

Открытие стоячих экситонов большого радиуса и классификация мерцающих кристаллов.

Часть 1. Общая постановка задачи о самоорганизации полых квантовых резонаторов в легированных кристаллах

Ф. И. Высикайло

*Московский радиотехнический институт РАН, Москва, Россия;
ФГБНУ «Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов»,
ул. Центральная, дом 7а, г. Троицк, 142190, Московская обл., Россия, e-mail: filvys@yandex.ru*

Показано, что в легированных кристаллах, в области внедрения в кристаллическую решётку инородного атома, самоформируются **наноразмерные** структуры (стоячие ϵ -волны или ϵ -резонаторы) двух типов с квантовыми (волновыми) профилями относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$. Исследован способ кумуляции энергии возбуждения (экситонов) в таких кумулятивно-диссипативных структурах, существенно отличающихся от диффузионных диссипативных структур Пригожина–Тьюринга–Колмогорова. Стоячие экситоны большого радиуса, открытые автором, развиваются в области внедрённых в решётку атомов примеси (в квантовых резонаторах), кумулируют в себя энергию опорного кристалла и излучают её в виде резонансных электромагнитных волн, соответствующих квантовым переходам в таких квантовых точках (КТ). Предлагается способ изготовления макроскопического твёрдого кристалла с заданной концентрацией квантовых точек и соответствующим главным числом n , описывающим степень возбуждения КТ, формирующих возбуждённый (мерцающий) кристалл (сверхрешётку) внутри опорного кристалла. При облучении легированного кристалла резонансным излучением КТ переходят в возбуждённые состояния и их электронные оболочки перекрываются, формируя возбуждённый (мерцающий) бикристалл металлического (водородного) типа в матрице опорного кристалла. Доказана возможность формирования отрицательных бикристаллов с куперовскими парами электронов при легировании кристаллов IV группы атомами V группы. Бикристаллы с мерцающими кристаллами в матрице опорного кристалла могут многократно возбуждаться поэтому являются более удобными для исследований по сравнению с газообразными блуждающими ридберговскими кристаллами.

Ключевые слова: кумулятивная квантовая механика, стабильные и метастабильные квантовые точки, квантовые линии, модель Гамова α -распада атомного ядра, поляризационные квантово-размерные эффекты, возбуждённые кристаллы в опорных кристаллах, бикристалл, связанные (стоячие) экситоны Высикайло.

УДК 530.145

ВВЕДЕНИЕ

Энергия сейчас трансформируется в электрическую и тепловую (как наиболее удобные для практического применения в производстве и быту) преимущественно с помощью тепловых, атомных и гидроэлектростанций. Станции кумуляции, аккумуляции и трансформации солнечной энергии экологически чисты, но вносят малую долю в общую выработку энергии. Трудности, препятствующие созданию экологически чистых накопителей энергии, обусловлены отсутствием технологий и детального понимания процессов кумуляции (фокусировки) и диссипации (рассеивания) электромагнитной энергии, трансформирующейся в возбуждения материальных нанометровых частиц. Системные исследования поляризующихся и заряженных конвективных кумулятивно-диссипативных фрактальных (состо-

ящих из заряженных частей или фракций) структур наномира только начинаются. И это несмотря на то что во многих лабораториях мира ведутся работы по созданию изделий на квантовых точках (КТ) и квантовых линиях (КЛ), имеющих нанометровые размеры. Понятие о КТ и их регулярных системах пересекается с такими понятиями, как экситоны и кумулятивно-диссипативные наноразмерные структуры (КДС) и их регулярные системы – кумулятивно-диссипативные кристаллы (сверхрешётки и др.). Тем не менее осознание, что нанотехнологии являются технологиями, связанными со структурными кумулятивно-диссипативными явлениями, определяемыми фокусировкой (кумуляцией) **кулоновскими** силами, потенциальными барьерами или разделением объёмного заряда [1–6], пока не занимают должного места в науке. При этом неограниченные кумулятивные процессы в кванто-

вой механике наномира ошибочно запрещаются в классической квантовой механике, требующей регулярности ψ -функций частиц **всюду**, в том числе и в полых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторах, стремящихся к их центру ψ -функции частиц с резонансной энергией. При этом собственные энергетические спектры – $E_{n-1/2}$ с ограниченно кумулирующими к центру резонатора $\psi_{n-1/2}$ – функциями в случае плоскостной симметрии резонатора сохраняются, в том числе и основной тон (полуволновой или π -резонанс). Часто наблюдения за спектрами комбинационного рассеивания связать со структурами резонаторов с плоскостной симметрией невозможно, так как во многих экспериментах **явно участвуют структуры со сферической симметрией** [7]. Решение таких парадоксов, обусловленных неограниченной кумуляцией $\psi_{n-1/2}$ в центре **полого** сферически- или цилиндрически-симметричного квантового резонатора в квантовой механике, проведено автором в [1–7], где доказано, что следует для всех симметрий **полых** квантовых резонаторов учитывать полный собственный энергетический спектр (а не только спектр полных 2π -резонансов).

В будущем КТ, экситоны и иные КДС и их регулярные системы – это огромное перспективное поле деятельности в квантовой электронике, энергетике, медицине, биологии и иной практике. Возможно применение КТ при создании из них мерцающих кристаллов или сверхрешёток не только в ювелирной промышленности, но и для мощных СВЧ транзисторов с частотами до 10^{11} Гц. Не менее важно такое направление, как использование заряженных КТ и КЛ для улучшения механических и иных характеристик **солнечных батарей и термоэлектриков** [1, 2]. Сферически-симметричные фуллерены и замкнутые нанотрубки могут из-за поляризационных сил захватывать свободные электроны с резонансной кинетической энергией E_n (до 6 шт. на фуллерен) и образовывать метастабильные отрицательно заряженные сферические КТ с энергией электронов больше нуля [1–6]. Этот квантово-размерный поляризационный эффект Высикайло первого типа с характерным размером ~ 1 нм описан автором аналитически с помощью модели (рис. 1а), восходящей к модели Гамова–де Бройля–Гельмгольца, применённой Гамовым для моделирования α -распада атомных ядер. Проведенный автором анализ возможных решений первой краевой задачи Гельмгольца [3–7] и сравнение аналитических расчётов с экспериментальными сечениями захвата полыми фуллеренами электронов с резонансными энергиями (см. [2, 8–10]) позволили автору не только сформулировать, но и верифицировать с помощью этих

экспериментов основы кумулятивной квантовой механики (ККМ) в [3–7].

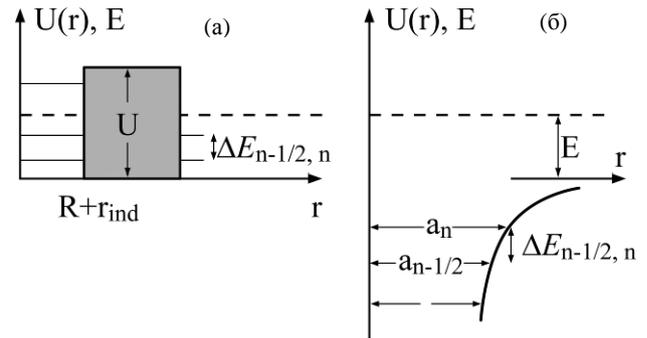


Рис. 1а. Задача Гамова–де Бройля–Гельмгольца. Схема метастабильной (квазидоткрытой) квантовой точки или линии с поляризационным зеркалом, захватывающим электрон с энергией $E > 0$ в поляризационную ловушку с характерным размером $R+r_{\text{ind}}$. Поляризационное зеркало затемнено. Модель соответствует модели Г.А. Гамова, применённой им впервые для моделирования α -распада атомных ядер.

$\Delta E_{n-1/2, n}$ – энергия расщепления Высикайло уровней с главным квантовым числом n [7].

Рис. 1б. Задача де Бройля–Бора–Гельмгольца. Схема стабильной (закрытой) квантовой точки с окружающим её бесконечным потенциальным кулоновским барьером для частиц с полной энергией меньше нуля. Для описания энергетического спектра квантовой точки применяется модель водородоподобного атома с «радиусом орбиты»: a_n и $a_{n-1/2}$ – характерные радиусы квантового резонатора с кулоновским потенциалом для квантовых частиц с главным квантовым числом n и энергиями E_n (с асимметричной ψ_n) и $E_{n-1/2}$ (с симметричной $\psi_{n-1/2}$) соответственно. $\Delta E_{n-1/2, n}$ – энергия расщепления Высикайло уровней с главным квантовым числом n [7].

В данной работе ККМ будет применена для описания спектров комбинационного рассеивания (КРС) лазерного излучения на открытых автором стоячих экситонах Высикайло (В) в легированных бором кристаллах алмаза, нахождения профиля относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$ и обобщения полученных результатов на явления в других легированных кристаллах (части 1 и 2). Полученные результаты позволяют надеяться на создание: 1) бикристаллов на базе опорных кристаллов, легированных специальными примесями, формирующими мерцающие кристаллические решётки с **нанометровыми расстояниями между узлами** и 2) терагерцовых лазеров при когерентном поведении элементов мерцающего кристалла.

Как доказано в [3–7], плотность вероятности нахождения частицы в слое dr квантового полового резонатора при любом типе его симметрии определяется: $W_n(r)dr = \cos^2(k_{n-1/2}r)dr$ или $\sin^2(k_n r)dr$. Нерегулярные в центре резонатора \cos -решения регуляризируются (рис. 2) соответствующим типом симметрии нормировочным геометрическим коэффициентом, равным $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$, при $k \neq 0$ (при плоскостной симметрии $k = 0$, $\chi = 1$; при цилиндрической $k = 0,5$ и при сферической симметрии $k = 1$) [3–7]. При этом нет необходимости

для полых резонаторов со сферической и цилиндрической симметрией выбрасывать решения с \cos -волнами, как это делается в [11]. Стратификация вероятности нахождения частицы в объёме квантового резонатора аналогично определяется энергией частицы, то есть квадратом квантовых чисел $((n-1/2)^2$ для \cos -волн и n^2 для \sin -волн) для любого типа симметрии **полого** резонатора (рис. 2) [3–7]. ККМ позволила реабилитировать и модифицировать модели Френкеля–Ванье–Мотта–де Бройля–Бора–Гельмгольца и применить авторскую модель стоячих экситонов Высикайло для аналитического описания с точностью до третьего знака КРС и вычисления профиля относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$ на наноразмерах от внедрённого в решётку алмаза атома бора [7]. Без привлечения ККМ 2/3 (больше половины) линий КРС в легированных бором алмазах невозможно идентифицировать в рамках квантовой механики, требующей ограниченности собственных ψ -функций.

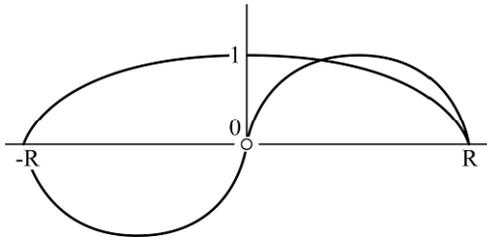


Рис. 2. Зависимость от расстояния до центра полого квантового резонатора регуляризованных \sin - ($\psi_{1-1/2}$) и \cos -решений ($\psi_{1-1/2}$) при $n = 1$. Регуляризация производится соответствующим типом симметрии геометрическим коэффициентом, равным $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$, при $k \neq 0$ (при $k = 0$, $\chi = 1$) [3–7].

В данной работе предложен новый **физико-химический** способ формирования квантовых точек – стоячих экситонов Высикайло с характерными нанометровыми размерами ($r_n = n^2 \varepsilon(r) a_0$), близкими к размерам экситонов Ванье–Мотта (ВМ). Размеры бегущих экситонов Ванье–Мотта определяются согласно теории Бора для атома водорода: $r_a = \frac{m_0}{m_r} n^2 \varepsilon_k a_0$ (см. подроб-

нее п. ЭКСИТОНЫ). В отличие от модели экситонов Ванье–Мотта–Бора–Гельмгольца–Шредингера, в которой относительная диэлектрическая проницаемость считается постоянной по кристаллу $\varepsilon_c = \text{const}$, в авторской модели стоячих экситонов $\varepsilon = \varepsilon(r)$, то есть является функцией от расстояния до центра экситона (легирующего центра). Именно профиль $\varepsilon(r) > \varepsilon_c = \text{const}$ в области легирующей примеси обеспечивает кумуляцию электромагнитных волн в эту область. Это **повышает вероятность возбуждения экситона в области легирующего центра**. Зна-

чит, локальное увеличение $\varepsilon(r) > \varepsilon_c$ обеспечивает большую рождаемость экситонов в области легирующего центра при облучении всего легированного кристалла. Отличие относительной диэлектрической проницаемости невозмущённого кристалла с $\varepsilon_c = \text{const}$ от $\varepsilon(r)$ в нанометровой области легирующего центра обеспечивает и продолжительную локализацию в области повышенного возбуждения экситонов, что и делает экситон стоячим. Связана такая локализация с тем, что собственная энергия $E_n \sim 1/(\varepsilon(r)n)^2$ стоячего экситона зависит от $\varepsilon(r)$ и из-за этой зависимости не совпадает с собственными энергиями экситонов в невозмущённом кристалле $E_n \sim 1/(\varepsilon_k n)^2$. Отсутствие энергетического резонанса и приводит к локализации стоячего экситона в области легирующего центра.

В первой части данной работы рассмотрим общую постановку задачи о самоорганизации и формировании в мерцающие кристаллы стоячих экситонов большого радиуса с размерами, близкими к размерам экситонов Ванье–Мотта (ВМ), в легированных кристаллах. Эти квантовые резонаторы самоформируются профилем относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$ в области внедрения в кристаллическую решётку алмаза атомов легирующей примеси. Характерные профили $\varepsilon(r)$, то есть характерные размеры стоячих ε -волн в легированных бором алмазах, автором определены на основании экспериментальных КРС и разработанной им модели стоячих экситонов Высикайло.

Во второй части приведём сравнения конкретных экспериментальных КРС, полученных в многочисленных экспериментах с аналитическими расчётами энергетических резонансных спектров по модифицированной автором модели Ванье–Мотта–де Бройля–Бора–Гельмгольца–Шредингера (первой краевой неоднородной задачи Гельмгольца с профилем кулоновского потенциала $\sim 1/r$) для **полого** резонатора.

ЭКСИТОНЫ

Представление об экситоне введено в 1931 году Я.И. Френкелем для объяснения отсутствия фотопроводимости некоторых кристаллов: при поглощении света поглощённая энергия расходуется не на создание носителей заряда, а на образование экситона – локализованного энергетического возбуждения, которое распространяется по невозмущённому кристаллу в виде уединённой волны энергии. Этим Френкель теоретически обосновал возможность перехода одного из атомов (или одной из молекул) кристалла в возбуждённое состояние и последовательную передачу этого возбуждения от одного атома в кристалле к другому, то есть перенос квантового

возбуждения на макроскопические расстояния. **Так естественно возникли задачи о: 1) кумуляции энергии электромагнитных волн в энергию возбуждения – экситона, 2) локализации и самофокусировке экситонов, 3) трансформации их энергии, переносе и накоплении этой энергии в аккумуляторе, 4) терагерцовых лазерах на мерцающих кристаллах и т.д.** Экситон (от лат. *excito* — возбуждаю) – квазичастица, соответствующая электронному возбуждению в кристалле диэлектрика или полупроводника, мигрирующему по кристаллу в виде локализованной (сфокусированной) кулоновским потенциалом (рис. 1) волны энергии, но не связанному с переносом электрического заряда и массы (в виде частиц). Однако известно, что перенос энергии без массового носителя возможен только в виде электромагнитной волны. Решение этого парадокса в теории экситонов без привлечения виртуальных электромагнитных волн возможно при: 1) перемещении в 3D-пространстве возбужденного электрона на его место одновременно из этой области приходит невозбуждённый электрон с меньшей кинетической энергией и 2) резонансом обмена энергией возбуждения между различными электронами, то есть возбуждение передается от одного электрона к другому, который и формирует с соответствующей дыркой новый экситон. При этом все обменивающиеся пространственными местами уровни возбуждения (соответствующие им энергии электронов) должны находиться в квантовом резонансе, то есть полная энергия невозбуждённого электрона E_1 с соответствующей кинетической энергией и замещающая его энергия E_n возбужденного электрона обязательно должны принадлежать общему собственному энергетическому спектру ($E_n \sim 1/(\epsilon_k n)^2$). Если относительная диэлектрическая проницаемость кристалла $\epsilon(r)$ меняется от расстояния до внедрённого в кристаллическую решётку атома легирующей примеси, то резонансного обмена энергиями электронов происходить не может. Это локализует экситон, родившийся или сфокусированный кулоновским потенциалом (рис. 1), в области легирующей примеси, где $\epsilon(r)$ имеет другие значения, чем в удалённых от атома примеси местах. Понятие экситон близко к понятию уединенной волны, или солитона. При поглощении энергии формируются разнесённые в пространстве электроны и дырки. Они на любых расстояниях испытывают кулоновское взаимодействие. Последнее приводит к тому, что электроны и дырки следует рассматривать в 3D-пространстве как связанную электронно-дырочную пару – экситон. В этом случае экситон – это квазичастица, возникающая при бестоковых возбуждениях в полупроводни-

ках. В зависимости от характера связи в литературе [12, 13] отмечают два типа экситонов, локализуемых в потенциальных ямах (рис. 1б). Первый тип – **свободные** экситоны большого радиуса (экситоны ВМ), характерные размеры которых достигают десятков и сотен межатомных расстояний. Второй тип – связанные экситоны малого радиуса (экситоны Френкеля), их размеры не превышают в кристалле межатомного расстояния [12, 13].

Свободные экситоны Ванье–Мотта – экситоны большого радиуса – исследованы в 1937–1938 годах Дж. Ванье (G. Wannier) и Н. Моттом (N. Mott). Такой экситон перемещается по кристаллу в виде связанных состояний электрона и дырки, которые могут находиться на различных узлах кристаллической решётки (перемещающийся **экситон большого радиуса**). Обычно экситон Френкеля (Ф) представляют [12] как предельный случай, когда связанные электрон и дырка сидят на одном и том же узле (экситон малого радиуса). Экситон ВМ чаще наблюдается в полупроводниках и диэлектриках с $\epsilon_k > 1$.

Экситон Ванье–Мотта–де Бройля–Бора представляет собой водородоподобное связанное состояние электрона и дырки. Модель ВМ учитывает, что эффективные массы электрона m_e и дырки m_h отличаются от массы свободного электрона m_0 и что энергия кулоновского взаимодействия электрона и дырки в кристалле ослаблена в ϵ_k^2 раз наличием **постоянной по кристаллу относительной диэлектрической проницаемости** среды ϵ_k . Размеры радиуса взаимодействия возрастают в ϵ_k раз. Полная энергия электрона в экситоне ВМ (рис. 1б) выражается, как и для атома водорода [12]):

$$E_n = -\frac{m_r e^4}{8(\epsilon_k \epsilon_0 h)^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (1)$$

где $m_r = m_e m_h / (m_e + m_h)$ – приведенная масса системы (электрона и дырки); ϵ_k – постоянная диэлектрическая проницаемость кристалла; n – главное квантовое число экситона. При $n = 1$ получаем энергию связи для основного состояния экситона ВМ. Для состояния с главным квантовым числом n , в соответствии с атомной моделью Бора, определяется характерный радиус экситона $r_a(n)$ [13] (рис. 1б):

$$r_a = \frac{m_0}{m_r} n^2 \epsilon a_0. \quad (2)$$

Полная энергия свободного экситона ВМ состоит из суммы его кинетической энергии $\frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_h)}$, определяемой движением центра масс, и потенциальной энергии E_n [12, 13]:

$$E(k) = +E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_n)} = -\frac{m_r e^4}{8(\epsilon_k \epsilon_0 \hbar)^2} \cdot \frac{1}{n^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_e + m_n)}, \quad (3)$$

где k – волновой вектор экситона как целой частицы; a_0 – радиус невозбуждённого атома Бора.

Каждая из зависимостей $E(k)$ с заданным n образует экситонную зону. Формулы (1)–(3) следует рассматривать для бегущих экситонов как **оценочные**, так как они не учитывают таких факторов, как, например, влияние сложной зонной структуры кристалла, взаимодействие электронов и дырок с фононами и т.д. Для полупроводников типа Ge и Si и групп $A^{III}B^V$, $A^{II}B^V$ типичны значения $m_r = 0,1 \cdot m_0$, $\epsilon_k \sim 10$, что приводит к значениям $E_n \sim 10^{-2}$ эВ, $a_r \sim 10^{-8}$ м. Энергии связи экситона в полупроводниках много меньше характерных атомных энергий, а их радиусы много больше межатомных расстояний в кристалле. Большие значения a_r означают, что экситон ВМ по существу есть макроскопическое энергетическое образование в кристалле и глобальная структура кристалла лишь определяет параметры ϵ_k и m_r . Поэтому экситон ВМ в кристалле рассматривают как квазиатом, движущийся в вакууме с постоянной относительной диэлектрической проницаемостью $\epsilon_k = \text{const} > 1$ [13]. Искажение структуры кристалла присутствием экситона или даже большого числа экситонов в модели ВМ считается пренебрежимо мало [12]. Экспериментально водородоподобная структура энергетического спектра экситона ВМ $E_n \sim E_1/n^2$ впервые наблюдалась Е.Ф. Гроссом в 1952 году в кристаллах Cu_2O при температуре жидкого азота, когда удалось обнаружить девять линий водородоподобной экситонной серии (исключая уровень с главным квантовым числом $n = 1$) [13].

Связанные экситоны Френкеля – это локализованный на дефекте экситон малого радиуса, являющийся связанным. Связанные экситоны образуются на нейтральных центрах, хотя возможно их образование и на заряженных дефектах. Примесный атом искажает потенциальную энергию электрона в решетке, образуя при этом глубокую потенциальную яму, считается не превышающую в размере межатомное расстояние [13] (рис. 1б). Энергетический уровень основного состояния экситона Φ , считается [13], находится ниже аналогичного уровня экситона ВМ, то есть энергия диссоциации E_{ex} для связанного экситона Φ больше, чем для свободного экситона ВМ. Для некоторых материалов энергия диссоциации может составлять доли электрон-вольта. Поэтому экситон Φ более стабилен при комнатной температуре по сравнению с экситоном большого радиуса. Спектр излучательной рекомбинации связанных экситонов более узкий,

чем спектр свободных экситонов, так как связанный экситон локализован в пространстве и его кинетическая энергия невелика по сравнению с таковой у свободного экситона большого радиуса [13].

Автор считает, что экситоны типа Френкеля и Ванье-Мотта могут быть в **легированных кристаллах** как связанными, так и свободными и радиусы их могут быть разными из-за локального изменения $\epsilon(r)$ в области внедрённого (в кристаллическую решётку опорного кристалла) легирующего атома (см. часть 2). Возможна сложная самоконденсация экситонов в области внедрения инородного атома в решетку опорного кристалла, где происходят изменения характерных размеров межатомных расстояний в решётке опорного кристалла, что и отражается на модуляции $\epsilon(r)$.

СТОЯЧИЕ ϵ -ВОЛНЫ В ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ И КОНДЕНСИРУЮЩИЕСЯ В НИХ КУМУЛЯТИВНО-ДИССИПАТИВНЫЕ СТРУКТУРЫ – СТОЯЧИЕ ЭКСИТОНЫ ВЫСИКАЙЛО

Далее описан новый, открытый автором способ самофокусировки энергии электромагнитных волн в легированных кристаллах в **стоячих** ϵ -волнах с переменной относительной диэлектрической проницаемостью $\epsilon(r)$ в области внедрения атома примеси в решётку легированных кристаллов. Если удастся внедрять атомы легирующей примеси с формированием периодических наноструктур, то, возможно, тем самым автором **открыт новый физико-химический способ выращивания фотонных кристаллов** с периодом решётки $\sim 10 \div 20$ нм.

Из общих соображений, в рамках классической квантовой механики (волновой механики) понятно, что при легировании (внедрении инородного атома примеси в идеальную кристаллическую решётку и образовании благодаря ему химических связей с окружающими атомами решётки) любого кристалла с диэлектрической проницаемостью ϵ из этой области расходится волна возмущения (изменения, например, ϵ) локальных свойств кристаллической решётки (ϵ_k). При этом сам кристалл как часть целого будет (например, согласно принципу Ле Шателье-Брауна) стремиться уменьшить это возмущение обратной сходящейся волной (условие Зоммерфельда). В результате протяжённого взаимодействия в кристалле сходящейся к внедрённому атому или молекуле волны (с ψ^* -функцией) и волны расходящейся (диссипирующей с ψ -функцией) формируется стоячая волна (потенциальная **стратифицированная** кумулятивно-диссипативная квантовая твёрдотельная система

с $\psi^* \psi = |\psi|^2$, и, следовательно, происходит волновое изменение относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$ легированного кристалла в области внедрения в решётку инородного атома. Так формируются кумулятивно-диссипативные волновые (квантовые) стационарные потенциальные профилированные поляризационные $\epsilon(r)$ -структуры Высикайло в легированных кристаллах. Стоячие ϵ -волны, возникающие в кристалле при допировании атомами или молекулами примеси, согласно гипотезе де Бройля, аналогичны волнам на воде при бросании в нее камня (рис. 3). Только в кристалле при внедрении легирующей примеси в решётку квантовые волны застывают (рис. 3б). Их описание следует проводить с учётом изменяющегося в пространстве $\epsilon(r)$. При $\epsilon \gg 1$ размеры квантовых структур в легированных кристаллах в $\sim \epsilon(r)n^2$ раз превосходят размеры невозбуждённых атомов $a_r \sim a_0 = 0,529 \text{ \AA}$. Размеры стоячих ϵ -волн Высикайло близки к размерам свободных экситонов ВМ. Такое грубое представление требует дальнейшей детализации, но для аналитических расчётов резонансных стоячих экситонов В, локализующихся на возмущениях $\epsilon(r)$, обусловленных внедрением инородных атомов в кристаллическую решётку опорного кристалла, является достаточным для идентификации линий КРС (см. часть 2).

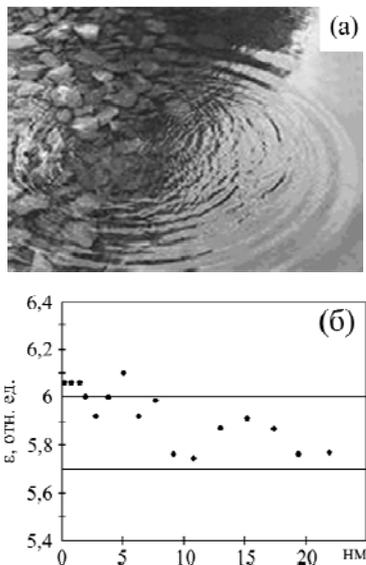


Рис. 3. Волны на воде (а), согласно гипотезе де Бройля, аналогичны волнам $\epsilon(r)$ в легированном алмазе (б) в области внедрения в решётку атома бора (подробнее и ссылки см. часть 2, табл. 1 [7]).

Профилированные внедрением инородных атомов в кристаллическую решётку потенциальные наноструктуры с $\epsilon(r)$, открытые автором, выступают топологическими центрами кумуляции энергии (возбуждения в кристалле) – экситонов Φ и свободных экситонов ВМ. После захвата экситона ВМ или экситонов Φ в стоячей

ϵ -волне В профилем $\epsilon(r)$ формируется стоячий экситон В (локализованное энергетическое возмущение легированного кристалла с размерами $\sim a_0 \epsilon(r) n^2$). Автор по экспериментально измеренным КРС на стоячих экситонах В определил формирующие его профили $\epsilon(r)$ (рис. 3б) для алмаза, легированного бором. Колебательные профили $\epsilon(r)$ (рис. 3б) возникают в области примесных центров в легированных кристаллах и затухают от расстояния до атома легирующей примеси. На базе анализа обширных экспериментов автором установлено, что примесные атомы, внедряясь в кристаллическую решётку, формируют протяжённый ($\sim 20 \text{ нм}$) сложный колебательный профиль относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$ в опорном кристалле. Этот протяжённый профиль с **повышенными значениями** $\epsilon(r)$ в центре КТ (рис. 3б и табл. 1 и 2 в части 2) с больших объёмов кумулирует любую энергию электромагнитного излучения к центру такой КТ и делает рождающиеся в этой области экситоны связанными в области внедрения атома примеси. Происходит этот захват из-за больших значений $\epsilon(r)$ в стоячей ϵ -волне (рис. 3б), чем в основном кристалле с $\epsilon_k = \text{const}$. По этой причине такие КТ кумулируют энергию электромагнитных волн, формируют стоячие экситоны, которые при взаимодействии с падающим на кристалл излучением наблюдаются в КРС. Так, в области внедрения примеси в решётку возникают, усиливаются и исчезают через резонансное излучение электромагнитных волн **стоячие экситоны Высикайло** с характерными размерами, близкими к размерам **свободных экситонов Ванье-Мотта**.

Кумулятивно-диссипативные структуры (КДС) – КТ с профилированным значением $\epsilon(r) > \epsilon_k$ и с локализованными экситонами и другими возмущениями являются частным случаем КДС Высикайло [14]. Они отличаются по свойствам и своей архитектуре от диффузионных диссипативных структур Тьюринга [15, 16]. Связано это с тем, что в КДС Высикайло присутствуют не только процессы диссипации (диффузии), но и конвективные процессы кумуляции. В потенциальных зародышах – стоячих $\epsilon(r)$ -волнах, открытых автором, при облучении легированного кристалла электромагнитным излучением формируются и растут КДС (по мере самофокусировки – локализации свободных экситонов Френкеля или Ванье-Мотта в стоячую $\epsilon(r)$ -волну – растёт главное квантовое число n стоячего экситона Высикайло).

МЕРЦАЮЩИЕ КРИСТАЛЛЫ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ТИПА

При перекрытии электронных оболочек стоячих КДС (КТ или стоячих экситонов Высикайло)

с $n > 1$ в легированных кристаллах формируются стоячие **наномолекулы** и далее из молекул – мерцающие кумулятивно-диссипативные кристаллы (КДК) или сверхрешётки металлического (водородного) типа с характерными размерами сверхрешётки ~ 10 нм ($\approx 2\varepsilon(r)a_0n^2$) и более. Для образования мерцающих кристаллов в кристаллах, легированных примесями, необходимо электромагнитными волнами возбуждать в опорных легированных кристаллах стоячие экситоны, которые и будут формировать КДК. Представляют интерес экспериментальные исследования электромагнитных, лазерных и иных свойств **стоячих** мерцающих водородоподобных кристаллов металлического типа в легированных кристаллах в зависимости от интенсивности облучения и концентрации легирующей примеси. Экспериментальные и аналитические исследования таких явлений мерцающих кристаллов в опорных кристаллах находятся в зачаточном состоянии. Однако можно утверждать, что механические свойства таких бикристаллов могут определяться механическими свойствами опорных кристаллов, а электромагнитные и лазерные свойства – уже свойствами мерцающих макрокристаллов с характерными размерами решёток **нанометрового размера**, определяемого интенсивностью возбуждающего излучения и процессами релаксации (диссипации и когерентного (вынужденного) и свободного излучения электромагнитных волн).

КОЛЛАПС ψ -ФУНКЦИИ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ КУПЕРОВСКОЙ ПАРЫ В АТОМАХ V ГРУППЫ, ЛЕГИРУЮЩИХ АЛМАЗ

Легирование алмаза проводится не только атомами донорной примеси (В и другими элементами из III группы Периодической системы Менделеева), но и акцепторной примесью (N и другими элементами из V группы Периодической системы Менделеева). Оказывается, не представляет большого труда рассчитать спектры отрицательных экситонов большого радиуса, в которых формируются куперовские пары электронов (рис. 4). Отрицательный ион формируется при коллапсе ψ -функции свободного электрона в области атома азота, легирующего алмаз. В этом случае спектры такого отрицательного экситона с захваченной куперовской парой электронов одной положительно заряженной дыркой будут соответствовать спектрам атома водорода. Но, так как эффективный кулоновский потенциал, действующий на каждый из электронов в области отражающего «зеркала», $U(r) = -1/r + 1/(2r) = -1/(2r)$, согласно квантово-механической модели атома водорода, частота собственных уровней

в таком экситоне будет в 4 раза гуще, чем в атоме водорода. При этом и для отрицательных экситонов большого радиуса следует учитывать возможную модификацию эффективного значения относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$ в области внедрения акцепторной примеси (рис. 5). Захват свободных электронов и формирование отрицательных экситонов при легировании акцепторными примесями могут привести к улучшению диэлектрических свойств алмаза, кремния или германия, в которых не удается избавиться от донорной примеси (В и другими элементами из III группы Периодической системы Менделеева).

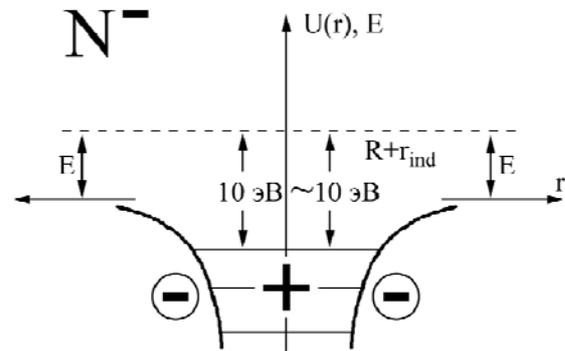


Рис. 4. Стоячий отрицательно заряженный экситон с куперовской парой.

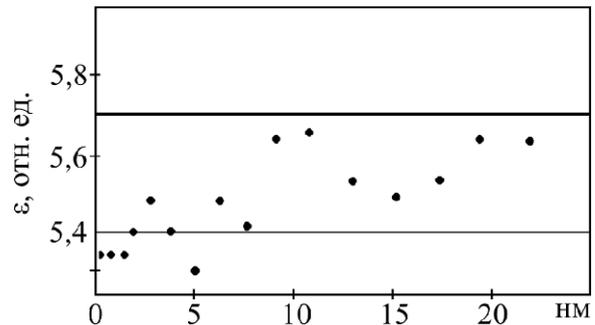


Рис. 5. Возможный профиль относительной диэлектрической проницаемости в алмазе, легированном азотом и иными атомами из V группы элементов.

В соответствии с данными, приведенными в таблице, связь C-C имеет длину порядка $1,53 \text{ \AA}$, что соответствует относительной диэлектрической проницаемости алмаза: $\varepsilon \approx 5,7$. Длина связи В-С равна $1,57 \text{ \AA}$, что, согласно данной работе и спектрам комбинационного рассеивания (см. подробнее часть 2), соответствует в области внедрения атома из III группы элементов $\varepsilon \approx 6,06$. Так как длина связи N-C порядка $1,47 \text{ \AA}$, то можно ожидать в области внедрения атома азота $\varepsilon \approx 5,1 \div 5,2$, при этом нижний уровень стоячего нейтрального экситона будет порядка $0,5 \div 0,54 \text{ эВ}$. Коллапс ψ -функции свободных электронов при формировании куперовской пары в атомах V группы, легирующих алмаз, может повышать его диэлектрические свойства, а при определённых условиях и соответствующих

Химические связи, их энергия и длина [17]

Связь	Энергия связи, кДж/моль	Длина связи, Å	Связь	Энергия связи, кДж/моль	Длина связи, Å
C-C	342,76	1,53	C-N	292,6	1,47
C=C	661,46	1,33	C=N	749,26	1,22
C≡C	807,22	1,21	C≡N	877,12	1,15

концентрациях такой примеси может приводить к его сверхпроводимости.

КЛАССИФИКАЦИЯ СТОЯЧИХ ЭКСИТОНОВ ВЫСИКАЙЛО И ИХ МЕРЦАЮЩИХ КРИСТАЛЛОВ

Можно классифицировать стоячие экситоны Высикайло по двум типам, соответствующим типу донорной или акцепторной примеси. Как известно, при слабом легировании кристаллов происходит существенное изменение их электромагнитных свойств (при сохранении механических свойств опорного кристалла). При активации мерцающих кристаллов в бикристаллах возможно существенное изменение их электромагнитных свойств уже при ничтожных концентрациях примеси. При одновременном легировании донорной и акцепторной примесями возможно не только улучшение свойств опорного кристалла, но и формирование в нем двух мерцающих кристаллов в одном опорном кристалле. Свойства такого трикристалла (например, из В, N и C) могут существенно меняться от интенсивности и длины волны, накачивающей стоячие экситоны Высикайло.

Отмечу, что в установках для синтеза кристаллов алмаза трудно избавиться от легирования алмаза бором. Это приводит к известным напряжениям в легированных кристаллах, обусловленных увеличением относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$ в области внедрения бора. Оказывается, одновременное принудительное легирование, например азотом и бором, приводит к компенсационным явлениям, уменьшающим модификацию относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$, вызываемой бором, так как при легировании атомами V группы происходит уменьшение относительной диэлектрической проницаемости алмаза (см. рис. 3б и рис. 5).

Таким образом, нами проведена классификация стоячих экситонов большого радиуса и соответствующих им мерцающих кристаллов в зависимости от валентности атомов, легирующих кристаллы IV группы элементов, и рассчитаны возможные спектры нейтральных и отрицательных экситонов большого радиуса, в которых формируются куперовские пары электронов. Для дальнейшей детализации явлений требуются подробные эксперименты.

ВЫВОДЫ

Ранее считалось [12, 13], что атом примеси возмущает кристалл, то есть модифицирует локальные значения $\epsilon(r)$, на уровне размеров между узлами (связанный экситон Френкеля), и при этом в самом кристалле $\epsilon(r) = \epsilon_k \equiv \text{const}$ (модель Ванье-Мотта (1)–(3)). Это действительно так при учёте только значительных изменений, но даже слабые изменения $\epsilon(r)$ могут существенно менять картину функционирования кумулятивно-диссипативных структур, формирующихся на слабой модуляции $\epsilon(r)$. Это асимптотические парадоксы, решение которых осуществляется с **учётом малых возмущений**. На базе анализа модели (Ванье-Мотта) свободных экситонов большого радиуса автором открыты и классифицированы в легированных кристаллах, в области внедрения в кристаллическую решётку инородного атома, самоформирующиеся наноразмерные структуры (стоячие ϵ -волны или ϵ -резонаторы) с квантовыми (волновыми) профилями относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$. Тем самым автор предполагает, что существуют связанные (сверхтяжёлые) экситоны Высикайло и они обусловлены квантовыми (волновыми профилями $\epsilon(r)$) эффектами, вызванными внедрением инородного атома в кристаллическую решётку легируемого кристалла, и происходит это в полном соответствии с гипотезой де Бройля (рис. 3, 6, 7). Из аналогии с моделью свободных экситонов Ванье-Мотта (рис. 3, 5) следует, что внедрение в кристалл инородного атома возмущает последний (его относительную диэлектрическую проницаемость) на характерных размерах $\approx a_0 \cdot n^2 \cdot \epsilon(r)$ (до 20 нм), и эти возмущения можно фиксировать с помощью КРС (см. рис. 3б и часть 2). Стоячие гиператомы с размерами в нанометры могут формировать регулярные системы – мерцающие кристаллы.

Профилированием концентрации легирующей примеси (изменением $\epsilon(r)$) можно управлять кумулятивными и диссипативными свойствами мерцающих кристаллов Высикайло, и тем осуществлять структурный перенос, то есть кумуляцию или диссипацию энергии в опорном 3D-кристалле.

Если удастся внедрять атомы легирующей примеси одновременно с формированием периодических наноструктур, то, возможно, тем са-

мым мы сможем *выращивать фотонные кристаллы по новому физико-химическому способу.*

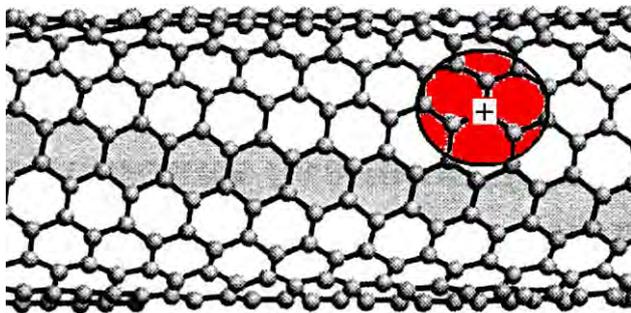


Рис. 6. Легированная углеродная нанотрубка со стоячим нанометровым экситоном (+).

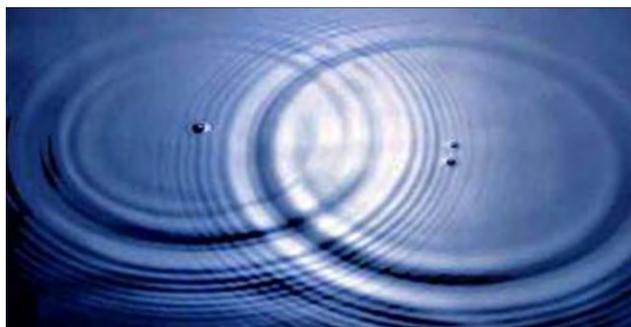


Рис. 7. Распространение волн на поверхности воды, и не только. <http://zaryad.com/forum/>

Исследован способ кумуляции электромагнитной энергии в кумулятивно-диссипативных структурах (КДС) из-за бóльших значений ϵ в центре структуры, чем на её периферии. Такие КДС существенно отличаются от диффузионных диссипативных структур Пригожина–Тьюринга–Колмогорова [15, 16]. В части 2 на базе модели (1)–(3) будет сформулирована аналитическая модель стоячих экситонов Высикайло, которая позволит идентифицировать все уровни стоячего экситона V и по экспериментально измеренным КРС определить профили относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$ в нанометровой области допированного в кристаллическую решётку атома примеси (рис. 6). Такие профилированные внедрением инородного атома в идеальную кристаллическую решётку области кумулируют электромагнитные волны, аналогично происходит самофокусировка лазерного излучения в воздухе. В результате такой кумуляции электромагнитной энергии формируются, развиваются и, излучая электромагнитные волны, погибают кумулятивно-диссипативные структуры и их регулярные системы – кристаллы (кумулирующие и диссипирующие энергию) в легированных опорных кристаллах с профилями относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$. Такие синергетические многофазные или мультифазные твердотельные системы с мерцающими (стоячи-

ми экситонными) кристаллическими подсистемами могут оказаться весьма перспективными в терагерцовых лазерах, при структурном переносе и утилизации электромагнитной и тепловой энергии в электрическую и при разработке управляющих и иных электронных **наноразмерных** устройств.

Особый интерес представляет исследование легирования графена атомами бора. В этом случае возможно формирование плоскоцилиндрических квазиатомов водорода – стоячих экситонов (рис. 6) и их КДК (рис. 7).

ЛИТЕРАТУРА

1. Vysikaylo Ph.I. Physical Fundamentals of Hardening of Materials by Space Charge Layers. *Sur Eng Appl Electrochem.* 2010, **46**(4), 291–298.
2. Blank V., Vysikaylo Ph. et al. C_{60} -doping of Nanostructured Bi-Sb-Te Thermoelectrics. *Phys Status Solidi A.* 2011, **208**, 105–113.
3. Vysikaylo Ph.I. Cumulation of de Broglie Waves of Electrons, Endoions and Endoelectrons of Fullerenes, and Resonances in the Propeties of Nanocomposite Materials with Spatial Charge Layers. *Sur Eng Appl Electrochem.* 2010, **46**(6), 547–557.
4. Vysikaylo Ph.I. Cumulative Quantum Mechanics (CQM). Part I. Prerequisites and Fundamentals of CQM. *Surf Eng Appl Electrochem.* 2012, **48**(4), 293–305.
5. Vysikaylo Ph.I. Cumulative Quantum Mechanics (CQM). Part II. Application of Cumulative Quantum Mechanics in Describing the Vysikaylo Polarization Quantum Size Effects. *Sur Eng Appl Electrochem.* 2012, **48**(5), 395–411.
6. Высикайло Ф.И. Поляризация аллотропных полых форм углерода и её применение в конструировании наноконпозитов. *Нанотехника.* 2011, **1**(25), 19–36.
7. Высикайло Ф.И. Самоорганизующиеся кумулятивно-диссипативные наноструктуры в легированных кристаллах. Парадоксы в квантовой механике и их решение на базе кумулятивной квантовой механики. *Инженерная физика.* 2013, (3), 15–48.
8. Туктаров Р.Ф., Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С., Лебедев Ю.А., Мазунов В.А. Плазменные колебания в молекулах фуллеренов при электронном захвате. *Письма в ЖЭТФ.* 2005, **81**(4), 207–211.
9. Jaffke T., Illenbergen E., Lezius M., Matejcik S., Smith D. and Mark T.D. Formatin of C_{60} and C_{70} by Free Electron Capture. Activation Energy and Effect of the Internal Energy on Lifetime. *Chem Phys Lett.* 1994, **226**, 213–218.
10. Huang J., Carman H.S. and Compton R.N. Low-Energy Electron Attachment to C_{60} . *J Phys Chem.* 1995, **99**, 1719–1726.
11. Дирак П.А.М. *Принципы квантовой механики.* М.: Наука, 1979. 480 с.
12. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Теоретическая физика: Учеб. пособие: Для вузов. Т.9 Статисти-*

- ческая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. 4-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 496 с.
13. Гуртов В.А., Осауленко Р.Н. *Физика твердого тела для инженеров. Учеб. пособие.* М.: Техносфера, 2007. 300 с. <http://dssp.petrsu.ru/p/tutorial/ftt/giv.htm>.
 14. Высикайло Ф.И. *Архитектура кумуляции в диссипативных структурах.* М.: Издательский дом Palmarium Academic Publishing, 2013. 352 с.
 15. Turing A.M. The Chemical Basis of the Morphogenesis. *Proc. Roy. Soc. B.* 1952, **273**, 37–71.
 16. Пригожин И., Стенгерс И. *Время, хаос, квант. К решению парадокса времени.* М.: Едиториал УРСС, 2003. 240 с.
 17. Миронова Г.А. *Конденсированное состояние вещества: от структурных единиц до живой материи.* Т. 1. М.: Физический факультет МГУ, 2004. 532 с.

Поступила 18.01.13

После доработки 15.05.13

Summary

It is shown that in doped crystals, in the area of introduction of an alien atom into the crystal lattice, there is self-formation of nanoscale structures (standing ε -waves or ε -resonators) of two types with quantum (wave) profiles of a relative permittivity – $\varepsilon(r)$. A way of cumulation of excitation energy (excitons) in the cumulation-dissipa-

tion structures is investigated, which is essentially different from the diffusion dissipative structures of Prigogine-Turing-Kolmogorov. Standing large-radius excitons, discovered by the author of the present article, are developed in spurring the lattice of impurity atoms (in quantum resonators); they cumulate the energy of the reference crystal and emit it as resonant electromagnetic waves corresponding to quantum transitions in quantum dots. A method of manufacturing a macroscopic solid crystal with a given concentration of quantum dots and the corresponding principal number n is proposed, which describes the degree of excitation of quantum dots forming excited (flickering) crystal (superlattice) in the reference crystal. During irradiation of the doped crystal by resonance emission, quantum dots jump into an excited state and their electron shells overlap, forming excited (flickering) bicrystal of a metal (hydrogen) type in the matrix of the reference crystal. A possibility of the formation of negative bicrystals with Cooper pairs of electrons in IV Group crystals doped with Group V atoms is proved. Bicrystals, with flickering crystals in the matrix of the reference crystal, can be re-excited many times, which makes it easier to study them than gaseous wandering Rydberg crystals.

Keywords: cumulative quantum mechanics, stable and metastable quantum dots, quantum line, Gamow's model of the atomic nucleus α -decay, quantum-size polarization effects, excited crystals in reference crystals, bicrystals, bound (standing) Vysikaylo excitons.