

ნანონაწილაკებისგან შემდგარი ნანოკომპოზიტური მასალის ლაზერით დასხივებისას წარმოშობილი ზოგიერთი ფიზიკური ეფექტის შესახებ

ლ. ხვედელიძე

მრავალპროფილიანი სასწავლო-სამეცნიერო ცენტრი კავკასია 2010

აბსტრაქტი. ნაშრომში განხილულია ნანოკომპოზიტური მასალის ლაზერით დასხივებისას წარმოშობილი ზოგიერთი ოპტიკური და სითბური ეფექტები. შემოთავაზებულია ერთი ფიზიკურ-მათემატიკური მოდელი. მოყვანილია შესაბამისი ამონახსნი და აღნიშნულია მსგავსი სახეობის მასალების გამოყენების შესაძლებლობის პერსპექტივა.

საკვანძო სიტყვები: ნანოკომპოზიტი, ლაზერით დასხივება, ფიზიკური ეფექტები, სტეფანის ამოცანა, ფიზიკურ-მათემატიკური მოდელი.

შესავალი

ბოლო წლებში მნიშვნელოვნად გაიზარდა ინტერესი ნანოკომპოზიტური ნანომასალების პრაქტიკული გამოყენების შესაძლებლობებისადმი. ამასთან, მნიშვნელოვანია შესაბამისი ექსპერიმენტების შედეგად მოხერხდეს რიგი ფუნდამენტური საკითხების დადგენა და მოხდეს მათი ფიზიკურ-მათემატიკური მოდელის დაზუსტება, რასაც დიდი პრაქტიკული მნიშვნელობა ენიჭება როგორც თეორიული, ასევე პრაქტიკული მიზნებისთვის (ნანოელექტრონიკაში, ნანომედიცინაში, ნანოტექნოლოგიებში და ა.შ.).

ნაშრომში [1] განხილული იყო დიელექტრიკულ ნანოკომპოზიტში სინათლის სხივის არაწრფივი გავრცელება, რომლის დროსაც გათვალისწინებული იყო ზოგიერთი შესაძლო კვანტური ეფექტი. მიღებული შედეგების დაზუსტების მიზნით მიზანშეწონილია დადგენილი იყოს ამ დროს ნანოკომპოზიტში მიმდინარე მიკროპროცესების შედეგად წარმოქმნილი ზოგიერთი ფიზიკური ეფექტის შესაძლო გავლენა რეალურ ფიზიკურ სურათზე.

მოცემულ ნაშრომში განხილულია ნანოკომპოზიტური მასალის ლაზერით დასხივებისას წარმოშობილი ზოგიერთი ფიზიკური ეფექტი კვანტური ფიზიკის ზოგადი დებულებების საფუძველზე. ამასთან, შესაბამისი კერძო შემთხვევების განხილვისას მიზანშეწონილია, რომ ნაშრომში განხილული ფიზიკური ეფექტები გათვალისწინებული იქნას ნანოკომპოზიტური მასალის ლაზერით დასხივების დროს.

თეორიული მოდელი. როგორც ცნობილია, მყარ სხეულებში სითბო გადაეცემა ქაოსურად სხეულის შემადგენელი ატომების და მოლეკულების რხევის შედეგად. ასეთი რხევების გავრცელება მოსახერხებელია განვიხილოთ როგორც წრფივი სპექტრის ნაწილაკების - ფონონების გავრცელება. ბერა - ასევე რხევის გავრცელება, მაგრამ შესაბამის ტალღებს გააჩნიათ გავრცელების მიმართულება. გავრცელე-

ბის ერთიანი მექანიზმი ვლინდება იმაში, რომ მაკროსკოპულ სხეულებში სითბო-გადაცემის კოეფიციენტი და ბგერის სიჩქარე ერთმანეთის პროპორციულია [3.4]. აღნიშნული საკითხი მეტად აქტუალურია ტექნიკისა და ტექნოლოგიების მრავალი განხრისათვის, მათ შორის ბიოსამედიცინო მასალების შექმნისა და გამოყენების შემთხვევისათვის.

სითბოგამტარობის შეფასებისთვის გამოვიყენოთ ზოგადი ფენომენოლოგიური შეფასება [4,5]:

$$\lambda = \alpha V l, \quad (1)$$

სადაც λ - კომპოზიტის სითბოგამტარობაა, ($W/(m.k)$); V -ნიმუშში სითბოს გადამტანი ნაწილაკების მახასიათებელი სიჩქარეა. სითბოს გადატამტანია ფონონი, რომლისთვისაც მახასიათებელი სიჩქარე არის მასალაში ბგერის სიჩქარის ტოლი, ($m/\hbar$), l - ფონონის თავისუფალი განარბენის სიგრძე, (m), α - მოცულობითი სითბო-აკუსტიკური კოეფიციენტი, რომელიც ფონონების კონცენტრაციის პროპორციულია (J/m^2K), k_B - ბოლცმანის მუდმივაა, და ახასიათებს მოცულობას, რომელშიც ფონონების ბალისტიკური მოძრაობა გარდაიქმნება ქაოსურად. აშკარაა, რომ ეს მოცულობა პროპორციულია l^3 -ის და $\alpha = k_B(C l^3)$, სადაც C უგანზომილებო სიდიდეა და ტოლია ერთის.

რადგან უმეტეს შემთხვევაში ნანონაწილაკების კომპოზიტის სითბოგამტარობა არსებითად მცირეა მაკრონაწილაკების სითბოგამტარობაზე, ბუნებრივია ვივარაუდოთ, რომ კომპოზიტის სითბოწინაღობაში ძირითად წვლილს გვამღევს ფონონების გაბნევა კომპოზიტის მარცვლების საზღვარზე. შესაბამისად თავისუფალი განარბენის სიგრძის მახასიათებლად ავიღოთ მანძილი კომპოზიტის არაერთგვაროვნებებს შორის, რომელიც განისაზღვრება კომპოზიტში რენტგენის სხივების კოჰერენტული გაბნევის მიდამოთი. ფონონების კონცენტრაცია ცალსახად განისაზღვრება ბოზე-აინშტაინის განაწილებით და არ არის დამოკიდებული კონკრეტული ნიმუშის სახეობაზე. შესაბამისად უნდა ვივარაუდოთ, რომ (1) გამოსახულებაში პროპორციულობის კოეფიციენტს სხვადასხვა ნიმუშისათვის ექნება მახლობელი მნიშვნელობა.

დაუშვათ, ნანოკომპოზიტური ნახშირბადის მილი, რომელშიც მოთავსებულია გრაფენის ნანონაწილაკები (ნანოკომპოზიტი), იმყოფება ლაზერის სხივით დასხივების ზემოქმედების ქვეშ. თავად გრაფენი ჩავთვალოთ ელექტრულ ტალღამტარად. შესაბამისად, ნანომოწყობილობა მთლიანობაში ჩავთვალოთ ლითონ-დიელექტრიკის ერთიან სისტემად. ასეთი სისტემის სითბოგამტარობის მექანიზმის დადგენა საინტერესოა დასმული ამოცანის განხილვის შემთხვევაში.

სითბოგამტარელობის იდეალიზირებული მექანიზმი მეტალი-დიელექტრიკის საზღვარზე შემოთავაზებულია ნაშრომში [6]. ჩვენ შემთხვევაში

„ლითონად“ შეიძლება ჩავთვალოთ გრაფიტის მაგვარი მიდამო, რომლის სითბოგამტარობაა λ_{Gr} . ნაშრომში [6,7] ნაჩვენებია, რომ კაპიცას სითბოწინაღობა დამოკიდებულია ფონონებს და ელექტრონებს შორის სითბოს გადაცემის კოეფიციენტზე, რომლისგანაც შედგება მეტალი θ ; იგი იზომება $W/(m^2 K)$ და თვითონ მეტალის სითბოგამტარობისაგან. სითბოგამტარობის კოეფიციენტი, განპირობებული კაპიცას სითბოწინაღობით, შეიძლება ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$\lambda = \frac{l\sqrt{\theta\alpha V}}{N}; \quad (2)$$

სადაც N საზღვრების რაოდენობაა, რომელსაც გადაკვეთს ფონონი განარბენის სიგრძეზე λ . ჩავსვათ კოეფიციენტი α მნიშვნელობა (2) გამოსახულებაში და ჩავთვალოთ, რომ $\sqrt{C} \approx 1$. მივიღებთ შეფასებას ერთი საზღვრისათვის

$$\lambda = \sqrt{k_B \theta V}.$$

გადასვლით მიდამოში მოქმედებს ორივე მექანიზმი: ჩვეულებრივი მაკროსკოპული სხეულის სითბოგამტარობის და სითბოგამტარობის, რომელიც განპირობებულია ფონონების გაბნევით კომპოზიტის ნიმუშსა და გრაფიტისმაგვარ ნიმუშის მიდამოს შორის. სითბური ნაკადის თანდათანობითი გავრცელებისას კომპოზიტში ხდება მათ შორის საზღვრების გადაკვეთა და თუ გამოვიყენებთ ელექტრო-სითბურ ანალოგიას თანდათანობითი მიერთების შემთხვევისათვის, შეიძლება დავწეროთ, რომ

$$\lambda = \frac{\alpha V l}{1 + \frac{N \alpha V}{\sqrt{\theta \alpha V l}}}; \quad (3)$$

აშკარაა, რომ, როდესაც საზღვრები მცირეა ან არ არსებობს ($N=0$) ეს გამოსახულება გადადის (1) გამოსახულებაში, ხოლო საზღვრების გარკვეული რაოდენობის შემთხვევაში კი (2) გამოსახულებაში.

გრაფიტის „მინაერთის“ გამოვლენა, რომლის წილიც კომპოზიტის სითბოგამტარობაში ტოლია c -სი, შეიძლება გავითვალისწინოთ წრფივ მიახლოებაში შემდეგნაირად: $\lambda = \lambda_D - (\lambda_D - \lambda_{Gr})c$, სადაც λ - როგორც წინათ, კომპოზიტის სითბოგამტარობის კოეფიციენტი, λ_D - ნიმუშის მარცვლების სითბოგამტარობის კოეფიციენტი, λ_{Gr} - გრაფიტის მსგავსი ნაწილის სითბოგამტარობის კოეფიციენტი.

ზემოთ მოყვანილი ფორმულის ანალოგიურად შეგვიძლია ჩავწეროთ

$$\lambda = \lambda_D - \left(\lambda_D - \lambda_{Gr} + \frac{\alpha V l}{1 + \frac{N \alpha V}{\sqrt{\theta \alpha V l}}} \right) c. \quad (4)$$

თითქმის სრული გრაფიტიზაციის არ არსებობის დროს კომპოზიტის სითბოგამტარობა გადადის შესაბამისად λ_D და λ_{Gr} -ში, რადგან ამ დროს საზღვრების

რაოდენობა უმნიშვნელოა.

(4) გამოსახულება შემოთავაზებული მოდელის ფარგლებში შეგვიძლია ჩავთვალოთ ძირითად გამოსახულებად. ამასთან, სავარაუდოა, რომ სითბოგადაცემის ცვლილების მსგავსი მექანიზმი დამახასიათებელი იქნება ნაწილობრივად ნაწილობრივად მიერი სახეობის კომპოზიტისათვის. ამ მოსაზრებას ფაქტიურად ადასტურებს ნაშრომებში [7,8] მიღებული შედეგები.

იმისათვის, რომ განვსაზღვროთ ნაწილობრივად ნაწილობრივად ტემპერატურული რეჟიმი, საჭიროა მოვახდინოთ ლაზერული ზემოქმედების რიცხვითი მოდელირება. თუ უგულებელვყოფთ ლაზერული გამოსხივების შთანთქმას ნაწილობრივად ნაწილობრივად მიერი, მაშინ შეიძლება შემოვიფარგლოთ ერთგანზომილებიანი მიახლოებით, რადგანაც ლაზერული გამოსხივების ინტენსივობა თანაბრადაა განაწილებული დასხივებული ზონის მიხედვით, ხოლო მისი ზომა რამდენჯერმე აღემატება სითბური დიფუზიის სიგრძეს. იგი იმპულსური გათბობის ხანგრძლივობის დროზეც კი მთელი რიგით მეტია. ერთგანზომილებიან არაწრფივ სითბოგამტარობის განტოლებას სტეფანის პირობით ფაზური გადასვლის საზღვარზე ექნება სახე [9]:

$$\rho(x, T)[c(x, T) + L\delta(T - T_m)] \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x, T) \frac{\partial T}{\partial x} \right] + Q(x, t); \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = 0,$$

$$T|_{x=D} = T|_{t=0} = T_0;$$

სადაც T -ტემპერატურა, $T_0 = 300K$, t -დროა, x -კოორდინატა მიმართულია ნიმუშის შიგნით, ρ -სიმკვრივეა, c -კუთრი სითბოტევადობაა, k -სითბოგამტარობა, L -სრული დნობის სითბო, T_m -დნობის ტემპერატურა, $\delta(T)$ -დირაკის ფუნქციაა. $Q(x, t)$ ფუნქცია აღწერს სითბოს გამოყოფას ლაზერული გამოსხივების შთანთქმის დროს:

$$Q(x, t) = \alpha(T)(1 - R)q(t) \exp \left\{ - \int_0^x \alpha(T(x')) dx' \right\}; \quad (6)$$

სადაც α -შთანთქმის კოეფიციენტი, R -არეკვლის კოეფიციენტი, $q(t)$ -ლაზერის იმპულსის ფორმაა და აქვს სახე:

$$q(t) = \frac{W}{\tau_p} \sin^2 \left(\frac{\pi t}{2\tau_p} \right). \quad (7)$$

კონკრეტული ნივთიერების შესწავლის დროს საჭიროა გავითვალისწინოთ ოპტიკური და სითბური პარამეტრების ტემპერატურული დამოკიდებულება, ასევე ფაზურ მდგომარეობაზე მათი დამოკიდებულება. ზღვრამდე რეჟიმისათვის გამოსახულებაში შემავალი δ -ფუნქცია აუცილებელია იმისათვის, რომ განვსაზღვროთ მონოკრისტალის დნობის საწყისი.

ცნობილია, რომ ცალკეული ნანონაწილაკის როგორც სისტემის კონკრეტული ფიზიკური თვისებების გამოთვლა გამძლეებულია, რადგანაც იგი შედგება მრავალი ნაწილაკისაგან, რომლებიც ეთანადებიან კვანტური მექანიკის კანონებს. ცნობილია ასევე, რომ კვანტურმექანიკური სისტემის ოპტიკური თვისებები დაკავშირებულია მუხტის მატარებლების ენერგეტიკული მდგომარეობის სპექტრის თავისებურებებთან: დღეისათვის დადგენილად შეგვიძლია ჩავთვალოთ, რომ ნანონაწილაკების ოპტიკური და ელექტროფიზიკური თვისებები განსხვავდება მოცულობითი ნიმუშის თვისებებისგან არსებითად, რაც დაკავშირებულია მათი ენერგეტიკული სპექტრის ცვლილებასთან [6-9].

ნანონაწილაკის კვანტური მდგომარეობის სპექტრის განსაზღვრა შესაძლებელია გავლილი ელექტრომაგნიტური გამოსხივების სპექტრის მიხედვით. თუ შევადარებთ სხვადასხვა ზომის ნანონაწილაკებით შემდგარი ნანოკომპოზიტების გატარების სპექტრს, შესაძლებელია გამოვთვალოთ ამ დროს მიმდინარე პროცესების ზოგადი შტრიხები. თუ ჩავთვლით, რომ ნანონაწილაკების რაოდენობა N არც ისე დიდია და მას ეცემა ბრტყელი ელექტრომაგნიტური ტალღა, რომლის ტალღური ვექტორიც ძევს $(\alpha; y)$ სიბრტყეში, მაშინ სინათლის სხივის ნორმალური დაცემის დროს ნანოკომპოზიტის ბრტყელ საზღვარზე, რომელიც მოთავსებულია x ღერძის პერპენდიკულარულად, გატარების კოეფიციენტისათვის გამოსახულება შესაძლებელია ჩავწეროთ ასეთი სახით [10]:

$$T(\omega; N) = \frac{(1 - [R^2])^2 \cdot \exp(-\beta L)}{1 + R^2 \cdot \exp(-2\beta L)} ; \quad (8)$$

სადაც β -ექსტინქციის კოეფიციენტი, R -სხივის არეკვლის კოეფიციენტი ფენის საზღვართან, რომელიც, როგორც წესი, ექსპერიმენტის დროს ნაკლებია ერთზე, L -მანძილია, რომელიც გადის ნანოკრისტალის კომპოზიტში.

დისკუსია და ანალიზი. ნაშრომში განხილული საკითხი მეტად აქტუალურია მეცნიერებისა და ტექნოლოგიების სხვადასხვა განხრისთვის. დასმული ამოცანის გადაწყვეტა საშუალებას იძლევა დაზუსტდეს ნანოკომპოზიტური მასალის ლაზერით დასხივებისას წარმოშობილი ზოგიერთი ოპტიკური და სითბური ეფექტები კვანტური ცდომილების საზღვრებში. მოყვანილი ფიზიკური მოდელი საშუალებას იძლევა გავითვალისწინოთ ნანოკომპოზიტის სითბოგამტარობა და სტეფანის ამოცანის საფუძველზე მიღებულია $Q(\alpha, t)$ ფუნქცია, რომელიც აღწერს სითბოს გამოყოფას ლაზერული გამოსხივების შთანთქმის დროს (6). შედეგად დადგენილია, რომ კონკრეტული ნივთიერების შესწავლის დროს საჭიროა გავითვალისწინოთ ოპტიკური და სითბური პარამეტრების ტემპერატურული დამოკიდებულება, ასევე ფაზურ მდგომარეობაზე მათი დამოკიდებულება.

როგორც ცნობილია, ნანონაწილაკის კვანტური მდგომარეობის სპექტრის

განსაზღვრა შესაძლებელია გავლილი ელექტრომაგნიტური გამოსხივების სპექტრის მიხედვით. ბრტყელი ელექტრომაგნიტური ტალღის დაცემის შემთხვევისთვის, რომლის ტალღური ვექტორიც ძევს (x, y) სიბრტყეში და ვივარაუდებთ, რომ სინათლის სხივის ნორმალური დაცემის დროს ნანოკომპოზიტის რომელიც მოთავსებულია x ღერძის პერპენდიკულარულად, გატარების კოეფიციენტისთვის ჩაწერილია (8) გამოსახულება.

დასმული ამოცანის გადაწყვეტის შედეგად მიღებული შედეგები არსებითია ნანოტექნოლოგიური პროცესების დაზუსტებისთვის და ნანოკომპოზიტების პრაქტიკული გამოყენებისთვის. რადგანაც საკითხი გადაწყვეტილია მიკროზომების დონეზე, ამიტომ მიღებული შედეგები კიდევ უფრო არსებითი ხდება პრაქტიკული მიზნების წარმატებით გადაწყვეტისთვის.

დასკვნა. განხილული ფიზიკურ-მათემატიკური მოდელი შესაძლებლობას იძლევა მოხერხდეს ონკოლოგიური დაავადებების დროს მეთოდის პრაქტიკულად შემუშავება, რასაც დიდი მნიშვნელობა ექნება როგორც ნანოტექნოლოგიებისთვის და ნანომედიცინისათვის, ასევე შესაძლო გამოყენების სხვა სფეროებისთვისაც. მიღებული შედეგები გააადვილებს მთელი რიგი პრაქტიკული მნიშვნელობის საკითხების გადაჭრას, კერძოდ, ნანომედიცინაში შესაძლებელს გახდის სხვადასხვა სახის მძიმე დაავადებების დროულ დიაგნოზირებას. შესაძლებელია ასევე განხილული მოდელის მოდიფიცირება, რასაც ნათელს მოჰყენს შემდგომი ექსპერიმენტული კვლევები.

ნაშრომში დასმული ამოცანა გადაწყვეტილია კვანტური ფიზიკის ზოგადი პრინციპების შესაბამისად, რაც ზრდის მიღებული შედეგების პრაქტიკული გამოყენების შესაძლებლობებს. მიღებული შედეგების შედეგად დაზუსტებულია განხილული ამოცანის პრაქტიკული გამოყენების შესაძლებლობები და სავარაუდო შედეგების სიზუსტე.

ლიტერატურა:

1. Khvedelidze L. On non-linear spreading of light in dielectric nanocomposite. International Scientific Conference. Vol. 1. 28 December, p 3-5. 2019. Warsaw. Poland.
2. Khvedelidze L. On the nonlinear light scattering in a dielectric nanocomposite. International Scientific Conference. Science and Innovation 2021: Development Directions and Priorities. Melbourne, Australia. August, p. 188-194. 2021.
3. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. //Физическая кинетика. (Теоретическая физика. Т. X). Изд. 2. М.: Физматлит, 2007. 536 с.
4. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. Изд. 3. СПб.: Лань, 2008. 624 с.

5. *Eidelman E.D., Vul A.Y.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. V. 19. P. 266 210.
6. *Мейлахс А.П., Эйдельман Е.Д.* // Письма ЖЭТФ. 2014. Т. 100. В. 2. С. 89
7. *Pernot G., Stoffel M., Savic I. et al.* // Nature Materials. 2010. V. 9. P. 491–495.
8. *Yu J.-K., Mitrovi S., Tham D., Varghese J., Heath J.R.* // Nat. Mater. 2010. V. 9. P. 491–495.
9. Алфёров Ж.И. Физика и техника полупроводников. (ФТП), 32, 3 (1998).
10. Днепровский В.С., Жуков Е.А., Муляров Е.А., Тиходеев С.П. ЖЭТФ, 74, 77 (2004).
11. Bohren K.H., Huffman D. R. Adsorption and scattering of light by small particles. New York Chichester. 1983.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред (М., Гостехиздат, 1957).

On some physical effects arising from laser irradiation of nanocomposite materials consisting of nanoparticles

Summary

Based on the general principles of quantum physics, some physical effects arising from laser irradiation of nanocomposite materials are discussed. The considered physical and mathematical model allows us to practically develop a method for oncological diseases, which will be of great importance both for nanomedicine and for various possible applications. Nanotechnology today opens up wide opportunities for solving many practical problems that are quite realistic in the foreseeable future.