდ გავლენას ახდენს სტრუქტურული ერთეულის ზომები. კერძოდ, მაგნიტური მონესრიგების თავისებურება, ნივთიერების მაგნიტური თვისება მისი გარე მაგნიტურ ველში მოთავსებისას არსებითადაა დამოკიდებული ნაწილაკის ზომაზე, ფენის სისქესა და სხვა გეომეტრიულ მახასიათებლებზე. ინფორმაციის ულტრამკვრივი ჩანერისა და მაგნიტური ლოგიკური ელემენტების სწრაფქმედების გაზრდის პერსპექტიულობასთან დაკავშირებით ზომის ეფექტს მაგნიტიზმში აქვს დიდი მნიშვნელობა. მაგნიტური თვითმონესრიგება აღიძვრება მოქმედების კვანტური გაცვლით, გარდამავალი მეტალების ატომებისთვის მაგნიტური მომენტები ლაგდება პარალელურად (ფერომაგნეტიკები) ან ანტიპარალელურად (ფერიმაგნეტიკები) კიურის ან ნეელის ტემპერატურის დაბლა, შესაბამისად. მონესრიგებული ატომების რიცხვის ზრდით იზრდება ნაწილაკების მაგნიტური ენერგია (მოცულობის პროპორციულად). ნაწილაკის ზომის გაზრდით რაღაც კრიტიკულ  $R_c^m$ -მდე, ერთგვაროვანი დამაგნიტების მდგომარეობა ხდება არახელსაყრელი, ვიდრე მრავალდომენური. დომენების აღძვრა – უბანი, ანუ არე, სადაც დამაგნიტების ვექტორებს აქვთ ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულება, ნაწილაკების ჯამური მაგნიტური ენერგიის

შემცირებით. კრისტალური წარმოქმნის მსგავსად,  $R_c^m$  განისაზღვრება მაგნიტური ენერჯის, რომელიც პროპორციულია  $R_c^m$  -ის, და დომენის კედლის  $W_d$ -ის, რომელიც იზრდება  $R^2$ -ის პროპორციულად, კონკურენციით. რეალურად, მაგნიტურ მასალებში  $R_c^m$  -ის ზომები ძვეს ინტერვალში 10 ნმ-დან ათეულობით მკმ-მდე. ეს ნიშნავს, რომ ამ ზომის ნაწილაკისთვის, ფირის სისქის თუ მავთულის დიამეტრისას, მათი თვისებები არსებითად იქნება განსხვავებული მისსავე მაკროსკოპული სხეულისგან. მაგნიტურ ველში მყოფ ერთდომენიან ნანონაწილაკში დაიმზირება **სუპერპარამაგნეტიზმის ეფექტი**, რა დროსაც თვითდამაგნიტების ვექტორი სითბური რხევების მოქმედებით იწყებს ქაოსურ ფლუქტუაციას. ეფექტი დაიმზირება ნაწილაკის მახასიათებელი  $R$  ზომის შემცირებით ისეთ  $R_c$ -მდე, როცა  $kT \geq W_m \approx ABRS^3$ , სადაც  $k$  ბოლცმანის მუდმივაა;  $T$  – აბსოლუტური ტემპერატურა;  $A$  – დამაგნიტების ჯამური ანიზოტროპიის მუდმივა;  $B$  – ნაწილაკის ფორმის კოეფიციენტი. ამ პირობებში მაგნიტური დომენი იქცევა, როგორც პარამაგნიტური გაზის ატომი დიდი მაგნიტური მომენტით, დამაგნიტების ორიენტაციის განუწყვეტელი ცვლილებით. სუპერპარამაგნეტიკებზე გარე სუსტი ველის მოდებითაც კი ხდება მაკროდამაგნიტების გაჯერება, რადგანაც ცალკეული ნაწილაკების მაგნიტური მომენტები ასიათასობით მეტია ატომისაზე. ამ მდგომარეობაში მაგნიტური მომენტების ფლუქტუაცია პრაქტიკულად არაა. ნანონაწილაკის ზომების კიდევ უფრო შემცირებით თვითმონესრიგება შეუძლებელია მაგნეტიზმის კვანტური ბუნებით და განუზღვრელობის პრინციპით.  $R$  –ის შემცირება ზრდის განუზღვრელ იმპულსს, შესაბამისად, ენერჯიას  $\Delta W_m$ . როცა  $\Delta W_m \approx kT$  მონესრიგება საერთოდ არ აღიძვრება, მაშინ კლასტერის ზომა  $\approx 16$ მ-ა.

ბევრი მეტალი (რამდენიმე ათეულამდე), ნანოკლასტერებსა და ნანონაწილაკებში ატომების რიცხვის შემცირებისას, კარგავს მეტალურ თვისებებს. ამასთანვე, ეს ზრდის სავალენტო ელექტრონების ურთიერთმოქმედებას და მაგნიტური მონესრიგების გამო ზრდის მაგნიტურ თვისებებს. ლითიუმის, პლატინის და ალუმინის ნანონაწილაკებისთვის, რომელთა ზომებია  $\sim 16$ მ, დაბალ ტემპერატურებზე შეიმჩნევა მაგნიტური ამთვისებლობის ცვლილება კიურის კანონით, რომელიც დამახასიათებელია მაგნიტურად მონესრიგებული ნივთიერებებისთვის, ამავდროულად, მაღალტემპერატურულ არეში ემორჩილებიან პარამაგნეტიკებისთვის პაულის კანონს.

მაგნიტური თვისებების ცვლილება ზომის შემცირებით შეიმჩნევა აგრეთვე კლასიკურ ფერომაგნეტიკებში. მაკროსკოპულ ნიმუშებში კიურის ტემპერატურის დაბლა ურთიერთმოქმედება იწვევს დომენების წარმოქმნას. მეზობელი დომენებისთვის ჯამური მაგნიტური მომენტები მიმართულია ურთიერთსანინაალმდეგოდ, რაც ამცირებს კრისტალის მაგნიტურ ენერჯიას. მრავლდომენიან ნაწილაკებში გარე მაგნიტური ველი იწვევს დომენტშორისო კედლების წანაცვლებას და ველის გასწვრივ დომენტა მოცულობის გაზრდას. თუ ნაწილაკთა ზომები არ აღემატება კრიტიკულ მნიშვნელობებს –  $R_c \sim 30 \dots 40$  ნმ, ისინი გადადიან ერთდომენიან მდგომარეობაში, რომლებიც ხასიათდებიან უდიდესი კოერციტუვური  $H_c$  ძალით. ნანონაწილაკების ზომების შემდგომი შემცირებით,  $R \sim 5 \dots 10$ მმ, მკვეთრად მცირდება კოერციტუვური ძალა და  $H_c = 0$ . რამდენიმე ნმ-ზე დაბალი ზომის ნაწილაკები იმყოფებიან პარამაგნეტურ მდგომარეობაში.



ზომის შემცირების ზედაპირული ეფექტების გავლენას განიცდის, აგრეთვე, სტრუქტურული დეფექტები: დისლოკაციები, მიკრონაპრალები და ა. შ. ერთი მხრივ, მათი წარმოშობა და ევოლუცია იწვევს დრეკადი დაძაბულობების რელაქსაციას (თავისუფალი ენერჯის შემცირებას); მეორე მხრივ, მათი ზომების გაზრდა ზრდის საკუთარ ენერჯიას. ნაწილაკის კრიტიკული ზომები განსაზღვრავენ ამ ფაქტორების კონკურენციას.

კრისტალიკთა ზომების შემცირებით, ანუ ზედაპირულ ნაწილაკთა ფარდობის გაზრდით მოცულობასთან შედარებით, იზრდება ზედაპირული ძალების როლი (ადგეზია, ელექტროსტატიკურობა, კაპილარობა) და შემცირდება მოცულობითის (გრავიტაცია, ინერციულობა, მაგნიტური თვისებები). ბოლოს, გამტარიდან მისი ზომის შემცირებით ჯოულის სითბოს ართმევა უმჯობესდება, რადგანაც გაფანტვის ენერჯია ეცემა,  $R^2$ -ის პროპორციულად სითბოართმევის ფართი კი  $R^1$ -ის პროპორციულად. ეს იძლევა საშუალებას, ინტეგრალურ მიკროსქემაში ელემენტთაშორისო შემერთებლებზე მივიღოთ დენის ისეთი სიმკვრივე, რომელიც შეუძლებელია მაკრომონწყობილობაში. ზედაპირის გავლენის ეფექტი მცირე ზომის სტრუქტურებში კარგად ვლინდება, აგრეთვე, გადატანით მოვლენებისას (ელექტრული დენი, სითბოგამტარებლობა, პლასტიკური დეფორმაცია და ა. შ.). ამ დროს მატარებლებს შეიძლება მიენეროს ეფექტური თავუსუფალი განარბენის  $R_e$  სიგრძე. როცა  $R \gg R_e$  მატარებლების გაბნევა (ჩაჭერა, რეკომბინაცია) ხდება მოცულობაში და არაა დამოკიდებული ობიექტის გეომეტრიულ ზომაზე. როცა  $R < R_e$  სიტუაცია რადიკალურად იცვლება და კინეტიკური მოვლენები დამოკიდებულია ზომაზე, ანუ ზედაპირის როლზე. გარდა თავუსუფალი განარბენისა, ასევე მასზეა დამოკიდებული ეკრანირების სიგრძე, დიფუზიის სიგრძე და ა. შ.

ცნობილია, რომ უცხო ატომების დიფუზია ზედაპირზე უფრო სწრაფად მიმდინარეობს, ვიდრე მოცულობაში (განსაკუთრებით, მაღალ ტემპერატურაზე), რადგან თავისუფალი, გაუნწყვილებელი ბმები ბევრია და დიფუზიისთვის ბმის განწყვეტაზე ენერჯია არ იხარჯება. ნანოსტრუქტურის მასალებში მარცვლოვნების გაზრდის გამო შინაგანი საზღვრები დიდია, დიდია საზღვრის ეფექტის ფარდობა მოცულობით ეფექტთან და, შესაბამისად, მკვეთრად იზრდება დიფუზიის კოეფიციენტი, მიგრაციის და რეკრისტალიზაციის სიჩქარე და სხვა ნანომასალის მახასიათებლები მის მასიურ ობიექტთან შედარებით. ამ მიზეზით (სხვა დეფექტების დიდი კონცენტრაციის, არანონასწორული ფაზების, ფორების, შინაგანი დაძაბულობების და ა. შ. მიზეზით), ნანომასალები შორს არიან თერმოდინამიკური წონასწორული მდგომარეობებისგან. ამიტომ დღის წესრიგში დგას მათი სტრუქტურის და თვისებების სტაბილიზაციის საკითხი, განსაკუთრებით, მაღალ ტემპერატურებზე.

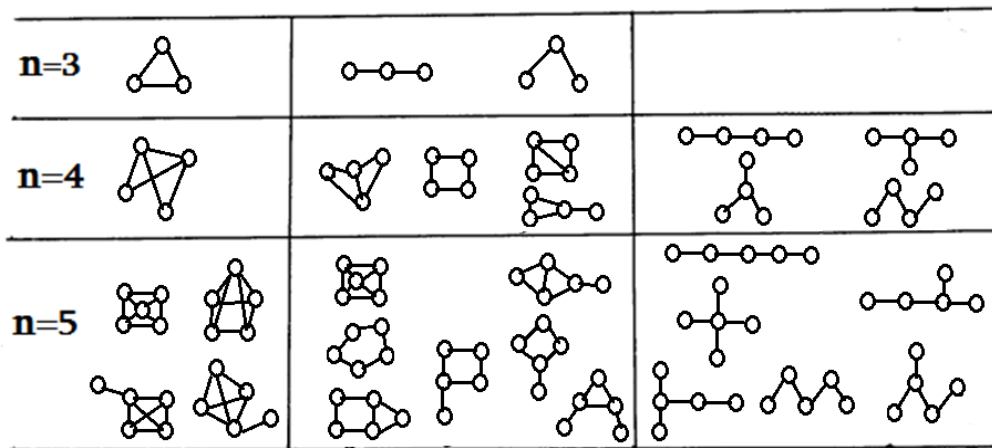
### 5.1. ნანონაწილაკის გეომეტრიული სტრუქტურა

ნანონაწილაკის გეომეტრიულ სტრუქტურას ატომების კომპაქტურად ჩანწყობის თავისებურებების შემდეგ ადვილად გავარჩევთ. მისი კრისტალური სტრუქტურა ისეთივეა, როგორც შესაბამისი მოცულობითი მასალის კრისტალური სტრუქტურა, მხოლოდ მესერის პარამეტრის რამდენადმე განსხვავებით. 80 ნმ ზომის ალუმინის

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

გეომეტრიული აგებულების მიხედვით, კლასტერი შეიძლება იყოს სხვადასხვა ფორმის: ჯაჭვი, ციკლი, პირამიდა, პოლიედრი და ა. შ. ნახ.5.2-ზე მოცემულია კლასტერის გეომეტრიული აგებულების ფორმა 3; 4 და 5 ატომის შემთხვევაში. უფრო მეტი ატომის კლასტერისთვის ფორმა უფრო რთულდება.

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



ნახ.5.2. კლასტერის გეომეტრიული აგებულების ფორმები

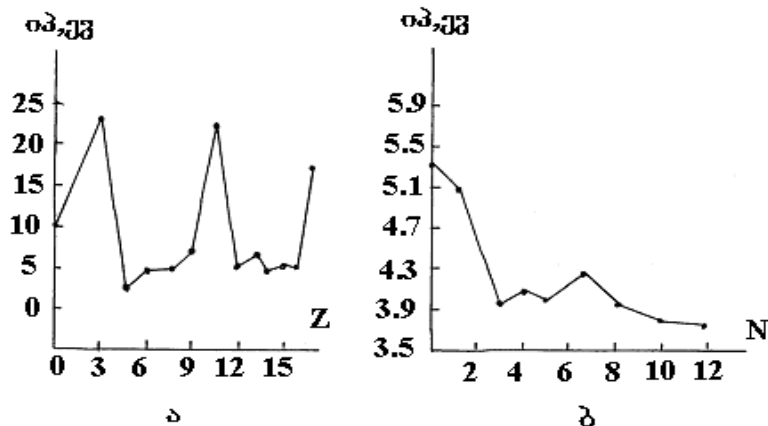
Al<sub>13</sub>-ში ერთ ატომზე მოსული ბმის ენერგია უფრო მცირეა, ვიდრე მოცულობაში. Al<sub>13</sub>-ის კლასტერს ზედაპირზე აქვს ერთი გაუწყვილებელი ელექტრონი. ერთი ელექტრონის დამატება ავსებს გარსს, რაც ზრდის Al<sub>13</sub>(-) იონის ბმის ენერგიას. მაგრამ მაინც ნაკლებია, ვიდრე მოცულობაში.

ნანონანილაკებს განვიხილავთ, როგორც ინდივიდიალურს, იზოლირებულს, მაგრამ ეს ყოველთვის ასე არაა. ზოგიერთი ნანონანილაკი, მაგალითად, ალუმინი, გამოირჩევა დიდი რეაქციული აქტივობით. ინდივიდუალური ალუმინის ნანილაკი ჰაერზე სწრაფად იფარება ჟანგით. რენტგენულმა ფოტოელექტრულმა სპექტროსკოპიამ აჩვენა, რომ 80 ნმ ზომის კლასტერისას, ალუმინის ჟანგის სისქე 3-5 ნმ-ია. ამიტომ, სუფთა ნანონანილაკის მიღებისთანავე მათ ხშირად ფარავენ ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებით (ზან), ანუ აკეთებენ პასივაციას. მაგალითად, ოქროს ნანონანილაკს ფარავენ გოგირდწყალბადის ორგანული ნაერთით და იქმნება S-Au-ის ძლიერი ბმა, რომელიც ხასიათდება მოლეკულური სიმეტრიით და ოქროს იცავს გარე ფაქტორების მოქმედებისაგან.

## 5.2. მაგიური რიცხვი

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

ნახ.5.3ა-ზე მოცემულია ატომების იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება მათ ატიმურ Z ნომერზე, რომელიც ატომში პროტონების რიცხვის ტოლია. როგორც ცნობილია, იონიზაციის პოტენციალი – ესაა ენერგია, რომელიც საჭიროა ნეიტრალური ატომისთვის გარე შრიდან ერთი ელექტრონის მოსაცილებლად. იონიზაციის პოტენციალის მაქსიმალური მნიშვნელობები აქვთ ნეიტრალური გაზის ატომებს – He, Ne, Ar და ა. შ., რადგანაც მათ აქვთ შევსებული გარე s და p ორბიტალები. ყველაზე მცირე აქვთ ტუტემინათა მეტალებს – Na, Ka და ა. შ. მათ აქვთ მხოლოდ ერთი ელექტრონი გარე ორბიტალზე და მის მოსაწყვეტად მცირე ენერგიაა საჭირო. ნახ.5.3 ბ-ზე გამოსახულია ნატრიუმის ატომების კლასტერისთვის იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება მათში არსებული ატომების რიცხვზე. პიკები მიიღება, როცა კლასტერში არის 2 და 8 ატომი. ტყვიისათვის – 7 და 10, ნატრიუმისათვის კი 2 და 8 მაგიური რიცხვებია.

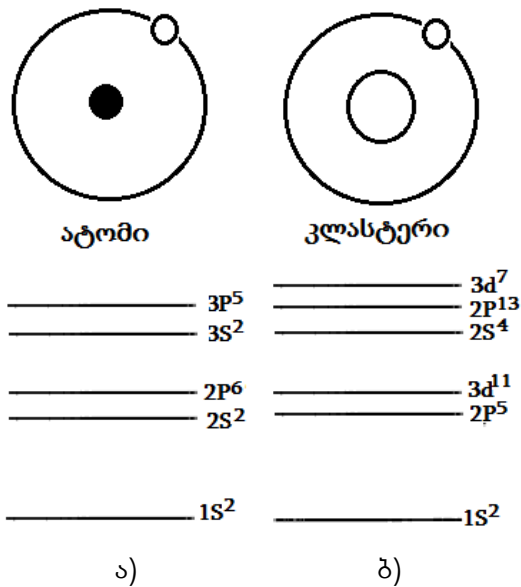


**ნახ.5.3.** იონიზაციის პოტენციალის დამოკიდებულება ატომურ ნომერზე (ა) და Na- ის კლასტერში ატომების რიცხვზე

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

### 5.3. ნანონანილაკის ელექტრული სტრუქტურა

ნანონანილაკის და ნანოსტრუქტურის ელექტრული სტრუქტურის განსაზღვრისთვის საინტერესოა მათი თეორიული მოდელის დადგენა. მიახლოებით შეიძლება ითქვას, რომ ისინი სუპერატომებია და მათთვის მისაღებია „ჟელეს მოდელი“. ამ მოდელით კლასტერის თითოეული ატომის ბირთვის დადებითი მუხტი თანაბრადაა განაწილებული კლასტერის ბირთვის ტოლ სფეროს მოცულობაში. ასეთი სფერული სიმეტრიის პოტენციალური ორმო წარმოადგენს ელექტრონების და ბირთვის ურთიერთმოქმედების პოტენციალს. კლასტერის ენერგეტიკული დონეები შეიძლება მივიღოთ აღნიშნული სისტემისთვის შრეინგერის განტოლების ამოხსნით, ისე, როგორც ეს ხდებოდა წყალბადის ატომისთვის. ნახ.5.4-ზე გამოსახულია ატომის ენერგეტიკული დონეები, მათზე მუხტის განაწილებით და შესაბამისი მუხტის განაწილება ნანოსისტემისთვის. ზედა ინდექსები აღნიშნავენ მოცემული ენერგეტიკული დონეების შევსებისას მათზე ელექტრონების რაოდენობას. სუპერატომში ელექტრონების საერთო რაოდენობას ეთანადება ელექტრონების მაგიური რიცხვი, როცა ზედა ენერგეტიკული დონე მთლიანად შევსებულია. აღსანიშნავია, რომ ჟელეს მოდელისთვის და წყალბადის ატომისთვის დონეთა თანმიმდევრობა ერთმანეთს არ ემთხვევა. ამ მოდელით მაგიური რიცხვი ეთანადება კლასტერს, როცა მისი ყველა დონე შევსებულია ელექტრონებით.



ნახ.5.4. ატომის (ა) და ნანოსისტემის (ბ) ენერგეტიკული დონეები

კლასტერის თვისებების შესწავლის მეორე ალტერნატიული მოდელი მას განიხილავს, როგორც მოლეკულას და მოლეკულარულ ორბიტალების თეორიას იყენებს ფუნქციონალური სიმკვრივის თეორიისთვის. ეს მიდგომა შეიძლება მცირე მეტალური კლასტერის რეალური ელექტრონული სტრუქტურის გამოთვლისთვის. წყალბადის ატომის კვანტურ თეორიაში ბირთვის გარშემო მბრუნავი ელექტრონი განიხილება, როგორც ტალღა. ამ ტალღის მათემატიკური  $\psi$  ფუნქცია შრედინგერის განტოლების ამოხსნა და ითვალისწინებს ელექტრონის მოქმედებას ბირთვის დადებით მუხტთან. ტალღური ფუნქციის ამპლიტუდის კვადრატი არის ელექტრონის ყოფნის ალბათობა ბირთვის მიმართ მოცემულ წერტილში. წყალბადის ატომის ყველაზე დაბალი დონის ტალღური ფუნქცია აღინიშნება  $1s$ -ით და აქვს ასეთი სახე:  $\psi = \exp(-r/\delta)$ , სადაც  $r$  მანძილია ელექტრონისა და ბირთვის შორის, ხოლო  $\delta$  – ბორის პირველი ორბიტის რადიუსი. ამ ფუნქციას პოულობენ შრედინგერის განტოლების ამოხსნით, როცა ელექტრონის და ბირთვის ელექტროსტატიკური პოტენციალია  $e/r$ . წყალბადის ატომის განტოლება ფიზიკაში ერთ-ერთი ზუსტად ამოხსნადია და კარგად ასახავს მოვლენებს. მოლეკულის შემთხვევაში, მაგალითად,  $H_2^+$  იონისათვის მოლეკულური ორბიტალების თეორიით შეიძლება, რომ სისტემის ტალღური ფუნქცია მოიძებნოს, როგორც ორი იზოლირებული ატომის ტალღური ფუნქციების წრფივი კომბინაცია, რომელიც ასე გამოისახება:

$$\psi = a\psi(1)_{1s} + b\psi(2)_{1s}, \quad (5.1)$$

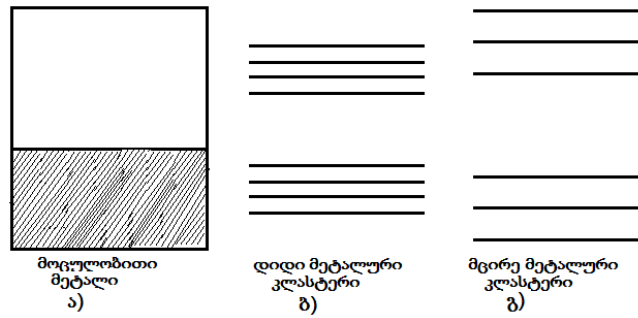
მოლეკულური იონისათვის შრედინგერის განტოლებას აქვს ასეთი სახე:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b} \right] \Psi = E\Psi \quad (5.2)$$

სადაც  $\Delta$  აღნიშნავს ორმაგი დიფერენცირების ოპერაციას, კვადრატულ ფრჩხილებში ბოლო ორი წევრი ორი დადებითი ბირთვის მიერ მისგან  $r_a$  და  $r_b$  მანძილებზე მყოფი ელექტრონების მიზიდვაა. წყალბადის მოლეკულის შემთხვევაში, როცა ორი ელექტრონია, მათ დაემატებათ ელექტრონთა განზიდვის კიდევ ერთი წევრი. როცა მოლეკულა შედგება მრავალი ატომისა და ელექტრონისგან, ამოცანა რთულდება და მის ამოსახსნელად არსებობს სხვადასხვა მიახლოება. ერთ-ერთი ასეთია სიმკვრივის ფუნქციონურობის თეორია. დიდი მოლეკულის ელექტრული სტრუქტურის საკმაოდ ზუსტად განსაზღვრა შესაძლებელი გახდა მოლეკულარული ორბიტალების თეორიით მას შემდეგ, რაც გაიზარდა კომპიუტერებით გამოთვლის შესაძლებლობა. ეს მეთოდი აგრეთვე იძლევა საშუალებას, ერთიანი მოდელით აღინეროს სხვა ატომების ის ჯგუფებიც (ლიგანდები), რომლებიც გარს აკრავს კლასტერის ატომების ძირითად ჩონჩხს. ბოლო პერიოდში ფართოდ გამოიყენება ე.წ. ტოპოლოგიური მიდგომა, რომელიც დამყარებულია მათემატიკის თანამედროვე და აბსტრაქტული დარგის – ტოპოლოგიის გამოყენებაზე. აქ მიღებულია სტოუნის კონცენტრული სფერული ფენების მოდელი, რომელშიც დაშვებაა, რომ კლასტერების შემადგენელი ატომები, განლაგებულნი კლასტერის ცენტრიდან ყოველ მხარეს თანაბარი მანძილით, ქმნიან ერთმანეთზე შემორტყმულ კონცენტრულ სფეროებს.

ატომების მიერ მესერის ფორმირების, რიცხობრივ მატებასთან ერთად, მათი დისკრეტული ენერგეტიკული დონეები იხლიჩებიან და გადადიან ენერგეტიკულ ზონებში. მეტალებში ზედა ენერგეტიკული ზონა ნაწილობრივია შევსებული, ხოლო ნახევარგამტარებში ვალენტური ზონა მთლიანად შევსებულია, გამოყოფილია ცარიელი ზონისაგან ღრეჩოთი. მეტალის ნაწილაკის შემცირებით რამდენიმე ასეულ ატომამდე, გამტარებლობის ზონაში მდგომარეობათა სიმკვრივე რადიკალურად იცვლება – უწყვეტობა იცვლება წყვეტილ დონეთა ნაკრებით, რომელთა შორის ენერგია შეიძლება სითბურ ენერგიაზე მეტი იყოს, რაც ქმნის ღრეჩოს. ელექტრული სტრუქტურის ცვლილება მოცულობითი (ა), დიდი (ბ) და მცირე კლასტერის (გ) შემთხვევაში მოცემულია ნახ.5.5-ზე.

მოლეკულის მსგავს მცირე კლასტერს აქვს ენერგეტიკული დონეების დისკრეტული ნაკრები დამაკავშირებელი და ანტიდამაკავშირებელი ორბიტალებით. შესაძლებელია კლასტერის ზომის ისეთ კრიტიკულ ზომამდე შემცირება, რომ უახლოეს ნაწილაკთა შორის მანძილი ელექტრონის ტალღის სიგრძის ტოლი იყოს. ასეთ შემთხვევაში ენერგეტიკული დონეები შეიძლება განვიხილოთ, როგორც პოტენციალურ ორმოში მყოფი ნაწილაკის დონეები. ამას ეწოდება კვანტური ზომითი ეფექტი. ახალი ელექტრონული თვისებების ახსნა შეიძლება ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპიდანაც. შეიძლება გასაგები გავხადოთ, რომ რაც უფრო კარგადაა ლოკალიზებული ელექტრონი სივრცეში, მას აქვს მით ფართო დიაპაზონის იმპულსი. ნახევარგამტარში კვანტური ზომითი ეფექტები ვლინდება უფრო დიდი ზომის კრისტალებში, ვიდრე მეტალებში, რადგანაც ნახევარგამტარებში ელექტრონის ტალღის სიგრძე მიკრონის რიგისაა, როცა მეტალში – 0,5 ნმ-ის ზომისაა.



**ნახ.5.5.** ელექტრული სტრუქტურა მოცულობითი (ა), დიდი (ბ) და მცირე კლასტერების (გ) შემთხვევაში

ექსპერიმენტზე დადგინდა, რომ კლასტერში ნანონანილაკთა მცირე რაოდენობა იწვევს იმას, რომ ენერგეტიკული სპექტრი დისკრეტულია, მასზე ელექტრონით შევსების ალბათობაც დისკრეტულია, რაც ძალზე განსხვავდება მოცულობითი სხეულისთვის ფერმის განაწილების უწყვეტი ფუნქციისგან. ნანონანილაკთა რაოდენობის ზრდასთან ერთად, მცირდება დონეთა შორის ენერგეტიკული მანძილი, ანუ ღრეჩო თანდათან ქრება. მაგალითად,  $Ag_{55}$ -ს კლასტერს აქვს აკრძალული ზონის სიგანე 0,2 ევ,  $Ag_{79}$ -ს – 0,1 ევ.

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

ნანონანილაკების ელექტრული სტრუქტურის შესწავლის ერთ-ერთი მეთოდია ულტრაიისფერი (უი) სპექტროსკოპია, რომელიც მდგომარეობს იმაში, რომ უი ფოტონი ატომის შიგა დონედან აგდებს ელექტრონს და შემდეგ იზომება ასეთი ელექტრონების რაოდენობა და ენერგია. ამ გაზომვის შედეგად განისაზღვრება ამოგდებული მოცემული ენერგიის ელექტრონების რაოდენობის დამოკიდებულება დაცემული ფოტონის ენერგიისაგან. რადგანაც კლასტერს აქვს დონეთა დისკრეტული სპექტრი, ამიტომ ამ დამოკიდებულებას ექნება პიკების სახე, რაც დაიმზირება ექსპერიმენტზე.

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

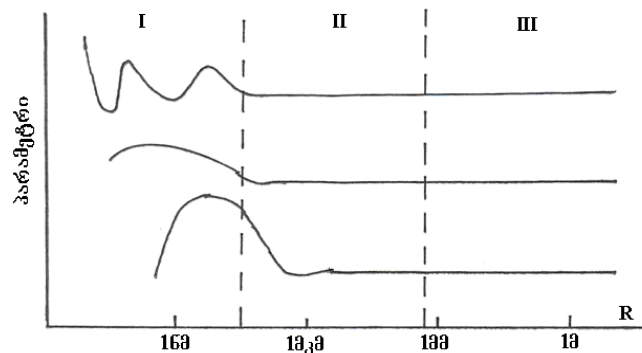
აღსანიშნავია, აგრეთვე, რომ, რადგანაც ნანონანილაკის ელექტრონული სტრუქტურა დამოკიდებულია მის ზომაზე, სხვა მასალასთან რეაქციის თვისება და-

მოკიდებული იქნება მის ზომაზე, ანუ კლასტერში ატომების რიცხვზე. არსებობს მრავალი ექსპერიმენტული მონაცემი ამ ფაქტის დასამტკიცებლად. ამ მოვლენას დიდი მნიშვნელობა აქვს კატალიზატორების წარმოებაში.

#### 5.4. მეტალური ნანონანილაკები

მასალების თვისებების  $R$  ზომაზე დამოკიდებულება შეიძლება გაიყოს ორ ნაწილად: 1) მცირემგრძნობიარე ნიმუშის ზომის მიმართ – „მაკროსკოპული“ და 2) მაღალმგრძნობიარე მასალების მიმართ, რომლებშიც თვისებების ცვლილება შეიძლება იყოს ძალიან დიდი და ჰქონდეს ოსცილაციის ხასიათიც კი, ჰქონდეს ექსტრემუმი ან გადიოდეს ნაჯერობის ისეთ დონეზე, რომელიც მკვეთრად განსხვავდება მაკროსკოპული მდგომარეობისგან. ეს შემთხვევები მოცემულია ნახ.5.6-ზე. მათ შორის მდებარეობს შუალედური უბანი, რომლის ზომაა  $R \leq 0$ , სადაც მათი ელექტრო-ფიზიკური თვისებები მაკრომასალებისგან მკვეთრად იცვლება, მაშინაც კი, როცა მათში ერთი და იმავე ატომების შემცველობის რაოდენობა სხვადასხვაა. ამის მნიშვნელოვანი მიზეზებია: შემადგენელ ატომთა რიცხვი სასრულია; ზედაპირული ატომების როლი მოცულობასთან შედარებით დიდია, რაც გამორიცხავს მოცულობის თვისებებს; ზედაპირზე დიფუზიის, ატომური გადაწყობის და ატომების თვითორგანიზაციის დიდი როლი; ახალი ფაზის, ფაზური გადასვლის, დისლოკაციის შექმნის დიდი შესაძლებლობები. ყოველივე ეს ნათლად ვლინდება მეტალურ სტრუქტურებში, სადაც ელექტრულ, კაპილარულ, მაგნიტურ, ზეგამტარულ თვისებებს აქვს განსაკუთრებული ხასიათი.

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



**ნახ.5.6.** ნანოუბანში მასალის თვისებების გამოვლენის სამი (1;2;3) ვარიანტი: I- ნანოსტრუქტურა; II – მიკროსტრუქტურა და III – მაკროსტრუქტურა



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

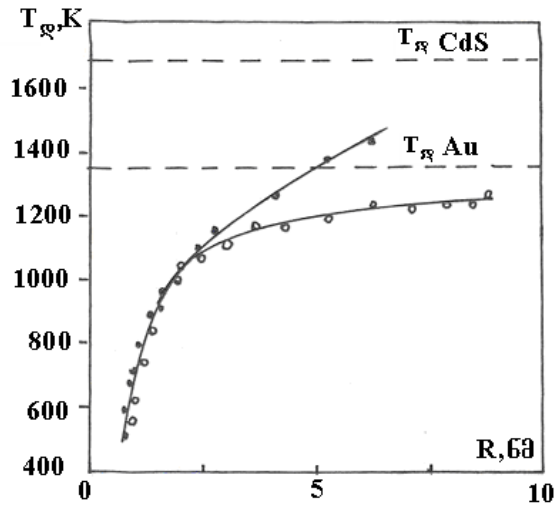
ზომითი ეფექტები ვლინდება არა მარტო ცალკეულ ნაწილაკებს შორის, არამედ ნაწილაკთაშორისაც. ნაწილაკთაშორის შესაძლებელია აღიძრას დამუხტვის ეფექტი, გამონვეული ერთი ნაწილაკიდან მეორეზე ელექტრონების გადასვლით. ასეთი გადასვლის შემდეგ ამ ორ ნაწილაკს შორის აღიძვრება ელექტროსტატიკური ძალები. ისინი არსებითია და არაა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

$$F_w = \frac{q_w^2(r)}{r^2}, \quad q_w^2(r) \approx 10\hbar c \left(\frac{R}{r}\right)^6 \quad (5.3)$$

ნაწილაკიდან ნაწილაკზე ელექტრონების გადასვლის მინიმალური რიცხვისას (ორივე ნაწილაკის მუხტი იცვლება ერთი ელექტრონის მუხტით) და როცა დიელექტრიკული მუდმივა  $\epsilon = 1$ , (5.3) ფორმულით განსაზღვრული  $F_w$  ძალა მცირეა კულონურ ძალაზე მანამ, სანამ  $r < R^3$ -ზე. მრავალი ელექტრონის გადასვლა ერთიდან მეორე ნაწილაკზე გამოიწვევს ნაწილაკის დეფორმაციას და განისაზღვრება ზედაპირული დაძაბულობით და არა დაჭიმულობით. ეს ეფექტი შესამჩნევი იქნება დუღილის ტემპერატურასთან ახლო ტემპერატურაზე, როცა ნაწილაკი თავის ორთქლთან დინამიკურ წონასწორობაშია.

ზომითი შეზღუდვები იწვევს ფაზური და სტრუქტურული გარდაქმნების, სითბოს, მუხტის გადაცემის, სინათლის არეკვლის და შთანთქმის პირობების შეცვლას. ამის გამო იცვლება მასალის ყველა ფუნდამენტური მახასიათებელი: მესრის მუდმივა, ელექტრული და ფონონური სპექტრები, ელექტრონების გამოსვლის მუშაობა, დნობის ტემპერატურა და ა. შ.

გამოსვლის მუშაობის ნაწილაკის ზომაზე დამოკიდებულება პირველად დაიმზიორა ოქროს მარცვლებზე. ნაწილაკთა რადიუსის შემცირებისას 0,3 ნმ-მდე Au – გამოსვლის მუშაობა შემცირდა 4-დან 2 ევ-მდე. ვერცხლზე პირიქით – გაიზარდა. ყველა მასალის ნაწილაკებისთვის იქნა ექსპერიმენტულად მიღებული ზომის შემცირებასთან ერთად დნობის ტემპერატურის შემცირება. ნახ.5.7-ზე მოყვანილია Au და CdS-სთვის ასეთი დამოკიდებულება.



ნახ.5.7. Au და CdS დნობის ტემპერატურის მათ ნანონანილაკის ზომაზე დამოკიდებულება

ეს შედეგები დამტკიცდა მრავალჯერადი ექსპერიმენტით სხვა მეტალებზეც. ნანონანილაკების დნობის ფიზიკური სურათი ასე წარმოდგინდება: განსაზღვრული რიცხვის ატომებიანი კლასტერი დნობის პროცესში იმყოფება მყარი და თხევადი ფაზების დინამიკურ წონასწორობაში; დინამიკური წონასწორობისას ყოველი ინდივიდუალური კლასტერი იცვლის ფორმას, მაგრამ ფაზათაშორის გადასვლის სიხშირე მცირეა და ყოველ ფაზაში ნანილაკი ასწრებს წონასწორობაში მოსვლას; რაც მცირეა ნანილაკთა რიცხვი, მით მცირე დრო და ტემპერატურაა საჭირო დინამიკურ წონასწორობაში მოსვლისათვის.

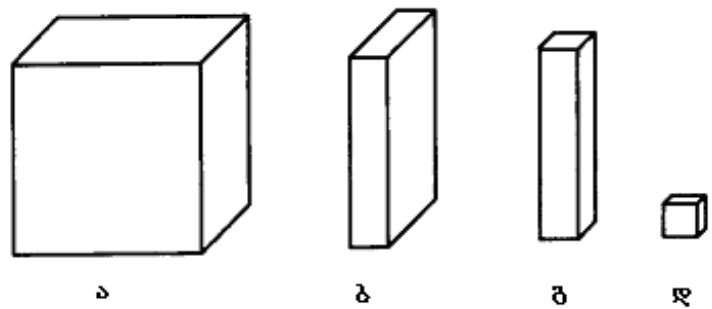
### საკონტროლო კითხვები:

1. როგორი თანაფარდობაა ნანონანილაკებში შიგა და გარე ზედაპირებს შორის?
2. რა არის ხვედრითი ზედაპირი და რა – მისი განზომილება?
3. რაში მდგომარეობს სუპერპარამაგნეტიზმის ეფექტი?
4. რა არის მაგიური რიცხვი?
5. როგორია ნანოსისტემების გეომეტრიული და ელექტრული სტრუქტურა?
6. რას წარმოადგენს კაზიმირის ძალები ნანოსისტემებში?
7. როგორაა დამოკიდებული Au და CdS დნობის ტემპერატურა მათ ნანონანილაკის ზომაზე?

## 6. ზომითი კვანტური შეზღუდვები: კვანტური ორმოს, მილაკის და წერტილის ცნებების არსი

სამგანზომილებიან სივრცეში ელექტრონულ სისტემას აქვს მაკროსკოპული ზომები, გამტარებლობის ელექტრონები არიან დელოკალიზირებულნი და თავისუფლად მოძრაობენ მთელ არეში. მაგალითისთვის, სპილენძის გამტარის ყველა ზომა მეტია, ვიდრე ატომთაშორის მანძილები. თუ სპილენძის გამტარის ერთ ან ორ ზომას შევამცირებთ ატომთაშორისი მანძილის რიგამდე, მდგომარეობა კარდინალურად შეიცვლება: დელოკალიზაცია იქნება შეუძლებელი და ელექტრონები გახდებიან ლოკალიზებულნი. განვიხილოთ, მაგალითად, სპილენძის ფირფიტა სიგრძით 10 სმ, სიგანით 10 სმ და სისქით 5 სმ. აქ ელექტრონები ყველგან თავისუფლად მოძრაობენ, ყველგან არიან დელოკალიზებულნი. თუ სისქეს შევამცირებთ 3,6 ნმ-მდე, რომელიც ეთანადება 10 ელემენტურ უჯრედს, ამ უჯრედის 20% ატომებისა ზედაპირზეა. გამტარებლობის ელექტრონები იქნებიან დელოკალიზებული ფირფიტის სიბრტყეში, მაგრამ იქნებიან ლოკალიზებული მცირე ზომით – სისქის მიმართულებით. ასეთ ობიექტს ეწოდება **კვანტური ორმო**. თუ სისქესთან ერთად სიგანესაც შევამცირებთ ნმ-ული მასშტაბით, მაშინ ლოკალიზაცია იქნება ორი მხრით და დელოკალიზაცია – ერთი, სიგრძისგანსწრის მხრით. ელექტრონები თავისუფლად მოძრაობენ მხოლოდ სიგრძივად და განივკვეთში არიან შეზღუდულნი. ასეთს ეწოდება **კვანტური მილაკი**. დაბოლოს, თუ სიგრძესაც შევამცირებთ ნმ-ულ ზომამდე – მიიღება **კვანტური წერტილი**. მასში ელექტრონები ლოკალურია სამივე მიმართულებით. ეს ჩანს ნახ.6.1-დან და ცხრილიდან.

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



**ნახ.6.1.** სხეული სხვადასხვა განზომილებებით: ა- მოცულობითი ობიექტი; ბ - კვანტური ორმო; გ - კვანტური მილაკი და დ - კვანტური წერტილი

ცხრილი

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

ნანომოვლენების რაოდენობითი დახასიათებისთვის ხშირად საჭიროა, მიკროერთეულებიდან (მიკრომეტრი, მიკროამპერი, მიკრონამი) გადავიდეთ ნანოერთეულებზე (ნანომეტრი, ნანოამპერი, ნანონამი). ფიზიკური სიდიდეების ერთეულთა სისტემა დგინდება ბუნებაში მიმდინარე ფიზიკური პროცესების ურთიერთმოქმედებით. ადრეული ეტალონების ცთომილება ახალი ნანოზომებისთვის უკვე მნიშვნელოვანი სიდიდეებია და ასეთი ეტალონებით სარგებლობა შეუძლებელია. ამიტომ უნდა შემოვიღოთ ფიზიკური სიდიდეების ახალი ეტალონები ადრე განსაზღვრულ ეტალონებზე დაყრდნობით. ძირითად ერთეულებად მიღებულია ისეთი სიდიდეები, რომლებსაც აქვთ შესაბამისი ეტალონები, განსაზღვრული დიდი სიზუსტით, და შეესაბამებიან მოცემულ ეპოქაში მეცნიერების და ტექნიკის განვითარებას. ეტალონი – ესაა გაზომვის საშუალება, რომლიც ინახავს ფიზიკური სიდიდის გაზომვის ამ ერთეულს და მისგან აწარმოებს გაზომვის სხვა, მასზე ნაკლებ ან მეტ ერთეულს. ეტალონის და, შესაბამისად, სიდიდის ერთეულის გარეშე არ შეიძლება სხვადასხვა დროს და სხვადასვა ხელსაწყოებით გაზომილი სიდიდეების შეთავსება ერთმანეთთან. ეტალონთა ერთობლიობა ქმნის ეტალონის ბაზას, რომელშიც შედის საერთაშორისო სისტემის ძირითადი ერთეულები (SI-სისტემა).

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

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

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

SI-სისტემის ეს ეტალონები გამოიყენება ნანოსტრუქტურებში, ხოლო სხვა სიდიდეების გამოყენება შესაძლებელია ტექნოლოგიური აპარატურის ნორმალური მუშაობისთვის.

კარგი გამტარების ბევრი თვისება აიხსნება მოდელით, რომლის თანახმად, სავალენტო ელექტრონები სცილდებიან თავის ატომებს, ხდებიან დელოკალიზებულნი გამტარებლობაში, შესწევთ უნარი, თავისუფლად იმოძრაონ დადებით იონებს შო-

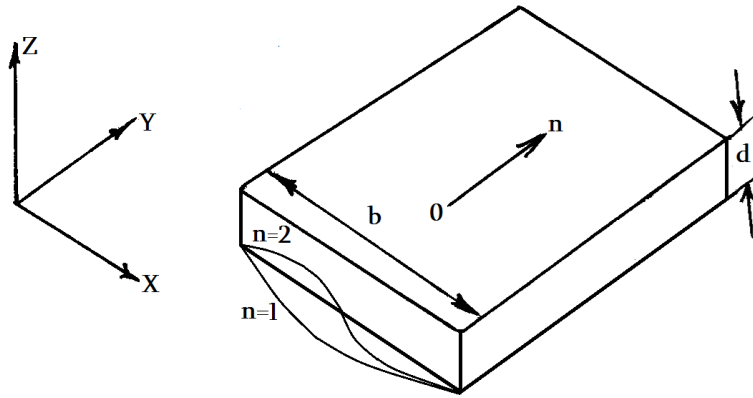
რის. დაჯახებიდან დაჯახებამდე ისინი გადიან თავისუფალი განარბენის  $L$  მანძილს. ასეთი ელექტრონები ისე იქცევიან, როგორც გაზი და მათ ეწოდებათ ფერმი-გაზი. მათი კინეტიკური ენერგია  $E=mv^2/2=p^2/2m$ , სადაც  $m$  – მასაა,  $v$  – სიჩქარე და  $p=mv$  – იმპულსი. კარგად იხსნება ომის კანონიც –  $V=IR$ .

### 6.1. ელექტრონის მოძრაობის თავისებურებანი კვანტური შეზღუდვებისას

კვანტურ-მექანიკური განხილვისას, თავისუფალი ელექტრონისთვის დე ბროილის ტალღაც ისევე იქცევა, როგორც ელექტრონი, მხოლოდ იმ გაგებით, რომ მისი შესაბამისი ტალღური ფუნქცია უნდა ვეძებოთ ასეთი სახით:  $\psi \sim \exp(ikr)$  და ამ ფუნქციებმა უნდა დააკმაყოფილონ პირობები: 1) უნდა იყვნენ ნორმირებულნი, ანუ ინტეგრალი განხილულ უბანში ყოფნის ალბათობის სიმკვრივიდან უნდა იყოს ერთის ტოლი  $\int \psi^* \psi dr = 1$ . ეს შესაძლებელია, თუ  $\psi = 1/V^{1/2} \exp(ikr)$ , სადაც  $V$  იმ არის მოცულობა, სადაც მოძრაობს ელექტრონი; 2) ტალღური ფუნქცია უნდა აკმაყოფილებდეს სასაზღვრო პირობას – სხეულის ზედაპირზე უნდა იყოს ნულის ტოლი. მაგალითად, მისი მოძრაობისას სწორ  $L$  მონაკვეთზე  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ , რასაც აღწერს ფუნქცია  $\psi_n = (2/L)^{1/2} \sin \pi n x / L$ , ხოლო საკუთარი ენერგია  $E_n = h^2 / 2m (\pi / L)^2 n^2$ , სადაც  $n = 1, 2, 3 \dots$  დასაშვები ენერგიის დონეები იკვანტება.

მცირე გარე ელექტრული ველებისას ელექტრონის დრეიფული სიჩქარე განისაზღვრება მისი  $\mu$  ძვრადობით, რომელიცაა ერთეულოვან ველში ელექტრონის სიჩქარე და განისაზღვრება თავისუფალი განარბენის საშუალო დროით. ცხადია, მათი ძვრადობა სამგანზომილიან სხეულში უფრო ნაკლებია, ვიდრე ორგანზომილებიანში და კიდევ ნაკლები, ვიდრე ერთგანზომილებიანში.

განვიხილოთ ელექტრონის მოძრაობა, რომელიც შეზღუდულია  $L$  მონაკვეთზე და სამართლიანია პირობა  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ , მაშინ ტალღური განტოლება ამოიხსნება ერთგანზომილებიანი ინტერპრეტაციით:  $\psi_n = (2/L)^{1/2} \sin \pi n x / L$  და ენერგიის მნიშვნელობას ექნება სახე:  $E_n = h^2 / 2m (\pi / L)^2 n^2$ , სადაც  $n = 1, 2, 3 \dots$  ცხადია, დასაშვები დონეები იკვანტება და სხვა დონეები არ არსებობს, რადგან მათთვის ტალღური ფუნქცია ვერ აკმაყოფილებს სასაზღვრო პირობებს. ნახ.6.2-ზე მოცემულია თავისუფალი ელექტრონის ტალღური ფუნქციის პირველი ორი მნიშვნელობა. ტალღური ვექტორის დასაშვები მნიშვნელობა მოიცემა თანაფარდობით:  $k = 2\pi / \lambda = \pi n / L$ .

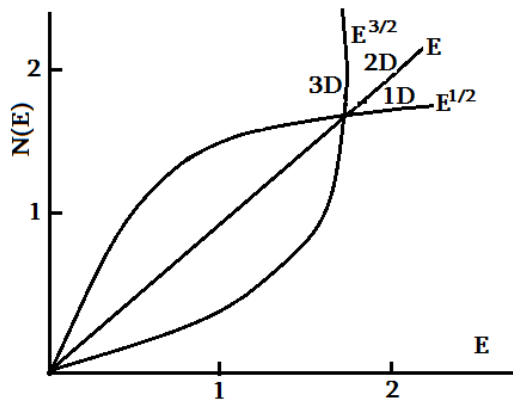


ნახ.6.2. თავისუფალი ელექტრონის ტალღური ფუნქცია

კვანტურ შემოსაზღვრულ სტრუქტურაში ელექტრონის ენერგიის მნიშვნელობის ფიქსაციის მოვლენას ეწოდება კვანტური შეზღუდვები. განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად,  $\Delta p_y \Delta y \geq \hbar$  ელექტრონი  $m^*$  ეფექტური მასით იკეტება  $y$  მიმართულებით, რაც ზრდის იმპულსს  $\hbar/L$  სიდიდით. შესაბამისად, იზრდება მისი კინეტიკური ენერგია სიდიდით:  $\Delta E = \hbar^2 k^2 / 2m = (\hbar^2 / 2m) (\pi^2 / L^2)$ .

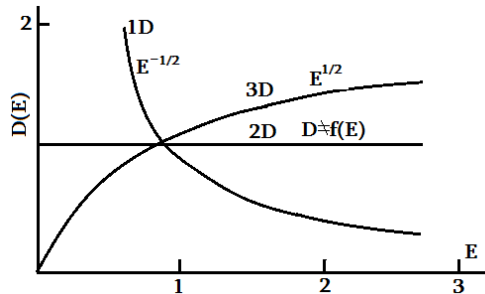
სხვა სიტყვებით, კვანტურ შეზღუდვებს თან ახლავს ენერგიის ცვლილება, დისკრეტული ენერგეტიკული სპექტრის ფორმირება  $E_n = (\hbar^2 \pi^2 / 2mL^2) n^2$  და  $k = 2\pi/\lambda$ . ნანომეტრული სტრუქტურის კვანტური შეზღუდვის პარალელურ სისტემას ეწოდება **ზემესერი**. სხვა სიტყვებით, ზემესერი არის მყარსხეულოვანი პერიოდული სტრუქტურა, რომელშიც ელექტრონზე მოქმედებს კრისტალური მესრის პოტენციალი და ერთგანზომილებიანი  $V(x)$  პოტენციალი, რომლის  $d$  პერიოდი ელექტრონის თავისუფალ განარბენზე მცირეა და კრისტალური მესრის  $a$  პერიოდზე მეტი.

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, თავისუფალი ელექტრონები იქცევიან, როგორც ფერმი-გაზი. აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე ისინი იკავებენ მესრის ყველა კვანძს  $k=0$  –დან  $k_F$ -მდე, რასაც ეთანადება ფერმის ენერგია  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ . თუ ნიმუშს აქვს კუბის ფორმა  $L$  წიბოს სიგრძით, მაშინ ჩვეულებრივ კოორდინატებში მისი მოცულობაა  $V = L^3$ .  $k$  სივრცეში ორ მეზობელ ელექტრონს შორის მანძილია  $2\pi/L$  და აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე  $4\pi k_F^3 / 3$  მოცულობის სფეროში გამტარებლობის ელექტრონები განაწილებულია თანაბრად ფერმი-დირაკის განაწილების თანახმად. ტემპერატურის გაზრდით ვიღებთ გადახრას წონასწორული სიმკვრივიდან ფერმის ენერგიის სიახლოვეში „კუდების“ გაჩენით. მოცემული ენერგიით გამტარებლობის ელექტრონების რაოდენობა დამოკიდებულია თვით ამ ენერგიაზე და სივრცის განზომილებაზე. ეს ხდება იმიტომ, რომ ერთ განზომილებაში მყოფი ელექტრონისთვის არეა  $2k_F$ , ორ განზომილებაში არის წრე ფართობით  $\pi k_F^2$  და სამ განზომილებაში – სფერო  $4\pi k_F^3 / 3$  მოცულობით. თუ ამ მოცულობებს გავყოფთ  $k$  სივრცის შესაბამის ელემენტარულ მოცულობებზე, გამოვრიცხავთ  $k_F$ -ს, მაშინ მივიღებთ ელექტრონების  $N$  რაოდენობის დამოკიდებულებას  $E$  ენერგიასაგან, რომელიც გამოსახულია ნახ.6.3-ზე.



**ნახ.6.3.** ელექტრონების რაოდენობის ენერგეტიკული დამოკიდებულება

ამ  $N(E)$  მრუდების დახრის კუთხე იძლევა მდგომარეობათა  $D(E)$  სიმკვრივეს და მოცემულია ნახ.6.4-ზე. უფრო ზუსტად,  $D(E)=dN/dE$ -ს. ამ ნახაზიდან ჩანს, რომ ერთგანზომილებიანი ობიექტისათვის მდგომარეობათა სიმკვრივე ენერჯიის ზრდით მცირდება, ორგანზომილებიანისთვის მუდმივია, ხოლო სამგანზომილებიანისათვის – იზრდება. ეს განსხვავებები მნიშვნელოვანია მეტალების და ნახევარგამტარების ბევრი თვისების ასახსნელად.



**ნახ.6.4.** მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგეტიკული დამოკიდებულება

მყარი სხეულის სითბოტევადობა  $C$  – სითბოს ის რაოდენობაა, რომელიც საჭიროა სითბოს გადაცემისას სხეულის 1 გრადუსით გასათბობად. სითბოტევადობაში ძირითადი ენერჯია იხარჯება მესრის რხევის აღგზნებაზე, რომელიც დამოკიდებულია ფონონის მდგომარეობათა სიმკვრივეზე. მეტალებში დაბალ ტემპერატურაზე ელექტრონების სითბოტევადობას ( $C_e$ ) შეაქვს

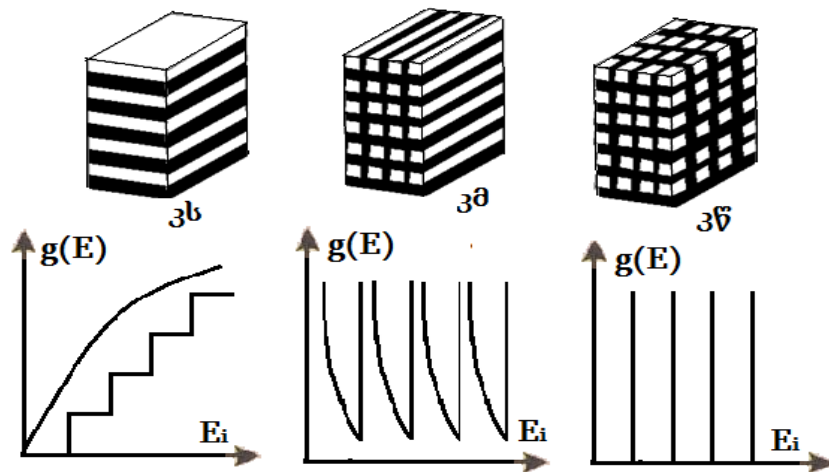
მნიშვნელოვანი წვლილი, რომელიც დამოკიდებულია ფერმის ზედაპირის მდგომარეობათა სიმკვრივეზე:  $C_e = \pi^2 D(E_F) k^2 T / 3$ , სადაც  $k$  – ბოლცმანის მუდმივაა.

მეტალის, მაგალითად, ალუმინის, ჩქარი ელექტრონებით გასხივებისას იმ ენერჯიით, რომელიც საჭიროა ატომის შიგა დონეებიდან ელექტრონის ამოგდებაზე, იქ ჩნდება ხვრელი. შესაძლებელია გამტარებლობის ზონიდან ელექტრონმა მასზე მო-

ახდინოს რეკომბინაცია და გამოსხივოს კვანტი. გამოსხივების ინტენსივობა დამოკიდებულია გამტარებლობაში ელექტრონების მდგომარეობათა სიმკვრივეზე. ასე რომ, გამოსხივების სპექტრი ასახავს მდგომარეობის სიმკვრივის ენერგეტიკულ დამოკიდებულებას.

ნახ.6.5-ზე გამოსახულია ზემესრის, კვანტური მილაკის და კვანტური ნერტილის მდგომარეობათა სიმკვრივების ენერგეტიკული დამოკიდებულება:

კვანტური ნერტილის არსში არ უნდა ვიგულისხმოთ გეომეტრიული შინაარსი, რადგან კვანტური ნერტილი არის ობიექტი, რომელსაც არ აქვს მაკროსკოპული განზომილება სამივე მიმართულებით. იგულისხმება ატომური ზომების რამდენიმე ათეული, რომლებიც მოთავსებულია, როგორც ჩანერგვები ძირითად მატრიცაში. ეპიტაქსიური ზრდის პროცესში, როცა მესრის მუდმივებს შორის არაა დიდი განსხვავება, მიიღება არადაძაბული რამდენიმე ატომური შრე. კვანტური ნერტილის მიღებისთვის იღებენ ~ 0,1 % მესრის მუდმივის განსხვავებას, მაგალითად, GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As სტრუქტურას. GaAs უფრო მეტი ენერგეტიკული აკრძალული ზონით ფენას ეფინება Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As უფრო ვიწრო ენერგეტიკული შრე და ეს ხდება მონაცვლეობით რამდენიმე ზედღების სახით.



ნახ.6.5. სხვადასხვა განზომილების სხეულის მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგეტიკული დამოკიდებულება

ენერჯის (იმპულსის) დისკრეტულობა განპირობებულია იმით, რომ ელექტრონის ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს ნული კვანტური ნაწილაკის ზედაპირზე. ეს შესაძლებელია, როცა კვანტური ნაწილაკის მოპირდაპირე ზედაპირზე თავსდება მთელი რიცხვები  $n=1, 2, 3, \dots$  – დე ბროილის ნახევარტალღები  $\lambda/2 = \pi\hbar/p$ . აქედან გამოდის ნებისმიერ ღერძზე იმპულსის დაკვანტვის კანონი:  $P_i = \pi\hbar n/d_i$  და ენერჯის დაკვანტვის კანონი:  $E_{ni} = \pi^2\hbar^2 n^2/2m_i^* d_i$ , სადაც  $m_i^*$  ელექტრონის ეფექტური მასაა, ხოლო  $d_i$  – ნანონაწილაკის ზომა, შესაბამისად,  $i$  ღერძის მიმართულებით.

დღესდღეობით გადაუწყვეტელი საკითხია კვანტურ სტრუქტურაში კვანტური ნერტილის ზუსტად ერთნაირი ზომების მიღება. მაგრამ ინფრანითელი ფოტომიმღებების და ლაზერების შექმნას ეს ხელს არ უშლის. არსებობს აგრეთვე სამელექტრო-



დიანი ხელსაწყობები, რომელშიც ერთი ელექტროდი ჩამკეცია და ორი მათგანი – გამომდენი და ჩამდენი. შესაძლებელია გამომდენ-ჩამდენი არხის ნახტომისებური ცვლილება და კვანტურ წერტილზე ერთი ელექტრონის გასვლა და, შესაბამისად, ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მიღება.

როგორც აღვნიშნეთ, დელოკალიზებულ ელექტრონს გამტარებლობის ზონაში ეწოდება თავისუფალი. ობიექტის ზომების შემცირებით ნანომასშტაბამდე ის ხდება ლოკალიზებული, ანუ მისი მოძრაობა შეზღუდულია. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, ელექტრონი ხვდება პოტენციალურ ორმოში, შეზღუდული არით და უარყოფითი ენერგიით, ესაა მართკუთხა ჭა დიდი კედლებით. ეს ჭა შეიძლება იყოს ერთ-, ორ-, სამ- და მეტგანზომილებიანი. თუ ერთგანზომილებიანია,  $L$  სიფართით, მაშინ ენერგიის დონეები აღინერება ფორმულით:  $E_n = [\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2]$ . უსასრულოდ ღრმა ორმოს აქვს უსასრულოდ ბევრი დონე, რომელთა შორის მანძილები იზრდება  $n$ -ის გაზრდით. თუ ორმოს სიღრმე სასრულია, მაშინ  $E_n$  დონე ზის  $E_{n+1}$  დონეზე დაბლა და სასრულია. ამიტომ მივიღებთ ერთ დონეს მაინც, რომელზეც იქნება ერთდროულად რაღაც რაოდენობის ელექტრონები. ეს რაოდენობა დამოკიდებულია ამ დონისათვის კვანტური რიცხვების კომბინაციაზე. ცხადია, რომ ერთგანზომილებიანი მართკუთხა ორმოს ყოველ დონეს ეთანადება მხოლოდ ერთი  $n$  კვანტური რიცხვი. ელექტრონს აქვს აგრეთვე სპინური მაგნიტური კვანტური რიცხვი  $m_s$ , რომელიც იღებს  $-1/2$  და  $+1/2$  – დან ერთ-ერთ მნიშვნელობას. ერთგანზომილებიანი მართკუთხა ორმოსვის ორივე სპინურ მდგომარეობას აქვს ერთი და იგივე ენერგია. პაულის აკრძალვის პრინციპით, ორი ელექტრონი არ შეიძლება იყოს მდგომარეობაში ერთნაირი კვანტური რიცხვებით, ასე რომ, ყოველ  $E_n$  დონეზე ერთგანზომილებიან მართკუთხა ორმოში არ შეიძლება იყოს ორზე მეტი ელექტრონი სანინაალმდეგო სპინებით. ამიტომ გადაგვარებაა ორჯერადი.

### საკონტროლო კითხვები:

1. ნანონაწილაკებში რა თანაფარდობაა შინაგან და გარე ზედაპირებს შორის?
2. რა არის ხვედრითი ზედაპირი და რაა მისი განზომილება?
3. როგორ მიიღება ახალი ფაზა?
4. რაში მდგომარეობს სუპერპარამაგნეტიზმის ეფექტი?
5. რა არის მაგიური რიცხვი?
6. როგორია ნანოსისტემების გეომეტრიული და ელექტრული სტრუქტურა?
7. რას წარმოადგენს კაზიმირის ძალები ნანოსისტემებში?
8. როგორია დამოკიდებული  $Au$  და  $CdS$  დნობის ტემპერატურა მათ
9. ნანონაწილაკის ზომაზე?
10. როგორია კვანტური ფირფიტის, მავთულის და წერტილის ცნება?
11. როგორია კვანტური ფირფიტის, მავთულის და წერტილის დელოკალიზაციის ხარისხი?
12. როგორია ნანოსისტემებში სიგრძის და დროის განზომილობათა ეტალონები?

## II. ნანოელექტრონიკის ფიზიკური საფუძვლები

### 7. ნანოელექტრონიკის საფუძვლების ფუნდამენტური მოვლენები

ნანოელექტრონიკის მიზანია არა მარტო ნანომასშტაბამდე ელემენტების გეომეტრიული ზომების შემცირება, არამედ მიღებული ნანომასალებისთვის გამოვლენილი სრულიად ახალი, უნიკალური თვისებების ახსნა, რომელიც კლასიკური ფიზიკის ფარგლებში შეუძლებელია და საჭიროებს კვანტური ფიზიკის ჩართვას. ახალი პროცესების კვლევისა და ახსნისთვის საჭიროა ახალი იდეები, ახალი მიდგომები, ახალი გამზომი აპარატურა და ტექნოლოგიური მონყობილობები, რომლებიც დაკავშირებულია სხვადასხვა სახის კვანტურ მექანიკურ მოვლენებთან.

ნანოზომის სტრუქტურაში დენის მატარებელთა მოძრაობა ძირითადად განისაზღვრება შემდეგი კვანტურ-მექანიკური მოვლენებით: 1) კვანტური შემოსაზღვრულობით და 2) ბალისტიკური ტრანსპორტით და კვანტური ინტერფერენციით; 3) განუზღვრელობის პრინციპით; 4) გვირაბგასვლით.

კვანტური შემოსაზღვრულობა აღიძვრება, როცა თავისუფალი ელექტრონის მოძრაობა შემოფარგლულია პოტენციალური ჯებირის ერთი მიმართულებით მაინც. პოტენციალური ჯებირის გასწვრივ დენის მატარებლის მოძრაობისას უპირატესად ითვლება მისი მოძრაობა დაჯახების გარეშე, ანუ ბალისტიკური მოძრაობა და კვანტური ინტერფერენცია. დენის მატარებლების გასვლა ჯებირის გავლით ხორციელდება უშუალოდ გვირაბგასვლით, რომლის დროსაც მუხტის მატარებლები ნანოხელსაწყოს ერთი მხრიდან აღმოჩნდებიან მეორე მხარეს, რასაც თან ახლავს ინფორმაციის გადატანა. განვიხილოთ ზემოთ ჩამოთვლილი მოვლენების ფიზიკური ბუნება და ძირითადი კანონზომიერებები.

#### 7.1. კვანტური შეზღუდვები

*მოცულობით (3D) კრისტალში* მოძრავ თავისუფალი ელექტრონისთვის მოძრაობა შეუზღუდავია, ეფექტური მასის მიახლოებით, შრედინგერის განტოლების ამოხსნას აქვს ბრტყელი ტალღის სახე:

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{(L_x L_y L_z)^{\frac{1}{2}}} \exp[i(K_x x + K_y y + K_z z)] \quad (7.1)$$

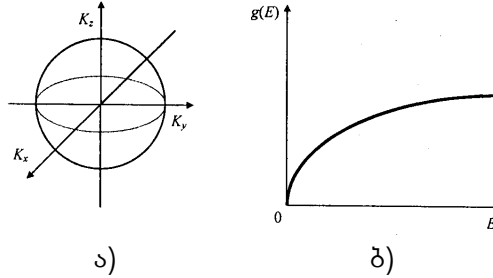
სადაც  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  - კრისტალის ზომებია (პარალელეპიპედის ფორმის)  $x$ ,  $y$  ი  $z$  მიმართულებით,  $K_i$  ( $i=1, 2$  და  $3$ ) ტალღური ვექტორის სივრცული კომპონენტებია.

ტალღურ  $K$  ვექტორთან ენერჯიის კავშირი გამოიხატება:

$$E = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2) = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) K^2, \quad (7.2)$$

სადაც  $m^*$  ელექტრონის ეფექტური მასაა,  $\hbar$  – დაყვანილი პლენკის მუდმივა ( $\hbar=h/2\pi$ ) და  $K^2=(K_x^2+K_y^2+K_z^2)$ .

ამ პარაბოლური დისპერსიის კანონის (7.2) შემთხვევაში იზონერგეტიკული ზედაპირი წარმოადგენს  $K$ -რადიუსიან სფეროს (ნახ.7.1ა).



**ნახ.7.1.** 3D- სისტემისათვის იზონერგეტიკული ზედაპირი (ა) და მდგომარეობის სიმკვრივის ენერგეტიკული დამოკიდებულება (ბ)

ადვილად განისაზღვრება სფერულ შრეზე  $E$  და  $E+dE$  იზონერგეტიკულ ზედაპირზე მოსული კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი.  $K$  სივრცეში სფერული შრის მოცულობაა:

$$dV = 4\pi K^2 dK, \tag{7.3}$$

სადაც,  $dK$  შრის სისქეა. ამ მოცულობაზე მოსული  $dN$  მდგომარეობათა რიცხვი:

$$dN = \frac{2 \cdot 4\pi K^2 dK}{(2\pi)^3} = \frac{K^2 dK}{\pi^2} \tag{7.4}$$

აქ მამრავლი 2 აღნიშნავს სპინის ორიენტაციის ორ შესაძლებლობას.

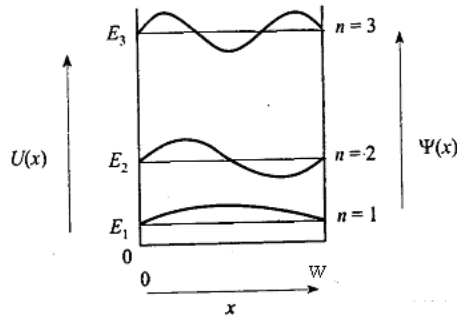
(7.2) ფორმულის გათვალისწინებით, (7.4)-დან განისაზღვრება მდგომარეობათა სიმკვრივე:

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = 2 \left( \frac{2\pi}{h^3} \right) (2m^*)^{3/2} E^{1/2} \tag{7.5}$$

მაშასადამე, (3D) სამგანზომილებიან სისტემაში პარაბოლური ენერგეტიკული სპექტრით ენერჯიის ზრდით დასაშვები ენერგეტიკული დონეების სიმკვრივე  $E^{1/2}$ -ის პროპორციულად იზრდება (ნახ.7.1 ბ).

დაბალგანზომილებიან სტრუქტურაში თავისუფალი ელექტრონის მოძრაობა ერთი მხრივ მაინცაა შეზღუდული. ამ შემთხვევაში ელექტრონის მოძრაობის სტაციონარული მდგომარეობის ამოცანა დადის სწორკუთხა, უსასრულოდ ღრმა პოტენციალურ ორმოში ნაწილაკის ყოფნის ამოცანაზე, როგორც ეს მოცემულია ნახ.7.2-ზე. თუ ორმოს სიგანე  $x$  ღერძის (შეზღუდული მიმართულება)  $W$ -ს ტოლია, მაშინ  $0 < x < W$  არეში შრედინგერის განტოლების ამოხსნას ექნება სახე:

$$\Psi(x) = A \exp(iKx) + B \exp(-iKx), \tag{7.6}$$



**ნახ.7.2.** პოტენციალური ორმო და მასში ელექტრონის ტალღური ფუნქცია

სადაც,  $K = (2mE)^{1/2} / \hbar$  და ის ნული უნდა იყოს პოტენციალური ორმოს კიდეებზე, ანუ  $x = 0$  და  $x = W$ . ასეთ პირობებს აკმაყოფილებს ტალღური ფუნქციის მხოლოდ გარკვეული ნაწილი. ასეთია დე ბროილის მდგარი ტალღა  $\lambda$  ტალღის სიგრძით. ორმოს სიგანეში თავსდება დე ბროილის ნახევარტალღის მთელი რიცხვი, ანუ

$$W = n \frac{\lambda}{2} \quad (7.7)$$

ტალღური ვექტორის შესაბამისი დასაშვები მნიშვნელობები დისკრეტულია და ტოლია:

$$K_n = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi n}{W} \quad (7.8)$$

ამ დროს ელექტრონის დასაშვები დისკრეტული ენერგეტიკული დონეები განისაზღვრება შემდეგი თანაფარდობით:

$$E_n = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 n^2 \quad (7.9)$$

$n$ -მთელი რიცხვები მთავარი კვანტური რიცხვებია. მაშასადამე, შეზღუდულ მოცულობაში მყოფი ელექტრონი იკავებს ენერჯიის მხოლოდ დისკრეტულ დონეს.

განვიხილოთ  $n$  კვანტური რიცხვის გავლენა პოტენციალურ ორმოში მყოფი ელექტრონის ენერგეტიკული დონეების განაწილებაზე. ამისათვის ვიპოვოთ

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n+1) \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 \quad (7.10)$$

და (7.9) ფორმულიდან თანაფარდობა  $\Delta E/E_n$ :

$$\frac{\Delta E}{E_n} = \frac{(2n+1)}{n^2} \quad (7.11)$$

(7.11)-დან ჩანს, რომ  $n$  კვანტური რიცხვის ზრდით

$$2n+1 \approx 2n, \quad \frac{\Delta E}{E_n} \approx \frac{2}{n} \quad (7.12)$$

$\Delta E$  ხდება მცირე  $E_n$ -თან შედარებით, ანუ ენერგეტიკული დონეები უახლოვდებიან ერთმანეთს.  $n$  კვანტური რიცხვის დიდი მნიშვნელობისას დონეები უწყვეტია, რაც შეესაბამება კლასიკური ფიზიკის შედეგებს. შესაბამისობის პრინციპის ზოგადი ფორმულირებით ნებისმიერ თეორიებს შორის, რომელშიც ერთ-ერთი კლასიკურის გაუმჯობესებაა, კარგი კავშირია და განსაზღვრულ პირობებში ახალი თეორია გადადის ძველში.

მაშასადამე, პოტენციალურ ორმოში მყოფი ელექტრონის ენერგია დაკვანტულია. ამ შემთხვევაში ელექტრონის ნორმირებული ტალღური ფუნქციები სხვადასხვა  $E_n$  მნიშვნელობებისათვის წარმოდგება ასეთი სახით:

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{W}\right)^{1/2} \cos\left[\frac{\pi x n}{W}\right] \quad (7.13)$$

თუ  $n$  – კენცია,

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{2}{W}\right)^{1/2} \sin\left[\frac{\pi x n}{W}\right] \quad (7.14)$$

თუ  $n$  – ლუნია.

ყველაზე დაბალ დონეს აქვს მნიშვნელობა:

$$E_1 = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)\left(\frac{\pi}{W}\right)^2 \quad (7.15)$$

(7.13) – (7.15)-ის თანახმად, ძირითადი მდგომარეობის ტალღურ  $\Psi_1$  ფუნქციას და  $E_1$  უმდაბლეს ენერგიას პოტენციალური ორმოს შიგნით არა აქვთ ნული მნიშვნელობა, ხოლო  $\Psi_2$  ფუნქციას (პირველი აღგზნებული მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია) აქვს ერთი ნული პოტენციალური ორმოს შიგნით,  $\Psi_3$  ფუნქციას – ორი ნული და ა.შ., რაც შეესაბამება ე.წ. ოსცილაციურ თეორემას: მე- $n$ -ე მდგომარეობაში სისტემას გააჩნია  $n-1$  კვანძი (იხილეთ Л.Ландау «Квантовая механика»). კვანტურ-მექანიკური სისტემა, არანულოვანი მინიმალური ენერგიით, განსხვავდება კლასიკურისაგან, სადაც პოტენციალური ორმოს ფსკერზე მყოფ ნაწილაკებს აქვთ ნულის ტოლი ენერგია.

დაბალგანზომილებიან სისტემაში მუხტის მატარებლების მოძრაობის შეზღუდვა, რომელიც ხასიათდება არანულოვანი მინიმალური ენერგიით და ენერგიის დასაშვები დონეების დისკრეტულობით, ცნობილია კვანტური შეზღუდვის სახელწოდებით. მყარ სხეულში კვანტური შეზღუდვა შეიძლება განხორციელდეს სივრცის სამივე მიმართულებით. მიმართულებათა რიცხვით, სადაც არაა კვანტური შეზღუდვა, კლასიფიცირდება დაბალგანზომილებიანი სტრუქტურები – კვანტური ფირები (2D-სისტემა), კვანტური მავთული (1D-სისტემა) და კვანტური წერტილი (0D-სისტემა).

კვანტურ ფირებში, რომლებიც ორგანზომილებიანი (2D) სტრუქტურებია, კვანტური შეზღუდვები მხოლოდ ერთი მიმართულებით – ფირის მართობულად (მაგალითად,  $z$  მიმართულებით). ასეთ სტრუქტურებში მუხტის მატარებლები თავისუფლად გადაადგილდებიან  $xy$  სიბრტყეში და მათი მოძრაობა განისაზღვრება კრისტალური მესრის პერიოდული პოტენციალით და  $z$  ღერძზე შეზღუდული დამატებითი პოტენციალით:  $U(z) = 0 = \text{Const}$ , როცა  $0 < z < W$  და  $U(z) = \infty$ , როცა  $z < 0$  და  $z > W$ . ამ შემთხვევაში ელექტრონის მოძრაობა  $x$  და  $y$  ღერძების გასწვრივ (ფირის სიბრტყეში) თავისუფალია ( $m^*$  მასით), ხოლო  $z$  ღერძის გასწვრივ – შეზღუდული  $U(z)$  პოტენციალით (2D-სისტემა). ამ პოტენციალისთვის სასაზღვრო პირობების გათვალისწინებით ( $\Psi = 0$ , როცა  $z = 0$  და  $z = W$ ), ერთელექტრონიანი ნორმირებული ტალღური ფუნქციები ასე წარმოგვიდგება:

$$\Psi(x, y, z) = \left( \frac{2}{L_x L_y W} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi z}{W}\right) \exp[i(K_x x + K_y y)] \quad (7.16)$$

სადაც  $L_x, L_y$  –  $xy$  სიბრტყეში ფირფიტის ზომებია (ითვლება, რომ  $L_x, L_y \gg W$ ).

საერთო ენერგია  $x$  და  $y$  მიმართულებით ენერგიის უწყვეტი მდგენელისა და  $z$  მიმართულებით კვანტური მნიშვნელობების ( $W$  სისქის შესაბამისი ფირისთვის) ჯამის ტოლია:

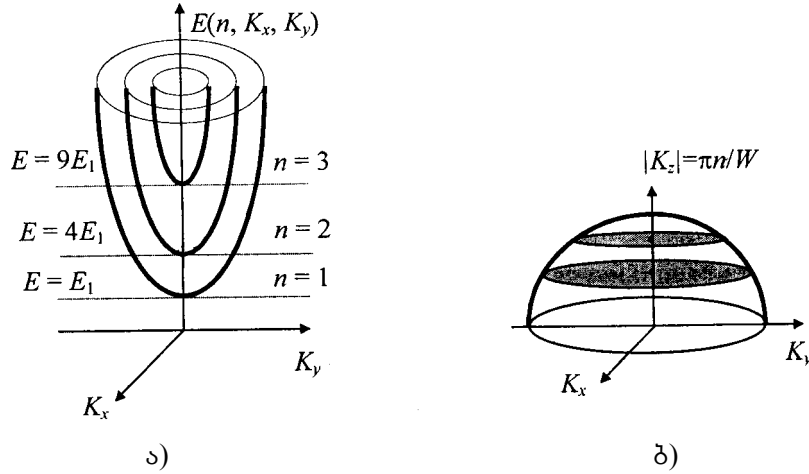
$$E(n, K_x, K_y) = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 n^2 + \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) (K_x + K_y)^2 \quad (7.17)$$

(7.17) ფორმულიდან ჩანს, რომ ასეთ კვანტურ ორგანზომილებიან სისტემაში ელექტრონის მდგომარეობა განისაზღვრება სამი რიცხვით ( $n, K_x, K_y$ ), ენერგეტიკული სპექტრი იყოფა ცალკეულ  $n$  ფიქსირებული მნიშვნელობის ორგანზომილებიან ქვეზონებად  $E_n = E_n(K_x + K_y)$  (ნახ.7.3 ა), ხოლო მუდმივი ენერგიის მრუდები წრეებია. რადგან ყოველ დისკრეტულ კვანტურ  $n$  რიცხვს ეთანადება ტალღური ვექტორის  $z$ -კომპონენტი  $|K_z| = (\pi/W)n$ , ამიტომ  $K$ -სივრცეში კვანტური მდგომარეობის განაწილება იქნება შრეების სახის, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ.7.3.ბ-ზე.  $E$  ენერგიის შესაბამისი ჩაკეტილი ზედაპირით შემოფარგლული მოცულობა იყოფა ფიქსირებულ  $n$  მნიშვნელობის რაოდენობის შრეებად.

კვანტური ფირისთვის (2D) მდგომარეობის სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულების განსაზღვრისთვის ვიპოვოთ ფიქსირებული  $n$ -სათვის  $E$  და  $E + dE$  ენერგიებს შორის მოთავსებული  $S$  რგოლის ფართობი:

$$S = 2\pi K_p dK_p \quad (7.18)$$

სადაც,  $K_p = (K_x + K_y)^{1/2}$  ორგანზომილებიანი ტალღური ვექტორის სიდიდეა,  $dK_p$  – რგოლის სიფართოე.



**ნახ.7.3.** კვანტური ფირისათვის ნაწილაკის ენერგეტიკული სპექტრი (ა) და  $K$ -სივრცეში კვანტური მდგომარეობების განაწილება

$(K_x, K_y)$  სიბრტყეში ერთ მდგომარეობას ეთანადება ფართობი  $dS=(2\pi)^2/L_x L_y$  და კრისტალის მოცულობის ( $V = L_x \cdot L_y \cdot W$ ) ერთეულში, სპინის პროექციის ორ შესაძლო მდგომარეობის გათვალისწინებით, ელექტრონის მდგომარეობათა რიცხვი ტოლი იქნება გამოსახულებისა:

$$dN = \frac{2S}{V dS} = \frac{K_\rho dK_\rho}{\pi W} = \frac{dK_\rho^2}{2\pi W} \quad (7.19)$$

(7.17)-ით გვექნება:

$$K\rho^2 = \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right) (E - E_n), \quad (7.20)$$

სადაც  $E_n = \hbar^2/2m^*(\pi/W)^2 n^2$ . ფირის კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივისთვის (19)-ის და (7.20)-ის გათვალისწინებით გვექნება:

$$g_{3D}(E) = \sum \frac{dN}{dE} = \left( \frac{m^*}{\pi W \hbar^2} \right) \sum \Theta(E - E_n), \quad (7.21)$$

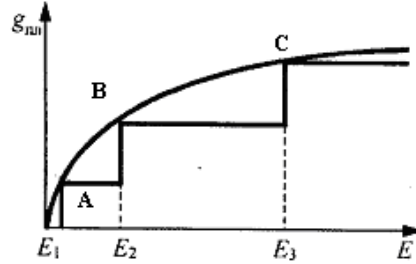
სადაც  $\theta(Y)$  ჰევისაიდის საფეხურიანი ფუნქციაა,  $\theta(Y) = 1$ , როცა  $Y \geq 0$  და  $\theta(Y) = 0$ , როცა  $Y < 0$ .

ხშირად  $g_{3D}(E)$ -ს ასე წარმოადგენენ:

$$g_{3D}(E) = \left( \frac{m^*}{\pi W \hbar^2} \right) \left( \frac{E}{E_1} \right)^{1/2}, \quad (7.22)$$

სადაც  $[(E/E_1)^{1/2}]$  მთელი ნაწილია  $(E/E_1)^{1/2}$ -ისა, ტოლი ქვეზონების რიცხვისა.

(7.21) და (7.22)-დან ჩანს, რომ კვანტური ფირისთვის ნებისმიერ ქვეზონაში მდგომარეობათა სიმკვრივე მუდმივია და არაა დამოკიდებული ენერგიაზე. როცა სიდიდე  $[(E/E_1)^{1/2}]$  იცვლება ერთი ერთეულით, ანუ იცვლება ქვეზონა, მაშინ ენერგია იცვლება ნახტომისებურად და ამიტომ  $g_{კვ}(E)$  დამოკიდებულებას აქვს საფეხურიანი სახე (ნახ.7.4).



**ნახ.7.4.** მდგომარეობის სიმკვრივის ენერგეტიკული დამოკიდებულება

თუ  $g_{კვ}(E)$  დამოკიდებულების (7.22) ფორმას გამოვსახავთ  $g_0(E)$  მასიური ნიმუშის (7.5) ფორმით, მაშინ მივიღებთ:

$$g_{კვ}(E) = g_0(E) \frac{[(E/E_1)^{1/2}]}{(E-E_1)^{1/2}} \quad (7.23)$$

აქედან ჩანს, რომ როცა  $E = E_n$ , მაშინ ფირის კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე მასიური ნიმუშის კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივის ტოლია, რაც ეთანადება ნახ.4-ზე A, B და C წერტილებს.

კვანტურ ფირფიტაში ელექტრონებს უწოდებენ ორგანზომილებიან ელექტრონულ გაზს.

*კვანტური მავთული* – ესაა ერთგანზომილებიანი (1D) სტრუქტურა. მას აქვს ორი ნანომეტრული განზომილება, რომელთა მიმართ არსებობს კვანტური შეზღუდვის ეფექტი. დენის მატარებლებს შეუძლიათ თავისუფლად გადაადგილდნენ მხოლოდ ერთი მიმამართულებით – მავთულის გასწვრივ. ამ შემთხვევაში ნაწილაკთა მოძრაობა განისაზღვრება კრისტალური მესრის პერიოდული პოტენციალით და  $y$  და  $z$  ღერძების გასწვრივ შეზღუდული მოძრაობის ამსახველი დამატებითი პოტენციალით:  $U(y,z) = 0$ , როცა  $0 < y < d$  და  $0 < z < W$ , და  $U(y,z) = \infty$ , როცა  $y < 0$ ,  $z < 0$  და  $y > d$ ,  $z > W$ . მოცემული პოტენციალისთვის ერთელექტრონიანი ნორმირებული ტალღური ფუნქცია შეიძლება წარმოდგეს ასეთი სახით:

$$\Psi(x, y, z) = \left( \frac{4}{L_x d W} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi y}{d}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{W}\right) \exp(iK_x x), \quad (7.24)$$

სადაც  $d$  და  $W$  კვანტური მავთულის სისქეა  $y$  და  $z$  ღერძების გასწვრივ, შესაბამისად, (ითვლება, რომ  $L_x \gg d$  და  $W$ ),  $K_x$  ერთგანზომილებიანი ტალღური ვექტორია.



ნანილაკის საერთო ენერგიაში წვლილი შეაქვს კინეტიკურ ენერგიას, რომელიც შედგება ერთი  $x$  მიმართულებით უწყვეტი და ორი  $y$  და  $z$  მიმართულებით კვანტური მდგენელებისაგან:

$$E(n, m, K_x) = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) K_x^2 + \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left[ \left( \frac{\pi}{d} \right)^2 m^2 + \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 n^2 \right], \quad (7.25)$$

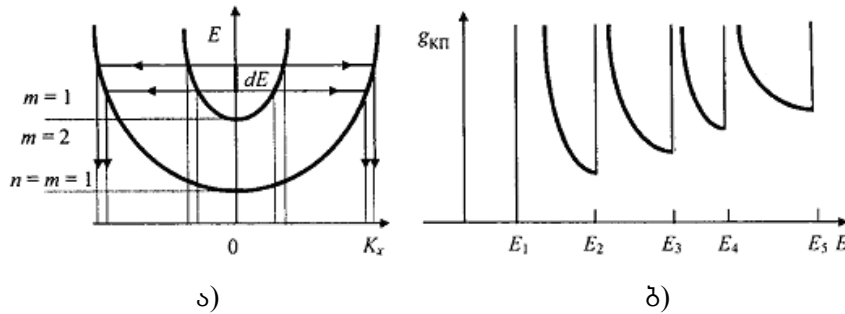
სადაც  $n, m = 1, 2, \dots$  დადებითი რიცხვებია, რომლებიც ახასიათებს კვანტურ ქვეზონებს.

(7.25)-ის თანახმად, კვანტური მავთულის ენერგეტიკული სპექტრი იყოფა ცალკეულ ერთგანზომილებიან ზონებად (პარაბოლებად)  $E(n, m, K_x)$ , რომლებიც ეთანადებიან  $n$  და  $m$  ფიქსირებულ მნიშვნელობებს (ნახ.7.5 ა).

გამოვთვალოთ კვანტურ მავთულში მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულება. მოცულობის ერთეულში  $dK_x$  ინტერვალში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი ტოლია:

$$dN = \frac{dK_x}{V(2\pi/L_x)} = \frac{dK_x}{L_x dW(2\pi/L_x)} = \frac{dK_x}{2\pi dW} \quad (7.26)$$

(7.22)-დან გამოდის, რომ:



**ნახ.7.5.** კვანტური მავთულისათვის ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრი (ა) და მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგეტიკული დამოკიდებულება (ბ), როცა  $d < W$ .

$$K_x = \left[ \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right) (E - E_{n,m}) \right]^{1/2}, \quad (7.27)$$

სადაც

$$E_{n,m} = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left[ \left( \frac{\pi}{d} \right)^2 m^2 + \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 n^2 \right] \quad (7.28)$$

მაშინ

$$dK_x = \frac{1}{2\hbar} \left( \frac{2m^*}{E - E_{n,m}} \right)^{1/2} dE \quad (7.29)$$

მაშასადამე, კვანტურ მავთულში მდგომარეობათა სიმკვრივის  $g_{3\beta}$  დამოკიდებულება  $E$  ენერგიაზე, სპინური გადაგვარებისა და  $dE$  ინტერვალში ორი  $\pm dK_x$  (ნახ.7.5ა), რომელთათვის  $(E - E_{n,m}) > 0$ , არის არსებობის გათვალისწინებით, შეიძლება წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით (ნახ.7.5ბ):

$$g_{3\beta}(E) = (2m^*)^{1/2} (\pi \hbar dW)^{-1} \sum \sum \theta(E - E_{n,m}) / (E - E_{n,m})^{-1/2}. \quad (7.30)$$

(7.30) გამოსახულებიდან ჩანს, რომ ცალკეულ ქვეზონაში ენერგიის ზრდით მდგომარეობათა სიმკვრივე  $(E - E_{n,m})^{-1/2}$  სახით მცირდება. როცა  $E = E_{n,m}$ , მაშინ მდგომარეობათა სიმკვრივე  $g_{3\beta}$  უსასრულობის ტოლია. მაგრამ უნდა აღინიშნოს, რომ ნებისმიერი ენერგიის ინტერვალის სასრული მნიშვნელობისთვის დასაშვებ მდგომარეობათა რიცხვი სასრულია.

*კვანტური წერტილი* – ნულგანზომილებიანი (0D) სისტემაა, რომელშიც დენის მატარებელთა მოძრაობა შეზღუდულია სამივე მიმართულებით და ყველა ამ მიმართულებაზე ელექტრონის ენერგია იკვანტება.

კვანტურ წერტილში ნაწილაკზე მოქმედებს შემდეგი სახის შემზღუდავი პოტენციალი:  $U(x,y,z) = 0$ , როცა  $0 < x < R$ ,  $0 < y < d$  და  $0 < z < W$ , და  $U(x,y,z) = \infty$ , როცა  $x < 0$ ,  $y < 0$ ,  $z < 0$  და  $x > R$ ,  $y > d$ ,  $z > W$ . 0D – სისტემაში ნორმირებული ტალღური ფუნქციები და დასაშვებ მდგომარეობათა სპექტრი წარმოდგება ასეთი სახით:

$$\Psi_{n,m,l}(x,y,z) = \left( \frac{8}{RdW} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi x}{R}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{d}\right) \sin\left(\frac{\pi z}{W}\right), \quad (7.31)$$

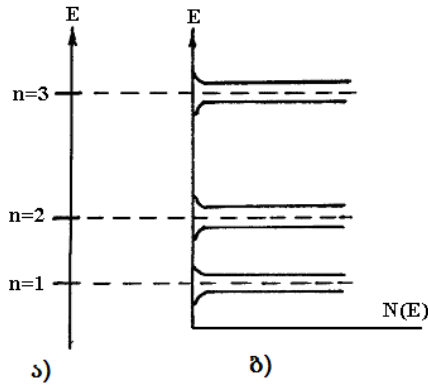
$$E(n,m,l) = \left( \frac{\hbar^2}{2m^*} \right) \left[ \left( \frac{\pi}{R} \right)^2 l^2 + \left( \frac{\pi}{d} \right)^2 m^2 + \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 n^2 \right] \quad (7.32)$$

სადაც,  $R$ ,  $d$  და  $W$  კვანტური წერტილის ზომებია  $x$ ,  $y$  და  $z$  ღერძების გასწვრივ;  $n$ ,  $m$  და  $l = 1, 2, 3$ . ქვეზონის გამომსახველი მთელი რიცხვებია.

(7.32)-დან ჩანს, რომ კვანტური წერტილის ენერგეტიკული სპექტრი წარმოადგენს დისკრეტული დასაშვები მდგომარეობების ერთობლიობას, ანუ მკვეთრ პიკებს (ნახ.7.6)  $n$ ,  $m$  და  $l$  რიცხვების ფიქსირებული მნიშვნელობებისათვის და აღინერება დ-ფუნქციით. ამ შემთხვევაში იქნება:

$$g_{3\beta}(E) = (2/RdW) \sum \sum \sum \delta(E - E_{n,m,l}). \quad (7.33)$$

კვანტური წერტილი შედგება მცირე რაოდენობის ატომებისაგან და ამიტომ კვანტური წერტილის შიგნით ენერგეტიკული მახასიათებლები თითქმის ერთნაირია. კვანტურ წერტილებთან ახლოს არიან ატომური კლასტერები და ნანოკრისტალები შედარებით მეტი რაოდენობის ატომებით. მაგრამ იქაც ადგილი აქვს კვანტური შეზღუდვის ეფექტს.



**ნახ.7.6.** კვანტური წერტილისათვის ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრი (ა) და მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგაზე დამოკიდებულება (ბ)

## 7.2. ბალისტიკური ტრანსპორტი და კვანტური ინტერფერენცია

მიკრო- და ნანოხელსაწყობების სწრაფქმედების ერთ-ერთი განმსაზღვრელი პარამეტრია დენის მატარებლების დრეიფული სიჩქარე და ძვრადობა. ეს პარამეტრები, ძირითადად, განისაზღვრება დენის მატარებლების გაბნევით ხელსაწყოს ერთი უბნიდან მეორეში მათი მოძრაობისას. რეალურად, გარე ველის გარეშე ქაოსურად მოძრავი ელექტრონი ყოველთვის ეჯახება სხვა ელექტრონს ან განიბნევა მესრის რხევაზე, დეფექტებსა, ან ორი ფაზის გამყოფ საზღვარზე. ამის გამო ელექტრონის სიჩქარე და მდგომარეობა იცვლება. ამ შემთხვევაში შეიძლება ლაპარაკი გაბნევის ორ უახლოეს აქტს შორის ელექტრონის მიერ გავლილი მანძილის საშუალოზე, რომელსაც ეწოდება ელექტრონის თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი. გარე ველის მოდებისას ელექტრონის ქაოსურ მოძრაობას დაედება მიმართული დრეიფული მდგენელი. ცხადია, ელექტრონის მიერ გავლილი მანძილი დრეიფულ მანძილზე მეტი იქნება.

მაკროსკოპულ სისტემაში  $F$  ველში დრეიფული სიჩქარის განსაზღვრისთვის საჭიროა იმპულსის, კოორდინატის და დროის მიმართ ელექტრონის განაწილების ფუნქციის  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$  პოვნა და სპეციალური დაშვებებით ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების ამოხსნა. პრაქტიკაში ხშირად გამოიყენება ბოლცმანის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნა რელაქსაციის დროის შემოტანით, რომლის განმავლობაში არანონასწორული განაწილების ფუნქცია, გარე ველის გამორთვის შემდეგ დამყარებულ ნონასწორულთან შედარებით,  $e$ -ჯერ ( $\sim 2,73$ ) ეცემა.

ელექტრონის დრეიფული სიჩქარის და ენერგიის ცვლილების ხარისხობრივი შეფასებისთვის გამოიყენება იმპულსით და ენერგიით გასაშუალოებული ბალანსის განტოლება:

$$\frac{d}{dt} [m^*(E)V_d] = qF - \frac{m^*(E)V_d}{\tau_p(E)} \quad (7.34)$$

$$\frac{dE}{dt} = qFV_d - \frac{E - E_0}{\tau_E(E)}, \quad (7.35)$$

სადაც  $E_0 = (3k_0T)/2$  – გარე  $F$  ველის გარეშე საშუალო სითბური ენერგია;  $\tau_p(E)$  და  $\tau_E(E)$  – იმპულსით და ენერგიით რელაქსაციის დროები, შესაბამისად.

სტაციონარულ შემთხვევაში  $d/dt(m^*V_d) = dE/dt = 0$  და (7.31) და (7.32)-დან გამოდის:

$$\tau_p(E) = \frac{m^*V_d}{qF} \quad \text{და} \quad \tau_E(E) = \frac{E - E_0}{qFV_d} \quad (7.36)$$

როგორც წესი,  $\tau_p(E) \ll \tau_E(E)$  და ამიტომ დრეიფული სიჩქარე განისაზღვრება იმპულსის დროის რელაქსაციის სიდიდით და შეიძლება დაინეროს:

$$V_d = \frac{q\tau_p(E)F}{m^*(E)} = \mu F, \quad (7.37)$$

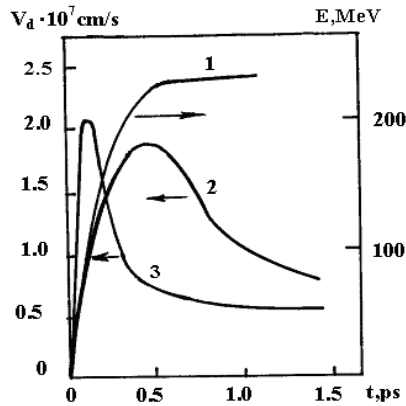
სადაც  $\mu = q\tau_p(E)/m^*(E)$  – მუხტის მატარებელთა ძვრადობაა.

მაკროსკოპულ სისტემაში დრეიფული სიჩქარე და, შესაბამისად, მუხტის მატარებელთა ძვრადობა, განისაზღვრება არა მარტო გაბნევის მექანიზმებით, არამედ კრისტალის სტრუქტურითაც. ელექტრონის თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი ყოველთვის ბევრად ნაკლებია ამ სისტემის ზომებთან შედარებით.

ნიმუშზე მკვეთრი წინა ფრონტის იმპულსის სახის ელექტრული ველის მოდებისას ველის მოქმედების დროის მონაკვეთი უფრო მცირეა, ვიდრე დაჯახებათაშორისო  $\tau_p$  დრო, ელექტრონი ველის მოქმედების დროს იმოძრაებს დაჯახების გარეშე. მაშინ, (7.37) ფორმულიდან დრეიფული სიჩქარის განსაზღვრისათვის რელაქსაციის  $\tau_p$  დრო უნდა შეიცვალოს ველის მოქმედების დროის  $t$  ხანგრძლივობით:

$$V_d = \frac{qFt}{m^*}, \quad t < \tau_p \quad (7.38)$$

აქედან შესაძლებელია, რომ საკმაოდ მაღალ ელექტრულ ველებზე  $V_d$  სიჩქარე მიიღებს უფრო მეტ მნიშვნელობას, ვიდრე უფრო ხანგრძლივი დროით მოქმედი სტაციონარული ელექტრული ველის შემთხვევაში, როცა ირთვება სიჩქარის შემამცირებელი გაბნევის მექანიზმები (ნახ.7.7). ნახაზიდან ჩანს, რომ დროის ასეთი პირობებისათვის, დრეიფული სიჩქარის დროში ცვლილება დასაწყისში ხასიათდება სწრაფი ზრდით და მაქსიმუმის მიღწევის შემდეგ იგი სწრაფად ეცემა სტაციონარულ მნიშვნელობამდე. ელექტრული ველის ჩართვისას დრეიფული სიჩქარის სწრაფი ზრდა განპირობებულია გაბნევის გარეშე ელექტრონების მოძრაობით, რომელსაც თან მოჰყვება კრისტალის მესერთან მრავალმხრივი დაჯახება და სიჩქარის შემდგომი შემცირება.



**ნახ.7.7.** Si-ში ელექტრონის დრეიფული სიჩქარისა (2;3) და საშუალო ენერჯიის (1) მართკუთხა სახის ელექტრული ველის მოქმედების დროზე დამოკიდებულება: 1 და 2 T=293 K; 3– 77K.

ნანოსტრუქტურაში მუხტის მატარებლების ტრანსპორტის პირობები არსებითად განსხვავდება მაკროსისტემაში არსებული პირობებისგან. თავისუფალ განარბენზე ნაკლები ზომის სტრუქტურაში მუხტის მატარებელთა გადატანა ხდება გაბნევის გარეშე. ასეთ გადატანას ეწოდება ბალისტიკური ტრანსპორტი.

რადგანაც  $\tau_p \ll \tau_E$  შეიძლება დაინეროს:

$$L_p = \tau_p V_d \approx L_{CB} = \tau V. \quad (7.39)$$

ეს ნიშნავს, რომ ხელსაწყოს აქტიური უბნის ზომები უნდა შედარდეს ელექტრონის თავისუფალი განარბენის მანძილს. გარდა ამისა, აღსანიშნავია, რომ  $\tau_p$ -ზე ნაკლებ დროში ვერც ერთი გამბნევი ცენტრი ვერ ასწრებს დაარღვიოს თავისუფალი ელექტრონის მოძრაობა და ამიტომ, ბალისტიკური ტრანსპორტის ძირითადი ეფექტები განისაზღვრება სტრუქტურის ზომების და თავისუფალი განარბენის მანძილის ურთიერთთანაფარდობით. გადამწყვეტად ითვლება თავისუფალი განარბენის მანძილი, რომელიც ახასიათებს მუხტის მატარებელთა დრეკად და არადრეკად გაბნევას.

დრეკადი გაბნევისას თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი – ესაა მუხტის მატარებლის მიერ ორ უახლოეს დაჯახებას შორის გავლილი მანძილი. დაბალ ტემპერატურაზე ელექტრონული სისტემა განისაზღვრება ფერმის სიჩქარით  $v_F = (2E_F/m^*)^{1/2}$ , ( $E_F$  –ფერმის ენერჯია) და რელაქსაციის დროით  $\tau_{rel} = Dd/v_F^2$  ( $D$  – მატარებელთა დიფუზიის კოეფიციენტი,  $d$  – სტრუქტურის ზომა).

არადრეკადი გაბნევისას თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი – ესაა მანძილი, რომელზეც ელექტრონული ტალღა გაბნევით იცვლის ფაზას. ის სიდიდით ტოლია  $L_{ადრ} = v_F \tau_{rel}$ , სადაც  $\tau_{rel}$  – ფაზის რელაქსაციის დროა. არადრეკადი გაბნევის დასახასიათებლად გამოიყენება სხვა პარამეტრიც – ფაზური კოჰერენტულობის მანძილი  $L_{\phi} = (D\tau_{rel})^{1/2}$ . ამ მანძილზე ელექტრონული ტალღა ინარჩუნებს თავის ფაზას. უნდა აღინიშნოს, რომ არადრეკადი გაბნევისას თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი და კოჰერენტულობის მანძილი სხვადასხვა მახასიათებლებია. ზოგადად, ფაზური კოჰერენტულობის მანძილი უფრო მცირეა თავისუფალ განარბენის საშუალო

მანძილთან შედარებით. ორივე ეს პარამეტრი მნიშვნელოვანია ელექტრონული ტალღის ინტერფერენციის პირობების ანალიზისას.

მყარ სხეულებში თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი არადრეკადი გაბნევისას მეტია, ვიდრე დრეკადისას. სტრუქტურაში, რომლის ზომა მეტია  $L_{დრ}$ -ზე, მაგრამ ნაკლებია  $L_{ადრ}$ -ზე, ხდება „კვაზიბალისტიკური“, ანუ სუსტი გაბნევა.

განვიხილოთ ორი ტალღის ინტერფერენცია ზოგადი სახით, რომელთა ტალღური ფუნქციაა  $\psi = A \exp(i\varphi)$ . ორი ასეთი ტალღის ზედდებისას, ახალი ტალღის შექმნის ალბათობა მოიცემა თანაფარდობით:

$$W = |\psi_1 - \psi_2|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 4|A_1 * A_2| \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (7.40)$$

ამ ალბათობის სიდიდე შეიძლება შეიცვალოს ინტერვალში – ორი ტალღის ამპლიტუდის ჯამიდან მათ სხვაობამდე, მათი ( $\varphi_1$  და  $\varphi_2$ ) ფაზების თანაფარდობაზე დამოკიდებულებით.

ნანოსტრუქტურებში მნიშვნელოვან მახასიათებლად ითვლება ფერმის ტალღის სიგრძე  $\lambda_F = 2\pi/k_F$ , სადაც  $k_F$  ფერმის ტალღური ვექტორია.  $T=0K$  ტემპერატურაზე ელექტრონთა მდგომარეობები განისაზღვრება თანაფარდობით  $|k| \leq k_F$ , რაც ელექტრონთა ტალღის სიგრძის  $\lambda \geq \lambda_F$  ეკვივალენტურია. ფერმის ტალღის სიგრძე დამოკიდებულია მასალის სტრუქტურის სახეზე. მეტალებში, დაბალ ტემპერატურებზეც კი, თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი არ აღემატება 10 ნმ-ს, რაც ტიპური ნანოსტრუქტურის ზომის რიგისაა. ამიტომ მათში ბალისტიკური ტრანსპორტი ძნელად ხორციელდება. მათში ფერმის ტალღის სიგრძეც ძალიან მცირეა (0,1 – 0,2 ნმ), ამიტომ მეტალებში ენერგეტიკული დონეების დაკვანტვა არაარსებითია. ნახევარგამტარულ სტრუქტურებში დენის მატარებელთა ტრანსპორტი უფრო ადვილად ხორციელდება, ვიდრე მეტალებში, რადგანაც ნახევარგამტარულ სტრუქტურებში ელექტრონების თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი მიკრომეტრის რიგისაა. მაგალითად, ოთახის ტემპერატურაზე არადრეკადი გაბნევისას, ელექტრონების თავისუფალი განარბენის საშუალო მანძილი აღწევს 50- – 100 ნმ Si-ში, ხოლო 120 ნმ GaAs-ში.

ნანოსტრუქტურაში დენის მატარებლების იდეალური ბალისტიკური ტრანსპორტი ხასიათდება უნივერსალური ბალისტიკური გამტარებლობით, რომელიც არაა დამოკიდებული მასალის სახეზე და განისაზღვრება მხოლოდ ფუნდამენტური მუდმივებით. ელექტრონის ტალღური ბუნების გამო, სტრუქტურაში მუხტის მატარებლების გადატანაზე მოქმედებს მის გარეთ მიმდინარე პროცესები. ეს მოქმედება გადაეცემა სტრუქტურას კონტაქტების მეშვეობით, რომლებიც სტრუქტურის შემადგენელი ნაწილებია. ბალისტიკური ტრანსპორტის ილუსტრაციის ყველაზე მარტივ ხელსაწყოს წარმოადგენს ორკონტაქტიანი, ნულოვანგამბნევიანი კვანტური გამტარი. გარდა ამისა, იგულისხმება, რომ კონტაქტები – ეს ელექტრონების რეზერვუარებია, საიდანაც ელექტრონები უშუალოდ, დაყოვნების გარეშე ხვდებიან არხში.

დავუშვათ,  $T=0K$  ტემპერატურაზე რეზერვუარები შევსებულია ელექტრონებით  $\mu_1$  და  $\mu_2$  ელექტროქიმიურ პოტენციალებამდე. თუ  $\mu_1 > \mu_2$ , მაშინ რეზერვუარებს შორის გაივლის დენი:

$$I = 2(\mu_1 - \mu_2)e v \frac{dn}{d\mu}, \quad (7.41)$$

სადაც  $e$  ელექტრონის მუხტია,  $v$  ელექტრონების სიჩქარის მდგენელია ფერმის ზედაპირზე არხის გასწვრივ,  $dn/d\mu$  - არხში ელექტრონთა მდგომარეობის სიმკვრივე და მამრავლი 2 ითვალისწინებს სპინის მდგომარეობის შესაძლო ორ ვარიანტს. კვანტურ მავთულში  $dn/d\mu = 1/\pi\hbar v$ . გავითვალისწინებთ რა, რომ  $\mu_1 - \mu_2 = e(V_1 - V_2)$ , სადაც  $V_1$  და  $V_2$  რეზერვუარებში სხვადასხვა ელექტროქიმიური პოტენციალების შემქმნელი ელექტრული პოტენციალებია, კვანტური მავთულის გამტარებლობისათვის მივიღებთ:

$$G = \frac{I}{V_1 - V_2} = \frac{e^2}{\pi\hbar} = \frac{2e^2}{h} \quad (7.42)$$

ეს იდეალური, ერთგანზომილებიანი მავთულის გამტარებლობა ბალისტიკურ რეჟიმში განისაზღვრება მხოლოდ ფუნდამენტური მუდმივებით – ელექტრონის მუხტით და პლანკის მუდმივით. სიდიდეს  $e^2/h = 38,74$  მკსმ (მიკროსიმენსი) ეწოდება გამტარებლობის კვანტური ერთეული (ან გამტარებლობის კვანტი). შესაბამისი წინალობაა  $h/e^2 = 25,8$  კომი (წინალობის კვანტი).

ფერმის დონეს ქვემოთ რამდენიმე ენერგეტიკული მდგომარეობის მქონე არხის გამტარებლობა იკვანტება  $2e^2/h$  ერთეულით, რაც დაიმზირება კვანტურ ნერტილოვან კონტაქტში. კონტაქტიდან ინჟექტირებული ყველა ელექტრონი არ მოხვდება განსახილველ სტრუქტურაში. მათი ნაწილი აირეკლება და უკან დაბრუნდება, რაც აღინერება ყველა მომყვანი არხის შესაბამისი არეკვლის  $R_i$  კოეფიციენტით.  $i$ -ურ არხში გამავალი დენი მცირდება აგრეთვე იმ ელექტრონების ხარჯზე, რომლებიც გადავიდნენ ერთი არხიდან სხვა არხში, რაც აღინერება გადაცემის  $T_{ij}$  კოეფიციენტით  $j$ -რიგიდან  $i$ -რ არხში გადასვლით. ამის გათვალისწინებით და თუ დავუშვებთ, რომ ყოველი მომყვანი არხი მრავალმოდურია, ანუ მასში არის ელექტრონებით დაკავებული  $N_i$  ქვეზონა, მაშინ საერთო დენი  $i$ -ურ არხში იქნება:

$$I_i = \left( \frac{2e^2}{h} \right) \left[ (N_i - R_i)V_i - \sum T_{ij}V_j \right] \quad (7.43)$$

სადაც  $V_i$  –  $i$ -ურ არხზე მოდებული ძაბვაა.

(7.43) ფორმულა ლანდაუერ-ბიუტიკერის ფორმულაა და დაბალგანზომილებიანი სტრუქტურისთვის ის წარმოადგენს ომის კანონს. ამ ფორმულით, ხარისხობრივად, ბევრი ექსპერიმენტული მონაცემი იხსნება.

### 7.3. განუზღვრელობის პრინციპი

ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად, შეუძლებელია ერთდროულად ზუსტად განსაზღვროთ ელექტრონის კოორდინატი და იმპულსი. აბსოლუტურ

ვაკუუმში განსაზღვრული სიჩქარით (იმპულსით) ელექტრონის მოძრაობის მაგალითზე ნაჩვენებები (§3.1) იყო მიკროსკოპში მისი კოორდინატის ზუსტად განსაზღვრის შეუძლებლობა. განუზღვრელობის პრინციპი ასე ჩაინერება მათემატიკურად:

$$\Delta x \Delta P_x \geq \hbar \quad (7.44)$$

სადაც  $\Delta x$  ნაწილაკის ცდომილებაა  $x$  კოორდინატში მოცემულ მომენტში,  $\Delta P_x$  - იმპულს-ვექტორის პროექციის ცდომილება  $x$  კოორდინატზე იმავე მომენტში.

(7.44)-ის მსგავსად, შეიძლება ჩავწეროთ:

$$\Delta x \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m} \quad (7.45)$$

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

ასევე შეიძლება დავწეროთ, რომ:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (7.46)$$

(7.44) და (7.46)-ით, დამაკავშირებელ წყვილებს, იმპულსს და კოორდინატს, ასევე, ენერგიას და დროს, უნოდებენ შეუღლებულ ცვლადებს.

ამრიგად, თუ ვიცით ზუსტად ელექტრონის კოორდინანტი, საერთოდ არ ვიცით მისი იმპულსი ან სიჩქარე და პირიქით. ამიტომ აზრს კარგავს კლასიკურ მექანიკაში კარგად ცნობილი მიკრონაწილაკის მდებარეობის განმსაზღვრელი ტრაექტორიის ცნება. კვანტურ მექანიკაში აზრი აქვს მიკრონაწილაკის მოცემულ მომენტში სივრცის მოცემულ წერტილში ყოფნის ალბათობას და აღინერება სტატისტიკური მახასიათებლებით. შეინარჩუნება მიკრონაწილაკის ისეთი მახასიათებლები, როგორცაა მასა, ენერგია, იმპულსის მომენტი.

განუზღვრელობის პრინციპი იძლევა საშუალებას, ავხსნათ ატომის და მოლეკულის მდგრადობა, შევაფასოთ მათი ენერგიები, ზომები და ა.შ. განვიხილოთ ატომი

და ავხსნათ, ელექტრონი რატომ არ „ეცემა“ ბირთვზე  $\frac{e^2}{r^2}$  კულონური ძალის მოქმედებით.  $v$  სიჩქარით მოძრავი ელექტრონისთვის კულონის მიზიდვის ძალა განწონას-

წორებულია განზიდვის ძალით  $\frac{mv^2}{r}$ , ანუ  $\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$ . აქედან  $r = \frac{e^2}{mv^2}$ , ანუ ბირ-

თვიდან მანძილი შეიძლება იყოს ძალიან მცირე, თუ სიჩქარე დიდია. მაგრამ ელექტრონისთვის სამართლიანია განუზღვრელობის პრინციპი მისი  $r$  მდგომარეობისათვის და  $v$  სიჩქარისთვის. განუზღვრელობიდან გამომდინარე,  $mv r \geq \hbar$ . აქედან

და ძალთა წონასწორობიდან მივიღებთ, რომ  $r \geq \frac{\hbar^2}{me^2}$ . აქედან გამომდინარე,

ელექტრონს „ეკრძალება“  $r = \frac{\hbar^2}{me^2}$  -ზე უფრო ნაკლებ მანძილზე მოძრაობა, ანუ



$r \approx 0.0536$ მ, რაც ეთანადება ბორის პირველ რადიუსს, ძირითად მდგომარეობაში ენერგიის მინიმუმის ანალოგიურად, სიჩქარისათვის მივიღებთ  $v \leq \frac{e^2}{\hbar}$ , ამგვარად, ატომი მდგრადი სისტემაა.

განუზღვრელობის პრინციპის შედეგია ნებისმიერი მიკროსისტემისათვის ე.წ. „ნულოვანი ენერგიის“ არსებობა, ანუ მინიმალური ნულისაგან გასხვავებული ენერგია, რომელიც აქვს მიკროსისტემას აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე. სისტემაში არავითარ პირობებში არ შეიძლება მოძრაობის შეწყვეტა, რადგანაც ნაწილაკთა ლოკალიზაცია (განუზღვრელობის პრინციპი) იწვევს მისი კინეტიკური ენერგიის გაზრდას, ხოლო მიკრონაწილაკთა ლოკალიზაციის ხარისხის შემცირება – მისი პოტენციალური (საშუალო) ენერგიის გაზრდას. განუზღვრელობის პრინციპი არის ფიზიკურად რეალური. ეს ნიშნავს, რომ შემცირება (გაზრდა) ერთ-ერთი შეუღლებული ცვლადისა აუცილებლად იწვევს მეორე ცვლადის გაზრდას (შემცირებას).

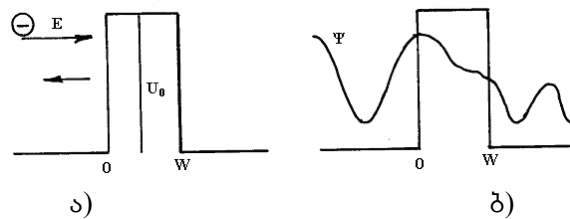
#### 7.4. დენის მატარებლების გვირაბგასვლა

ელექტრონული გვირაბგასვლის პროცესი მდგომარეობს იმაში, რომ ელექტრონს პოტენციალური ჯებირის გავლა შეუძლია მაშინაც კი, როცა მისი ენერგია ნაკლებია პოტენციალური ჯებირის სიმაღლეზე. ეს ეფექტი კვანტურია და კლასიკურ მექანიკაში ანალოგი არა აქვს. კლასიკური მექანიკის თანახმად, ნაწილაკი არ შეიძლება იყოს  $U_0$  სიმაღლის პოტენციალური ჯებირის შიგნით, როცა მისი ენერგია  $E < U_0$ , რადგან მისი კინეტიკური ენერგია ხდება უარყოფითი, ხოლო მისი იმპულსი – წარმოსახვითი:

$$\frac{P^2}{2m} = E - U_0 < 0 \quad (7.47)$$

გარდა ამისა, თუ ნაწილაკი ენერგიით  $E < U_0$ -ზე უახლოვდება პოტენციალურ ჯებირს, მაშინ ის მისგან აირეკლება და იმოძრაებს სანინალმდეგო მიმართულებით. თუ  $E > U_0$ -ზე მაშინ ნაწილაკი აგრძელებს მოძრაობას იმავე მიმართულებით. კვანტურ მექანიკაში სურათი სხვაგვარია. კვანტური მექანიკის თანახმად, ელექტრონული გვირაბგასვლის პროცესი შესაძლებელია ნაწილაკის იმპულსსა და მის კოორდინატს შორის არსებული განუზღვრელობის პრინციპით.

განუზღვრელობის პრინციპით იმპულსის და კოორდინატის ერთდროულად ზუსტად განსაზღვრა შეუძლებელია, ჯებირის შიგნით კოორდინატის ფიქსაცია იმპულსს ხდის განუზღვრელს. შესაბამისად, ჩნდება ნაწილაკის პოტენციალურ ჯებირში განქოლვის ალბათობა. ელექტრონის გვირაბგასვლისა და კლასიკური პროცესები ნაჩვენებია ნახ.7.8-ზე. „განუზღვრელობის“ პრინციპიდან გამომდინარეობს და ჩანს ნახ.7.47-დანაც, რომ არსებობს ნაწილაკის არეკვლის გარკვეული ალბათობა მაშინაც კი, როდესაც მისი ენერგია მეტია ჯებირის სიმაღლეზე, რაც კლასიკურ მექანიკაში „მიუღებელია“.



**ნახ.7.8.** ელექტრონის პოტენციალური ჯებირით გავლის ალბათობა კლასიკურ (ა) და კვანტურ (ბ) შემთხვევებში

გვირაბგასვლის ეფექტი აღმოაჩინა გ. გამოვმა 1928 წელს. ამ ფაქტმა ახსნა დაგროვილი ბევრი ექსპერიმენტული ფაქტი. განსაკუთრებით უნდა აღინიშნოს ბირთვიდან ნაწილაკების ამოფრქვევა – ატომური მეცნიერებისა და ტექნიკის ძირითადი საფუძველი. გ. გამოვი მართლაც იმსახურებდა ნობელის პრემიას, მაგრამ მისი აღმოჩენიდან ოცდაათი წლის შემდეგ, როცა ის უკვე ცოცხალი აღარ იყო, გვირაბგასვლის ეფექტზე დამზადდა პირველი ისეთი ხელსაწყოები, როგორცაა გვირაბული დიოდი, ტრანზისტორი, გადამცემები, ზედაბალი ტემპერატურის გამზომი თერმომეტრები, დაბოლოს, მასკანირებული გვირაბული მიკროსკოპი, რომელმაც დაუდო საფუძველი ნანოტექნოლოგიის დაწყებას.

გვირაბგასვლის ეფექტის აღწერისათვის შემოაქვთ პოტენციალური ჯებირის განმსჭვალვის  $D$  და არეკვლის  $R$  ( $D = 1 - R$ ) კოეფიციენტები, განსაზღვრული გასულ და არეკვლილ ნაწილაკთა სიმკვრივის ფარდობით დაცემულ ნაწილაკთა სიმკვრივესთან.  $U_0$  სიმაღლის და  $W$  სიგანის მართკუთხა პოტენციალური ჯებირის (ნახ.7.8) განმსჭვალვა:

$$D = D_0 \exp\left\{-\left(\frac{2}{\hbar}\right)\left[2m(U_0 - E)^{1/2}\right]W\right\} \quad (7.48)$$

სადაც  $D_0$  მუდმივი, ერთთან ახლოს მყოფი კოეფიციენტია,  $m$  – ნაწილაკის მასა და  $E$  – მისი ენერგია.

ფორმულა (7.48)-დან ჩანს, რომ ნაწილაკის პოტენციალური ჯებირით განმსჭვალვის ალბათობა მით მეტია, რაც ნაკლებია მისი მასა, ვიწროა პოტენციალური ჯებირი და მცირეა ნაწილაკისა და პოტენციალური ჯებირის ენერგიებს შორის სხვაობა.

ნაწილაკის მოძრაობის აღწერისთვის უნდა ამოიხსნას შრედინგერის ერთგაზომილებიანი სტაციონარული განტოლება:

$$-\left(\frac{\hbar}{2m}\right)\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [U(x) - E]\Psi(x) = 0, \quad (7.49)$$

სადაც  $m$  ნაწილაკის მასაა,  $E$  – ნაწილაკის სრული ენერგია და  $\Psi(x)$  – მისი ტალღური ფუნქცია.

განვიხილოთ შემთხვევები, როცა ნაწილაკთა გაბნევა სხვადასხვა სიგანის და სიმაღლის პოტენციალურ ჯებირებზე ხდება.

**7.4.1. ნაწილაკთა გაბნევა მართკუთხა, უსასრულო სიგანის პოტენციალური ჯებირიდან**

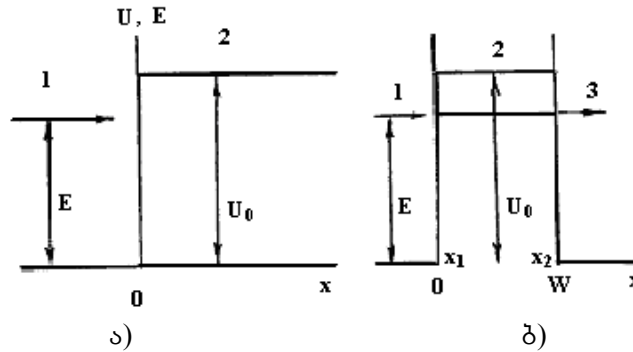
ამ დროს სამართლიანია პირობა:  $U(x) = 0$ , როცა  $x < 0$  და  $U(x) = U_0 = \text{Const}$ , როცა  $x > 0$ .

(7.49) განტოლების ამოხსნა მოსახერხებელია ცალკეული არეებისათვის  $x < 0$  და  $x > 0$ . არეში  $x < 0$  (ნახ.7.9ა, უბანი 1), სადაც  $U(x) = 0$ , (7.49) მიიღებს  $K_1 = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$  ტალღურვექტორიანი თავისუფალი ნაწილაკისათვის განტოლების სახეს და მისი ამონახსნი იქნება დე ბროილის დაცემული და არეკლილი სხივების სუპერპოზიცია:

$$\Psi_1(x) = A_1 \cdot \exp(iK_1x) + B_1 \cdot \exp(-iK_1x) = \Psi_1^{(+)} + \Psi_1^{(-)} \quad (7.50)$$

სადაც,  $A_1$  დაცემული  $\Psi_1^{(+)}$  ტალღის ამპლიტუდაა, ხოლო  $B_1$  – არეკლილი  $\Psi_1^{(-)}$  ტალღის ამპლიტუდა.

არეში  $x > 0$  ( ნახ.7.9ა, უბანი 2),  $U(x) = U_0$  და განტოლების ამოხსნის ხასიათი განისაზღვრება დაცემული ნაწილაკის  $E$  ენერჯიისა და პოტენციალური საფეხურის  $U_0$  ფარდობით. განვიხილოთ შემთხვევები:



**ნახ. 7.9.** სრული  $E$  ენერჯიის მქონე კვანტური ნაწილაკის მოქმედება  $U_0$  სიმაღლის საფეხურიან ჯებირთან (ა) და  $U_0$  სიმაღლის და  $W$  სიგანის მართკუთხა ჯებირთან (ბ).

1.  $x > 0$  და  $E > U_0$ , მაშინ ტალღური ფუნქციის ამონახსნს აქვს სახე:

$$\Psi_2(x) = A_2 \cdot \exp(iK_2x) + B_2 \cdot \exp(-iK_2x), \quad (7.51)$$

$$\text{სადაც, } K_2 = \left[ \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad (7.52)$$

გავითვალისწინებთ რა არე 2-ის ერთგვაროვნობას, ჯებირის ზემოთ გამავალი ტალღისათვის ამპლიტუდა  $B_2$  გაუტოლდება ნულს და გვექნება:

$$\Psi_2(x) = A_2 \cdot \exp(iK_2x) = \Psi_2^{(+)}. \quad (7.53)$$

$D$  განმსჭვალვის და  $R$  არეკვლის კოეფიციენტების პრაქტიკული გამოყენებისთვის იყენებენ ალბათობის ნაკადის სიმკვრივის ვექტორის ცნებას:

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi\Psi^{*'} - \Psi^*\Psi') \quad (7.54)$$

(7.54)-ით და განმსჭვალვის  $D$  და არეკვლის  $R$  კოეფიციენტების განმარტებიდან გამომდინარე, გვაქვს:

$$D = \left| \frac{j_2^{(+)}}{j_1^{(+)}} \right| \quad \text{და} \quad R = \left| \frac{j_1^{(-)}}{j_1^{(+)}} \right| \quad (7.55)$$

(7.53) და (7.54)-დან არე 2-სათვის ალბათობის ნაკადის სიმკვრივის ვექტორის სიდიდისათვის, გვაქვს:

$$\begin{aligned} j_2^{(+)} &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \left[ A_2 \cdot \exp(iK_2x) \cdot A_2 \cdot \exp(-iK_2x)' \right] - \left[ A_2 \cdot \exp(-iK_2x) \cdot A_2 \cdot \exp(iK_2x)' \right] \right\} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \left[ A_2 \cdot \exp(iK_2x) \cdot A_2 \cdot \exp(-iK_2x)(-iK_2) \right] - \left[ A_2 \cdot \exp(-iK_2x) \cdot A_2 \cdot \exp(iK_2x)(iK_2) \right] \right\} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left( -iK_2|A_2|^2 - iK_2|A_2|^2 \right) = -\frac{2i^2\hbar K_2|A_2|^2}{2m} = \frac{\hbar}{m} \left( K_2|A_2|^2 \right). \end{aligned} \quad (7.56)$$

ანალოგიურად, არე 1-სათვის დაცემული და არეკვლილი ტალღა იქნება:

$$j_1^{(+)} = \frac{\hbar}{m} \left( K_1|A_1|^2 \right), \quad (7.57)$$

$$j_1^{(-)} = -\frac{\hbar}{m} \left( K_1|B_1|^2 \right), \quad (7.58)$$

(7.55)-ის გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$D = \frac{K_2|A_2|^2}{K_1|A_1|^2}, \quad (7.59)$$

$$\text{და} \quad R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}, \quad (7.60)$$

მაშასადამე, განმსჭვალვის  $D$  და არეკვლის  $R$  კოეფიციენტების განსაზღვრის-თვის განმსჭვალვის და არეკვლის ტალღის ამპლიტუდები უნდა გამოისახოს დაცე-მული ტალღის  $A_1$  ამპლიტუდით. ამისთვის გამოვიყენოთ ტალღური ფუნქციის უწყ-ვეტობა და ნაწილაკთა ნაკადის მუდმივობა. ორი ფაზის გამყოფი საზღვარი ძევს  $x = 0$ -ზე და ზემოთ მოცემული ორი პირობით,  $\Psi_1(x)$  და  $\Psi_2(x)$  –სთვის ვპოულობთ:

$$\Psi_1(0) = A_1 + B_1 = \Psi_2(0) = A_2 \quad \text{და} \quad \Psi_1'(0) = iK_1A_1 - iK_1B_1 = \Psi_2'(0) = iK_2A_2 \quad \text{ანუ}$$

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad \text{და} \quad K_1A_1 - K_1B_1 = K_2A_2, \quad \text{აქედან}$$

$$B_1 = \frac{A_1(K_1 - K_2)}{K_1 + K_2} \quad (7.61)$$

$$\text{და } A_2 = A_1 \frac{2K_1}{K_1 + K_2}, \quad (7.62)$$

საიდანაც, (7.59) – (7.62)-ით ვღებულობთ:

$$D = \frac{4K_1K_2}{(K_1 + K_2)^2} \quad (7.63)$$

$$\text{და } R = \frac{(K_1 - K_2)^2}{(K_1 + K_2)^2} \quad (7.64)$$

(7.63) და (7.64)-დან გამოდის, რომ როცა  $E = U_0$  ( $K_2 = 0$ ), არეკვლის კოეფიციენტი  $R = 1$ , ხოლო განმსჭვალვის კოეფიციენტი  $D = 0$ . ნაწილაკთა ენერგიის ზრდით არეკვლის კოეფიციენტი მცირდება და მიისწრაფვის ნულისაკენ, როცა  $E \rightarrow \infty$ .

ნაკადის სიმკვრივის ვექტორის სიდიდე მე-2 არეში, როცა  $x > 0$ , (7.56) და (7.62) ფორმულებით, ტოლია:

$$j_2^{(+)} = \frac{4\hbar}{m} \left[ \frac{K_1^2 K_2 |A_1|^2}{(K_1 + K_2)^2} \right] \quad (7.65)$$

(7.65)-დან ჩანს, რომ როცა  $E > U_0$ , არსებობს პოტენციალური ჯებირიდან ტალღის არეკვლის რაღაც ალბათობა, რომელიც კვანტური მექანიკის შედეგია. ეს შედეგები მკვეთრად განსხვავდება კლასიკურისაგან, რომლის თანახმად, ნაწილაკი  $E > U_0$  ენერგიით მთლიანად, არეკვლის გარეშე გადის მე-2 არეში.

2.  $x > 0$  და  $E < U_0$ , მაშინ (7.52)-ით  $K_2$  ხდება წარმოსახვითი და (7.51) ზოგად ამონახსნში იქნება არა ორი ურთიერთსაწინააღმდეგოდ მიმართული ტალღის კომბინაცია, არამედ ორი მონოტონური ფუნქციის ერთობლიობა:

$$\Psi_2(x) = C_1 \cdot \exp(\beta x) + C_2 \cdot \exp(-\beta x), \quad (7.66)$$

სადაც  $\beta = [2m(U_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ .

ტალღური ფუნქციის სასრულობიდან გამომდინარე,  $C_1 = 0$  და გვაქვს:

$$\Psi_2(x) = C_2 \cdot \exp(-\beta x). \quad (7.67)$$

(7.50) და (7.67) ტალღური ფუნქციების „შეკერვა“ და  $x = 0$  გამყოფ საზღვარზე მათი პირველი წარმოებულების ტოლობა იძლევა:  $\Psi_1(0) = A_1 + B_1 = \Psi_2(0) = C_2$  და  $\Psi_1'(0) = iK_1A_1 - iK_1B_1 = \Psi_2'(0) = -C_2\beta$ , საიდანაც მივიღებთ:

$$B_1 = \frac{A_1(K_1 - i\beta)}{K_1 + i\beta} \quad (7.68)$$

$$C_2 = \frac{2K_1 A_1}{K_1 + i\beta}, \quad (7.69)$$

აქედან ჩანს, რომ ამპლიტუდები  $B_1$  და  $C_2$  კომპლექსური რიცხვებია, ხოლო არეკვლის კოეფიციენტი  $R = |B_1|^2 / |A_1|^2 = (K_1 - i\beta)^2 / (K_1 + i\beta)^2 = 1$ , ანუ ყველა ნაწილაკი პოტენციალური საფეხურიდან სრულად აირეკლება. მიუხედავად ამისა, მე-2 არეში არსებობს განსაზღვრული, თუმცა მცირე, პოტენციალური ჯებირის შიგნით შეღწევის ალბათობა:  $|\Psi_2(x)|^2 = |C_2|^2 \cdot \exp(-2\beta x) = 4E/U_0 \cdot |A_1|^2 \cdot \exp(-2\beta x) \neq 0$ . ნაწილაკი თითქოს შედის პოტენციალური ჯებირის შიგნით და კვლავ უკან ბრუნდება (მე-2 არეში ნაკადი არაა).

#### **7.4.2. ნაწილაკთა გაბნევა მართკუთხა, სასრული სიგანის პოტენციალური ჯებირიდან**

რეალურ ფიზიკურ სიტუაციაში კვანტური ნაწილაკი ყოველთვის მოქმედებს  $U_0$  სიმაღლის და  $W = x_2 - x_1$  სიგანის მართკუთხა პოტენციალურ ჯებირზე (სიმეტრიული ჯებირი, ნახ.7.9 ბ). სამივე არისტვის შრედინგერის განტოლების ამონახსნებს აქვთ სახე:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 \cdot \exp(iK_1 x) + B_1 \cdot \exp(-iK_1 x), \quad x < x_1 \\ \Psi_2 &= A_2 \cdot \exp(K_2 x) + B_2 \cdot \exp(-K_2 x), \quad x_1 < x < x_2 \\ \Psi_3 &= A_3 \cdot \exp(iK_1 x), \quad x > x_2 \end{aligned} \quad (7.70)$$

სადაც  $K_1 = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$  და  $K_2 = [2m(E - U_0)/\hbar^2]^{1/2}$ . (7.70) გამოსახულებაში  $\exp(iK_1 x)$  და  $\exp(-iK_1 x)$  აღწერენ დაცემულ და არეკვლილ ტალღებს, შესაბამისად, ხოლო სიდიდე  $A_3 \cdot \exp(iK_1 x)$  – გასულ ტალღას. მუდმივები  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3$  განისაზღვრებიან ტალღური ფუნქციის უწყვეტობის და საზღვრებზე ( $x = x_1$  და  $x = x_2$ ) მათი პირველი წარმოებულების ტოლობის პირობებიდან (ე.წ. „შეკერვის“ პირობიდან).

ამ შემთხვევაში არეკვლის კოეფიციენტი მიიღებს სახეს:

$$D(E) = \frac{4K_1^2 K_2^2}{A_1^2 (K_1^2 - K_2^2)} \sin^2(WK_2) + 4K_1^2 K_2^2, \quad (7.71)$$

თუ დაცემული ტალღური ფუნქცია ისეა ნორმირებული, რომ  $A_1=1$ , მაშინ განმსჭვალვის კოეფიციენტის მაქსიმუმი  $D(E) = 1$  მიიღება ისეთი ნაწილაკისათვის, რომლის ენერგია ტოლია:

$$E = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 n^2, \quad (7.72)$$

სადაც  $n = 0, 1, 2, \dots$  ენერგიის სხვა მნიშვნელობებისთვის შეიმჩნევა დაცემული ნაკადის ჯებირისგან ნაწილობრივი არეკვლა. მაშასადამე, კვანტური თეორიიდან გამოდის, რომ მაშინაც კი, როცა დაცემული ტალღის ენერგია მეტია პოტენციალური

ჯებირის სიმაღლეზე, მისი არეკვლის კოეფიციენტი შეიძლება განსხვავდებოდეს ნულისაგან, რაზედაც მოხსენებულ იყო §7.4-ში.

განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც  $E$  ენერგიის კვანტური ნაწილაკი მოქმედებს  $W$  სიგანის მართკუთხა პოტენციალურ ჯებირთან, რომლის სიმაღლე მეტია ნაწილაკის ენერგიაზე ( $E < U_0$ ). კლასიკური ნაწილაკი აირეკლება ე. წ. კლასიკურ მობრუნების წერტილში ( $x = x_1$ ). მობრუნების წერტილი – ესაა წერტილი  $x$  კოორდინატით, მასზე მიღწევის შემდეგ ნაწილაკი თავის მოძრაობის საწინააღმდეგოდ იცვლის მიმართულებას და ამ წერტილში მისი კინეტიკური ენერგია უტოლდება ნულს, ანუ სრული ენერგია  $E = U(x)$ . მართკუთხა ჯებირისათვის მობრუნების წერტილები იქნება  $x = x_1$  და  $x = x_2$  (ნახ.7.9 ბ).

ყოველ ამ სამ არეში (ჯებირის წინ, შიგნით და უკან) შრედიგერის განტოლების ამონახსნს აქვს სახე:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= A_1 \cdot \exp(iK_1x) + B_1 \cdot \exp(-iK_1x), \quad x < x_1 \\ \Psi_2 &= A_2 \cdot \exp(\beta x) + B_2 \cdot \exp(-\beta x), \quad x_1 < x < x_2 \\ \Psi_3 &= A_3 \cdot \exp(iK_1x), \quad x > x_2 \end{aligned} \quad (7.73)$$

სადაც  $K_1 = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$  და  $\beta = [2m(U_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ ,  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3$  – მუდმივებია. (7.73) გამოსახულებაში  $A_1 \cdot \exp(iK_1x)$  და  $B_1 \cdot \exp(-iK_1x)$  აღწერენ დაცემულ და არეკვლილ ტალღებს, შესაბამისად, ხოლო  $A_3 \cdot \exp(iK_1x)$  – ჯებირით გასულ ტალღას. (7.73) გამოსახულებების ჩანერაში გათვალისწინებულია, რომ არეში  $x > x_2$  ვრცელდება მხოლოდ გასული ტალღა. ჯებირით გასულ ტალღის არსებობა, როდესაც კვანტური ნაწილაკის ენერგია ნაკლებია ჯებირის სიმაღლეზე, მიუთითებს გვირაბგასვლის ეფექტზე.

(7.55) და (7.73) განტოლებებიდან მივიღებთ:

$$D = \frac{K_1 |A_3|^2}{K_1 |A_1|^2}, \quad R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}, \quad (7.74)$$

$B_1$  და  $A_3$  ამპლიტუდები შეიძლება განისაზღვროს ტალღური ფუნქციების უწყვეტობის და საზღვრებზე მათი პირველი წარმოებულების ტოლობის პირობებიდან. როცა  $x = 0$ , გვაქვს:

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad iK(A_1 - B_1) = \beta(A_2 - B_2), \quad (7.75)$$

ხოლო როცა  $x = W$ , მაშინ გვაქვს:

$$\begin{aligned} A_2 \cdot \exp(\beta W) + B_2 \cdot \exp(-\beta W) &= A_3 \cdot \exp(iK_1 W), \\ \beta[A_2 \cdot \exp(\beta W) - B_2 \cdot \exp(-\beta W)] &= iK_1 A_3 \cdot \exp(iK_1 W) \end{aligned} \quad (7.76)$$

(7.75) და (7.76) განტოლებების ამოხსნის შემდეგ მივიღებთ:

$$D = \frac{4K_1^2 \beta^2}{Z}, \quad R = 1 - \frac{4K_1^2 \beta^2}{Z} \quad (7.77)$$

სადაც  $Z = (K_1^2 + \beta^2)^2 \operatorname{sh}^2(\beta W) + 4K_1^2 \beta^2$

(7.77)-ის ანალიზით დგინდება, რომ სასრული სიგანის და სიმაღლის ჯებირის შემთხვევაში არსებობს ჯებირით ნაწილაკის გავლის ალბათობა, რომელიც კვანტურ-მექანიკური ეფექტი და აბსოლუტურად შეუძლებელია კლასიკურ შემთხვევაში.

ელექტრონული გვირაბგასვლა მყარსხეულოვანი სტრუქტურის საერთო მოვლენაა და დაბალგანზომილებიან სტრუქტურებში გამოირჩევა სპეციფიკური თავისებურებებით. ერთ-ერთი ასეთი თავისებურება დაკავშირებულია მუხტის ელექტრონებით გადატანის დისკრეტულობის ბუნებასთან, რომელმაც მიიღო „ერთელექტრონიანი გვირაბგასვლის“ სახელწოდება. მეორე თავისებურება განისაზღვრება კვანტურჭებთან ნახევარგამტარულ ნანოსტრუქტურაში მუხტის მატარებლის ენერგეტიკული მდგომარეობების დისკრეტულობით. კვანტურ ჭაში მუხტის მატარებლის გვირაბული გასვლისას ერთი განსაზღვრული დონიდან პოტენციალური ჯებირის მეორე ეკვივალენტურ ენერგეტიკულ დონეზე ხდება ელექტრონის ენერგიისა და იმპულსის შენახვა. დონეთა ასეთი თანხვედრა ზრდის გვირაბულ დენს და ცნობილია რეზონანსული გვირაბგასვლის ეფექტით. აგრეთვე, მაგნიტური და არამაგნიტური მასალების შემცველ ნანოსტრუქტურებში გვირაბული ელექტრონების სპინური პოლარიზაციის სახესხვაობანი იძლევიან დამატებით ეფექტებს. ყველა ეს ეფექტი ფართო გამოყენებას პოულობს ნანოელექტრონული ხელსაწყოების შექმნაში.

### საკონტროლო კითხვები:

1. რა ძირითად კვანტურ მოვლენებზეა დამყარებული ნანოელექტრონიკა?
2. რაში მდგომარეობს განუზღვრელობის პრინციპი?
3. რაში მდგომარეობს გვირაბგასვლის ეფექტი სხვადასხვა სახის ჯებირებში?
4. რაში მდგომარეობს სხვადასხვა სახის პოტენციალური ჯებირებიდან ნაწილაკთა გაბნევის ეფექტი?
5. რაში მდგომარეობს კვანტური შეზღუდვა და რამდენი სახისაა?
6. რაში მდგომარეობს კვანტური ბალისტიკური ეფექტი?
7. როგორია ნაწილაკთა გაბნევა სხვადასხვა სახის პოტენციალური ჯებირებიდან?

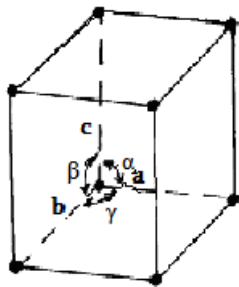


### III. ახალი მასალები

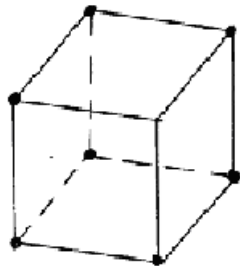
#### 8.1. კრისტალის აგებულება

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

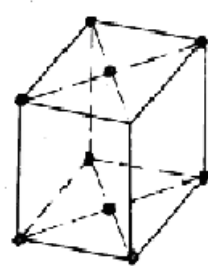
ნანომასალაში ატომები ლაგდება განსაზღვრული წესრიგით, თავისებური პერიოდულობით, რომელიც ქმნის კრისტალურ მესერს. პერიოდულ მესერში შეიძლება ყოველთვის გამოიყოს ელემენტარული უჯრედი, რომლის ტრანსლაციით ერთ მხარეს მაინც, მიიღება კრისტალი. ელემენტარული მესრის შექმნა დამოკიდებულია ატომის ზომაზე და მის გარე შრეში ელექტრონების კონფიგურაციაზე. ელემენტარულ უჯრედში კოორდინატა ღერძების არჩევა ხდება ნიბოების გასწვრივ ან მათ პარალელურად და ამიტომ კოორდინატა ღერძებს შორის  $\alpha$ ,  $\beta$  და  $\gamma$  კუთხეები შეიცვლება სიმეტრიის მიხედვით. კრისტალოგრაფიულ კოორდინატა სისტემის თითოეულ ღერძს გააჩნია სიგრძის საკუთარი მონაკვეთი  $a$ ,  $b$  და  $c$ , რომელსაც ჩამოჭრის ამ ღერძზე ერთეულად არჩეული სიბრტყე. ამგვარად, ექვსი სიდიდე  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  და  $\gamma$  განსაზღვრავს კოორდინატა სისტემის არჩევას და მათ გეომეტრიული მუდმივები ეწოდებათ.



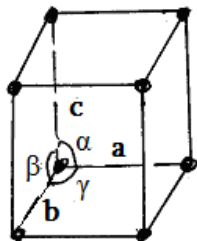
პრიმიტიული  
 $a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma = 90^\circ$   
 1) ტრიკლინური



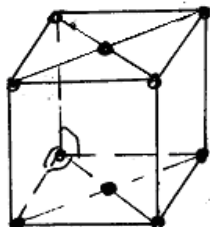
პრიმიტიული  
 $a \neq b \neq c; \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$   
 2) მონოკლინური



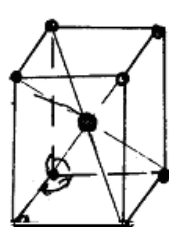
ბაზოცენტრირებული



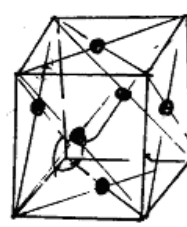
პრიმიტიული



ბაზოცენტრ.

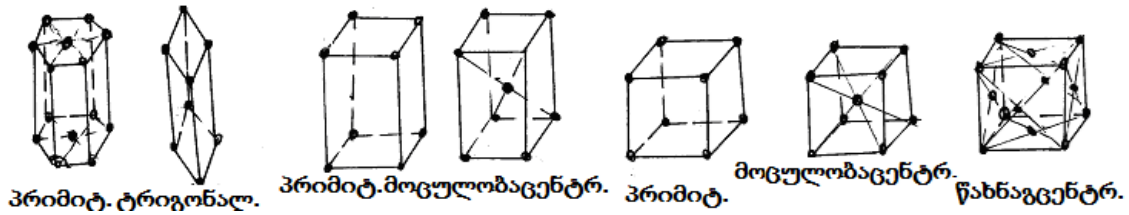


მოცულობაცენტრ.



წახნაგცენტრ.

3) რომბული (ორთორომბული)  $a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



$a=b \neq c; \gamma=120^\circ; \alpha=\beta=90^\circ$  |  $a=b \neq c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$  |  $a=b=c; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$   
 4) ტრეკლიკონალური | 5) ტეტრაგონალური | 6) კუბური

**ნახ.8.1.** ბრავეს მესრის სახესხვაობები

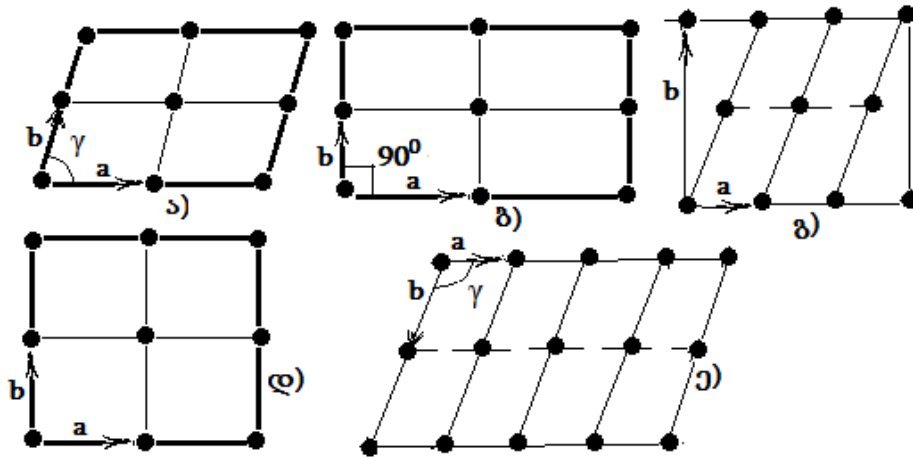
კრისტალები, რომლებიც აღინერებიან ერთი რომელიმე კრისტალური სისტემით, ეკუთვნიან ერთ სინგონიას. ამის მიხედვით, ყველა არსებული კრისტალი ჯგუფდება ექვს სინგონიად და ქმნის 14 ტრანსლაციურ ჯგუფს, რომლებიც მოცემულია ნახ.8.1-ზე. მათი არსებობა პირველად ბრავემ დაამტკიცა და მის პატივსაცემად უწოდეს ბრავეს მესერი

ზოგჯერ ტრიგონალური განიხილება ცალკე მე-7 სინგონიად (კრისტალურ სისტემად). ამ შვიდ ელემენტარულ უჯრედს გააჩნია სხვადასხვა სიმეტრია და ამიტომ მიიღება შვიდი ტრანსლაციური ჯგუფი. a, b და c მონაკვეთებზე აგებულ პარალელეპიპედში კვანძები მოთავსებულია მათ წვეროებში, ამიტომ მათ ეწოდებათ პრიმიტიული. მესერში შეიძლება არსებობდეს ელემენტარული უჯრედი წვეროებში დამატებითი კვანძების გარეშე, როცა სიმეტრია არაა დარღვეული. ასეთი უჯრედი არაა სიმეტრიული და ადგილი ექნება დამატებით ტრანსლაციებს. ისინი კვანძს გადაიტანენ რომელიმე წახნაგის ან უჯრედის ცენტრში. ასეთი მესერია წახნაგცენტრირებული ან მოცულობათცენტრირებული.

ორგანოზომილებიანი მესრის შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი ისე უნდა აირჩეს, რომ კვანძებზე აგებული ელემენტარული პარალელოგრამის სიმეტრია თანხვდებოდეს მესრის კვანძის სიმეტრიას. ამ შემთხვევაში ელემენტარული უჯრედი აიგება a და b მონაკვეთებზე და მათ შორის არსებულ  $\gamma$  კუთხეზე. ბრავეს 5 ორგანოზომილებიანი მესერი მოცემულია ნახ.8.2-ზე. ამ შემთხვევაში არის ბრავეს უჯრედი: ა) ირიბკუთხა პარალელოგრამი, ბ) მართკუთხედი, გ) ცენტრირებული მართკუთხედი, დ) კვადრატი და ე) რომბი, რომლებიც ქმნიან 4 სისტემას – ირიბკუთხას, მართკუთხას, კვადრატულსა და ჰექსაგონალურს.

ზოგჯერ ნივთიერება ქმნის სხვადასხვა კრისტალურ სისტემას, მდგრადს სხვადასხვა წნევისა და ტემპერატურაზე. ნივთიერების ამ თვისებას პოლიმორფიზმი ეწოდება, ხოლო სტრუქტურებს – პოლიმორფული ფორმები ან ნივთიერების ალოტროპული მოდიფიკაცია. ალოტროპია – ერთი ქიმიური ელემენტის არსებობა ორ ან მეტ მარტივ მდგომარეობაში. პოლიმორფიზმი – ერთი შემადგენლობის მყარი სხეულის არსებობა ორ ან მეტ კრისტალურ სტრუქტურად. მოდიფიკაცია, რომელიც მდგრადია ნორმალურ და დაბალ ტემპერატურებზე, აღინიშნება  $\alpha$ -თი, ხოლო მოდი-

ფიკაცია, რომელიც მაღალ ტემპერატურებზეა მდგრადი –  $\beta$ -თი,  $\gamma$ -თი და ა. შ. მასალებისთვის მნიშვნელოვანია მოდიფიკაციის სახის ცოდნა, რადგან მათზეა დამოკიდებული მათი ელექტრო-, მექანიკური-, ოპტიკური- და მაგნიტური თვისებები.



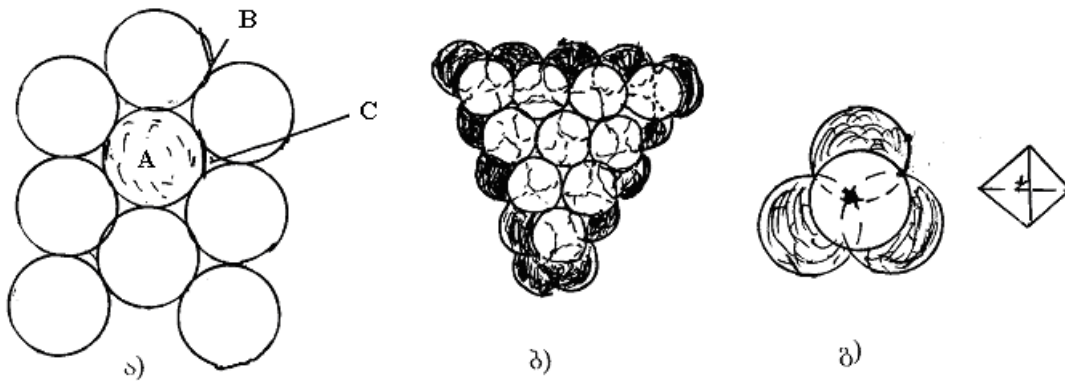
ნახ.8.2. ორგამზომილებიანი ბრავეს მესრის სახესხვაობები

მაგალითად, ნახშირბადის პოლიმორფიზმია გრაფიტი, ალმასი და ფულერენი. სილიციუმის კარბიტს რამდენიმე მოდიფიკაცია აქვს და ა. შ.

## 8.2. ინდივიდუალური ნანონანილაკები და ნანოსისტემები

ნანონანილაკები შედგება  $10^6$  ან უფრო მცირე რაოდენობის ატომებისაგან, ამიტომ მათი თვისებები მკვეთრად განსხვავდება იმ ატომების თვისებებისაგან, რომლებიც ბმაში არიან ნივთიერების მოცულობაში. თვით ნანონანილაკების ზომები, შედგენილი ბმული ატომებით ან მოლეკულებით, არ აღემატება 100 ნმ-ს. ცალკეული ატომები შეერთებისას ქმნიან კლასტერებს, რომელშიც ატომების რიცხვი და, შესაბამისად, მისი ზომაც იცვლება. მაგალითად, 1 ნმ-ის რადიუსიანი კლასტერი შეიცავს 25 ატომს, რომელთა უმეტესი ნაწილი ზედაპირზეა. ბევრი მოლეკულა, განსაკუთრებით ბიოლოგიური, შედგება 25 მოლეკულაზე ნაკლები მოლეკულისაგან. მაგალითად, ჰემ-მოლეკულა ( $\text{FeC}_{34}\text{H}_{32}\text{O}_4\text{N}_4$ ), ადამიანის სისხლის ჰემოგლობინის საფუძველი და უჯრედთან უნებგადის მიმტანი, შედგება 75 ატომისაგან. მათ შორის არ შეიძლება ზუსტი საზღვრის გავლება. ისინი ლაგდებიან, როგორც ცალკეული ატომების ჯგუფები ან მოცულობითი მასალის ნაწილები. როგორც ვიცით, კრიტიკულ ზომაზე ნაკლები ზომის ნანონანილაკები ავლენენ უნიკალურ თვისებებს მოცულობით მასალებთან შედარებით. თუ ნანილაკის ზომა ნაკლებია რაღაც მახასიათებელ, კრიტიკულ ზომასთან შედარებით, მაშინ ის ავლენს ახალ ფიზიკურ და ქიმიურ თვისებებს. შეიძლება მივიღოთ, რომ ნანონანილაკი – ესაა ატომების აგრეგატი, რომელთა ზომებია 1-დან 100 ნმ-მდე; განიხილება, როგორც მოცულობითი მასალის ნაწილი, მაგრამ რაღაც მოვლენის შესაბამის სიგრძეზე ნაკლები ზომის. ატომების ეს აგრეგატები, ანუ კლასტერები, ხასიათდებიან ატომის ჩანყობის სხვადასხვა სიმკვრივით. შე-

იძლება დავუშვათ, რომ ატომები გარკვეული რადიუსის მქონე უკუმშვადი სფეროები. ამის გამო ნივთიერების კრისტალური სტრუქტურა შეიძლება გავიგოთ, თუ წარმოვიდგინოთ, რომ ის მიღებულია ასეთი სფეროების მჭიდროდ დაწყობის შედეგად. ეს სფეროები მიიზიდებიან კულონური, ვან-დერ-ვაალსური ან სხვა რომელიმე ძალებით და ამის გამო ცდილობენ მოთავსდნენ ერთმანეთთან რაც შეიძლება მჭიდროდ, ისე, რომ მათ შორის მანძილს ჰქონდეს მინიმალური მნიშვნელობა, ხოლო თითოეული სფერო გარშემორტყმული იყოს მეზობელი სფეროების მაქსიმალური შესაძლო რიცხვით. სფეროების ასეთ წყობას, რომელიც ხასიათდება პოტენციალური ენერჯის მინიმუმით, სფეროების უმჭიდროესი წყობა ეწოდება, რაც გამოსახულია ნახ. 8.3-ზე. ნახ. 8.3 ა-ზე მოცემულია ერთნაირი რადიუსის სფეროების ფენა უმჭიდროესი წყობის დროს. ნახ. 8.3 ბ-ზე – როცა მეორე ფენის სფეროები თავსდება პირველი ფენის ჩაღრმავებებში. ნახ. 8.3 გ-ზე გამოსახულია, როცა პირველი და მეორე ფენის სფეროების ცენტრები ქმნიან სწორ ტეტრაედრს, რომლის შიგნით მოთავსებულია ტეტრაედრული სიციარიელი. ცხადია, რომ სფეროების უმჭიდროეს წყობას გააჩნია კომპაქტურობის კოეფიციენტის ყველაზე დიდი მნიშვნელობა. კომპაქტურობის კოეფიციენტი არის ერთ ელემენტალურ უჯრედში შემავალი სფეროების მოცულობის შეფარდება უჯრედის სრულ მოცულობასთან, რომელიც სფეროების მოცულობასთან ერთად შეიცავს მათ შორის არსებულ სიციარიელეთა მოცულობებსაც. ვთქვათ, ელემენტალური უჯრედის მოცულობაა  $V$ , მასში მოთავსებულია  $r$ -რადიუსისანი  $n$  სფერო, მაშინ კომპაქტურობის კოეფიციენტი იქნება:  $q=4/3\pi r^3 n/V$ .



**ნახ.8.3.** ტოლრადიუსიანი სფეროების წყობა ერთ ფენად (ა) ორ ფენად (ბ) და ტეტრაედრულად (გ)

ნებისმიერი უმჭიდროესად ჩაწყობილი სტრუქტურისათვის  $q$  ტოლია 0,74-ის, ე. ი. სივრცე ივსება 74%-ით. სიბრტყეზე სფეროების მაქსიმალური ჩალაგება მოცემულია ნახ.8.3ა-ზე. თითოეული სფერო ეხება 6 მეზობელ სფეროს (კოორდინაციული რიცხვია 6) და მის ირგვლივ ქმნის 6 სამკუთხა სიციარიელს. სამკუთხა სიციარიელი ერთდროულად ეკუთვნის სამ სფეროს და თითოეულ სფეროზე მოდის ამ სიციარიელის  $1/3$ . ცენტრში მყოფ სფეროზე მოსული სიციარიელეთა რიცხვი იქნება  $6 \times 1/3 = 2$ , ე.ი. ორჯერ მეტია, ვიდრე ფენაში მყოფი სფეროების რიცხვი.

სფეროების უმჭიდროესი სივრცული წყობა მიიღება აღნიშნული ფენების ერთმანეთზე დადების შედეგად, ისე, რომ ყოველი ზედა სფერო ხვდება ქვედა ფენის სფეროთა შორის სიცარიელეში. რადგანაც სიცარიელების რიცხვი ორჯერ მეტია სფეროების რიცხვზე, ამიტომ წყობა შეიძლება განხორციელდეს: 1) მეორე ფენის სფეროები დაიკავებენ BBB ტიპის ადგილებს, 2) ან დაიკავებენ CCC ტიპის ადგილებს. მეორე ფენისთვის ამას არავითარი პრინციპული მნიშვნელობა არა აქვს. ამ ფენის თითოეული სფერო ეხება ქვედა ფენის სამ სფეროს (ნახ.8.3 ბ) და ზემოდან ხურავს სამკუთხა სიცარიელეს, რომელიც ქვედა ფენის სამი სფეროს მიერაა შექმნილი. ოთხი სფეროს ცენტრების შეერთებით მიიღება სწორი ტეტრაედრი (ნახ.8.3 გ) და წარმოიშობა ტეტრაედრული სიცარიელე. ნახ.8.3 ბ-დან ჩანს, რომ მეორე ფენაში კიდევ არსებობს მეორე გვარის სიცარიელები, როდესაც ქვედა სიცარიელეს თანხვდება ზედა სიცარიელე. ეს სიცარიელე გარშემორტყმულია 6 სფეროთი, რომლის ცენტრების შეერთებით მიიღება ოქტაედრი. ასეთი სახისაა ოქტაედრული სიცარიელე, რომელიც გაცილებით დიდი მოცულობისაა, ვიდრე ტეტრაედრული. დადგენილია, რომ ტეტრაედრული სიცარიელის შიგნით მოთავსებული სფეროს რადიუსი უნდა შეადგენდეს ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,22 ნაწილს, ხოლო ოქტაედრულ სიცარიელეში მოთავსებულისა – 0,41.

მესამე ფენის შევსებისთვის მნიშვნელობა ენიჭება, თუ მესამე ფენის სფეროები დაიკავებენ ABAB, ACAC ან BCBC (ნახ.8.3) მდგომარეობებს. ამ შემთხვევაში სფეროების წყობა ხასიათდება პრიმიტიული ჰექსაგონალური უჯრედის სიმეტრიით. მეოთხე და შემდეგი ფენის წყობისათვის შეიძლება იყოს უფრო რთული – ABCA, BCAC, ACCB და ა.შ.

ერთი და იმავე რადიუსის სფეროებისგან შეიძლება აიგოს მოცულობითად ცენტრირებული კუბური მესერი, რომელიც არაა უმჭიდროესი წყობა და მისი კომპაქტურობის კოეფიციენტი 68%. სფეროს რადიუსი, რომელიც ნიბოსა და ნახნაგის ცენტრის სიცარიელებში ჩაეტევა, არის ძირითადი სფეროს რადიუსის 0,15 და 0,29. გარდა ამისა, უჯრედში 24 სიცარიელეა კოორდინაციული რიცხვით 3 (ტრიედრული სიცარიელე) და სხვა.

აღსანიშნავია, რომ კოორდინაციული რიცხვის შემცირებით მცირდება კომპაქტურობის კოეფიციენტიც. მაგალითად, ჰექსაგონალური და კუბური უმჭიდროესი წყობის დროს კომპაქტურობის კოეფიციენტი 74%-ია, მოცულობითად ცენტრირებულ კუბში კოორდინაციული რიცხვია 8 და კომპაქტურობის კოეფიციენტი – 68%; ჩვეულებრივ კუბში კოორდინაციული რიცხვია 6, ხოლო კომპაქტურობის კოეფიციენტი – 52,3% და ა. შ.

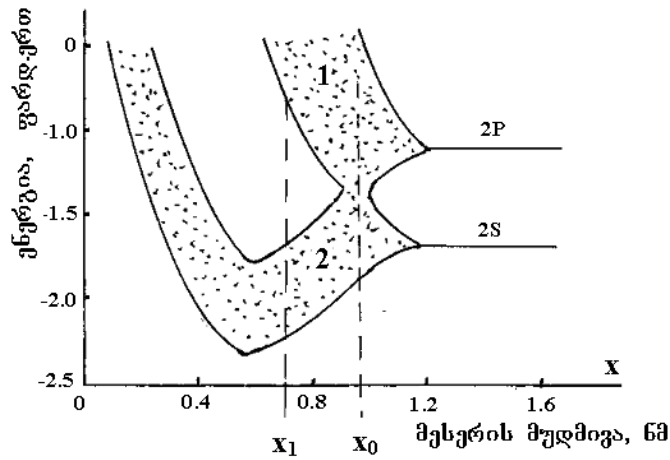
### საკონტროლო კითხვები:

1. როგორ მიიღება ახალი ფაზა და რა არის კომპაქტურობის კოეფიციენტი?
2. როგორია ტრიკლინური, რომბული და ტეტრაგონალური სტრუქტურა?
3. როგორია მონოკლინური, კუბური და ჰექსაგონალური სტრუქტურა?
4. როგორია ორგანზომილებიანი ბრავეს მესერის სახესხვაობები?
5. რა არის კომპაქტურობის კოეფიციენტი?

## 9. ნახშირბადის ნანოსისტემები

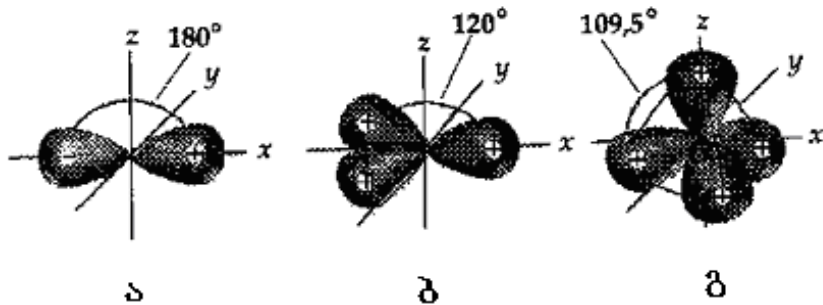
### 9.1. ნახშირბადისეული კავშირები

ნანოტექნოლოგია იძლევა ფართო პერსპექტივებს ახალი მასალების, ელექტრონიკის, ფიზიკის, ქიმიის, ენერგეტიკის და სხვა დარგების სწრაფი განვითარებისათვის. ამ პროცესში გადამწყვეტ როლს თამაშობენ ფულერენი და ნახშირბადის ნანომილაკები, რომლებშიც ნახშირბადისეული კავშირები თვისებებით უნიკალურია და მრავალსახა. ნახშირბადი ყველაზე უფრო გავრცელებული ელემენტია ბუნებაში და ახორციელებს სიცოცხლისათვის საჭირო ძირითად პროცესებს. ნახშირბადის ძირითადი თავისებურებაა – C – C – კავშირების შექმნა, რომელთა ბუნებაზეა დამოკიდებული მისგან შექმნილი მასალის თვისებები და მისი მონაწილეობით მიმდინარე პროცესების ნაირსახეობები. ამ კავშირის ბუნების გაგებისთვის საჭიროა განვიხილოთ ნახშირბადის ატომის ელექტრული სტრუქტურა. ის შეიცავს 6 ელექტრონს, რომლებიც აუგზნებელ მდგომარეობაში არიან უმდაბლეს ენერგეტიკულ დონეებზე  $(1s)^2(2s)^2(2p_x)^1(2p_y)^1(2p_z)^1$ . როცა მოლეკულაში ნახშირბადის ატომი დაკავშირებულია სხვა ატომთან, მისი ელექტრონული სტრუქტურა ასეთია:  $(1s)^2(2s)^1(2p_x)^1(2p_y)^1(2p_z)^1$ . ელექტრული მუხტი s-მდგომარეობაში განაწილებულია სფერული სიმეტრიით და 1s-ელექტრონები ქიმიურ ბმაში არ მონაწილეობენ. დანარჩენი 4 ელექტრონი განაწილებულია  $n=2$  დონეებზე. დიდ მანძილებზე ორი ნახშირბადის ატომი ერთმანეთზე არ მოქმედებს და აქვთ დისკრეტული მდგომარეობები. მიახლოებისას დონეები იხლიჩებიან, ქმნიან ზონებს 2 და 6 ელექტრონული მდგომარეობებით, სულ 8 ელექტრონისათვის. ელექტრული მუხტი p-მდგომარეობაში განაწილებულია ჰანტელის ფორმის ურთიერთმართობ ორბიტალებზე.  $x_0$  მანძილზე მიახლოებისას (ნახ.9.1) ბმაში მონაწილეობს გარე p- ორბიტალის ორ-ორი ელექტრონი, რაც იწვევს ზონის ნახევრად შევსებას და მიიღება მეტალი, ანუ გრაფიტი. ატომების უფრო მეტად მიახლოებისას ( $x_1$  მანძილამდე) ნახშირბადის ატომის გარე s-ორბიტალი და სამი p-ორბიტალი ამყარებს კავშირს სხვა ატომებთან. ამ ორბიტალებს შორის მუხტები ერთმანეთში ირევა, ანუ სხვა სიტყვებით, ბირთვიდან ამ ორბიტებზე მყოფი ელექტრონების დაშორება სხვადასხვაა და ხდება მათი ტალღური ფუნქციების ურთიერთგადაფარვა. ამის გამო ხდება s- და p- მდგომარეობების ტალღური ფუნქციების ჰიბრიდიზაცია. თითოეული ატომიდან ბმაში მონაწილეობს ოთხ-ოთხი ელექტრონი, რაც ავსებს ქვედა სავალენტო ზონას, ხოლო ზედა გამტარებლობის ზონა რჩება ცარიელი. ელექტრონების ასეთი განლაგება იძლევა დიელექტრიკს – მიიღება ალმასი, აკრძალული ენერგეტიკული ზონით 5,3 ევ.



**ნახ.9.1.** ალმასში ენერგეტიკული ზონების შექმნა;  
 1 – გამტარებლობის ზონა; 2 – სავალენტო ზონა

ტალღური ფუნქციების ჰიბრიდიზაცია იწვევს s- და p- მდგომარეობების გადანევას ატომის ბირთვის მიმართ, რასაც ეთანადება შესაბამისი სიდიდის ელექტრული დიპოლური მომენტის წარმოქმნა. მიუხედავად იმისა, რომ ნახშირბადის ატომში 2s- და 2p- დონეების ენერგიებს შორის სხვაობა ძალიან მცირეა, ელექტრული დიპოლური მომენტის სიდიდე ( $7,33 \cdot 10^{-30}$  კლ•მ) საკმაოდ მოცულობითია და მისი გავლენა ნახშირბადის სხვადასხვა ალოტროპიული (კრისტალური სტრუქტურით განსხვავებული მესერი) მდგომარეობის შექმნის ენერგეტიკაზე არსებითია. ეს გამოსახულია ნახ.9.2-ზე, საიდანაც ჩანს, რომ მყარფაზიანი ნახშირბადის სხვადასხვა ალოტროპიული მდგომარეობისთვის დამახასიათებელია სამი ძირითადი ტიპის ქიმიური ბმის წარმოქმნა: sp, sp<sup>2</sup> და sp<sup>3</sup>, კავშირებს შორის კუთხეებით 180°, 120° და 109,5°, შესაბამისად. ამ შემთხვევაში არანორმალური ტალღური ფუნქცია შეიძლება დაინეროს ასეთი სახით:  $\Psi = s + \lambda p$ , სადაც, p აღნიშნავს p<sub>i</sub> ორბიტალების ნარევს, ხოლო λ p- მდგომარეობის s- მდგომარეობაში ფარდობითი შერევის კოეფიციენტი, რომელიცაა, შესაბამისად, 1; 2,5 და 3,5. ასეთი ჰიბრიდიზაციისას p- ორბიტალების ბმის მიმართულებები და მათ შორის კუთხე იცვლება λ-ის სიდიდის ცვლილების მიხედვით.



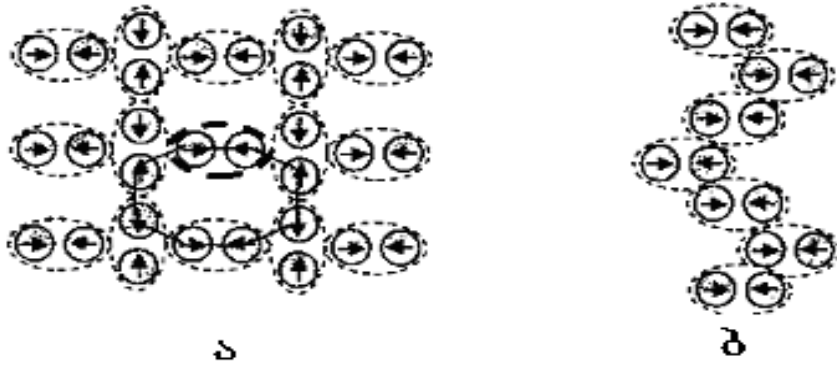
**ნახ.9.2.** ნახშირბადის ქიმიური ბმების ძირითადი ტიპები:  
 კარბინი (ა), გრაფიტი (ბ), ალმასი (გ)

ნახშირბადის ორატომიანი მოლეკულის შექმნისას აღიძვრება მხოლოდ  $\sigma$ - ბმა, კოვალენტური და იონური კავშირის შესაბამისი წილობითი ენერგიებით – 6,83 ევ და 2,2 ევ. სავალენტო ელექტრონების ჰიბრიდიზაციით შექმნილი შედარებით დიდი ელექტრული დიპოლის მომენტის გათვალისწინებით დგინდება, რომ დიპოლები განლაგებულია ურთიერთსანინაალმდეგოდ, რაც ასუსტებს ბმის ენერგიას. წილობითი ენერგიები იცვლება ჯამური ენერგიით და ხდება 6,2 ევ-ის ტოლი, ხოლო ბირთვებს შორის მანძილი – 1,242Å-ის ტოლი.

ნახშირბადის ალოტროპიული სახესხვაობანი დამოკიდებულია ნახშირბადის ორატომიან მოლეკულასთან სხვა ატომების მოქმედების სახეზე. ნახშირბადის სამატომიანი მოლეკულა  $C_3$  მიიღება ორატომიან  $C_2$  მოლეკულასთან ნახშირბადის ატომის მოქმედებით. ურთიერთმოქმედების პოტენციალური ენერგიის მინიმუმი ხორციელდება ატომების უმჭიდროესი წყობისას, ანუ კომპაქტურობის კოეფიციენტის უდიდესი მნიშვნელობისას. ატომების ასეთი განლაგებისას თავს იჩენს ელექტრონ-დიპოლური და დიპოლ-დიპოლური ურთიერთმოქმედება, რაც ზრდის ბმის ენერგიას. მეორე მხრივ, ნახშირბადის ატომის მოქმედება  $C_2$  მოლეკულასთან აერთიანებს ყველა სამ ატომს ერთ საერთო  $C_3$  მოლეკულად. ამის გამო  $C_2$  მოლეკულა განიცდის დეფორმაციას, რაზედაც იხარჯება ენერგია და საბოლოოდ ბმის ენერგია  $C_2$ - $C$  შეადგენს 6,383 ევ-ს, საშუალო მანძილით – 1,584Å. ნახშირბადის ატომისა და ორატომიანი მოლეკულის ურთიერთმოქმედებისას ფორმირდება ალმასის ტიპის სტრუქტურა. მაღალ (დნობის) ტემპერატურაზე ალმასის ტიპის სტრუქტურა იშლება  $C_2$  და  $C$  ატომის ქიმიური ბმის განყვეტის გამო, ხოლო დაბალ ტემპერატურაზე – ორატომიანი მოლეკულის შიგნით ატომთა ბმის განყვეტის შედეგად.

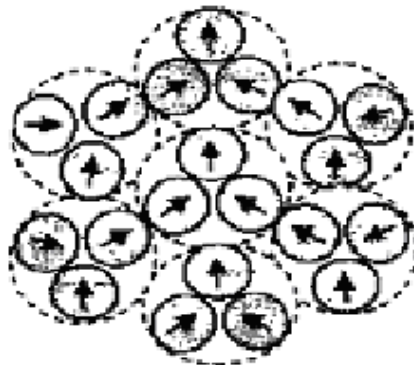
ნახშირბადის მოლეკულების  $C_2$ - $C_2$  ურთიერთმოქმედებისას ყალიბდება ჯვარედინი ან ძაფისებური სტრუქტურა ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ.9.3-ზე.  $C_2$  მოლეკულების ასეთი ურთიერთ განლაგება იწვევს მათ გაჭიმვას და მოლეკულის შიგნით ატომებს შორის მანძილი გაზრდას 1,242Å-დან 1,415Å-მდე. ამ პროცესზე იხარჯება ენერგია და საბოლოო შედეგად ფორმირდება ნახ.9.3 ა)-ზე გამოსახულ შრეში მყოფ  $C_2$  მოლეკულის ბმის ენერგია დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედებით, რომელიც 1,855 ევ-ის ტოლია. შრე წარმოადგენს სწორი ექვსკუთხედებისგან შემდგარ ბრტყელ ბადეს, რომელთა ყოველ კუთხეში მოთავსებულია ნახშირბადის ატომი (ჰექსაგონალური კრისტალური სტრუქტურა). ასეთ სიბრტყეს ეწოდება გრაფენი. გრაფენებს შორის ურთიერთქმედება მოლეკულურია და ბმის ენერგია შეადგენს 0,29 ევ-ს, ხოლო მათ შორის მანძილი – 3,35Å-ს. მცირეოდენი ძვრის დეფორმაცია იწვევს ასეთი მასალის ფენებად დაშლას. ამ თვისებას ამჟღავნებს გრაფიტი. ნახშირს აქვს ძაფისებური სტრუქტურა, რომელიც გამოსახულია ნახ.9.3 ბ)-ზე და ერთმანეთის მიმართ წანაცვლებულია ნახშირბადის ერთი ატომის სიდიდით. ამ ალოტროპიულ მდგომარეობაში  $C_2$  მოლეკულებს შორის ბმის ენერგია ~ 2,3 ევ-ია, ხოლო ძაფებს შორის კოვალენტური ბმებია და მათი სიდიდე ~ 1,21 ევ-ის ტოლია.





**ნახ.9.3.**  $C_2-C_2$  მოლეკულის ურთიერთმოქმედებისას ნივთიერების შექმნის ფრაგმენტი: გრაფიტი (ა); ნახშირი (ბ)

ნახშირბადის  $C_3$  მოლეკულის შრეში განლაგების ხასიათი მოცემულია ნახ. 9.4-ზე. ნახშირბადის შრეში ასეთი წყობა ხასიათდება პოტენციალური ენერჯიის მინიმუმით, კომპაქტურობის კოეფიციენტის მაქსიმალური სიდიდით და სტრუქტურა შეიცავს 12 ახლოს მყოფ ნახშირბადის ატომს. მათ შორის კოვალენტური ბმა განისაზღვრება გაცვლითი ურთიერთმოქმედებით, ანუ  $\sigma$ - ბმით, 11,5 ევ იონიზაციის ენერჯიით. ასეთი სახის განლაგების მოცულობითი სტრუქტურა ქმნის ნახნაცვენტრირებულ კუბურ სტრუქტურას, ნანაცვლებულს ნიბოს ნახევრით და ატომთა შორის 1,54 Å მანძილით. ბმის ენერჯია, ძირითადად, განისაზღვრება დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედებით. ასეთი თვისებებით ხასიათდება ალმასი.

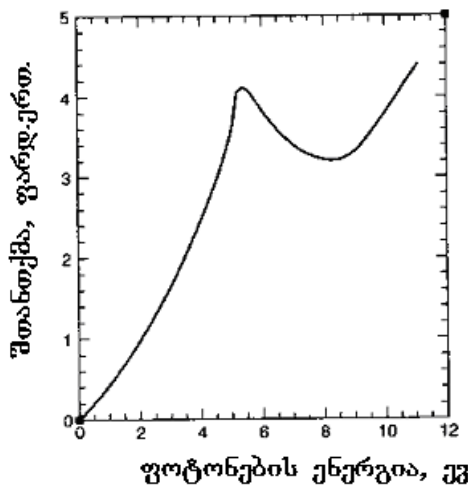


**ნახ.9.4.** ალმასის შრეში  $C_3$  მოლეკულის მდებარეობა დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედებისას

## 9.2. ფულერენი

დიდი ხნის განმავლობაში მიიჩნეოდა, რომ ბუნებაში არსებობდა ნახშირბადის სამი ალოტროპიული ფორმა: კარბინი, გრაფიტი და ალმასი. გასული საუკუნის ბოლოს აღმოჩენილ იქნა უნიკალური თვისებების მქონე, ე. წ. ჩონჩხედისებური ნახშირბადის სტრუქტურა, რომელიც წარმოადგენს ნახშირბადისეულ შეკრულ ღრუ სფერულ გარსს. ის ჰგავს ფეხბურთის ბურთს და შედგება ნახშირბადის 60 ატომისგან.

მისი აღმოჩენა იყო თითქმის შემთხვევითი, ის აღმოჩნდა ვარსკვლავთშორისო სივრცის შესწავლისას. შეისწავლებოდა სინათლის შთანთქმა ვარსკვლავთშორისო არსებული მტვერით, ანუ იქ არსებული მცირე ნაწილაკებით. ცნობილია, რომ ვარსკვლავების სინათლის ინტენსივობა კოსმოსური სივრცის გავლის შემდეგ მცირდება. ესაა ოპტიკური შთანთქმა და ხორციელდება ვარსკვლავებიდან დედამიწისკენ წამოსული სხივის შთანთქმით და გაბნევით მის გზაზე არსებული მტვერის ნაწილაკების მიერ. ეს შთანთქმა შეისწავლება ინტენსივობის გაზომვით მოსული სინათლის სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე, ანუ სხვადასხვა ფერზე. გაზომვების შედეგად აღმოჩნდა, რომ შთანთქმა იზრდება ულტრაიისფერ (უი) დიაპაზონში 220 ნმ (კვანტის ენერგია 5,6 ევ) ტალღის სიგრძესთან ახლოს (ნახ. 9. 5). ამ შთანთქმას ხსნიდნენ ვარსკვლავთშორისო არეში არსებულ ჰიპოთეზურად მცირე გრაფიტის ნაწილაკებზე გაბნევით, რასაც ასტრონომთა შორის ჩვეულებრივ მოვლენად მიიჩნევდნენ და ჰქონდა საერთო აღიარება.



**ნახ.9.5.** ვარსკვლავთშორისო არის გავლით დედამიწაზე მოსული ვარსკვლავის სინათლის ოპტიკური სპექტრი

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

ქიმიკოს-თეორეტიკოსების მიერ 60 ატომისაგან შემდგარი ნახშირბადი, ფორმულით  $C_{60}$ , რამდენიმე წლის წინათ იყო ცნობილი, მაგრამ მისი არსებობა ექსპერიმენტულად არ იყო დამტკიცებული. ამ მოლეკულის ბევრი თვისება გამოთვლილი იყო თეორიულად, მათ შორის იწინასწარმეტყველეს ინ-დიაპაზონის შთანთქმის სახეც. ჰაფმანის და კრატჩმერის მიერ აღმოჩენილი ოთხი შთანთქმის ხაზი კარგად ეთანა-

დებოდა თეორიულად წინასწარმეტყველურ  $C_{60}$  მოლეკულის ამ დიაპაზონში შთანთქმის სპექტრს. შეიძლება თუ არა, ვარსკვლავთა სინათლის შთანთქმა უი-დიაპაზონში გამოწვეული იყოს  $C_{60}$  მოლეკულით? დამტკიცებისთვის მეცნიერები იკვლევდნენ შთანთქმას ნახშირის ელექტროდების რკალით მიღებულ  $^{13}C$ -ის უი-დიაპაზონში და ადარებდნენ  $^{12}C$ -ზე მიღებულ სპექტრებს. ცნობილია, რომ ელემენტი თავის იზოტოპით შეცვლისას ანაცვლებს ინ-სპექტრს მასათა თანაფარდობიდან კვადრატული ფესვით, ანუ  $(13/12)^{1/2} = 1,041$ -ით, ანუ ნანაცვლება უნდა იყოს  $4,1\%$ -ით. ეს ზუსტად ემთხვევა ექსპერიმენტულ მონაცემებს. მაშასადამე, მკვლევრებმა მიიღეს 60-ატომიანი, სფეროს ფორმის ნახშირბადის მოლეკულის არსებობის მყარი მტკიცება. მას-სპექტრომეტრმა დააფიქსირა ნაწილაკები მასური რიცხვით 720, ანუ თითოეული 12 მასის ატომური ერთეულის მქონე 60 ნახშირბადის ატომისაგან შემდგარი ნაწილაკები. ეს გააკეთა ჯგუფმა, რომელშიც შედიოდა ჰ. კროტო, რ. კერლი და რ. სმოლი (H. Kroto, R. Curl, R. Smalley), რომლებიც 1996 წელს დაჯილდოვდნენ ნობელის პრემიით.

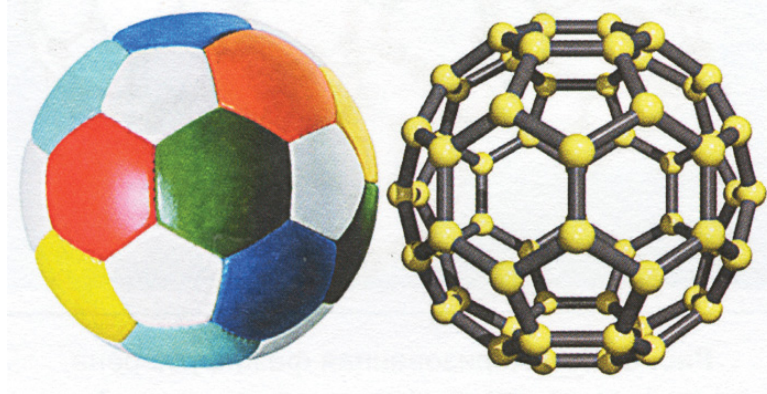
ფულერენებს უწოდებენ ნახშირბადის ატომებისგან შემდგარ მოლეკულათა კლასს, რომლებიც ქმნიან 12 ხუთკუთხედისა და ორი ან უფრო მეტი ექვსკუთხედისაგან ჩაკეტილ გარსს. ფულერინში ნახშირბადის ყოველი ატომი ესაზღვრება სამ მეზობელ ატომს და ატომების საერთო რიცხვი ყოველთვის ლუნია. ყოველი ფულერენი შეიცავს ნახშირბადის  $2(10+n)$  ატომს, სადაც  $n$  ექვსკუთხედების რიცხვია და ყოველთვის მეტია ერთზე.

$C_{60}$  მოლეკულის არქიტექტურა შექმნა რიჩარდ ბაკმინისტერ ფულერენმა (Richard Buckminster Fuller) და მის პატივსაცემად მას ფულერენი უწოდეს. მას აქვს ფეხბურთის ბურთის ფორმა. ის წარმოადგენს ღრუ სფეროს ფორმას, რომელიც შედგება 20 ექვსკუთხა და 12 ხუთკუთხა სიმეტრიულად განლაგებული ნახნაგისგან, სადაც ხუთკუთხედები ერთმანეთს არ ესაზღვრებიან (ნახ.9.6). ყოველი ექვსკუთხედი ესაზღვრება სამ ექვსკუთხედს და სამ ხუთკუთხედს, ხოლო ყოველი ხუთკუთხედი – მხოლოდ სამ ექვსკუთხედს. სფეროს შემქმნელი ნახშირბადის ატომები ერთმანეთს უკავშირდებიან ძლიერი კოვალენტური ბმებით. სფეროს გარსის სისქეა – 0,1 ნმ,  $C_{60}$  მოლეკულის რადიუსი – 0,357 ნმ, C-C ბმის სიგრძე ხუთკუთხედში – 0,143 ნმ, ხოლო ექვსკუთხედში – 0,139 ნმ.

დღესდღეობით ფულერენი ყველაზე უფრო გავრცელებული ტერმინია სამეცნიერო წრეებში: ის ასტრონომებმა აღმოაჩინეს კოსმოსში და მეტეორიტებში, ბიოლოგებმა შეამჩნიეს მისი მსგავსება ცოცხალი სამყაროს ბიოლოგიურ სტრუქტურასთან, გეოლოგებმა ნახეს საბადოებში, მასალათმცოდნეებმა მის ბაზაზე შექმნეს უნიკალური თვისებების მქონე მასალები და ა. შ.

ფულერენის წარმოქმნის დასაწყისში ხდება  $C_3$  მოლეკულასთან ნახშირბადის მოლეკულათა თანდათანობით მიერთება და ჩაკეტილი კონფიგურაციების შექმნა 6, 8, 34 და ა. შ. ატომისგან, კლასტერის ტიპის მდგრადი კონფიგურაციის სახით. ნახშირბადის შემდგომი ატომები მოქმედებენ ასეთ კლასტერზე, რომლის ზომები იზრდება. ამიტომ იონური ბმების წვლილი მცირდება და მხედველობაში მიიღება მხოლოდ ელექტრონ-დიპოლური და დიპოლ-დიპოლური ურთიერთქმედება. ნახშირბადის ატომი თავისი დიპოლით მოქმედებს კლასტერის სამ ატომთან, როგორც ეს ნაჩვენებ-

ბია ნახ.9.3-ზე, ხდება სავალენტო ელექტრონების გაერთიანება და ნახშირბადიანი კავშირების შექმნა ენერგიით 4,664 ევ. ფულერენს აქვს მკაცრად განსაზღვრული „გრაფიტის“ და „ალმასის“ კავშირების წილი, ამიტომ ის იკავებს ადგილს მათ, ანუ  $sp^2$ - $sp^3$ -ს შორის.



**ნახ.9.6.**  $C_{60}$  ფულერენის მოლეკულის სტრუქტურა

რით განსხვავდება ფულერენი უფრო გავრცელებულ და ცნობილ ნახშირბადის სხვა ალოტროპიული ფორმის ნახშირბადებისაგან, რომლებიც ატომური სტრუქტურის მასალის თვისებაზე გავლენის კლასიკური მაგალითებია? მართლაც, გრაფიტი – რბილი, გაუმჭირვალე მასალაა, კარგად ატარებს ელექტრულ დენს, ხოლო გამჭირვალე ალმასი – ყველაზე მკვრივი მინერალია და დიელექტრიკია. გრაფიტის ატომური სტრუქტურა შედგება ნახშირბადის ატომების სუსტკავშირებიანი ჰექსაგონალური ბადის შრეებისაგან, ხოლო ალმასს აქვს კუბური მესერი. შედარებით კარგად შესწავლილი  $C_{60}$ -ის მოლეკულა სფეროიდია ეკვივალენტური ზედაპირით – 0,76მ დიამეტრით, ნახშირბადის ატომების ნახევრად გაჯერებული ნაერთია და ახლოსაა  $sp^2$  ჰიბრიდიზაციასთან. მისი ყველა ატომი ესაზღვრება სამ უახლოეს ატომს, რომელიც მასთან დაკავშირებულია  $\sigma$ -ბმით. ანუ, ყოველი მრავალნახნაგის წვეროდან გამოდის სამი წიბო, ხოლო დარჩენილი სავალენტო ელექტრონი ქმნის დელოკალიზებულ ორმაგ  $\pi$ ბმას. ატომების ასეთი განლაგება ფულერენში მას ხდის უფრო ჭარბი რეაქციული თვისებების მქონეს.

ბუნებაში  $C_{60}$ -ის გარდა კიდევ არსებობენ მაღალსიმეტრიული ენდოფულერენები, ჰიპერფულერენები (გიგანტური ფულერენები), რომლებიც წარმოადგენენ ერთმანეთში ჩადგმულ გარსებს, რომელიც ასე აღინიშნება:  $C_{60}@C_{240}@C_{540}$  და ა.შ. დღესდღეობით მათი ელექტროფიზიკური და ქიმიური თვისებები ბოლომდე არაა შესწავლილი. ყურადღებას იპყრობს შეერთების კიდევ ერთი კლასი, ე. წ. ჰეტეროფულერონი, რომლის სტრუქტურა შეკრულია და ნახშირბადის ატომებზე ნაწილობრივ ჩანაცვლებულია სხვა ატომები. მაგალითად,  $C_{59}B$ ,  $C_{58}N$ ,  $C_{57}B_3$ ,  $C_{58}BN$ ,  $C_{59}M$ , სადაც M მეტალია და ა. შ. ზოგადად,  $C_{60}$  დიელექტრიკია და მისი სტრუქტურის 26% სიცარიელეა. ამ სიცარიელეს ეწოდება ენდოედრალური სიცარიელე და მასში შეიძ-

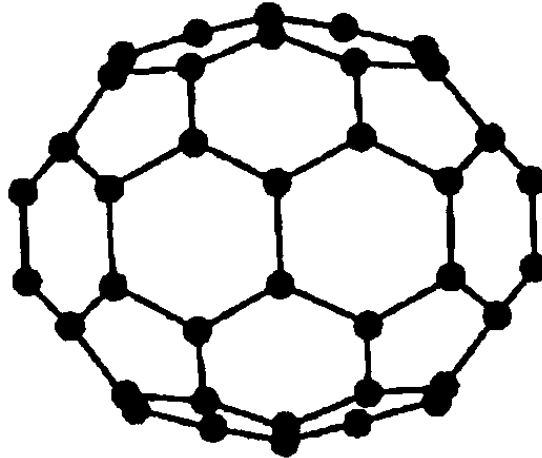
ლება მოთავსდეს სხვა სახის ატომები. ასეთი ნაერთი აღინიშნება  $M_m@C_n$ , სადაც  $M$  ფულერენში ჩანერგილი ატომია,  $m$  და  $n$  მიუთითებს ატომთა რიცხვს ფულერენში და მის გარსზე. ფულერენის უჯრედში მოთავსებული ატომი, პრაქტიკულად, კარგავს თავის ინდივიდუალურ ქიმიურ თვისებებს. ენდომეტალოფულერენში ჩანერგილი იონის ზომა შინაგანი სიციარიელის ზომასთან შედარებით ნაკლებია, ამიტომ მოლეკულის ცენტრიდან იონი წაინაცვლებს და ქმნის იონურ მომენტს. ეს მოვლენა იძლევა საშუალებას, შეიქმნას სეგნეტოელექტრული თვისებების მქონე მასალები. საინტერესოა, აგრეთვე, მათი ლეგირება ტუტემინათა მეტალებით, რომლებიც ადვილად გასცემენ ელექტრონებს. ვაკუუმში  $400^{\circ}\text{C}$  ტემპერატურაზე შესაძლებელია  $C_{60}$ -ის კალიუმით ლეგირება.  $K$  ჯდება ტეტრაედრში, ფულერენის უჯრედში, ის გასცემს ელექტრონს, მიიღება  $C_{60}^{+}$ , სადაც ელექტრონები სუსტად არიან დამაგრებული და მცირე ძაბვაზეც ატარებენ დენს, ანუ ფულერენი ხდება გამტარი. ზოგადად, თუ ჩანერგილი ატომი გადასცემს საკუთარ სავალენტო ელექტრონს,  $C_{60}$ -ის მოლეკულას, მაშინ ასეთ შენაერთს უწოდებენ *ფულერიდს*, თუ არ გადასცემს, – *კლატრატს*.

რიგ ფულერიდებში,  $M_3C_{60}$ -ში, შეიმჩნევა ზეგამტარობა, როცა მათში ჩანაცვლებული იყო ტუტემინათა მეტალები ( $K$ ,  $Na$ ,  $Rb$ ,  $Cs$ ), რომელთა ზეგამტარობაში გადასვლის ტემპერატურაა  $T_c \geq 18\text{ K}$ . ასევე, ზეგამტარ  $CsRuC_{60}$ -ის ზეგამტარობაში გადასვლის ტემპერატურაა  $T_c = 33\text{ K}$ . ზეგამტარობაში გადასვლის ტემპერატურის სიდიდე კრისტალის მესრის პარამეტრის პროპორციულია:  $K_3C_{60}$ -სთვის (მესრის პარამეტრი  $r_0 = 1,424\text{ ნმ}$ )  $T_c = 18\text{ K}$ ,  $Rb_3C_{60}$  ( $r_0 = 1,438\text{ ნმ}$ ) –  $T_c = 30\text{ K}$ ,  $Cs_3C_{60}$  –  $T_c = 40\text{ K}$  ( $r_0 = 1,442\text{ ნმ}$ ). ფულერენში ტუტემინათა მეტალების ატომების ზომებზე მეტი ზომის ჩანერგვით იზრდება მესრის პარამეტრი. მაგალითად,  $CHBr_3-C_{60}$ -ში  $T_c = 117\text{ K}$  ( $r_0 = 1,452\text{ ნმ}$ ),  $CHI_3-C_{60}$ -ში  $T_c = 146\text{ K}$  ( $r_0 = 1,458\text{ ნმ}$ ).

ფულერენი, გარდა ვარსკვლავთმორისო სივრცისა, მცირე რაოდენობით აღმოჩენილ იქნა ბუნებრივ მინერალებში (შუნგიტების საბადოში) და მეტეორიტებში. სახელწოდება „შუნგიტები“ ეწოდა დასახლება შუნგის გამო, სადაც პირველად აღმოაჩინეს ეს მინერალი. შუნგიტების საბადოში ნახშირის შემცველობა მერყეობს 1-დან 70% -მდე, ხოლო მასში ფულერენი  $10^{-3}\%$ -ია. ნახშირი არის 10 ნმ ზომის ბურთულების სახით და არა აქვს კრისტალური სტრუქტურა. დედამიწის პირობებში ფულერენი ოზონისა და უი-გამოსხივების მოქმედებით განიცდის დეგრადაციას, მაგრამ თუ დაცულია რაიმე გარსაცავი ფენით, ის დიდხანს ინარჩუნებს თავის სახეს. ფულერენი გვხვდება ვულკანის ამონაფრქვევში, მეხის დაცემის ადგილში. ძალიან მცირე რაოდენობით ფულერენს შეიცავს ნავთის ლამპის და ბუხრის ქვარტლი. მეტეორიტულ ფულერენებში აღმოჩენილ იქნა გაზი  $^3\text{He}$ , რომელსაც აქვს კოსმოსური წარმოშობა. ამით მეტეორიტ ალენდეს წლოვანება შეფასდა 4,6 მილიარდი წლით. მთვარის გრუნტში ფულერენი არ იქნა აღმოჩენილი.

კიდევ უფრო სხვადასხვაგვარი თვისებები აქვს  $C_{70}$  მოლეკულას, რომლის ფორმა მოგვაგონებს ნესვს ან რაგბის ბურთს და რომელიც გამოსახულია ნახ. 9.7-ზე. შეიძლება მათი მოდიფიცირება  $C_{70}$ -ის გარსის შიგნით ან გარეთ სხვა ატომის ან მოლეკულის მიერთებით.

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



ნახ.9.7.  $C_{70}$  ფულერენის სტრუქტურის აგების სქემა

ფულერენის მსგავსი ნივთიერება არაორგანული ნაერთია სხვადასხვა მოლეკულებისგან შეკრული სფერული ან სხვა ფორმით. იაპონელმა მკვლევრებმა დაადგინეს, რომ, ნახშირბადისგან განსხვავებით, სილიციუმის ატომებს არ შეუძლიათ შექმნან შეკრული სტრუქტურა. ისინი მხოლოდ ვოლფრამის გარშემო წარმოშობენ ჰექსაგონალურ შეკრულ სტრუქტურას. ასეთი სტრუქტურები პოტენციურად გამოსაყენებელია კვანტურ კომპიუტერებში, ქიმიურ კატალიზატორებში და ახალ ზეგამტარებში. მოლეკულური ორბიტალების თეორიით, ნაწინასწარმეტყველებია ბევრი სხვა მოლეკულისგან შემდგარი ჩაკეტილი სტაბილური სტრუქტურის არსებობა. მაგალითად, ორბიტალების ფუნქციონალური სიმკვრივის მეთოდმა აჩვენა, რომ  $N_{20}$  კლასტერი უნდა იყოს ჩაკეტილი, სტაბილური და თანამედროვე ეტაპზე ყველაზე უფრო ენერგომოცულობით ფეთქებად ნივთიერებაზე თითქმის სამჯერ უფრო ძლიერი ფეთქებადი ნივთიერება.

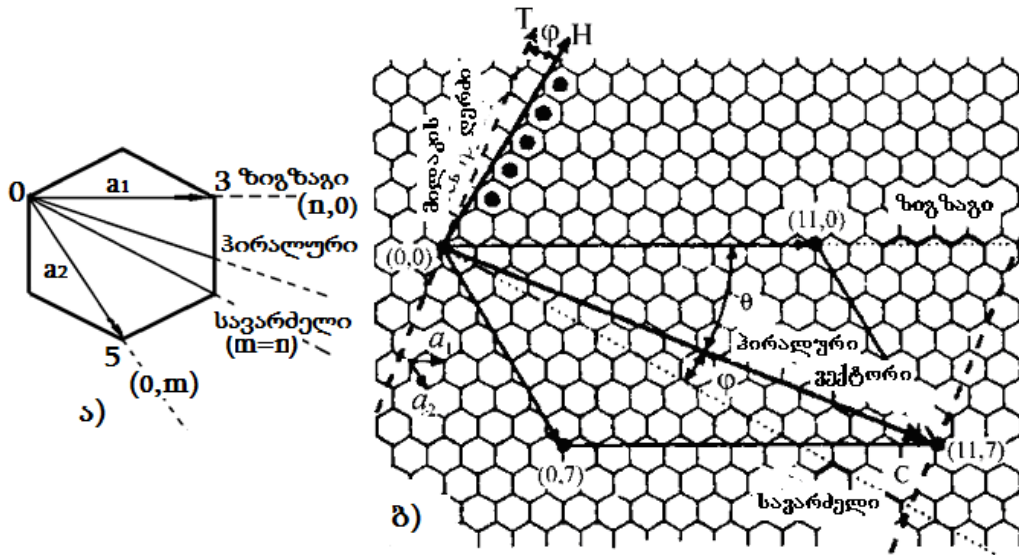
მას-სპექტროსკოპით იქნა დამზერული, გარდა  $C_{60}$  და  $C_{70}$ -ისა,  $C_{20}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{36}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{80}$ ,  $C_{82}$ ,  $C_{84}$ ,  $C_{90}$ ,  $C_{92}$ ,  $C_{98}$ ,  $C_{100}$  ფულერენი. ასეთი სახის ფულერენების არსებობა საინტერესო და პერსპექტიულია იმით, რომ შესაბამისი ლეგირებით შესაძლებელია, მათ ჰქონდეთ ზეგამტარებლობაზე გადასვლის მაღალი ტემპერატურები.

### 9.3. ნახშირბადის ნანომილაკები

სფეროიდულ ნახშირბადიან სტრუქტურებთან ერთად, ფორმირდება ასევე ცილინდრული, წაგრძელებული სტრუქტურაც, ე. წ. ნანომილაკი, რომელიც გამოირჩევა ფიზიკო-ქიმიური თვისებების მრავალფეროვნებით. ეს პირველად მიიღო 1991

ნელს ს. იჯიმიმ (S. Iijima). მისი არსებობა და ზოგიერთი თვისებები აღმოჩენამდე თეორიულად იყო ნაწინასწარმეტყველები. ის შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ცილინდრად შეხვეული გრაფიტის ფურცელი, ანუ გრაფენი – ექვსკუთხედის წვეროებში მოთავსებული ნახშირის ატომებით. ერთშიან ნანომილაკს აქვს 2 ნმ სიდიდის დიამეტრი და 100 მკმ-მდე სიგრძე, რომელიც კვაზიერთგანზომილებიანია და კარგი ნანომავეთულია. ნანომილის ბოლოები შეიძლება იყოს ღია ან დახურული. ნანომილაკის ერთ-ერთი განზომილებითი პარამეტრია „ჰირალობა“, რომელიც მიუთითებს იმ ექვსკუთხედის კოორდინატებს, რომელიც გრაფენის მილად დახვევისას უნდა დაემთხვეს საწყის ექვსკუთხედს. ტერმინი „ჰირალობა“ შემოიღო 1884 წელს ინგლისელმა ფიზიკოსმა უილიამ ტომსონმა (ლორდი კელვინი, Wiliam Thomson), მაგრამ ეს ტერმინი უფრო გავრცელდა 1966 წელს შვეიცარიელი ქიმიკოსის ვლადიმირ პრელოგის მიერ (Vladimir Prelog).

ნანომილი წარმოდგება წყვილი მთელი რიცხვებით  $(n,m)$ , რომელთა ჯამი დიამეტრზე წრეწირის გასწვრივ ექვსკუთხედების რაოდენობის ტოლია. გრაფენის ორიენტაციის კუთხე მილის ღერძის მიმართ განსაზღვრავს ნანომილის გამტარებლობის ხასიათს – მეტალურია თუ ნახევარგამტარული. ნახევარგამტარული მილაკის აკრძალული ზონის სიგანე დამოკიდებულია ჰირალობაზე (შეხვევის კუთხე და მილის დიამეტრი). მეორე მხრივ, მილის დიამეტრი და შეხვევის კუთხე, ან შეხვევის ბიჯი, ორგანზომილებიანი გრაფენის კრისტალოგრაფიული ელემენტალური უჯრედის ანალოგიაა. მისი ტრანსლაციით მილის გასწვრივ მიიღება ნანომილი (ნახ.9.8).



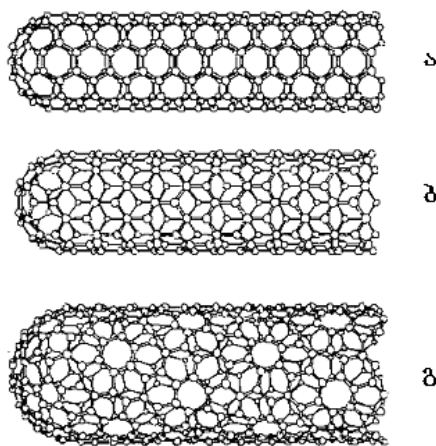
**ნახ.9.8.** გრაფენის ორგანზომილებიანი ელემენტალური უჯრედის ბაზისური ვექტორები (ა;  $a_1$  და  $a_2$ ) და ჰექსაგონალური ბადის ცილინდრად სხვადასხვა

ჰირალურად შეხვევით ნანომილაკის ფორმირების მოდელი: T– მილაკის გასწვრივი ღერძი; H – გრაფენის სიმეტრიის ღერძი;  $\varphi$  – კუთხე მათ შორის;  $\theta$  – ჰირალური კუთხე.

„შეხვევის ანუ ჰირალური ვექტორი“  $C=na_1+ma_2$ , სადაც  $a_1$  და  $a_2$  ჰექსაგონალური უჯრედის ბაზისური ვექტორებია. შეხვევა ისე უნდა მოხდეს, რომ  $C$  ვექტორის ბოლო და სათავე ერთმანეთს დაემთხვეს. თუ გრაფენის ფენის შეხვევისას ჰირალური ვექტორის ბოლოებზე ექვსკუთხედების წყვილი ნანომილის ღერძის მიმართ  $\theta$  კუთხითაა, რომელიც იცვლება  $0$ -დან  $90^\circ$ -მდე, მაშინ ასეთ ერთშიან ნანომილს ეწოდება ჰირალური. თუ ყოველი ექვსკუთხედის ორი მხარე მილის ღერძის პარალელურია, ასეთ ნანომილს ეწოდება აჰირალური „ზიგზაგის“ ტიპის. აჰირალური „სავარძლის“ ტიპის ნანომილს ყოველი ექვსკუთხედის ორი მხარე მილის ღერძის მართობად აქვს მიმართული. აჰირალური „ზიგზაგის“ მიმართულებაზე შეხვევისას  $m=0$  ან  $n=0$ , ხოლო „სავარძელზე“ –  $n=m$  და ჰირალური მიმართულებით შეხვევისას  $m \neq n$ , რაც ჩანს ნახ.9.8.-დან.  $T$  ტრანსლაციის ვექტორი მიმართულია მილის გასწვრივ და  $C$  ვექტორის მართობია.  $C$  ვექტორის სიგრძე ნანომილის ზედაპირის სიგრძეა, რომლის მომჭიმავია ნანომილის დიამეტრიც.  $T$ -სა და  $C$ -ს შორის შეხვევის ფართობი ეთანადება ნანომილაკის ერთეულოვან უბანს, რომლის მრავალჯერადი ტრანსლაციით მიიღება ნანომილი.

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

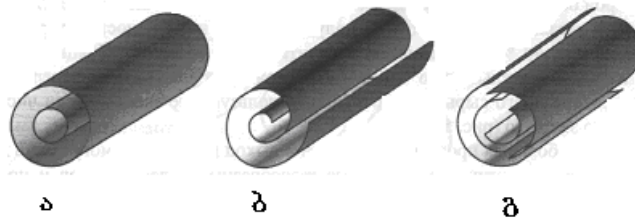
გრაფენის შეხვევა შესაძლებელია მისი სხვადასხვა ღერძის გარშემო, რითაც მიიღება სხვადასხვა ტიპის ნანომილაკი სხვადასხვა მახასიათებლებით. ნახ.9.9-ზე გამოსახულია ასეთი ტიპის სამი შესაძლო ვარიანტი. ნანომილის ზრდის მექანიზმი აქამდე არაა ცნობილი. რადგანაც ერთკედლიანი მილის ზრდისათვის აუცილებელია ნიკელის ან კობალტის კატალიზატორი, შეიძლება ითქვას, რომ კატალიზატორის ატომები, ნანომილის ზრდისას, უერთდებიან ნახშირბადის ატომებს გაუნწყვილებული ბმებით და ალაგებენ მათ მილის კედლის გარშემო.



**ნახ.9.9.** გრაფენის შეხვევის მეთოდზე დამოკიდებული ნახშირბადის ნანომილაკის რამდენიმე შესაძლო სტრუქტურა: სავარძელი (ა), ზიგზაგი (ბ) და ჰირალური (გ)



ძაფისებური ნანაზარდებით შესაძლებელია მდგრადი ორ- და მრავალშრიანი ნახშირბადის ნანომილაკების ჩამოყალიბება. ამ დროს არსებობს სტრუქტურული სახეობის უფრო მეტი ვარიანტი, რომელთაგან სამი გამოსახულია ნახ.910-ზე.



**ნახ.9.10.** მრავალშრიანი ნანომილაკის განივი კვეთის მოდელი: ჩადგმულ-კონცენტრირებული (ა), შეხვეული მთლიანი გრაფენი (ბ), შეხვეული ნაჭრებიანი გრაფენი (გ)

იდეალური (უდეფექტო) მრავალშრიანი ნახშირბადის ნანომილაკები (**მ66ა**) შედგებიან ურთიერთჩადგმული, სხვადასხვა დიამეტრის მქონე კოაქსიალური ცილინდრებისგან, ან არიან სხვადასხვა სახის ხვიარები, აქვთ ხახვისებური სტრუქტურა. ყველა შემთხვევაში, ორშრიანი ნახშირბადის ნანომილაკებში (**ონ6მ**) შრეებს შორის მანძილი (ვან-დერ-ვაალსის ღრეჩო) ახლოსაა გრაფიტის მესრის მუდმივასთან ( $0,34$  ნმ), ხოლო დეფექტურ ონ6მ-ში აღწევს  $0,5$  ნმ-ს. მნ6მ-ის გარე დიამეტრი აღწევს  $5 \div 40$  ნმ-ს, შინაგანი –  $1 \div 4$  ნმ-ს, ხოლო სიგრძე –  $0,5 \div 7$  მკმ-ს. მაგრამ მნ6მ, როგორც წესი, შეიცავს დეფექტების დიდ რაოდენობას, ამიტომ მისი განივიკვეთი ზუსტი კონცენტრირებული წრეები არაა, არამედ „შეხვეული ქალაღის“ ფორმისაა. მართლაც, სინთეზის პირობების მიხედვით, ნანომილაკები შეიძლება ჩამოყალიბდნენ სხვადასხვა ან ერთდროულად რამდენიმე ფორმის. სხვადასხვა ფორმის ნანომილაკები ამჟღავნებენ სრულიად განსხვავებულ ელექტრულ, მაგნიტურ, ოპტიკურ თვისებებს. გრაფენის ფურცლის კონკრეტული სქემით შეხვევისგან დამოკიდებულებით, ნანომილაკი შეიძლება იყოს მეტალი ან ნახევარგამტარი. მაგალითად, თუ  $|m-n|$  სხვაობა ჯერაღია 3-ის, ასეთი ნანომილაკები ამჟღავნებენ მეტალურ თვისებებს. მეტალებია ყველა „სავარძლის“ სახის აჰირალური ნანომილაკები. აგრეთვე ითვლება, რომ ონ6მ-ის გარე შრე, უმეტესად, ნახევარგამტარული მილაკებია, ხოლო შინაგანი შრეები – მეტალური ან ნახევარგამტარული.

ნახშირბადის მოლეკულების  $C_3-C_2$  ურთიერთმოქმედებისას, რომელთა შორის მანძილი  $2,664 \text{ \AA}$ -ია, ფორმირდება ნანომილაკის სტრუქტურა.  $C_3$ -ის გარშემო ლადებებიან  $C_2$  მოლეკულები, რომელთა მიერ შეკრული ჯაჭვი ქმნის შეკრული სტრუქტურის სისტემას. ასეთი სტრუქტურის შიგნით რჩება სიცარიელე, რომლის ზომამ შეიძლება შეადგინოს რამდენიმე ათეული ნმ.  $C_3-C_2$ -ს შორის ელექტრულ-დოპოლური და დიპოლურ-დიპოლური ურთიერთქმედების შედეგად, ქიმიური ბმის სიდიდე  $2,226$  ევ-ია.

ფულერენი და ნანომილაკი ურთიერთრეაგირებენ და ფორმირდება ახალი უნიკალური სახის სტრუქტურა – ნანომილაკები, რომელთა შიგნით იმყოფება ფულერენ-

ნი. პირველი ასეთი სტრუქტურა დამზერულ იქნა 1998 წელს, გრაფიტის ლაზერით აორთქლებით მიღებულ სტრუქტურაზე კატალიზატორის გამოყენებისას. მაღალ-გარჩევისუნარიანი ელექტრონული მიკროსკოპიის მეშვეობით შეამჩნიეს, რომ ნანომილაკში ზოგან ფულერენი განლაგებულია რეგულარულად, ხოლო ცალკეულ სექციებში არის მათი მცირე დაგროვება (ორი, სამი) ან შეერთებული არიან, ნაგრძელების სახით, რამდენიმე ერთად. ასეთ ახალ ნანომილაკებს უწოდეს ნახშირბადული პიპოდები (ნპ) და აღინიშნება  $C_{60}@nm$ -ით ( $C_{60}$  ფულერენი ნანომილის შიგნით).

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

პიპოდები არაჩვეულებრივები არიან არა მხოლოდ თავიანთი ფორმით, არამედ თვისებებითაც. გახურებისას ისინი განიცდიან არაჩვეულებრივ გარდაქმნებს. მაგალითად,  $800^{\circ}C$  ტემპერატურამდე გახურებისას  $C_{60}@nm$  სტრუქტურა არ იცვლება, უფრო მაღლა გახურებისას ორი მეზობელი ფულერენი ერთმანეთს ეკვრის, მიიღება დიმერი, ტრიმერი და შემდეგ გადაიზრდება ნანომილაკიდან ნაგრძელებულ ნანონისკარტად, დაბოლოს, ცილინდრული ფორმის ფრაგმენტად.  $1200^{\circ}C$  ტემპერატურის შემდეგ, ცალკეული  $C_{60}$  ფულერენები პრაქტიკულად მთლიანად ქრებიან, ხოლო პიპოდი გარდაიქმნება ორ ერთმანეთში ჩადგმულ **ონნმ-ად**. ამ დროს ფულერენისგან შექმნილი შინაგანი მილის დიამეტრი მთლიანად კონტროლდება გარე მილით.

ეს მოვლენა მიიღება პიპოდების არა მარტო გახურებით, არამედ მათი ლაზერული დასხივებით (მილის ფოტოპოლიმერიზაცია), ელექტრონული ნაკადის მოქმედებით კატალიზატორის არსებობისას (მაგალითად, კალიუმის) და ა. შ. უნდა აღინიშოს, რომ პიპოდებში ფულერენის გარდაქმნები ხორციელდება მხოლოდ მილაკის შიგნით, რომელიც წარმოადგენს უნიკალურ ნანორეაქტორს. სრულიად შესაძლებელია, პიპოდებში ამ პროცესების შემდგომმა კვლევებმა გამოავლინოს მათი გამოყენების ფართო პერსპექტივები. მაგალითად, დამზადდეს კოაქსიალური ნანოსადენი – იზოლირებული გარსის შიგნით გამტარი. ასეთი გარსი შეიძლება იყოს ბორის ნიტრიდი BN, რომელიც კარგი იზოლატორია; მასში შევიდეს ფულერენი, ე.ი. შეიქმნას სტრუქტურა  $C_{60}@BN$ , შემდეგ გავახუროთ ან დავასხივოთ. შედაგად შეიქმნება იზოლატორ BN-ის მილში გაზრდილი მეორე – ნახშირბადის გამტარი მილი.

პიპოდები – ეს პერსპექტიული მასალებია მიკრო- და ნანოტექნიკაში ნანოდიოდების, ტრანზისტორების, მახსოვრობის ელემენტების, ლოგიკური სქემების, ნყალბადის აკუმულატორების და სხვა ხელსაწყოთა დასამზადებლად.

მეცნიერებმა შექმნეს ნანოსტრუქტურის ახალი სახე – ნანოკვირტი, რომელიც ერთფენიან ნანომილაკზე გარედან მიკრულია ფულერენებით, ისე, როგორც ხის ტოტზე განლაგებული კვირტები. ამ ფულერენების უმეტესობაა კლასტერები  $C_{42}$  და  $C_{60}$ , აგრეთვე დარეგისტრირდა  $C_{20}$ .

ნანოკვირტის სინთეზის დადებითი და გადამწყვეტი ფაქტორებია მისი მიღება ოთახის ტემპერატურაზე, ატმოსფერული წნევისას, ნებისმიერ ქვესაფენზე და ატმოსფეროში წყლის ორთქლის –  $H_2O$ -ის და ნახშირორჟანგის გაზის –  $CO_2$ -ის არსებობა. მიღების პირობების ოპტიმიზაციამ შესაძლებელი გახადა ნანომილზე ისეთი ფულერენის მიღება, რომლის სიმკვრივე 1 ფულერენი/ნმ-ზე მეტია. ფულერენები ეკვირვან ნანომილაკს ძალიან მყარად: არ წაინაცვლებენ ელექტრომიკროსკოპის ნემსის და ელექტრონული კონის მოქმედებით, არ სცილდებიან  $7000^{\circ}C$  ტემპერატურამდე გახურებისას და არ იხსნებიან ორგანულ გამხსნელებში, რაც მიუთითებს ნანომილაკთან მათ კოვალენტურ კავშირზე.

ნანოკვირტებს სამჯერ ნაკლები ძაბვისას აქვს ათჯერ მეტი ემისიური დენები, ვიდრე სწორზედაპირიან ერთფენიან ნანომილაკს. ეს იძლევა საშუალებას, ნანოკვირტები გამოყენებულ იქნან ემისიურ კათოდებში, დამამახსოვრებელ მოწყობილობებში, დეკოდერებში და ა. შ.

2004 წელს მეცნიერებმა შექმნეს ნახშირბადის კიდეც ერთი ახალი ფორმა – ფორიანი მყარი მასა, ძალიან მსუბუქი და მაგნიტის მიერ კარგად მიმზიდველი. ეს ნივთიერება მიღებულ იქნა ნახშირბადის სამიზნის ლაზერით ბომბარდირების მეთოდით. ლაზერის სიხშირე შეადგენდა  $10000$  ჰც-ს, რითაც სამიზნე გახურდა თითქმის  $10000^{\circ}C$  ტემპერატურამდე. მიღებული მასალის სტრუქტურას ეწოდა ნანოქაფი და მას მიიჩნევენ ნახშირბადის მეხუთე ფორმად – გრაფიტის, ალმასის, ფულერენებისა და ნანომილაკების შემდეგ. ნანოქაფი ჰგავს ჭვარტლს და აქვს ძალიან მცირე სიმკვრივე.

ნანოქაფის ერთ-ერთი განსაკუთრებული თვისებაა მაგნიტის მიერ მიზიდვა, როცა ნახშირბადი არამაგნიტური მასალაა. ეს თვისება და ის, რომ კარგად შთანთქავს ინფრანითელ სხივებს, ნანოქაფს ხდის ფართოდ გამოყენებად ნივთიერებად მედიცინაში. კერძოდ, ნანოქაფის მიკროსკოპული რაოდენობით სისხლსადენში შემვებით შესაძლებელია წვრილ კაპილარებში სისხლის მოძრაობის შესწავლა მაგნიტურ-რეზონანსული ტომოგრაფიით. სიმსივნეში ნანოქაფის შეყვანისას მას შეუძლია მთლიანად მოსპოს სიმსივნე იმის ხარჯზე, რომ ინფრანითელი სხივის დასხივებით ნანოქაფი ბევრად უფრო მეტად გახურდება, ვიდრე მეზობელი ჯანმრთელი ქსოვილი.

### საკონტროლო კითხვები:

1. როგორი ბმებია გრაფიტის, ნახშირის და ალმასის მოლეკულათა შორის?
2. რა არის ფულერენი და როგორ აღმოაჩინეს?
3. როგორია ფულერენის და მის სახესხვაობათა ზოგადი სტრუქტურა?
4. რა არის ჰილარობა და როგორი სახის ნანომილები ფორმირდებიან?
5. რა არის საბაზისო ვექტორები და როგორ არიან განლაგებულნი ექვსკუთხედში?
6. როგორ მიიღება „ზიგზაგის“ და „სავარძელის“ სტრუქტურები და როგორია მათი კოორდინატები?
7. სხვადასხვა ჰილარობით როგორი გამტარებლობის ნანომილაკები მიიღება?

#### 9.4. ფულერენის და ნანომილაკის მიღება.

ნანოტექნოლოგიის ერთ-ერთი მთავარი მიმართულება და ამოცანაა ნახშირბადის ნანომილაკების სინთეზი, მათი თვისებების კვლევა და პრაქტიკული გამოყენება. მათ მიმართ ინტერესი ორმხრივია: პირველი – ფუნდამენტური ასპექტით, რომ მინიატიურული ზომების ნანომილაკებს აქვთ უნიკალური ფიზიკო-ქიმიური თვისებები და მეორე – ამ თვისებების გამო აქვთ ფართო გამოყენებითი შესაძლებლობები ახალი ტიპის მასალებში და მონყობილობებში. ნანომილაკების ელექტრული თვისებები, როგორცაა მატარებლების კონცენტრაცია და ძვრადობა, აკრძალული ზონის სიგანე, გამტარებლობა და ა. შ., განისაზღვრება მისი გეომეტრიით, რომლის ძირითადი პარამეტრია ჰირალობა, ანუ გრაფენის ფურცლის კუთხის ორიენტაცია ნანომილაკის ღერძის მიმართ. მაშასადამე, ნანომილაკი წარმოადგენს მინიატიურული ობიექტების განსაკუთრებულ კლასს, ელექტრული თვისებების ვარირების ფართო დიაპაზონით და ისინი განიხილებიან ნანოელექტრონიკის მომავალ ელემენტებად.

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

ნახშირბადის სხვადასხვა ალოტროპიული მდგომარეობის მიღებისას ნახშირბადის გაზურ გარემოში, მაღალი ტემპერატურისა და სანყისი პროდუქტების დიდი კონცენტრაციის პირობებში, რეაქცია მიმდინარეობს საკმაოდ ინტენსიურად. ნახშირბადის ატომების მაღალი კონცენტრაციის მიღება შესაძლებელია გრაფიტის სუბლიმაციით მასზე მძლავრი სითბური ან პლაზმური ნაკადის, მზის სხივის ან ლაზერის მოქმედებით. გრაფიტის ფენებს შორის ბმის ენერგია 0,29 ევ-ს შეადგენს და მის გასაწყვეტად საჭიროა ~3500K ტემპერატურა, რომელიც ახლოსაა გრაფიტის სუბლიმაციის ტემპერატურასთან (~4000K). ნახშირბადის სხვადასხვა ალოტროპიულ მდგომარეობაში გადაყვანის რეაქციისთვის საჭიროა სუბლიმაციის ტემპერატურაზე მეტი ტემპერატურა და მხოლოდ ნახშირბადის ატომების გარემო, რათა ისინი მინარევულ ატომებთან არ შევიდნენ რეაქციაში და არ დაეფინონ მინარევული სახით ქვესაფენზე. გარდა ამისა, გრაფიტის მაღალ ტემპერატურაზე გახურებისას არ უნდა ხდებოდეს ამ გარემოს იონიზაცია, ანუ ტემპერატურის წყაროს გარემო არ უნდა ართმევდეს დამატებით ენერგიას. ასეთ გარემოდ აღებულია ჰელიუმი, რომელსაც აქვს მაღალი იონიზაციის ენერგია და მაღალ ტემპერატურაზე არ იონიზირდება.

განვიხილოთ ფულერენების და ნახშირბადის ნანომილაკების მიღების ყველაზე გავრცელებული მეთოდები.

### 9.4.1. გრაფიტის ელექტრორკალური გაფრქვევა

ამ მეთოდის არსი, რომელიც შეიმუშავა ვ. კრეჩმერმა, ასეთია: ინერტული გაზით სავსე ხუფში, გრაფიტის ელექტროდებს შორის ანთებულია გაზის ატომების იონიზაციით შექმნილი რკალური განმუხტვა. ხუფის კედლების და კათოდის გაცეცება ხდება წყლით ან თხიერი აზოტით.

100ა რკალის დენის ძალაზე, ატმოსფერულის უფრო დაბალ წნევაზე და ელექტროდებს შორის 25 ÷ 35 ვ ძაბვაზე ელექტროდებს შორის წარმოქმნილი პლაზმა იძლევა 4000K ტემპერატურას. ასეთ მაღალ ტემპერატურაზე ანოდის გრაფიტის ზედაპირი ინტენსიურად ორთქლდება. რკალის ზონასა და გარე ატმოსფეროს შორის ტემპერატურის მკვეთრი დაცემის შედეგად ნახშირბადის ატომები პლაზმის მაღალი ტემპერატურის არიდან გადიან უფრო ცივ არეში და კონდენსირდებიან ხუფის კედლებზე, კათოდის ზედაპირსა ან ცივ ქვესაფენზე.

კონდენსირებული ფენის ელექტრომიკროსკოპული დაკვირვებისას შეიძლება დამზერებელი იქნას, ჭვარტლთან ერთად, სტრუქტურები: ფულერენი და ნანომილები. ფენის ნაწილი, რომელიც შედგება გრაფიტის, ჭვარტლისა და ფულერენისაგან, კონდენსირდება ხუფის ცივ კედლებზე, ხოლო ნაწილი, შემდგარი გრაფიტისა და ნანომილისაგან, – კათოდის ზედაპირზე. ამიტომ, თუ რა მასალაა მისაღები, ფულერენი თუ ნანომილი, ქვესაფენი მოთავსდება შესაბამის ადგილზე.

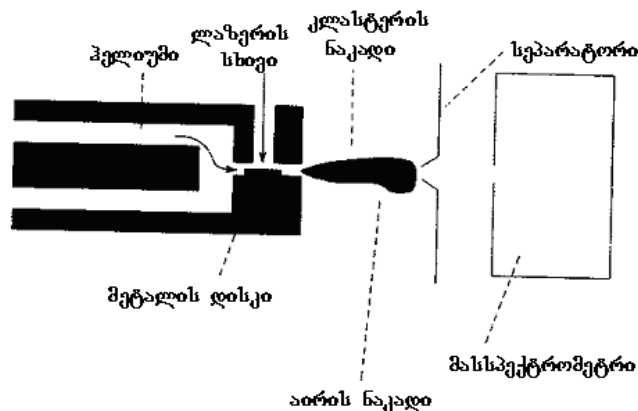
ერთშრიანი ნანომილის მიღებისთვის დადებითი ელექტროდის ცენტრალურ ნაწილში, კატალიზატორის სახით, ათავსებენ დამატებით მცირე რაოდენობის კობალტს, ნიკელს ან რკინას. კატალიზატორის გარეშე მიიღება მრავალშრიანი, ანუ ერთმანეთში ჩადგმული ნანომილები. რკალური განმუხტვის მეთოდით შესაძლებელია 1 ÷ 5 ნმ-ისა და 1 მკმ სიგრძის ერთშრიანი ნანომილაკის მიღება.

### 9.4.2. გრაფიტის ლაზერული აორთქლება

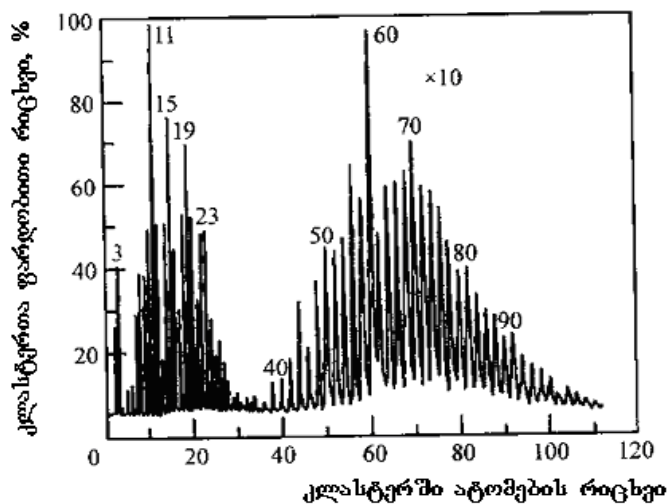
გრაფიტის გახურება რკალური განმუხტვით ჰელიუმის ატმოსფეროში სრულად აკმაყოფილებს ნახშირბადის სხვადასხვა ალოტროპიული მდგომარეობების მიღების მოთხოვნებს. მაგრამ ეს პროცესი ხასიათდება მიღებული პროდუქტის მცირე გამოსავლიანობით, ამიტომ გრაფიტის გასახურებლად გამოიყენება ლაზერი, ენერჯის ნაკადით  $10^{12}$  ვტ/მ<sup>2</sup> და 1,6მმ ფოკუსირებული სხივის დიამეტრით, რომელიც იძლევა 30000K ტემპერატურას. ამ დროს გამოსავლიანობა 90%-ია. ასეთი დანადგარის სქემა მოცემულია ნახ.9.11-ზე, რომელიც პირველად შექმნა რ. სმოლიმ.

მაღალენერგეტიკული და დიდი ინტენსივობის ლაზერის სხივით ხდება გრაფიტის აორთქლება, გაზური ჰელიუმის ნაკადი წარიტაცებს აორთქლებული ნახშირბადის მცირე ნაწილაკებს მცირენახვრეტიან არეში, სადაც ჰელიუმი ფართოვდება, ცივდება ნაკადთან ერთად და კონდენსირდება მცირეატომიან კლასტერებად. შემდეგ ნაკადი გადის კალორიმეტრით მასს-სპექტრომეტრში, სადაც იზომება მოლეკულის ან კლასტერის მასა. კონდენსირებული ფენა, გრაფიტის ნანონაწილაკებთან ერთად, შეიცავს ფულერენსა და 10 ÷ 20 ნმ დიამეტრის და 100 მკმ სიგრძის ნანომი-

ლაკს. ნახ.9.12-ზე გამოსახულია მასს-სპექტრი, ზემოთ აღნიშნული ექსპერიმენტით მიღებული ნახშირბადის სხვადასხვა ატომთა რაოდენობის კლასტერებისათვის.



ნახ.9.11. მეტალის ზედაპირიდან ლაზერული აორთქლებით ნანონანილაკის მიღების დანადგარის სქემა



ნახ.9.12. გრაფიტის ლაზერული აორთქლებით მიღებული ნახშირბადის კლასტერის მას-სპექტრი

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

### 9.4.3. ნახშირბადშემცველი ორთქლისგან ქიმიური დაფენა

ნახშირბადის ნანომილაკის მიღების ყველაზე უფრო პრაქტიკულ და ფართოდ გავრცელებულ მეთოდს წარმოადგენს ცხელ მეტალურ კატალიზატორის ზედაპირ-

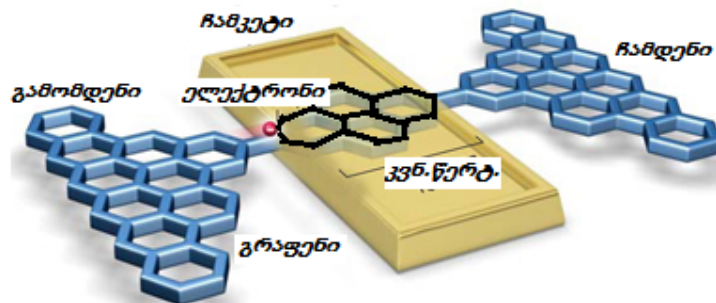
ზე ნახშირბადმემცველი გაზისგან თერმოქიმიური დაფენის მეთოდი. ამ მეთოდს აგრეთვე უწოდებენ „ნახშირწყალბადის გაშლის კატალიზურ მეთოდს“.

ნახშირბადმემცველი გაზის ნარევი (ჩვეულებრივ, ნარევი  $C_2H_2$  აცეტილანისა ან  $CH_4$  მეთანისა აზოტთან) გაედინება  $700 \div 1000$  °C ტემპერატურის მქონე ღუმელში მოთავსებულ კვარცის მილში. მილში მოთავსებულია კერამიკის ტიგელი (რეტორტა) მეტალური ფხვნილის კატალიზატორით. ნახშირწყალბადის გაშლა, მიმდინარე გაზის ატომების და მეტალის ატომების ქიმიური რეაქციის შედეგად, იძლევა კატალიზატორის ზედაპირზე ფულერენისა და ნანომილაკის წარმოქმნას შინაგანი დიამეტრით 10 ნმ-მდე და სიგრძით რამდენიმე ათეულ მკმ-მდე. ნანომილაკის გეომეტრიული პარამეტრები მნიშვნელოვნადაა დამოკიდებული ქიმიური პროცესების მიმდინარეობის პირობებზე (დროზე, ტემპერატურაზე, წნევაზე და ბუფერული გაზის სახეზე და სხვა), აგრეთვე, კატალიზატორის სახესა და მის დისპერსიულობის ხარისხზე.

### 9.5. ფულერენის და ნანომილაკის თვისებები და გამოყენება

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

გრაფენის გამოყენების ერთ-ერთი საინტერესო უბანია მისი გამოყენება ერთელექტრონიან ტრანზისტორში (ნახ.9.13), სადაც გამომდენი, არხი და ჩამდენი წარმოადგენს გრაფენს.



ნახ.9.13. ერთელექტრონიან ტრანზისტორი

ნახშირბადის ნანომილაკების ერთ-ერთი საინტერესო თვისებაა, რომ, მის დიამეტრსა და ჰირალობაზე დამოკიდებულებით, ის შეიძლება იყოს მეტალი ან ნახევარგამტარი. ნანომილაკის სინთეზის პროცესში შესაძლებელია, მილაკში შერევის, რაღაც ნაწილი იყოს ნახევარგამტარული თვისებების, ხოლო დანარჩენი – მეტალურის. ჩვეულებრივ, მეტალური თვისებები ახასიათებს სავარძლიან სტრუქტურებს. ნახშირბადის ნანომილაკის ელექტრული თვისებების შესასწავლად იყენებენ მასკანირებულ გვირაბულ მიკროსკოპს (მგმ) ლოკალური ელექტრონული სპექტროსკოპიის

რეჟიმში. დიფერენციალური გამტარებლობის დაბლაზე დამოკიდებულებით დადგინდა, რომ მეტალური გამტარებლობისას სრულდება ომის კანონი, ხოლო ნახევარგამტარულისას განისაზღვრა აკრძალული ზონის სიგანე, რომელიც შეადგენდა 0,7 ევ-ს. დადგინდა, რომ აკრძალული ზონის სიგანე მილაკის დიამეტრის უკუპროპორციულია და დიამეტრის გადიდებით მიისწრაფვის ნულისკენ. ემპირიულად მოცემულია:  $E_g=0,9/d$ , სადაც  $E_g$  აკრძალული ზონის სიგანეა ევ-ში და  $d$  – მილის დიამეტრი ნმ-ში. ითვლება, რომ  $E_g$  იცვლება 0,4-1,0 ევ ინტერვალში. ნახშირბადის მეტალურ ნანომოლაკს აქვს ძალიან დიდი ელექტრული გამტარებლობა. დადგენილია, რომ მას შეუძლია გაათაროს კვადრატულ სანტიმეტრზე მილიარდი ამპერი დენი. შესაბამის პირობებში სპილენძის სადენი დნება გამოყოფილი სითბოს ხარჯზე. ნახშირბადის ნანომოლაკების ასეთი დიდი გამტარებლობა აიხსნება მათში ძალიან მცირე დეფექტების არსებობით, რაზედაც თითქმის არაა გაბნევა, ანუ ელექტრონები არიან ბალისტიკური. ამიტომ დიდი დენი ნანომოლაკს არ ახურებს, როგორც ეს ხდება სპილენძში. ამავე მიზეზით, ისინი არიან კარგი სითბოგამტარებიც. ნანომოლაკი თითქმის ორჯერ მეტად სითბოგამტარია, ვიდრე ალმასი. ყოველივე ეს იძლევა საშუალებას, რომ ნახშირბადის ნანომოლაკები გამოყენებული იყოს სქემებში ელემენტთაშორის მიმყვანებად. ნახევარგამტარებლობის ტიპის ერთშრიან ნახშირბადის ნანომოლაკებში დენის მატარებლების ძვრადობა აღწევს 15000 სმ<sup>2</sup>/ვ.ნმ მნიშვნელობას, რაც მიუღწეველია ჩვეულებრივ ნახევარგამტარებში. დაბალ ტემპერატურაზე ნახშირბადის ნანომოლაკებში შეიმჩნევა დენის საფეხურისებური ზრდა (გამტარებლობის დაკვანტვა) მოდებული ძაბვის მიმართ. გამტარებლობის კვანტია  $G_0=4e^2/h$ , სადაც  $e$  ელექტრონის მუხტია და  $h$  - პლანკის მუდმივა. ამიტომ კვანტური გამტარებლობის კოეფიციენტი შეიძლება იყოს მთელი ან არამთელი, მაგალითად, 0,5 $G_0$ . ეს კვანტური მოვლენა გამოიყენება საინფორმაციო სისტემების ნანოელექტრონულ ხელსაწყოებში. IBM-ის (აშშ) თანამშრომლებმა აღმოაჩინეს, რომ დეფექტიანი ნახშირბადიანი ნანომოლაკები ასხივებენ ინ-სხივებს რამდენიმე რიგით მეტი ინტენსივობით, ვიდრე მასიური ნახევარგამტარები.

პირველივე ცდებმა აჩვენა, რომ ნანომოლაკი ხასიათდება უნიკალური მექანიკური თვისებებით. ნანომოლის გასწვრივ დრეკადობის მოდულის მნიშვნელობა მდებარეობს 1,28-1,8 ტპა ინტერვალში. შედარებისთვის უნდა აღინიშნოს, რომ ფოლადისთვის იუნგის მოდული 0.21 ტპა-ია, რაც ნიშნავს, რომ ნახშირბადის ნანომოლაკის იუნგის მოდული ათჯერ მეტია, ვიდრე ფოლადისა. ეს ნიშნავს, რომ ნახშირბადის ნანომოლი ძნელად უნდა ილუნებოდეს, მაგრამ რადგან მილი ძალიან წვრილია და უდეფექტო, ადვილად ილუნება და არ ტყდება. ამის მიზეზი ისიცაა, რომ ნახშირბადის მილის კედლები შედგება ექვსკუთხედებისაგან, გალუნვისას ის იცვლის თავის ფორმას, მაგრამ არ ირღვევა. ესაა უნიკალური შედეგი იმ ფაქტისა, რომ C-C ბმამ შეიძლება შეიცვალოს ჰიბრიდიზაციის სახე. აგრეთვე, შეცვლის ხარისხი და s-p შერევის კოეფიციენტი დამოკიდებულია გალუნვის სიდიდეზე. ერთშრიანი ნახშირბადის ნანომოლისთვის ზღვრული ძაბვა მექანიკურ გაჭიმვაზე შეადგენს 45 გპა-ს, მაშინ, როცა ფოლადი ირღვევა 2გპა-ზე. მექანიკური მახასიათებლებით მრავალშრიანი ნახშირბადის ნანომოლაკებიც უკეთესია ფოლადზე, მაგრამ ისეთი არაა, როგორც ერთშრიანის მახასიათებლები. მაგალითად, 200 ნმ დიამეტრის მქონე მრავალშრიანი ნანომოლაკის ზღვრუ-



ლი ძაბვაა 7 ვკა და იუნგის მოდული – 0,6 ტპა. უკანასკნელ ხანს ჩაატარეს ასეთი ექსპერიმენტი: ნანომილაკის დეფორმაციისას მასში გაატარეს დენი, კერძოდ, 12 ნმ დიამეტრის და 30 ნმ სიგრძის ნანომილში, სხვადასხვა დეფორმაციისას, გაატარეს 10მგა/მმ<sup>2</sup> სიმკვრივის დენი. ამის შედეგად ნანომილი გახურდა 2000K ტემპერატურამდე და დაიშალა. დარჩენილი ნაწილების ზომები, ნარჩენი დეფორმაციის შემდეგ, დაახლოებით იყო: ნანომილის დიამეტრი – 0.8 ნმ და სიგრძე – 9 ნმ.

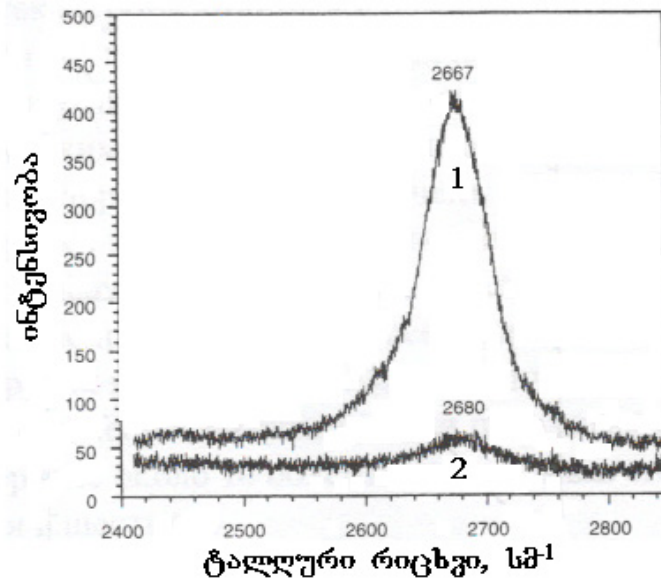
ნახშირბადის ნანომილაკის ლერძის გასწვრივ მცირე ძაბვის მოდებისას ხდება მისგან ელექტრონების ინტენსიური ემისია, რასაც ეწოდება ველითი ემისია. ეს ეფექტი ადვილად დაიმზირება, როცა ორ პარალელურ ფირფიტას შორის, სადაც ერთ-ერთი ნანომილაკია, მოდებულია მცირე ძაბვა. ამ ეფექტის გამოყენება შეიძლება თხელი სიბრტყული დისკლების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

ნახშირბადის ნანომილაკის დიდი ელექტრონული გამტარებლობა მიუთითებს იმაზე, რომ ისინი ცუდად ატარებენ ელექტრომაგნიტურ ტალღებს. ასეთი ნანომასალისგან შექმნილი კომპოზიციური ფირფიტა ელექტრომაგნიტური გამოსხივების კარგი დამცველია, რაც მნიშვნელოვანია კომპიუტერული და ელექტრონული ხელსაწყოების ნარმოებაში, სამხედრო საქმეში.

დიდ წნევაზე ფულერენი ხდება მკვრივი, როგორც ალმასი. მისი მოლეკულა წარმოადგენს იდეალურად სუფთა ნახნაგცენტრირებულ კუბურ მესერში თავისუფლად მოძრავ ბირთვებს. ამ თვისების გამო ფულერენი შეიძლება იქნას გამოყენებული, როგორც მყარი საპოხი და ცვეთამდეგი ნივთიერება. ამიტომ ნახშირბადის ნანომილაკები გამოიყენება ელექტრონულ მიკროსკოპებში ზონდებად.

ნახშირბადის ნანომილაკები შეიძლება გამოვიყენოთ ლითიუმით მუხტისგადატანის ბატარეებში. გამოთვლებით დადგენილია, რომ მილაკში ნახშირბადის ყოველ ექვს ატომზე შესაძლებელია ლითიუმის ერთი ატომის მოთავსება. ერთ-ერთი საინტერესო შესაძლებლობაა ნახშირბადის ნანომილაკის გამოყენება წყალბადის შესანახად თბოელემენტების კონსტრუირებისას მომავალი ავტომობილების ნარმოებაში ელექტროენერჯის წყაროდ (აკუმულატორად). ნახშირის ნანომილაკის წყალბადით დატუმბვის მარტივი მეთოდი იმაში მდგომარეობს, რომ KOH-ის ხსნარში ერთშრიანი ნანომილაკი ფირფიტის სახით წარმოადგენს კათოდს. ანოდია Ni(OH)<sub>2</sub>. ელექტროლიტის დისოციაციისას მიიღება H<sup>+</sup>, რომელიც მიემართება კათოდისაკენ, ანუ ავსებს ნანომილაკს, რაც კარგად ჩანს ნახ.9.14-ზე. მიღებული მაქსიმალური ტევადობა შეადგენს 1200 მლა•სთ/კგ-ს. ჩვეულებრივ ტყვია-მჟავის აკუმულატორის ელექტროდში ნახშირბადის ნანომილაკის შეყვანით იზრდება მისი მუშაობის დრო.

ეფექტური გამოყენება პოვეს ნახშირბადის ნანომილაკებმა სუპერკონდენსატორებში, რომელიც წარმოადგენს ელექტროლიტში ჩაშვებულ და ერთმანეთისგან მემბრანა-სეპარატორით გამოყოფილ ორი ელექტროდის სისტემას. მათში გამოიყენება ორმაგი ელექტრონული შრის ეფექტი. ნახშირის ნანომილაკებიან სუპერკონდენსატორებში ელექტროდებს შორის მანძილი მცირდება მიკრონიდან ნანომეტრამდე, ფართობი ასეული მ<sup>2</sup>/გ-ია და ამიტომ აქვს ძალიან დიდი ტევადობა ~200 ფ/გ, სიმძლავრის სიმკვრივე – 30 კვტ/კგ-მდე და ენერჯია – 7 ვტ•სთ/კგ.



ნახ.9.14. ნახშირბადის ნანომილის სპექტრი, მიღებული წყალბადში დამუშავებამდე (1) და მასში დამუშავების შემდეგ (2)

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

ნახშირბადის ნანომილაკების გამოყენება შესაძლებელია ბიოლოგიური და სამედიცინო ტექნოლოგიების ინტეგრაციისთვის. ნანომილაკის და ბიომოლეკულის მოდიფიცირების ბიოლოგიური შეთავსების საკითხი, რომელიც სანყის სტადიაშია, სწრაფად ვითარდება. მოდიფიკაცია შესაძლებელია გახსნილი მილაკის შიგნით, ღრუში დეზოქსირიბონუკლეინის მჟავის (დნმ) შეყვანით, რომელსაც შეუძლია C ციტოქრომის ელემენტის ბიომოლეკულის ადსორბციით გადატანა ნანომილაკის ღია ბოლოებზე ან გვერდებზე. მოდიფიცირების საკითხის გადანყვევების შემდეგ შესაძლებელი იქნება ამა თუ იმ ორგანოს უჯრედთან ნახშირბადის ნანომილაკით წამლის საშუალების მიტანა ჯანმრთელი უჯრედის დაუზიანებლად.

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

ლიც უსაფრთხოა ჯანმრთელობისთვის, გამძლეა გარე ფაქტორების მოქმედების მიმართ და ანტიკოროზიულია.

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

### **საკონტროლო კითხვები:**

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

## **10. ელექტრონული მიკროსკოპიის გაზომვის არსი და მეთოდები**

მიკრო- და ნანოზომის ობიექტების შექმნისთვის, ცხადია, უნდა იყოს მასალების ატომური შედგენილობის, ფორმის და სტრუქტურის ნანოდონეზე განსაზღვრის შესაძლებლობა. ფართოდ გავრცელებული ოპტიკური მიკროსკოპიის გარჩევისუნარიანობა, რელიეფ ნესით, განისაზღვრება დასხივებული ხილული სინათლის ტალღის სიგრძით. რადგანაც ყველაზე მოკლე ტალღის დიაპაზონი ეთანადება დაახლოებით 400ნმ-ს და ოპტიკური მიკროსკოპის გარჩევისუნარიანობა შემოფარგლულია მისი ნახევრით, ანუ 200ნმ-ით, ამიტომ აუცილებელია შეიქმნას ისეთი ხელსაწყო, სადაც გამოყენებულ იქნება უფრო მოკლე ტალღის სიგრძეების გამოსხივება, ანუ არა სინათლის გამოსხივების ბუნების წყაროები. ამიტომ, მასთან შედარებით, ელექტრონული ნაკადი უფრო ეფექტურია და გარჩევისუნარიანობა ბევრად მეტი. ნანონაწილაკისთვის „მიკროსკოპიის“ ტერმინის გამოყენება პროცესის არსს სრულად არ ასახავს, უფრო მოხერხებული იქნებოდა ტერმინი „ნანოსკოპია“.

თანამედროვე ეტაპზე არსებობს ნანოსტრუქტურების ანალიზისა და დიაგნოსტიკის მრავალი მეთოდი. ეს მეთოდები უნდა იყოს ნიმუშისთვის არადამრღვევი და ატომური და ელექტრონული სტრუქტურის დიდი სიზუსტით განმსაზღვრელი. ეს მეთოდებია: დიფრაქციული (რენტგენოსტრუქტურული, ელექტრონოგრაფიული); სპექტროსკოპიული (ოფე-ელექტრონული სპექტროსკოპია, ინ-სპექტროსკოპია, მეორადი ელექტრონების მას-სპექტროსკოპია) და რეზონანსული (ელექტრონული პარამაგნიტური, ბირთვული მაგნიტური, ბირთვული გამა-რეზონანსული). ამ მეთოდებით შესაძლებელია განისაზღვროს ნაწილაკთა სტრუქტურული დარღვევების ხარისხი, ზედაპირული ჩანართების არსებობა, ელექტრონების სიმკვრივეთა განაწილება და ა.შ.

ზოგადად მიკროსკოპის ამოცანაა – დამკვირებელს მისცეს მცირე ობიექტების იმ ზომამდე გადიდებული გამოსახულება, რომ შესაძლებელი იყოს ამ დეტალების ფიზიკური მახასიათებლების განსხვავება. მაგალითად, ოპტიკური მიკროსკოპი იყენებს სინათლის ნაკადს და ობიექტის სხვადასხვა უბნებს შორის შთანთქმის, არეკვლის და გარდატეხის კოეფიციენტებს შორის სხვაობას. მისი გარჩევისუნარიანობა, როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, რელეის ოპტიკური ტექნიკის საფუძველზე, განისაზღვრება სინათლის ტალღის სიგრძის ნახევრით. ამიტომ, გარჩევისუნარიანობა, პრაქტიკულად, შემოსაზღვრულია 200ნმ-ით. შექმნილი სიტუაციიდან გამოსავალი ის, რომ შეიქმნას ხელსაწყო, სადაც გამოყენებულ იქნება ტალღური გამოსხივება უფრო მოკლე ტალღის სიგრძით, ანუ გამოსხივება არატალღური ბუნებით.

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

მასკანირებელი ზონდური მიკროსკოპია (**მზმ**) – ზედაპირის ლოკალური თვისებებისა და მორფოლოგიის შესწავლის ყველაზე თანამედროვე მეთოდია, რომელიც გამოირჩევა დიდი გარჩევისუნარიანობით. შექმნილია მასკანირებელი ზონდური მიკროსკოპების მთელი სერია – ხელსაწყოები, რომლებშიც გამოსაკვლევი ზედაპირის სკანირება ხდება სპეციალური ნემს-ზონდით (მთელ ზედაპირზე ნემსის გადაადგილებით განსაზღვრული ბიჯით), შედეგად რეგისტრირდება გვირაბული დენი (გვირაბული მიკროსკოპი). ზონდური მიკროსკოპები არა მარტო გამზომი ხელსაწყოებია, არამედ – ინსტრუმენტებიც, რომელთა დახმარებით შეიძლება ფორმირდეს და შეიქმნას ნანოსრუქტურები.

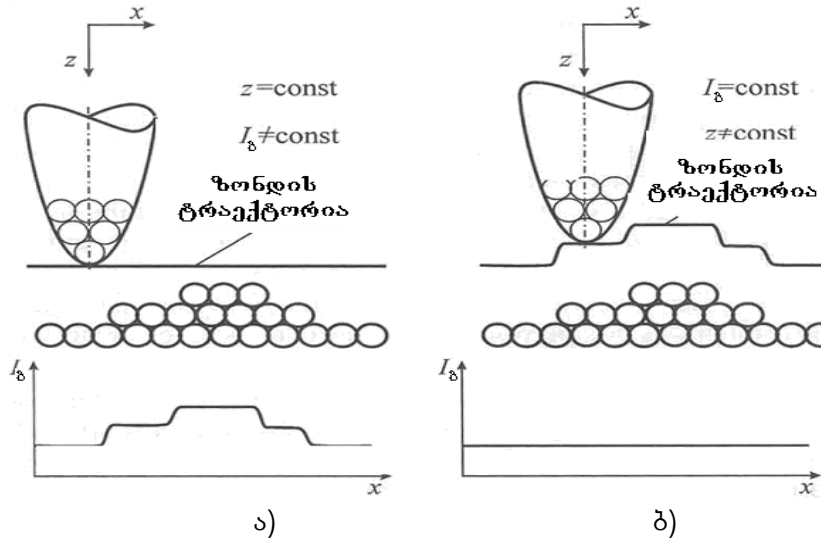
### 10.1. მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპია

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

თუ ეს მანძილი ~ 1ნმ-ია, მაშინ ზონდსა და ნიმუშს შორის აღიძვრება გვირაბული დენი, რომელიც მკაცრადაა დამოკიდებული ამ მანძილზე. ამ მანძილზე ხდება ნემსის ბოლოზე მყოფი ელექტრონის და ნიმუშის ელექტრონის ტალღური ფუნქციების ურთერთგადაფარვა და ზონდზე მცირე (0,01 - 10 ვ) ძაბვის მოდებისას აღიძვრება გვირაბული დენი ( $1-10^3$  პა). ცხადია, რომ მგმ უნდა მუშაობდეს მაღალი ვიბროიზოლაციისა და მაღალი ვაკუუმის პირობებში, რადგან ვიბრაცია და ჰაერის ერთი მოლეკულაც კი გამოიწვევს მოკლე ჩართვას და დენი არ გაიზომება.

გამოიყენება მგმ-ის ორი სახე: სკანირების მუდმივი სიმაღლით, ანუ  $z = \text{Const}$ , რაც მოცემულია ნახ.10.1 ა)-ზე და გვირაბული მუდმივი დენით, ანუ  $I_{\text{გ}} = \text{Const}$ , რომელიც გამოსახულია ნახ.10.1 ბ)-ზე. განვიხილოთ მათი მუშაობის პრინციპი.

სკანირების მუდმივი სიმაღლის მიკროსკოპში ძირითადი სიგნალია გვირაბული  $I_{\text{გ}}$  დენის სიდიდის დაფიქსირება. ის დამოკიდებულია ზედაპირის ტოპოგრაფიაზე – მასზე არსებული „ბორცვების“, ნაკანრების, საფეხურებების (მათ შორის ერთატომიანის), ადსორბირებული ატომების და ვაკანსიების რაოდენობაზე. ზედაპირზე არსებული ატომი, რომელზედაც გადადის ზონდი, განსაზღვრავს გვირაბული დენის სიდიდეს. რადგანაც  $I_{\text{გ}}$  დამოკიდებულია  $\Delta z$ -ზე, ამიტომ ზონდიდან სიგნალი ძლიერდება და ჩაინერება  $I_{\text{გ}}$ -ის ცვლილება ზედაპირის ცვლილების მიხედვით.



**ნახ.10.1.** მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპის ორი სახე: სკანირების მუდმივი სიმაღლით (ა) და გვირაბული მუდმივი დენით (ბ)

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

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

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

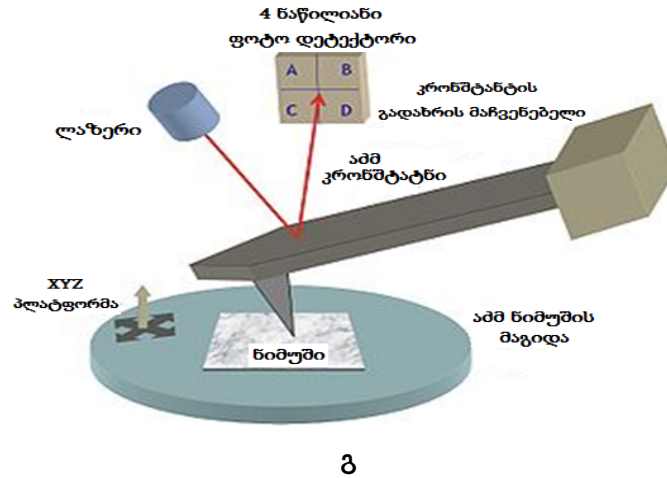
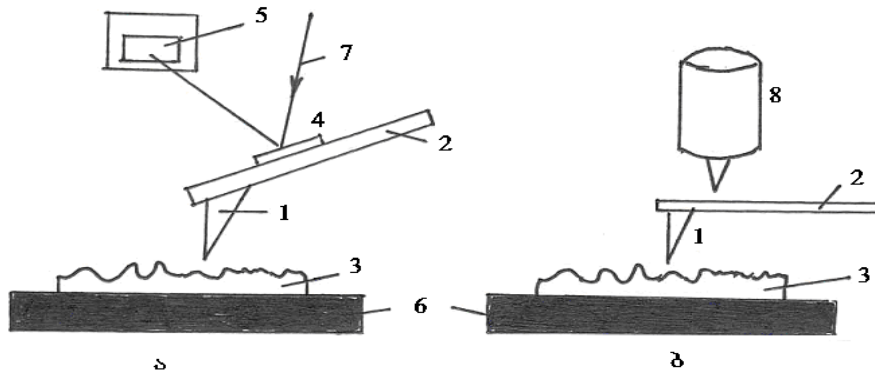
მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპის მნიშვნელოვანი ნაკლია ის, რომ გამოკვლევისთვის გამოდგება მხოლოდ ელექტროგამტარი მასალები, რადგანაც ზონდსა და საკვლევ ზედაპირს შორის უნდა გაიაროს დენმა. ამიტომ, ის გამოიყენება მეტალების, ნადნობების, ზეგამტარების და ნახევარგამტარების ზედაპირების შესწავლისთვის.

## 10.2. ატომურ-ძალური მიკროსკოპია

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

როგორც წესი, ზონდი თავსდება დრეკადი ფირფიტის ერთ ბოლოზე, რომლის მეორე ბოლო ხისტადაა დამაგრებული (ნახ.10.2). ორ მოლეკულს შორის მოქმედების ძალა მკვეთრადაა დამოკიდებული მათ შორის მანძილზე. ურთიერთმოქმედი სხეულებია ზონდი (ნახ.10.2-ზე 1) და საკვლევი ზედაპირი (ნახ.4.12-ზე 3). მათი დაახლოება საჭირო მანძილამდე და სკანირება ხორციელდება პიეზოელექტრული ტრანსლატორით (ნახ.10.2-ზე 6). ძალების აღძვრისას (მიზიდვა ან განზიდვა) შეიცვლება მანძილი ზონდსა და ზედაპირს შორის, რაც დაფიქსირდება ან ფოტოდიოდით (ნახ.10.2-ზე 5), ან გვირაბული ზონდით (ნახ.10.2-ზე 8). ზონდად შეიძლება გამოიყენებოდეს 5÷50 ნმ დიამეტრის სილიციუმის მონოკრისტალი ან ვოლფრამი.

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



**ნახ.10.2.** ატომურ-ძალური მიკროსკოპის მუშაობის პრინციპი, სიგნალის ფოტოდოდით (ა), გვირაბული ზონდით (ბ) და საერთო (გ) ფიქსაციით: 1 – ზონდი (ნემსი); 2 – დრეკადი ფირფიტა; 3 – საკვლევი ზედაპირი; 4 – სარკე; 5 – ფოტოდოდ; 6 – პიეზოელექტრული ტრანსლიატორი; 7 – ლაზერის სხივი და 8 – გვირაბული ზონდი

**აძმ-ის** გამოყენება შეიძლება ნებისმიერი მასალის (გამტარის, დიელექტრიკის და ნახევარგამტარის) ზედაპირის რელიეფის ნანოდონზე განსაზღვისათვის. მისი საშუალებით დაიმზირება სტრუქტურული ლოკალური დეფექტები, მინარევები, სხვადასხვა ჩართვების საზღვრები, ბიოლოგიური ობიექტები და სხვა ფუნდამენტური თუ გამოყენებითი ხასიათის ამოცანები.

### 10.3. მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპია

მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი (**მსმ**) არეგისტრირებს სითბოს განაწილებას ნიმუშის ზედაპირზე. მისი მგრძნობიარობაა 50 ნმ, რადგანაც უფრო მცირე მანძილზე ისეთი მაკროსკოპული სიდიდე, როგორც ტემპერატურაა, შეუძლებელია. **მსმ-ის** ზონდი არის, ალბათ, მსოფლიოში ყველაზე მცირე თერმომეტრი: მას შეუძლია გაზომოს ზედაპირის ტემპერატურის ცვლილება გრადუსის  $10^{-4}$  ნაწილის სიზუსტით, რამდენიმე ათეულ ნმ მანძილზე. ზონდი წარმოადგენს 30 ნმ დიამეტრის მონი-

კელბულ ვოლფრამის მავთულს. W – Ni მუშაობს, როგორც თერმონწყვილი. როცა გამთბარი ზონდის წვერო მიუახლოვდება საკვლევ (მყარ) ნიმუშს, რომელიც სითბოს უფრო კარგი გამტარია, ვიდრე ჰაერი, წვეროს სითბოდანაკარგები გაიზრდება. ის გაცივდება და თერმონწყვილის თერმოელექტრომამოძრავებელი ძალა (**თემძ**) შემცირდება ლრეჩოს ზომის შეცვლის პროპორციულად. და პირიქით, ზონდის ზედაპირიდან დაცილებისას თემძ იზრდება. მაშასადამე, სითბოს ცვლილება ადგენს ზედაპირის ტოპოლოგიას, ისე, როგორც გვირაბულ მიკროსკოპში – დენის ცვლილება. **მსმ** უფრო ხშირად გამოიყენება ცოცხალ უჯრედში ტემპერატურის კარტოგრაფირებისას.

### **საკონტროლო კითხვები:**

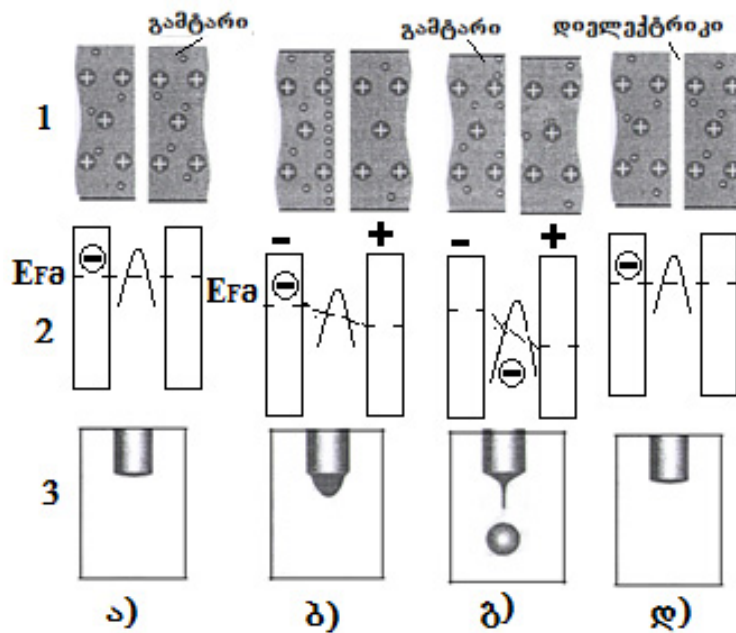
1. რა პრინციპზე მუშაობს მასკანირებელი გვირაბული მიკროსკოპი?
2. რა დადებითი და უარყოფითი მხარეები აქვს მასკანირებელ გვირაბულ მიკროსკოპს?
3. რა პრინციპზე მუშაობს ატომურ-ძალური მიკროსკოპი?
4. რა პრინციპზე მუშაობს მასკანირებელი სითბური მიკროსკოპი?



## IV.ზოგიერთი კვანტური ეფექტები და მათზე შექმნილი ხელსაწყოები

### 11. ერთელექტრონიანი გვირაბგასვლა. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორი

განვიხილოთ გვირაბგასვლა ორ მეტალურ გამტარებლობის ფირფიტას შორის მოთავსებულ თხელ დიელექტრიკულ ფენაში. როგორც ცნობილია, გამტარში დენი განპირობებულია უძრავი მესრის იონებს შორის ელექტრონების მოძრაობით, რომელშიც ყოველ ელექტრონს გადააქვს დისკრეტული, ერთეულოვანი მუხტი და გადატანილი საერთო მუხტი იცვლება მონოტონურად, უწყვეტად. ორ გამტარს შორის მოთავსებულ თხელდიელექტრიკიან სტრუქტურაში დენი იცვლება კომბინირებულად – უწყვეტად გამტარში და დისკრეტულად დიელექტრიკის გავლით. ეს პროცესები სქემატურად გამოსახულია ნახ.11.1-ზე. გვირაბგავლის ეს პროცესები 1986 წელს ა. ლიხარიოვმა შეადარა არასრულად დაკეტილ წყლის ონკანს.



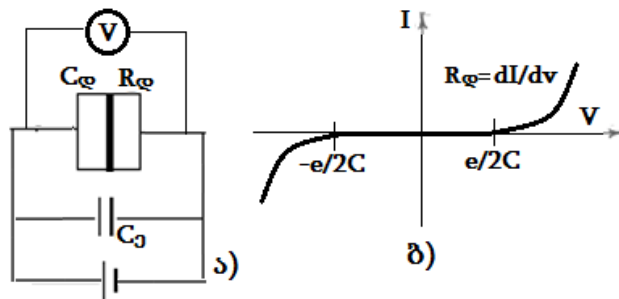
**ნახ.11.1.** ერთელექტრონიანი გვირაბგასვლა

დასაწყისში, პროცესის პირველ სტადიაში, მეტალ-დიელექტრიკის გამყოფი საზღვარი ელექტრულად ნეიტრალურია. დიელექტრიკის ორივე მხარეს მეტალებში ფერმის დონეები ერთ ზღვარზეა (ა). მეორე სტადიაში მეტალის შემონაფენებს ედება მცირე მუდმივი ელექტრული პოტენციალი, რაც იწვევს მეტალებში დენის უწყვეტ გავლას დიელექტრიკის საზღვრამდე, მეტალებში ფერმის დონეების ურთიერთნაცვლებას და გამყოფ საზღვარზე მუხტის დაგროვებას (ნახ.11.1 - 1-ის და 2-ის ბ), რასაც მოჰყვება ონკანზე წვეთის დაგროვება (ნახ.11.1 - 3-ის ბ). მესამე პროცესში

ხდება მუხტის დაგროვება იმ მნიშვნელობამდე, რომ ადგილი აქვს ერთი ელექტრონის გვირაბგასვლას დიელექტრიკში, წვეთის მონყვეტას (ნახ.11.1 გ). მეოთხე პროცესში, გვირაბგასვლის აქტის შემდეგ, სისტემა უბრუნდება საწყის მდგომარეობას (ნახ.11.1 დ). გარე ველის მოდებისას პროცესი მეორდება. დიელექტრიკის გავლით ელექტრონს შეუძლია გვირაბგასვლა რაღაც ზღურბლური დაბვის შემდეგ. ამ დაბვის შიგნით, ანუ ამ დაბვამდე, გვირაბგასვლა შეუძლებელია ამ ელექტრონზე გამტარში სხვა მოძრავი ან უძრავი მუხტის კულონური მოქმედებით. ამ მოვლენას ეწოდება კულონური ბლოკადა. გვირაბგასვლის მომენტს თან ახლავს სტრუქტურის წინააღობის შემცირება.

### 11.1. ერთგვირაბული გასვლის სტრუქტურა

ასეთი სისტემა წარმოადგენს ბრტყელ კონდენსატორს  $C$  ტევადობით, რომელზედაც შეიძლება მოთავსდეს  $Q$  მუხტი. ასეთ კონდენსატორში დაგროვილი ენერჯია ტოლია  $E=Q^2/2C$ -ის. კონდენსატორის ენერჯია იცვლება დისკრეტულად და ის მინიმალური დაგროვილი ენერჯია, რომელიც მას ერთი ელექტრონით ექნება, არის:  $\Delta E=e^2/2C$ , სადაც  $e$  ელექტრონის ელემენტარული მუხტია. გარე დაბვის მოდებისას, ერთი ელექტრონის გვირაბგასვლის პროცესისას ელექტროსტატიკური ენერჯიის ცვლილება წარმოადგენს კონდენსატორში ერთი ელექტრონის ენერჯიისა და წყაროს მიერ შესრულებელი მუშაობის სხვაობას:  $\Delta E=e^2/2C - eV$ . გვირაბგასვლა შესაძლებელია მხოლოდ მაშინ, როცა ეს ენერჯია მინიმალურია. აქედან, გვირაბგასვლის ზღვრული დაბვა ორივე მხარეს  $|V_{ზღვ}|=e/2C$ -ის. სიდიდეს  $e^2/2C$  ეწოდება კულონური ღრეჩო. ნახ.11.2.-ზე მოცემულია ერთგვირაბული სტრუქტურის ეკვივალენტური სქემა (ნახ.11.2 ა) და მისი ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი (ვამ) (ნახ.11.2ბ).



**ნახ.11.2.** ერთგვირაბული სტრუქტურის ეკვივალენტური სქემა (ა) და მისი ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი (ბ)

მისი ძირითადი ელემენტია დიელექტრიკით შექმნილი  $C_g$  ტევადობა და გვირაბული, ანუ დიელექტრიკის  $R_g$  წინააღობა, რომელიც მას აქვს გარე დაბვის მოდების გარეშე.  $C_0$  – ეფექტური ტევადობა ითვალისწინებს ნიმუშთან კონტაქტების და დენის წყაროს ტევადობებს. ცხადია, საერთო  $C$  ტევადობა, შეერთების შემდეგ, ტოლია მა-

თი ჯამისა:  $C=C_{\text{გ}}+C_{\text{კ}}$ , ასეთ სტრუქტურაში დენი გაივლის მასზე  $V_{\text{გლ}}$ -ზე მეტი ძაბვის მოდებისას, რომელიც აისახება მის ვამ-ზე (ნახ.11.2 ბ). პირდაპირი ძაბვისას დენი განისაზღვრება  $R_{\text{გ}}$ -ით. ერთელექტრონიანი გვირაბგასვლისას გარე ძაბვის სიდიდის ოსცილაციის სახე იქნება:  $\pm e/2C$ .

ზემოთ აღნიშნული პროცესების ექსპერიმენტული შესრულებისთვის საჭიროა, რომ სითბური ენერჯიის ფლუქტუაციები იყოს მინიმალური, ანუ  $kT \ll e^2/2C$ , საიდანაც:

$$C \ll \frac{e^2}{2kT} \quad (11.1)$$

ასევე, მეორე მხრივ, კულონური ბლოკადისთვის ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპით  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ , ან  $e^2/2C \geq \hbar/R_{\text{გ}}C$  და საჭიროა, რომ სტრუქტურის გვირაბული წინალობა მეტი იყოს წინალობის კვანტურ ერთეულზე:

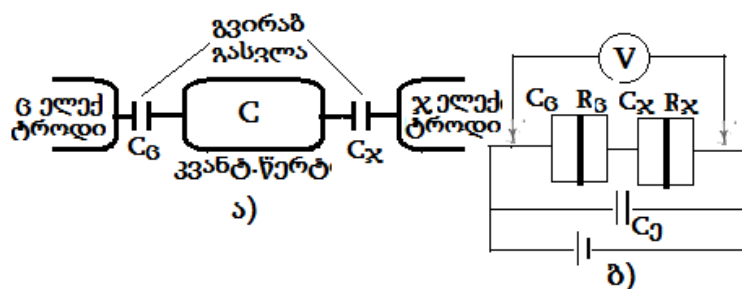
$$R_{\text{გ}} > \frac{\hbar}{e^2} = 25,813 \text{ კომი} \quad (11.2)$$

(11.1) და (11.2) პირობების შესრულება შესაძლებელია დაბალ ტემპერატურაზე ნანოზომის სტრუქტურებში. მაგალითად,  $T=4,2\text{K}$  ტემპერატურაზე საჭიროა შეიქმნას ტევადობა  $C \ll 2 \cdot 10^{-16}$  ფარადი,  $T=77\text{K}$  –  $C \ll 2 \cdot 10^{-17}$  ფარადი, ხოლო  $T=300\text{K}$  –  $3 \cdot 10^{-18}$  ფარადი, ანუ 0,1 – 1,0 ატოფარადი. ერთგვირაბული გასვლის სისტემაში ერთელექტრონიანი გვირაბგასვლის პროცესის განხორციელება შეუძლებელია, რადგან მუხტის ცვლილებისთვის ფლუქტუაცია უნდა იყოს ძალიან მცირე მისი კვანტურ წერტილში მდგრადად ლოკალიზაციისთვის.

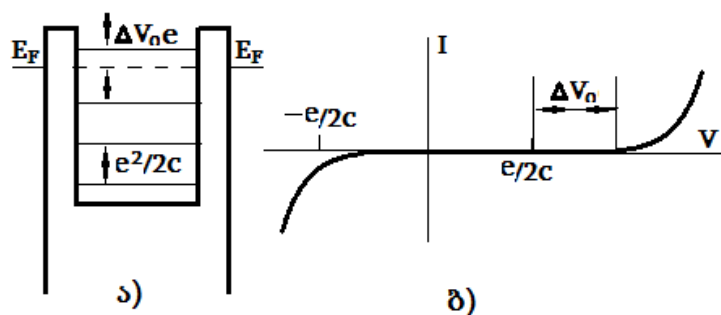
## 11.2. ორგვირაბული გასვლის სტრუქტურა

ახალი სწრაფქმედი ხელსაწყოს მუშაობის პრინციპი დამყარებულია კვანტური განზომილებების შრეებში ელექტრონის გავლაზე. ცხადია, ასეთი შრეების სისქე უნდა იყოს ისეთი მცირე, რომ ელექტრონმა გამოავლინოს ტალღური ბუნება. ასეთი შრეების შექმნა შესაძლებელია მხოლოდ თანამედროვე ტექნოლოგიით, კერძოდ, მოლეკულურ-სხივური ეპიტაქსიით. ამ მეთოდით შესაძლებელი გახდა მრავალშრიანი თხელფიროვანი სტრუქტურების მიღება – თითოეული რამდენიმე ათეული და ერთეული ნანომეტრის რიგის. ამიტომ, ასეთი თანამედროვე ხელსაწყოს შექმნისთვის საინტერესოა არა ერთგვირაბული, არამედ ორგვირაბული სტრუქტურის გამოყენება. ტოპოლოგიურად ის შედგება ორი მიმდევრობით შეერთებული ერთგვირაბული სტრუქტურისგან, რომლის ეკვივალენტური სქემა მოცემულია ნახ.11.3-ზე. ეს შეიძლება იყოს მეტალის გამტარი ნახევარგამტარის ან მეტალის ნანონაწილაკებთან (კუნძულთან) ორმხრივ კონტაქტში. კუნძული, თავის ზომით და თვისებებით, წარმოადგენს კვანტურ წერტილს, სადაც მოთავსებულია განსაზღვრული რაოდენობის მუხტი. მას აქვს ტევადობითი კავშირი მარჯვენა და მარცხენა ელექტროდებთან, შესაბამისი  $C_{\text{კ}}$  და  $C_{\text{გ}}$  ტევადობებით. თვით კუნძულის ტევადობა  $C$  ტოლია  $C_{\text{კ}}$  და  $C_{\text{გ}}$  ტევადობების ჯამისა. როგორც ერთგვირაბულისთვის, აქაც, ორგვირაბული სტრუქტურისთვისაც არსებობს ძაბვის დიაპაზონი, სადაც ელექტრონის გადატანის

კულონური ბლოკადის გამო ელექტრული დენი არ იქნება. კუნძულში – ელექტროდებთან და კუნძულის შიგნით დასაშვები ელექტრული დონეების სხვაობის გამო, ვამ-ის სიმეტრიულობა, როგორც ეს იყო ერგვარაბულისთვის, იქნება დარღვეული. ეს ეფექტი შეიძლება აიხსნას კუნძულის და ელექტროდების ელექტროქიმიური პოტენციალის ტერმინებით. მართლაც, კუნძულის მცირე ზომებისას ფერმის ენერგია შიგნით და ელექტროდებზე იქნება განსხვავებული. ეს იძლევა განსხვავებას ელექტროპოტენციალებს შორის  $\Delta\mu = \mu_{\text{კუნ}} - \mu_{\text{გ}} = \mu_{\text{კუნ}} - \mu_{\text{გ}} = e\Delta V_0$ , როგორც ნახ.11.4-დან ჩანს, სადაც გამოსახულია ორგვირაბული სტრუქტურის ენერგეტიკული ეკვივალენტური სქემა (ნახ.11.4 ა) და შესაბამისი ვამ (ნახ.11.4 ბ). განსხვავების მიზეზი ისაა, რომ კუნძულში მუხტის გადანაწილება დამახასიათებელია მხოლოდ  $\mu_{\text{კუნ}}$ -სთვის, რომელიც  $e/C$ -ის ჯერადია, ხოლო მაკროსკოპული ნიმუშისათვის  $C$  დიდია, ფარდობა  $e/C$  ძალიან მცირეა და განსხვავება ფერმის დონეებს შორის არაა.



ნახ.11.3. ორგვირაბული სტრუქტურის ეკვივალენტური სქემა კუნძულის (ა) და ორი ერთგვირაბულის შეერთებისას (ბ)



ნახ.11.4. ორგვირაბული სტრუქტურის ენერგეტიკული ეკვივალენტური სქემა (ა) და შესაბამისი ვამ (ბ)

ნანონაწილაკებში წონასწორობას მივყავართ იქამდე, რომ ფერმის დონეები, როგორც შესაძლებელია, იყოს ერთმანეთთან ახლოს, მაგრამ  $\Delta V_0$  მაინც იქნება რაღაც სიდიდის დიაპაზონში  $\Delta V_0 < e/2C$ . ეს იწვევს ორ გვირაბს შორის გაჟონვის კოეფიციენტებს შორის განსხვავებას და ვამ-ზე ასიმეტრიას.

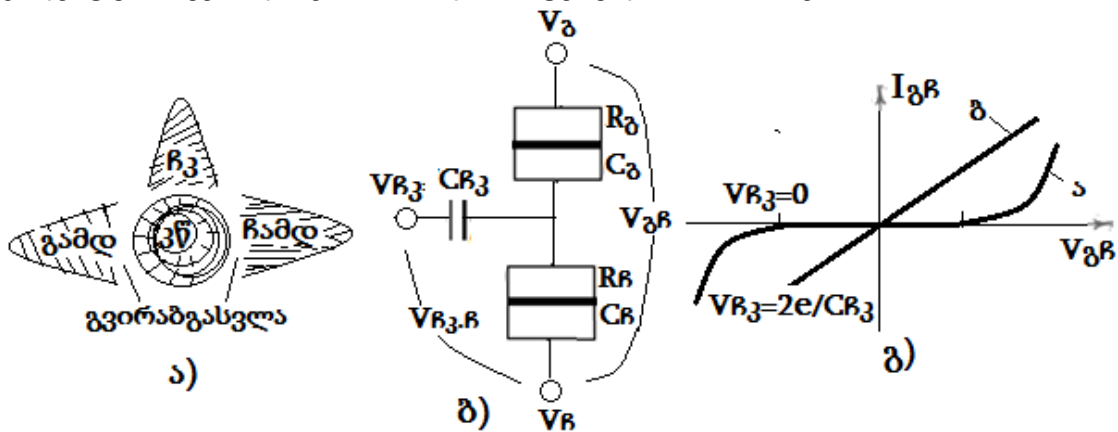
ელექტრონის ენერგეტიკული დონეების დისკრეტულება კუნძულში განისაზღვრება იმით, რომ მისი მუხტის ცვლილება შეიძლება მხოლოდ ერთი ელექტრონის ულუფებით მოსვლით ან წასვლით. ამ დისკრეტულობის სიდიდეა  $e^2/2C$ .  $T=0K$  ტემპე-

რატურაზე მდგომარეობები ფერმის დონემდე მთლიანად შევსებულია. ამიტომ რჩება  $\Delta V_0$  სხვაობა იმ დონეთა შორის, რომლისგანაც ხდება ელექტრონების ინჟექცია და კუნძულზე უახლოეს იმ დონეს შორის, რომელზეც ის უნდა დაჯდეს. ერთი ელექტრონის მოსვლით სისტემის ელექტროსტატიკური ენერგია შეიცვლება სიდიდით:  $\Delta E = 1/2[(e/C + \Delta V_0)^2 C - \Delta V_0^2 C]$ .

კუნძულზე მარცხენა ელექტროდიდან მისული ელექტრონი პოლარიზაციით ინდუცირებს მარჯვენა ელექტროდში მუხტს სიდიდით  $eC_{\text{კ}}/C$ . მის გადასალახავად და კულონური ბლოკადის დასაძლევად საჭიროა გარე ძაბვა  $V_0 V(e/2C + \Delta V_0)/C_{\text{კ}}$ . ეს იძლევა ვამ-ის ასიმეტრიას (ნახ.11.4. ბ).

### 11.3. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მუშაობის პრინციპი და პარამეტრები

კარგად აიხსნება ორგვირაბგასვლის სტრუქტურის მაგალითზე. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორი – ესაა სამგამოსავლიანი ხელსაწყო, სადაც გამომდენიდან ჩამდენისაკენ, მათი გამყოფი კვანტური წერტილის გავლით, ელექტრონები სათითაოდ გადიან და რომელშიც კვანტური წერტილის ელექტრული მდგომარეობები ელექტროსტატიკურად ჩამკეციტით კონტროლდება. მისი ფორმირების სტრუქტურა, ეკვივალენტური სქემა და შესაბამისი ვამ მოცემულია ნახ.11.5-ზე.



ნახ.11.5. ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის სტრუქტურა (ა), ეკვივალენტური სქემა (ბ) და შესაბამისი ვამ (გ)

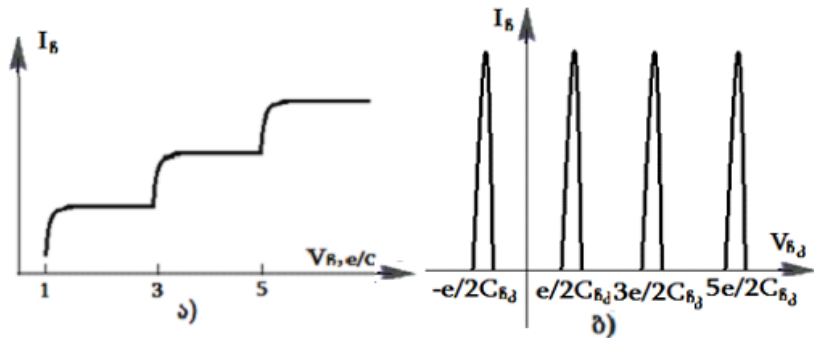
ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მუშაობა შეიძლება აღინეროს, თუ მის სტრუქტურაში გამოვყოფთ ორ ერთელექტრონიან უჯრედს: ერთი დაკავშირებულია გამომდენთან, მეორე – ჩამდენთან. ვამ მიიღება ისე, როგორც ელექტრონის ორგვირაბიანი გავლისას, როცა  $V_{\text{გ}} = 0$  (ნახ.11გ-ზე ა-მრუდი). როცა  $V_{\text{გ}} = e/2C_{\text{გ}}$ , მაშინ კულონური ბლოკადა მოხსნილია და დენის გავლა ხდება უწყვეტად (ნახ.11.5. გ-ზე, ბ-მრუდი).

ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის ჩამკეციტზე ძაბვის ცვლილებით 0-დან  $e/2C_{\text{გ}}$ -მდე კულონური ბლოკადა და ელექტრონი გადის გამომდენიდან კვანტურ წერტილ-

ში, ვერ გადის ჩამდენში. ჩამკეტზე  $e/2C_{\beta_3}$ -ის ჯერადი დაბვის მოდებისას კულონური ბლოკადა იხსნება, გამომდენ-ჩამდენის დენი ხდება შესამჩნევი და საფეხურიანი. ასეთ მახასიათებელს ეწოდება კულონური კიბე (ნახ.11.6.ა). ამის მსგავსად დაიმზირება ოსცილაცია  $I_{\beta_3}(V_{\beta_3})$  დამოკიდებულებაზე, როცა ჩამკეტზე დაბვა იცვლება  $ne/C_{\beta_3} - e/2C_{\beta_3}$ , რაც გამოსახულია ნახ. 11.6.ბ-ზე.

ერთელექტრონიან ტრანზისტორში გამომდენ-ჩამდენი ( $I_{\beta_3}$ ) დენის გამოთვლა შესაძლებელია კვანტურ წერტილში ელექტრონის გვირაბით შემოსვლის სიჩქარისა და მისგან გასვლის ალბათობის გამოყენებით.

ერთელექტრონიან ტრანზისტორში კვანტურ წერტილად  $Au_{55}$ -ის ლიგანდურ ჯაჭვს აქვს პერსპექტივა სტაბილიზაციისა და ტემპერატურაში მოგების თვალსაზრისით. მცირე რაოდენობის ოქროს ატომები იფარება ბუნებრივი, იზოლირებული ე.წ. ლიგანდის  $\sim 0,7$  ნმ სისქის გარსით. გვირაბგასვლა ხდება ორ მეზობელ ლიგანდ-სტაბილიზებულ არეს შორის, სადაც გარსი გამოდის ჯებირის როლში. ექსპერიმენტმა აჩვენა, რომ ელექტრონის გასვლა ჯაჭვურ ლიგანდაში ხდება სოლიტონის მსგავსად. გამოთვლებმა აჩვენა, რომ ამ დროს ნაწილაკთა შორის ტევადობა  $10^{-18}$  ფარადია, ხოლო წინაღობა – 100 მომ.



**ნახ.11.6.** ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის გამოსავლითი (ა) და გარდამავალი ვამ (ბ)

ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის უპირატესობაა ის, რომ მას აქვს ძალიან მცირე ზომები (რამდენიმე ანგსტრემი) და მასთან დაკავშირებული დიდი ინტეგრაცია, აგრეთვე, ძალიან მცირე მოთხოვნის სიმძლავრე და დიდი ფუნქციონალური შესაძლებლობები. მაგრამ, უნდა მივიღოთ მხედველობაში მისი უარყოფითი მხარეებიც. ეს, უპირველეს ყოვლისა, გამოიხატება შემდეგში: 1) ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მუშაობის შესაძლებლობა შემოიფარგლება მხოლოდ დაბალი ტემპერატურებით. მათი ოთახის ტემპერატურაზე მუშაობისთვის საჭიროა, კვანტური წერტილის ზომები იყოს ბევრად ნაკლები 10 ნმ-ზე; 2) ერთელექტრონიან ტრანზისტორებს, დიდი გვირაბული გადასვლის წინააღმდეგობის გამო, რომელიც ბევრად მეტია  $h/e^2$  ( $25,8$ კომ)-ზე, აქვთ გამოსავალი – დიდი იმპედანსი; 3) ერთელექტრონიანი ტრანზისტორისთვის გამომდენ-ჩამდენის დაბვა უნდა იყოს უფრო მცირე, ვიდრე ჩამკეტი დაბვის ამპლიტუდა. ეს საჭიროა იმისთვის, რომ გადამრთველ ხელსაწყოებში, კვან-

ტური წერტილის პოტენციალის გამომდენ-ჩამდენი ძაბვით ადვილად მმართველს, ერთელექტრონიანი ტრანზისტორი გამოყენებულ იქნას როგორც ჩამკეტი და 4) ერთელექტრონიანი ხელსაწყოს მახასიათებლების განმეორადობისა და განსაზღვრის სიძნელე დაკავშირებულია კუნძულთან ახლოს არაკონტროლირებად მუხტის გაჩენასთან. ეს მუხტი აღიძვრება კუნძულის გარშემო მყოფი დიელექტრიკის მიერ მინარევული ნივთიერების თუგინდ ერთი ატომით. მინარევის მუხტი კუნძულს უკეთებს პოლარიზაციას და მასში ამით ცვლის კულონური ბლოკადის პირობებს.

აღნიშნული შეფერხებების დაძლევის შემდეგ ერთელექტრონიანი ხელსაწყობი ლაბორატორიული ნიმუშებიდან გადავლენ პროდუქციულ წარმოებაში.

### **საკონტროლო კითხვები:**

1. რაში მდგომარეობს ერთ- და ორელექტრონიანი გვირაბგასვლის ეფექტი და როგორია მისი ვოლტ-ამპერული ეფექტი?
2. როგორია ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის სქემატური გამოსახულება?
3. როგორია ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის მუშაობის პრინციპი?
4. როგორია ერთელექტრონიანი ტრანზისტორის ვოლტ-ამპერული
5. მახასიათებელი და ახსენით მისი სვლა.

## **12. რეზონანსული გვირაბგასვლა**

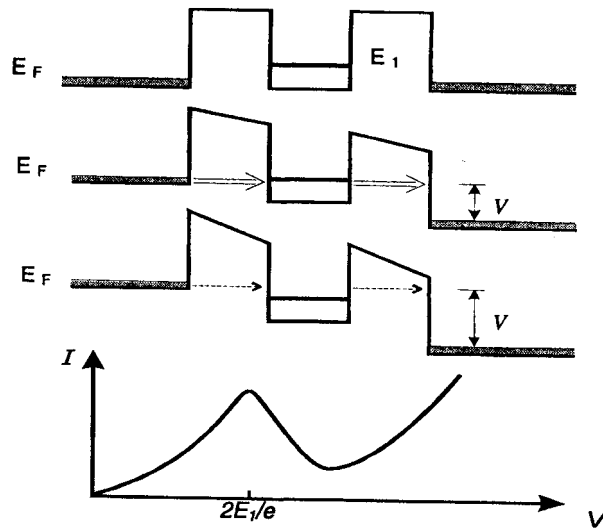
მცირეზომიან სტრუქტურებში ელექტრონების გვირაბგასვლა, პოტენციალური ჯებირის მახასიათებლების გარდა, განისაზღვრება თვით სტრუქტურის შიგნით ელექტრონებისთვის დასაშვები ენერგეტიკული მდგომარეობებით. ორი პოტენციალური ჯებირით შეზღუდულ მცირეზომიან სტრუქტურაში ინჟექტირებულ ელექტროდში ფერმის დონესა და მცირეზომიან სტრუქტურაში დისკრეტულ დონეს შორის ურთიერთთანხვედრისას მკვეთრად იზრდება მასში გამავალი გვირაბული დენი. ეს მოვლენა ცნობილია რეზონანსული გვირაბგასვლის მოვლენით. ეს ინვეს ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელზე უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობის გამოვლენას, რაც მნიშვნელოვანია მყარსხეულოვან მაღალსიხშირული გენერატორების შექმნისთვის.

არსებობს რეზონანსული გვირაბგასვლის ორი სახე: კოჰერენტული და მიმდევრობითი. კოჰერენტული მექანიზმით გვირაბგასვლა ხორციელდება, როცა ელექტრონული ტალღა ისე ეთანადება ჭაში კვანტური დონეების ზომებს, რომ ელექტრონის ტალღური ფუნქცია ინარჩუნებს კოჰერენტულობას ორგვირაბიან სისტემაში. ამ შემთხვევაში, ისე როგორც ოპტიკაში, ჭაში ტალღის ამპლიტუდა უნდა გაიზარდოს და მთელ სტრუქტურაში უნდა მოხდეს რეზონანსული გვირაბგასვლა. მიმდევრობითი რეზონანსული გვირაბგასვლის მექანიზმი გულისხმობს, რომ ორბარიერიან სტრუქტურაზე პოტენციალის მოდებისას ელექტრონი, რომლის ენერგია ემთხვევა ჭაში

კვანტურ დონეს, ემიტერიდან გვირაბულად გადის ჭაში ამ დონეზე და შემდეგ მეორე ჯებირის გავლით გადის კოლექტორში.

ამ ეფექტის დამზერის ტიპურ სტრუქტურას წარმოადგენს კვანტური ჭა. რეზონანსული გვირაბგასვლის მოვლენა იწინასწარმეტყველა დ. ბომმა, მაგრამ მისი ექსპერიმენტული განხორციელება მოხდა ოცი წლის შემდეგ, მას შემდეგ, რაც ზესტრუქტურის ფორმირების ბაზაზე შეიქმნა მაღალხარისრიანი კვანტური ჭა. ასეთი სტრუქტურის ენერგეტიკული დიაგრამა და მისი ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი მოცემულია ნახ.12.1.-ზე.

ორჯებირიან რეზონანსულ-გვირაბულ სტრუქტურებს ამზადებენ GaAs-AlGaAs ზემესრულ სტრუქტურების ბაზაზე. ელექტროდების „ვინროზონიან“ მასალად და თვით ჭად გამოიყენება GaAs. რეზონანსულ-გვირაბულ სტრუქტურად შეიძლება გამოყენებულ იქნას Si-SiO<sub>2</sub> სისტემაც.



ნახ.12.1. კვანტური ორჯებირიანი სტრუქტურის ენერგეტიკული დიაგრამა და მისი ვამ

კვანტური შეზღუდვები იწვევს ჭაში ენერგეტიკული დონეების დაკვანტვას. ორგანზომილებიან სტრუქტურაში – კვანტური ფირფიტა  $a$  სისქით – წარმოიქმნება ქვეზონა  $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2m^* a^2)$ . ითვლება, რომ გარე დაბვის მოდების გარეშე ის მდებარეობს თითოეული ჯებირის გარეთ მყოფ ფერმის ( $E_F$ ) დონეზე მაღლა. ელექტროდს, საიდანაც ხდება ელექტრონების ინჟექცია, ეწოდება ემიტერი, ხოლო შემკრებ ელექტროდს – კოლექტორი.

სტრუქტურაზე მცირე გარე  $V$  დაბვის მოდებისას დაბვის დიდი ნაწილი ეცემა ჯებირის უბანზე, რადგანაც მათი ელექტრული წინააღობა ბევრად მეტია, ვიდრე ჭის წინააღობა. მათში ხდება ენერგეტიკული დონეების დიდად დახრა, მაგრამ სტრუქტურის გავლით გვირაბული დენი მაინც მცირეა. გარე მოდებული დაბვის გაზრდისას ჭაში  $E_1$  დონე დაბლა იწვევს, რაც იწვევს ემიტერულ ჯებირში გვირაბული დენის გაზრდას.



ჭიდან ელექტრონების გვირაბგასვლა არაა შეზღუდული, რადგანაც ფერმის დონე კოლექტორში უფრო დაბლაა, ვიდრე ჭაში და გვირაბგასვლა მიდის მაღლიდან დაბალ დონეზე. გვირაბული დენის სიდიდე მაქსიმალური ხდება მაშინ, როცა ემიტერში ფერმის  $E_F$  დონე ემთხვევა ჭაში  $E_1$  დონეს. ამ შემთხვევაში ჭაში გვირაბულად გასული ელექტრონები ინარჩუნებენ თავიანთ ენერგიას და იმპულსს. ამის გამო ისინი იქ არ ჩერდებიან და სწრაფად გადიან კოლექტორში. ხდება ჭის გავლით ელექტრონების რეზონანსული გასვლა, რაც ემიტერის და კოლექტორის სიმეტრიული ჯებირების შემთხვევაში ეთანადება  $V = 2E_1/e$  დაბვას.

$E_1$  დონის შემდგომი ძირს დაშვებისას ელექტრონებს აღარ შეუძლიათ გვირაბგასვლა ენერგიისა და იმპულსის შენარჩუნებით. ისინი ყოვნდებიან ჭაში, რაც იწვევს დენის შემცირებას და ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელზე უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობის უბნის შექმნას. გარე დაბვის შემდგომი ზრდა იწვევს ელექტრონების მზარდ, თერმულად აქტივირებულ ჯებირისზედა ემისიას და სტრუქტურაში დენის შესაბამის ზრდას.

აღსანიშნავია ის, რომ დაბვის ზრდით დენი ეცემა, ანუ ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელზე მიიღება უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობა. ეს მიუთითებს იმაზე, რომ დენსა და დაბვას შორის ფაზა წანაცვლებულია  $180^\circ$ -ით და თოთქოს მათი ცვლადი მდგენელები მიმართული არიან ურთიერთშემხვედრი მიმართულებით. შესაბამისად, ცვლადი სიგნალის სიმძლავრე, რომელიც ტოლია დენისა და დაბვის ნამრავლისა, უნდა იყოს უარყოფითი ნიშნით. ეს ტოლფასია იმისა, რომ უარყოფითი წინააღმდეგობა კი არ მოიხმარს ცვლადი სიგნალის სიმძლავრეს, არამედ გარე წრედს აძლევს მას. უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობით კომპენსირდება სქემაში დადებითი წინააღმდეგობით შექმნილი დანაკარგები და ამრიგად შესაძლებელია დაბვის გაძლიერების, გენერაციის და გარდამქმნელის სქემის შექმნა.

ორგანზომილებიან, ორჯებირიან სტრუქტურაში გარე მოდებული დაბვით შექმნილი გვირაბული დენი გამოითვლება შემდეგი დაშვებებით. ითვლება, რომ ჭა, ემიტერი და კოლექტორი გამოყოფილნი არიან პოტენციალური ჯებირებით  $z$  მიმართულებით. მათში ელექტრონები არიან  $m^*$  მასიანი თავისუფალი ნაწილაკები. ემიტერში  $k$  ტალღურვექტორიანი ელექტრონი გაბნევის გარეშე გვირაბულად გადის კოლექტორში, ანუ  $xy$  სიბრტყეში სრული ენერგიის შენარჩუნებით და ტალღური ვექტორის შეუცვლელად. ტალღური ვექტორის  $z$  მდგენელი იცვლება, რადგან ამ მიმართულებით სტრუქტურა არაერთგვაროვანია. უგულელყოფილია კულონური მოქმედება ელექტრონსა და მისგან შექმნილ პოტენციურ არეკვლას შორის. უგულელყოფილია აგრეთვე ჯებირისა და ემიტერის და კოლექტორის საზღვრებზე გარე დაბვით გამოწვეული ზონის გაღუნვები. ყველა ეს დაშვება იძლევა საშუალებას, განისაზღვროს  $E_z$  ენერგიის ელექტრონებისთვის პოტენციალური ჯებირის განმსჭვალვის  $D(E_z)$  კოეფიციენტი შრედიანგერის ერთგანზომილებიანი განტოლების ამოხსნით. ამასთან ერთად,  $x$ - და  $y$ - მიმართულებით ამოხსნისას მიიღება ბრტყელი ტალღა, ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობებით  $E_{x,y} = (\hbar^2 / (2m^*)) (k_x^2 + k_y^2)$ . გვირაბული ელექტრონის სრული ენერგია კი ტოლია  $E = E_{x,y} + E_z$ .

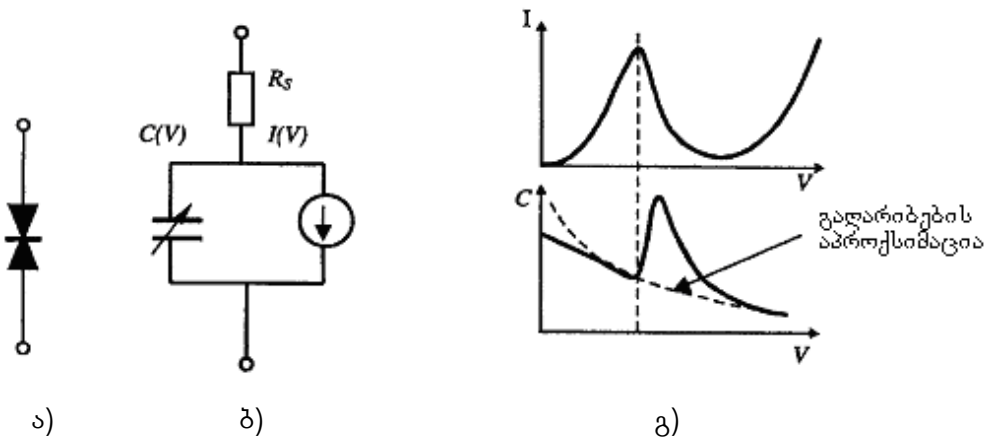
მოცემულ სტრუქტურაში საერთო გვირაბული დენის განსაზღვრისას უნდა გამოითვალოს გვირაბულ ალბათობათა ჯამები ემიტერში და კოლექტორში ელექტრონების ენერგეტიკული განაწილების ფუნქციის, ჯებირის განმსჭვალვის კოეფიციენტის და კოლექტორში თავისუფალი ადგილების გათვალისწინებით. როცა არ ხდება ელექტრონის ენერგიის გაბნევა კოლექტორში  $E_3$  ენერგია უკავშირდება ემიტერში  $E_2$  ენერგიას თანაფარდობით:  $E_3 = E_2 + eV$ , სადაც  $V$  სტრუქტურაზე მოდებული გარე ძაბვაა.

რეზონანსულ-გვირაბასულ მოვლენებზე ძირითადი სამუშაოები ჩაატარა ნობელის პრემიის ლაურეატმა ლეო ესაკიამ. მისი გამოთვლები ხარისხობრივად კარგად თანხვედრაშია ექსპერიმენტთან. რაოდენობრივი თანხვედრისთვის უნდა იქნეს გათვალისწინებული ყველა ის დაშვებები, რომლებიც ზემოთ იქნა ჩამოთვლილი.

რეზონანსული გვირაბასვლის მოვლენა ტერაჰერც სიხშირეზე მომუშავე დიოდებისა და ტრანზისტორების შექმნის საშუალებას იძლევა.

### 12.1. რეზონანსულ გვირაბასვლაზე შექმნილი დიოდი.

ზოგადად, რეზონანსულ-გვირაბული დიოდი წარმოადგენს მიმდევრობით შეერთებულ კვანტური ჭების პერიოდულ სტრუქტურას, გამოყოფილს პოტენციალური ჯებირებით და ორ მოპირდაპირე მხარეს შექმნილი ელექტრული კონტაქტებით. უფრო ხშირად გამოიყენება ორჯებირიანი სტრუქტურა, სიმეტრიული მახასიათებლებით და ერთი კვანტური ჭით, რადგანაც ჭის რიცხვის გაზრდით ძნელდება რეზონანსული გვირაბასვლა. ნახ.12.2-ზე გამოსახულია ასეთი დიოდის პირობითი აღნიშვნა, ეკვივალენტური სქემა და მისი ძირითადი ელექტრული მახასიათებლები.



**ნახ.12.2.** რეზონანსულ-გვირაბული დიოდის პირობითი აღნიშვნა (ა), მისი ეკვივალენტური სქემა (ბ), ვოლტ-ამპერული და ვოლტ-ფარადული მახასიათებლები (გ)

რეზონანსულ-გვირაბული დიოდის ეკვივალენტური სქემა შეიცავს  $I(V)$  დენის წყაროს და ტევადობას  $C(V)$ , რომლებიც იმართებიან ძაბვით და მიმდევრობით შეერთებული  $R_s$  წინააღმდეგობისგან. აქ პარალელური  $I(V)$  და  $C(V)$  წრედი წარმო-

ადგენს დიოდს, ხოლო მიმდევრობით შეერთებული  $R_s$  წინააღმდეგობა არის საკონტაქტო წინააღმდეგობების ჯამი.  $C(V)$  ტევადობა მნიშვნელოვანია ხელსაწყო სწრაფქმედების განსაზღვრისთვის. დენითი რეზონანსული ძაბვის არის გარდა, ის თითქმის გაღარიბებული უბნის ტევადობის ტოლია. უარყოფით დიფერენცირებულ წინააღმდეგობის უბანში ტევადობის პიკი განპირობებულია ორმოში დაგროვილი რეზონანსული ელექტრონებით. ეს უნდა იქნეს მიღებული მხედველობაში დიოდის სწრაფქმედების განხილვისას.

რეზონანსულ-გვირაბული დიოდის ძირითადი თავისებურებაა მის ვოლტამპერულ მახასიათებელზე უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობის არის არსებობა, რომელიცაა მისი ფართო პრაქტიკული გამოყენების საფუძველი. მისი ძირითადი ელექტრული პარამეტრებია: დენის სიმკვრივისა და ძაბვის მნიშვნელობები პიკის წერტილის უბანში, „დოლინის“ დენის სიმკვრივე მინიმუმში და დენის ამ სიმკვრივეების შეფარდება.

ჯებირის სისქის გაზრდით პიკური დენის სიმკვრივე ექსპონენციალურად მცირდება. რეალურ ხელსაწყოებში, ოთახის ტემპერატურაზე – მაქსიმუმში და მინიმუმში დენის სიმკვრივეთა ფარდობა მერყეობს ერთიდან ათამდე, ხოლო დაბალ ტემპერატურაზე ეს ფარდობა უფრო მეტია. გაბნევის ეფექტი რეზონანს აფართოებს, მაგრამ ამავდროულად ასუსტებს მას. დენის პიკური სიმკვრივე თითქმის არ გრძნობს გაფანტვის ეფექტებს, მაგრამ მინიმუმში დენის სიმკვრივე და, შესაბამისად, მათი ფარდობა საგრძნობლადაა დამოკიდებული ჭის საზღვრებზე გაბნევის ხარისხზე.

მაღალი სამუშაო დენის სიმკვრივის მიღებისთვის საჭიროა ჯებირი იყოს თხელი (რამდენიმე მონოატომური შრე), ხოლო გამყოფი საზღვარი – მკვეთრი და თანაბარი. ექსპერიმენტულად დამტკიცებულია, რომ გამყოფი საზღვრები არასდროს არიან ქიმიურად მკვეთრი და აბსოლუტურად ბრტყელი, თუნდაც ოპტიმალურ პირობებში მათი ფორმირებისას. მაგალითად, ზემესერის შექმნის ყველაზე პერსპექტიულ GaAs და AlAs მასალებში მაინც არსებობს 1-4 გარდამავალი მონოშრე. ამიტომ საზღვარზე პოტენციური ჯებირი არაა მკაცრად საფეხურიანი, არამედ განრთხმულია და დამოკიდებულია საზღვრის ზედაპირის რელიეფზე. ეს ამცირებს დიოდის ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელზე უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობის უბანში მაქსიმუმსა და მინიმუმში დენის ფარდობის სიდიდეს და ხსნის განსხვავებას რეზონანსულ-გვირაბულ დიოდის თეორიასა და ექსპერიმენტს შორის.

რეზონანსულ-გვირაბული დიოდის პრაქტიკული გამოყენებისთვის მნიშვნელოვანია ის, რომ მას გააჩნია გადართვის დიდი სიჩქარე. ასეთი დიოდის სწრაფქმედების განხილვისას მხედველობაში უნდა მიიღებოდეს მასში მიმდინარე პროცესების ორი დრო: დრო გვირაბგასვლაზე, დაკავშირებული კვანტურ მექანიზმებთან და დრო, რომელიც საჭიროა დიოდის ტევადობის დამუხტვისთვის, განსაზღვრული წრედის პარამეტრებით.

განვიხილოთ აღნიშნული „გვირაბგასვლის დრო“ და „RC-დრო“. ჩავთვალოთ, რომ განსაზღვრულ დროში რეზონანსულ-გვირაბულ სტრუქტურაში ელექტრული ველი გადადის არარეზონანსული მდგომარეობიდან რეზონანსულში. ამ ცვლილების პასუხად კვანტურ ჭაში ტალღური ფუნქციის ამპლიტუდა იცვლება მის საბოლოო სტაციონარულ მნიშვნელობამდე. გვირაბგასვლის დრო – სწორედ ამ ცვლილების

დროა, ანუ სისტემის მდგრად მდგომარეობაში გადასვლის დროა. ეს სიდიდე კვანტურ ორმოში სტაბილური რეზონანსული მდგომარეობის  $t_{\text{რ}}$  სიცოცხლის ხანგრძლივობის რიგისაა, რომელიც კვანტური ორმოს ელექტრონის მიერ გავლის დროის ტოლია. გამარტივების შემთხვევაში, ეს დრო მოიცემა ენერგეტიკული დონის  $E_0$  სიგანით, როგორც:

$$t_{\text{რ}} = h/E_0, \quad (12.1)$$

სადაც,  $h$  პლანკის მუდმივაა.

ჯებირის სისქის და სიმაღლის შემცირებით  $E_0$  ექსპონენციალურად მცირდება, რაც (12.1)-ით იწვევს გვირაბგასვლის დროის გაზრდას. მორე მხრივ, ჯებირის ამ პარამეტრების შემცირება ამცირებს ვამ-ზე მაქსიმუმსა და მინიმუმში დენების ფარდობას, ამიტომ საჭიროა ოპტიმალური პარამეტრების შერჩევა. იდეალური რეზონანსულ-გვირაბული დიოდის სწრაფქმედების თეორიული ზღვარი ფასდება 0,1 პნმ-ით. რეალურ ხელსაწყოებში გამყოფი საზღვრის განრთხმისა და მუხტის მატარებელთა გაბნევის გამო გვირაბგასვლის დრო იზრდება.

რეზონანსულ-გვირაბულ დიოდებში სწრაფქმედება განისაზღვრება არა მარტო გვირაბის გავლის დროით, არამედ კონდენსატორის დამუხტვის დროითაც, ანუ  $R_s C(V)$  მუდმივითაც (ნახ. 12.2-ის ბ).

რეზონანსულ-გვირაბული დიოდების ერთ-ერთი უპირატესობა სხვა გვირაბულ დიოდებთან შედარებით ისაა, რომ შედარებით მცირე ტევადობისას მას შეუძლია მიიღოს მაქსიმალური დენის დიდი სიმკვრივე. მაგალითად,  $2 \cdot 10^{-7}$  პფ ტევადობისას მიღწეულია დენის სიმკვრივე  $7 \cdot 10^5$  ა/სმ<sup>2</sup>. ეს სიდიდეები აჩვენებენ, რომ სიჩქარის მაჩვენებელი, რომელიც განისაზღვრება ხვედრითი ტევადობის ფარდობით დენის სიმკვრივის მაქსიმალურ მნიშვნელობასთან ( $C/J_a$ ), ნაკლებია 0,3 პნმ/ვ-ზე სხვა სახის გვირაბული დიოდებისთვის ეს მაჩვენებელი მეტია 10 პნმ/ვ-ზე. ეს განსხვავება შესაძლებელია აიხსნას რეზონანსულ-გვირაბულ დიოდებში ჯებირის და კვანტური ქის ოპტიმალური პარამეტრების მიღებით.

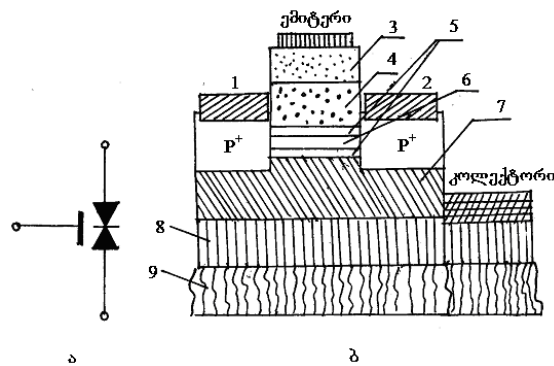
## 12.2. რეზონანსულ გვირაბგასვლაზე შექმნილი ტრანზისტორი

რეზონანსულ-გვირაბულ დიოდზე მმართველი ელექტროდის დამატებას გადაწყავს ის რეზონანსულ-გვირაბულ ტრანზისტორში. ნახ. 12.3-ზე გამოსახულია რეზონანსულ-გვირაბული ტრანზისტორის ელექტრულ სქემაში პირობითი აღნიშვნა და მისი შექმნის სტრუქტურული სახე. დამატებით ელექტროდზე პოტენციალის მოდება იწვევს დიოდის ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის წანაცვლებას დენის ღერძის გასწვრივ (ნახ. 12.2-ის გ).

შესაძლებელია რეზონანსულ-გვირაბული დიოდის გაერთიანება ჩვეულებრივ ტრანზისტორთან, რის შედეგადაც მივიღებთ კომბინირებულ ხელსაწყოს. ეს ვარიანტი გამოიყენება რეზონანსულ-გვირაბული ბიპოლიარული ტრანზისტორისა და ცხელ ელექტრონებზე შექმნილი რეზონანსულ-გვირაბული ტრანზისტორის მისაღებად. რეზონანსულ-გვირაბულ ბიპოლიარულ ტრანზისტორის ბაზაში ან ემიტერ-ბა-

ზის გადასასვლელის უბანში ჩაშენებულია რეზონანსულ-გვირაბული სტრუქტურა. ეს უკანასკნელი – ცხელ ელექტრონებზე შექმნილ რეზონანსულ-გვირაბული ტრანზისტორის ემიტერშია ჩაშენებული. ამ ხელსაწყოების სქემაში საერთო ემიტერის ჩართვისას მათ მახასიათებლებზე ჩნდება უარყოფითი დახრილობა, რაც საინტერესოა მათი ფართო გამოყენებისთვის.

ნახ.12.3-ის ბ-ზე გამოსახულ რეზონანსულ-გვირაბულ ტრანზისტორში დენის მართვა ხდება ჩამკეტებით. მასში ემიტერის დენის მოდულაცია შესაძლებელია ჩამკეტზე პოტენციალის ცვლილებით, რომელიც თავის მხრივ ცვლის ემიტერის გარშემო მყოფ p-n გადასასვლელის უბანს. ემიტერის დენის ასეთი მართვა საშუალებას იძლევა, იმართოს სტრუქტურაში გამავალი მაქსიმალური დენი.



**ნახ.12.3.** რეზონანსულ-გვირაბული ტრანზისტორის ელექტრულ სქემაში პირობითი აღნიშვნა (ა) და მისი შექმნის სტრუქტურული სახე GaAs-AlAs-ის ბაზაზე: 1 – ჩამკეტი 1; 2 – ჩამკეტი 2; 3 – n<sup>-</sup>-InGaAs; 4 – n<sup>-</sup>-InGaAs; 5 – 1,5 ნმ სისქის i-AlAs; 6-5 ნმ სისქის i-GaAs; 7 – n<sup>-</sup>-GaAs; 8 – n<sup>+</sup>-GaAs და 9 ნახევრად იზოლირებული GaAs-ის საფენი

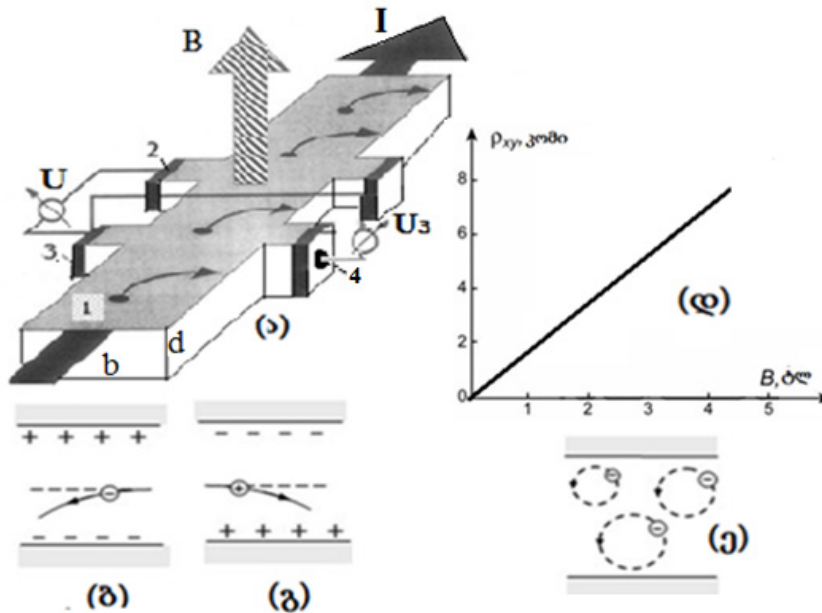
გვირაბულ ეფექტზე შექმნილ ნანოელექტრონულ ხელსაწყოებს აქვთ რიგი უპირატესობანი ტრადიციულ ხელსაწყოებთან შედარებით, რომლებიც დამყარებულია მათ სწრაფქმედებაზე და ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის უნიკალურობაზე. ამის გამო ეს ხელსაწყოები თამაშობენ მთავარ როლს ზემოაღნიშნული სიხშირისა და ზედიდე ინტეგრაციის სქემების შექმნაში.

**საკონტროლო კითხვები:**

1. რაში მდგომარეობს რეზონანსული გვირაბგასვლის ეფექტი და რამდენი სახისაა?
2. როგორ მუშაობს რეზონანსული გვირაბგასვლის დიოდი და როგორია მისი ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი?
3. როგორია სქემატურად რეზონანსული გვირაბგასვლის ტრანზისტორი?
4. როგორ მუშაობს რეზონანსული გვირაბგასვლის ტრანზისტორი?

### 13. კვანტური ჰოლის ეფექტი

ჩვეულებრივი ჰოლის ეფექტი აღმოაჩინა 1879 წელს ბალტიმორის უნივერსიტეტის ასპირანტმა ედვინ ჰოლმა, რომელიც მდგომარეობს *მაგნიტურ ველში* მოთავსებულ დენიან გამტარში *განივი* ელექტრული ველის აღძვრაში. ჰოლის ეფექტის გაზომვის სქემა მოცემულია ნახ.13.1 ა-ზე. აქ 1 გამტარია (ნახევარგამტარი), რომლის გასწვრივ გადის  $I$  ელექტრული დენი; 2, 3, 4 – ძაბვის



**ნახ.13.1.** ა) ჰოლის ეფექტის გაზომვის სქემა: 1 – ნიმუში; 2; 3 და 4 – ელექტრული კონტაქტები; ბ) მაგნიტურ ველში ელექტრონის ტრაექტორია; გ) მაგნიტურ ველში ხვრელის ტრაექტორია; დ) ჰოლის ძაბვასა და მაგნიტურ ველს შორის წრფივი დამოკიდებულება; ე) ძლიერ მაგნიტურ ველში ელექტრონის ციკლური მოძრაობა

გამზომი ელექტროდები;  $B$  – ნიმუშის სიბრტყის მართობულად მიმართული მაგნიტური ველის ინდუქცია;  $U_3$  - 3 და 4 კონტაქტებს შორის აღძრული ჰოლის ძაბვა. ამ ძაბვის აღძვრა აიხსნება ლორენცის ძალის  $F_{\text{ლ}} = eBv$  მოქმედებით მაგნიტურ ველში მოძრავ ელექტრულ მუხტზე, რომელიც აიძულებს მას, იმოძრაოს წრეზე რადიუსით:

$$r = \frac{mv}{Be} \tag{13.1}$$

სადაც,  $e$  ელექტრული მუხტია,  $m$  – მუხტის მატარებელთა ეფექტური მასა,  $v$  – მათი სიჩქარე. ნიმუშში დენია  $I = e v S$ , სადაც  $n$  ელექტრონების კონცენტრაციაა,  $S$  – დენგამტარის განივკვეთი  $S = bd$ , სადაც  $b$  – მისი სიგანეა და  $d$  – სისქე.

ლორენცის და ჰოლის ველით გამოწვეული ძალების ნონასნორობის პირობიდან გამომდინარე, რომ  $eE_{\parallel} = eV_{\parallel}/b = e\mathcal{V}B$ . აქედან მიიღება, რომ  $V_{\parallel} = b\mathcal{V}B = I\mathcal{V}B/nevd = IR_{\parallel}$ , სადაც  $R_{\parallel}$  ჰოლის წინააღმდეგობაა. ორგანოზომილებიან სისტემაში  $R_{\parallel} = B/en_s$ , სადაც  $n_s$  ელექტრონების ზედაპირული კონცენტრაციაა. აღსანიშნავია, რომ  $R_{\parallel}$  აღძრულ განივ პოტენციალთა სხვაობის ფარდობაა გასწვრივ დენთან,  $R_{\parallel} = R_{XY} = V_Y/I_X$ . ამ დროს გასწვრივი წინააღმდეგობა  $R_{\perp} = R_{XX} = V_X/I_X$  სუსტადაა დამოკიდებული მაგნიტური ველის ინდუქციაზე, სიდიდით ახლოს რჩება თავის მნიშვნელობასთან, როცა  $B = 0$ .

ნახ.13.1 ბ)-ზე ნაჩვენებია მაგნიტურ ველში გამტარებლობის ელექტრონის მოძრაობის ტრაექტორია. როდესაც ელექტრონული დენი მიედინება მარცხნიდან მარჯვნივ, ელექტრონები მოძრაობენ შემხვედრი მიმართულებით (მარჯვნიდან მარცხნივ) და იხრებიან ქვევით. ამიტომ გამტარის ქვედა კიდის ახლოს იქმნება უარყოფითი ელექტრული მუხტის სიჭარბე, ხოლო ზედა კიდის ახლოს – დადებითი სიჭარბე. ნახ.13.1 გ)-ზე გამოსახულია დადებითი მუხტის – „ხვრელის“ მოძრაობის ტრაექტორია. ისინი მოძრაობენ ელექტრული დენის მიმართულებით და ისინიც გადაიხრებიან ქვევით. ამიტომ გამტარის კიდის ახლოს იქნება დადებითი ელექტრული მუხტის სიჭარბე, ხოლო ზედა კიდის ახლოს – უარყოფითების სიჭარბე.

ჰოლის  $U_{\parallel}$  ძაბვას აქვს საწინააღმდეგო ნიშანი. ამ ძაბვის სიდიდე პროპორციულია მაგნიტური ინდუქციისა და დენის ძალისა:

$$U_{\parallel} = \frac{BI}{dne} \quad (13.2)$$

სადაც,  $n$  დენის მატარებელთა კონცენტრაციაა;  $e$  – მუხტი;  $d$  – (ნახ.13.1 ა 1) გამტარის სისქე. აქედან ჩანს, რომ ჰოლის ძაბვის ანალოგიურად, 3 და 4 ელექტროდებს შორის გაზომილი ჰოლის წინააღმდეგობა ( $\rho_{XY}$ ) მაგნიტურ ველზე დამოკიდებულია წრფივად (ნახ.13.1. დ). გარდა ამისა, (13.2) ფორმულაში არც ელექტრონის მახასიათებლები (მასა, ძვრადობა) შედის, არც მასალის მახასიათებლები და არც მისი ფორმა. ამიტომ ცხადია, ჰოლის ძაბვის გაზომვით შესაძლებელია გარე მაგნიტური ველის ინდუქციის განსაზღვრა.  $B$ ,  $d$ ,  $I$  სიდიდეების ცოდნა იძლევა საშუალებას, განისაზღვროს ნახევარგამტარში ელექტრული მუხტის მატარებელთა ნიშანი და კონცენტრაცია. ამიტომ, ჰოლის მინიატიურული სენსორები ფართოდ გამოიყენება მაგნიტური ველის სიდიდის გაზომვისთვის, ხოლო ჰოლის ეფექტი – ნახევარგამტარში ელექტროგამტარებლობის მახასიათებლების შესასწავლად.

ნახ.13.1 ა)-ზე გამოსახული სქემით ხშირად ზომავენ 2 და 3 ელექტროდებზე დაცემულ  $U$  ძაბვას, რაც იძლევა საშუალებას, გამოითვალოს 1 გამტარის გასწვრივ ელექტრული წინააღმდეგობა და გამოკვლეულ იქნას მისი დამოკიდებულება მაგნიტური ველის სიდიდეზე (მაგნიტორეზისტული ეფექტი).

ყოველი ზემოთ განხილული მოვლენა 1879 წლიდან სამართლიანი იყო 3D განზომილებიან სივრცეში, სადაც ელექტრონის ლოკალიზაცია ნულია, ანუ ის თავისუფალია და ჰოლის  $R_{\parallel}$  წინააღმდეგობა წრფივადაა დამოკიდებული მაგნიტური ველის

B სიდიდეზე. ერთი საუკუნის შემდეგ, 1980 წელს, კლაუს ფონ კლიტცინგმა აჩვენა, რომ ორგანზომილებიანი ელექტრული სისტემისთვის (2DEG)-ს დამოკიდებულებას აქვს სრულიად სხვა სახე.

ფორმულა (13.1)-დან ჩანს, რომ საკმაოდ დიდი მაგნიტური ველისას  $r$  რადიუსი შეიძლება გახდეს (ნახ.13.1 1) გამტარის გეომეტრიულ ნახევარსიგანეზე ნაკლები. გარდა ამისა,  $2\pi r$  სიდიდე გახდება მუხტის მატარებლის თავისუფალი განარბენის სიგრძეზე ნაკლები, მაშინ ისინი მოვლენ მოძრაობაში წრიულ ორბიტაზე, წრიული სიხშირით  $\omega = Bq/m\hbar$  (ნახ.13 ე). (13.1) ფორმულაში  $v$  სრული სიჩქარეა (დრეიფულს +სითბური), დენის სხვადასხვა მატარებლებს გააჩნიათ სხვადასხვა სითბური სიჩქარეები და, შესაბამისად, ისინი ბრუნავენ სხვადასხვა რადიუსის ორბიტებზე. ეს მხოლოდ – „კლასიკური“ შეხედულებაა. ფაქტობრივად, როდესაც დენის მატარებელთა დე ბროილის ტალღის სიგრძე გახდება  $2\pi r$ -ის რიგის, მაშინ მათი მოძრაობა ამ მხრიდან შეზღუდულია, ანუ ლოკალიზებულია და დანარჩენი ორი მხრიდან სიბრტყეში თავისუფალია, ანუ დელოკალიზებულია. ასეთ სტრუქტურებს უწოდებენ დაბალგანზომილებიან ნანოსტრუქტურებს. ეს კი გვიჩვენებს, რომ ამ შემთხვევაში იმპულსის მომენტიცა და ისინი დენის მატარებელთა მოძრაობის ენერგიაც ორთოგონალურია მაგნიტური ველის ინდუქციის ვექტორის მიმართ და იკვანტებიან. ამ შემთხვევაში მუხტის მატარებლის მოძრაობა უნდა აღინეროს კვანტური მექანიკის კანონებით.

### 13.1. დაბალგანზომილებიანი მყარსხეულოვანი ნანოსტრუქტურები

კვანტური მექანიკის ერთ-ერთი ძირითადი ცნებაა დე ბროილის ტალღა, რომელიც გამოხატავს ნებისმიერი კვანტური ობიექტის დუალიზმს, რაც იმას ნიშნავს, რომ ობიექტი ერთდროულად ტალღაცაა და კორპუსკულარული ბუნების ნაწილაკიც. დე ბროილმა წამოაყენა იდეა, რომ ნებისმიერი იმპულსის მქონე ნაწილაკი შეიძლება დახასიათდეს ტალღის სიგრძით:

$$\lambda_d = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{mv} \rightarrow \frac{h}{m^*v} \quad (13.3)$$

სადაც,  $h$  პლანკის მუდმივაა,  $v$  – სიჩქარე და  $m^*$  – ეფექტური მასა. მაგალითად, თუ ელექტრონი მოძრაობს ოთახის ტემპერატურაზე  $\approx 5 \cdot 10^7$  სმ/წმ სიჩქარით, მას ექნება 1,4 ნმ (14Å) ტალღის სიგრძე.

თუ ობიექტს კოორდინატის ღერძის მიმართ თუგინდ ერთი მხრივ ექნება დე ბროილის ტალღის სიგრძის სათანადო ზომა, მაშინ ასეთ ობიექტში ელექტრონი წარმოადგენს კვანტურ ნაწილაკს და კვანტურ ორმოში ელექტრონის ენერგიას ექნება, ამ მხრის გასწვრივ, დისკრეტული მნიშვნელობები და ერთი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან მეორეზე გადასვლისთვის საჭირო იქნება განსაზღვრული ენერგია. ეს მოვლენა კვანტური შეზღუდვაა და ფიზიკური თვისებებით განსხვავებული იქნება მიკრონაწილაკის მასშტაბის ობიექტისგან.

კლასიკურისგან განსხვავებით, კვანტური ჰოლის ეფექტი დაიმზირება ისეთ გამტარებში, რომელთა სისქე ეთანადება დე ბროილის ტალღის სიგრძეს. ასეთ გამტარებ-



ში, რომელთაც აგრეთვე უწოდებენ ორგანოზომილებიან სისტემებს, ნაწილაკის მოძრაობა შეზღუდულია  $z$  ღერძის გასწვრივ და ელექტრონის მოძრაობას აქვს ორგანოზომილებიანი ხასიათი ( $x, y$ ) სიბრტყეში. ამ დროს  $Z$  ღერძის მართობულ სიბრტყეში მოძრაობა თავისუფალია და ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრი ასე გამოისახება:

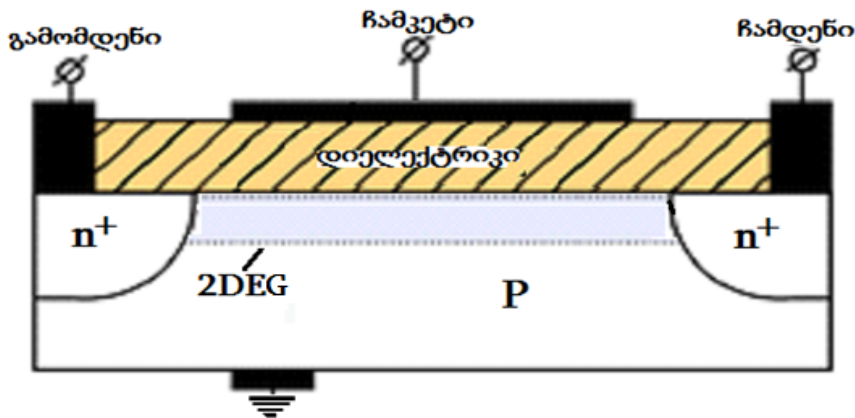
$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + E_n, \quad (13.4)$$

სადაც,  $n=0, 1, 2, \dots, m$  ელექტრონის ეფექტური მასაა.

თანამედროვე ტექნოლოგიით შესაძლებელია რამდენიმე ნმ ზომის ობიექტის (კვანტური შრე, კვანტური მილაკი, კვანტური წერტილი) შექმნა, რომელშიც ელექტრონი ამჟღავნებს კვანტურ თვისებებს.

ორგანოზომილებიანი ელექტრული გაზის (2DEG) შექმნის ერთ-ერთი მეთოდი მდგომარეობს იმაში, რომ ელექტრონები ჩაიჭიროებიან მყარი სხეულის შიგნით ნახევარგამტარისა და დიელექტრიკის გამყოფ საზღვარზე ან ორი სხვადასხვა სახის ნახევარგამტარის გამყოფ ზედაპირზე.

ორგანოზომილებიანი სისტემის კლასიკურ მაგალითს, რომელშიც დაიმზირება კვანტური ჰოლის ეფექტი, წარმოადგენს მეტალ-დიელექტრიკ-ნახევარგამტარის (მდნ) სისტემა, რომელშიც 2DEG წარმოიქმნება ნახევარგამტარისა და დიელექტრიკის გამყოფ საზღვარზე ინვერსიული უბნის შექმნისას. ეს გამოსახულია ნახ.13.2-ზე.

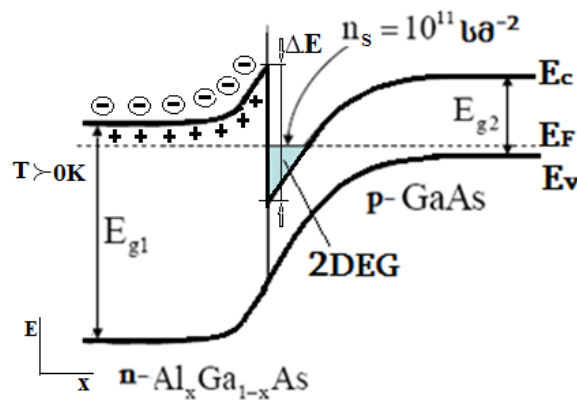


**ნახ. 13.2.** მდნ-ველის ტრანზისტორში ჩამკეტზე ძაბვის მოდების შემდეგ ორგანოზომილებიანი ელექტრული გაზის ფორმირება

მდნ-ტრანზისტორში ჩამკეტი ნახევარგამტარისგან განცალკევებულია დიელექტრიკით. ჩამკეტზე დადებითი ძაბვის მოდებისას ელექტრონები მიიზიდებიან ნახევარგამტარიდან გამყოფ საზღვართან ახლოს. ამით იქმნება გამყოფ საზღვართან ელექტრონების კონცენტრაციის და, შესაბამისად, გამომდენსა და ჩამდენს შორის ელექტრული წინააღმდეგობის შეცვლის საშუალება. ველის მდნ-ტრანზისტორში ელექტრონებს შეუძლიათ იმოძრაონ გამყოფი საზღვრის გასწვრივ (არხში) ( $x, y$ ) სიბრტყეში და მათი მოძრაობა არხის მართობული  $z$  მიმართულებით შეზღუდულია.

ასეთ შემთხვევაში, კვანტური მექანიკის თანახმად, ამ მიმართულებით არსებობს ენერჯის მხოლოდ დისკრეტული დონეები.

დაბალ ტემპერატურაზე, რომლის შესაბამისი ენერჯია გაცილებით ნაკლებია დონეებს შორის არსებულ ენერჯეტიკულ ღრეწობებზე და საკმარისად მცირე სიმკვრივის დროს ყველა ელექტრონი თავმოყრილია უმცირეს დაბალ დონეზე. მაგრამ, მიუხედავად იმისა, რომ ველის მდნ-ტრანზისტორი წარმოადგენს 2DEG-ის თითქმის იდეალურ მარეალიზებელს, მას აქვს რამდენიმე ხარვეზი. კერძოდ, ელექტრონები, რომლებიც თავმოყრილია კრისტალური ნახევარგამტარისა და ამორფული დიელექტრიკის ფენის გამყოფ საზღვარზე, გაიზნევიან ქაოსურად არასწორ გამყოფ ზედაპირზე. გარდა ამისა, ნახევარგამტარის სასურველი ტიპის მიღებისთვის, ტრადიციულად, მასში ხდება ან დონორული, ან აქცეპტორული მინარევების ლეგირება. აბსოლუტურ ნულზე უფრო მაღალ ტემპერატურაზე მინარევულ ატომებს სცილდებიან რა ელექტრონები ან ხვრელები, ისინი ტოვებენ ატომებს იონიზებულ მდგომარეობაში. თავისუფალი მატარებლების კონცენტრაციის გაზრდასთან ერთად, იზრდება მათი გაბნევა იონიზებულ მინარევებზე. ორივე ამ ეფექტით მცირდება ძვრადობა, რომელიც, თავისუფალი მატარებლების მაღალ კონცენტრაციასთან ერთად, აუცილებელია 2DEG-ის ფორმირებისთვის. ამ მხრივ უპირატესობა აქვს მოდულირებად-ლეგირებულ სტრუქტურას, სადაც ნახევარგამტარში მუხტის მატარებელთა გენერირებისა და მათი გადატანის უზნები სივრცულად განცალკევებულნი არიან. ამისთვის გამოიყენებიან სხვადასხვა სიფართის აკრძალული ზონის მქონე ჰეტეროსტრუქტურები, რომელთა ენერჯეტიკული დიაგრამები, GaAs/AlGaAs-ის შემთხვევაში, ილუსტრირებულია ნახ.13.3-ზე.



**ნახ. 13.3.** მოდულირებად-ლეგირებული GaAs/AlGaAs ჰეტეროსტრუქტურა

მოდულირებად-ლეგირებულ სტრუქტურაში დიდი აკრძალული ზონის მქონე ნახევარგამტარში შეყვანილია დონორული მინარევი. ელექტრონები, ტოვებენ რა დონორულ ატომებს (სითბური აქტივაციით  $T > 0K$ ), გადაკვეთენ გამყოფ საზღვარს და გადადიან მცირე აკრძალული ზონის მქონე ნახევარგამტარში. იქ ელექტრონები კარგავენ ენერჯიას, ჩაიჭირებიან გამყოფ ზედაპირულ უბანში და ეკვრიან AlGaAs-ის

ზედაპირისწინა დადებით ფენას. ელექტრონებს არ შეუძლიათ გადალახონ  $\Delta E$  ჯები-რი და აღმოჩნდებიან ლოკალიზებულნი სამკუთხა პოტენციალურ ორმოში. მისი სი-განე რამდენიმე ნანომეტრია. ეს ელექტრონები სივრცულად გამოყოფილნი არიან ძლიერ ლეგირებული n-ტიპის ნახევარგამტარისგან, საიდანაც ისინი წამოვიდნენ. ენერგეტიკული დონეები ელექტრონების გასწვრივი (x-ღერძის გასწვრივ) მოძრაო-ბისთვის დაკვანტულია. დაკავებულია მხოლოდ ქვედა ენერგეტიკული დონეები. მაგ-რამ ამ დონეებზე ელექტრონებს შეუძლიათ მოძრაობა ორი სხვა მიმართულებით ჰე-ტეროგადასვლის პარალელურ სიბრტყეში. ყოველი ასეთი დონე წარმოადგენს ზომი-თი დაკვანტვის ორგანოზომილებიან ქვეზონას. ამრიგად, დაბალ-ლეგირებულ ვინრო-ზონიან ნახევარგამტარში ჰეტეროგადასვლის საზღვართან წარმოიქმნება ორგან-ზომილებიანი ელექტრული გაზი (2DEG). მასში მოთავსებულია ორმხრივი მიმართუ-ლების დელოკალიზებული ელექტრონები.

მოდულირებად-ლეგირებული სტრუქტურა იმითაც გამოირჩევა მდნ-სტრუქტურ-რისგან, რომ ღრმა ვაკუუმის პირობებში მიღებული ზედაპირები გამოირჩევიან მა-ღალი სისუფთავით და მათი გამყოფი ზედაპირი უაღრესად სწორია ატომურ დონე-ზე. სტრუქტურების დაფენები მიმდინარეობს ღრმა ვაკუუმში, მოლეკულურ-სხივუ-რი ეპიტაქსიის ტექნოლოგიით, რომელიც განხილული იყო §1.8-ში.

ამრიგად, შესაძლებელია სამგანზომილებიან ნახევარგამტარებში მივიღოთ ორ-განზომილებიანი ელექტრული გაზი, თუ მოძრავ ელექტრონებსა და მათ წარმომ-ქმნელ მინარევებს განვაცალკევებთ და განვათავსებთ სხვადასხვა, მაგრამ

მეზობლად მყოფ ერთმანეთთან ძალიან ახლო სიბრტყეში, რომ მინარევებმა შეძ-ლონ თავიანთი ელექტრონების გადაცემა. სწორედ მოლეკულურ სხივური ეპიტაქსია (მსე) იძლევა ამის საშუალებას.

### საკონტროლო კითხვები:

1. რაში მდგომარეობს ჰოლის ეფექტი?
2. რა ფიზიკურ სიდიდეებზეა დამოკიდებული ჰოლის წინალობა?
3. ნახევარგამტარის რომელი პარამეტრების განსაზღვრა შეიძლება ჰოლის წინალობიდან?
4. რატომ შეიძლება ჰოლის წინალობის გამოყენება წინალობის გაზომვის ეტა-ლონად?
5. როგორ განიმარტება ობიექტის დაბალგანზომილებიანობის ცნება?
6. რომელ ნანოხელსაწყოებში დაიმზირება კვანტური ჰოლის ეფექტი?
7. როგორია მოდულირებად-ლეგირებული ჰეტეროსტრუქტურა?

### 13.2. ელექტრონული სისტემა მაგნიტურ ველში

კლასიკური ელექტროდინამიკიდან ცნობილია, რომ B მაგნიტური ინდუქციის ველში ელექტრონები მოძრაობენ წრიულ ტრაექტორიებზე, რომლებსაც ეწოდებათ

ციკლოტრონული ორბიტები. მათზე მოძრაობის სიხშირე, ანუ ციკლოტრონული სიხშირე,  $m$  მასის,  $e$ -მუხტით,  $B$  მაგნიტურ ველში წრიულ ორბიტაზე პერიოდულად მოძრავი ელექტრონის  $\omega_c$  სიხშირეა. მოძრაობის კლასიკურ განტოლებას აქვს სახე:

$$m \frac{v^2}{R} = \frac{e}{c} v B \quad (13.5)$$

სადაც,  $v$  ელექტრონის სიჩქარეა წრეზე,  $R$  - წრის რადიუსი. აქედან მიიღება, რომ

$$R = \frac{cmv}{eB} \quad (13.6)$$

საიდანაც მარტივად მიიღება ციკლოტრონული სიხშირის გამოსახულება:

$$\omega_c = \frac{v}{R} = \frac{eB}{mc} \quad (13.7)$$

ბორ-ზომერფელდის წესით, ციკლოტრონული მოძრაობისას:

$$\oint \vec{P} d\vec{l} = nh \quad (13.8)$$

სადაც,  $\vec{P}$  ელექტრონის იმპულსის ვექტორია მაგნიტურ ველში, რაც იძლევა:

$$P \rightarrow P - \frac{e}{c} A, \text{ სადაც } A - \text{ ცირკულაციის პოტენციალი გამოსახავს კავშირს მაგ-}$$

ნიტურ ნაკადთან, მაშინ:

$$nh = 2\pi P - \frac{e}{c} B \pi r^2 = 2\pi m \omega_c r^2 - \pi m \omega_c r^2 = \pi m \omega_c r^2 \quad (13.9)$$

ქედან  $n$ -ური კვანტური ორბიტალები:

$$r_n = \sqrt{\frac{nh}{\pi m \omega_c}} = \sqrt{2n \frac{\hbar}{eB}} \quad (13.10)$$

ხოლო კვანტური ენერგიები:

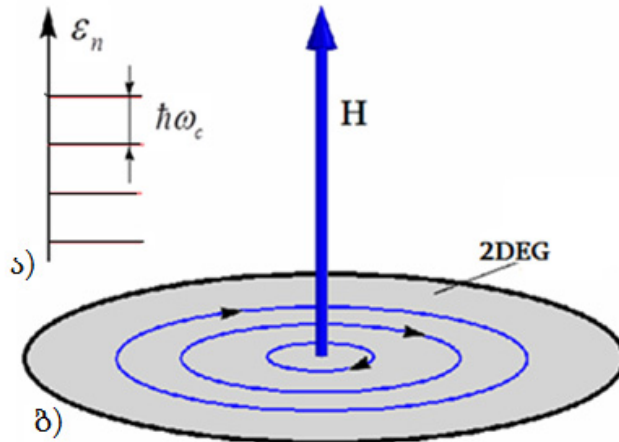
$$E_n = \frac{P^2}{2m} = \frac{m \omega_c r_n^2}{2} = n \hbar \omega_c \quad (13.11)$$

სადაც,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  (13.11)-დან ჩანს, რომ ამ დროს აღიძვრება ექვიდისტანციური დისკრეტული დონეები. „დაიკარგა“ კვანტური ენერგიის ნაწილი, რომელიც ეთანადება  $n = 0$ -ს. ზუსტი გამოთვლებით დადგინდა, რომ:

$$E_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (13.12)$$

მიღებულ კვანტურ დონეებს ეწოდება ლანდაუს დონეები და  $V$ -ს კი - ლანდაუს დონის შევსების ხარისხი.

ნახაზ 13.4-ზე გამოსახულია ლანდაუს დონეების განაწილება (ა) და დაკვანტვის სქემატური წარმოდგენა (ბ).



ნახ.13.4. ლანდაუს დონეების განაწილება (ა) და დაკვანტვის სქემატური წარმოდგენა (ბ)

$m$  მასის თავისუფალი ელექტრონისთვის,  $B = 10$  ტლ მაგნიტური ველისას (რაც ექსპერიმენტებზე ჩვეულებრივია),  $\omega_c = 280$  გჰც-ზე მიღებულ დაკვანტვისას ლანდაუს დონეებს შორის ენერგია შეესატყვისება  $10\text{K}$  ტემპერატურულ ენერგიას. მაშასადამე, მაგნიტურ ველში 2DEG-ში კვანტური ეფექტების დამზერისთვის საჭიროა ცდები ჩატარდეს  $10\text{K}$ -ზე უფრო დაბალ ტემპერატურებზე.

ლანდაუს დონეზე ელექტრონული მდგომარეობის სიმკვრივის ხარისხობრივი განსაზღვრისთვის დავუშვათ, რომ პაულის აკრძალვის პრინციპი შეიძლება გავრცელდეს ერთი ციკლოტრონული ორბიტალისთვის. პაულის პრინციპის მოთხოვნით, ორბიტალების გადაუკვეთელობის გამო, ერთ კვანტურ მდგომარეობაზე უნდა

მოვიდეს ფართი  $dS \equiv \pi \cdot l_B^2 = \frac{\pi \hbar c}{eB}$ ; სადაც,  $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$  - მაგნიტური სიგრძეა. მისი ფი-

ზიკური აზრი მდგომარეობს იმაში, რომ თუ 2DEG-ის გეომეტრიული ზომა გახდება მასზე ნაკლები, მაშინ მაგნიტურ ველში ამოცანა დადის ერთგანზომილებიან ამოცანაზე, ციკლოტრონული ორბიტა მასში ვერ თავსდება და ის აზრს კარგავს. დაზუსტებული თეორიით დადგინდა, რომ  $l_B$  რადიუსის ფართობი ელექტრონის კონცენტრაცია

$$n_0 \equiv \frac{eB}{2\pi\hbar c} = \frac{B}{2\Phi_0} \quad (13.13)$$

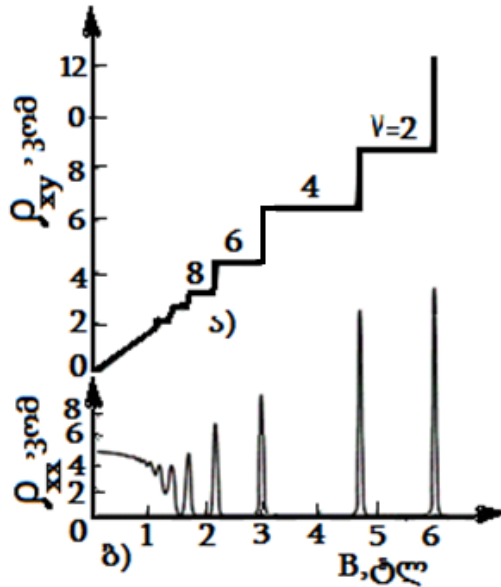
სადაც,  $\Phi_0$  - მაგნიტური ნაკადის კვანტია. ის  $l_B$ -რადიუსიან წრეში გამავალი მაგნიტური ნაკადის ტოლია:

$$\Phi = \pi l_B^2 B = \frac{\pi \hbar c}{e} = \Phi_0 = 2,05 \cdot 10^{-7} \text{ ერს} \cdot \text{სმ}^2 \quad (13.14)$$

(13.13) ფორმულიდან გამოდის, რომ ლანდაუს დონის ყოველ ელექტრონზე მოდის მაგნიტური ნაკადის ორი კვანტი.

### 13.3. მთელრიცხვიანი კვანტური ჰოლის ეფექტი

როგორც შემჩნეული იყო 1980 წელს კლიტცინგის მიერ, სილიციუმის მეტალ-ჟანგი-ნახევარგამტარ (მჟნ) ტრანზისტორის ინვერსიულ შრეში დაბალ ტემპერატურასა ( $T \sim 1K$ ) და ძლიერ მაგნიტურ ველში ( $B \sim 10$  ტლ) ჰოლის ეფექტის გაზომვისას, ჰოლის წინალობის მაგნიტურ ველზე წრფივი დამოკიდებულების ნაცვლად, როგორც მიიღო ჰოლმა (ნახ.13.1 დ), დამოკიდებულების მრუდზე დაიმზირა „საფეხურები“ (ნახ.13.5). ყოველ ამ საფეხურზე წინალობის სიდიდე ფუნდამენტური ფიზიკური სიდიდეების კომბინაციის მთელ რიცხვ  $\nu$ -ზე განაყოფის ტოლი იყო:



ნახ.13.5. ჰოლის წინააღმდეგობის (ა) და კუთრი წინალობის (ბ) დამოკიდებულება მაგნიტურ ველზე

$$R_{\nu} = \frac{h}{\nu e^2} \quad (13.15)$$

სადაც,  $\nu$  ნატურალური რიცხვია,  $h$  - პლანკის მუდმივა.

ნახაზ 13.5-დან ჩანს, რომ როდესაც ჰოლის წინალობის დამოკიდებულებაზე (ნახ.13.5 ა) შეიმჩნევა საფეხური, გასწვრივი ელექტრული წინალობა (ნახ.13.5 ბ) ძალიან მცირე სიდიდეა და, ზუსტი ექსპერიმენტული გაზომვით, თითქმის ნულის ტოლია. ეს იმას ნიშნავს, რომ საფეხურის დროს, დაბალ ტემპერატურაზე ნიმუშში დენი გადის გაბნევის გარეშე.

ექსპერიმენტულმა გაზომვებმა აჩვენა, რომ ჰოლის წინალობის დაკვანტვის სიზუსტეზე არ ახდენს გავლენას ისეთი მნიშვნელოვანი პარამეტრები, როგორცაა ნიმუშის ზომები, საზღვრის გავლენა და ჩვეულებრივ ჰოლის ეფექტში მნიშვნელოვანი ჰოლის ჩამოკლება ომური კონტაქტებით, ასევე, სტრუქტურული სრულყოფა, ანუ დეფექტების და მინარევების არსებობა, 2D-ელექტრული გაზის დამჭერი მასალის სახე, ტემპერატურა და გამზომი დენის ძალა. დაკვანტვის გაზომვის სიზუსტე თით-

ქმის ცთომილების გარეშეა და ამიტომ 1990 წელს წინააღმდეგობის  $h/e^2$  კვანტის სიდიდე, როცა  $\nu=1$   $R_3 \approx 25812,807557(18)$ , ომი მიიღეს წინააღმდეგობის საერთაშორისო ეტალონად.

მთელრიცხვიანი კვანტური ჰოლის ეფექტის (მკჰე) არსის და მისი კლასიკური ეფექტისგან განსხვავების გაგებისთვის უნდა გავითვალისწინოთ 2DEG-ის თავისებურებანი და მაგნიტურ ველზე დამოკიდებული დისკრეტული, ეკვიდისტანციური ლანდაუს ენერგეტიკული დონეების აღძვრა. ასევე, აღსანიშნავია, რომ 2DEG-ში ლანდაუს დონეების შემავსებელ ელექტრონთა რიცხვი

(ე.წ. გადაგვარება  $d = eB/h$ ) და ჰოლის კლასიკური და კვანტური ეფექტის განმასხვავებელი სხვა სიდიდეებიც, გამოსახული (13.7), (13.10), (13.12), (13.14) და (13.15) ფორმულებით, დამოკიდებული არიან მხოლოდ უნივერსალურ მუდმივებზე, მაგნიტურ B ველზე და არ არიან დამოკიდებული ნიმუშის პარამეტრებზე.

ნიმუშში, 2DEG-ის  $n$  ელექტრონებით, ძლიერ მაგნიტურ ველში, დაბალ ტემპერატურაზე ყველა ელექტრონი იმყოფება ლანდაუს უმდაბლეს ენერგეტიკულ დონეზე. მაგნიტური ველის შემცირებასთან ერთად, ლანდაუს დონეზე ელექტრონთა ტევადობა (გადაგვარება) მცირდება  $eB_v/h$ -ით, ელექტრონები გადადიან ზედა, უახლოეს დონეზე ლანდაუს დონის  $hB_v/(2\pi m)$  ენერგეტიკული ღრეჩოს გადალახვით (ნახ.13.4 ა). ასეთი პროცესი ქმნის ველის თანმიმდევრობას  $B_v = nh/e\nu$ , რომელთა დროს ელექტრონები სრულად ავსებენ ლანდაუს დონეების ზუსტ რიცხვს, ტოვებენ რა ზემოთ განლაგებულ დონეებს ცარიელს. ჰოლის წინააღმდეგობის კლასიკურ გამოსახულებაში  $R_3=B/ne$  მიღებული  $B_v$  ველის მნიშვნელობების თანმიმდევრული ჩასმით მიიღება დაკვანტული ჰოლის წინააღმდეგობა  $R_\nu = h/\nu e^2, \nu = 1,2,3, \dots$

ლანდაუს დონის შევსების პროცესს თან ახლავს ამ დონეზე ელექტრონთა ლოკალიზაცია, რომლებიც აღარ მონაწილეობენ გამტარებლობაში, ამიტომ დონის შევსებისთანავე მაგნიტონინალობა მყისვე ხდება ნულის ტოლი (ნახ.13.5 ბ), ხოლო ჰოლის წინააღმდეგობა განსაზღვრული მნიშვნელობისაა და მუდმივი (ნახ.13.5 ა).

**მკჰე-ის** ზუსტი დაკვანტვის არსებობის თეორიული გამყარება, მაღალი დონის ვირტუალურ ექსპერიმენტულ შედეგებზე დაყრდნობით, სხარტი გააზრებით მოგვცა ბობი ლაფლინმა. ის გამოვიდა მარტივი მოსაზრებიდან, რომ ჰოლის წინააღმდეგობა  $R_3 = h/ve^2 = (h/e)/(ve)$  წარმოდგენა შეიძლება, როგორც მაგნიტური ნაკადის კვანტის  $\Phi_0 = h/e$ -ს ფარდობა ელექტრონის  $e$  მუხტთან, გამრავლებული ლანდაუს დონის შევსების  $\nu$  ხარისხზე. მაგნიტური ნაკადის კვანტი – რაღაც ვირტუალური ელემენტარული ერთეულია, რომლის მეშვეობით შესაძლებელია მაგნიტური ველის მოქმედების აღწერა ელექტრულ სისიტემასთან. თავის მხრივ, მაგნიტური ველი არ იკვანტება, რაც განასხვავებს მას მუხტისგან, რომელიც  $e$ -ს ჯერადია.

ზემოთ აღნიშნულიდან გამომდინარე, **მკჰე-ის** ახსნა განიხილება ერთეულოვანი ორგანოზომილებიანი ელექტრონების კვანტური მოძრაობით მაგნიტურ ველში, მკაცრად განსაზღვრული ელექტრონების მიერ, მაღალ დონეზე გადასასვლელად მხოლოდ ლანდაუს დონეთა ღრეჩოს შესაბამისი ენერგიების მიღებით და გამყოფ

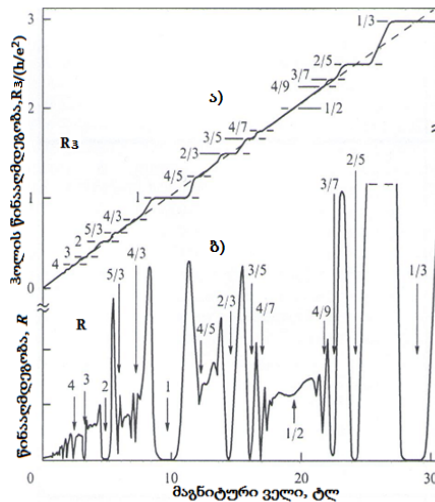
ზედაპირზე ლოკალური, ელექტრონებისთვის ჩამჭერი მდგომარეობების გაჩენით. დანარჩენ სხვა ელექტრონებთან ურთიერთობა არ

განიხილება, გარდა მხოლოდ ლანდაუს დონის შევსებასა ან დაცლაში მონაწილეობისა. ამიტომ, მკჰე-ს უნოდებენ ერთნაწილაკიან ეფექტს.

### 13.4. წილადობრივი კვანტური ჰოლის ეფექტი

ანს შტიორმერმა და დენ ცუიმ 1981 წელს შეამჩნიეს, რომ ჰოლის წინააღმდეგობაზე საფეხური არა მხოლოდ ლანდაუს დონის შევსების  $\nu$  ხარისხის მთელ მნიშვნელობაზეა, არამედ არსებითად-ძლიერ მაგნიტურ ველზეც, როცა  $\nu = 1/3$ . შემდეგში აღმოჩენილ იქნა საფეხურები ელექტრონულ წინააღმდეგობაზე  $\nu$ -ს სხვა წილად მნიშვნელობებზეც, მაგალითად, როცა  $\nu = 2/5$ ;  $3/7$  და ა.შ. ზოგადად, ეს ეფექტი დაიმზირება, როცა 2DEG-ში ლანდაუს დონეების ნაწილობრივ შევსებისას ჰოლის წინააღმდეგობის მაგნიტური ინდუქციის სიდიდეზე დამოკიდებულების გრაფიკზე დაიმზირება განივი წინააღმდეგობის მუდმივობა – „საფეხურის“ სწორი უბანი.

თუ გავიზიარებთ ბ. ლაფლინის ვირტუალურ მოსაზრებას მკჰე-ის შემთხვევაში და მის ახსნას გამოვიყენებთ აქ მიღებული შედეგებისთვის, სადაც საფეხური გაჩნდა პირველი დონის შევსების სამჯერ უფრო მაღლა, გამოვა, რომ მუხტია  $q = \Phi_0 / (3h/e^2) = e/3$ , რაც იმ დროისთვის აუხსნელი იყო. ის, რომ ექსპერიმენტზე დაიმზირა რაღაც ნაწილაკი წილადური მუხტით, იყო ნამდვილი. ყოველივე ეს გვაძლევს, რომ ორგანზომილებიანი ელექტრონული გაზის (2DEG) ნაცვლად ვიხელმძღვანელოთ ჩვენთვის ჯერ კიდევ უცნობი ტერმინით – ორგანზომილებიანი ელექტრონული სისტემით (2DES).



**ნახ.13.6.** ჰოლის წინააღმდეგობის (ა წყვეტილი), მთელრიცხვიანი და წილადობრივი კვანტური ჰოლის წინააღმდეგობების (ა) და გასწვრივი წინააღმდეგობის (ბ) დამოკიდებულება მაგნიტურ ველზე



ნახაზ 13.6 - ზე მოცემულია ჰოლის წინააღმდეგობის, მთელრიცხვიანი და წილადობრივი კვანტური ჰოლის წინააღმდეგობის და გასწვრივი წინააღმდეგობის დამოკიდებულება მაგნიტურ ველზე. მასზე შეიმჩნევა „საფეხურები“, ლანდაუს დონის შევსების როგორც მთელრიცხვიანი, ასევე წილადობრივი მნიშვნელობების შემთხვევაში.

წილადობრივი კვანტური ჰოლის ეფექტის (ნკჰე) აღძვრის მიზეზი მდგომარეობს მაგნიტურ ველში ელექტრონთა შორის ურთიერთქმედების თავისებურებებით. ამიტომ ნკჰე არ შეიძლება განიხილებოდეს, როგორც ერთელექტრონიანი ეფექტი და აიხსნას მხოლოდ მკჰე-ის თეორიით. თუმცა, როგორც მკჰე-ისას აუცილებელია ლანდაუს დონეებში ენერგეტიკული ღრეჩოს არსებობა, ასევე აუცილებელია მისი არსებობა ნკჰე-ის აღძვრისას.

### საკონტროლო კითხვები:

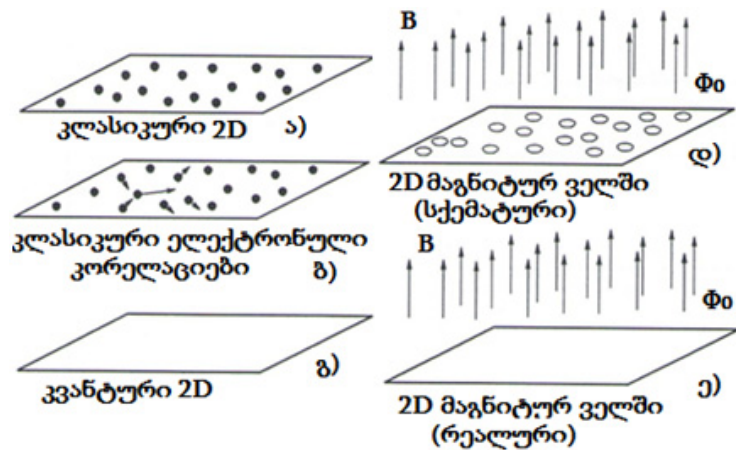
1. როგორი დონეა ლანდაუს დონე?
2. რას ნიშნავს ლანდაუს დონის შევსების ხარისხი?
3. რა არის მაგნიტური სიგრძე და რა ფიზიკური აზრი აქვს მას?
4. რა არის მაგნიტური ნაკადის კვანტი და რა კავშირშია მაგნიტურ სიგრძესთან?
5. რას ნიშნავს მთელრიცხვიანი კვანტური ჰოლის ეფექტი?
6. ახსენით, რატომაა კვანტური ჰოლის ეფექტის დროს ჰოლის წინააღმდეგობის მაგნიტური ველის დამოკიდებულებაზე „საფეხურები“ და რაზეა დამოკიდებული მისი პლატფორმა?
7. ახსენით კვანტური ჰოლის ეფექტისას გასწვრივი წინააღმდეგობის ნულთან ტოლობა;
8. რაში მდგომარეობს ლეფლინის წარმოდგენა მაგნიტური ველის დაკვანტვის შესახებ?
9. როდის დაიმზირება ორგანზომილებიანი ელექტრულ ვაზში წილადობრივი კვანტური ჰოლის ეფექტი?

### 13.5. კვანტური ჰოლის ეფექტების ხარისხობრივი ინტერპრეტაცია

წილადობრივი კვანტური ჰოლის ეფექტი წარმოადგენს მრავალწილადობრივ ეფექტს, რომელიც შეიცავს ძლიერ მაგნიტურ ველში ელექტრონებს შორის რთულ ურთიერთქმედებას, კორელაციას. ამიტომ ნკჰე-ის ასახსნელად საჭიროა ახალი თეორიული მიდგომები, ახალი იდეები და თავისებურებანი. სწორედ ასეთი ახალი და სწორი თეორიული მიდგომა წამოაყენა 1983 წელს ბობი ლიფლინმა. ამ თეორიის ძირითადი ქვაკუთხედეა მაგნიტური ნაკადის კვანტისა და ორგანზომილებიანი ელექტრონის ურთიერთქმედება.

კლასიკური მექანიკის თანახმად, ორგანზომილებიანი ელექტრონები დამუხტული ბურთულებია და შესაძლებელია ცალკეულ მათგანზე დაკვირვება (ნახაზი 13.7 ა). მათ შორის განზიდვაა, როგორც ეს გამოსახულია ნახ.13.7 ბ-ზე, მაგრამ იკავებენ

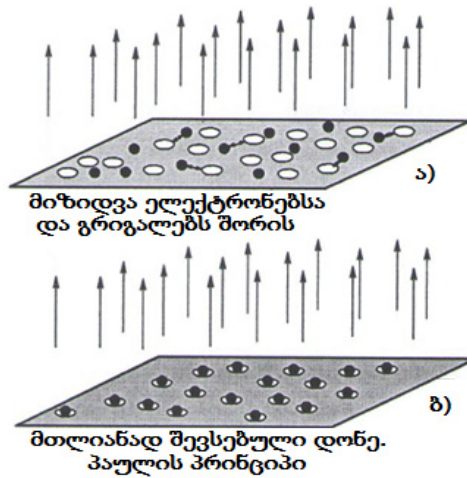
სხვა განსაზღვრულ ადგილს. კვანტურ-მექანიკური გაგებით, ელექტრონები მთელ სიბრტყეში არიან განფენილი (ნახ.13.7 გ), როგორც ტალღა და არიან განურჩევლნი. მნიშვნელოვანი კონცეპტუალური წინ გადადგმული ნაბიჯია ის, რომ *გამჭოლი მაგნიტური B ველი* „ელექტრონთა სითხეში“ *ქმნის მაგნიტურ „კენჭებს“* (ე.წ. გრიგალი), თითო ცალს მაგნიტური ველის ყოველ  $\Phi_0 = h/e$  კვანტზე (ნახ.13.7 დ). გრიგალის შიგნით ელექტრონი იქცევა შემდეგნაირად: ის ცენტრიდან მიისწრაფვის გრიგალის ზედაპირისკენ. გრიგალის ზომა მაგნიტური ნაკადის ერთი კვანტის ფართობის ტოლია, ანუ ფართობი  $(S) \cdot B = \Phi_0$ . ამიტომ შეიძლება წარმოვიდგინოთ, რომ *ყოველი გრიგალი თავის თავში ინახავს ნაკადის ერთ კვანტს*. გრიგალი, ისე როგორც ელექტრონი, განფენილია მთელ ზედაპირზე და მისი მოძებნაც შესაძლებელია თანაბარი ალბათობით (ნახ.13.7 ე).



**ნახ.13.7.** 2DES-ის სხვადასხვა მიახლოებაში სქემატური გამოსახვა. შავი წერტილი – ელექტრონი; თეთრი რგოლები – გრიგალი და ისარი – მაგნიტური B ველის ნაკადის  $\Phi_0$  კვანტი

საყურადღებოა, რომ მაგნიტურ ველში ელექტრონის და გრიგალის ინტუიციური ურთიერთკავშირი გადამწყვეტია და ქმნის ახალ შესაძლებლობებს ბევრი მოვლენის ახსნაში, როცა თვით ისინი საწინააღმდეგო ტიპის ობიექტებია – პირველს გააჩნია მუხტი, მეორეს არ გააჩნია. ყოველი ელექტრონი გრიგალის ცენტრშია და, ამავდროულად, მის გარშემო მყოფი ელექტრონების ნაწილია. ასევე ცხადია, რომ მათი შეკავშირება ენერგეტიკულად მომგებიანია.

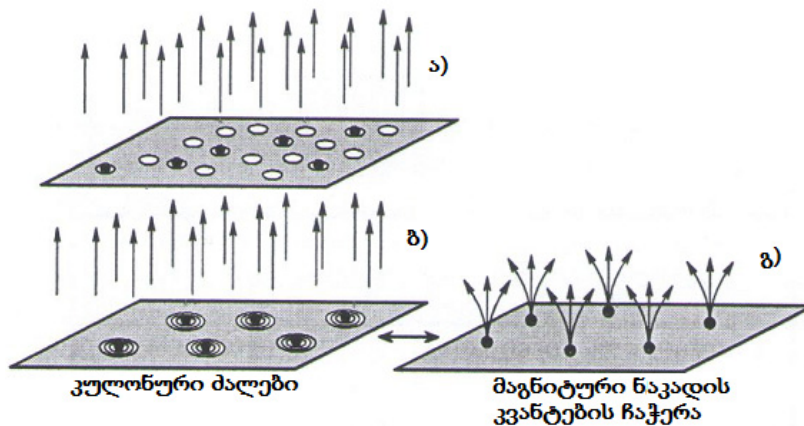
*აუცილებელია, რომ ყოველი ელექტრონი* გარშემორტყმული იყოს ერთი *გრიგალით*, რომელიც სამართლიანია პაულის პრინციპითაც. ლანდაუს ქვედა დონის სრული შევსებისას, როცა ელექტრონების რიცხვი ნაკადის კვანტის რიცხვის ტოლია, ელექტრონების და გრიგალების განაწილება სრულად განისაზღვრება პაულის პრინციპით – ერთი გრიგალი ერთ ელექტრონზე (ნახ.13.8). ეს **მკჷე-ის** აღძვრის პირობაა.



**ნახ.13.8.** 2DES - ში ელექტრულ-გრიგალური მიზიდვის (ა) შექმნის სქემატური გამოსახვა, ლანდაუს დონის სრული შევსება (ბ), როცა  $\nu = 1$

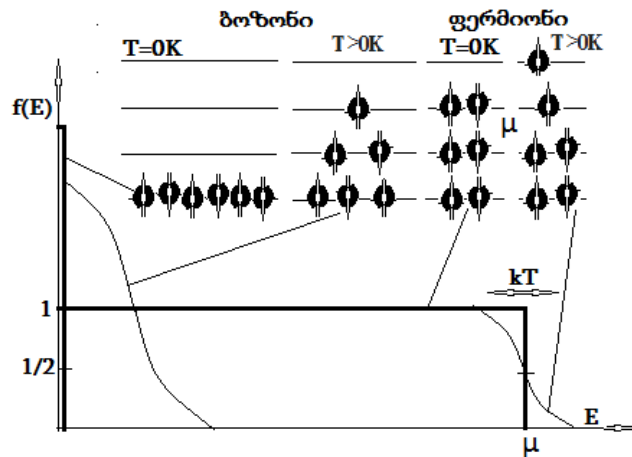
ეს შეიძლება გავრცელდეს, როცა  $\nu = 2, 3, 4, \dots$  მაშასადამე, მკვე-ის აღძვრისას მართებულია ელექტრონებისთვის პაულის პრინციპი, ანუ ელექტრონები ავსებენ ცარიელ მდგომარეობებს.

როდესაც მაგნიტური ველი გადააჭარბებს მკვე-ის სიდიდეს  $\nu = 1$ -დან, უფრო ძლიერი მაგნიტური ველი წარმოშობს მეტ ნაკადის კვანტს და აჭარბებს ელექტრონთა რაოდენობას. პაულის პრინციპი სრულდება ერთ ელექტრონზე ერთი გრიგალის მოთავსებისას (ნახ.13.9 ა), მაგრამ ამ დროს გამოუყენებელი რჩება გრიგალები. ერთ ელექტრონზე ერთზე მეტი გრიგალის მოთავსების შემთხვევაში, ელექტრული სისტემის ელექტროსტატიკური კულონური ენერგია მცირდება (ნახ.13.9 ბ), რაც იწვევს განზიდვის ენერგიის შემცირებას. ამ შემთხვევაში აღძრული ელექტრონების ფარდობითი მოძრაობა პაულის პრინციპით კი არა, არამედ კულონური განზიდვის ენერგიის შემცირებით იმართება.



**ნახ.13.9.** ელექტრულ-გრიგალური მიზიდვის შექმნის სქემატური გამოსახვა, პაულის პრინციპის დაცულობა (ა), ერთ ელექტრონზე სამი გრიგალის მოთავსება(ბ) და ელექტრონის გადაქცევა კომპოზიტურ ნაწილაკებად (გ)

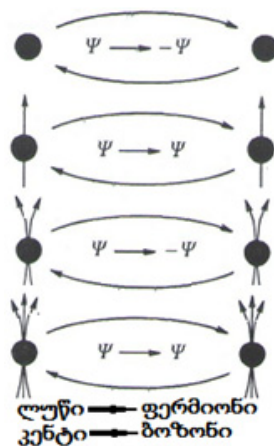
გამოდის, რომ ნაკადის კვანტმა შექმნა გრიგალი და შესაძლებელია გრიგალის შეცვლა ნაკადის კვანტით. მაშინ მართებულია აზრი, რომ ელექტრონი „იჭერს“ მაგნიტური ნაკადის კვანტს და ხდება მისი შემადგენელი ნაწილი (ნახ.13.9 ბ, გ). თეორიის თვალსაზრისით, ასეთი „შემადგენელი ნაწილაკების“ აღწერა ბევრად მარტივია, ვიდრე „თავისუფალი“ ელექტრონების. ელექტრონს *პლუს* ნაკადის კვანტი ახალი ობიექტია, რომელსაც ეწოდება **კომპოზიტური ნაწილაკი (კნ)**. **კნ-ის გარსში** ელექტრონებთან ერთად, გარე მაგნიტური ველი „შევიდა“ ნაწილაკის შემადგენლობაში, მაგნიტური ველი „გაქრა“ და ელექტრონები აღარ განიცდიან მისგან არავითარ მოქმედებას. მეტიც, ჩაჭერილი ნაკადის კვანტი ცვლის ნაწილაკის ბუნებას გარდაქმნის ფერმიონებს ბოზონებად და პირიქით. მაგრამ კვანტური მექანიკით არ შეიძლება შეიქმნას კვაზიფერმიონი ბოზონების გაერთიანებით, მათი სპინებისგან გამომდინარე. ასევე, ფერმიონებს და ბოზონებს აქვთ სხვადასხვა სტატისტიკა (ნახ.13.10). ფერმიონთა სისტემის ამსახველი ტალღური ფუნქცია ანტისიმეტრიულია და ნაწილაკთა გადასმით ის ნიშანს იცვლის, ანუ მრავლდება -1-ზე, ხოლო ბოზონების შემთხვევაში სიმეტრიულია და ნიშანს არ იცვლის, მრავლდება +1-ზე. **კნ-ის შემთხვევაში** ეს ასე არაა. ამ დროს საჭიროა ჩაჭერილი ნაკადის კვანტის გათვალისწინება და მისი არსებობა ცვლის ნაწილაკის სტატისტიკას. კერძოდ, ელექტრონი + *ლუნი* რაოდენობის ნაკადის კვანტი კომპოზიტური *ფერმიონია (კფ)*, ხოლო ელექტრონი + *კენტი* რაოდენობის ნაკადის კვანტი კომპოზიტური *ბოზონია (კბ)* (ნახ.13.11).



**ნახ.13.10.** ენერჯის მიხედვით განაწილება ბოზონების (ბოზე-აინშტაინის სტატისტიკა) და ფერმიონების (ფერმი-დირაკის სტატისტიკა)

დაბალი ლანდაუს დონის 1/3-ით შევსებისას ყოველი ელექტრონი ღებულობს მაგნიტური ნაკადის სამ კვანტს. მაშასადამე, მიიღება **(კბ)**. ის იმყოფება ნულოვან მაგნიტურ ველის პირობებში (ის უკვე ახალი ნაწილაკია), ახალი ენერგეტიკული მდგომარეობით *ბოზე-კონდენსაციის* მდგომარეობაში. შეიძლება ექსპერიმენტულად განისაზღვროს ის ენერგეტიკული ღრეჩო, რომელიც საჭიროა ჰოლის წინაღობის დაკვანტვის აღძვირსთვის და ჩვეულებრივი წინაღობის ნულთან გატოლებისთვის.

როდესაც მაგნიტური ველის სიდიდე აჭარბებს ლანდაუს დონის შევსების ფაქტორის სრული გაჯერების შესაბამის მაგნიტურ ველს, მაშინ მაგნიტური ნაკადის კვანტების ნაწილი არ ჩაიჭირება და ყოველ გრიგალში აღიძვრება მუხტის წილადობრივი დეფიციტი. მათ აკლიათ ელექტრონები და ისინი თითქოს წარმოადგენენ ეფექტურ *ხვრელებს* – ეფექტური დადებითი მუხტის მატარებლებს. ამ კვაზინაწილაკებს შეუძლიათ თავისუფლად მოძრაობა **2DES**-ში და ხდება დენის გატარება.



**ნახ.13.11.** ელექტრონების და კომპოზიტური ნაწილაკების სტატისტიკა

ეს კი არის წილადობრივი კვანტური ჰოლის ეფექტი, რომელიც ექსპერიმენტზე დაიმზირება სხვადასხვა მეთოდებით. **ნკჰე-ზე**, ისე როგორც **მკჰე-ზე**, მიღებული პლატო (საფეხური) პოტენციალის ფლუქტუაციის შედეგია, რომელიც თავის მხრივ შექმნილია მატარებელთა ლოკალიზაციით კრისტალის დეფექტებზე. განსხვავება იმაშია, რომ ელექტრული დენის მატარებლები – არა ელექტრონები, არამედ წილადობრივი მუხტის მატარებელი ნაწილაკებია. **ნკჰე** თეორიულად კარგად იხსნება ყოველი ელექტრონის მიერ მაგნიტური ნაკადის კვანტის კენტი რიცხვის ჩაჭერისას, ანუ როცა წილადის მნიშვნელი კენტი რიცხვია, მაგალითად,  $\nu = 1/3, 1/5, 1/7, \dots$  კვაზინაწილაკი, მუხტით  $e/3, e/5, e/7$  და ა.შ.,  $\nu = 2/3, 4/5, 6/7$  და ა.შ. ასე რომ, წილადობრივი **კფ**, რომლებიც აკმაყოფილებენ ლანდაუს შევსების ფაქტორის სახეს  $\nu = p/(2p \pm 1)$ , (პირველადი წილადი) ექვემდებარებიან რაციონალურ ახსნას.

ნანოელექტრონიკაში, კვანტური მექანიკის გამოყენების ბევრი საინტერესო, უახლესი, თანამედროვე თეორიის და პრინციპის გაცნობის შემდეგ, დარჩა კიდევ ბევრი ექსპერიმენტული შედეგი პასუხგაუცემელი, მათ შორისაა **ნკჰე-ში** ელექტრონის მიერ მაგნიტური ნაკადის კვანტის ლუნი რიცხვის ჩაჭერის ბოლომდე ახსნა; როგორ იცვლება **კფ**-ის მასა ენერგიაზე დამოკიდებულებით? სპინების გათვალისწინებით, სპინური კვანტური ჰოლის ეფექტი; რა როლს თამაშობს ელექტრონის მიერ გრიგალის ჩაჭერილ კომპოზიტურ ნაწილაკზე მეორე კვანტის ჩაჭერის შემდეგ შექმნილი დიპოლი **კფ**-ის შემდგომ შექმნაზე და თვისებებზე? და მრავალი სხვა, რომლებიც ასევე ლამაზად და საინტერესოდ იქნებიან ახსნილი.

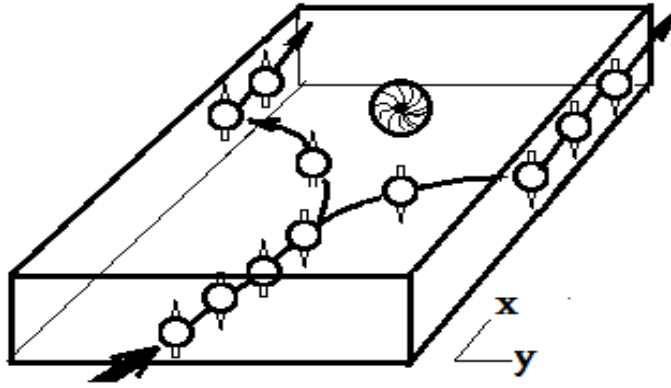
### 13.6. სპინური ჰოლის ეფექტი

წინა პარაგრაფებში განხილულ იყო ჰოლის კლასიკური და კვანტური ეფექტები. 1971 წელს მ. დიაკოვმა და ვ. პერელემმა თეორიულად აჩვენეს, რომ ანალოგიურად დენის მატარებელთა განცალბება შესაძლებელია ერთი ტიპის მატარებლებისთვის, სპინების ორიენტაციის მიხედვით, მაგნიტური ველის გარეშეც. შემდეგ ამ მოვლენას ეწოდა სპინური ჰოლის ეფექტი, რომელიც 2004 წელს ექსპერიმენტულად იქნა დადასტურებული. ეს გამოწვეულია იმით, რომ არაპოლარიზებული მინარევული ატომ-სამიზნისგან ელექტრონების არეკვლის მიმართულება დამოკიდებულია მათ სპინურ ორიენტაციაზე, რომელიც სპინურ-ორბიტალური ურთიერთქმედების შედეგია. ეს უკანასკნელი კი შექმნილია ატომურ ორბიტაზე ელექტრული მუხტის მოძრაობის მაგნიტური მომენტისა და მის საკუთარ მაგნიტურ მომენტებს შორის ურთიერთქმედებით. ასეთი არეკვლის პროცესში სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედებით სხვადასხვა სპინური ორიენტაციის ელექტრონები მინარევებისგან აირეკლებიან სხვადასხვა მხარეს სპინებით ზევით, უმეტესად მოძრაობის მიმართულებისგან მარცხნივ, ხოლო ელექტრონები – სპინებით ქვევით, მარჯვნივ. ეს იმიტომ ხდება, რომ განსაზღვრული ორიენტაციით საკუთარ მაგნიტურ მომენტს – სპინს, ემატება გაბნეული ელექტრონების მოძრაობის რაოდენობის იმპულსი და მათი ჯამური ვექტორის მიმართულება დამოკიდებულია სპინის ორიენტაციაზე. პრაქტიკულად ეფექტის დამზერა შესაძლებელია ფერომაგნიტიკიდან არამაგნიტურ მეტალში სპინ-ორბიტალური მატარებლების ინჟექციით.

სპინური ჰოლის ეფექტის მოქმედება ილუსტრირებულია ნახ.13.12-ზე. მისი გამოვლენის აუცილებელი პირობაა დენის გამტარ არხში მინარევული ატომის ან

დეფექტის სახით გამზნევი ცენტრის არსებობა. გამტარის გასწვრივ დენის გავლისას დენის მატარებელთა მრავალჯერადი არეკვლით გაჩნდება მიმართულების მართობი და გვერდითი ზედაპირისკენ მიმართული სპინ-პოლარიზებული ელექტრონების ნაკადი. ეს გამოიწვევს გამტარის მოპირდაპირე ზედაპირზე განსაზღვრული სპინური ორიენტაციის კონტროლირებადი სპინური რელაქსაციით ელექტრონების დაგროვებას, რომლის შრის სისქე დამოკიდებულია მათი დიფუზიის საშუალო სიგრძეზე.

კლასიკური სპინური ჰოლის ეფექტის აღმოჩენისთანავე დაისვა საკითხი – აქვს თუ არა მას ანალოგია ცნობილ კვანტურ ჰოლის ეფექტთან. უკანასკნელის შემთხვევაში, როცა ლანდაუს რამდენიმე ქვეზონა მთლიანად შევსებულია და ჰოლის დენზე შეიმჩნევა საფეხურები, სტრუქტურის ნაპირების გასწვრივ შეიმჩნევა არამილევადი მუხტური დენი. მილევის არარსებობისთვის ელექტრონები უნდა გადავიდნენ ლანდაუს ზედა ზონაში, რისთვისაც მათ უნდა გადალახონ ენერგეტიკული ბარიერი. რადგანაც მუხტი წარმოადგენს კვანტურ სიდიდეს, ხოლო სპინის პროექცია უწყვეტი სიდიდეა, ამიტომ ანალოგიას ადგილი არ უნდა ჰქონდეს. მაგრამ თეორეტიკოსებმა შემოგვთავაზეს ინფორმაცია მატერიის ახალი მდგომარეობის – სპინური იზოლატორის გამოყენების შესახებ. ეს მდგომარეობა შეიძლება აღიძრას სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების შედეგად აკრძალული ზონის წარმოქმნით. ასეთი მდგომარეობის შექმნა შეიძლება ვინროზონიანი ნახევარგამტარების ჰეტეროსტრუქტურებისას, მაგალითად, CdTe/HgTe/CdTe.



**ნახ.13.12.** ელექტრონული ნაკადის სივრცული განცალგება მათი სპინების მიხედვით დენგამტარში დეფექტზე არეკვლისას

სპინური იზოლატორის ქვედა ზონა შევსებულ იქნება ერთი ორიენტაციის ელექტრონებით, ხოლო მეორე ზონამდე იქნება ენერგეტიკული ღრეჩო. მუხტით დენს არ შეუძლია გავლა, მხოლოდ გაივლის მიუღწეველი სპინური დენი.

კლასიკურ სპინურ ჰოლის ეფექტს, ჯერჯერობით, ცნობილ კვანტურ ჰოლის ეფექტთან ანალოგია არ გააჩნია. ეს იმით აიხსნება, რომ სპინით განცალგებული ელექტრონების რაოდენობა ერთმანეთის ტოლია. ამ შემთხვევაში სპინური პოლარიზაციის დაკვირვება შესაძლებელია ოპტიკური მეთოდებით. განივ პოტენციალთა სხვაობა აღიძვრება მხოლოდ გამტარში სპინ-პოლარიზაციური დენის გავლისას.

ექსპერიმენტზე სპინური ჰოლის ეფექტი რეგისტრირდება მხოლოდ გამტარში დენის გატარებისას დამყარებულ რეჟიმის პროცესში. ზოგადად, სწრაფმოქმედ სპინტრონულ მოწყობილობებში მნიშვნელოვანია სპინური პოლარიზაციის დინამიკა დენის ჩართვისა და დეპოლარიზაციას შორის, ანუ მისი გამორთვისას. ექსპერიმენტულად დაიმზირა, რომ დაბალ ტემპერატურებზე (4,2-30)K ელექტრული ველის გამორთვისას სპინ-პოლარიზებული ელექტრონების ნაკადის შექმნისთვის უფრო ნაკლები დროა საჭირო (ელექტრონების სპინ-ორბიტალური გაბნევის დრო), ვიდრე ჩართვისას. ამ შემთხვევაში დომინირებს არხში სპინ-პოლარიზებული ელექტრონების დიფუზია, რომლებიც გადამწყვეტად ზემოქმედებენ სპინების დეპოლარიზაციაზე.

ზოგადად, სპინური ჰოლის ეფექტის პრაქტიკული გამოყენება მიმართულია მყარსხეულოვან სტრუქტურებში ელექტრული ველის მოქმედებით სპინ-პოლარიზებული დენის მატარებლების ნაკადის მართვისას, მაგნიტური ველის გამოყენების გარეშე.

### საკონტროლო კითხვები:

1. რა არის მაგნიტური გრიგალი და რა კავშირშია მაგნიტური ნაკადის კვანტთან?
2. რა კავშირშია მაგნიტური გრიგალი და პაულის პრინციპი ერთმანეთთან?
3. რა არის კომპოზიტური ნაწილაკი და რა თვისებებით გამოირჩევა ის?

4. როგორია კომპოზიციური ფერმიონი, კომპოზიციური ბოზონი და როდის მიიღებიან?
5. ახსენით, როგორ ხდება კომპოზიციური ფერმიონის გარდაქმნა კომპოზიციურ ბოზონად და პირიქით?
6. რაში მდგომარეობს სპინური ჰოლის ეფექტი?
7. რა არის სპინური ჰოლის ეფექტის აღმძვრელი?
8. რა კავშირია სპინურ და კვანტურ ჰოლის ეფექტთა შორის?

#### 14. აარონოვ-ბომის ეფექტი და მასზე შექმნილი ხელსაწყო

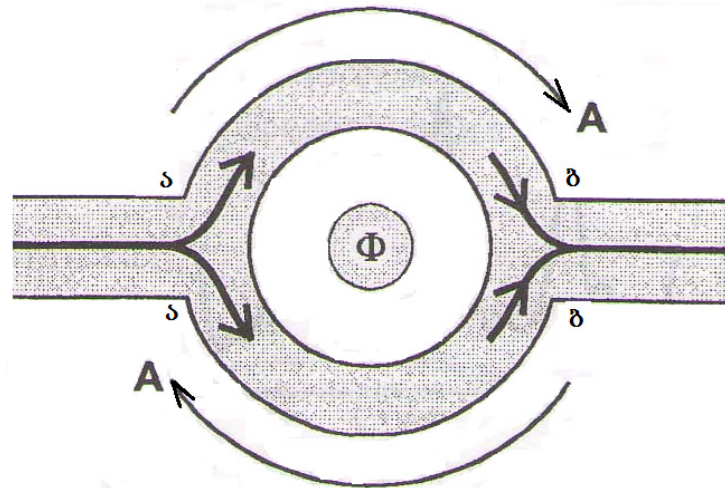
დაბალზომიან სტრუქტურებში მუხტის მატარებლების გადატანის სრულიად ახალი, არატრადიციული ეფექტი, მაკროსკოპულ სისტემასთან შედარებით, იძლევა ბევრ საინტერესო მოვლენას. ცხადი სახით ისინი წარმოჩინდებიან მაშინ, როცა სტრუქტურის ზომები უფრო მცირეა, ვიდრე ელექტრონის ტალღის ფაზური კოჰერენტულობის სიგრძე. ეს მანძილებია ორ ახლო ნერტილს შორის, სადაც ხდება ელექტრონების გაბნევა მინარევულ ატომზე, ფონონზე და ნივთიერებაში სხვა დარღვევებზე, რის გამოც ელექტრონის ტალღის ფაზა იცვლება. ასეთ სტრუქტურაში გამავალი ურთიერთდამოუკიდებელი ელექტრონების ტალღის ფაზები არ იცვლებიან მთელი გზის განმავლობაში. ცხადია, ინტერფერენციული ეფექტების გამოვლენა მოსალოდნელია მაშინ, როცა სხვადასხვაფაზიანი ტალღები შეხვდებიან ერთმანეთს. ასეთი პირობებით, ფაზური ინტერფერენცია ჩვეულებრივ შესაძლებელია მყარსხეულოვან სტრუქტურებში მათი ნანომეტრული ზომების დროს. ამ პირობებში სტრუქტურის გამტარებლობა განისაზღვრება ფაზურ ინტერფერენციასთან დაკავშირებული ეფექტებით. ეს ხდება დენის მატარებლების გადატანის ბალისტიკური ან კვაზიბალისტიკური რეჟიმის დროს, ანუ დენის მატარებლების უმნიშვნელო გაბნევისას.

განვიხილოთ ორი ტალღის ინტერფერენცია, რომელთა ტალღურ ფუნქციას აქვს, ზოგადად, ასეთი სახე  $\psi = A \exp(i\varphi)$ . როცა გვაქვს ორი ასეთი ტალღა, ახალი ტალღის წარმოქმნის ალბათობა:  $W = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 4|A_1 * A_2| \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ . მათი  $\psi_1$  და  $\psi_2$  ფაზათა ( $\varphi_1$  და  $\varphi_2$ ) ურთიერთდამოკიდებულების მიხედვით, ეს ალბათობა შეიძლება შეიცვალოს ამპლიტუდების ჯამის ან სხვაობის კვადრატის ინტერვალში. ნანოზომებისგან განსხვავებით, მაკროსისტემაში არა აქვს მნიშვნელობა ფაზათა მიმართ ინფორმაციის შენახვას, რადგან მისი ზომა ბევრად მეტია ფაზური კოჰერენტულობის და საშუალო განარბენის სიგრძეებზე და, აგრეთვე, ხდება დიდი რაოდენობის წყვილი ტალღის გასაშუალება, რაშიც ცალკეული ტალღის ეფექტი არ ჩანს. ნანოსტრუქტურებში გასაშუალება დაყვანილია მინიმუმამდე და კვანტური ინტერფერენციის ეფექტი კარგად დაიმზირება.

დაბალგანზომილებიან სტრუქტურებში ფაზათა კვანტური ინტერფერენციის ილუსტრაციას წარმოადგენს აარონოვ-ბომის ეფექტი. ეს ეფექტი მდგომარეობს იმაში, რომ გარე ელექტრომაგნიტური ველი, რომელიც მოთავსებულია ელექტრონებისაგან მიუწვდომელ არეში, მოქმედებს ამ ელექტრონების კვანტურ მდგომარეო-



ბებზე. ამ ეფექტის დამზერისთვის განვიხილოთ ნახ.14.1. ა-ა სიბრტყის წრეში შესული ერთნაირფაზიანი ელექტრონული ტალღა იყოფა ორ ერთნაირ ჯგუფად, რომლებიც გადიან ერთნაირ გზებს და ერთდებიან ბ-ბ გასასვლელის სიბრტყეში. მათ აქვთ ერთნაირი ფაზები, სანყისი  $A_1(0)$  და  $A_2(0)$  და საბოლოო  $A_1(L)$  და  $A_2(L)$  (სადაც  $L$  ა-დან ბ-მდე მათ მიერ გავლილი მანძილია), და ამპლიტუდები. წრის ცენტრში მოთავსებული მინიატიურული სოლენოიდის ჩართვის შემდეგ, წრის სიბრტყის მართობული  $\Phi$  მაგნიტური ნაკადის მიერ შექმნილი ველის  $\mathbf{A}$  ვექტორული პოტენციალი აიძულებს ელექტრონებს, წრის ცალკეულ შტოებში იმოძრაონ პარალელურად ან ანტიპარალელურად (ნახ.14.1). გამოსავალ კონტაქტზე წარმოიქმნილი ელექტრონული ტალღების ფაზათა სხვაობა ტოლი იქნება  $\Delta\phi = 2\pi(\Phi/\Phi_0)$ , სადაც  $\Phi_0 = h/e$  მაგნიტური ნაკადის კვანტია.



ნახ.14.1. აარონოვ-ბომის მაგნიტური ეფექტის სქემატური წარმოსახვა

ელექტრონული ტალღების ინტერფერენცია აღიძვრება ფაზათა სხვაობის მაგნიტურ ველზე პერიოდული დამოკიდებულების გამო, რაც დაკავშირებულია მაგნიტური ნაკადის კვანტების რიცხვის  $(\Phi/\Phi_0)$  ცვლილებასთან. ინტერფერენციისას ელექტრონული ტალღის ამპლიტუდის გაზრდა ხდება კონსტრუქციულად, როცა  $\Phi$  ჯერადია  $\Phi_0$ -ის და შემცირება (დესტრუქცია), როცა ფარდობა  $\Phi/\Phi_0$  მთელ-ნახევარი რიცხვია.

წრიულ ინტერფერომეტრში ერთნაირი სანყისი ფაზის ელექტრონული ტალღისთვის განმსჭვალვის კოეფიციენტი ასე გამოისახება:

$$D(E) = \cos^2 \left[ \frac{e\phi}{2h} \right] \quad (14.1)$$

სადაც,  $\Phi = BS_{\text{ვფ}}$  მაგნიტური ნაკადია;  $S_{\text{ვფ}} = \pi d^2 / 4$  ეკვივალენტური ფართობია, ხოლო  $d$  – ინტერფერომეტრის დიამეტრი.

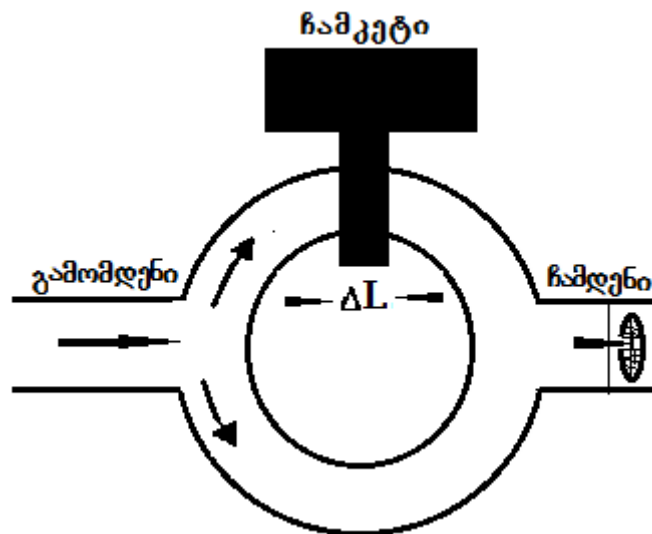
ამ შემთხვევაში მაგნიტური  $\Phi$  ნაკადის ცვლილებით იქნება არხის გამტარებლობის და, შესაბამისად, ელექტრონული ნაკადის ოსცილაცია  $h/e$  პერიოდით.

### 14.1. წრიული ინტერფერენციული ტრანზისტორი

ელექტრონებს შეუძლიათ ნახევარგამტარებში ფაზური კოჰერენტულობა შეინარჩუნონ, მეტალებთან შედარებით დიდ, რამდენიმე მიკრომეტრ მანძილზე, რაც იძლევა საშუალებას, ექსპერიმენტულად უფრო ადვილად ვმართოთ მათში ელექტრონთა ტალღების ინტერფერენციული ურთიერთქმედება. ამ შემთხვევაში აარონოვ-ბომის ეფექტს ადგილი აქვს ელექტროსტატიკური ველის დროსაც, როცა ელექტრონების ნაკადზე მოქმედებს გარე ელექტრული ველი, მაგალითად, მმართველი ელექტროდი – ჩამკეტი.

წრიული ინტერფერენციული ტრანზისტორი 1984 წელს შემოთავაზებული და დაპატენტებულ იქნა ფაულერის მიერ [A.B.Fowler, “Semiconductor interferometer”, US Patent 4 550 330 (1984)].

ამ ტრანზისტორში არის წრიული კონსტრუქცია, სადაც წრის ერთ ნახევარს კვეთავს ჩამკეტი, რომელსაც აქვს,  $L$  ნახევარწრესთან შედარებით, მცირე  $\Delta L$  ზომა, როგორც გამოსახულია ნახ.14.2-ზე. ჩამკეტის საშუალებით შესაძლებელია ელექტრული ნაკადის ცვლილება, რის შედეგადაც ნახევარწრეებზე მიიღება სხვადასხვა ფერმის ენერგიები და, შესაბამისად, ჩამკეტის ქვეშ ელექტრონის ტალღისთვის განსხვავებული ფერმის ტალღის სიგრძეები ( $\lambda_F \neq \lambda'_F$ ). ეს იძლევა კონსტრუქციის სხვადასხვა შტოში გამავალი ელექტრონული ტალღის სვლათა სხვაობას. კონსტრუქციის განშტოების წერტილს ელექტრონები ერთდროულად ტოვებენ და თუ ფაზათა სხვაობა  $2\pi$ -ის ტოლია, ადიტიურად ინტერფერირებენ და წრის გამტარებლობა იქნება მაქსიმალური. არხის (წრის) გამტარებლობამ შეიძლება დაიწყოს ოსცილაცია ფერმის ტალღური ვექტორის პერიოდით, თუ შესრულდება პირობა  $(k_F - k'_F)\Delta L = 2\pi n$ , სადაც  $k'_F = 2\pi/\lambda'_F$  ფერმის ტალღური ვექტორია ჩამკეტქვეშ  $\Delta L$  სიგრძეზე;  $k_F$  - ფერმის ტალღური ვექტორი ჩამკეტის გარეთ და  $n$  - მთელი რიცხვები.



ნახ.14.2. წრიული ინტერფერენციული ტრანზისტორის სქემა

ამ დროს ერთნაირი სანყისი ფაზის ელექტრული ტალღისთვის განმსჭვალვის კოეფიციენტი:

$$D = \cos^2[\tau \Delta V / 2 \hbar], \quad (14.2)$$

სადაც  $\tau$  ელექტრონის მიერ არხის სიგრძის გავლის დროა. ფაზის ცვლილება ხდება ელექტრონის ტალღის სიგრძის ცვლილებით და განისაზღვრება ელექტრონის მიერ არხის გავლის დროით. მაშასადამე, აარონოვ-ბომის მაგნიტურ ეფექტში ფაზის ცვლილება პროპორციულია მაგნიტური ნაკადით შემოფარგლული ფართისა, ხოლო ელექტრულში კი – იმ არხის სიგრძისა, რომელზეც ელექტრული ველი მოქმედებს.

ფორდმა, თანამშრომლებთან ერთად [C.J.Ford et al., “Electrically defined heterojunction rings and the Aharonov-Bohm effect”, Appl.Phys.Lett. **54**(1), p.21 (1989)], გამოიყენა ასეთივე წრიული კონსტრუქცია, მაგრამ მასში წრის მხარეები იყო სახვადასხვა სიგრძის და სტრუქტურა იმართებოდა მთლიანად ჩამკეპით. ინტერფერენციის პირობას ჰქონდა შემდეგი სახე:  $k_F \Delta L = 2\pi n$ . ამ დროს  $k_F$  მოიცემოდა ჩამკეპის ძაბვის სიდიდის ცვლილებით.

ასევე შესაძლებელია წრიული ინტერფერენციული ტრანზისტორის მიღება წრიული სიმეტრიული კონსტრუქციის გამოყენებით, თუ წრის ერთ მხარეში წინასწარ, რაღაც გზით მოხდება მასალაში ფერმის ენერჯის სიდიდის შეცვლა ისე, რომ ფერმის ენერჯები ჩამკეპზე გარე ძაბვის მოდების გარეშე იყოს განსხვავებული. ასეთი შეცვლა განახორციელა ნახევარგამტარულ მასალაში ავთო თავხელიძემ, თანამშრომლებთან ერთად [A.Tavkheldze et al., “Observation of Quantum Interference Effect in Solid”, J.Vac.Sci.Technology, B, v.1, 24, №3, p.1413 (2006); A.Tavkheldze et al., “Fermi-Level Tuning G-Doped Layers”, Nanomaterials/**11**, 505 (2021)]. პერიოდული ნანოზომის „ხნულების“ შექმნამ ნახევარგამტარის ზედაპირზე გამოიწვია ფერმის ენერჯის გაზრდა. ჩამკეპის მოპირდაპირე მხარეზე ასეთი ხნულების  $\Delta L$  სიგრძის შექმნით მიიღება ელექტრონული ტალღის სვლათა სხვაობა და გამოსასვლელზე ფორმირდება ინტერფერენციული ტალღა. ჩამკეპზე გარე ძაბვის პოლარობის და სიდიდის ცვლილებით რეგულირდება წრის მხარის გამტარებლობა და, შესაბამისად, ტალღათა ინტერფერირება [A.Bibilashvili, A.Tavkheldze, “Quantum Interference Device”, US Patent US7 566 897 B2, (Jul.28, 2009, Prior Mar.20,2008)]. ამ შემთხვევაში სამართლიანია (14.2) ფორმულა.

აარონოვ-ბომის ეფექტი შესაძლებელია დაიმზიროს გარე ველების მოქმედების გარეშეც ტრადიციულ დაბალგანზომილებიან კვანტურ მილაკებშიც. ამ მილაკებში მყოფი მინარევი ან სხვა დეფექტი არღვევს ელექტრონების კოჰერენტულ განაწილებას და იძლევა არასიმეტრიულ პოტენციალურ ჯებირს, რომელიც ელექტრონმა უნდა გადალახოს. ამის შედეგად მოხდება ფერმის ზედაპირის ოდნავ წანაცვლება, რაც გამოიწვევს დეფექტის ერთ მხარეს მიმავალი დენის მატარებლების ნაწილის ტრაექტორიის შეცვლას და აარონოვ-ბომის სახის მარყუჟის კვლავ შეკვრას. ელექტრონის მიერ დეფექტის ან მინარევის შემოვლისას შეიცვლება მისი ტალღის ფაზები და მიიღება ინტერფერენცია. შედეგად მიიღება მასალის ამ არეში ელექტრული გამტარებლობის რხევა საშუალო კვადრატული გადახრით  $e^2 / h$ , დამოუკიდებლად მისი ზომი-

სა და სახისა და ენოდება გამტარებლობის უნივერსალური ფლუქტუაცია (გამტარებლობის მინიმალური ულუფა).

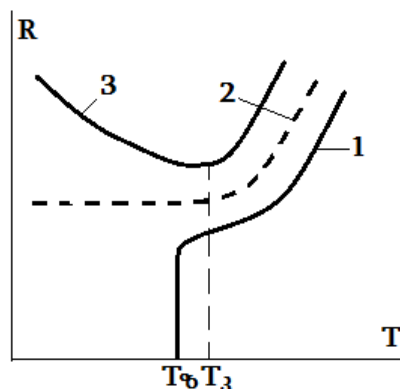
მაშასადამე, გამტარებლობის კვანტური ცვლილების მიღებისთვის, რომელიც დაკავშირებულია ელექტრონული ტალღის ფაზურ ინტერფერენციასთან, საჭიროა ნიმუშის ზომა იყოს ისეთივე რიგის, როგორც ფაზური კოჰერენტულობის სიგრძე. როგორც კი ნიმუშის ზომა „მეტი“ გახდება, გამტარებლობის კვანტური რხევები განირთხმებიან ინტერფერენციული პროცესების დიდი რაოდენობის გასაშუალოების გამო და ინტერფერენციაც შეუმჩნეველი გახდება.

### საკონტროლო კითხვები:

1. როგორ სტრუქტურებშია შესაძლებელი ელექტრონული ტალღების ფაზური ინტერფერენცია?
2. რაში მდგომარეობს აარონოვ-ბომის ეფექტი და რომელ ფიზიკურ მოვლენაზეა ის დამყარებული?
3. როგორია სქემატურად აარონოვ-ბომის ხელსაწყო?
4. როგორ მუშაობენ მაგნიტური და ელექტრული წრიული ტრანზისტორები?
5. რა არის და რისი ტოლია გამტარებლობის უნივერსალური ფლუქტუაცია?

## 15. კონდოს ეფექტი

კლასიკური წარმოდგენის თანახმად, მეტალების ელექტრული წინააღმდეგობა ტემპერატურის შემცირებასთან ერთად, რადგანაც ელექტრონები სულ უფრო მცირედ და მცირედ გაიბნევიან კრისტალური მესრის სითბურ რხევებზე. მაგრამ დაბალი ტემპერატურის არეში ტემპერატურის შემცირებით შეიმჩნევა წინააღმდეგობის სამი სახით სვლა, რომელიც მოცემულია ნახ.15.1-ზე.



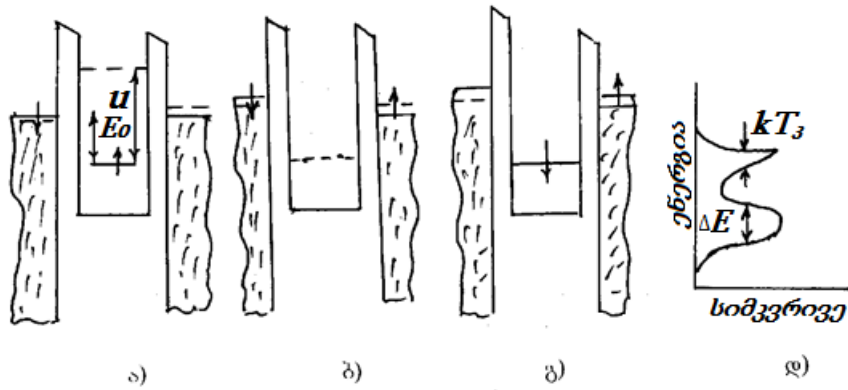
**ნახ.15.1.** მეტალების წინააღმდეგობის ცვლილების ტიპები (0–10)K ტემპერატურის ინტერვალში: ზეგამტარი (1), გაჯერებულგამტარიანი (2) და კონდოსეფექტიანი გამტარი (3)

ზოგიერთი მეტალის (მაგალითად, Pb, Nb) წინააღმდეგობა, ტემპერატურის  $T_0$  ტემპერატურამდე შემცირებისას, მცირდება და შემდეგ ეცემა ნულამდე, ანუ ხდება ზეგამტარი (ნახ.15.1-ის 1), ხოლო ბევრი სუფთა მეტალის (მაგალითად, Cu, Au, Al) წინააღმდეგობა მცირდება რალაც ნარჩენ სიდიდემდე (ნახ.15.1-ის 2) და ტემპერატურის შემდგომი შემცირებით აღარ იცვლება. მაგრამ მეტალების წინააღმდეგობა, მცირე მაგნიტური შენაერთებით, როგორცაა Fe, Co, Ni, ძალიან მცირე ტემპერატურაზე იზრდება (ნახ.15.1-ის 3), რასაც ეწოდება **კონდოს ეფექტი** და ეს დაკავშირებულია ნიმუშში ყველა ელექტრონის სრული სპინის არანულოვან მნიშვნელობასთან. ეს ეფექტი დაიშორება არა მარტო მაგნიტურმინარევეებიან მეტალებში, არამედ კვანტურ წერტილებშიც.  $T_0$  ტემპერატურას, რომლის შემდეგ წინააღმდეგობა კვლავ იზრდება, ეწოდება **კონდოს ტემპერატურა**.

### 15.1. მაგნიტურმინარევეებიან მეტალებში კონდოს ეფექტი

კონდოს ეფექტი მაგნიტურმინარევეებიან მეტალებში შეიძლება აიხსნას ანდერსონის მოდელით, რომლის ენერგეტიკული ილუსტრაცია მოცემულია ნახ.15.2-ზე. არამაგნიტურ მეტალში მაგნიტური მინარევის ატომი წარმოადგენს კვანტურ  $\chi$ ს, რომელსაც მატრიცული მეტალის  $E_0$  ფერმის დონის დაბლა აქვს მხოლოდ ერთი ენერგეტიკული დონე. ეს დონე დაკავებულია ერთი ელექტრონით, ინდივიდუალური სპინით, მაგალითად, ელექტრონის სპინი მიმართულია მაღლა, როგორც ეს დიაგრამაზე ისრითაა ნაჩვენები (ნახ.15.2-ის ა). მინარევეული ატომი გარშემორტყმულია მატრიცული მეტალის ატომების მრავალი ელექტრონით, რომელთათვისაც ფერმის დონის ქვემოთ ყველა ენერგეტიკული მდგომარეობები დაკავებულია, ხოლო მაღლა – ცარიელია. როცა ნიმუშზე ედება ელექტრული წანაცვლება, მაშინ ელექტრულ ღრუბელში დაკავებული დონეები ადვილად წანაცვლებენ  $\chi$ ს ორივე მხარეს.

ორმოში, რომელიც ხასიათდება U ენერჯის ჯებირით, კიდევ ერთი ელექტრონის დამატება კულონური ურთიერთქმედებით აკრძალულია. მინარევის ატომიდან ერთი ელექტრონის მოშორებისთვის საჭიროა სისტემისთვის, სულ მცირე,  $E_0$  ენერჯის დამატება (ნახ.15.2-ის ა). მაგრამ, ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპის თანახმად, ელექტრონს შეუძლია დატოვოს ორმოში დონე მცირე დროით რიგით  $\hbar/E_0$ , გავიდეს გვირაბულად და დაიკავოს ორმოს გარეთ კლასიკურად აკრძალული ვირტუალური მდგომარეობა (ნახ.15.2-ის ბ) და შემდეგ მის ადგილზე ორმოში ჩაჯდეს მეტალის მატრიცის მრავალი ელექტრონიდან ერთ-ერთი (ნახ.15.2-ის გ). ახლად მოსულ ელექტრონს შეიძლება ჰქონდეს საწინააღმდეგო მიმართულების სპინი, რაც შეცვლის მინარევის სპინის ჯამურ მიმართულებას. ამის შედეგად ნიმუშის ამ ადგილზე გაჩნდება მინარევის სპინის საწყის და საბოლოო მიმართულებებს შორის განსხვავება.



**ნახ.15.2.** მეტალში მაგნიტური მინარევის არსებობისას, ნიმუშზე ელექტრული წანაცვლებისას კონდოს ეფექტის ახსნის ანდერსონისეული მოდელი: სანყისი (ა), ვირტუალური (ბ) და საბოლოო (გ) მდგომარეობები; (დ) – ენერჯიის სიმკვრივე

სპინებით გაცვლა ხარისხობრივად ცვლის სისტემის მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგეტიკულ მახასიათებელს. ერთად მიმდინარე მრავალ ასეთ პროცესს ეწოდება კონდო-რეზონანსული პროცესები. ასეთი რეზონანსი ქმნის ახალ ელექტრონულ მდგომარეობას, რასაც ეწოდება **კონდო – მდგომარეობა** ფერმის ენერჯიის ტოლი ენერჯიით. ეს მდგომარეობა ყოველთვის „რეზონანსშია“ ფერმის დონესთან. რადგანაც კონდო-მდგომარეობა იქმნება მინარეველ მაგნიტურ ატომთან ახლოს ლოკალიზებულ და მეტალ-მატრიცულ თავისუფალ ელექტრონთა შორის გაცვლითი პროცესებით, ამიტომ კონდოს ეფექტი წარმოადგენს მრავალი სხეულის ტიპურ ეფექტს. ელექტრონები, რომლებმაც იმოქმედეს მაგნიტურ მინარევთან და მის ახლოს ლოკალიზდნენ, ქმნიან **კონდო-ღრუბელს**. ამათგან ყოველი ელექტრონი მინარევსა და სხვა ელექტრონებზე ფლობს ინფორმაციას. ასე რომ, ღრუბელში ელექტრონები ურთიერთკავშირშია.

დაბალტემპერატურულ დიაპაზონში ტემპერატურის შემცირებით წინააღმდეგობის ზრდის ფაქტი არის კონდო-მდგომარეობის არსებობის დამადასტურებელი. ეს მდგომარეობა ზრდის ფერმის დონესთან ახლო მყოფ ელექტრონთა გაბნევას. დაბალ ტემპერატურაზე, გამტარებლობის ელექტრონების ჰიბრიდიზაცია მეტალში მაგნიტური მინარევის ატომის ლოკალიზებულ ელექტრონების სპინებთან ინვევს ხვედრითი წინააღმდეგობის ზრდას. სრული ხვედრითი წინააღმდეგობა, როგორც ტემპერატურის ფუნქცია, ასე გამოისახება:

$$\rho = AT^5 - B \ln T + C \quad (15.1)$$

სადაც  $A, B, C$  მუდმივები დამოკიდებულია მაგნიტური იონების კონცენტრაციაზე, გაცვლით ენერჯიასა და გაბნევის ძალაზე.

კონდოს ტემპერატურა:

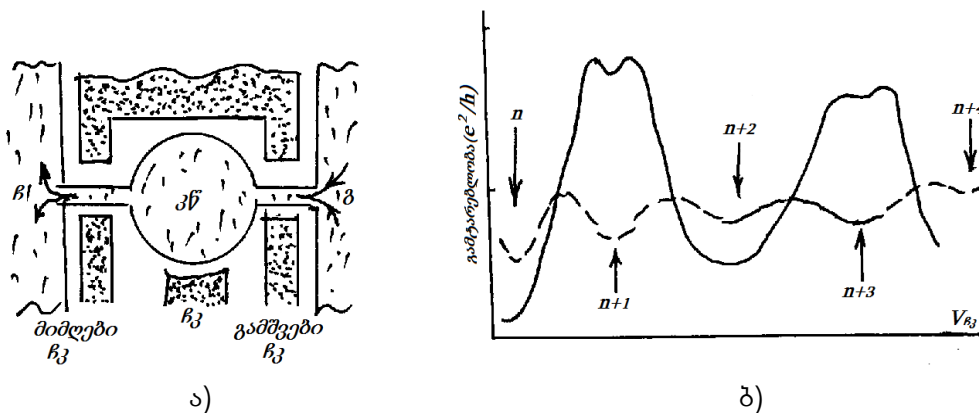
$$T_3 = \frac{\sqrt{\Delta E U}}{2} \exp \frac{\pi E_0 (E_0 + U)}{\Delta E U} \quad (15.2)$$

სადაც  $\Delta E$  მინარევის ენერგეტიკული დონის სიფართოა, გადიდებული ელექტრონული გვირაბასვლით (ნახ.14.2-ის დ).

კონდო-სისტემისთვის ფარდობა მის აქტიურ  $R$  წინალობასა და აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე  $R_0$  წინალობას შორის დამოკიდებულია მხოლოდ ტემპერატურებზე, როგორც  $R/R_0 = f(T/T_0)$ . ყველა მასალა, რომელიც შეიცავს მინარევს სპინებით  $1/2$ , შეიძლება აღინეროს იმავე ტემპერატურული დამოკიდებულებით – ფუნქციით  $f(T/T_0)$ . სისტემა შეიძლება მთლიანად დავახასიათოთ კონდოს ტემპერატურით, მასში შემავალი  $\Delta E$ ,  $E_0$  და  $U$  პარამეტრებით.

## 15.2. კვანტურ წერტილებში კონდოს ეფექტი

კვანტური წერტილი (კწ) სისტემათა მეორე კლასია, სადაც ინფორმაციის გადატანის ტრანსპორტის თვისებაზე დამზერილი იქნა კონდოს ეფექტი. ამ შემთხვევაში სისტემის პარამეტრებზე კონტროლი უფრო მაღალ დონეზეა შესაძლებელი, ვიდრე ეს იყო მაგნიტურმინარევებიან მოცულობით მეტალში. კვანტური წერტილი შეიცავს მკაცრად განსაზღვრული რაოდენობის ელექტრონებს და შეიძლება იმოქმედონ, როგორც მაგნიტური მინარევი. ლუნი რაოდენობის ელექტრონებისთვის სრული სპინი შეიძლება იყოს ნული ან მთელი რიცხვი და კენტი რაოდენობისთვის – მთელის ნახევარი. ბოლო შემთხვევა კონდოს ეფექტის კლასიკური მაგალითია. ყველაზე მაღალი ენერგიის მქონე ერთი ელექტრონის გარდა, შეიძლება სხვა ელექტრონები უგულებელვყოთ, ანუ ეს შემთხვევა ეკვივალენტურია ერთი ელექტრონის არსებობისა სპინით  $s=1/2$ .



ნახ.15.3. მართვადი კწ (ა) და მისი გამტარებლობის ცვლილება დაბვით (ბ):  $T = \text{---} 0,25\text{K}$  და  $\text{---} 1\text{K}$

ჩამკეტიანი კვანტური წერტილი შეიძლება ელექტრულად გადაერთოს „კონდო-სისტემის“ მდგომარეობიდან „არა კონდო-სისტემის“ მდგომარეობაში, მათში ელექტრონების კენტი რიცხვის რაოდენობის ლუნით შეცვლით (ნახ. 15.3 ა). კვანტური წერტილი შეერთებულია ორი ელექტრონის გვირაბამსვლელ არხთან, რომელთაგან ელექტრონების გაშვების შესაძლებლობა იმართება შესავალ და გამოსავალ ჩამკე-

ტებზე დაბვის ცვლილებით.  $\kappa\text{N}$ -ის კავშირი ელექტრონების გამომდენთან და ჩამდენთან განსაზღვრავს  $\kappa\text{N}$ -ის მდგომარეობის  $\Delta E$  ენერგიას.  $\kappa\text{N}$ -ში ელექტრონების რიცხვი და მათი ენერგიის დონე რეგულირდება ცენტრალურ ჩამკეტზე მოდებული დაბვით. კონდოს ტემპერატურა შეიძლება შეიცვალოს ჩამკეტზე დაბვის ცვლილებით, რადგანაც ერთელექტრონიანი მდგომარეობის ენერგია უახლოვდება ფერმის დონეს.

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

$\kappa\text{N}$ -ში ყველა ელექტრონი უნდა მოვიდეს მხოლოდ ერთი წერტილის გავლით, რადგან მის გარშემო სხვა ელექტრული გზა არ არსებობს. ელექტროდებზე საწინააღმდეგო დაბვებისას კონდო-რეზონანსი აადვილებს მდგომარეობისთვის შერევის ხარისხს, რაც ზრდის გამტარებლობას, ანუ წინააღობა მცირდება. მაშასადამე,  $\kappa\text{N}$ -ში კონდოს ეფექტს აქვს საწინააღმდეგო სახე, ვიდრე მოცულობით მეტალში. ნახ.15.3-ის ბ)-ზე მოცემულია  $\kappa\text{N}$ -ის გამტარებლობის ცვლილება სხვადასხვა ტემპერატურაზე, ჩამკეტზე დაბვის ცვლილებისას, რომლითაც რეგულირდება წერტილში ელექტრონთა რიცხვი. როდესაც კვანტურ წერტილში მოთავსებულია ელექტრონთა წყვილი რაოდენობა, მისი გამტარებლობა იზრდება ტემპერატურის შემცირებით. ეს მიუთითებს იმაზე, რომ ამ შემთხვევაში კონდოს ეფექტს ადგილი არა აქვს. კვანტურ წერტილში ელექტრონთა კენტი რაოდენობისას დაიმზირება გამტარებლობის ტემპერატურაზე საწინააღმდეგო დამოკიდებულება, რაც გამოსახავს კონდოს ეფექტის არსებობას.

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

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

### საკონტროლო კითხვები:

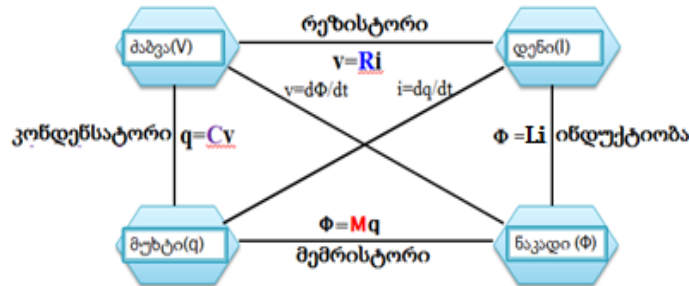
1. რაში მდგომარეობს კონდოს ეფექტი?
2. რა არის კონდოს ღრუბელი?
3. რა არის კონდოს რეზონანსი?
4. როგორია კონდოს ეფექტი კვანტურ წერტილებში?
5. როგორ მუშაობს კონდოს ხელსაწყო?



## 16. მემრისტორის მუშაობის პრინციპი და პარამეტრები

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

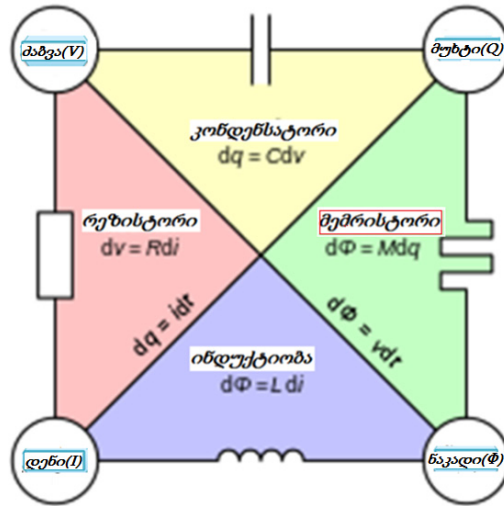
ელექტრობაში ოთხი ძირითადი სიდიდეა: მუხტი (Q), დენი (დენის ძალა, I), ძაბვა (პოტენციალთა სხვაობა, U) და მაგნიტური ნაკადი (Φ). ყველა ეს სიდიდე წყვილ-წყვილად უკავშირდება ერთმანეთს. მაგალითად, დენი დროის ერთეულში მუხტის ნაკადია, ძაბვა და დენი ერთმანეთს უკავშირდება ომის კანონით და ა.შ. აგრეთვე, არსებობს სამი მატერიალური ობიექტი, ე.წ. წრედის პასიური ელემენტები, სადაც რეალიზდება ამ სამ სიდიდეს შორის თანაფარდობა: რეზისტორი აკავშირებს დენის ძალას და ძაბვას, კონდენსატორი – ძაბვას და მუხტს, ინდუქტივობა – მაგნიტურ ნაკადს და დენის ძალას. ნებისმიერი სირთულის ელექტრული წრედი და მისი ეკვივალენტური სქემა შეიძლება აიგოს ამ პასიური ელემენტების და აქტიური (ტრანზისტორები) ელემენტების კომბინაციით.



ნახ.16.1. ელექტრული სქემის ბაზური ელემენტები

გასული საუკუნის 70-იან წლებში ამერიკელმა ფიზიკოსმა ლეონ ჩუამ გამოთქვა ჰიპოთეზა, რომლის თანახმად, უნდა არსებობდეს ელექტროსქემის მეოთხე ბაზური ელემენტი, რომელიც აღწერდა კავშირს მაგნიტურ ნაკადსა და მუხტს შორის. ასეთი ელემენტი არ შეიძლებოდა შემდგარიყო უკვე ცნობილი სხვა დანარჩენი სამი პასიური ელემენტის რაიმე კომბინაციით. მან ამ ელემენტს უწოდა *მემრისტორი*, ანუ „დამამახსოვრებელი“ რეზისტორი (ნახ. 16.1). მისი წინალობა დამოკიდებულია მასში გამავალ მუხტის სიდიდეზე, ანუ მასში გამავალ დენის ხანგრძლივობაზე. მემრისტორის მახასიათებელია M მემრისტორობა (როგორც რეზისტორისთვის R წინააღმდეგობა), რომლის სიდიდეა მაგნიტური ნაკადის ცვლილების ფარდობა მუხტის ცვლილებასთან. ჩუა გამოვიდა იმ მოსაზრებიდან, რომ ელექტრული წრედის ოთხი ძირითადი სიდიდე (I, V, Q და Φ) ერთმანეთს უნდა უკავშირდებოდეს ექვსი თანაფარდობით და ცნობილი იყო მხოლოდ ხუთი:  $dV = R dI$ ;  $dQ = I dt$ ;  $dQ = C dV$ ;  $d\Phi = L dI$

და  $d\Phi = Vdt$ , აკლია კავშირი მაგნიტურ ნაკადსა და მუხტს შორის. ამიტომ მან შემოიღო  $d\Phi = MdQ$  (ნახ.16.2). თუ გავითვალისწინებთ ბოლო ფორმულას და მხედველობაში მივიღებთ წინა მე-2 და მე-5-ს, მაშინ გამოვა, რომ:

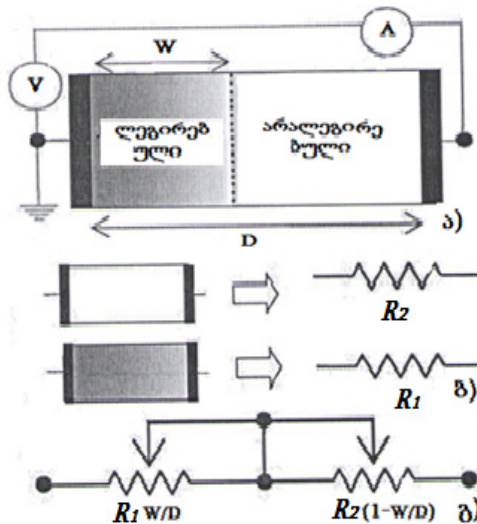


ნახ.16.2. კავშირი ელექტრული წრედის ოთხ სიდიდეს შორის

$$V = M(Q)I \tag{16.1}$$

თუ  $M = \text{Const}$ , მაშინ (16.1) ომის კანონია წრედის უბნისთვის. ზოგადად,  $M \neq \text{Const}$  და დამოკიდებულია მისი მდგომარეობის წინა ისტორიაზე, თუ მასში რა რაოდენობის მუხტი გადიოდა.

რამდენიმე წლის წინ (2008 წ.) ამერიკელ ექსპერიმენტატორთა ჯგუფმა სტენლი ვილიამსის ხელმძღვანელობით შექმნა მემრისტორი. ის წარმოადგენს პლატინის ელექტროდებს შორის მოთავსებულ ნანოსისქის (<70ნმ) ტიტანის სრული ( $\text{TiO}_2$ ) და არასრული ( $\text{TiO}$ ) ოქსიდური ფენების ერთობლიობას.



ნახ.16.3. მემრისტორის მუშაობის მოდელი

მემრისტორის თვისება შეიძლება განხილულ იქნას შემდეგი მოდელით. მისი სრული წინაღობა შედგება ორი ცვლადი რეზისტორის წინააღობათა მიმდევრობით შეერთებისგან (ნახ.16.3). ერთ-ერთი რეზისტორი ( $\text{TiO}_2$ -ით) დაბალი წინააღობითაა, ანუ ღიაა ( $R_{\text{ღ}}=R_1$ ), ხოლო მეორე – დიდი წინააღობით, ჩაკეტილია ( $\text{TiO}$ -ით), ანუ ( $R_{\text{ჩ}}=R_2$ ).

$\text{TiO}_2$ -ის მხრიდან ელექტროდზე დადებითი ძაბვის მოდებისას იცვლება მისი კრისტალური სტრუქტურა. ჟანგბადის დადებითი იონები მიემართებიან  $\text{TiO}$ -ში, მოხდება წინააღობათა გადანაწილება მათ შორის და საზღვარი  $\text{TiO}_2$ -  $\text{TiO}$  გადაინევს, რომლის სიდიდე და სიჩქარე დამოკიდებულია მუხტის გავლის ხანგრძლივობაზე. ამ დროს ძაბვასა და დენს შორის თანაფარდობა ასე გამოისახება:

$$V(t) = \left[ R_1 \frac{W}{D} + R_2 \left( 1 - \frac{W}{D} \right) \right] I(t) \quad (16.2)$$

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

$$\frac{dW(t)}{dt} = \mu \frac{R_1}{D} I(t) \quad (16.3)$$

სადაც,  $\mu$  იონების ძვრაძობაა. (16.3)-ის ინტეგრებით მიიღება:

$$W(t) = \mu \frac{R_1}{D} Q(t) \quad (16.4)$$

(16.4) ფორმულის ჩასმით (16.2) ფორმულაში, ასევე,  $R_1 \ll R_2$  და (16.1)-ის გათვალისწინებით, მიიღება, რომ:

$$M(Q) = R_2 \left( 1 - \frac{\mu R_1}{D^2} \right) Q(t) \quad (16.5)$$

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

ტრადიციული ბაზური პასიური ელემენტების ძირითადი პარამეტრები ( $R, C, L$ ) მუდმივებია, დამოკიდებულნი მასალის გვარობაზე, სისუფთავეზე, ზომაზე, ტემპერატურაზე და ა.შ. მემრისტორისთვის სიდიდე  $M$ , მისი განმარტების თანახმად, მუხტის ფუნქციაა, რაც მოიცემა (16.5) ფორმულით. აქედან ჩანს, რომ როცა დენი ნულია, მაშინ  $M$  მუდმივია, მაგრამ თვით ამ მუდმივის მნიშვნელობა დამოკიდებულია იმაზე, თუ რამდენ ხანს გადიოდა დენი მასში, ანუ მის ელემენტში მუხტის რაოდენობა. იმისდა მიხედვით, თუ როგორ რეჟიმში მუშაობს მემრისტორი, მიიღება ან რეზისტორი:

$$M = \frac{d\phi}{dq} = \frac{d\phi}{dt} \cdot \frac{dt}{dq} = \frac{V}{I} = R \quad (16.6)$$

ან კონდენსატორი:

$$M = \frac{d\phi}{dq} = \frac{dVdt}{CdV} \Rightarrow \frac{1}{C} \quad (16.7)$$

ან ინდუქტივობა:

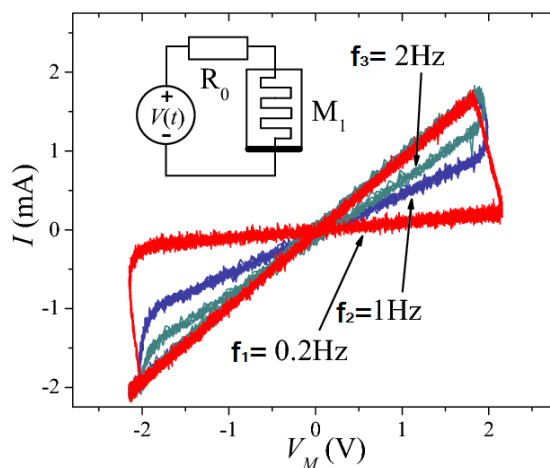
$$M = \frac{d\phi}{dq} = \frac{LdI}{dIdt} \Rightarrow L \quad (16.8)$$

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

ნახ.16.4-ზე გამოსახულია მემრისტორზე დენის დამოკიდებულება სხვადასხვა სიხშირის ცვლად ძაბვაზე. ზედა კუთხეში მოცემულია მემრისტორის სქემატური აღნიშვნა.

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

ეს ფიზიკურად გასაგებია, რადგან წინააღმდეგობის ცვლილება დამოკიდებულია გავლილ მუხტზე და, სიხშირის გაზრდით, ერთ ნახევარპერიოდში გაივლის მუხტი, მეორეში კი ველარ მოასწრებს გავლას. მილი ვერ ასწრებს გაფართოებას, ის უკვე ვიწროვდება და, შესაბამისად, ნაკლები მუხტი გაივლის და ბოლოს გაჯერდება. რეზისტორის წინააღმდეგობა განისაზღვრება დენის ძაბვაზე დამოკიდებულების გრაფიკის დახრილობიდან. ნახ.16.4-დან ჩანს, რომ დენის და ძაბვის ნულ მნიშვნელობაზე, დაბალ  $f_1$  სიხშირეზე, იკვეთება ორი მრუდი – აღმავალი, დიდი დახრით (მცირე წინალობა) და დაღმავალი, შედარებით მცირე დახრით (დიდი წინალობა). ეს ნიშნავს, რომ უძრაობაში მემრისტორის წინალობა სხვადასხვაა და დამოკიდებულია წინა ისტორიაზე.



ნახ.16.4. მემრისტორზე დენის დამოკიდებულება სხვადასხვა სიხშირის ცვლად ძაბვაზე

## საკონტროლო კითხვები:

1. როგორ შეუძლია მემრისტორმა შეცვალოს სქემის ელემენტები?
2. როგორაა მონყობილი მემრისტორი?
3. როგორ შეიძლება მიღებულ იქნას მემრისტორისგან სქემის სხვა ელემენტები?
4. როგორია მემრისტორის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი?

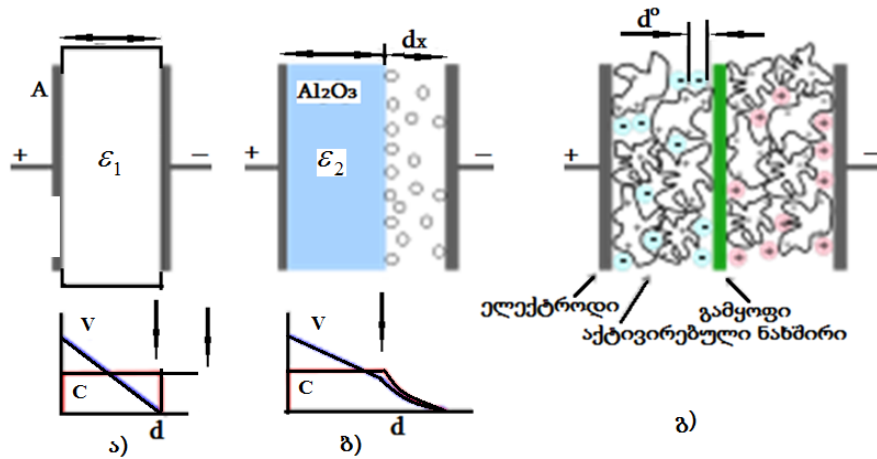
## 17. იონისტორი (სუპერკონდენსატორი), მისი მუშაობის პრინციპი და პარამეტრები

თანამედროვე ეტაპზე მსოფლიო მეცნიერების, ეკონომიკის და ცხოვრების დონის განუხრელი ამაღლება მოითხოვს ენერჯის მოხმარების ზრდას, რომელიც შემოფარგლულია ენერგორესურსების რაოდენობრივი მარაგის სასრულობით. ამიტომ მეცნიერების წინაშე დგას არატრიალური ამოცანა – მოიძებნოს ახალი, ალტერნატიული ენერჯის წყაროები და შემუშავდეს ახალი ენერგოგადამუშავების ტექნოლოგიები. ენერგორესურსებით უზრუნველყოფის ერთ-ერთი მეთოდია მოხმარებული ენერჯის უტილიზაცია. მაგრამ ზოგიერთი ენერჯის უტილიზაცია, მაგალითად, სითბურისა, მოუხერხებელია და, გარდა ამისა, ზოგჯერ მოითხოვება მცირეგაბარტიანი ენერჯის წყაროები, რაც გამოიხატება იმაში, რომ თანამედროვე მიკროელექტრონული ხელსაწყოების და მონყობილობების პროექტირებისას ხშირად დგას მათი სათადარიგო ან ავტონომიური კვების საკითხი. ამიტომ, მათი ელექტროენერჯის მოთხოვნის ხასიათისა და ამოცანის შესრულების მიხედვით, გამოიყენება ელექტროლიტური კონდენსატორები, აკუმულატორები ან კვების ბატარეები. მაგრამ ზემოთ ჩამოთვლილი მონყობილობები ან მათი კომბინაციები, მათი სპეციფიკის გამო, ხშირად გამოუსადეგარია დასმული ამოცანების გადასაწყვეტად.

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

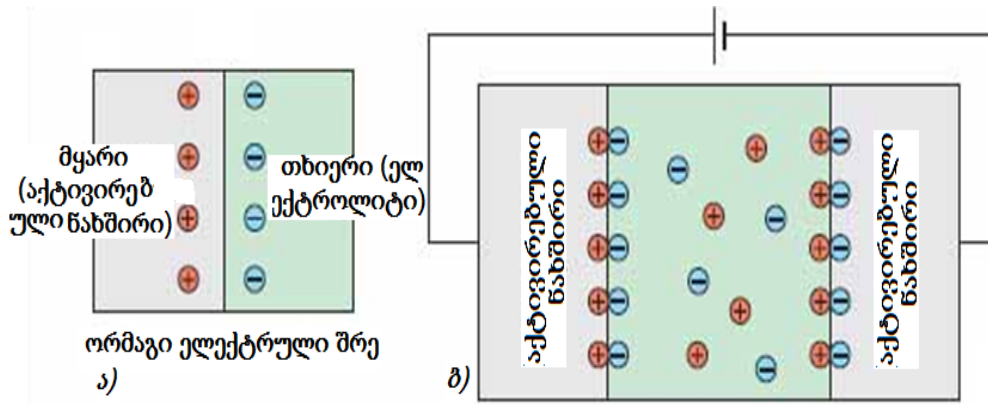
ამერიკელმა ქიმიკოსმა რობერტ რაიტმაერმა 1962 წელს მისცა საპატენტოში განაცხადი, სადაც დანვრილებით იყო აღწერილი „ორმაგი ელექტროლი შრის“ კონდენსატორში ელექტროლი ენერჯის შენახვის პროცესი. ნახ.17.1-ზე გამოსახულია სამი კონდენსატორული კონსტრუქციული სქემის შედარება. თუ ჩვეულებრივ კონდენსატორებში ალუმინის შემონაფენები იზოლირებულია, ტრადიციულად, დიელექტრიკის ფენით, მან აქცენტი გააკეთა უშუალოდ შემონაფენების მასალაზე – ელექტროდებს უნდა ჰქონდეთ სხვადასხვა გამტარებლობა: ერთი ელექტროდი უნდა იყოს იო-

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

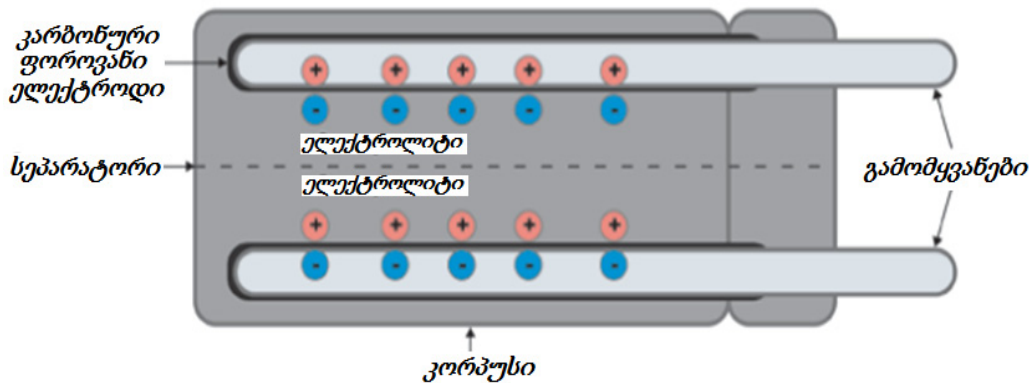


ნახ.17.1. სამი კონდენსატორული კონსტრუქციული სქემის შედარება: ა) – ელექტროსტატიკური; ბ) – ელექტროლიტური და გ) – იონისტორი

როგორც აღნიშნული იყო, დადებითი და უარყოფითი მუხტები ელექტროდის ზედაპირზე ფორმირდებიან, ქმნიან მათზე მუხტიან ოეშ-ს. გამყოფი საზღვარი იქნება ოეშ (ნახ.17.2 ა). ეს უბანი და მუხტი იზრდება მაღალი ძაბვის მოდებისას (ნახ.17.2 ბ). ამ დროს ოეშ-ის სისქე ძალიან მცირეა და მოლეკულის რიგისაა, ანუ  $\sim 5-10$  ნმ. ხშირად, ელექტროდებზე გამოიყენება აქტივირებული ნახშირი (წვრილდისპერსირებული ფრაქციით), დამზადებული სპეციალური ტექნოლოგიით, და ორგანული ელექტროლიტი. ელექტროლიტი აღწევს ნახშირის ნაწილაკებს შორის და ამით ელექტროდი „გაჟღენთილია“ ელექტროლიტით. შეიძლება წარმოვიდგინოთ, რომ იონისტორის საერთო ტევადობა დიდი რაოდენობის მცირე ტევადობების ნაერთია, სადაც აქტივირებული ნახშირის ყოველი თავისებური ელექტროდი აღმძვრელია ოეშ-ის. შეიძლება ითქვას, რომ ულტრაკონდენსატორის ელექტროდები ჩაშვებულია თხიერ ელექტროლიტში და ერთმანეთისგან განცალკევებულია სეპარატორით (ნახ.17.3). ძაბვის მოდებისას ელექტროლიტის თავისუფალი იონები გადაადგილდებიან სანინალმდეგო

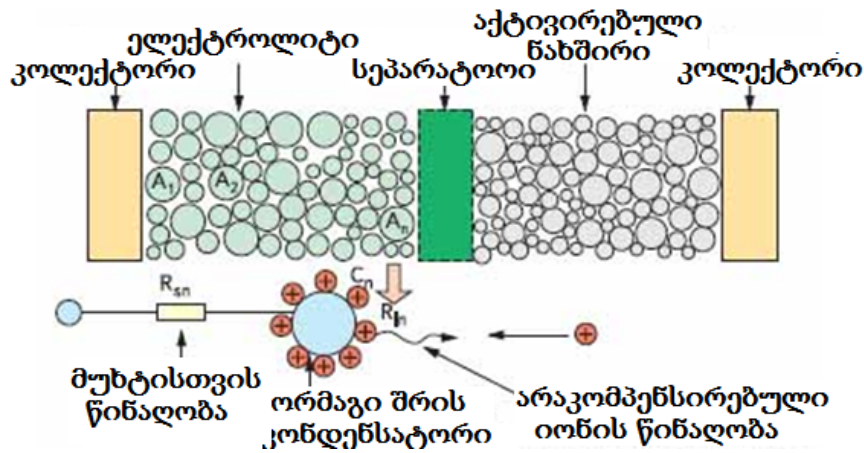


ნახ.17.2. იონისტორში ორმაგი ელექტრული შრის აღძვრა (ა) და ძაბვის მოდებისას მუხტის ზრდა (ბ)



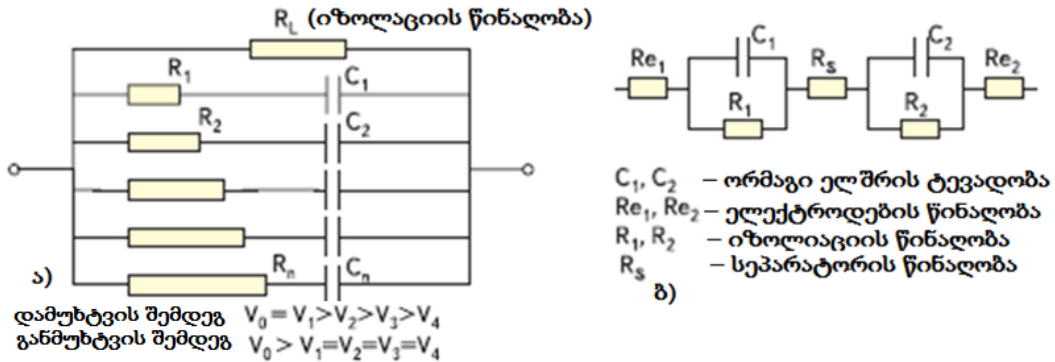
ნახ.17.3. იონისტორის (ულტრაკონდენსატორის) სტრუქტურა

ნიშნის ელექტროდის მხარეს. იონები მასში ვერ შედიან და არ მოქმედებენ ელექტროდის ზედაპირთან დაფარული ნახშირის ელექტროქიმიური ნეიტრალობის გამო. შედეგად შექმნილი ოქსიდის წარმოადგენს შენახული ენერჯის წყაროს. აქტიური ელექტროდები შედიან ელექტროლიტთან ჟანგვა-აღდგენით რეაქციაში და, საერთოდ, იონისტორში ენერჯის დაგროვება ხდება როგორც ოქსიდით, ასევე, შექცევადი ქიმიური რეაქციით. ამ პროცესებში აქტიურად მონაწილეობენ პატარა ნაწილაკის ყველა კონდენსატორები. ამიტომ, იონისტორისთვის შეიძლება გამოყენებულ იქნას ეკვივალენტური სქემა, რომელიც გამოსახულია ნახაზ 17.4-ზე. აქტივირებული ნახშირის ნაწილაკი/ელექტროლიტით აგებულ ყველა პატარა კონდენსატორს **ოქსიდით** ექნება ტევადობა  $C_n$  და არაკომპენსირებული იონების წინააღმდეგობა  $R_{in}$  შეიძლება შეიცვალოს იონების სიჩქარით, ელექტროდებს შორის მანძილით და ა.შ. იონისტორი შედგება ორი ელექტროდისგან, გამოყოფილი ელექტროლიტით მასში მოთავსებული იონ გამტარი მემბრანით (სეპარატორი) და ელექტრული ჩართვით. ენერჯის აკუმულაცია ხდება ორივე ელექტროდის ორმაგი შრით, როგორც ორშრიანი ტევადობების ერთობლიობა.



**ნახ.17.4.** იონისტორის აქტიური შრის აქტივირებული ნახშირი/ ელექტროლიტი სტრუქტურის სქემატური გამოსახვა

იონისტორის ეკვივალენტური სქემა წინააღობათა და მცირე კონდენსატორების პარალელური შეერთებით მოცემულია ნახ.17.5.ა-ზე.  $R_1$ ,  $R_2$  და  $R_n$  აქტიური ნახშირის ნაწილაკთა შიგა წინააღმდეგობაა,  $C_1$ ,  $C_2$  და  $C_n$  - ოქს ტევადობები შესაბამისი წინააღმდეგობებისთვის. ნახაზ 17.5 ბ-ზე მოცემულ ეკვივალენტურ სქემაზე, რომელიც ითვალისწინებს ელექტროდების და სეპარატორის წინააღობებს,  $VZabvis$  მოდების შემდეგ დამუხტვის დენი ( $i$ ) აღინერება:



**ნახ.17.5.** იონისტორის ეკვივალენტური სქემა (ა) და მასში ელექტროდების და სეპარატორის გათვალისწინებით (ბ)

$$i = \frac{V}{R} \exp\left(\frac{-t}{RC}\right) \quad (17.1)$$

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



კონდენსატორის ტევადობა განისაზღვრება ფორმულით:

$$C = \epsilon \epsilon_0 \frac{S}{d} \quad (17.2)$$

სადაც,  $C$  კონდენსატორის ტევადობაა,  $\epsilon$  – დიელექტრიკის დიელექტრიკული მუდმივა,  $\epsilon_0$  – ვაკუუმის დიელექტრიკული მუდმივა,  $S$  – ელექტროდების ფართი და  $d$  – ელექტროდებს შორის მანძილი.

(17.2)-დან ჩანს, რომ ჩვეულებრივ კონდენსატორებში ტევადობის გაზრდა შესაძლებელია  $\epsilon$ -ის ან  $S$ -ის გაზრდით, ან  $d$ -ს შემცირებით.

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

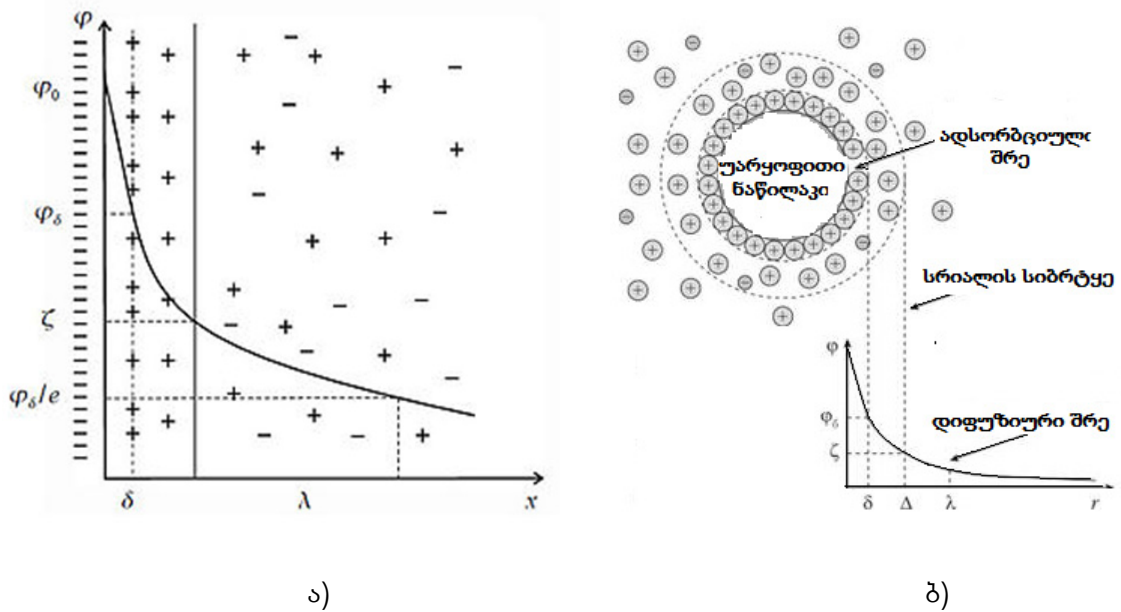
- მცირე ხვედრითი ენერჯია, ვიდრე აკუმულატორებს;
- მოკლე ჩართვისას შიგა კონტაქტების უვნებელყოფა;
- თვითდამუხტვის მეტი სიდიდე, ვიდრე აკუმულატორებს;
- დამუხტვისა და განმუხტვის დენის დიდი მნიშვნელობა;
- ელექტროლიტის მცირე დეგრადაცია;
- მუშაობის დიდი დრო;
- კომპონენტების არატოქსიკურობა.

ოემ-ს აქვს ისეთი აგებულება, როგორც ბრტყელ კონდენსატორს. განსხვავებით იდეალურისგან, რეალურად ოემ-ს აქვს დიფუზიური (განრთხმული) აგებულება. თანამედროვე თეორიით, **ოემ** შედგება ორი ფენისგან: 1) ჰელმჰოლცის ფენა, ანუ ადსორბირებული შრე, რომელიც უშუალოდ ეკვრის ფაზათაშორის ზედაპირს  $\delta$  სისქით (ნახ.17.6 ა და ბ). მასში  $\varphi(x)$  პოტენციალი ზედაპირიდან ნრფივად ეცემა  $\varphi_\delta$ -მდე და 2) დიფუზიის, ანუ გუის შრე ( $\lambda - \delta$ ) სისქით (ნახ. 17.6 ბ), რომელშიცაა ზედაპირული მუხტის მოპირდაპირე ბმული იონები.

დიფუზიური შრის სისქე განისაზღვრება ტოლობით:

$$\lambda = \frac{1}{\lambda} = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 R T}{2 F^2 I}} \quad (17.3)$$

სადაც,  $\lambda$  დებაის სიგრძის შებრუნებული სიდიდეა;  $R$  – რიდბერგის მუდმივა;  $T$  – აბსოლუტური ტემპერატურა და  $F$  – ფარადის მუდმივა.



ნახ.17.6. იონისტორში ორმაგი ელექტრული შრის პოტენციალის (ა) და იონების განაწილების (ბ) აგებულება

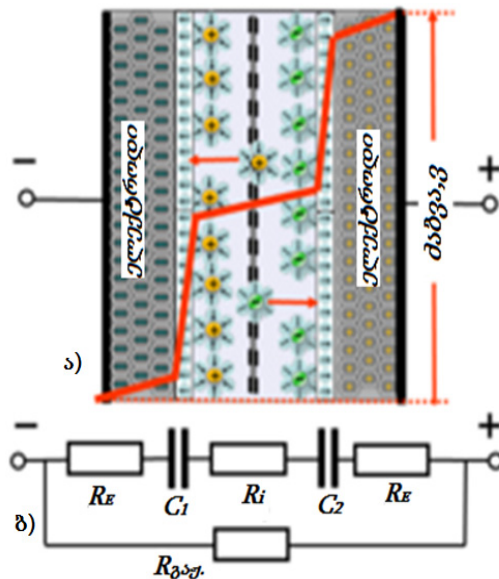
ოშე-ს ელექტრული მახასიათებელია პოტენციალი, რომელიც დიფუზიის შრის შიგნით გამოითვლება ფორმულით:

$$\varphi(x) = \varphi_s \exp(-\lambda x) \quad (17.4)$$

დიფუზიის შრე შეიცავს „ბმულ“ არეს, სადაც იონები მიზიდულნი არიან ელექტროსტატიკური ძალით და ნაწილდებიან ( $\Delta - \delta$ ) სისქეში (ნახ.17.6 ბ).

ოეშ-ის ელექტრული მახასიათებელი  $\varphi$  პოტენციალი დამოკიდებულია სისტემის თვისებებზე და ის შედგება რამდენიმე შემადგენელი ნაწილისგან: 1)  $\varphi_0$  - უშუალოდ ფაზათა გამყოფ ზედაპირზე; 2)  $\varphi_s$  - დიფუზიური შრის პოტენციალი, რომელიცაა ადსორბციულის და დიფუზიურის საზღვარზე, 3) ელექტროკინეტიკური პოტენციალი, ანუ ძეცა-პოტენციალი, რომელიც სრიალის ზედაპირს წარმოადგენს და დიფუზიის შრის პოტენციალის ნაწილია. სრიალის ზედაპირი წარმოიქმნება იმის შედეგად, რომ დისპერსიული ნაწილაკების მოძრაობისას დიფუზიის შრეში უფრო დაშორებული მონაწილეობენ დიფუზიურ მოძრაობაში. ამიტომ, ჩნდება ნაწილაკთა არაკომპენსირებული ზედაპირული მუხტი და შესაძლო ელექტროკინეტიკური მოვლენა. და 4)  $\varphi_{x=\lambda}$  პოტენციალი,  $e$  -ჯერ (2,7) ნაკლები, ვიდრე  $\varphi_s$  და დიფუზიური შრის სისქის მახასიათებელი.

სიმეტრიულ იონისტორში პოტენციალი მცირდება სიმეტრიულად ორივე ორმაგ შრეში ელექტროდებისა და ელექტროლიტის მიხედვით (ნახ.17.7ა).

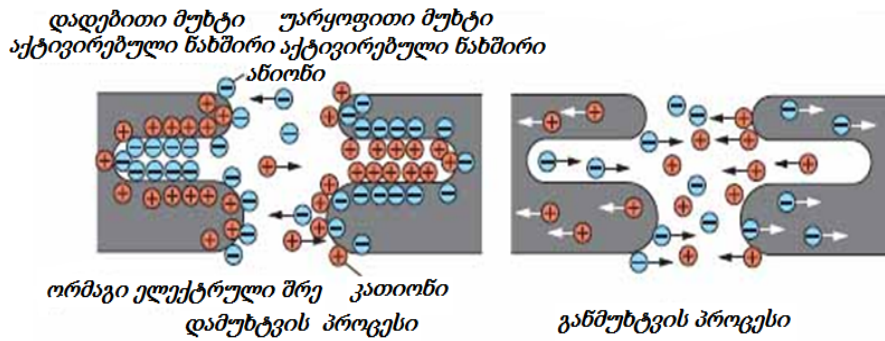


**ნახ.17.7.** სიმეტრიულ იონისტორში დაბვის განაწილება და მისი ეკვივალენტური სქემა

ასიმეტრიულში, როგორც კონდენსატორების ჰიბრიდში, ელექტროდებს შორის დაბვის ვარდნა ასიმეტრიულია. მათში მაქსიმალური დაბვა შემოსაზღვრულია ელექტროლიტის იონური დაშლის მაქსიმალური დენით. ამ დროს გაჟონვის დენები უფრო დიდია (ნახ.17.7ბ).

*იონისტორის ფიზიკო-ქიმიური მუშაობის პრინციპი.* ცნობილია, რომ ჩვეულებრივ კონდენსატორებს შემონაფენებს შორის აქვთ მრავალშრიანი ან მონოლითური დიელექტრიკები. მაგალითად, ალუმინიან ელექტროლითურ კონდენსატორებს დიელექტრიკად აქვთ  $Al_2O_3$ , ტანტალურებს –  $Ta_2O_5$ .

იონისტორებს არ აქვთ დიელექტრიკული შრეები, მასში გამოიყენება ოქსიდის შექმნის მექანიზმი, რომელიც მუშაობს, როგორც დამუხტული დიელექტრიკი. დამუხტვა/განმუხტვის პროცესი მიმდინარეობს დადებითი და უარყოფითი ელექტროდების ზედაპირზე ფორმირებული იონების შრეში, მაგალითად, აქტივირებული ნახშირის ელექტროდებზე (ნახ.17.8). მოდებული დაბვით ანიონები და კათიონები მოძრაობენ შესაბამისი ელექტროდებისკენ, გროვებიან მათ ზედაპირზე და ქმნიან ოქსიდს, რომელიც გადამწყვეტია იონისტორის მუშაობისთვის. იონისტორში გამოიყენება, ძირითადი ელექტროლიტების ორი ტიპი – ნყლიანი (წყალხსნარიანი) და ორგანული (არანყალხსნარიანი). არანყლიანი გამოსადეგია იონისტორის უჯრედზე ჰვამდე დაბვის მოდებაზე, რაც 2-ჯერ მეტია ნყალხსნარიანთან შედარებით და მუდმივი დაბვის მოდებისას არ აქვთ გაჟონვის დენი. განსაზღვრული პოლარობის დაბვის კონკრეტულ დონეზე, ელექტროქიმიური პროცესის გამო, გაივლის დენი. ამ დაბვის სიდიდეს ეწოდება „დაშლის დაბვა“. დაბვის შემდგომი ზრდა იწვევს ელექტროლიტის უფრო ინტენსიურად დაშლას, ჩნდება დამატებითი დენი და იონისტორი გამოდის მწყობრიდან. დამუხტვისას იონისტორზე მოდებული დაბვა არ უნდა აღემატებოდეს დაშლის დაბვას. ამიტომ დამუხტვისას იონისტორებს რთავენ მიმდევრობით.



**ნახ.17.8.** იონისტორის დადებით და უარყოფით ელექტროდებზე  
ორმაგი ელექტრული შრის შექმნა

*იონისტორის ელექტრული და საექსპლუატაციო პარამეტრები.*

**ტევადობა.** როგორც იყო აღნიშნული, იონისტორი წარმოდგენილია სხვადასხვა წინააღმდეგობის მქონე მცირე კონდენსატორებისგან შემდგარი ეკვივალენტური სქემის სახით (ნახ.17.5). თუ საწყისი მუხტითი დაბვა ნაკლებია სრული მუხტის დაბვაზე ( $V_0$ ), მაშინ ტევადობის გაზომვისას იონისტორზე დაბვა დაეცემა. ეს დაკავშირებულია იმასთან, რომ დიდი შიგა წინააღმდეგობის მცირე კონდენსატორები არ არიან ბოლომდე დამუხტულნი. მაგრამ, დამუხტვის დროის გაზრდით ეს მცირე კონდენსატორები დაიმუხტებიან ბოლომდე და გაიზრდება ტევადობა. იონისტორის ტევადობა განისაზღვრება:

$$C = \frac{I \times t}{V_1 - V_2} \quad (17.5)$$

სადაც  $C$  ელექტრული ტევადობაა (ფ),  $I$  - ტესტირების დენი (ა),  $V_1 - V_2$  - დაბვის ტესტური დიაპაზონი (ვ) და  $t$  - დრო (წმ). თუ განმუხტვის დენი დიდია ან კონდენსატორი განიმუხტა დიდი დროის განმავლობაში, მაშინ მარეზულტირებელი ტევადობა იქნება მცირე, და პირიქით. ამიტომ, საჭირო გაზომვებისთვის უნდა იყოს განმუხტვის დენი 1მა/ფ.

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

**მუხტის მახასიათებელი.** იონისტორის ეს პარამეტრიც, რამდენიმე მარტივი დაშვებით, შეიძლება ასე წარმოვადგინოთ:

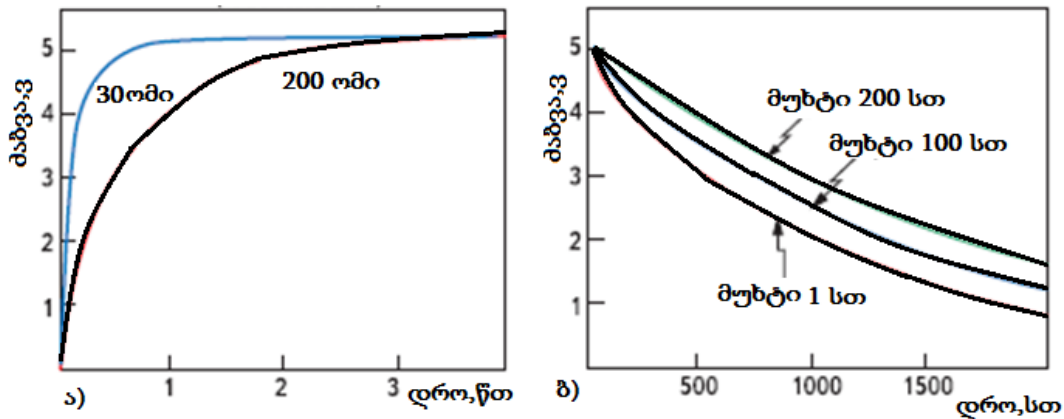
$$V = V_0 [1 - \exp(-t / RC)] \quad (17.6)$$

ნახ.17.9ა-ზე გამოსახულია იონისტორის დამუხტვის დაბვის დამოკიდებულება დროზე სხვადასხვა წინააღმდეგობისას. წინააღმდეგობის გაზრდით დამუხტვის დროც

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

$$t = \frac{C \times (V_0 - V_1)}{I} \quad (17.7)$$

$$t = -C \times R \times \ln(V_1 / V_0) \quad (17.8)$$



ნახ.17.9. იონისტორის დამუხტვისა (ა) და განმუხტვის (ბ) ძაბვის დროზე დამოკიდებულება სხვადასხვა წინააღმდეგობისა და დროის დამუხტვისას

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

ნახ.17.9 ბ-ზე მოყვანილია იონისტორის განმუხტვის ძაბვაზე დამოკიდებულება სხვადასხვა დროის დამუხტვისას. ჩანს, რომ, მაგალითად, დამუხტვის პროცესის ერთი საათიდან 100 საათამდე ცვლილებისას ძაბვა, ფაქტობრივად იცვლება 2,5-დან 2,8 ვოლტამდე და, ასე რომ, იონისტორის დამუხტვა შეიძლება იყოს სწრაფი.

**განმუხტვისა და თვითგანმუხტვის მახასიათებელი.** იონისტორის განმუხტვის მახასიათებელი, (17.5)-ის გათვალისწინებით, ასე შეიძლება წარმოდგინდეს:

$$t = C \times \frac{V_1 - V_2}{I} \quad (17.9)$$

თვითგანმუხტვის მახასიათებელი კი:

$$V = V_0 \times \exp\left(\frac{-t}{R_L C}\right) \quad (17.10)$$

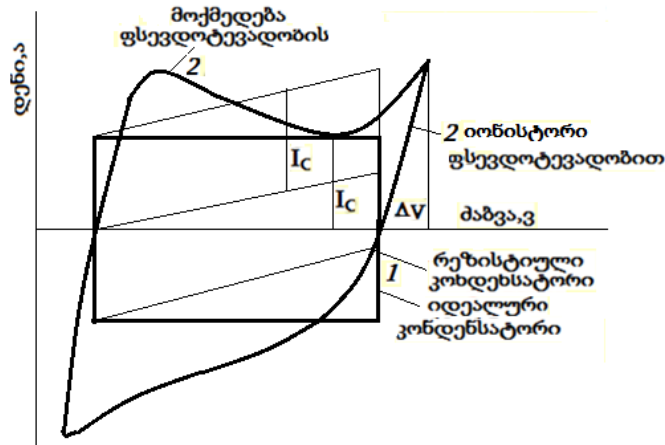
სადაც  $R_L$  – იზოლაციის წინააღმდეგობაა.

შესამჩნევი განსხვავება დაიმზირება სტატიკური კონდენსატორისა და იონისტორის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელზე, რომელიც გამოსახულია ნახაზ 17.10-ზე.

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

მყარსხეულოვანი ელექტროლიტები განსაკუთრებული ტიპის იონური კრისტალებია, რომლებიც გამოირჩევიან მაღალი გამტარებლობით. ასეთ მასალებში გამტარ-

რებლობა ხორციელდება არა ელექტრონების მოძრაობით, როგორც სხვა სტრუქტურის კრისტალებში, არამედ სხვადასხვა ნიშნის იონებით, თხიერი ელექტროლიტის მსგავსად. ამიტომ ასეთ იონურ კრისტალებს უწოდებენ მყარ დიელექტრიკებს ან სუპერიონურ გამტარებს. სუპერიონურ გამტარებად შეიძლება გამოიყენებოდეს ისეთები გამტარები, როგორცაა, მაგალითად,  $AgI$ ,  $Ag_4RbI_5$ ,  $LiI$  და ა.შ.



**ნახ.17.10.** იონისტორის ციკლური ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი:  
1 – სტატიკური და 2 - ფსევდოტევადობა

მათში იონური ტრანსპორტის პროცესები აღინერება გადინების (პერკოლაციის) თეორიით. ამ თეორიაში მნიშვნელოვანია „გადინების ალბათობის“ არსი, რომელიც განისაზღვრება, როგორც ალბათობა იმისა, რომ არის ნებისმიერ წერტილში ინჟექტირებული სითხე მიაღწევს ამ წერტილიდან უსასრულოდ დაშორებულ წერტილს. ცხადია, რომ გადინების თეორიისას სითხის გავრცელების პროცესი შემოფარგლული იქნება ფორიანი არის რაღაც სასრულო უბანში, ანუ ფორიან არეში. ეს თეორია მიახლოებითია.

ასევე, პერკოლაციის არსი შეიძლება გადავიტანოთ ნებისმიერ გარემოზე, რომელშიც ხდება მეორე გარემოდან რომელიღაც ნივთიერების გადატანა. ეს პერკოლაციური გარემოებებია, რომელთათვისაც უნდა განისაზღვროს გადინების წყარო, სხვადასხვა მდგომარეობაში მყოფი გადინების ელემენტები, ერთი არაგადინებადია (პირველადი), მეორე – გადინებადი; ასევე – გადინების მეთოდი. ასევე მნიშვნელოვანია ზღბრული გადინება – პერკოლაციური არის გამტარი კომპონენტის მინიმალური კონცენტრაცია.

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

უკანასკნელ ხანს ინტენსიურად ისწავლება ვერცხლის იოდიდი, როგორც მცირე დისპერსიული კრისტალების სუპერიონური გამტარი. ის ასევე გამოიყენება ნანომავთულების სახით. სუპერიონური გამტარი  $AgI$  მზადდება ალუმინის ანოდური ოქსიდის საფუძველზე, რომელშიც ლეგირებულია ნანომავთული. მიმდინარეობს სამუ-

შაობი AgI-ში დიელექტრიკული მუდმივის და შიგა წინააღმდეგობის შესაცვლელად მასში ტიტანისა და ბისმუტის იონების შერევით.

### **საკონტროლო კითხვები:**

1. როგორ ელემენტს წარმოადგენს იონისტორი?
2. აღწერეთ იონისტორში ორმაგი ელექტრული შრის წარმოქმნის მექანიზმი;
3. როგორია აქტივირებული ნახშირი?
4. როგორ მუშაობს იონისტორი?
5. როგორია იონისტორის ეკვივალენტური სქემა?
6. რა პარამეტრებით ხასიათდება იონისტორი?
7. სად შეიძლება იონისტორის გამოყენება?

## რეკომენდირებული ლიტერატურა:

1. В.Е.Борисенко, А.И. Воробьева, А.Л. Данилюк, Е.А. Уткина «Нанoeлектроника: Теория и практика» 2-е изд. –М., БИНОМ., Лаборатория знаний, 2013, - 366 стр.;
2. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин «Основы нанoeлектроники» М., Логос, 2006, 412 стр.;
3. Ю. И. Головин «Введение в нанотехнику», М., «Машиностроение», 2007, 494стр.;
4. А.А.Щука «Нанoeлектроника»,М., БИНОМ «Лаборатория знаний», 2012, 343 стр.;
5. В. Балабанов, И. Балабанов «Нанотехнологии правда и вымысел», М., «Эксмо», 2010, 382 стр.;
6. В.Неволин «Квантовая физика и нанотехнологии», М., «ТЕХНОСФЕРА», 2011, 68стр.;
7. И.П.Суздаев «Нанотехнология, физико-химия нанокластеров, структур и материалов», М., URSS, 2008, 589 стр.;
8. В. И. Балабанов «Нанотехнологии наука будущего», М., «Эксмо», 2009, 285стр.;
9. ა. ბიბილაშვილი „ნახევარგამტარული მიკროელექტრონიკა“, თბილისი, თსუ, 2009, 416 გვ.;
10. Ч. Пул-мл., Ф. Оуен «Нанотехнологии», пер. с англ-го под ред. Ю.И.Головина, М., «ТЕХНОСФЕРА», 2006, 316стр.;
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц «Квантовая механика (нерелятивистская теория)», М., Физматлит, 2002, 808 с.,(т. 3), гл. 15 «Движение в магнитном поле», п. 112 «Движение в однородном магнитном поле», с. 554 –559;
12. К. фон. Клитцинг Квантовый эффект Холла: Нобелевская лекция 1985 г. // Успехи физ. наук. 1986. Т. 150, 1. С. 107-126;
13. Г.М.Младенов, В.М.Спивак, Е.Г. Колева, А.В. Богдан «Введение нанoeлектронные технологии – нанoeлектроника», книга 1, Киев-София, 2010, 327 стр.;
14. «Нанонаука и нанотехнологии», энциклопедия систем», под редакции Е.Е.Демидовой, изд.- ЮНЕСКО, 2009,768 стр.;
15. В.Е.Борисенко, А.Л. Данилюк, Д.Б. Мигас «Спинтроника», М.Лаборатория знаний, 2017,229 стр.;
16. Г.М.Младенов, В.М.Спивак, Е.Г. Колева, А.В. Богдан «Введение нанoeлектронные технологии – нанoeлектроника», книга 1, Киев-София, 2010, 327 стр.;
17. «Нанонаука и нанотехнологии», энциклопедия систем», под редакции Е.Е.Демидовой, изд. ЮНЕСКО, 2009,768 стр.;
18. М. Рыбалкина «Нанотехнологии для всех» www.nanonewsnet.ru
19. S.K. Kulkarni «Nanotechnology – Principles and Practices», ISBN 9783319091716, 403p;
20. E.L. Wolf «Quantum Nanoelectronics and Quantum Computing», Weinheim, 2009, 387p;
21. M.K. Jayara «Nanostructured Metal Oxides and Devices», ISBN 978-981-15-3314-3 (2020), 458p;
22. O.V. Kharissova, L. Myriam «Hanbook of Nanomaterials and Environmental Application», (2021), ISBN 978-3-030-36267-6, 519p.



რედაქტორი  
კორექტორი  
დამკაბადონებელი  
გარეკანის დიზაინერი

დალი გერმანიშვილი  
ლელა ნიკლაური  
ხათუთა ბადრიძე  
მარიამ ებრალიძე

მომზადდა ივანე ჯავახიშვილის  
სახელობის თბილისის სახელმწიფო  
უნივერსიტეტის გამომცემლობაში

---

0179 თბილისი, ი. ჭავჭავაძის გამზირი 14  
14, Iliа Tchavtchavadze Ave., Tbilisi 0179  
Tel: +995 (32) 2250484, 6284; 6278  
<https://www.tsu.ge/ka/publishing-house>



ფიზიკა-მათემატიკის მეცნიერებათა დოქტორი, პროფესორი. არის ივ. ჭავჭავაძის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტის, ფიზიკის დეპარტამენტის ასოცირებული პროფესორი, ასევე სსიპ მიკრო- და ნანოელექტრონიკის ინსტიტუტის დირექტორი, რომელიც შედის სახელმწიფო სამხედრო სამეცნიერო ცენტრ „დელტა“ დაქვემდებარებაში.

1965 წელს დაამთავრა ამბროლაურის რაიონის ხოტევის ზოგად საგამანათლებლო საშუალო სკოლა ოქროს მედალზე და იმავე წელს ჩაირიცხა თბილისის სახელმწიფო

უნივერსიტეტის ფიზიკის ფაკულტეტზე, რომელიც დაამთავრა 1970 წელს.

1982 წელს დაიცვა საკანდიდატო დისერტაცია მინსკის რადიოტექნიკურ ინსტიტუტში. 1985 წელს მიენიჭა დოცენტის სამეცნიერო წოდება, 2001 წელს ივ. ჭავჭავაძის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში დაიცვა სადოქტორო დისერტაცია და 2003 წელს მიენიჭა პროფესორის სამეცნიერო წოდება.

ა. ბიბილაშვილს აქვს 160 სამეცნიერო ნაშრომი, 17 პატენტი (მათ შორის 4 აშშ-ის), 6 წიგნი. მონაწილეობდა რამდენიმე საერთაშორისო კონფერენციის მუშაობაში. მისი ხელმძღვანელობით დაცულია ექვსი საკანდიდატო დისერტაცია, რამდენიმე სამაგისტრო და საბაკალავრო ნაშრომი. მონაწილეობდა არაერთ საერთაშორისო და ეროვნულ გრანტში ხელმძღვანელისა და ძირითადი შემსრულებლის პოზიციით.

ა. ბიბილაშვილმა მუშაობა დაიწყო 1970 წელს სამეცნიერო კვლევით გაერთიანება „მიონში“, 1983 წელს მიწვევით გადავიდა ივ. ჭავჭავაძის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში ფიზიკის ფაკულტეტზე, სადაც დღემდე მუშაობს. 2011 წელს დირექტორად დაინიშნა ახლადგახსნილ სსიპ მიკრო- და ნანოელექტრონიკის ინსტიტუტში, სადაც დღემდე მუშაობს.

ამირან ბიბილაშვილის სამეცნიერო ინტერესები მოიცავს ნახევარგამტარული ხელსაწყოებისა და ინტეგრალური მიკროსქემების შექმნის დაბალტემპერატურულ-, ფოტო- და კატალიზურად სტიმულირებულ ტექნოლოგიებს, რადიაციის გავლენას მიკროელექტრონულ ხელსაწყოებზე, ნანოსტრუქტურების მიღებას, კვლევისა და მათ გამოყენებას მიკრო- და ნანოხელსაწყოებში.

ამირან ბიბილაშვილი არის გამოგონებათა მედლის მფლობელი, საქართველოს სამეცნიერო საზოგადოების პრემიის და მედლის მფლობელი.