

*Д.В. Образцов, Д.А. Шеришорин,*

*М.В. Макарчук, В.П. Шелохвостов*

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СООТНОШЕНИЙ В НАНОРАЗМЕРНЫХ КВАНТОВЫХ СТРУКТУРАХ

В настоящее время уделяется достаточно много внимания исследованию систем, некоторые составляющие которых находятся в диапазоне 1...100 нм. В них нередко проявляются квантовые эффекты, существенно изменяющие макросвойства. К таким системам можно отнести и водные растворы высокой степени разведения (РВСР) при концентрации примеси  $< 10^{-8}$  %. Их изучение представляет интерес из-за нелинейного характера изменения свойств при уменьшении концентрации растворимого компонента. В этой связи исследовали водные РВСР меди.

Анализировали раствор как квазистационарную систему из свободных молекул, случайных ассоциаций и кластеров, сформированных с участием растворимого объекта (меди). Каждый из кластеров считали неоднородной составляющей, которая определяется возможностями водных молекул как диполей компенсировать оборванные связи поверхности растворимого объекта. Энергетическое состояние воды вокруг примеси представляли в виде чередующихся слоев с различной поляризацией (рис. 1) и оценивали с использованием волнового уравнения Шредингера [1]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + (U(x) - E)\psi = 0, \quad (1)$$

**ЗДЕСЬ  $\hbar$  – ПОСТОЯННАЯ ПЛАНКА;  $m$  – МАССА ЧАСТИЦЫ;  $E$  – ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ ЧАСТИЦЫ;  $\psi$  – ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ;  $U$  – ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ.**

**НАИБОЛЬШИЕ РАЗМЕРЫ СЛОЕВ, ПРИ КОТОРЫХ ОНИ МОГУТ СЧИТАТЬСЯ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ (КЯ), И ПОЛОЖЕНИЕ УСТОЙЧИВЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В НИХ РАССЧИТЫВАЛИСЬ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫВЕДЕННОГО РАНЕЕ [2] СООТНОШЕНИЯ (2)**

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\pi}{W} \right]^2 n^2 = 0,3737 \left( \frac{m_0}{m} \right) \left( \frac{n}{W(\text{нм})} \right)^2, \text{ эВ}, \quad (2)$$

**ГДЕ  $m_0$  – МАССА СВОБОДНОГО ЭЛЕКТРОНА;  $m$  – ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНА;  $n$  – КВАНТОВОЕ ЧИСЛО ( $n = 1, 2, \dots$ );  $W$  – ШИРИНА КВАНТОВОЙ ЯМЫ (СЛОЯ).**

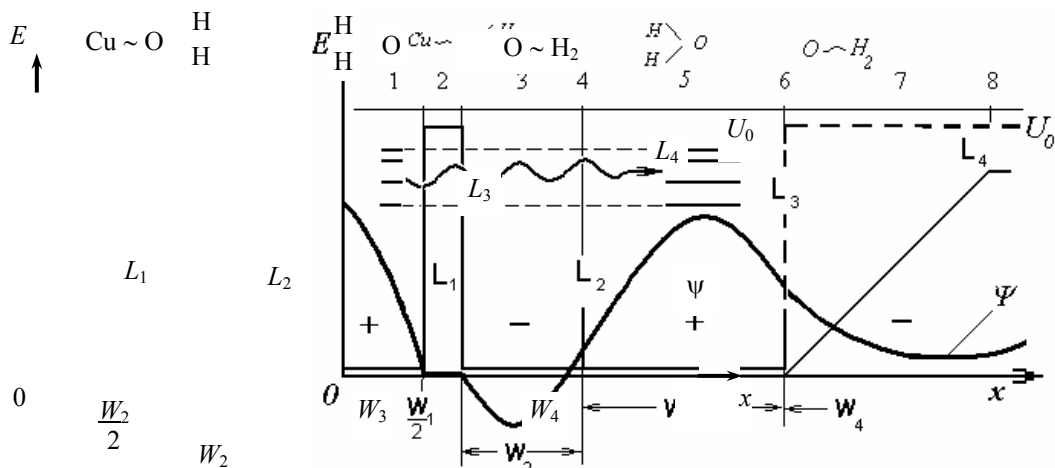


Рис. 1 Структурное состояние меди в растворе высокой степени разведения (вода)

ИЛЛЮСТРАЦИЯ РАСЧЕТНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СООТНОШЕНИЙ  $E_N$  И КАЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ УРОВНЯ ЭНЕРГИИ (ПО МОДУЛЮ ФУНКЦИИ  $\psi$ ) ПРИВЕДЕНЫ НА РИС. 1.

ЯДРО КЛАСТЕРА (РИС. 1) СООТВЕТСТВУЕТ  $W = 1...50$  НМ (ОБЛАСТЬ 1), ЕГО МОЖНО РАССМАТРИВАТЬ КАК КЯ С ПОЛОЖИТЕЛЬНЫМ ВНУТРЕННЕ НЕ СКОМПЕНСИРОВАННЫМ ЗАРЯДОМ (ВНСЗ), КОТОРЫЙ ЧАСТИЧНО КОМПЕНСИРУЕТСЯ АДСОРБИРОВАННЫМИ МОЛЕКУЛАМИ ВОДЫ ЗА СЧЕТ СООТВЕТСТВУЮЩЕЙ ИХ ПОЛЯРИЗАЦИИ. ПРИ ЭТОМ НА ПОВЕРХНОСТИ ОБРАЗУЕТСЯ БАРЬЕР 2 КАК ХЕМОСОРБИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ  $Cu \sim O \approx 2H$ , ПРОТЯЖЕННОСТЬ КОТОРОГО МОЖНО ОЦЕНИТЬ В  $1...2$  НМ, И ОБЛАСТЬ 3 ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ВНСЗ ВЕЛИЧИНОЙ  $3...10$  НМ. ПОСКОЛЬКУ ДИПОЛЬНАЯ КОМПЕНСАЦИЯ ЗАРЯДА НЕ АБСОЛЮТНА, ТО ЧЕРЕЗ БАРЬЕР 4 ( $\sim 1$  НМ) ВОЗНИКАЕТ СЛЕДУЮЩИЙ СЛОЙ 5 С ПОЛОЖИТЕЛЬНЫМ ВНСЗ. ТАКИМ ОБРАЗОМ, МОЖНО ПРЕДСТАВИТЬ ЗНАЧИТЕЛЬНЫЙ ФРАКТАЛЬНЫЙ РЯД КЯ В НАПРАВЛЕНИИ ОТ ПРИМЕСИ С ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОМ УМЕНЬШЕНИЕМ ЭНЕРГИЙ ВНСЗ.

ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕННЫХ ИЗ ФИЗИЧЕСКОГО АНАЛИЗА РАЗМЕРОВ КЯ (СЛОЕВ) ВНУТРИ КЛАСТЕРА НА РИС. 1 ПОКАЗАНО ИЗМЕНЕНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ  $\psi$  ДЛЯ НИЗШЕГО КВАНТОВОГО СОСТОЯНИЯ В НАПРАВЛЕНИИ  $x$  (ОТ ЯДРА КЛАСТЕРА). КАК ВИДНО ФУНКЦИЯ ТАКЖЕ МЕНЯЕТ И ЗНАК, КОТОРЫЙ ОБУСЛОВЛИВАЕТ СУЩЕСТВОВАНИЕ УСТОЙЧИВЫХ КВАНТОВЫХ УРОВНЕЙ ТОЛЬКО В КЯ С ПОЛОЖИТЕЛЬНЫМ ЗНАКОМ (1, 5 И Т.Д.). В КАЖДОЙ ПОСЛЕДУЮЩЕЙ КЯ С ПОЛОЖИТЕЛЬНЫМ ЗНАКОМ ЭНЕРГИЯ УМЕНЬШАЕТСЯ. ТАК, ДЛЯ ОБЛАСТИ 5 ПРИ РАСЧЕТЕ ПО ФОРМУЛЕ (УПРОЩЕНИЕ ФОРМУЛЫ 2)  $E_N \sim N^2/W^2$  ВЕЛИЧИНА ЭНЕРГИИ СОСТАВИТ ПОРЯДОК  $0,25E_N$ , ДЛЯ ОБЛАСТИ 8 ОНА ИЗМЕНИТСЯ ЕЩЕ НА ПОРЯДОК.

ОСОБЕННОСТЬЮ ВОЗБУЖДЕННЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЯВЛЯЕТСЯ ТО, ЧТО ПРИ РАЗМЕРАХ РАСТВОРЯЕМОЙ ПРИМЕСИ МЕНЕЕ  $1$  НМ (ОБЛАСТЬ 1 РИС. 1) ОСНОВНЫЕ УРОВНИ СТАНОВЯТСЯ МЕНЕЕ УСТОЙЧИВЫМИ (РАВНОМЕРНО УШИРЕННЫМИ) ПО ОТНОШЕНИЮ К ВОЗБУЖДЕННЫМ. ПОСЛЕДНИЕ СРАВНИВАЮТСЯ ПО ЧАСТОТЕ С УСТОЙЧИВЫМИ СОСТОЯНИЯМИ В 5, 8 И Т.Д. ПОСКОЛЬКУ ЭТИ ВОДНЫЕ СЛОИ ФОРМИРОВАЛИСЬ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ МЕДИ, ТО ОНИ, ВПОЛНЕ ВЕРОЯТНО, СООТВЕТСТВУЮТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СООТНОШЕНИЯМ ИМЕННО МЕДИ. УСЛОВНО ТЕ И ДРУГИЕ СОСТОЯНИЯ ИЗОБРАЖЕНЫ В ВИДЕ ДИСКРЕТНЫХ УРОВНЕЙ В 1 И 5 ОБЛАСТЯХ. УРОВНИ ПРИМЕСИ (ОБЛАСТЬ 1) ИМЕЮТ МАЛОЕ ВРЕМЯ ЖИЗНИ, НО ИХ ЗАПОЛНЕНИЕ ВОЗМОЖНО ОТ ПРЯМОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ ВНЕШНИМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОТОКОМ (СВЕТОМ). ВОДНЫЙ СЛОЙ (ОБЛАСТЬ 5) ОКАЗЫВАЕТСЯ, ПО СУТИ ПРОЗРАЧНЫМ, А СОТВЕТСТВЕННО ВОЗБУЖДЕНИЕ В НЕМ ОБУСЛОВЛИВАЕТСЯ ТУНЕЛЛИРОВАНИЕМ ИЗ ОБЛАСТИ 1 (ПОКАЗАНО ВОЛНИСТОЙ СТРЕЛКОЙ НА РИС. 1).

ВТОРАЯ ОСОБЕННОСТЬ – БОЛЬШЕЕ ВРЕМЯ ЖИЗНИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ В ВОДНЫХ КВАНТОВЫХ СЛОЯХ (КЯ) И ПО ЭТОЙ ПРИЧИНЕ НАКОПЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ С ЕЕ ПЕРЕИЗЛУЧЕНИЕМ В ПРОХОДЯЩИЙ ПОТОК И УСИЛЕНИЕМ ЭТОГО ПОТОКА.

## ВЫПОЛНЕННЫЙ АНАЛИЗ И ЕГО РЕЗУЛЬТАТЫ ПОЗВОЛЯЮТ СЧИТАТЬ ВОЗМОЖНЫМ ОБНАРУЖЕНИЕ В ДАННОМ СЛУЧАЕ МЕДИ В ЧРЕЗВЫЧАЙНО МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ (МЕНЕЕ $10^{-17} \dots 10^{-28} \%$ ).

Экспериментальная проработка изложенных идей проводилась спектроскопией РВСП меди по методике, предложенной в работе [2].

Выделяли каждую из длин волн лазерного луча (лазер на парах меди) с помощью дифракционной решетки, пропускали через кювету с дистиллированной водой и растворами РВСП меди-алюминия, меди-никеля, никеля-алюминия. Интенсивность луча на выходе из каждой кюветы воспринималась раздельно чувствительными диодами и регистрировалась осциллографом. Результаты эксперимента показаны на рис. 2 в координатах интенсивность – длина волны.

На графиках измерялись интенсивность, положение максимума интенсивности, полуширина пика на половине его высоты. Как следует из визуальной оценки, полуширина полосы поглощения от РВСП меди меньше, а высота (интенсивность) больше (кривые 3, 4). В растворах, в которых отсутствовала медь (кривые 2, 5 – исходная среда и РВСП Ni–Al соответственно), наблюдалось увеличение полуширины полосы поглощения и уменьшение интенсивности.

Описанные исследования позволяют определять воздействие меди на водную среду по уменьшению полуширины полосы поглощения и увеличению интенсивности в положении максимума полосы поглощения (в сравнении с исходной средой) проходящего светового потока даже в присутствии подобного воздействия со стороны других элементов. Это можно интерпретировать как резонансное прохождение электромагнитного потока (с минимальным коэффициентом поглощения).



**Рис. 2** Спектр поглощения в РВСП:

1 – исходный лазерный луч; 2 – дистиллированная вода;

3 – РВСП Cu–Ni; 4 – Cu–Al; 5 – Ni–Al

Таким образом, разработан резонансный метод спектрального анализа обнаружения меди в РВСП по структурным изменениям среды. Дальнейшее исследование и развитие метода позволит осуществлять контроль на присутствие и других примесей сверхмалых концентраций (диапазон менее  $10^{-17} \%$ ).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники: Учебное пособие. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. С. 109 – 114.

2 Шелохвостов В.П., Макачук М.В., Шеришорин Д.А., Чернышов В.Н. Структура и свойства растворов высокого разбавления // Вестник Тамбовского государственного университета, 2003. Т. 8. Вып. 4. С. 698 – 701.