

Открытие стоячих экситонов большого радиуса и аналитическое описание спектров их комбинационного рассеивания. Часть 2. Применение кумулятивной квантовой механики для описания самоорганизующихся кумулятивно-диссипативных мерцающих водородоподобных кристаллов металлического типа, формируемых стоячими экситонами большого радиуса в легированных кристаллах диэлектриков IV группы элементов

Ф. И. Высикайло

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

По экспериментальным спектрам комбинационного рассеивания (КРС) открыты стоячие экситоны Высикайло в области внедрения в кристаллическую решётку инородного атома и предложен способ определения профилей $\varepsilon(r)$ в волновых ε -структурах с шагом $\Delta r \approx 0,529\varepsilon(r)(n-1/4)/Z$, где Z – заряд, локализованный в наноструктуре; n – главное квантовое число, формирующейся на структуре квантовой точки (КТ). На основе кумулятивной квантовой механики (ККМ) в легированных кристаллах описывается: 1) расщепление уровня с главным квантовым числом n на два (с энергией расщепления $\Delta E_{n \rightarrow 1/2, n} \sim n^{-1/4}$ в случае потенциального барьера и с $\Delta E_{n \rightarrow 1/2, n} = 13,56(((\varepsilon_{n-1/2}(r)(n-1/2))^2 - (\varepsilon_n(r)n)^2)$ эВ в случае потенциальной ямы с профилированным $\varepsilon(r)$); 2) известные в литературе КРС полых водородоподобных КТ, формирующих мерцающие или возбуждённые микро- или нанокристаллы, в любых опорных кристаллах, легированных примесями, замещающими атомы в кристаллической решётке. При облучении легированного кристалла резонансным излучением КТ переходят в возбуждённые состояния и их электронные оболочки перекрываются, формируя возбуждённый (мерцающий) кристалл металлического (водородного) типа в матрице опорного кристалла. Предлагается способ изготовления макроскопического твёрдого кристалла с заданной концентрацией КТ и соответствующим главным числом n , определяющим степень возбуждения мерцающего кристалла (сверхрешётки) внутри опорного кристалла.

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

В части 1 данной работы:

1) показано, что в легированных кристаллах, в области внедрения в кристаллическую решётку инородного атома, самоформируются наноразмерные структуры (стоячие волновые ε -структуры или ε -резонаторы) с квантовыми (волновыми) профилями относительной диэлектрической проницаемости – $\varepsilon(r)$. Даже слабое отличие относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$ в области внедрения инородного атома от относительной проницаемости ε_k в области не возмущённого кристалла, приводит к локализации энергетических возмущений – экситонов, делая их стоячими, так как свободный резонансный перенос экситонов (при криогенных температурах) возможен только при постоянном

профиле $\varepsilon_k(r) = \text{const}$. Если $\varepsilon(r)$ в области внедрения инородного атома больше, чем в опорном кристалле, то все электромагнитные волны кумулируют (локализуются) в экситон в этой области, тем формируя **стоячий** экситон Высикайло (В). При этом внутренняя энергия стоячего экситона В больше внутренней энергии свободного экситона Ванье-Мотта (ВМ). Если $\varepsilon(r)$ в области внедрения инородного атома меньше, чем в опорном кристалле, то внутренняя энергия стоячего экситона В меньше соответствующей внутренней энергии свободного экситона ВМ. Здесь отмечу, что в установках для синтеза кристаллов алмаза трудно избавиться от легирования алмаза бором. Это приводит к известным напряжениям в легированных кристаллах, которые обусловлены увеличением относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$ 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. часть 1, рис. 6);

2) рассмотрена общая постановка задачи о самоорганизации в легированных кристаллах на базе ϵ -резонаторов мерцающих кристаллов из стоячих экситонов В;

3) исследован способ кумуляции энергии возбуждения (экситонов) в кумулятивно-диссипативных структурах (рис. 1а), существенно отличающихся от диффузионных диссипативных структур Колмогорова – Тьюринга – Пригожина;

4) установлено, что 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) (рис. 1а и б);

5) предложен способ изготовления макроскопического твёрдого кристалла с заданной концентрацией КТ и соответствующим главным квантовым числом n , описывающим степень возбуждения стоячих экситонов В, формирующих возбуждённый (мерцающий) кристалл (сверхрешётку) внутри опорного кристалла (рис. 1б);

6) отмечено, что при облучении легированного кристалла, КТ переходят в возбуждённые состояния и их электронные оболочки перекрываются, формируя возбуждённый (мерцающий) кристалл металлического (водородного) типа в матрице опорного кристалла (рис. 1), с малой работой выхода электронов из мерцающего кристалла. Так самоформирующиеся в области внедрения в кристаллическую решётку атомов легирующей примеси КТ с меняющимися размерами (рис. 1) выступают основой для формирования кумулятивно-диссипативных структур (КДС) – стоячих экситонов В и их регулярных систем – кумулятивно-диссипативных кристаллов (КДК) (рис. 1). КДК могут быть применены для разработки датчиков и других приборов на базе совершенно нового принципа их функционирования. Свойства КДК меняются от концентрации легирующей примеси и степени возбуждения (главного квантового числа n) стоячих экситонов Высикайло;

7) обнаружено, что бикристаллы с мерцающими кристаллами металлического типа в матрице опорного кристалла могут многократно

возбуждаться и поэтому являются удобными для исследований по сравнению с газообразными блуждающими ридберговскими кристаллами Манькина.

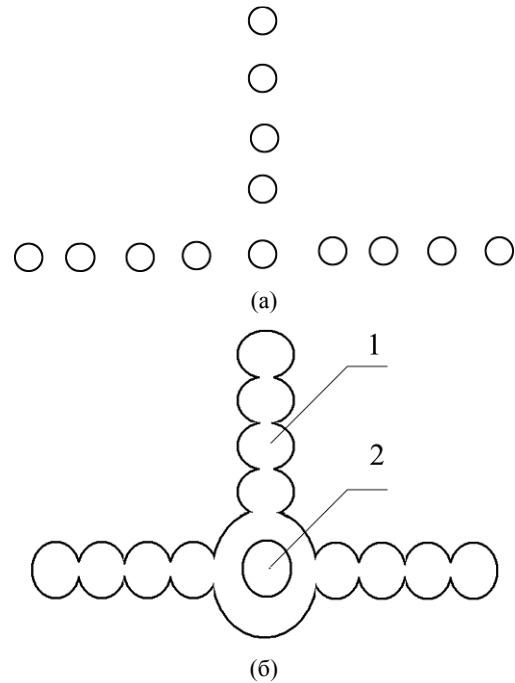


Рис. 1. Схема формирования мерцающего кристалла из стоячих экситонов Высикайло: (а) – легированный кристалл при облучении слабым энергетическим источником; (б) – перекрытие электронных оболочек стоячих экситонов – квантовых точек с переменным размером при мощном облучении. Русло из квантовых точек (1), фокусирующее энергию в центр её излучения (2).

Изменяя концентрацию легирующей примеси или интенсивность внешнего электромагнитного облучения опорного кристалла, тем самым увеличивая n – главное квантовое число стоячего экситона В, можно управлять свойствами мерцающих кристаллов металлического типа в опорном кристалле. Это позволяет формировать не только разнесённые в пространстве КТ, но и создавать из них русла и другие аттракторы для кумуляции потоков энергии свободных экситонов и других энергетических возмущений в заданные области сложнолегированных кристаллов и кумулировать энергию в этих областях (рис. 1). Формирование мерцающих молекул и далее – мерцающих кристаллов сопровождается динамическим притяжением их центров друг к другу, что может сопровождаться очисткой опорного кристалла от легирующей примеси (вытеснением примеси из опорного кристалла или локальной кумуляции примеси).

Итак, кроме простого нанесения не меняющегося со временем нанометрового рисунка на поверхность полупроводника и травления для создания нанометровых КТ, можно использовать более сложные пульсирующие во времени и пространстве явления. И таким примером самоформирования профилированных на нанометровых

размерах стратифицированных структур в кристаллах служат открытые потенциальные (стоячие) $\varepsilon(r)$ -волны Высикайло (с профилями $\varepsilon(r)$ – относительной диэлектрической проницаемости возмущённого кристалла), возникающие в легированных кристаллах в области внедрения в решётку примесных центров. Размеры квантово-механического изменения относительной диэлектрической проницаемости в стоячих $\varepsilon(r)$ -волнах r_V близки к размерам свободного экситона Ванье-Мотта (ВМ, для которых в модели ВМ считается, что относительная диэлектрическая проницаемость кристалла $\varepsilon_k \equiv \text{const}$). Применение модифицированной автором модели ВМ и основ кумулятивной квантовой механики (ККМ) показывает: 1) учёт расщепления резонансного энергетического спектра с главными квантовыми числами n на два подуровня [1–4]; 2) учёт спектральных линий Высикайло с $E_n \sim (n-1/2)^2$ позволяет описать все имеющиеся в экспериментах спектры комбинационного рассеивания (КРС) на стоячих экситонах В в кристаллах алмаза, легированного бором. Это позволяет надеяться, что модель Высикайло-Ванье-Мотта-де Бройля-Бора может оказаться полезной для описания мерцающих кристаллов и в иных опорных кристаллах, например кремнии, германии и др.

В данной работе в части 2 ККМ используется для определения профиля $\varepsilon(r)$ в наноразмерных КДС Высикайло в легированных кристаллах. Профили $\varepsilon(r)$ реализуются вблизи атома примеси, внедрённого в решётку. В легированных кристаллах, как считает автор, КРС формируются рассеиванием лазерного излучения стоячими экситонами, открытыми автором в легированных бором кристаллах алмаза. Внутри опорного кристалла стоячие экситоны Высикайло при перекрытии их электронных оболочек формируют свой возбужденный нанокристалл металлического (водородоподобного) типа с главным квантовым числом КТ с $n > 1$. Автор доказывает, что в КРС фиксируются переходы в стоячих экситонах – КТ – между состояниями с различными n и переходы из состояний с асимметричной ψ_n в состояния с симметричной $\psi_{n-1/2}$ функциями с одним и тем же главным квантовым числом n . Этим переходам в ККМ соответствует расщепление энергии [1–4] $\Delta E_{n-1/2,n} \sim |(n-1/2)^{\pm 2} - n^{\pm 2}|$ [1–4]. ККМ позволяет описать (с точностью до третьего знака) экспериментальные КРС при рассеивании лазерного излучения на стабильных (закрытых) водородоподобных КТ (стоячих экситонах Высикайло, формирующих возбуждённый мерцающий кристалл в опорном кристалле). Этим очередной раз экспериментально подтверждается правомерность применения ККМ, предложенной в [1–4].

*Основы кумулятивной квантовой механики (ККМ) сформулированы в [1–4]. В ККМ при описании резонансов в полых квантовых резонаторах с любым типом симметрии (плоскостной – $k = 0$, сферической – $k = 1$ и цилиндрической – $k = 0,5$) следует учитывать не только резонансные \sin -волны (часть 1, рис. 2) с ограниченными ψ_n -функциями ($\psi_n(0) = 0$), но и резонансные \cos -волны с неограниченной (при $k \neq 0$) в центре резонатора $\psi_{n-1/2}$ -функцией электрона ($\psi_{n-1/2}(r) \sim \cos(k_{n-1/2}r)/r^k = \infty$ при $r \rightarrow 0$). Дираком [5] \cos -решения ошибочно выбрасываются из собственных энергетических спектров сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов в классической квантовой механике, требующей ограниченности ψ -функций всюду в пространстве, в том числе и в центре полого резонатора. Согласно ККМ, квантовая частица с резонансной энергией $E_{n-1/2}$ сгребается к центру полого сферически- (или цилиндрически-) симметричного резонатора сферически- (или цилиндрически-) симметричным потенциальным барьером (часть 1, рис. 1а). Как доказано в [1–4], плотность вероятности нахождения частицы в слое dr квантового полого 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 регуляризуются в центре резонатора (часть 1, рис. 2) соответствующим типу симметрии нормировочным геометрическим коэффициентом, равным $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$, при $k \neq 0$ (при $k = 0$, $\chi = 1$) [1–4]. 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 (часть 1, рис. 2) [1–4]. Поэтому в ККМ наряду с классическим спектром энергий для асимметричных ψ_n -функций (\sin -волн с $\psi_n(0) = 0$, часть 1, рис. 2) с $E_n \sim n^2$ для **полых** квантовых резонаторов существуют и реализуются в экспериментах квантовые резонансы для симметричных $\psi_{n-1/2}$ -функций (\cos -волн с $\psi_{n-1/2}(0) = \infty$) с $E_n \sim (n-1/2)^2$. **Расщепление** резонансного энергетического спектра с главными квантовыми числами n **на два подуровня называется расщеплением Высикайло** уровня с главным квантовым числом n в полом квантовом резонаторе [1–4]. Для задач с барьерами (часть 1, рис. 1а) энергия расщепления Высикайло $\Delta E_{n,n-1/2} \sim n-1/4$ [1–4]. Для задач с полостью с потенциальными барьерами (часть 1, рис. 1б) энергия расщепления Высикайло $\Delta E_{n,n-1/2}$ впервые будет рассчитана в данной работе. Энергии E_1 и $E_{1-1/2}$ с $n = 1$ (часть 1, рис. 2) отличаются ровно в 4 раза для любого типа симметрии полого резонатора и типа потенциальной ямы или потенциального барьера [1–4]. При переходах электрона в полом квантовом резонаторе (КТ или КЛ) из одного резонанс-*

ного состояния в другое происходит излучение или поглощение фотона, как и в случае обычного атома. В отличие от обычного атома в *полых* наноструктурах появляется множество спектральных линий Высикайло, в которых участвуют уровни с симметричными $\psi_{n-1/2}$ -функциями, неограниченно кумулирующими к центру полого резонатора. Учётом этих особенностей отличается ККМ от классической квантовой механики [5], выбрасывающей из рассмотрения решения с симметричными относительно центра *полого* резонатора $\psi_{n-1/2}$ -функциями (часть 1, рис. 2) и соответствующим энергетическим спектром $E_{n-1/2}$ в случае сферической или цилиндрической симметрии резонатора. Без учёта *cos*-волн или состояний с симметричными $\psi_{n-1/2}$ -функциями локализованных в экситоне электронов идентифицировать 2/3 спектров КРС, наблюдаемых в легированных алмазах, невозможно!

МОДЕЛЬ И КЛАССИФИКАЦИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК. СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАСSEИВАНИЯ ЭКСИТОНОВ ВЫСИКАЙЛО

*Общая классификация квантовых точек.
Размеры конструкции и симметрии стабильных
и метастабильных квантовых точек*

Считается, что в КТ движение электрона ограничено в трех направлениях и энергетический спектр полностью дискретный, как в поляризованном ящике Гамова (часть 1, рис. 1а) или в макроатоме (часть 1, рис. 1б). Так как поляризованный ящик ограничен конечным потенциалом, то, согласно квантовой механике, электрон может проникать через потенциальный барьер. Такая КТ называется метастабильной, или открытой КТ [1–4]. В КТ с профилем кулоновского потенциала, как в атоме (часть 1, рис. 1б), проникновение электрона сквозь бесконечный кулоновский потенциал невозможно. Такие КТ называют закрытыми или стабильными [1–4]. Поэтому их называют еще искусственными (макро)атомами, хотя каждая КТ состоит из тысяч или даже сотен тысяч атомов. Размеры КТ порядка нескольких нанометров. Подобно атому, КТ может содержать один или несколько свободных электронов и соответствующее количество положительных ионов – дырок. Если содержит один электрон, то это как бы искусственный макроатом водорода, если два – макроатом гелия и т.д. Однако, в отличие от сферически-симметричных атомов с ангстремными размерами (Å), теория для КТ опирается в основном на модель с прямоугольными наноразмерными положительно заряженными ящиками (с плоскостной симметрией, $k = 0$) (часть 1, рис. 1а) [6].

Аналогично переходу между уровнями энергии атома при переходе между энергетическими уровнями КТ может излучаться фотон или ме-

няться спектр регистрируемого излучения (КРС). Можно также забросить электрон на высокий энергетический уровень, а излучение получить от перехода между более низколежащими уровнями (люминесценция). При этом, в отличие от настоящих атомов, частотами переходов легко управлять, меняя размеры кристалла или используя кристаллы с различными относительными диэлектрическими проницаемостями ϵ_k .

В кристаллах, допированных примесью, внедряющейся в кристаллические решётки, можно концентрацией примеси управлять спектральными, прочностными и электрическими свойствами материала. Как доказывается в данной работе, в обычных кристаллах, допированных, например, бором, при облучении электромагнитным излучением формируются мерцающие кристаллы на КТ (стоячих экситонах) как с ограниченной кумуляцией (локализацией) ψ_n -функций, так и с неограниченной кумуляцией собственных $\psi_{n-1/2}$ -функций электронов к центру сферически-симметричной *полой* КТ.

Типы квантовых точек по способу их создания.

*Бикристаллы с твёрдотельными
мерцающими кристаллами,
формируемыми стоячими
экситонами Высикайло*

Различают четыре типа КТ точек (по способу их создания):

- коллоидные;
- метастабильные внедренные поляризационные отрицательно заряженные (на базе фуллеренов и других полых молекул и КЛ на базе нанотрубок, захвативших электроны) [1–4];
- эпитаксиальные – формируются с помощью масок или внедрением примесей, замещающих атомы в кристаллической решётке (например, бор замещает углерод в алмазе и тем возмущает кристаллическую решётку);
- обусловленные локальным разрушением кристаллических решёток пучками высокоэнергетических частиц или электромагнитных волн.

При помощи коллоидного синтеза получают нанокристаллы – КТ, покрытые слоем адсорбированных поверхностно-активных молекул. КТ, связанные с подложкой, могут использоваться, например, в перспективных приложениях нанoeлектроники. Метастабильные отрицательно заряженные КТ [1–4] можно получить в результате дробления кристаллов фуллерита с нанокристаллами полупроводников или металлов в мельницах, как это делалось, например, в [7].

Особое внимание уделим КТ, полученным в кристаллах (например, алмазе и кремнии) при малых концентрациях допирования примесями (например, азотом, бором, фтором и мышьяком), существенно меняющими цвет и электрические

свойства таких кристаллов при их облучении электромагнитным излучением. Внедрение малой примеси в кристаллическую решётку (при эпитаксии), как доказывает автор, приводит к формированию в легируемых кристаллах волновой структуры с меняющимся профилем относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$ на размерах порядка 1–20 нм от внедрённого в кристаллическую решётку инородного атома легирующей примеси. Такое профилирование $\varepsilon(r)$ приводит к кумуляции энергии (экситонов и других энергетических возмущений) к примесному центру и формированию стоячего экситона Высикайло – КТ с радиусами:

$$a_n = \frac{(4\pi\varepsilon(r)\varepsilon_0)\hbar^2 n^2}{Zm_0 e^2} = \quad (1)$$

$$= a_0 \cdot \varepsilon(r) \cdot n^2 / Z = 0,529 \cdot \varepsilon(r) \cdot n^2 / Z [\text{Å}],$$

и с энергетическим спектром (по модели атома водорода, a_0 – радиус атома водорода, n – главное квантовое число) для классических асимметричных относительно центра полого квантового резонатора (sin-) волн с ψ_n :

$$E_n = \frac{m_0 V^2}{2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon(r)\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = \quad (2)$$

$$= -\frac{1}{(4\pi\varepsilon(r)\varepsilon_0)^2} \frac{m_0 e^4 Z^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2},$$

и с дополнительным энергетическим спектром Высикайло, если возможны резонансы с симметричными относительно центра квантового резонатора собственными $\psi_{n-1/2}$ -функциями (cos-волны) [1–4]:

$$E_{n-1/2} = \frac{m_0 V^2}{2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon(r)\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = \quad (3)$$

$$= -\frac{1}{(4\pi\varepsilon(r)\varepsilon_0)^2} \frac{m_0 e^4 Z^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{(n-1/2)^2},$$

и с соответствующими размерами (стоячих экситонов Высикайло):

$$a_{n-1/2} = \frac{(4\pi\varepsilon(r)\varepsilon_0)\hbar^2 (n-1/2)^2}{Zm_0 e^2} = \quad (4)$$

$$= a_0 \cdot \varepsilon(r) \cdot (n-1/2)^2 / Z =$$

$$= 0,529\varepsilon(r) \cdot (n-1/2)^2 / Z [\text{Å}].$$

Такие (3)–(4) стоячие с симметричными $\psi_{n-1/2}$ -функциями (cos-) волны возможны в случае **полых** резонаторов типа фуллеренов [1–4]. Если для состояний с асимметричными ψ_n -функциями описание опирается на удвоенное главное квантовое число n [8, 9], то для состояний с симметричными относительно центра квантового резонатора $\psi_{n-1/2}$ -функциями (в частности, cos-волны) описание аналогично проводится для $2n-1$ (или $2(n-1/2)$).

Отличие модели стоячих экситонов Высикайло (1)–(4) от модели свободных экситонов Ванье-Мотта (часть 1, уравнения (1)–(3)) существенно и заключается в следующем. Так как атом примеси внедрён в кристаллическую решётку (рис. 2) и профилем $\varepsilon(r)$ (который аналогичен профилю волн в воде, ч. 1 рис. 3) локализует дырку (рис. 2в, сфера 2), то можно считать массу дырки в такой водородоподобной локализованной структуре бесконечной. Эффективная масса электрона, локализованного кулоновским потенциалом дырки, будет соответствовать классической массе электрона в атоме водорода m_0 . Эффективная относительная диэлектрическая проницаемость ε в стоячем экситоне Высикайло, то есть в (1)–(4), считается функцией от расстояния r до центра КТ, а в модели Ванье-Мотта $\varepsilon = \varepsilon_k \equiv \text{const}$ всюду в кристалле [10, 11].

Профиль $\varepsilon(r)$ в авторской модели стоячего экситона рассчитывается по экспериментальным КРС (как считает автор, КРС определяются рассеиванием лазерного излучения на стоячих экситонах Высикайло) E_n и $E_{n-1/2}$ водородоподобных КТ. Экспериментально установленные КРС в легированных кристаллах и имеющие отношение к рассеиванию лазерного света на экситонах в легированных кристаллах приведены в [12–18] и аккумулированы в табл. 1 и 2 (третий столбец). Здесь же, во втором столбце, приведены аналитически рассчитанные по модели (1)–(4) энергетические спектры с учётом расщепления Высикайло уровней с главным квантовым числом n . При использовании модели (1)–(4) для расчёта резонансных спектров эти расчёты одновременно **верифицировались** спектрами $\Delta E_{n-1/2,n}$ (пятый столбец в табл. 1 и 2) и спектрами гелиоподобных экситонов с $Z = 2$ и с $Z = 3$ (табл. 1, второй столбец, числа с символом /). **Синергизм** (совместное действие) обработки данных заключается в одновременном согласовании всех значений матрицы 22x7 (табл. 1): имеющихся в базе автора экспериментальных наблюдений [12–18] с известными автору теоретическими представлениями, изложенными в [1–4, 8–11].

Состояния с симметричными волновыми функциями (с $\psi_{n-1/2}$ -функциями), неограниченно кумулирующими к центру квантового резонатора, возможны, если внедрённый в кристаллическую решётку атом смещён в сторону от узла идеального кристалла (рис. 2), то есть атом примеси имеет характерные размеры ковалентных связей, отличные от характерных размеров ковалентных связей атома в идеальной опорной кристаллической решётке. Согласно [19] размер ковалентной связи атома бора в легированном алмазе равен 1,574 Å при малых концентрациях бора. Рис. 2б иллюстрирует смещение атома бо-

ра (из-за наличия у него 3-валентных электронов) на доли \AA относительно узла кристалла алмаза, в котором углерод имеет 4 валентных электрона (рис. 2а). Электрон, формирующий КТ (стоячий экситон Высикайло), с радиусом $a_{n-1/2} \approx 0,529\varepsilon(r)(n-1/2)^2 [\text{\AA}]$ фокусируется всей структурой $\varepsilon(r)$ -волны в кристалле (с объёмом $V_{n-1/2} = (4/3)\pi a_{n-1/2}^3$) именно в то место, где должен находиться узел идеального кристалла алмаза (рис. 2б и в). Собственные симметричные $\Psi_{n-1/2}$ -функции *при больших n* строятся аналогично с помощью обобщённых полиномов Лагерра, как это делается для асимметричных ψ_n -функций в [8, 9] с $a_n \approx 0,529n^2 [\text{\AA}]$. Для малых $n \sim 1$ необходимо сшивать решения $\cos(k_{n-1/2}r)/r$ с $\exp(-k_{n-1/2}r)$ на границе полости, в которой в центре отсутствует заряд (рис. 2в). Такие сложности для построения симметричной $\Psi_{1-1/2}$ -функции в области центра водородоподобной КТ связаны с тем фактом, что $\Psi_{1-1/2} = \exp(-k_{1-1/2}r)/r^{1-1/2}$ не является решением уравнения Шредингера в полости (рис. 2). Однако, применяя закон сохранения энергии для электрона, мы получаем $\Delta E_{n-1/2,n} = E_n - E_{n-1/2}$ практически для любых главных квантовых чисел n , в том числе и для $n \sim 1$. При этом $k_{1-1/2} = 2k_1$, то есть энергии при равных главных квантовых числах для асимметричных и симметричных волновых функций в водородоподобной полости КТ расщепляются и при $n = 1$ отличаются почти в 4 раза, как и в случае задачи Гамова-де Бройля-Гельмгольца (часть 1, рис. 1а) [1–4].

Вопрос: «Почему не наблюдаются собственные спектры с симметричными волновыми функциями в сферически-симметричных квантовых резонаторах с атомными ядрами в их центрах?» – требует дополнительных исследований структуры атомных ядер и решения вопроса стабилизации нейтронов в атомных ядрах. Для этого необходимо детализировать потенциальный барьер (часть 1, рис. 1а), введённый Г.А. Гамовым при описании α -распада атомных ядер. Этот потенциальный барьер (часть 1, рис. 1а) и отражает электроны оболочки атома от его центра. А вот уже наличие в центре атома сверхстабильного атомного ядра с потенциальным барьером, непроницаемым для электронов оболочки, является достаточным условием для постановки в центре атома условия $\psi_n(0) = 0$. Наличие этого условия существенно изменяет задачу. Изменяется характерный размер задачи в два раза, что соответствует изменению характерных энергий задачи в четыре раза [1–4]. Условие $\psi_n(0) = 0$ исключает решения с $\psi_{n-1/2} \sim 1/r$ при $r \rightarrow 0$ для всех электронов электронной оболочки любого водородоподобного атома, то есть происходит вырезание 2/3 спектра, соответствующего спектру

полной водородоподобной квантовой точки [1–4].

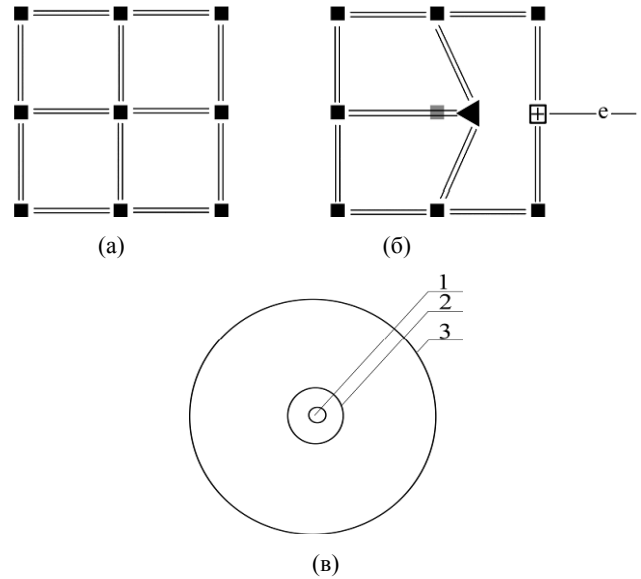


Рис. 2. Геометрическая 2D-схема формирования квантовой точки (обобществлённого всем объёмом нанокристалла электрона e): (а) – идеальная кристаллическая решётка элемента из IV группы системы Д.И. Менделеева; (б) – 2D-схема модификации решётки элементов из IV группы Периодической системы атомом примеси (треугольник). e – обобществляемый объём квантовой точки электрон. + – дырка (положительный ион). Серый квадратик – узел решётки, к которому кумулирует обобществлённый электрон; (в) – сферически-симметричная квантовая точка в алмазе при замене атома углерода атомом бора. 1 – внутренняя полость в области узла решётки, обусловленная ковалентными связями атома бора только с тремя атомами углерода; 2 – сфера движения положительно заряженной дырки с радиусом $d \approx 1,54 \text{\AA}$; 3 – граница, внутри которой локализуется электрон в стабильной сферически-симметричной квантовой точке (или центре окраски) с характерным размером a_n или $a_{n-1/2}$.

Автор на базе экспериментально обнаруженных КРС [12–18] в данной работе доказывает, что в ряде экспериментов с легированными кристаллами наблюдаются переходы, связанные с расщеплением уровней с главным квантовым числом n на два подуровня с асимметричной ($\psi_n(0) = 0$) и симметричной $\Psi_{n-1/2}$ -функциями ($\Psi_{n-1/2}(0) = \infty$). Энергетический спектр таких переходов определяется следующим образом:

$$\Delta E_{n-1/2,n} = a_0 Z^2 \cdot ((n-1/2) \cdot \varepsilon_{n-1/2}(r))^{-2} - (n\varepsilon_n(r))^{-2} \approx \frac{13,56 \cdot Z^2 (n-1/4)}{((n-1/2) \cdot n \cdot \varepsilon_{n-1/2,n})^2} \quad [\text{эВ}]. \quad (5)$$

Здесь $\varepsilon_{n-1/2,n}(r)$ – эффективная относительная диэлектрическая проницаемость нанокристаллита на расстоянии $\approx \varepsilon_{n-1/2,n} \cdot a_0 \cdot n^2$ ($n \gg 1/2$) от центра стоячей $\varepsilon(r)$ -волны, на которой формируется КТ, Z – заряд системы локализованных в стоячей волне (в области внедрённого инородного атома) дырок, формирующих КТ – стоячий экситон большого радиуса. Расщепление квантовых состояний волн де Бройля электронов с главным квантовым числом n по типу симметрии волно-

Таблица 1. Идентифицированные автором собственные энергетические уровни $E_{n-1/2} = -13,56 \cdot ((n-1/2)\epsilon(r))^{-2}$ эВ и $E_n = -13,56 \cdot (n\epsilon(r))^{-2}$ эВ и характерные радиусы a_n водородоподобной квантовой точки в алмазе, допированном бором (спектры стоячих экситонов Высикайло). Зависимость относительной диэлектрической проницаемости ϵ от r в стоячей $\epsilon(r)$ -волне

n	E_n , мэВ Теория/ $Z = 2$	E_n , мэВ Эксп. [лит.]/ Z	ϵ	ΔE , мэВ $= E_n - E_{n-1/2}$	a_n , Å $a_{n-1/2}$	$a_n/2$, Å / $\epsilon(r)$
1-1/2	-1480	Нет, $a_{1-1/2} < d$	6,06		0,8	
1	-369	-369 [12; 13]	6,06		3,2	
2-1/2	-164	-161÷165 [14]	6,06	72	7,2	
2	-92	-?	6,06	?	12,82	
3-1/2	-60,27	-?	6,0	17,37	19,84	
3	-42,9	-42,9 [15]	5,925	17,36[15]	28,21	
4-1/2	-30,74	-30,99[15]	6,0	7,96	38,88	
4	-22,78	-22,56[15]	6,1	7,93[15]	51,63	
5-1/2	-19,10	?	5,92	3,97	63,42	
5	-15,13	-15,13[15]	5,987	3,97[15]	77,63	
6-1/2	-13,51	-13,51 [15]	5,76	2,1	92,17	
6	-11,41	-11,41[15]	5,745	1,98[15], 2,07[16]	109,41	
7-1/2	-9,31/37,2	-9,3[15]/2	5,87	1,38	131,2	65,6/5,92
7	-7,93/31,72?	-7,93[15]/2	5,906	?	153,1	76,55/5,987
8-1/2	-7,0/28	-28,02[15]/2	5,87		174,67	87,34/5,84
8	-6,38/25,54	-25,54[15]/2	5,76		195,0	97,5/5,76
9-1/2	-5,64/22,56	-22,56[15]/2	5,77		220,53	110,3/5,745

Таблица 2. Идентифицированные автором энергетические уровни водородоподобной полый квантовой точки в кремнии, допированном бором, с $E_{n-1/2} = -13,56 \cdot ((n-1/2)\epsilon(r))^{-2}$ эВ и $E_n = -13,56 \cdot (n\epsilon(r))^{-2}$ эВ

n	E_n , мэВ Теория	E_n , мэВ Эксп. [лит.]	$\epsilon(n)$	ΔE , мэВ $= E_n - E_{n-1/2}$	r , Å
1-1/2 Si:B	-259	Нет, $a_{1-1/2} < d \approx 2$ нм	14,47		1,91
1 Si:B	-64,76	-64,8? [17]	14,47		7,65
2-1/2 Si:B	-37,9	-37,9 [17]	12,61	14,48	15,0
2 Si:B	-23,42	-23,4 [17]	12,03		25,46

вых функций (симметричные с $\psi_{n-1/2}$ и асимметричные с ψ_n или с чётными или нечётными ψ -функциями) (5) называется расщеплением Высикайло уровней с одним главным квантовым числом и впервые идентифицировано автором при сравнении аналитических расчётов с экспериментальными наблюдениями за сечениями резонансного захвата электронов **полыми** фуллеренами [1–4]. Асимметрия локального заряда (рис. 2б) приводит к блужданию дырки вокруг мнимого (серый квадратик) узла (рис. 2в, сфера 2) и движению внедрённого атома во внутренней полости локализации атома примеси (внутри сферы 2, рис. 2в), что позволяет перейти к сферической геометрии такой КТ (рис. 2в) с полостью в её центре с $r \sim 1$ Å. Наличие такой полости позволяет надеяться на возможность установления не только \sin -волн (с ψ_n), но и \cos -волн (с $\psi_{n-1/2}$) в сферически-симметричных **полых** КТ (рис. 2в) в алмазах и других кристаллах, допированных атомами примеси, внедряющихся в кри-

сталлическую решётку опорного кристалла диэлектрика (или полупроводника).

В модели Высикайло (1)–(4) радиус экситона или КТ – a_n или $a_{n-1/2}$ – в легированном кристалле зависит от профиля относительной диэлектрической проницаемости кристалла $\epsilon(r)$, возникающего при внедрении примеси в решётку кристалла, и значения главного квантового числа n возбуждённого уровня водородоподобной КТ (полной энергии электрона в КТ). Условие применимости модели Ванье-Мотта (часть 1, соотношения (1)–(3)), согласно [10], состоит в требовании достаточно большой величины «радиуса орбиты экситона Ванье-Мотта» – $a_n \sim \hbar^2 \epsilon n^2 / m e^2 \gg a_0$ (часть 1, рис. 1б). Это условие заведомо выполняется при больших n , но в кристаллах с большим ϵ может выполняться и для $n \sim 1$ [10, стр. 353] Аналогично обосновывается условие применимости (1)–(4) для стоячих экситонов Высикайло $a_{n-1/2} \gg a_0$ (часть 1, рис. 1б). Однако в случае формирования стоячего экситона большо-

го радиуса это условие модифицируется на $a_{n-1/2} > d$. Здесь d – размер между ближайшими атомами в кристаллической решётке опорного кристалла (алмаза, кремния и др.). Это условие связано с невозможностью формирования нижних энергетических уровней в структуре с профилированным $\varepsilon(r)$ с характерными размерами $a_{n-1/2} < d$ или $a_n < d$ (рис. 2). Для алмаза $d \approx 1,54 \text{ \AA}$. Поэтому состояние с $\psi_{1-1/2}$, с энергией $E_{1-1/2} \approx -1,48 \text{ эВ}$ и $a_{1-1/2} \approx 0,8 \text{ \AA} < d$, как стоячий экситон Высикайло с минимально возможной энергией реализоваться не может (его нет как структуры, сформированной в кристалле). Его нет в экспериментальных наблюдениях и, согласно развиваемой теории, быть не может (рис. 2 и табл. 1). Аналогично решается вопрос в случае стоячих экситонов Высикайло в кремнии (табл. 2) и германии. В кремнии, по-видимому, нижнее состояние с $E_{1-1/2} \approx -0,341 \text{ эВ}$ и $a_{1-1/2} \approx 1,67 \text{ \AA} < d \approx 2 \text{ \AA}$ (табл. 2) также не реализуется в экспериментах. А вот $E_{1-1/2}$ уже в слабо легированном германии (с $\varepsilon = 16$), возможно, удастся обнаружить в экспериментах.

Мерцающие молекулы и кристаллы из стоячих экситонов большого радиуса могут формироваться при перекрытии их возбуждённых электронных оболочек и наблюдаться при концентрациях легирующей примеси (например, бора):

$$N_{B,n} = 1/(2a_n)^3 = 10^{24}/(2 \cdot 0,529 \cdot \varepsilon(r) \cdot n^2)^3 [\text{см}^{-3}] \quad (6)$$

или для состояний с симметричными $\psi_{n-1/2}$ -функциями при

$$\begin{aligned} N_{B,n-1/2} &= 1/(2a_{n-1/2})^3 = \\ &= 10^{24}/(2 \cdot 0,529 \cdot \varepsilon(r) \cdot (n-1/2)^2)^3 [\text{см}^{-3}]. \end{aligned}$$

Так, для алмаза, допированного бором, формирование мерцающих кристаллов (сверхрешёток), согласно (6), может наблюдаться при $n = 5$ и концентрациях бора, допированного в кристаллическую решётку алмаза $\approx 2,5 \cdot 10^{17} [\text{см}^{-3}]$, а при $n = 4$ соответственно при $9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Такие твёрдотельные бикристаллы, описываемые с помощью авторской модели (модифицированной модели Ванье-Мотта-Френкеля-де Бройля-Бора), содержащие внутри базисного кристалла мерцающие кристаллы из стоячих экситонов, могут оказаться полезными в практике, и особенно для научных исследований:

1) общих свойств металлических водородоподобных кристаллов (с характерным размером между узлами 1–10 нм). При этом нет необходимости в огромных давлениях соответствующих металлизаций обычного водорода;

2) прохождения электронов через точки либрации Высикайло-Эйлера [20, 21] в нанометровых заряженных положительным зарядом (или поляризованных структурах с меняющейся отно-

сительной диэлектрической проницаемостью, часть 1, рис. 2б) при перекрытии электронных оболочек стоячих экситонов Высикайло и т.д. Если обычные страты в газовом разряде (см. ссылки в [20, 21]) были известны Фарадею, то наностраты с точками либрации Высикайло-Эйлера, открыты в данной работе (рис. 1).

Без учёта расщепления резонансного спектра на cos- и sin-волны объяснить весь спектр, полученный в работах, при захвате электронов **полями** сферически-симметричными фуллеренами невозможно. Только учёт cos-волн (спектральной серии Высикайло) позволил в [1–4] получить согласование аналитических расчётов энергетических спектров с экспериментально измеренными в [22–24] с точностью до ≈ 5 –10%. В [1–4] обоснована повышенная стабильность cos-состояний (вероятность нахождения электрона вне квантового резонатора – фуллерена – в три раза меньше, чем у sin-волны). В данной работе аналогично учёт спектра переходов от асимметричных волн к симметричным волнам (спектральная серия Высикайло) при одном и том же главном квантовом числе n позволяет реабилитировать аналитическое описание водородоподобных КТ и установить профиль $\varepsilon(r)$ (см. табл. 1 и 2 и часть 1, рис. 2б). Без привлечения ККМ [1–4] (состояний с $\psi_{n-1/2}$ -функциями) объяснить расщепление уровней на два (с $\Delta E = \Delta E_{i-1/2,i} = E_i - E_{i-1/2}$) и идентифицировать 2/3 всех спектров комбинационного рассеивания (с $E_{i-1/2}$), наблюдаемых в экспериментах (табл. 1, 2), **невозможно!** Конечно, можно предположить, что в кристаллах стоячие экситоны имеют форму **кубов**, для которых и в классической квантовой механике следует учитывать, согласно [6], весь спектр (1)–(4) стоячих экситонов, но это менее разумно, чем признать в сферически-симметричной геометрии возможность состояний с $\psi_{n-1/2}$ -функциями, неограниченно кумулирующими к центру **полого** сферически-симметричного резонатора. (При этом предположении для объяснения резонансных спектров захвата электронов явно сферически-симметричными полями фуллеренами в рамках этой модели пришлось бы фуллерены окружать кубическими поляризационными стенками, что находится на грани здравого смысла.)

ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Неограниченная кумуляция в квантовых явлениях в природе существует! В частности, она обнаруживается в неограниченной кумуляции симметричных относительно центра резонатора $\psi_{n-1/2}$ -функций стоячих волн де Бройля в квантовых **полях** сферически- или цилиндрически-симметричных резонаторах. Визуализация этого

явления наблюдается в собственных спектрах резонатора с $E_{n-1/2}$ и переходах с $\Delta E_{n-1/2,n}$, соответствующих расщеплению Высикайло уровня с главным квантовым числом n . Описание таких явлений для сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов проводится в рамках кумулятивной квантовой механики, как показано в [1–4] и данной работе. Согласно гипотезе де Бройля, неограниченной кумуляции не может не быть, так как она существует в классической волновой механике согласно [25, 26] и работам Безанта (1859), Рэля (1917), Гудерлея (1942), Покровского, Ландау, Забабахина и др. Явления сферической кумуляции к центру применяются в атомных и водородных бомбах. При этом в квантовой механике требованием Дирака (ТД) оставлено место *только для* ограниченной стационарной (в стоячей волне) кумуляции к центру *плоскостных резонаторов*. Постулат (гипотеза) де Бройля оказался эффективен для огромного числа волновых явлений. Поэтому автор в [1–4] и данной работе сформулировал и решил парадоксы в квантовой механике, следующие из ТД о регулярности ψ -функций квантовых частиц и гипотезы де Бройля, и приступил к расчетам квантовых резонансов в сферическом *полем* резонаторе (метастабильной КТ), представленном на рис. 2в, и практическому обоснованию возможности формирования резонансных состояний с $\psi_{n-1/2}(0) \sim \cos(k_{n-1/2}r)/r = \infty$. Для любого типа симметрии квантового полого резонатора *регуляризованные* решения (1)–(4), в рамках ККМ, совпадают с решением при плоскостной симметрии резонатора, то есть все эти решения совпадают с решениями в случае классической квантовой механики с ограниченной кумуляцией $\psi_{n-1/2}$ -функций в центре квантового резонатора [1–4]. Минимальные резонансные энергии (при $n = 1$) для сферических (КТ) или цилиндрически-симметричных (КЛ) резонаторов в рамках ККМ (для \cos -волн или в общем случае для симметричных волновых функций основного тона – $\psi_{1-1/2}$) в четыре раза меньше, чем минимальная возможная энергия (для \sin -волн – первого обертона или в общем случае для состояний с асимметричной волновой функцией ψ_1) в рамках классической квантовой механики, требующей регулярности ψ -функций в нуле. В общем случае (рис. 1, при $\varepsilon = 1$) расщепление Высикайло энергетических уровней с главным квантовым числом $n - \Delta E_{n \rightarrow n-1/2} \sim |n^{\pm 2} - (n-1/2)^{\pm 2}|$. В случае КТ с $\varepsilon(r)$ энергия расщепления энергетических уровней с главным квантовым числом $n - \Delta E_{n \rightarrow n-1/2} = 13,56 \cdot |(\varepsilon_n(r)n)^2 - (\varepsilon_{n-1/2}(r)(n-1/2))^2|$. В рамках ККМ при значениях $n \gg 1/2$ происходит вырождение квантовых уровней полых квантовых резонаторов (КТ или КЛ) не в два раза, как по

принципу Паули, а в четыре раза, так как, согласно ККМ, следует учитывать \cos - и \sin -волны (или состояния с симметричными и асимметричными волновыми функциями) одновременно.

Неограниченные решения – с симметричными относительно центра полого резонатора $\psi_{n-1/2}$ -функциями – регуляризуются при правильном учёте геометрических нормировочных коэффициентов $B_{n-1/2} = 2^k \pi^{1/2} r^k / R^k$. Эти коэффициенты регуляризуют в нуле $\psi_{n-1/2}$ как в случае сферической симметрии, так и в случае цилиндрической симметрии. Для регуляризованных $\psi_{n-1/2}$ -функций \cos -волн – $B_{n-1/2} \cdot \psi_{n-1/2}(0) = 2^k \pi^{1/2} r^k \cos(k_{n-1/2}r) / (rR)^k = 2^k \pi^{1/2} / R^k$. В рамках ККМ проводить расчёты всех параметров КЛ и КТ следует с учётом геометрических нормировочных коэффициентов $\chi(r)$, соответствующих типу симметрии задачи и регуляризующих неограниченно растущие, например к центру квантового резонатора, собственные $\psi_{n-1/2}$ -функции для частиц. Ошибки с преждевременными предельными переходами во всех учебниках по квантовой механике возникли из-за непонимания явлений с неограниченной кумуляцией $\psi_{n-1/2}$ -функцией частиц и неучёта обратных волн ($\psi_{n-1/2}^*$) в *полых* резонаторах. Но в атомной физике и нет полых резонаторов. Это сейчас исследуются полые квантовые резонаторы, и для них следует применять ККМ. Решение всех парадоксов, отмеченных автором, осуществляется учётом обратных волн (ψ^*) и модификацией ТД на менее жёсткое требование ограниченности только плотности вероятности $\chi^2(r) |\psi|^2$ нахождения частицы в объёме dV [1–4].

Так почему же Дирак ошибся, ограничив всюду значения ψ -функции частиц в [5]? В двадцатые годы теория Нильса Бора для атома водорода и водородоподобных структур имела огромное значение для развития правильных физических представлений. Сформулировав свои постулаты, Бор не только описал спектры атома водорода, но и указал направление, в котором многие годы успешно развивалась новая физика, – квантовая механика водородоподобных атомов. Создатели квантовой механики Шредингер, Гейзенберг и Дирак строили теорию так, чтобы постулаты Бора получались в ней естественным образом [9]. Однако при точном квантово-механическом решении уравнения Шредингера (которое сводится к неоднородному или в ряде случаев даже к однородному уравнению Гельмгольца) все значения энергии, определяемые в теории Бора, возможны при одном и том же и притом нулевом значении момента количества движения электрона, захваченного в потенциальную яму. Поэтому представления Бора об «орбитах» электрона в атоме, оказалось, противоречат гипотезе Луи де Бройля о том, что квантовые частицы ведут себя, как волны в резонато-

рах Гельмгольца. Удовлетворяя постулатам Бора, создатели квантовой механики выбросили из решений неоднородного уравнения Гельмгольца для сферически- и цилиндрически-симметричных квантовых резонаторов основной тон (cos-волны или волны с $\psi_{n-1/2}$ и соответствующим им собственным энергетическим спектром), оставив в решениях уравнения Шредингера только обертоны с ограниченными ψ -функциями. По мнению автора, это и является основным парадоксом в квантовой механике, требующей регулярности всюду ψ -функций. Для случаев сферической и цилиндрической симметрии **полых** квантовых резонаторов весь энергетический спектр симметричных cos-волн (с полной энергией уровней $E_{n-1/2} \sim \pm(n-1/2)^{\pm 2}$) выбрасывается Дираком из-за требования ограниченности ψ -функций [5, стр. 209]. Требование ограниченности или регулярности ψ -функций было поддержано Фоком [5], Ландау [8], Зельдовичем и др. Это требование связывают с утверждением Гильберта о конечности физических параметров в любых явлениях. Но физический смысл при описании квантовых резонансов несёт регулируемая плотность вероятности нахождения частицы в объёме dV : $W_{n-1/2}(r) = \chi^2(r)|\psi_{n-1/2}(r)|^2 = 2^{2k} \pi r^{2k} |\psi_{n-1/2}(r)|^2 \sim \cos^2(k_{n-1/2}r)$, $n = 1, 2, 3 \dots$. Значит, учёт решений с неограниченно кумулирующими к центру полого резонатора $\psi_{n-1/2}(r)$ не нарушает и принцип Гильберта.

В результате проведенного анализа (решений первой краевой задачи Гельмгольца с однородным и неоднородным уравнениями Гельмгольца [27]), опирающегося на ККМ, в данной работе и в [1–4] получены физические обоснованные решения (1)–(4) для собственных ψ -функций, включающие как ψ_n (sin-волны), так и $\psi_{n-1/2}$ (cos-волны) в **полых** квантовых резонаторах с любым типом симметрии. Решения получены как для модифицированной автором в [1–4] задачи Гамова-де Бройля-Гельмгольца с $E_n > 0$ или $E_{n-1/2} > 0$ (первая краевая задача с однородным уравнением Гельмгольца [27]), которая соответствует в ядерной физике задаче Г.А. Гамова с потенциальным барьером (часть 1, рис. 1а), так и для задачи Высикайло с $E_n < 0$ или $E_{n-1/2} < 0$ (модифицированной модели Ванье-Мотта-Френкеля-де Бройля-Бора), соответствующей первой краевой задаче с неоднородным уравнением Гельмгольца. Это соответствует в атомной физике задаче де Бройля-Бора-Гельмгольца об энергетическом спектре водородоподобных атомов с кулоновской потенциальной ямой (часть 1, рис. 1б), но заканчивающейся не ядром, а полостью (рис. 2в). Электрон проникает в полость (рис. 2в) с $E_{n-1/2}$ или E_n , которая определяется главным квантовым числом n и симметрией ψ -функции, а значит, **эффективным размером** (a_n или $a_{n-1/2}$) потенциальной квантовой ямы

(часть 1, рис. 1б). ТД об ограниченности ψ -функций квантовых частиц исключало из моделей Ванье-Мотта и Френкеля состояния с симметричными $\psi_{n-1/2}$ -функциями (энергетические спектры и характерные размеры (3) и (4) соответственно). Учётом профилирования относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$ в области внедрения инородного атома или молекулы в решётку и учётом всех спектров серии Высикайло, то есть учётом (1)–(4), отличаются модели автора от моделей Ванье-Мотта (часть 1, уравнения (1)–(3)), в которой $\epsilon_k(r) \equiv \text{const}$, и других моделей, учитывающих только спектры (1) и тем самым удовлетворяющих ТД, являющимся ошибочным для **полых** квантовых резонаторов. Для атома водорода и других атомов следует ставить граничное условие в их центре $\psi(0) = 0$, которое исключает из решений $\psi_{n-1/2}$ (cos-волны) для структур с атомными ядрами в их центре.

Полученные в экспериментах [22–24] (см. ссылки в этих работах) спектры резонансных энергий захвата электрона молекулами фуллеренов хорошо согласуются с результатами аналитических расчётов (см. [1–4]), выполненных по модифицированной автором модели Гамова-де Бройля-Гельмгольца и применённой для расчёта энергетического спектра с учётом cos- и sin-волн (расщепление Высикайло уровней с главным квантовым числом n). Сравнение аналитических расчётов минимальных резонансных энергий захваченных электронов с экспериментальными исследованиями [22–24] резонансных процессов поляризационных захватов электронов полыми молекулами C_{60} и C_{70} показали отличное совпадение ($\approx 5 \div 10\%$) только при учёте cos-волн (основного тона квантового резонатора с $\psi_{1-1/2}(0) \sim \cos(k_{n-1/2}r)/r = \infty$ и $E_{1-1/2} = 0,24$ эВ) [1–4]. Если учитывать только sin-резонансы (с $\psi_1(0) \sim \sin(k_1r)/r = 0$ и $E_1 = 0,92$ эВ), то расхождение величин резонансных энергетических уровней с главным квантовым числом $n = 1$ между аналитическими расчётами по модели, опирающейся на модель Гамова-де Бройля-Гельмгольца, и экспериментальными наблюдениями достигает нескольких раз (4 раза). Только с учётом cos-волн экспериментально наблюдаемое в [23] максимальное эффективное сечение захвата электрона молекулой C_{60} $\sigma_{\text{эфф}}$ с точностью до 5% совпадает с расчётным сечением $\sigma_a = \pi(R+r_{\text{ind}})^2$. Здесь R – радиус молекулы фуллерена. При этих расчётах масса электрона автором считалась классической, а общий эффективный поляризационный размер r_{ind} , на котором возникает поляризационное «зеркало», возвращающее электрон к центру фуллерена, определяется из эксперимента (по первому энергетическому уровню – cos-состоянию с главным квантовым числом $n = 1$) и является единственным параметром задачи Высикайло (модифицированной автором модели Гамова-де Бройля-Гельмгольца) для все-

го энергетического спектра и \cos -, и \sin -волн (часть 1, рис. 1а). Такой точности расчётов в настоящее время не даст ни один из методов, опирающийся на первые принципы квантовой механики. Модель автора (модифицированная модель Гамова-де Бройля-Гельмгольца) в соответствии с гипотезой де Бройля хорошо описывает резонансы при захвате электронов старшими фуллеренами [1–4]. Явление поляризационного резонансного захвата электронов с полной энергией $E_n > 0$ или $E_{n-1/2} > 0$ фуллеренами впервые объяснено в [1] и названо автором первым **поляризационным** квантово-размерным эффектом Высикайло [2–4]. Характерные размеры этого поляризационного эффекта (см. в [1] рис. 2) порядка 1,24 нм [1–4]. ККМ в виде модели автора (модифицированной модели Гамова-де Бройля-Гельмгольца), учитывающая \cos -волны, была успешно применена и к описанию экспериментальных наблюдений [7] второго поляризационного квантово-размерного эффекта Высикайло [2–4], приводящего к колебательному изменению параметров полупроводников от концентрации физически легирующей добавки C_{60} . Характерные размеры второго поляризационного (поляризационно-концентрационного) квантово-размерного эффекта Высикайло [2–4] от 10 нм (размеры нанокристаллита) до мезоразмеров термоэлектрика (см. в [3] рис. 1 и 6).

На базе ККМ в этой работе построена аналитическая теория (1)–(4) водородоподобных квантовых резонаторов с характерными размерами до 20 нм и с малой **полостью** ($\sim \text{Å}$) в области замещённого атома в кристаллической решётке (рис. 2в). С помощью (1)–(4) идентифицированы все спектры электромагнитного излучения (КТ в алмазах и кремнии, допированных бором, фосфором и мышьяком), полученные в экспериментах [12–18]. Совпадение экспериментальных спектров с аналитическими расчётами (табл. 1 и 2) по модели автора (модифицированной модели Ванье-Мотта-Френкеля-де Бройля-Бора-Гельмгольца) доказывает наличие расщепления Высикайло уровней с главным квантовым числом n на два подуровня при формировании водородоподобных КТ в легированных кристаллах алмаза (табл. 1, столбец 5). На базе модели, разработанной автором, впервые предложен совершенно новый способ определения (по экспериментально измеренным КРС) профилей $\varepsilon(r)$ в стоячих ε -волнах Высикайло с шагом $\Delta r \approx 0,529\varepsilon(r)$ ($(n-1/4)/Z$ (часть 1, рис. 2б). Z -заряд, локализованный в наноструктуре, n – главное квантовое число формирующееся на структуре КТ. Расщепление спектральных линий в алмазе, допированном бором, обусловлено смещением бора в кристаллической решётке по отношению к расположению замещённого атома углерода из-за больших размеров ковалентных связей атома бора, чем у

атомов углерода. Это обуславливает в образованной сферически-симметричной КТ формирование полости с характерным размером $\sim \text{Å}$ (рис. 2в). Наличие полости в решётке обуславливает возможность, как и в случае резонансного захвата электрона в полую молекулу фуллерена, двух типов резонансов: с симметричными $\Psi_{n-1/2}$ -функциями и асимметричными ψ_n -функциями при одном и том же главном квантовом числе n , но с различными резонансными энергиями $E_{n-1/2}$ и E_n соответственно. Об аналогичном расщеплении энергетических уровней (и соответственно спектральных линий) на \cos - и \sin -состояния с одним главным квантовым числом n в полых квантовых резонаторах – фуллеренах – при исследовании поляризационного захвата электрона фуллереном сообщалось автором в [1–4] и названо расщеплением Высикайло (часть 1, рис. 1).

Профилированные внедрением инородного атома в идеальную кристаллическую решётку области кумулируют экситоны Ванье-Мотта, Френкеля и другие энергетические возмущения. В результате такой кумуляции энергии формируются, развиваются и, излучая электромагнитные волны, погибают кумулятивно-диссипативные структуры (кумулярующие и диссипирующие энергию) в легированных кристаллах с профилями относительной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(r)$.

Модель (1)–(4) предсказывает, что расщепления уровней с главным квантовым числом n на два подуровня (с n и $n-1/2$) и формирование водородоподобных КТ, с профилями $\varepsilon(r)$ будут наблюдаться при допировании бором и другими атомами любых кристаллических диэлектриков из IV группы.

Идентифицированные в алмазе и кремнии, допированном бором, КРС водородоподобных КТ, обнаруженные в [12–18], соответствуют собственным энергетическим уровням и переходам электронов из более высоких энергетических состояний с асимметричными ψ_n -функциями в более стабильные состояния с симметричными $\Psi_{n-1/2}$ -функциями (с одним и тем же главным квантовым числом $n = 3, 4, 5, 6$). Как считает автор, эти спектры не имеют никакого отношения к спин-орбитальному взаимодействию, как утверждается в [15, 16] (см. ссылки в [12–18]). Все эти спектры или энергетические уровни, установленные в [12–18], нельзя называть Лаймановской серией водородоподобных квантовых точек, так как эти спектры включают все спектры Высикайло (с $n-1/2$) и все остальные классические спектры, соответствующие серии Бальмера, Пашена и т.д.

Автором доказано на базе экспериментальных данных [12–18; 22–24], что в рамках ККМ класс

состояний с симметричной волновой функцией (основной тон) следует учитывать в качестве возможных решений в любых *полых* квантовых резонаторах с любым типом симметрии. Энергетический дискретный спектр $E_{n-1/2}$ и пространственная стратификация вероятности нахождения частицы в объёме полого квантового резонатора $W_{n-1/2}$ как для волн де Бройля с $\psi_{n-1/2}$ -функцией (cos-волн) с $E_{n-1/2} \sim (n-1/2)^{\pm 2}$, так и для с ψ_n -функцией (sin-волн) с $E_n \sim n^{\pm 2}$ зависят только от эффективного размера резонатора и n – главного квантового числа (n – для sin-волн или $(n-1/2)$ – для cos-волн) и не зависят от типа симметрии квантовой точки, линии или ямы. При этом вся *спектральная серия Высикайло* в общем случае учитывает как переходы между состояниями с симметричными волновыми функциями, так и переходы между состояниями с асимметричными и симметричными волновыми функциями, и наоборот, что в разы обогащает возможные для наблюдения спектры *полых* квантовых резонаторов и, в частности, водородоподобных квантовых точек и КЛ. Ранее все спектры из серии спектральных линий Высикайло для сферических и цилиндрических квантовых резонаторов были ошибочно запрещены Дираком, который требовал (ГД) регулярности ψ -функции всюду, даже при кумуляции электрона к центру квантового резонатора *с полостью*. В результате для объяснения спектральных «загадочных» линий из серии Высикайло последователи ошибки Дирака стали утверждать, что модель Ванье-Мотта не способна описать стоячие экситоны и формирование из них мерцающих твёрдотельных кристаллов (сверхрешёток) в опорных кристаллах при любых концентрациях легирующей примеси. Автор доказал, что все эти «загадочные» уровни, спектральные линии и их расщепления, обнаруженные в работах [12–18], соответствуют расщеплению Высикайло уровней с главным квантовым числом n , а модель автора (обобщённая модель Ванье-Мотта-Френкеля-де Бройля-Бора) (1)–(4) отлично описывает все уровни и спектр водородоподобных *полых* квантовых точек (стоячих экситонов Высикайло, формирующих мерцающие кристаллы) в алмазе, допированном бором, если учитывать уровни с симметричными волновыми $\psi_{n-1/2}$ -функциями.

Представляет интерес исследование легирования графена атомами бора. В этом случае возможно формирование плоскоцилиндрических квазиатомов водорода – стоячих экситонов.

Особый интерес представляет применение ККМ для описания переходов в КТ, формирующих мерцающие бикристаллы (сверхрешётки или мерцающие поликристаллы). В данной работе с помощью ККМ (по опубликованным в литературе спектрам комбинационного рассеивания в легированных кристаллах, в области внедрения в

кристаллическую решётку инородного атома или молекулы) открыты самоорганизующиеся наноразмерные волновые структуры (резонаторы) Высикайло с квантовыми (волновыми) профилями относительной диэлектрической проницаемости $\epsilon(r)$. Исследован способ кумуляции энергии возбуждения (экситонов) в таких кумулятивно-диссипативных структурах (КДС) из-за больших значений ϵ в центре структуры, чем на её периферии. КДС существенно отличаются от диффузионных диссипативных структур Пригожина-Тьюринга-Колмогорова [28, 29]. Как доказано в данной работе, при облучении легированных кристаллов удаётся при криогенных температурах фиксировать КРС при рассеивании лазерного излучения на стоячих экситонах Высикайло с характерными размерами, близкими к размерам свободных экситонов Ванье-Мотта (рис. 2б). Это позволило рассчитать зависимость $\epsilon(r)$ – относительной диэлектрической проницаемости в кристалле – от расстояния до атома легирующей примеси (табл. 1 и 2). Автором впервые на базе ККМ и экспериментальных данных, приведенных в [12–18], доказано, что внедрение атома примеси в кристаллическую решётку приводит к волновым наноразмерным колебаниям относительной диэлектрической проницаемости кристалла $\epsilon(r)$ в области внедрения инородного атома на уровне нескольких процентов. Из данных табл. 1 и 2 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 удаётся фиксировать с помощью КРС. Ранее считалось, что атом примеси возмущает кристалл на уровне размеров между узлами (связанный экситон Френкеля). Теперь мы видим (табл. 1 и 2; часть 1, рис. 2б), что существуют связанные 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 Луи де Бройля (часть 1, рис. 4).

Могут быть рассчитаны все спектры мерцающих молекул с возбуждёнными внутри них мерцающими стоячими суператомами (стоячими экситонами Высикайло) двух типов – с симметричной и асимметричной волновой функциями их электронных оболочек. Такие синергетические многофазные или мультифазные твёрдотельные системы с расщеплением Высикайло с мерцающими (стоячими экситонными) подсистемами могут оказаться весьма перспективными при утилизации тепловой энергии в электрическую или электромагнитную.

Для исследования влияния поляризационных сил, например в ближней зоне поляризованного диполя C_{60} , следовало бы провести численные расчеты распределения плотности электронов в C_{60} методом функционала плотности [30] в присутствии налетающего электрона (или протона) и рассчитать профиль поляризационного барьера (часть 1, рис. 1а). Однако, как показано в работах автора, определенные детали структуры сечений и физика явления кумуляции электронов в полые молекулы или каверны в кристаллах могут быть исследованы и в рамках аналитических простых, предложенных автором в [1–4], аналитических моделей, восходящих к моделям Гамова, Ванье, Мотта, де Бройля, Бора и Гельмгольца. Простая модель (часть 1, рис. 1а) после ряда упрощений применённая мною для описания квантовых резонансов при захвате электрона фуллеренами, свелась к хорошо известной модели Г.А. Гамова, предложенной им для описания проникновения α -частицы через потенциальный барьер атомного ядра. Модель Г.А. Гамова использовалась для аналитического вычисления вероятности распада радиоактивных ядер, наблюдаемого в экспериментах, и для выяснения возможности распада атомных ядер с испусканием одного или двух протонов (В.И. Гольданский, 1960, 1965). В историческом плане значение такой теории особенно велико, потому что теория Гамова – пример первого успешного применения квантовой механики к атомному ядру, то есть к объектам фемтомира (с размерами $\sim 10^{-15}$ м). Но она восходит к первой краевой задаче Гельмгольца и гипотезе де Бройля. По-видимому, в [1] впервые модель с потенциальным барьером (часть 1, рис. 1а), аналогичная модели Гамова-де Бройля-Гельмгольца, была использована для описания резонансных процессов поляризационного захвата электронов полыми поляризующимися молекулами углерода в наномире (с размерами $\sim 10^{-9}$ м). Предложенную регуляризацию неограниченных решений, ККМ и расщепление Высикайло уровней с главным квантовым числом n на два подуровня можно применять для описания кумулятивных явлений в атомных ядрах и явлений кумуляции в классической физике волн.

Авторским подходом, решающим ряд парадоксов классической квантовой механики, в частности описывающим кумулятивные явления в КТ и КЛ, можно воспользоваться согласно гипотезе Луи де Бройля для описания поведения любых частиц в соответствующих квантовых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторах, в том числе и в фемторазмерных резонаторах (атомных ядрах), а также в классических резонаторах для различных типов волн (симметричных с неограниченной кумуляцией к центру и асимметричных по отношению к цен-

тру резонаторов). Эти модели могут быть применены, например, для решения таких редких «загадочных» явлений, как волны-убийцы в океанах, для моделирования мезобаллистической проводимости в поляризующихся протяжённых нанотрубках – КЛ и даже смерчах, торнадо и циклонах, кумулирующих энергомассовоимпульсные потоки к центру самоорганизующегося резонатора [31].

Работа проводилась при финансовой поддержке грантами РФФИ № 13-07–0027; 14-07-00277.

ЛИТЕРАТУРА

1. Vysikaylo Ph.I. Cumulation of de Broglie Waves of Electrons, Endoions and Endoelectrons of Fullerenes, and Resonances in the Properties of Nanocomposite Materials with Spatial Charge Layers. *Surf Eng Appl Electrochem.* 2010, **46**(6), 547–557.
2. Vysikaylo Ph.I. Cumulative Quantum Mechanics (CQM). Part I: Prerequisites and Fundamentals of CQM. *Surf Eng Appl Electrochem.* 2012, **48**(4), 293–305.
3. Vysikaylo Ph.I. Cumulative Quantum Mechanics (CQM). Part II. Application of Cumulative Quantum Mechanics in Describing the Vysikaylo Polarization Quantum Size Effects. *Surf Eng Appl Electrochem.* 2012, **48**(5), 395–411.
4. Высикайло Ф.И. Поляризация аллотропных полых форм углерода и её применение в конструировании наноконструктивов. *Нанотехника.* 2011, **1**(25), 19–36.
5. Дирак П.А.М. *Принципы квантовой механики.* М.: Наука, 1979. 480 с.
6. *Нанонаука и нанотехнологии. Энциклопедия систем жизнеобеспечения.* М.: Магистр-Пресс, 2009. 106–138.
7. Blank V., Vysikaylo Ph. et al. C_{60} – doping of Nanostructured Bi-Sb-Te Thermoelectrics. *Phys Status Solidi A.* 2011, **208**, 105–113.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика: Учеб. пособие. Т.3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория.* М.: Физматлит, 1974. 752 с.
9. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. *Введение в атомную физику.* М.: Физ.-мат. лит., 1969. 303 с.
10. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Теоретическая физика: Учеб. пособие для вузов. Т.9 Статистическая физика Ч. 2. Теория конденсированного состояния. 4-е изд.* М.: Физматлит, 2004. 496 с.
11. Гуртов В.А., Осауленко Р.Н. *Физика твердого тела для инженеров.* Учеб. пособие. М.: Техносфера, 2007. 300 с. <http://dssp.petrus.ru/p/tutorial/fit/giv.htm>
12. Collins A.T. and Williams A. W. S. The Nature of the Acceptor Centre in Semiconducting Diamond. *J Phys C: Solid State Phys.* 1971, **4**, 1789–1800.
13. Cherenko R.M., Boron. The Dominant Acceptor in Semiconducting Diamond. *Phys Rev. B.* 1973, **7**, 4560–4567.
14. Collins A.T., Lightowers E.C. and Dean P.J. Role of Phonons in the Oscillatory Photoconductivity Spect-

- rum of Semiconducting Diamond. *Phys Rev.* 1969, **183**(3), 725–730.
15. Denisov V.N., Mavrin B.N., Blank V.D. et al. First Observation of Electronic Structure of the Even Parity Boron Acceptor States in Diamond. *Phys Letters A.* 2012, **376**, 2812–2815.
 16. Hynunjung Kim, Grimsditch M., Anthony T.R. et al. Electronic Raman and Infrared Spectra of Acceptors in Isotopically Controlled Diamonds. *Phys Rev B.* 1998, **57**(24), 15316–15327.
 17. Wright G.B. and Mooradian A. Raman Scattering from Donor and Acceptor Impurities in Silicon. *Phys Rev Lett.* 1967, **18**(15), 608–610.
 18. Jain K., Lai S. and Klein M.V. Electronic Raman Scattering and the Metal-insulator Transition in Doped Silicon. *Phys Rev B.* 1976, **13**(12), 5448–5464.
 19. Popova D.M., Mavrin B.N., Denisov V.N., Skryleva E.A. Spectroscopic and First-principles Studies of Boron-doped Diamond: Raman Polarizability and Local Vibrational Bands. *Diamond & Related Materials.* 2009, **18**, 850–853.
 20. Vysikaylo Ph.I. The Analytic Calculation of Ionization–Drift Waves (3D Strata) of Nanosecond Discharges: The Determination of the Cathode Drop in Nanosecond Discharges according to the Number of Visualized Plasma Structures. *Surf Eng Appl Electrochem.* 2011, **47**(2), 139–144.
 21. Высикайло Ф.И. Аналитические исследования ионизационно-дрейфовых волн в наносекундных разрядах. *Инженерная физика.* 2012, (7), 27–44.
 22. Туктаров Р.Ф., Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С. и др. Плазменные колебания в молекулах фуллеренов при электронном захвате. *Письма ЖЭТФ.* 2005. **81**(4), 207–211.
 23. Jaffke T., Illenbergen E., Lezius M., Matejčík S., Smith D. and Mark T.D. Formation of C₆₀ and C₇₀ by Free Electron Capture. Activation Energy and Effect of the Internal Energy on Lifetime. *Chem Phys Lett.* 1994, **226**, 213–218.
 24. Huang J., Carman H.S. and Compton R.N. Low-Energy Electron Attachment to C₆₀. *J Phys Chem.* 1995, **99**, 1719–1726.
 25. Забабахин Е.И., Забабахин И.Е. *Явления неограниченной кумуляции.* М.: Наука, 1988. 173 с.
 26. Маргулис М.А. Сонолюминесценция. *Успехи физических наук.* 2000, 170(3), 263–287.
 27. Полянин А.Д. *Справочник по линейным уравнениям математической физики.* М.: Физматлит, 2001. с. 511, 515.
 28. Turing A.M. The Chemical Basis of the Morphogenesis. *Proc Roy Soc. B.* 1952, **273**, 37–71.
 29. Пригожин И., Стенгерс И. *Время, хаос, квант. К решению парадокса времени.* М.: Едиториал УРСС, 2003. 240 с.
 30. Yang S., Yoon M. et. al. Electron Transfer and Localization in Endohedral Metallofullerenes: Ab Initio Density Functional theory Calculations. *Phys Rev B.* 2008, **78**, 115435.
 31. Высикайло Ф.И. Новая 3D концепция усиления кумулятивных структур (КС) в катастрофах. Часть I. Самоорганизация КС с кумулятивными струями. *Пространство и время.* 2012, **4**(10), 141–150.

Поступила 04.02.13

После доработки 15.05.13

Summary

Based on the experimental data of Raman spectra, in doped crystals, when foreign atoms are introduced into the crystal lattice, the standing Vysikaylo excitons have been discovered. The method is proposed so as to determine profiles $\varepsilon(r)$ in the ε -wave structures, with the step $\Delta r \approx 0.529\varepsilon(r)(n-1/4)/Z$, where Z is the charge localized in the nanostructure; n – the principal quantum number for the emerging structure of a quantum dot (QD). Applying cumulative quantum mechanics (CQM), it is possible to describe the following in doped crystals: 1) the splitting (in two) of the level with the principal quantum number n (with the splitting energy $\Delta E_{n-1/2,n} \sim n^{-1/4}$ in the case of a potential barrier, and $\Delta E_{n-1/2,n} = 13.56((\varepsilon_{n-1/2}(r)(n-1/2))^{-2} - (\varepsilon_n(r)n)^{-2})$ eV in the case of the potential well with a profiled $\varepsilon(r)$, and 2) all known in the literature Raman spectra of the hollow hydrogenic QDs, forming flickering or excited micro- or nano-crystals in any reference crystals doped with impurities that substitute atoms in the crystal lattice. When a doped crystal is irradiated by the resonant radiation, QDs pass into the excited state and their electron shells overlap, thus forming an excited (flickering) metal (hydrogenic) crystal in the matrix of the reference crystal. A method is proposed for manufacturing a macroscopic solid crystal with the required concentration of QDs and the respective principal number n , describing the degree of excitation of the excited (flickering) crystal (superlattice) inside the reference crystal.

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, standing Vysikaylo excitons.