

Уральский Государственный технический университет УГТУ-УПИ

Финансово-промышленный Венчурный фонд ВПК

В.Б. Щербатский, В.Л. Дерунов, Е.В. Якушина, В.М. Кормышев

**ЦВЕТОВОЕ ЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ В ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ
И СВЕРХПРОВОДИМОСТИ**

Екатеринбург - 2010

СО Д Е Р Ж А Н И Е	Стр.
Введение	3
1. Новые результаты исследований свойств электронов	4
2. Новое свойство электронов - цветовой заряд	5
3. Электрон-глюонная плазма и её характеристики	8
4. Применение цветового взаимодействия электронов в расчетах химической связи	13
5. Особенности расчетной модели, базы исходных данных и решения	15
6. Результаты расчета химической связи в двухатомных молекулах	17
7. Применение расчетов на основе цветового заряда для создания новых сверхпроводящих материалов	23
8. Математическая модель ВТСП на основе мультиэлектрона	30
9. Особенности модели, базы исходных данных и решения	32
10. Адаптация математической модели и проверка адекватности	32
11. Свойства мультиэлектрона и сравнение их с известными теориями сверхпроводимости	33
12. Эффект обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП)	37
13. Мультиэлектронный механизм сверхпроводимости	38
14. Экспериментальное подтверждение физических основ нанотехнологии комнатнотемпературных сверхпроводников	39
15. Возможности применения мультиэлектронного механизма сверхпроводимости в сильноточной электронике	44
16. Технологические требования к изготовлению КТСП и ВТСП	49
ВЫВОДЫ	50
Использованные источники	51

ВВЕДЕНИЕ

В 2011 году исполнится 100 лет с момента открытия сверхпроводимости Х. Камерлинг-Онессом. Им было установлено, что ртуть при очень низкой температуре (4,15К) становится сверхпроводником со строго нулевым электрическим сопротивлением.

Преимущества сверхпроводимости, например, в энергетике очевидны, но они могут быть реализованы только в том случае, если этот эффект будет достигнут при комнатных температурах. Главной причиной, из-за которой специалисты до сих пор не могут создать такой материал, является, по мнению акад. В.Л. Гинзбурга, отсутствие ясности в понимании физического механизма этого явления.

Аналогичные затруднения испытывают и специалисты в области практической химии соединений. По мнению д.х.н. Ф.Г.Унгера (ТГУ), исследование и доказательство спиновой природы нефтяных дисперсных систем, горных пород, осадков водных систем приводит к выводам о существовании взаимодействий, выходящих за рамки Ньютоновых и Кулоновых. Обменные взаимодействия, описываемые в рамках аппарата волновой механики, не имеют конкретного аналитического выражения, что свидетельствует о недостающих элементах в выражениях энергий взаимодействия. Спиновая природа взаимодействий относится к релятивистской квантовой механике и в современной квантовой химии на указанном уровне не учитывается.

Попытка решения изложенных актуальных проблем изложена в настоящей работе. С этой целью выполнено обобщение результатов в области различных отраслей науки:

- общая теория поля;
- астрофизика;
- физика элементарных частиц;
- квантовая хромодинамика;
- квантовая химия;
- молекулярная и атомная спектроскопия;
- электроника.

В результате были получены косвенные доказательства наличия у электронов цветового заряда, что выражается в свойстве частиц образовывать связанные состояния.

Экспериментальное подтверждение новых свойств частицы на первом этапе работы было выполнено специалистами Научно-исследовательского института электронной техники (г.Воронеж). С помощью нанотехнологий на современном оборудовании ими была синтезирована слоистая структура диэлектрик-металл-диэлектрик, в которой создали специальные условия для возникновения сверхпроводимости. В результате получили металл, устойчиво сверхпроводящий в диапазоне температур 77.. 620К.

1. Новые результаты исследований свойств электронов

Электронные свойства большинства твердых тел хорошо описываются нерелятивистским уравнением Шредингера. При этом низкоэнергетические возбуждения представляют собой квазичастицы с конечной эффективной массой, то есть с квадратичным законом дисперсии $\epsilon(p) = p^2/2m^*$ (m^* – эффективная масса). Но в некоторых случаях закон дисперсии квазичастиц вблизи энергии Ферми может быть линейным $\epsilon(p) = c^* \cdot p$ ($c^* \approx 10^6$ м/с). Эти квазичастицы должны описываться релятивистским уравнением Дирака, в котором вместо скорости света c фигурирует скорость Ферми v_F . Считается, что такие безмассовые квазичастицы могут быть ответственны за квантовый эффект Холла в графене, сверхтекучесть ^3He , псевдощель в ВТСП и другие явления.

В подтверждение вышеизложенного, приведем новые результаты исследований электронов в твердом теле. В работе [1] сообщается о первом непосредственном наблюдении дираковских фермионов в графите (графене). Методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (*ARPES*) установлено, что закон дисперсии вблизи угла зоны Бриллюэна **H** действительно линейный (рис.1). Величина v_F , определенная по его наклону, составила $(0,91-0,15) \cdot 10^6$ м/с. При этом оказалось, что дираковские фермионы в графите сосуществуют с обычными квазичастицами, имеющими параболический закон дисперсии вблизи угла зоны Бриллюэна **K**.

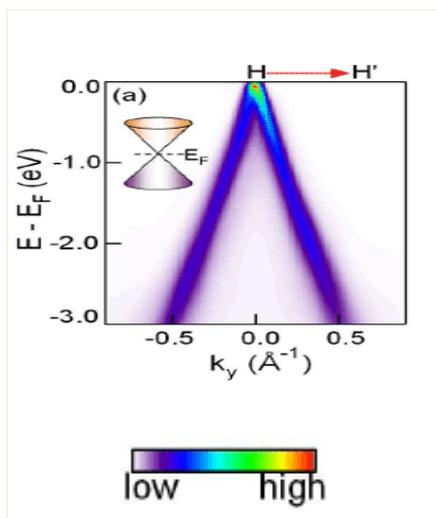


Рис.1. Экспериментальное обнаружение релятивистского эффекта электронов в твердом теле (графене)

Эти результаты не единичны, они нашли подтверждение в работах других исследователей [2,3], где отмечается, что фактически открывается новая научная страница – “релятивистская” физика твердого тела, в которой квантовые релятивистские явления, реализуемые обычно в физике высоких энергий, переносятся в обычные условия. Новые свойства электронов, неразличимые на Шредингеровском уровне, могут быть описаны релятивистским уравнением Дирака. Методика определения этих новых свойств, следствия и их практическое использование излагается в дальнейшем.

2. Новое свойство электронов - цветовой заряд

Основу методики составляет обобщение современных фундаментальных закономерностей таких разделов науки, как общая теория поля, физика элементарных частиц, квантовая хромодинамика (КХД) и квантовая химия.

Так, для физического обоснования данного метода применены новые теоретические результаты варианта общей теории фундаментальных взаимодействий элементарных частиц, составляющей математическую основу современной физики и полученные российским физиком-теоретиком А.А. Кецарисом [4]. Этот вариант основан на переходе от четырехмерного пространства-времени к пространству тензоров всех рангов с использованием алгебры Клиффорда и тензорной алгебры. В результате свойства структурных матриц, свойства квантовых уравнений и, в конечном счете, свойства фундаментальных частиц определяются свойствами тензоров при перестановке их индексов.

Если волновая функция фундаментальной частицы описывается 4- вектором вида:

$$\begin{aligned}\Psi^1 &= \varphi^1 + i\chi^1 \\ \Psi^2 &= \varphi^2 + i\chi^2 \\ \Psi^3 &= \varphi^3 + i\chi^3 \\ \Psi^4 &= \varphi^4 + i\chi^4,\end{aligned}$$

то её свойства на различных уровнях могут быть описаны с помощью диаграмм Юнга. Число клеток в такой диаграмме равно числу индексов n (рангу тензора частицы). Примеры таких диаграмм представлены на рис.2 и 3.

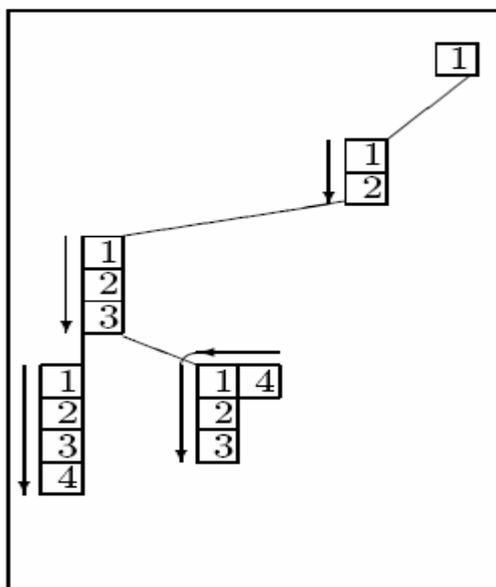


Рис.2. Лептонная ветвь диаграммы Юнга

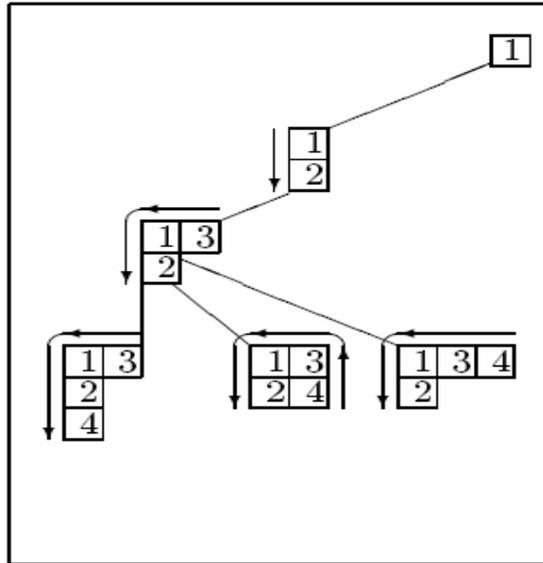


Рис.3. Кварковая ветвь диаграммы Юнга

Кварковая ветвь диаграммы Юнга (рис.3) изучена в настоящее время очень хорошо. На нижнем, релятивистском уровне, имеем три разновидности частиц, которым, в соответствии с принципами КХД, присвоены цветовые заряды: красный, зеленый и синий. Эти разновидности представлены в табличной форме:

кварки	красные	зеленые	синие
верхние	u_r	u_g	u_b
нижние	d_r	d_g	d_b

Лептонная ветвь (рис.2) построена в соответствии с результатами общеизвестной электрослабой теории взаимодействия элементарных частиц, за создание которой Ш. Глэшоу, А. Салам и С. Вайнберг удостоены Нобелевской премии (1979г.). Теория отражает взаимосвязь свойств, описываемую тензорами лептонов (например, электрона e^- и электронного нейтрино ν). Лептоны на нижнем, релятивистском уровне, когда в алгебру включаются тензоры четвертого ранга, разделяются на две цветовые разновидности:

лептоны	белые	черные
верхние	ν_w	ν_b
нижние	e_w	e_b

Так как теория электрослабого взаимодействия частиц подтверждена экспериментально (CERN, Швейцария), то из симметрии тензоров 4 ранга с практической необходимостью следует, что лептоны и, в частности, электроны, двухцветны. Следовательно, в реальности, эти частицы имеют черный или белый цветовые заряды и подчиняются сильному цветовому взаимодействию.

Естественно, обозначения указанных цветов, как и всех цветовых зарядов элементарных частиц в КХД, носят условный характер.

Еще раз отметим, что это новое свойство электронов проявляет себя только на релятивистском, Дираковском уровне. На обычном, Шредингеровском уровне, на котором, в частности, основаны квантовая механика твердого тела и квантовая химия, цвета вырождаются и черные и белые электроны становятся неразличимыми.

Изложенные физические представления подтверждаются уравнениями Дирака для двухцветных частиц [4]:

– черных электронов (e_c)

$$a \cdot B \cdot \partial_4 \cdot \varphi_2 + (i \cdot A \cdot \partial_1 + I \cdot \partial_2 + i \cdot B \cdot \partial_3) \cdot \varphi_2 = \frac{1}{R_{\text{compt}}} \cdot \varphi_1 ;$$

– белых электронов (e_b)

$$i \cdot \partial_4 \cdot \varphi_2 + i \cdot \sigma^a \partial_a \cdot \varphi_2 = \frac{1}{R_{\text{compt}}} \cdot \varphi_1 .$$

Здесь $\varphi_{1,2}$ – действительная часть комплексной волновой функции электронов (ψ);

$\partial_{1..4}$ – операторы частного дифференцирования по координатам (1,2,3) и времени (4);

σ^a, ∂^a – матрица Дирака и её оператор частного дифференцирования;

a – ускорение;

A, B, I – индексы диаграмм Юнга ;

R_{compt} – комптоновский радиус электрона.

Таким образом, уравнения для черных и белых электронов имеют аналогичный вид. Установлено, что в них в качестве определяющего размера частицы необходимо использовать комптоновский радиус электрона.

Применение цветового заряда, как нового физического свойства электрона, равноценно введению для него дополнительного квантового числа. Поэтому цвет должен учитываться путем использования в расчетах гиперзаряда (Y) и изотопического спина ($I=(i_1+i_2)$). Например, для трех возможных вариантов цветового взаимодействия частиц $e_b e_b$, $e_b e_c$, $e_c e_c$, согласно табл.1, имеем, соответственно, $I = 1, 0, -1$.

Таблица 1
Значения изотопического спина для e

Частица	Число частиц в мультиплете	Изотопический спин I	Цветовой заряд	Проекция изоспина
e_b	2	$1/2$	$+1/2$	$+1/2$
e_c			$-1/2$	$-1/2$

С учетом наличия у электронов механического спина ($S = +1/2\hbar; -1/2\hbar$) они могут образовывать состояния $\{I=0, S=1\}$ и $\{I=0, S=0\}$. Если такие электроны находятся на электронных оболочках атомов, то их потенциал взаимодействия (притяжения) в первом случае становится существенно больше, чем во втором, а общая энергия меньше [5]. В итоге, например, заполнение электронных оболочек p,d,f происходит вначале частицами с одинаковым спином S, но разным цветовым зарядом. Эта закономерность имеет место в Периодическом законе Д.И. Менделеева и соответствует известному эмпирическому правилу Хунда.

Статистический вес электронов с черным и белым цветовыми зарядами, определяемый значением I одинаков и равен $1/2$. Поэтому в Природе количество таких частиц также одинаково. Статистически равно и количество атомов химических элементов, имеющих черные и белые электроны на валентных оболочках. Поэтому, в любом выбранном объеме всегда имеются электрически нейтральные атомы, но с валентными электронами с противоположным по знаку цветом. Такие атомы, благодаря цветовому взаимодействию притягиваются и могут образовывать, например, химическую связь.

Нобелевский лауреат А. Салам просчитал все последствия введения цветового заряда для электрона и совместно с Дж. Пати успешно использовал его в своей теории электрорядерных взаимодействий [6].

3. Электрон-глюонная плазма и её характеристики

В КХД частицы, имеющие цветовой заряд взаимодействуют при помощи физического поля, состоящего из промежуточных частиц – глюонов, также имеющих цвет. Глюоны выступают как кванты векторного поля, обеспечивающего калибровочную цветовую симметрию. Подтверждение существования глюонов получено в экспериментах с глюонными струями в 1979 г. В случае двухцветных частиц каждый глюон имеет удвоенный, по сравнению с электроном, черно-белый заряд, необходимый для выполнения закона сохранения заряда при цветовом взаимодействии. Закономерности двухцветного взаимодействия частиц аналогичны закономерностям их электростатического взаимодействия. Так как электроны и глюоны относительно друг друга находятся в свободном состоянии, то они образуют плазменное состояние, характерное для заряженных частиц. Такая двухкомпонентная и двухцветная электрон-глюонная плазма (ЭГП) является частным, вырожденным по цвету, случаем трехцветной кварк-глюонной плазмы, рассматриваемой в КХД.

Плазма в общем случае характеризуется широким набором изученных физических свойств [7]. Здесь выбраны те свойства, которые используются в примерах расчета химической связи и сверхпроводимости.

Концентрация частиц в ЭГП зависит от определяющего размера и находится по выражению:

$$n_g = \frac{A}{V} = \frac{3 \cdot A}{4 \cdot \pi \cdot A \cdot R_{comp}^3} \quad (1)$$

где: A , V – количество частиц и занимаемый ими объем, соответственно.

В ЭГП частицы испытывают непрерывные колебания с частотой Ленгмюра (ω_L), определяемой по выражению, приведенному ниже.

Если на ЭГП воздействует магнитное поле, то возникает прецессия Лармора и частицы начинают вращаться, приобретая механический и магнитный момент M , определяемый массой частицы m , скоростью v и радиусом окружности R_l ($M=m \times v \times r$) (рис.4а). Вращение происходит вокруг магнитных силовых линий B или вокруг общей оси, когда взаимодействуют электроны, имеющие собственные цветовые и электрические заряды. Колеблющиеся с разными

цветовыми зарядами частицы способны образовывать связанные состояния, в результате чего, в ЭГП может возникать мультичастица.

В настоящей работе такую частицу, состоящую из двух и более колеблющихся или вращающихся около общего центра электронов с разными цветовыми зарядами, авторы назвали **мультиэлектроном (me)**.

В ЭГП наблюдается рассеивание одновременно движущихся и колеблющихся частиц (рис.4б). Рассеивание зависит от прицельного расстояния r , которое меняется, если центральная частица (например, ядро атома) также совершает колебания. В итоге рассеивание носит диффузный характер.

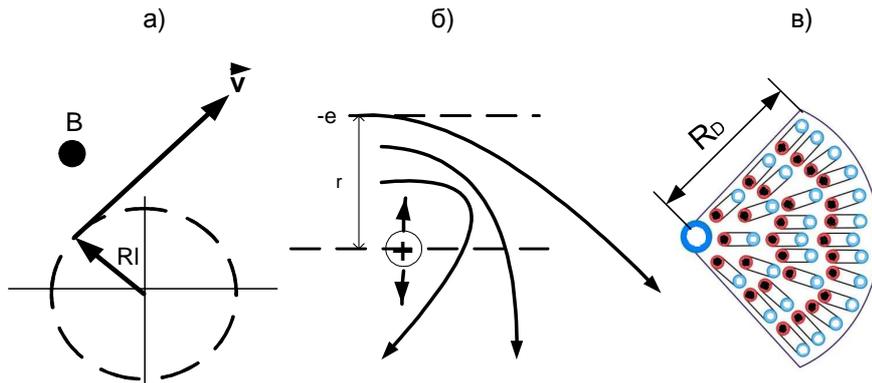


Рис.4. Вращение (а), рассеивание (б) и экранирование (в) частиц в ЭГП (обозначения в тексте).

В ЭГП уравнения распределения потенциала от единичного заряда (цветового или электрического) и его колебаний формально имеют один и тот же вид [7]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + a \cdot \varphi(r) = 0. \quad (2)$$

Здесь φ – функция потенциала (смещения заряда);

r - радиус;

a – константа, принимающая значения:

1) в случае распределения потенциала:

$$a = -1/(R_D)^2, \text{ где } R_D = \left(\frac{4 \cdot \pi \cdot Z_e^2 \cdot n_e}{k \cdot T_e} + \frac{4 \cdot \pi \cdot Z_g^2 \cdot n_g}{k \cdot T_g} \right)^{-1/2}; \quad (3)$$

2) для смещения заряда при его колебаниях:

$$a = \omega_L^2 = \frac{4 \cdot \pi \cdot n_e \cdot Z_e^2}{m_e}, \quad (4)$$

где R_D – радиус Дебая для экранирования в ЭГП (рис.4в);

ω_L – частота колебаний Ленгмюра;

n_e, m_e, n_g – концентрация, масса электронов и глюонов, соответственно;

Z_e, Z_g – цветовые заряды электронов и глюонов, соответственно;

T_e, T_g – температуры электронов и глюонов, соответственно;
 k – константа Больцмана.

При граничных условиях $\varphi(0)=\lambda$ и $\varphi(\infty) = 0$ уравнение (1) имеет решение:

$$\varphi = \lambda \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right). \quad (5)$$

Зависимость (5) формально совпадает с формулой, описывающей потенциал сил отталкивания некоторого центрального поля и применяемой при расчете ионной связи в кристаллах [8]. Константы λ и ρ в (5) определяют величину отталкивающей силы и эффективные размеры области отталкивания, соответственно.

Совместно с Законом Кулона, который описывает притяжение, выражение (5) составляет известный потенциал Борна-Майера, часто применяемый для расчета химической связи [8]:

$$\varphi = -\frac{q_1 q_2}{r} + \lambda \exp\left(\frac{r}{\rho}\right), \quad (6)$$

где q_1, q_2 – эффективные заряды частиц.

Для двух взаимодействующих и экранированных глюонами зарядах электронов в ЭГП данное решение записывается в виде потенциала Юкавы [7]:

$$\varphi = \frac{q_1 q_2}{r} \cdot \exp\left(-\frac{r}{R_u}\right), \quad (7)$$

где R_u – радиус экранирования Юкавы (в ЭГП $R_u = R_D$).

Поля взаимодействий, описываемые уравнениями (6) и (7) имеют центральный характер, поэтому их можно использовать совместно.

Известна работа, в которой предлагается использовать потенциал Юкавы для расчета химической молекулярной связи [9].

С помощью данных закономерностей были определены основные характеристики ЭГП в атомах с целью их использования в расчетных примерах химической связи и сверхпроводимости. Эти характеристики приведены на рис.5 и в табл.2 и 3.

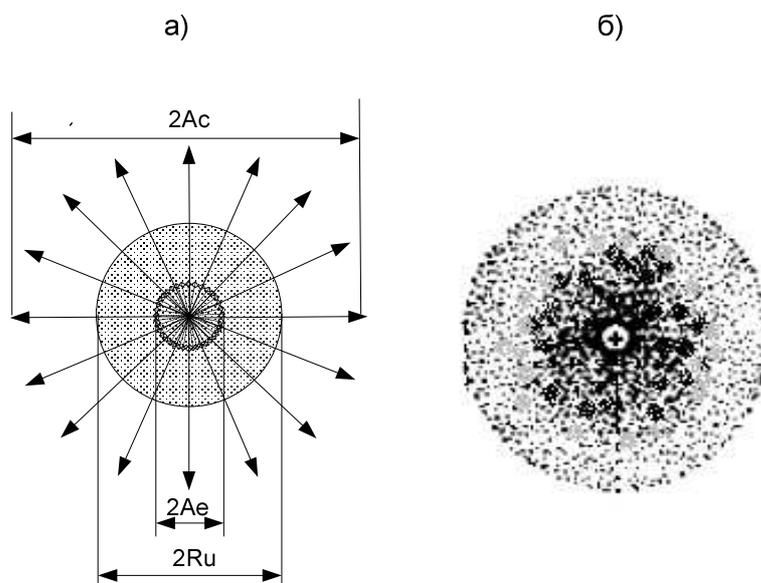


Рис.5. Характеристики электрона в ЭГП и атоме Н:

а) A_c – амплитуда колебаний цветового заряда;

A_e – амплитуда колебания электрического заряда (для сравнения);

R_u – радиус экранирования в ЭГП (равен для зарядов: цветового – радиусу Дебая в (R_D); электрического – комптоновскому радиусу электрона (R_{comp}));

б) диффузный характер колебаний 1S электрона в атоме Н (соответствует представлениям квантовой механики).

Таблица 2
Параметры ЭГП

Параметр	n_e	n_g	T_e	T_g	Z_e	Z_g	$R_u=A_c$
размерность	шт/см ³	шт/см ³	эВ	МэВ	доли е	доли Z_e	см
Среднее значение в те	$3,83 \cdot 10^{19}$	$2,22 \cdot 10^{24}$	13,25	0,0024	7,33	14,66	$3,79 \cdot 10^{-9}$
В атоме Н	$9,22 \cdot 10^{21}$	$2,22 \cdot 10^{24}$	13,59	0,0024	7,636	15,27	$5,29 \cdot 10^{-9}$
В ядре атома	$7,07 \cdot 10^{37} *$	$7,07 \cdot 10^{37}$	$46 \cdot 10^6 *$	140	2,531	5,062	$1,5 \cdot 10^{-13}$

*) – значение для нуклонов в КХД даны для сравнения.

Таблица 3
 Параметры колебаний частиц в ЭГП

Параметр	Частота	Длина волны	Амплитуда	Энергия
	ω_L	λ	A	E
размерность	рад/сек	см	см	эВ
Цветовой заряд электрона	$4,13 \cdot 10^{16}$	$4,56 \cdot 10^{-6}$	$5,29 \cdot 10^{-9}$	$6,94 \cdot 10^{-4}$
Электрический заряд электрона	$3,9 \cdot 10^{20}$	$2,4 \cdot 10^{-10}$	$8,3 \cdot 10^{-12}$	$3,4 \cdot 10^{-5}$
Протон в Н	$2,8 \cdot 10^{22}$	$6,71 \cdot 10^{-12}$	$1,5 \cdot 10^{-13}$	$3,19 \cdot 10^8$

Из полученных данных следует, что, например, атом Н в основном состоянии 1S представляется как динамическая система, состоящая из электрона и протона, колеблющихся с различными частотами в ЭГП. Электростатическое кулоновское взаимодействие обеспечивает устойчивость этой системы, а рассеивание электрона на ядре определяет диффузный характер и отсутствие орбитального движения в электронной оболочке (см. рис.5б), что имеет место в реальности. В магнитном поле у электрона появляется механический вращающий момент импульса М, известный как спин S. Амплитуда цветковых колебаний электрона A_c определяет размер атома Н и численно совпадает со значением радиуса Бора (табл.2). В общем случае, параметры колебаний в ЭГП рассчитываются на основе волновой функции ψ , которая по физическому смыслу является амплитудно-фазовой характеристикой этих колебаний с аргументом в виде координат частицы. Важно, что величина $|\psi|^2$ позволяет определить плотность распределения наведенного электрического заряда электронов, которую необходимо задавать в расчетах химической связи в виде величин q_1, q_2 .

Полученные результаты в полной мере соответствуют основополагающим принципам квантовой механики. Известно предположение Луи де Бройля о том, что свободно движущемуся электрону с импульсом p и энергией E можно сопоставить волну с волновым вектором k и частотой ω , причем: $p = \hbar k$ или $p = \hbar / \lambda$ и $E = \hbar \omega$. Постоянно колеблющаяся в хромоплазме частица с большой точностью может быть описана этими зависимостями, как волна. Свойства ЭГП позволяют понять причину возникновения этих колебаний и, следовательно, волновых свойств частиц.

Уточняется также физическое понимание соотношения неопределенности Гейзенберга: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$. Как известно, данное соотношение показывает принципиальную невозможность зафиксировать одновременно импульс и координаты движущейся частицы. Это следует из того, что хромоплазменные колебания в микромире непрерывны и физически неустранимы.

Вместе с этим, действие известных классических законов взаимодействия между колеблющимися частицами сохраняется. Из этого вытекает необходимость комплексного рассмотрения физических процессов для правильного выбора необходимого сочетания квантовых и классических закономерностей для решения поставленных задач.

В существующих квантово-механических расчетах такое сочетание не используется. Необходимая точность расчетов, как известно, достигается методом подгонки этих расчетов под известный заранее результат. Подгонка осуществляется путем выбора, например, подходящего вида волновой функции и эффективных зарядов (методы Гайтлера-Лондона-Слэйтера-Полинга или Хунда - Герцберга-Малликена). В результате теряется предсказательность расчетов, которую необходимо иметь при создании новых материалов и химических соединений.

Предлагаемая в настоящей работе методика не отрицает квантово-механического подхода в расчетных исследованиях. Однако эти расчеты должны быть с необходимостью дополнены в постановочной части новыми взаимодействиями между электронами, а в перспективе должен быть осуществлен переход на Дираковский уровень для учета релятивистских эффектов.

Приближенная оценка новых свойств и взаимодействий между электронами изложена на примере определения химической связи и расчете сверхпроводимости, как актуальных задачах квантовой химии и физики твердого тела.

4. Применение цветового взаимодействия электронов в расчетах химической связи

Физическая постановка и математическая формулировка задачи расчета химической связи выполнены упрощенными и идеализированными. Однако идеализация и упрощения являются общепринятыми и апробированными на практике, что позволяет с достаточной точностью выполнять необходимые расчеты основных параметров химической связи как для известных, так и для новых материалов.

Физическая постановка задачи. Основные этапы образования химической связи на примере молекулы H_2 показаны на рис.6. В отдельном положении атомы H электрически нейтральны, но содержат электроны противоположных цветовых зарядов (рис.6а). Поэтому атомы взаимно притягиваются и при их сближении электроны на валентных оболочках возбуждаются. Волновые функции частиц расщепляются с образованием узлов в распределении электронной плотности, которая определяет распределение электрического заряда в молекуле (рис.6б,г). В результате электроны находятся одновременно в двух относительно автономных состояниях: на электронных оболочках образовавшихся положительных ионов, и в виде me , между ионами. Возникшая молекулярная химическая связь представляет собой электростатическую ионную связь между атомами-ионами и me (рис.6в). Так как цветовое взаимодействие, по

сравнению с электрическим взаимодействием, является короткодействующим, то оно осуществляется в молекуле только внутри me .

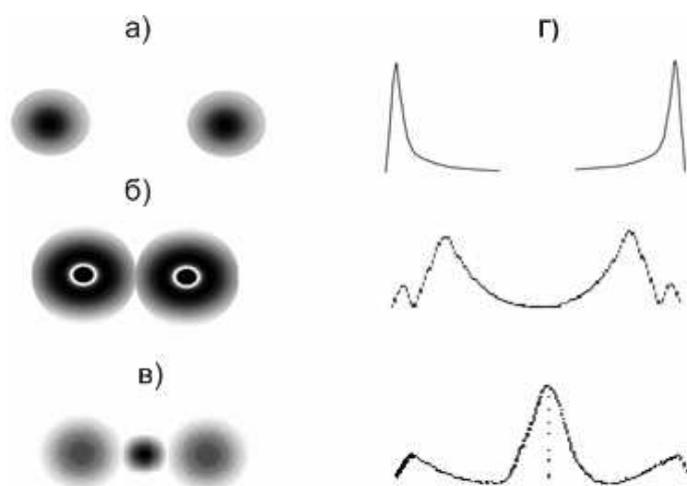


Рис.6. Этапы образования молекулы H_2 : а) исходное состояние атомов H в состоянии $1S$; б) сближение под действием силы притяжения цветковых зарядов электронов и переход атомов в возбужденное состояние $2S$; в) возникновение me и образование молекулы H_2 с помощью ионной связи; г) изменение волновой функции в виде электронной плотности вероятности, соответствующее этапам образования молекулы.

Изложенной физической постановке соответствует расчетная схема химической связи, приведенная на рис.7.

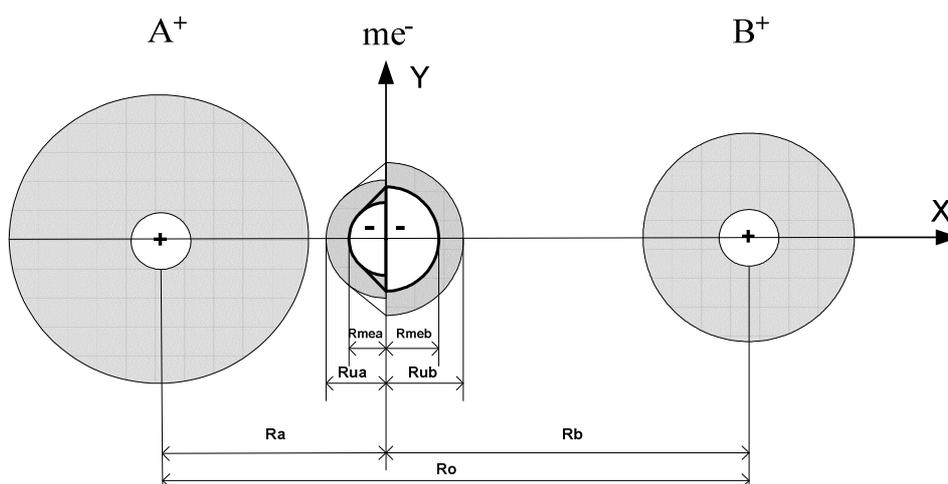


Рис.7. Расчетная схема химической связи.

Математическая формулировка задачи. В соответствии с расчетной схемой, химическую связь описали следующей системой уравнений:

$$E_{\text{пост}} + E_{\text{кул}} + E_U + E_{\text{вращ}} + E_{\text{колеб}} + E_{\text{возмущ}} = E = -E_{\text{св}}; \quad (8)$$

$$\left(\frac{q_{me}}{2}\right)^2 \cdot \left(-Cu_{a,b} \frac{1}{Rme_{a,b}} \exp\left(-\frac{Rme_{a,b}}{Ru_{a,b}}\right) + \frac{1}{Rme_{a,b}} + \frac{n^2 \rho_{me}}{Rme_{a,b}^2}\right) + q_{me} \cdot q_{a,b} \left(\frac{1}{R'_{a,b}} - \frac{\rho_{a,b}}{R_{a,b}^2}\right) = E_{i_{a,b}} / 2Ry; \quad (9)$$

$$q_{a,b} \cdot q_{me} \cdot \left(-\frac{1}{R_{a,b}} + \frac{Rme_{a,b}}{R_{a,b}^2}\right) + \frac{q_a \cdot q_b}{R_0} = -E_{a,b} / 2Ry; \quad E_d = \frac{|-E_{a,b}|_{\min}}{2Rya} K_q \quad (10)$$

и вспомогательными зависимостями

$$R_0 = R_a + R_b, \quad R'_{a,b} = \sqrt{Rme_{a,b}^2 + R_{a,b}^2 - 2Rme_{a,b}R_{a,b} \cos \alpha}, \quad (11)$$

$$|-q_{me}| = (q_a + q_b), \quad \frac{dE_{d,i}}{dR} \Big|_{R=Rme,R_0} = 0, \quad E_i = E_d + E_{ii} + E_A. \quad (12)$$

Принятые обозначения: $E = -E_{\text{св}}, E_{\text{пост}}, E_{\text{колеб}}, E_{\text{кул}}, E_U, E_{\text{вращ}}, E_{\text{возмущ}}, E_d, E_i$ – энергия связи, поступательная, колебательная, Кулона, Юкавы, вращательная, возмущения, диссоциации и ионизации молекулы и те соответственно; E_{ii} – энергия ионизации атомов; $E_{d,i}$ – энергия диссоциации и ионизации, текущие значения, соответственно; E_A – энергия сродства к электрону молекулы; $E_{i_{a,b}}$ – энергия ионизации те со стороны ионов A^+ и B^+ , соответственно; $|E_{a,b}|_{\min}$ – энергия диссоциации гетероядерной молекулы; R – радиус, текущее значение; $Ru_{a,b}, Cu_{a,b}$ – радиус и константа Юкавы в те относительно ионов A^+ и B^+ , соответственно; $Rme_{a,b}$ – классический радиус те относительно ионов A^+ и B^+ , соответственно; $r_{b,a,b}$ – радиус Бора для те относительно ионов A^+ и B^+ , соответственно; R_0 – расстояние между ионами; $R_{a,b}, R'_{a,b}$ – расстояние между те и ионами A^+ и B^+ по оси X и Y , соответственно; $q_{me}, q_{a,b}$ – эффективные электрические заряды те, ионов A^+ и B^+ , соответственно K_q – координационное число; a – постоянная Маделунга; Ry – постоянная Ридберга; $\rho_{me,a,b}$ – эффективный радиус области отталкивания для мультиэлектрона, ионов A^+ и B^+ , соответственно; α – угол между осью X и осью Y ; n – главное квантовое число.

5. Особенности расчетной модели, базы исходных данных и решения

В рассмотренной физической постановке, которая отличается от известных тем, что использована двумерная система координат (X, Y) для разделения межэлектронных взаимодействий в те и взаимодействий между остовами атомов и электронов. Определяющими является компенсация кинетического колебательного момента валентных e^- их цветовым притяжением и электростатическое взаимодействие те и ионов, поэтому расчеты производили в упрощенном варианте, приняв в (8) $E_{\text{пост}} = E_{\text{вращ}} = E_{\text{возмущ}} = 0$. В основе модели лежат универсальные потенциалы Юкавы и Кулона. Уравнение (9) описывает конфайнмент (удержание) короткодействующими силами Юкавы, возникающий при сжатии электронов в те ионами. Зависимость (10) отражает классическую

ионную связь, образующуюся из-за компромисса между кулоновской силой притяжения и силой отталкивания центрального поля, создаваемого m_e в молекуле на расстоянии R_{me} . Радиусы R_{me} и R_0 являются равновесными, определяющими размеры молекулы и местоположение m_e в ней. При $R_a=R_b$ система (9)–(10) описывает 100% ковалентную химическую связь. Таким образом, ковалентная связь представляется как частный случай ионной связи с участием m_e . Систему можно использовать и для расчета кристаллических решеток, так как в (10) введено соотношение K_q/α . В последнем случае модель дополняется зависимостью, которая в относительной форме связывает параметры m_e с размерами кристаллической решетки при её термическом расширении [10]. Численная величина $\rho_{a,b}$ представляет значение радиуса Бора для валентных электронов ионов A^+ и B^+ .

Особо следует остановиться на определении константы цветового взаимодействия α_s и, соответственно, C_u . Вырождение цвета в ЭГП и применение двухцветной схемы вместо трехцветной, предоставляет возможность рассматривать эффекты при расчетах схемы антиэкранировки в глюонной среде как пертурбативные, так как величина $\alpha_s < 1$ ($\alpha_s \sim 0,33$). Поэтому для инфракрасной области КХД, характерной для больших расстояний, здесь применено решение в однопетлевом приближении, которое описывается известной формулой [11]:

$$\alpha_s(r) = \frac{4\pi}{\left(11 - \frac{2n_f}{3}\right) \cdot LN\left(\frac{\Lambda^2}{r^2}\right)}, \quad r^2 \ll \Lambda^2, \quad (13)$$

Константа C_u рассчитывалась как отношение: $C_u = \frac{\alpha_s}{\alpha_e}$. (14)

Здесь приняты обозначения: α_s , α_e – бегущие константы цветового и электромагнитного взаимодействий; n_f – число типов кварков (лептокварков); r – текущее расстояние; Λ – масштабный фактор, определяющий область цветового взаимодействия (по аналогии с КХД принято $\Lambda = \rho / \alpha_e$, $n_f = 12$).

Константа Юкавы $C_u = Z_e^2/e^2$ показывала, во сколько раз силы Юкавы превышают силы Кулона на расстоянии конфайнмента электронов в m_e .

Радиус экранирования $R_u=R_D$, определяемый электронной концентрацией в m_e ($n_e=q_{me}/V_{me}$), находился по выражению (3). Так как R_0 и E_d функционально связаны согласно (12), то система двух уравнений (9) и (10) содержит два неизвестных R_{me} и R_0 и, следовательно, имеет решение.

Использованная в расчетах база данных, содержала общеизвестные и доступные сведения о физико-химических свойствах химических элементов и молекул, приведенных в справочниках и учебных пособиях [12,13]. Решение системы уравнений производили численным методом последовательных приближений с помощью компьютерной программы, составленной на основе процедур Excel. Сходимость решения обеспечивалась заданием $q_{a,b}$, которые определяли значение R_{me} , удовлетворяющее обоим уравнениям (9)-(10) с минимально возможной относительной погрешностью Δ .

6. Результаты расчета химической связи в двухатомных молекулах

Результаты определения основных параметров молекулы водорода приведены на рис.8. Здесь и далее на графиках даны зависимости энергии связи $E_{св}$ от текущего значения R . Кривые (1) построены для ядер ионов вдоль оси X . Значение и расположение их минимума определяет энергию диссоциации E_d и размер молекулы R_0 . Кривые (2) построены для me^- вдоль оси Y . Значение и расположение их минимума определяет энергию ионизации E_i и Rme .

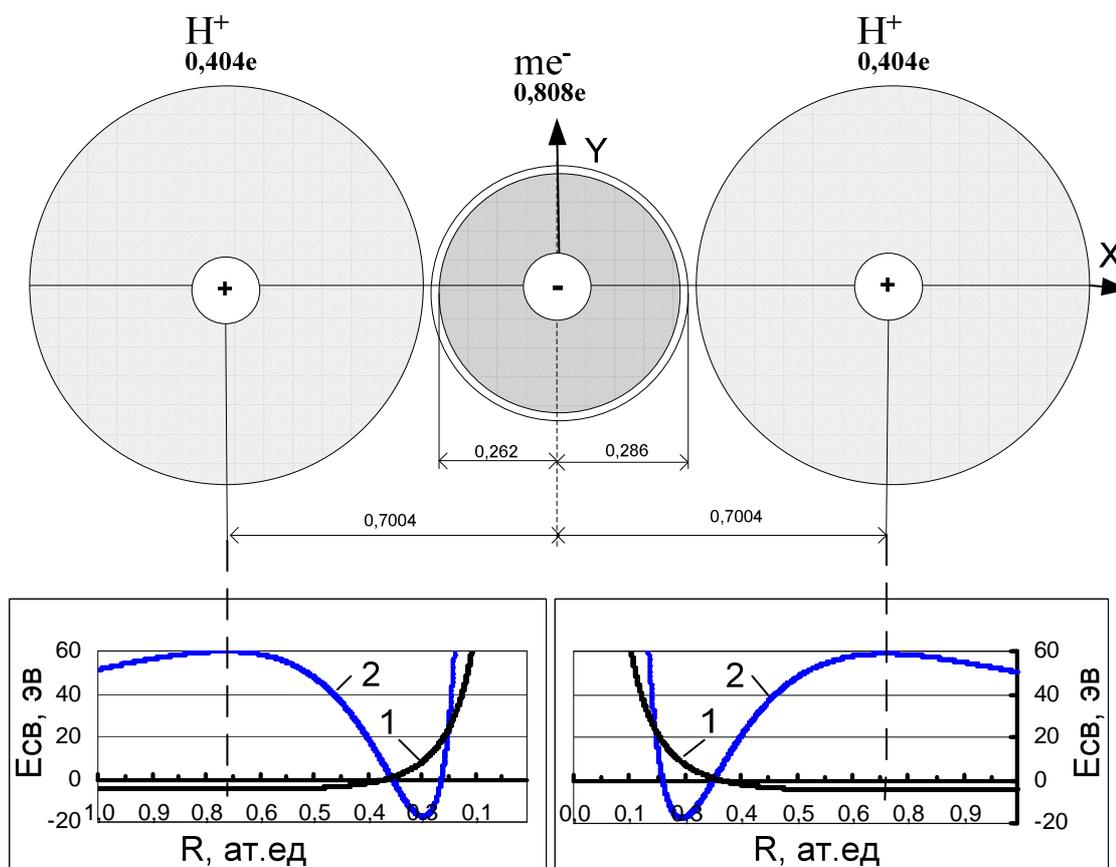


Рис.8. Расчетные параметры молекулы H_2 (обозначения в тексте).

Полученные зависимости отражают симметричный характер химической связи в H_2 , что соответствует её ковалентному виду.

Значение энергии связи для me^- зависит также от угла α между расчетными осями X и Y . Поэтому общая картина взаимодействия me^- с ионами в молекуле H_2 в объемном виде представлена на рис.9. Она соответствует современному энергетическому подходу в анализе химической связи, который позволяет найти наиболее слабое место в химическом соединении, определяемое минимальным значением энергии связи в её пространственном распределении в молекуле.

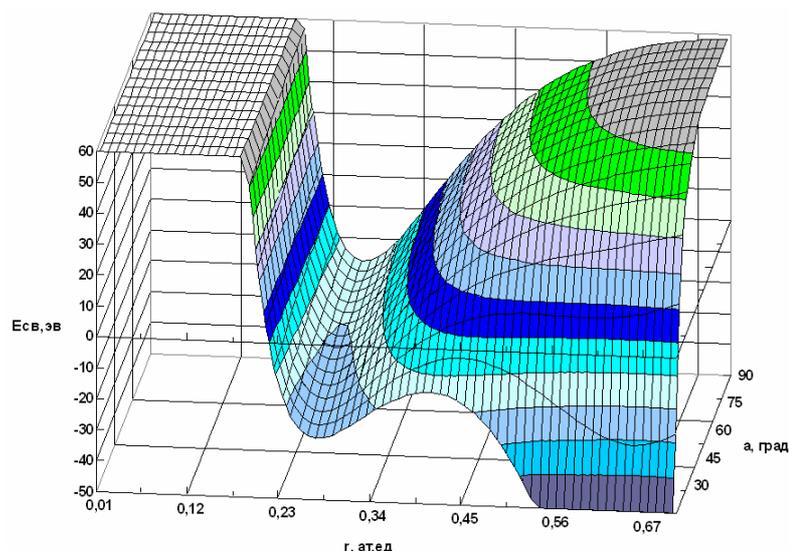


Рис.9. Зависимость энергии связи me от расстояния и угла между расчетными осями в H_2 .

Молекула H_2 является простейшей. Однако до сих пор не существовало объяснения, почему спектр молекул H_2 является очень сложным, внешне не имеет характерной для молекулярных спектров полосатой структуры, а выглядит как частокол хаотически расположенных линий различной интенсивности (рис.10). По этому поводу, проф., д.ф-м.н. Лавровым Б.П. (СПбГУ) отмечено [14], что этот спектр до сих пор отождествлен не полностью. Зарубежными авторами также многие линии идентифицированы неоднозначно [15, 16].

Полученные в настоящей работе данные о наличии во внутренней структуре H_2 колеблющейся и вращающейся мультичастицы (me) помогли произвести уточнение происхождения некоторых спектральных линий молекулы. Для этого, пользуясь методикой М.А. Ельяшевича [17], определили для me силовую колебательную постоянную $K = 2,82 \cdot 10^8$ дин/см. и вращательную постоянную $B = 2984,93$ см $^{-1}$ (для сравнения, для молекулы H_2 постоянные: $K=5 \cdot 10^5$; $B = 60$).

Было установлено, что основной спектр me находится в далекой ультрафиолетовой области H_2 и поэтому еще не исследовался. Однако высоковозбужденные состояния частицы содержатся в основном спектре молекулы H_2 , что отмечено на рис.10 жирными линиями (2), (3), (4) в её триплетных состояниях:

$${}^3\Sigma_g^+ \quad {}^3\Sigma_u^+ \quad {}^3\Pi_u$$

Таким образом, спектральный анализ косвенно подтвердил присутствие мультичастицы в структуре молекулы H_2 .



Пирс, Гайдон Идентификация молекулярных спектров, 1949

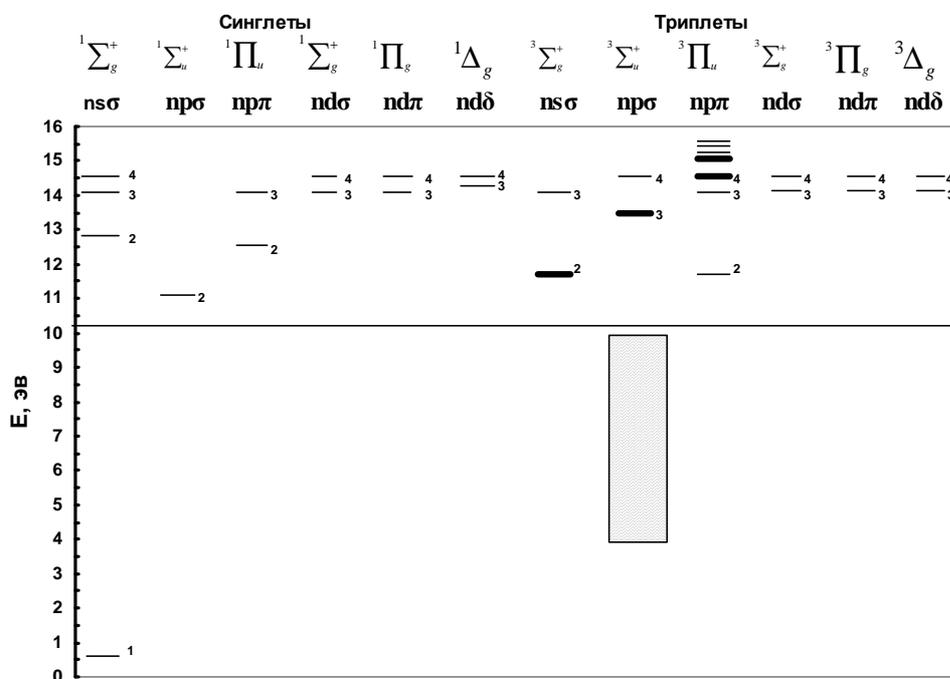


Рис. 10. Идентификация те в спектре молекулы H₂.

В таблицу 4 сведены результаты расчета химической связи для других гомоядерных молекул. Они свидетельствуют о том, что данный метод является обобщающим и может быть применен в случае кратной связи, имеющей место в O_2 и N_2 , а также для молекулярных кристаллов.

Таблица 4
Результаты расчета гомоядерных молекул

Молекула	Параметры молекулы						Параметры me^- в молекуле				
	n	$R_0/2$	E_D	E_i	E_A	$+q_i$	$R_u=R_{me}$	Cu	$-q_{me}$	n_{me}	Δ
	-	ат.ед	эВ	эВ	эВ	доли e	ат.ед	-	доли e	шт/см.куб	%
H_2	1	0,7004	-4,75	-17,62	0,72	0,404	0,262	45,85	0,808	$1,05 \cdot 10^{20}$	17,4
F_2	1	1,3398	-1,60	-15,57	3,45	0,324	0,502	51,16	0,648	$6,08 \cdot 10^{18}$	26,5
Cl_2	1	1,878	-2,48	-11,86	3,63	0,478	0,704	54,44	0,956	$9,1 \cdot 10^{17}$	19,7
Br_2	1	2,158	-1,97	-10,39	3,42	0,456	0,865	56,65	0,912	$3,3 \cdot 10^{17}$	15,1
I_2	1	2,519	-1,54	-8,82	3,17	0,436	1,007	58,41	0,872	$1,6 \cdot 10^{17}$	15,4
O_2	2	1,1433	-5,20	-17,34	1,47	0,539	0,428	49,75	1,079	$3,17 \cdot 10^{20}$	18,0
N_2	3	1,0393	-9,90	-24,38	0,05	0,710	0,389	48,94	1,420	$3,66 \cdot 10^{21}$	16,5
Ne^*	1	4,1985	-0,02	-0,02	-	0,064	1,57	64,24	0,129	$1,31 \cdot 10^{16}$	13,5

*)-молекулярный кристалл.

Для этого в расчетах необходимо учесть изменение ρ_{me} для O_2 и N_2 в me , так как в последнем случае изменяется приведенная масса электронов, составляющих me .

Полученное равенство $R_u=R_{me}$ является подтверждением мезонной теории Х. Юкавы на молекулярном уровне [26].

В качестве примера экспериментального подтверждения расчетной картины молекулярной связи на основе мультиэлектрона приведены результаты современных лазерных измерений электронной плотности и волновой функции молекулы N_2 (рис.11). Эти результаты качественно подтверждают наличие электронного облака, в виде мультиэлектрона, между двумя атомами N и характер взаимосвязи между ними, примененный в настоящем методе.

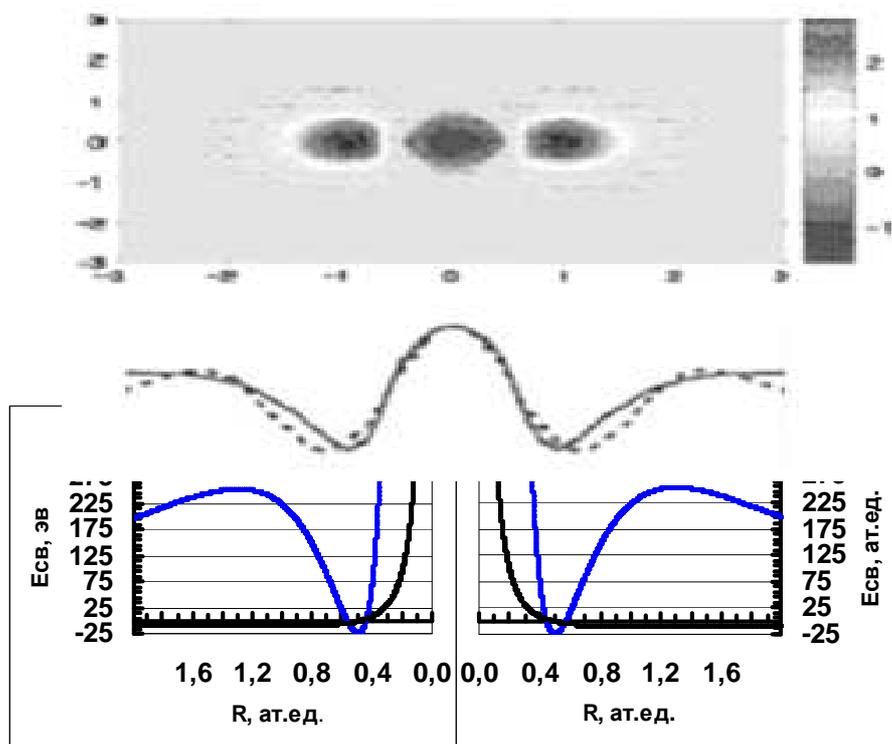


Рис.11. Экспериментальное распределение электронной плотности и волновая функция в двухатомной молекуле (N_2) по данным [18].

Расчет химической связи для гетероядерной двухатомной молекулы произведен на примере молекулы HF. Результаты расчета представлены в таблице 5 и на рис.9.

Таблица 5
Результаты расчета молекулы HF

Ион	Параметры молекулы					Параметры m_e^- в молекуле			
	$R_{a,bO}$	E_D	E_i	E_A	q_i	R_{a,bm_e}	N_e	q_{m_e}	Δ
	ат.ед	эВ	эВ	эВ	доли e	ат.ед	шт/см.куб	доли e	%
H^+	2,3180	-5,86	-19,83	3,45	+0,904	0,882	$2,46 \cdot 10^{18}$	-1,808	1,13
F^+	1,1460	-32,45				0,263	$1,69 \cdot 10^{20}$		2,76

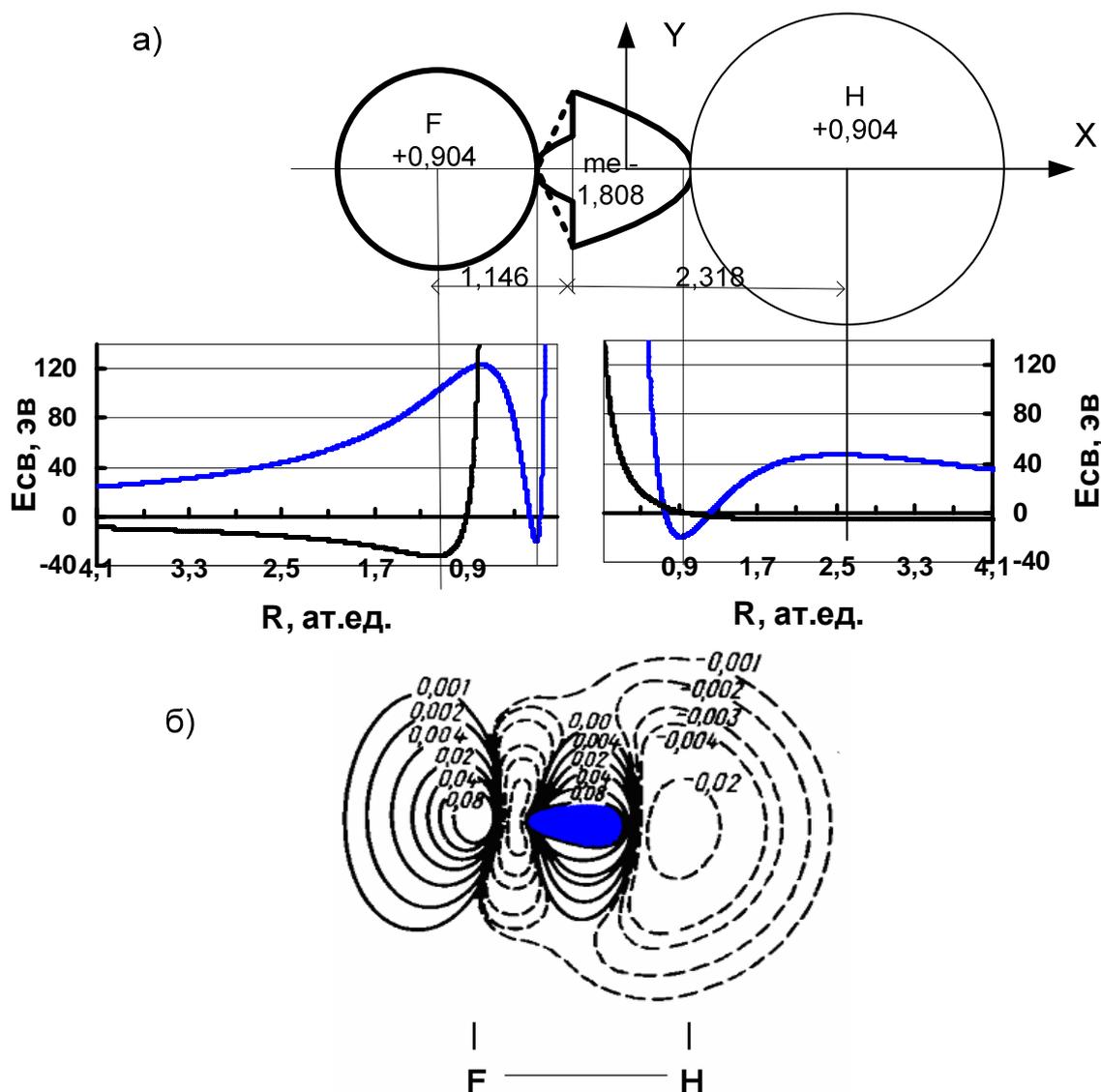


Рис.9. Расчетные параметры для молекулы HF:

- а) – основные геометрические размеры молекулы и зависимости энергии связи и ионизации от расстояния;
- б) распределение разностной электронной плотности на основе известных квантовомеханических расчетов[19] (приведено для сравнения).

Химическая связь в молекуле HF имеет, по сравнению с ковалентной связью, несимметричный характер. Причиной этого является разная электроотрицательность атомов F и H, что приводит к объемной деформации и смещению электронов m_e по оси X к иону F^+ . В сумме заряд иона F^+ и m_e отрицателен и равен $-0,904e$, а иона водорода H^+ – положителен ($+0,904e$). Поэтому молекула HF является характерным примером ионной связи.

Отметим, что вдоль оси X на границах всех молекул имеется остаточный отрицательный потенциал, соответствующий силам притяжения. Он, наряду с цветовым притяжением, обеспечивает межмолекулярное взаимодействие, известное как взаимодействие Ван-Дер-Ваальса.

7. Применение расчетов на основе цветового заряда для создания новых сверхпроводящих материалов

Разработанный на основе цветового заряда метод позволил подойти с единой позиции к анализу экспериментальных исследований свойств мультичастицы и межэлектронного взаимодействия в твердом теле.

Мультичастицу me в кристалле BiI_3 экспериментально наблюдал Е.Ф. Гросс еще в 1971 г.[20]. Используя из квантовой механики понятие приведенной массы ($m_{me}=0,5\cdot m_0$), он установил, что два связанных электрона с зарядом $2e$ и антипараллельными спинами при своем вращении в магнитном поле образуют простейшую водородоподобную систему (“биэлектрон”) с характерным обратным энергетическим спектром (ОВЭС) в оптической области (рис. 10):

$$E_{me}(n) = 2Ry + E_{св}/n^2, \quad n = 1,2,3,4,5,6, \quad (15)$$

где $E_{св}$ – энергия связи мультиэлектрона;

Ry – постоянная Ридберга;

n – главное квантовое число.

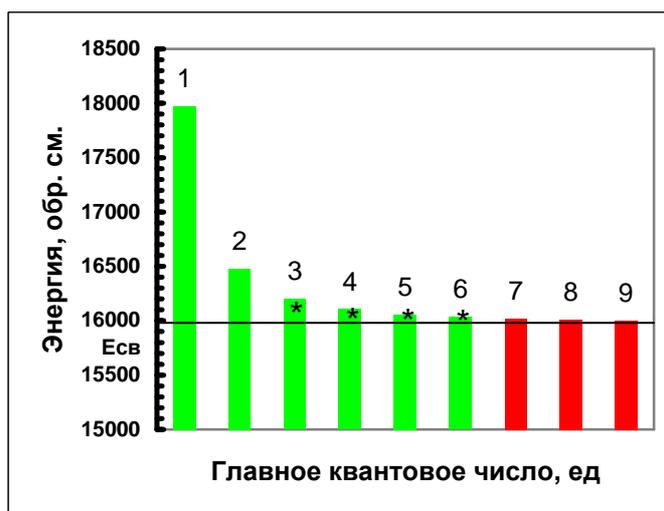
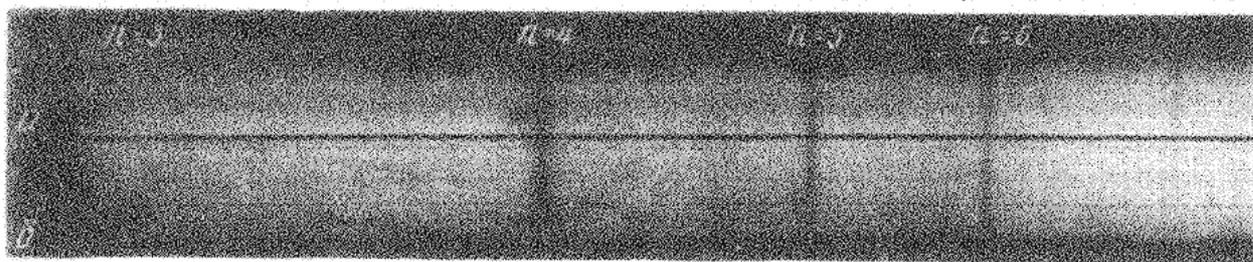


Рис.10. Энергетический спектр мультиэлектрона:

* - экспериментальные значения энергии по данным [20].

Для оценки достоверности совпадения его выводов с нашими результатами, произвели сопоставление расчетов с экспериментальными данными Е.Ф. Гросса [20], установленными для его биэлектрона с приведенной массой $0,6 \cdot m_e$ (рис.10). Получили совпадение расчетных значений энергии с экспериментальными величинами, для четырех квантовых чисел $n=3,4,5,6$ с относительной ошибкой 6,5%. Расхождение объяснили возможностью нахождения валентных электронов в различных состояниях (s-, p-, d-, f-) при образовании мультиэлектрона.

Опыт Е.Ф.Гросса был повторен на кристалле ZnP_2 [21]. Это исследование также подтвердило существование мультичастицы me в твердом теле с ОВЭС согласно выражению (15). Авторами мультичастица была названа “биэлектронным примесным комплексом” (БПК). Выполненная нами оценка размера me по данным [21] дала $R_{me} = 0,2$ ат.ед.

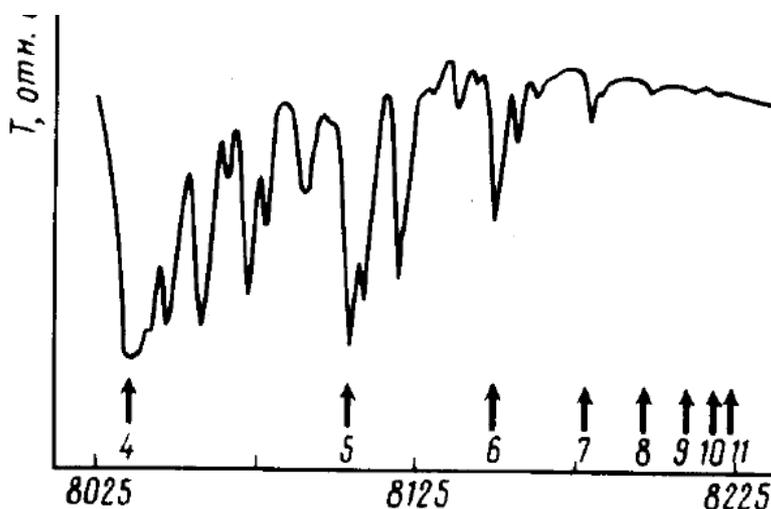


Рис. 11. Экспериментальный спектр me в ZnP_2 по данным [21].

Современные исследования спектральных характеристик me применительно к куперовской паре, ответственной за явление сверхпроводимости, ведутся в институте спектроскопии РАН [22], а так же за рубежом [23]. Хирчем [24] установлен важный факт, свидетельствующий о том, что в сверхпроводимости участвует мультичастица с приведенной массой именно $0,5m_e$, в то время как в существующих спектральных исследованиях ВТСП принимается, что куперовская пара, ответственная за СП, имеет массу $2m_e$ и поэтому её спектр должен находиться в тепловой области. В результате становится практически невозможным правильно идентифицировать действительное межэлектронное состояние и механизм СП.

Отметим, что спектр ОВЭС мультиэлектрона (me) походит на экситонный спектр. Однако спектр экситона имеет, как известно, прямой водородоподобный вид. Экситон не имеет электрического заряда, а его приведенная масса (электрона и дырки экситона Френкеля) часто превышает $2m_e$.

Большие возможности в изучении взаимодействия валентных электронов в твердом теле при СП предоставляет современная прецизионная рентгеновская томография [25]. Однако методика обработки экспериментальных карт деформационной электронной плотности в настоящее время не является совершенной. Как правило, ограничиваются определением координат характерных областей перетекания электронных зарядов с валентных оболочек атомов и зон повышенной электронной плотности, характерных для пар электронов ковалентной химической связи.

В настоящей работе, с целью уточнения физического механизма взаимодействия валентных электронов в кристаллах при СП, применили дополнительные методы обработки экспериментальных данных (рис.12).

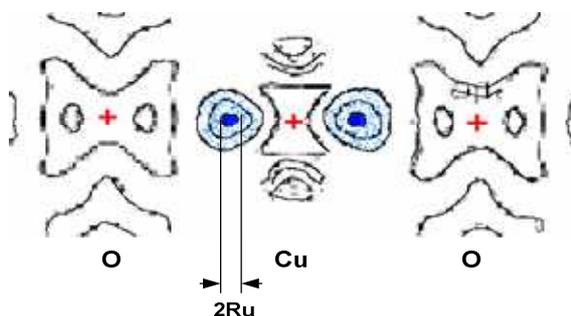


Рис. 12. Карта деформационной электронной плотности ВТСП [25] $(\text{Nd, Ce})_2\text{CuO}_{4-\delta}$ ($T_c = 23\text{K}$): + - центры атомов, ● - мультиэлектрон, R_u – радиус обменного взаимодействия.

Так, по координатам линий равной электронной плотности рассчитали вектор $\text{rot } F(r)$, характеризующий закрученность орбиталей электронов в области повышенной электронной плотности вероятности, возникающей из-за наложения волновых функций частиц. Определили, что ковалентная электронная пара испытывает в этой области собственное вращение по закону $F(r) = \omega \times R_u$, около общего центра с угловой скоростью ω и классическим радиусом $R_u = 6..8$ пм (см. рис.12), который соответствует размерам me , участвующим в химической связи.

На основании обобщения результатов вышеприведенных исследований был сделан вывод, что ковалентная пара в виде me и куперовская пара, используемая в механизме КТСП это одно и то же проявление цветового взаимодействия электронов. Не имеется принципиальных ограничений для применения этого взаимодействия в кристаллах, где наблюдается дальний порядок.

Для использования зависимостей (9)-(12) в расчетах кристаллических связей необходимо учитывать дополнительно тип решетки, координационное число $K_{\text{ч}}$ и правильно выбрать базис. Энергия диссоциации E_D заменяется на энергию плавления, а в качестве энергии ионизации выступает энергия когезии (по Киттелю [8] энергия когезии – это энергия, необходимая для разделения кристаллической решетки на нейтральные атомы).

Особый интерес представляет местоположение мультчастицы m_e в кристаллической решетке. Для его определения произвели предварительные расчеты величины R_0 , характеризующей в данном случае это местоположение.

Результаты расчета для ряда кристаллов химических элементов сведены в таблицу 6.

Таблица 6.

Величины радиуса поверхности Ферми и радиуса, характеризующего местоположение m_e в кристаллах химических элементов

Название элемента	Тип решетки	$R_f, a.ед.$	$R_0, a.ед.$	Название элемента	Тип решетки	$R_f, a.ед.$	$R_0, a.ед.$
Be	гпу	0,97364	0,97364	Sn	куб	1,15393	1,15397
Al	гцк	1,13150	1,13151	Sb	куб	1,11261	1,11264
Si	куб	1,04494	1,04498	Te	гекс	1,08855	1,08860
P	куб	1,08808	1,08811	Cs	оцк	2,99463	2,99474
Ti	оцк	1,25902	1,25902	Ba	оцк	1,93371	1,93382
V	оцк	1,16415	1,16417	La	оцк	1,41808	1,41816
Zn	гпу	1,20156	1,20158	Hf	куб	1,08260	1,08260
Ga	ором	1,14193	1,14198	Ta	оцк	0,93691	0,93692
Ge	куб	1,08877	1,08880	W	оцк	0,84384	0,84384
As	ромбэд	0,99368	0,99368	Re	гпу	0,78240	0,78241
Se	гекс	1,01309	1,01315	Os	гпу	0,73577	0,73577
Y	гпу	1,35896	1,35897	Ir	гцк	0,71173	0,71173
Zr	оцк	1,09880	1,09881	Hg	ромбэд	1,40982	1,41000
Nb	оцк	0,93621	0,93623	Tl	куб	1,29706	1,29709
Mo	оцк	0,83973	0,83973	Bi	ромбэд	1,39331	1,39342
Tc	гпу	0,77473	0,77475	Pb	гцк	1,19983	1,19991
Ru	гпу	0,72844	0,72844	Th	гцк	1,23272	1,23273
Cd	гпу	1,34978	1,34979	Ce	гцк	1,47647	1,47648

Для химических элементов, характеризующихся металлическими свойствами, поверхность Ферми в первой зоне Бриллюэна определена и представлена, согласно [8], в виде поверхности сферы с радиусом R_f . Получено совпадение значений радиусов R_0 и R_f . Это свидетельствует о том, что в металлах химическая связь аналогична молекулярной связи. Эта связь также осуществляется мультчастицей m_e , состоящей из валентных электронов атомов, участвующих в этой связи и расположенных вблизи поверхности Ферми. Ранее возможность такой структуры поверхности Ферми не рассматривалась.

Аналогичные расчеты были выполнены для кристаллов с выраженной ковалентной связью в решетке. Обобщение результатов представлено в виде рисунка, поясняющих расположение мультчастицы для этих случаев (рис.13). Этот рисунок является иллюстрацией того, каким образом осуществляется известный переход металл-диэлектрик (М-Д) Мотта [8] в зависимости от размеров решетки a_m , a_d и электронной концентрации (R_f).

Естественно, изображенные варианты представляют собой идеальные крайние случаи. В реальности, необходимо учитывать одновременно оба варианта расположения мультчастицы в кристаллической решетке и сложную форму поверхности Ферми.

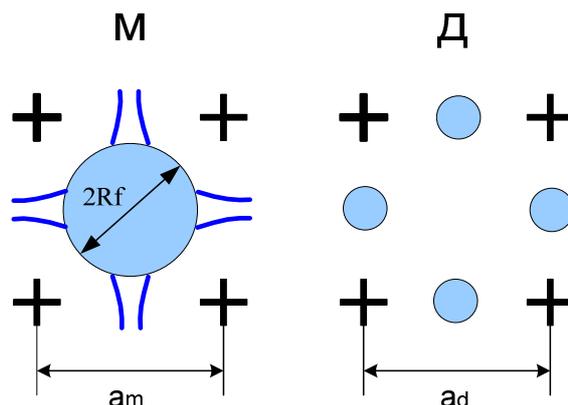


Рис. 13. Местоположение m_e в кристаллах металлов и диэлектриков.

В КХД удержание в связанном состоянии кварков в нуклонах объясняется цветовым конфайнментом. Для мультичастицы m_e энергетическая зависимость описывает потенциальную яму с барьером. Обращает внимание чрезвычайно узкая ширина “квантового мешка” ($dr=0,29\text{пм}$), по сравнению с размерами атома и высокий потенциальный барьер ($>25\text{эв}$), по сравнению с энергией связи. Эти особенности объясняются малой массой электронов и обменных частиц и большими расстояниями. Это приводит к тому, что явление конфайнмента наблюдается только на электронных орбиталях вблизи атомов, где имеется возможность компенсации кулоновского и кинетического колебательного барьеров положительным зарядом ядра. Для свободных электронов, при их сближении, конфайнмент не наблюдается.

Фундаментальность электронного конфайнмента проявляется при взаимодействии электронов низких энергий ($< 200\text{эв}$) с веществом:

- в опытах Девиссона-Джермера по рассеиванию электронов;
- в механизме электронных резонансов (АИС) на электронных оболочках атомов, ионов и молекул;
- при спаривании электронов при образовании фермион-бозонных структур электронных оболочек атомов химических элементов;
- при образовании анионов, прилипанию электронов и эффекте Казимира;
- при возникновении лавинных процессов в полупроводниках и т.д.

Поэтому Х. Юкава [26] неоднократно подчеркивал, что его обменное взаимодействие, остаточное от цветового взаимодействия, носит универсальный характер. Электромагнитное взаимодействие также является частным случаем потенциала Юкавы при $m_x=0$. Приведем еще ряд известных физических эффектов и экспериментальных фактов, которые косвенно подтверждают, что возможно указанное цветовое взаимодействие между e^- :

-фотоэффект в He_4 , когда в начальный момент наблюдается вылет из атома связанной пары e^- , фиксируемой как m_e [27];

-эффект Рамзауэра, при котором наблюдается электронная “сверхпроводимость” в благородных газах [28]. Здесь возникновение и распад me происходит в поле нейтрального атома, в результате чего закон рассеивания e^- такой же, как и в случае резонансного рассеивания пучков тяжелых заряженных частиц – протонов, обменивающихся π -мезонами [5];

-наличие в кристалле BiI_3 биэлектрона Гросса, энергетический спектр которого является спектром me [20];

-зафиксированные локальные “пики” электронной концентрации (горячие точки особенностей ван Хофа), возникающие на поверхности Ферми при СП и соответствующие месту расположения me в кристалле [29];

-обнаруженная избыточная электронная плотность в средней точке между двумя соседними атомами Si в направлении (111) в его кристаллической решетке и равная электронной плотности me . Избыток плотности вызван обменным взаимодействием двух валентных e^- с помощью третьей частицы при образовании ими ковалентной связи [8];

-наличие запрещенного рентгеновского отражения (222) в кристалле алмаза, указывающего на повышенную концентрацию e^- (0,4 электрона, что совпадает с её приведенным значением для me), участвующих в ковалентной связи между соседними атомами [8].

Участие мультиэлектрона в химической ковалентной связи и транспорте тока при сверхпроводимости позволило установить аналогию в его расположении в кристаллах НТСП и ВТСП (рис. 14) и разработать общую модель для физических основ СП.

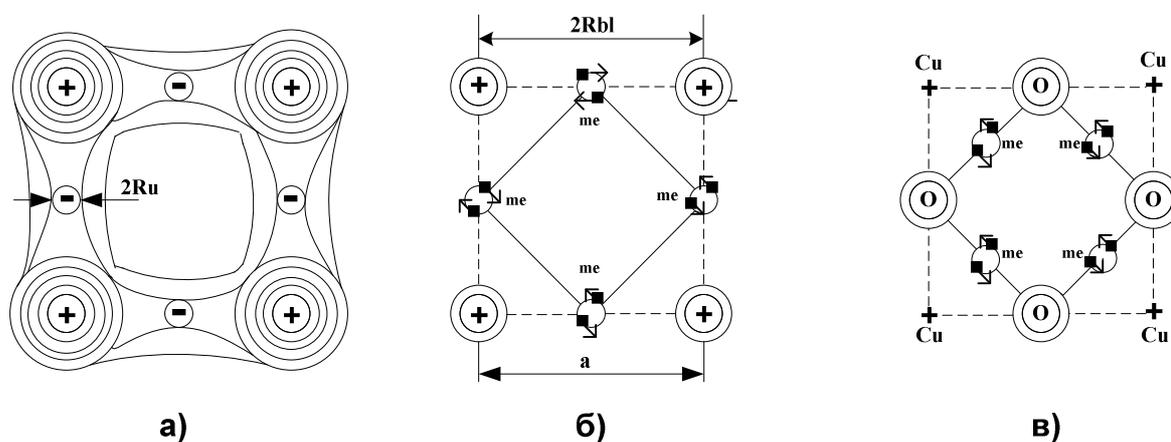


Рис 14. Аналогия в расположении мультиэлектрона в НТСП и ВТСП:

- а) определение радиуса Юкавы на основе рентгенограммы электронной плотности в решетке алмаза по данным [30];
- б) электронная подрешетка из me в простых НТСП;
- в) электронная подрешетка из me на примере купратов в ВТСП.

Установленное с помощью метода цветового взаимодействия значение R_u , было использовано в математической модели, являющейся составной частью физических основ СП.

Возможность существования сверхпроводимости при комнатной температуре и выше обосновали лауреат Нобелевской премии В.Л.Гинзбург [31] и У. Литтл [32]. Ими показано, что одной из самых важных проблем в области нанотехнологии является создание комнатотемпературных сверхпроводников (КТСП) [33]. Нанотехнология КТСП позволяет, в принципе, конструировать искусственные слоистые сверхпроводниковые наноструктуры, нанося атомные слои не только из тех материалов, у которых параметры кристаллической решетки близки друг к другу (как требуется для полупроводниковых структур). При нанотехнологии можно использовать гораздо большее разнообразие проводников и диэлектриков, нанося их монослои с атомной точностью для создания искусственных электронного и фононного спектров, необходимых для КТСП. Именно это позволяет сделать исследования и производство сверхпроводящих материалов неким “полигоном” для отработки нанотехнологических методов для сильнокоррелированных структур. Поэтому, создание КТСП - это, в значительной мере, нанотехнологическая проблема и, на наш взгляд, одна из важнейших.

После открытия в 1986г. за рубежом высокотемпературной сверхпроводимости, созданием КТСП в России занимаются 45 организаций и фирм, но результаты у них отсутствуют, так как физический механизм этого явления неизвестен, а официальная теория сверхпроводимости БКШ (Бардина-Шриффера - Купера) не может ответить на вопрос, каким должен быть КТСП.

Нобелевский лауреат в области сверхпроводимости Э. Леггетт [34], опираясь на твердо установленные экспериментальные факты, сформулировал основные требования, которым должны соответствовать современные физические основы сверхпроводимости (СП):

- 1- использовать заряд носителя тока $-2e$;
- 2- учитывать спин носителя, равный 0 (синглетное состояние);
- 3- объяснить, почему именно в купратах (CuO_2) наблюдается высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП);
- 4- объяснить относительную независимость формирования эффекта ВТСП в смежных слоях купратов;
- 5- установить причину различия в изотопическом эффекте для химических элементов, являющихся низкотемпературными сверхпроводниками (НТСП);
- 6- объяснить эффект сверхпроводимости для d-электронов;
- 7- объяснить наблюдаемые размеры носителей тока в пределах 1..3 нм.;
- 8- выяснить причины возникновения и роль псевдощели в ВТСП, а также взаимодействие электронов в обращенном состоянии с различными спинами.

Все объяснения должны быть даны с единой точки зрения и в итоге необходимо ответить на главный вопрос, какую структуру должен иметь сверхпроводник при комнатной температуре.

Разработанные и изложенные ниже физические основы СП соответствуют вышеперечисленным требованиям.

8. Математическая модель ВТСП на основе мультиэлектрона

Физическая постановка и математическая формулировка задачи расчета СП выполнены упрощенными и идеализированными. Однако идеализация и упрощения являются общепринятыми и апробированными на практике, что позволяет с достаточной точностью выполнять необходимые инженерные расчеты температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c при разработке нанотехнологии.

Физическая постановка задачи. Приняли, что носителем заряда при СП является me , образующий простейшую водородоподобную систему из связанных e^- . Связанное состояние возникает при существенном сближении валентных e^- отдельных атомов как в случае образования ковалентной связи, так и при их движении на поверхности Ферми в ячейке кристалла (рис.15). Сближение происходит при охлаждении, когда расстояние между атомами уменьшается. Электроны рассмотрели с противоположно направленными спинами, когда, согласно принципу Паули, между ними возможно возникновение связанного состояния с общим спином равным нулю. Взаимодействие двух e^- осуществляется в результирующем поле сил, определяемом одновременно потенциалами Юкавы и Кулона. Силы Кулона для e^- , имеющих одинаковый по знаку заряд, являются отталкивающими силами.

При образовании me кинетическая энергия составляющих свободных e^- переходит в колебательную энергию около общего центра и компенсируется потенциальной энергией цветового притяжения. Следовательно, по отношению к кристаллической решетке me имеет момент и спин, равные нулю, отрицательный заряд $2e^-$ и малые размеры. Если me не участвует в ковалентной связи и находится в зоне проводимости, то в электрическом поле он становится носителем тока, который при своем движении не испытывает рассеивания на решетке.

Таким образом, me представляет собой квантовую частицу в виде своеобразного “электронного иона”, который находится в состоянии электростатического равновесия с окружающими его электронами и атомами.

Требуется определить размеры me , его энергию связи (диссоциации), определяющую T_c и условия образования.

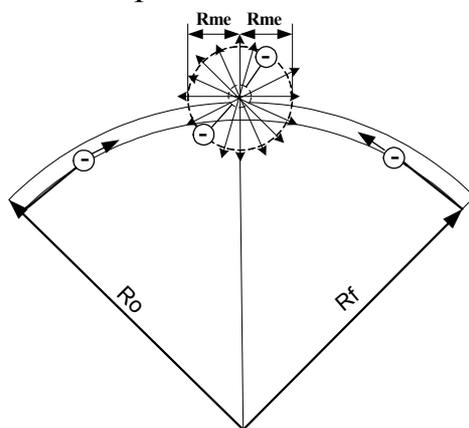


Рис.15. Образование мультиэлектрона вблизи поверхности Ферми (обозначения в тексте).

Математическая формулировка задачи. Условия образования и свойства мультиэлектрона описали следующими основными зависимостями

$$E_{\text{пост}} + E_{\text{кул}} + E_U + E_{\text{вращ}} + E_{\text{колеб}} + E_{\text{возмуц}} = E = -E_{\text{св}} ; \quad (16)$$

$$-Cu \frac{1}{Rme} \exp\left(-\frac{Rme}{Ru}\right) + \frac{2n^2 r_b}{Rme^2} + \frac{1}{Rme} = -E_{\text{св}} ; \quad (17)$$

$$-\frac{1}{Ro} + \frac{Rf}{Ro^2} = -E_{\text{св}} ; \quad (18)$$

$$\frac{k_b Tc K_q}{2Ry\alpha} = |-E_{\text{св}}| ; \quad Ro \leq r_b^* = \frac{e^2}{2E_u \epsilon^2} ; \quad (19)$$

$$\frac{dR}{da} = \frac{Rbl - Ro}{Rbl K_{mp} Tc^2 + Rme K_{me} Tc} = \exp(C_1 + C_2 \text{Ln}((Rbl K_{mp} Tc^2 + Rme K_{me} Tc)^{-1})) \quad (20)$$

и вспомогательными уравнениями:

$$-\frac{1}{Rbl} + \frac{Rf}{Rbl^2} = -E_{\text{св}}(T_{\text{пл}}), \quad r_b = \frac{\epsilon \eta^2}{m_{\text{ме}} e^2}, \quad m_{\text{ме}} = \frac{m_e m_e}{m_e + m_e}, \quad Rf = \frac{1}{\sqrt[3]{3\pi^2 n_e}}, \quad n_e = \frac{z N_a \rho}{M}, \quad (21)$$

$$K_{mp} = \frac{\gamma}{3B} \left(\frac{12\pi^4 N_a k_b}{5} \left(\frac{Tc}{\theta_D} \right)^3 + \frac{\pi^2 N_a k_b Tc}{T_f} \right), \quad \gamma = \frac{\pi^2 N_a k_b^2 z}{2E_f}. \quad (22)$$

Принятые обозначения: $E = -E_{\text{св}}, E_{\text{пост}}, E_{\text{колеб}}, E_{\text{кул}}, E_u, E_{\text{вращ}}, E_{\text{возмуц}}, E_{\text{и}}$ – энергия связи, поступательная, колебательная, Кулона, Юкавы, вращательная и возмущения, ионизации соответственно; Cu – константа Юкавы; Rme – классический радиус m_e ; n – главное квантовое число m_e ; r_b, r_b^* – радиусы Бора для m_e и ионизации; Ro – радиус электростатического равновесия m_e в ячейке кристалла; Rf – радиус поверхности Ферми; Rbl – половина расстояния между ближайшими соседями; k_b – постоянная Больцмана; K_q – координационное число; α – постоянная Маделунга; Ry – постоянная Ридберга; a – постоянная решетки; $K_{\text{тр}}$ – коэффициент термического расширения решетки; $K_{m_e \text{тр}}$ – коэффициент термического расширения m_e ; C_1, C_2 – коэффициенты адаптации модели; $T_{\text{пл}}$ – температура плавления кристалла; ϵ – диэлектрическая проницаемость; \hbar – постоянная Планка; e – заряд электрона; $m_{\text{ме}}$ – приведенная масса m_e ; m_e – масса электрона; n_e – электронная концентрация; z – валентность; N_a – число Авогадро; ρ – плотность; M – атомная масса; γ – коэффициент Грюнайзена; B – объемный модуль упругости; θ_D – температура Дебая; T_f, E_f – температура и энергия Ферми.

9. Особенности модели, базы исходных данных и решения

В рассмотренной физической постановке определяющим является компенсация кинетического момента e^- и электростатическое взаимодействие me , поэтому расчеты производили в упрощенном варианте, приняв в (16) $E_{\text{пост}}=E_{\text{вращ}}=E_{\text{возмущ}}=0$ и при $n=1$. Уравнение (17) описывает конфайнмент (удержание) короткодействующими силами Юкавы электронов в me в зависимости от расстояния. Оно содержит дополнительный член, учитывающий квантование орбит по правилу Бора для атома водорода. Зависимость (18) отражает классическую ионную связь [8], возникающую из-за компромисса между кулоновской силой притяжения и силой отталкивания центрального поля, действующего на расстоянии R_f . Радиусы R_{me} и R_0 являются равновесными, определяющими размеры и местоположение в решетке me для искомой $-E_{\text{св}}$ и, согласно, (19) T_c . Условие $R_0 \leq r_b^*$ определяет нахождение me в зоне проводимости. При $R_0=R_{bl}$ уравнение (18) переходит в зависимость (21) для ковалентной связи с энергией $-E_{\text{св}}(T_{\text{пл}})$. Таким образом, ковалентная связь представляется как частный случай ионной связи с участием me . По известным для кристалла $-E_{\text{св}}(T_{\text{пл}})$ и R_{bl} , находится соотношение K_c/α для me . Эмпирическая зависимость (20) в относительной форме связывает параметры me с размерами кристаллической решетки при её термическом расширении.

Знаменатель (20) представляет линейную суперпозицию изменения размеров решетки и me . Коэффициенты C_1 и C_2 служат для адаптации модели к реальным условиям. Остальные уравнения соответствуют классическим представлениям свободного электронного газа Ферми и теории теплоемкости решетки по Дебаю. В итоге система трех основных уравнений (17), (18) и (20) содержит три неизвестных R_{me} , R_0 и T_c и, следовательно, имеет решение.

Использованная в расчетах база данных, содержала только общеизвестные и доступные сведения о физико-химических свойствах элементов и НТСП, приведенных в справочниках и учебных пособиях [12,35,36,37]. Численные значения были взяты “как есть”, без какой-либо подгонки под модель. Характеристики ВТСП соответствовали значениям, приведенным в [35, 38].

Численное значение константы Юкавы приняли такое же, как и для сильного взаимодействия (см. расчет молекулярной связи), с поправкой на расстояние из-за эффекта поляризации вакуума. $C_u=41,1$ показывает, во сколько раз силы Юкавы превышают силы Кулона на расстоянии конфайнмента электронов.

Решение системы уравнений производили численным методом с помощью компьютерной программы, составленной с использованием процедур Excel.

10. Адаптация математической модели и проверка адекватности

Адаптацию провели путем определения C_1 и C_2 методом статистической обработки известных экспериментальных данных по НТСП и ВТСП, представленных в виде обобщающей зависимости (20). Результаты обработки приведены на рис. 16.

В итоге получены значения для $C_1=0,507138219$ (с ошибкой 7,3%) и $C_2=0,994150391$ (с ошибкой 0,5%). Показатель надежности адаптации в виде коэффициента корреляции для (20) составил $r = 0,9987$. Общая стандартная

ошибка не превысила 23,2%, относительная - 17,7%. Поэтому был сделан вывод о достаточной степени адекватности разработанной математической модели СП и её пригодности для практического применения.

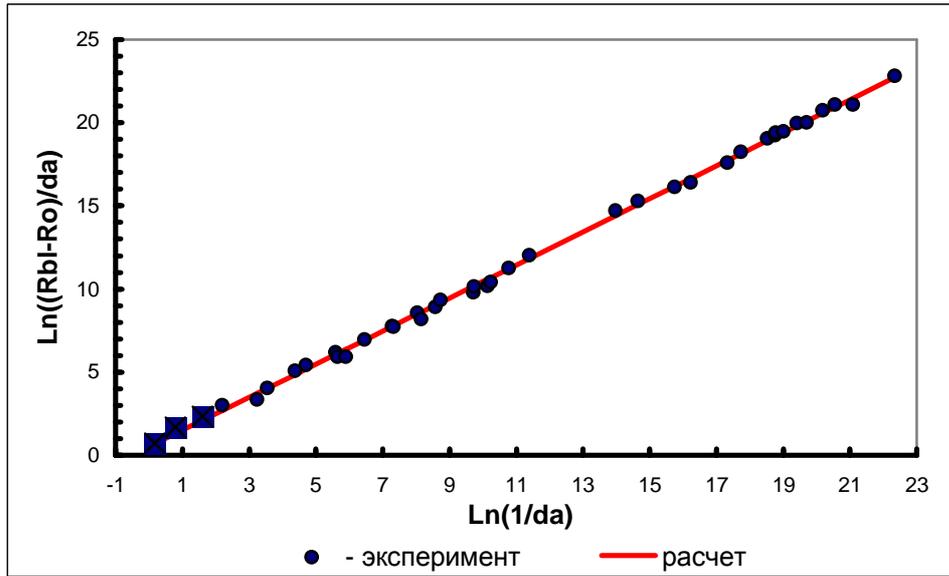


Рис.16. Обобщающая НТСП и ВТСП зависимость для адаптации и проверки адекватности математической модели m_e (квадратные точки - ВТСП, расположение точек соответствует ряду: $YBa_2Cu_3O_7$ - $SrNdCuO_2$ - $Bi_2Sr_2LaCuO_6$ - La - Se - Bi - Pb - Ba - Cs - Hg - P - Tc - Nb - Te - In - Ga - Sn - Tl - Ge - Sb - Si - V - Ta - Ce - Th - Y - Al - Zn - Cd - Re - Os - Ru - As - Mo - Zr - Ti - Ir - Hf - Be - W).

11. Свойства мультиэлектрона и сравнение их с известными теориями сверхпроводимости

Основные параметры и энергетические характеристики мультиэлектрона приведены в таблице 7 и на рис.17. Максимальная величина энергии связи (глубина «потенциальной ямы») для m_e достигает $\sim 8,8$ эв. Этой энергии достаточно для образования известных ковалентных связей в химических элементах и соединениях. В свободном состоянии m_e её значение ($E_{св} \sim 10^{-4}$ эв) мало и частица может находиться за пределами «потенциальной ямы» на значительном расстоянии в результате туннельного эффекта (рис. 18) (по аналогии с дейтроном). Для $T_c=300K$ расстояние, на котором имеет место туннельный эффект, равно 1,8 нм, а при $T_c=10K$ – 9,6 нм. При исследованиях ВТСП эти расстояния фиксируются как размеры частицы. Туннельный эффект ответственен за коллективные процессы в кристалле, возникающие при СП.

Изотопический эффект для m_e получается естественным образом, так как массовое число M входит в расчетные выражения (21). Это позволяет обобщить экспериментальные данные по изотопическому эффекту и объяснить причину различной чувствительности влияния M на T_c . Результаты такого обобщения показаны на рис.19. Они имеют коэффициент корреляции $r=0,948$ и стандартную ошибку 2,1%. Наглядно видно, что причиной неодинаковой

чувствительности элементов к изотопическому эффекту является различное расположение в них m_e относительно поверхности Ферми, которое зависит от разности (R_o-R_f) (см.рис.15). В свою очередь, эта разность определяется индивидуальными для каждого элемента соотношением (K_q/α) и валентностью Z .

Таблица 7

Основные свойства мультиэлектрона

№ п/п	Параметр	Обозначение	Размерность	Значение
1	Приведенная масса	m_{me}	Ед. массы e	0,5
2	Заряд	e_{me}	Ед. заряда e	- 2
3	Спин	S	\hbar	0
4	Константа Юкавы	C_u	-	41,1
5	Радиус Юкавы	R_u	Ат.ед	0,141353
6	Масса обменной частицы (по Юкаве)	m_x	эв	26 329 ^{*)}
7	Радиус мультиэлектрона классический	R_{me}	Ат.ед.	0,13256609 ^{**)}
8	Энергия связи	$E_{св}$	эв	0,000294421 ^{**)}

*) - 0,051 от m_e ;

***) - средние величины для НТСП.

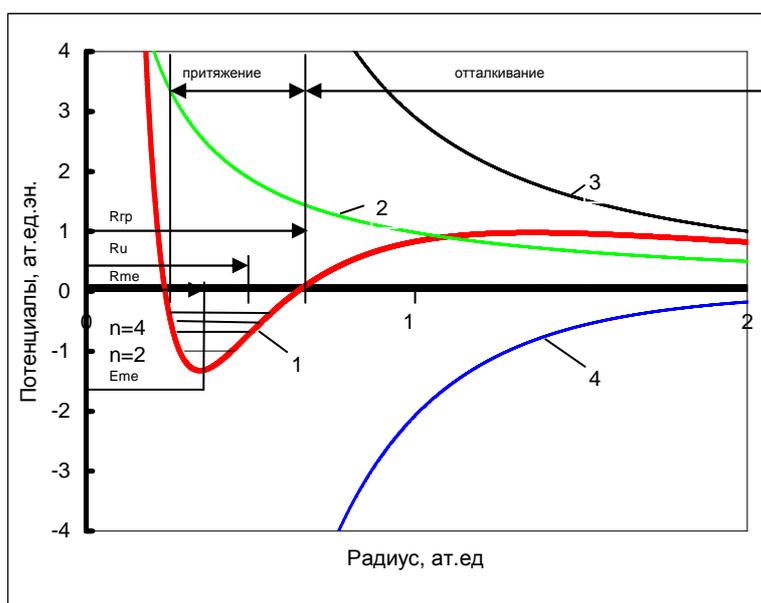


Рис.17. Энергетические зависимости для мультиэлектрона:
 1 – энергия m_e , 2- энергия Кулона, 3- энергия колебаний связанных электронов около общего центра в m_e ,
 4- энергия Юкавы, $R_{гр}$ – граница притяжения и отталкивания ($E_{св}$ условно показана не в масштабе).

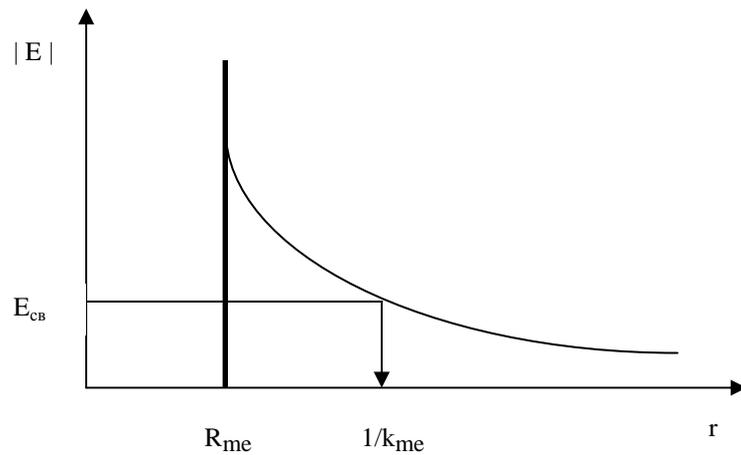


Рис.18. Зависимость между энергией (E) и расстоянием (r) для определения волнового вектора мультиэлектрона:
 R_{me} , k_{me} – радиус и волновой вектор me , соответственно;
 $1/k_{me}$ – расстояние, на котором происходит проникновение me сквозь потенциальный барьер путем туннельного эффекта.

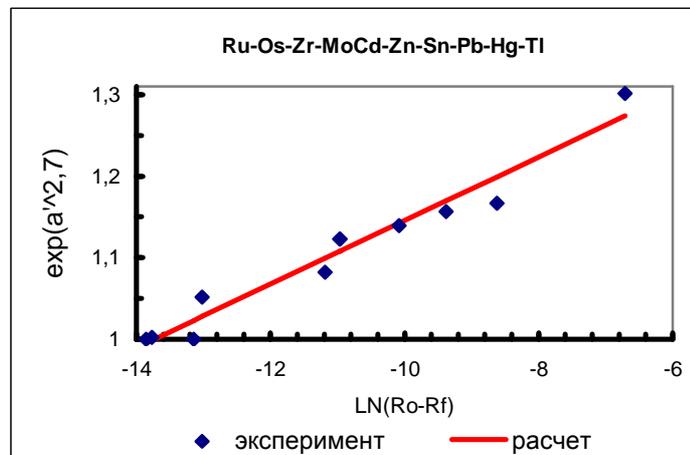


Рис.19. Изотопический эффект мультиэлектрона (параметр a' соответствует зависимости $M^{a'} Tc = const$, расположение экспериментальных точек соответствует ряду элементов, указанному вверху).

Влияние электронной концентрации на T_c показано на рис.20. Экстремальный характер зависимости определяется соотношением (R_f/R_o^2) , входящим в (18). При увеличении электронной концентрации $R_f \downarrow$, а $R_o \uparrow$. В итоге имеет место оптимальная закономерность для T_c , наблюдаемая на практике [37].

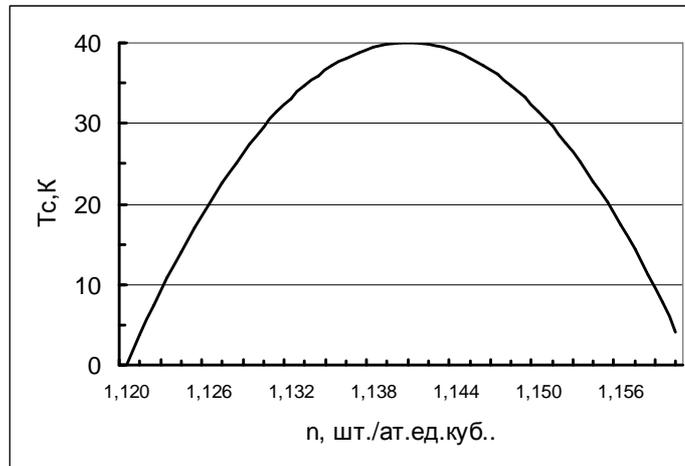


Рис.20. Расчетная зависимость T_c от электронной концентрации (n) для ВТСП $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) с $T_c=40$ К.

Аналогичным путем можно проследить зависимости для магнитного поля или других возмущающих воздействий, задав необходимое $E_{\text{возмущ}} \neq 0$.

Потенциал Юкавы не накладывает ограничений на количество взаимодействующих электронов и их тип (s- или d-электроны). Эти особенности можно учесть, заменив (17) уравнением Дирака - Шредингера для распределения электронной плотности вероятности в m_e .

Сравнение параметров m_e с характеристиками общепринятых теорий СП позволило установить их взаимосвязь. Например, теория БКШ [36] для расчета размера энергетической щели СП применяет выражение:

$$\Delta = 1,76k_b T_c.$$

Сравнение данной формулы с (19) показывает, что эмпирическая характерная величина 1,76 – это не что иное, как соотношение (K_q/α) для m_e . Усреднение всех известных НТСП и ВТСП дает $(K_q/\alpha)=1,9$. Следовательно, модель m_e позволяет определять эмпирическую константу в БКШ расчетным путем и, тем самым, уточняет известную теорию.

Конечный радиус корреляции параметра порядка $\xi(T)$ в теории Гинзбурга-Ландау [39] – является аналогом $1/k_{m_e}$ для m_e .

В теории БЭК (Бозе-Эйнштейна) [38] - радиус капли электронного конденсата R_k аналогичен R_{m_e} .

Таким образом, модель m_e уточняет и обобщает известные теории СП.

12. Эффект обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП)

Уникальным свойством me является то, что он имеет отрицательный коэффициент термического расширения $K_{me_{тр}}$, который является следствием конфинмента e^- , описываемого (17). Закономерность изменения $K_{me_{тр}}$ показана на рис.14. Она объясняет процессы сжатия и расширения решетки, практически наблюдаемые в НТСП и ВТСП как температурные аномалии [36] и учитывает это явление в расчетах T_c .

Если $T < T_c$, то $K_{me_{тр}}$ по абсолютной величине больше $K_{тр}$ и решетка сжимается, обеспечивая НТСП и ВТСП. В случае $T_c < T < T^*$, преобладает термическое расширение, при котором не выполняется условие $R_0 \leq r_b^*$ и me , хотя и существует, но не сверхпроводит, так как находится в запрещенной зоне. В итоге образуется псевдощель Δ^* , наблюдаемая экспериментально [38].

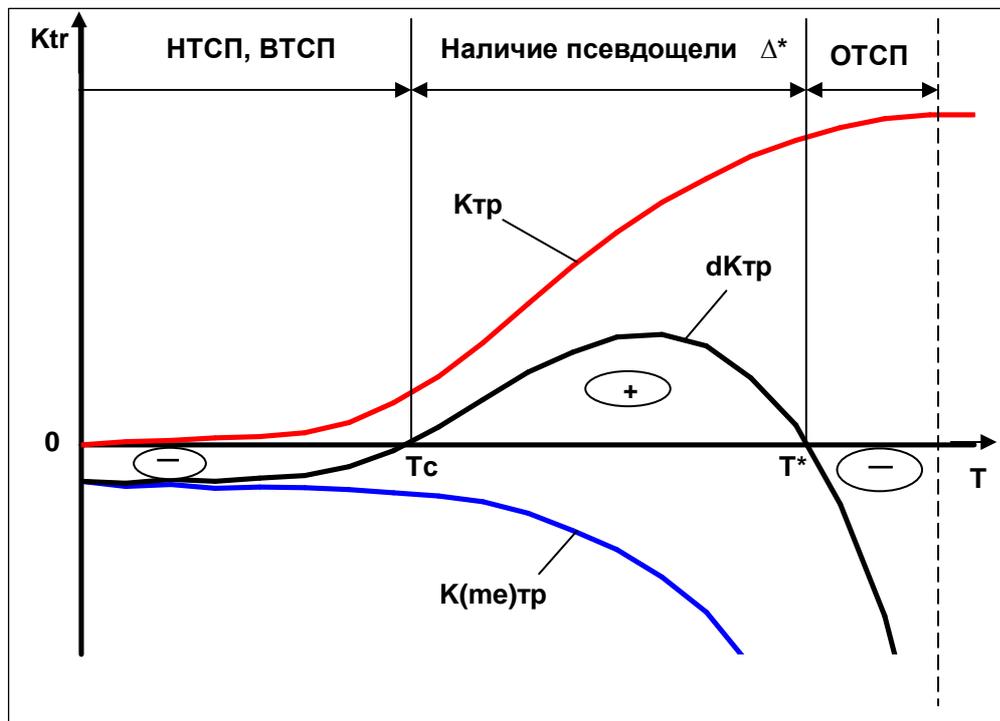


Рис.21. Расчетный эффект обратнотемпературной сверхпроводимости (ОТСП) ($dK_{тр}$ -изменение суммарного коэффициента термического расширения кристалла; T^* -температура образования псевдощели; \pm - зоны термического расширения и сжатия).

При $T > T^*$ снова происходит сжатие и становится возможен эффект ОТСП, при котором сверхпроводимость возникает при нагреве кристалла. Однако, при дальнейшем росте температуры, если тепловое возмущение превысит $-E_{св}$, то me распадается. В случае участия me в ковалентной связи может происходить фазовое изменение или разрушение структуры решетки (плавление кристалла). Из рис.21 видно, что температурный диапазон ОТСП относительно узок и относится к нестабильной области существования решетки. Это приводит к трудностям практического обнаружения прогнозируемого эффекта ОТСП, из-за размытости указанных температурных границ переходов и свойств кристалла.

Слоевой характер расположения электронных подрешеток в ВТСП (см.рис.14в) вызывает относительную независимость образования me в слоях

купратов. Так, в реальных кристаллах всегда имеются те или иные слоевые неоднородности, что приводит к разности $-E_{св}$ для me в слоях и возникновению многощелевых СП. Поэтому КТСП следует ожидать в таких кристаллах, где имеется наибольшая вероятность образования электронной подрешетки из me . В купратах такую вероятность предоставляют, в первую очередь, атомы кислорода (O) (см.рис.14.в). T_c в них определяется комплексом физико-химических свойств O: $T_{пл}=54,8K$, M , ρ , z , V , $\theta_D, (K_ч/\alpha)$. Модель me указывает, что эти свойства влияют на T_c взаимнокомпенсирующим образом, поэтому простая замена O для получения эффекта КТСП, например, на галогены не приносит необходимого результата. Для ответа на вопрос, каким должен быть КТСП, необходимо рассмотреть комплексный механизм СП на основе me .

13. Мультиэлектронный механизм сверхпроводимости

Акад. В.Л. Гинзбург подчеркивал, что в реальности одновременно присутствуют разные механизмы СП: электронный, фононный, экситонный [39]. Модель me позволяет рассмотреть совместное влияние на T_c электронного и фононного механизма на основе зависимости (20), которую представили в виде функции $T_c=f(da)$ и привели на рис.22.

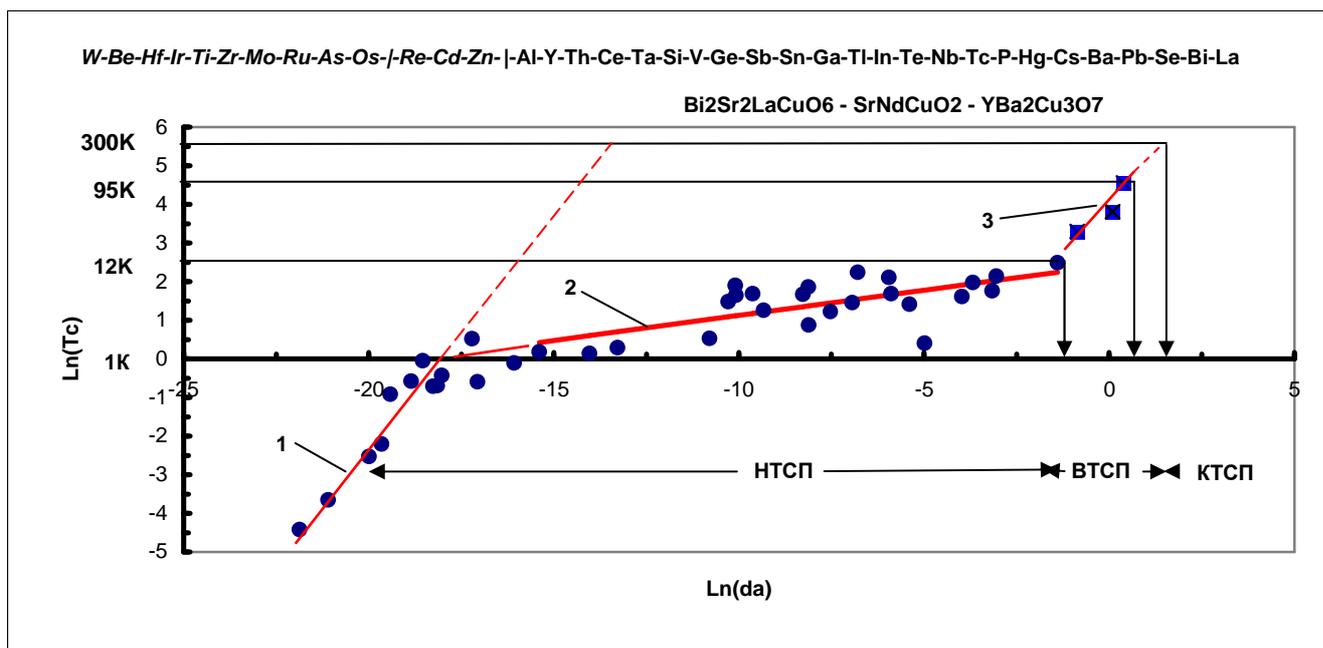


Рис.22. Влияние термического расширения решетки на T_c :

- 1- преобладание электронного механизма;
 - 2- преобладание фононного механизма в НТСП;
 - 3 - компенсация фононного возмущения в ВТСП (купраты)
- (расположение экспериментальных точек соответствует порядку названий химических элементов и соединений: W..Os–элементы с отрицательным расширением; Re..Zn– элементы переходной группы; Al..La –элементы с положительным расширением).

При низких ($T_c=0,01..1\text{K}$) температурах фононные колебания в решетке практически отсутствуют и преобладает электронный (мультиэлектронный) механизм СП. Процесс характеризуется степенью эффективности в виде коэффициента, отражающего угол наклона обобщающей зависимости (1) (см.рис.22) к оси абсцисс и равного 0,82. При $T_c=1..12\text{K}$ преобладающим становится фононный механизм СП, согласно наклона зависимости (2), его эффективность понижается до 0,12, т.е. почти в 7 раз. В купратах, при $T_c=40\text{K}$ и выше, зависимость (3) снова имеет высокую крутизну, характерную для электронного механизма СП с эффективностью 0,88. Последнее становится возможным потому, что в электронных подрешетках с те имеет место сильное подавление тепловых колебаний “химическим” сжатием кристалла.

С помощью модели те установлено, какой размер решетки и коэффициент термического расширения должен иметь КТСП. Значения этих параметров приведены на рис.23.

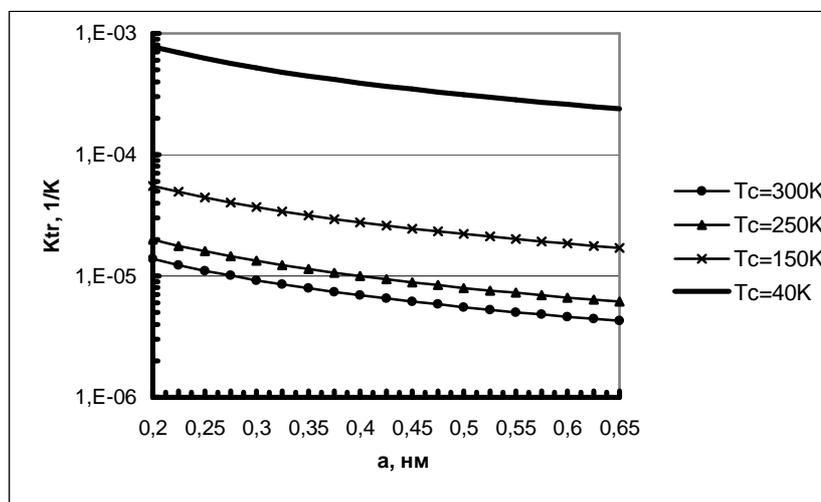


Рис.23. Необходимые расчетные значения коэффициента теплового расширения и размеров кристаллической решетки для заданной T_c .

В реальности, одновременно с термическим расширением происходит изменение удельной электронной концентрации в объеме решетки. С помощью модели те возможно учесть и это явление (см. рис.20).

14. Экспериментальное подтверждение физических основ нанотехнологии комнатотемпературных сверхпроводников

В настоящее время сверхпроводник, работающий по мультиэлектронному принципу при комнатных температурах, может быть изготовлен как в объемном, так и в пленочном виде.

Хорватский исследователь Дэниел Дюрек [40,41] синтезировал объемный сверхпроводник на основе химического соединения $\text{Ag}_5\text{Pb}_2\text{O}_6$, который имеет сверхпроводимость в диапазоне температур 215..525 К (рис.17). На технологию изготовления этого сверхпроводника в 2001г получен немецкий патент [42].

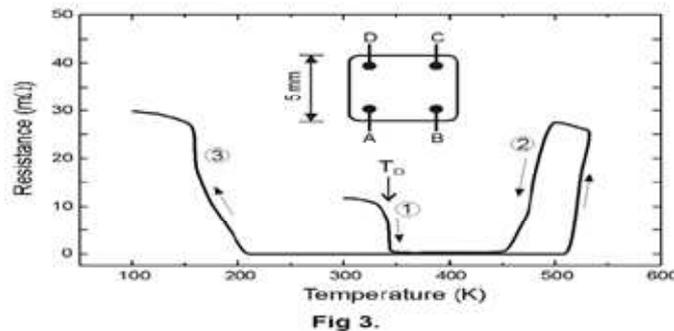


Рис.24. Экспериментальное подтверждение комнатотемпературной сверхпроводимости (342 K = 69 C, Danijel Djurek. et al.).

Л.Н. Григоров с сотрудниками (США (Калифорния)), успешно реализовал пленочную технологию получения комнатотемпературных сверхпроводников на основе полимеров (патенты US: 5,777,292 (1998г.); 6,552,883 (2003г.); 6,804,105 (2004г.)). Организованная на этой основе американцем Марком Голдесом фирма “Ультракондуктор” (Room Temperature Superconductors, Inc.) в настоящее время демонстрирует пленочные комнатотемпературные сверхпроводники и продает лицензии на их опытное производство. Сайт фирмы: (<http://ultraconductors.com>); Рекламный видеоролик: (http://www.youtube.com/watch?v=4ZBobLfUiik&feature=youtube_gdata).

В настоящей работе была разработана технология изготовления наногетероструктур (НГС) на основе мультиэлектронной модели КТСП [43]. Структура представляла собой металлические пленки, размером 2 нм., окруженные тонким слоем диэлектрика 1..5 нм. в виде “сэндвичей Гинзбурга” (рис.25b).

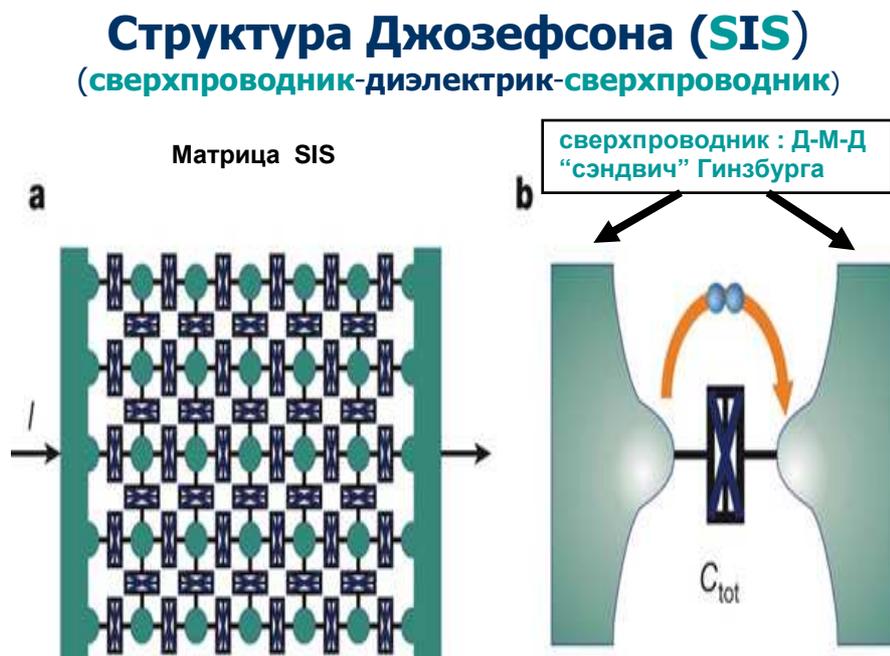


Рис.25. Опытная структура КТСП.

Известно, что для тонких пленок идентификация сверхпроводимости основана на эффектах Джозефсона, являющихся мировым признанным эталоном этого явления. Поэтому для подтверждения эффекта сверхпроводимости при комнатных температурах были изготовлены контакты Джозефсона в виде матрицы SIS. Структура SIS, методика измерения и ВАХ показаны на рис. 25а и рис. 26.

ВОЛЬТАМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА SIS

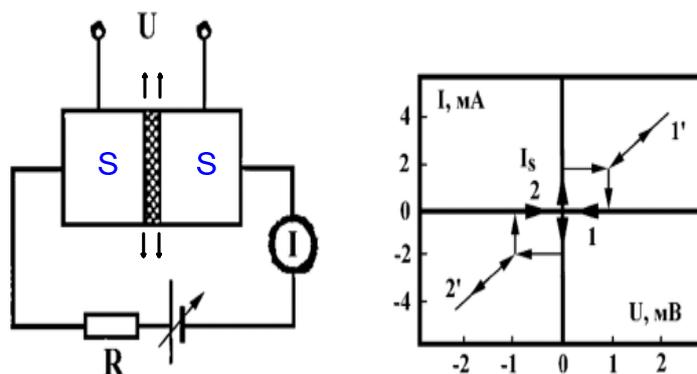


Рис. 26. Методика измерения свойств КТСП.

В процессе комплексных тестовых экспериментов и испытаний были установлены и идентифицированы:

- эффекты двухчастичного туннелирования при разных температурах (рис. 27);
- эффект Джозефсона на переменном токе (рис. 28);
- эффект Джозефсона на постоянном токе (рис. 29);
- эффект поглощения СВЧ излучения (рис. 30);
- влияние магнитного поля на образцы и их диамагнетизм (рис. 31);
- структура сверхпроводящих каналов (рис. 32).

1. Эффекты туннелирования

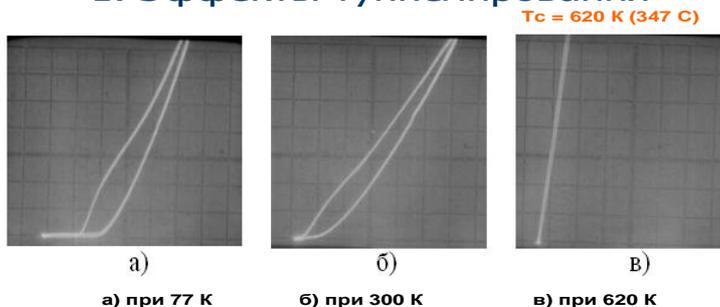


Рис. 27. Эффекты двухчастичного туннелирования.

2. Эффект Джозефсона на переменном токе



Рис. 28. Эффект Джозефсона на переменном токе.

3. Эффект Джозефсона на постоянном токе

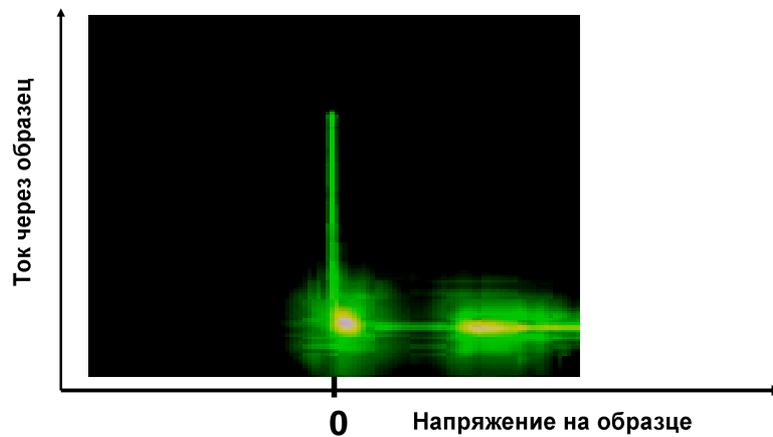


Рис. 29. Эффект Джозефсона на постоянном токе

5. Поглощение СВЧ



Рис.30. Эффект поглощения СВЧ излучения

4. Влияние магнитного поля на сверхпроводящий ток

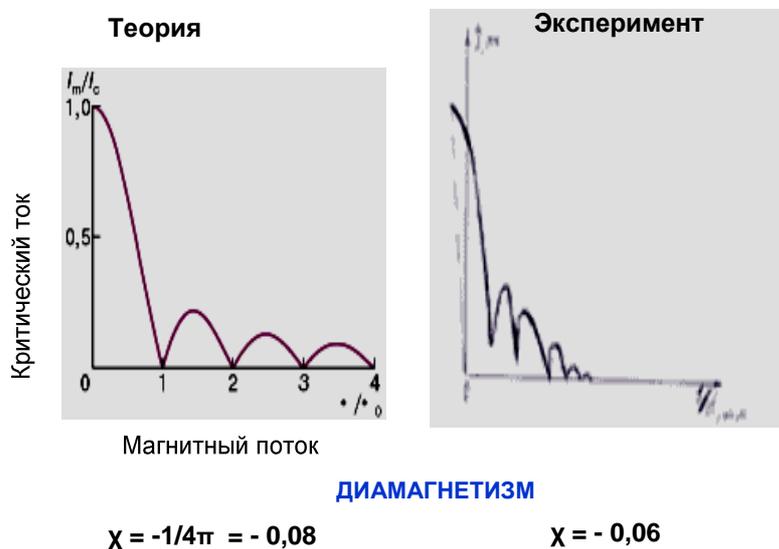


Рис. 31. Влияние магнитного поля на образцы и их диамагнетизм

7. Структура сверхпроводящих каналов



Микроплазменные образования, характерные для лавинного процесса

Рис.32. Структура сверхпроводящих каналов.

Полученные результаты носили воспроизводимый характер. Величина T_c для полученной структуры была определена $T_c = 620 \text{ K}$ (347C). Образцы обладали диамагнетизмом, что было подтверждено измерением величины магнитной восприимчивости $\chi = -0,06$.

Таким образом, созданный мультиэлектронный механизм СП нашел практическое подтверждение. Достигнутые положительные экспериментальные результаты показали целесообразность применения комнатотемпературной сверхпроводимости прежде всего в электронных приборах. Поэтому ниже рассмотрены такие возможности использования КТСП.

15. Возможности применения мультиэлектронного механизма сверхпроводимости в силовоточной электронике

Совершенствование конструкции электронных приборов за рубежом в настоящее время привело к созданию транзисторов III поколения (IRF 2804S), способных коммутировать токи до 160 А, при напряжении 30-40 В. Такие транзисторы уже нашли применение в автомобильной промышленности.

Главная особенность технологии современного мощного МДП-транзистора – это короткий канал, обеспечивающий низкое сопротивление открытого транзистора в ключевом режиме. Кроме того, малое сопротивление в открытом режиме обеспечивается параллельным соединением отдельных структур стока (многоканальность) и соответственно вертикальным их расположением (вертикальность). В мощных МДП-транзисторах объединяют истоки, стоком, как правило, является подложка.

Однако возможности конструктивного совершенствования транзисторов при использовании обычных носителей тока практически исчерпаны. Так, сокращение длины канала приводит к снижению пробивного напряжения между

стоком и затвором. Введение дополнительной дрейфовой n-области позволяет сохранить значение пробивного напряжения транзистора, но приводит к возрастанию сопротивления, так как n-область является высокоомной.

Потери мощности в электронном ключе на МДП-транзисторе определяются прежде всего потерями в открытом состоянии: $P = I_C^2 r_{СИ}$. Значение выходного тока I_C задается внешней нагрузкой, поэтому для снижения потерь P необходимо обеспечить минимальное значение $r_{СИ}$.

Для мощного МДП-транзистора можно выделить следующие составляющие сопротивления в открытом состоянии:

$$r_{СИ} = r_{кан} + r_{др} + r_{И} + r_C + r_{лок} + r_{n+} + r_{мет},$$

где $r_{кан}$ - сопротивление канала;

$r_{др}$ - сопротивление высокоомной стоковой области;

$r_{И}$ - сопротивление истока;

r_C - сопротивление стока;

$r_{лок}$ - сопротивление, вносимое неравномерным распределением тока стока по структуре;

r_{n+} - сопротивление низкоомной области стока;

$r_{мет}$ - сопротивление металлизации истока и корпуса транзистора.

Наибольший удельный вес имеют сопротивления $r_{кан}$ и $r_{др}$. При увеличении напряжения затвор-исток $U_{ЗИ}$ растет заряд затвора и несколько уменьшается сопротивление канала $r_{кан}$, а следовательно, и полное сопротивление транзистора $r_{СИ}$. Однако другие составляющие этого сопротивления не изменяются. Следовательно, при использовании традиционных носителей тока – электронов и дырок имеются принципиальные ограничения на снижение потерь P в транзисторе.

Новые возможности уменьшения потерь возникают в случае применения мультиэлектронных носителей тока в лавинном сверхпроводящем режиме работы транзистора. Так как свойства мультиэлектрона отличны от свойств дырок и электронов, то приведем основные положения, которыми необходимо руководствоваться при разработке технологии изготовления мультиэлектронного транзистора.

1. Необходимо свести к минимально возможному значению концентрацию обычных электронов и дырок в канале, так как последние, взаимодействуя с решеткой кристалла, дают основной вклад в сопротивление ($r_{кан} + r_{др}$).

Реально ток транзистора в лавинном сверхпроводящем режиме $I_{ЛП}$ представляет сумму тока дырок, электронов и тока мультиэлектронов;

$$I_{ЛП} = I_{e,h} + I_{ме} .$$

Если дырки и электроны отсутствуют, то составляющая $I_{e,h} = 0$ и ток через транзистор обеспечивается только мультиэлектронами. В результате выходное дифференциальное сопротивление транзистора $R_d = 0$. Если дырки и электроны присутствуют, но их концентрация меньше концентрации мультиэлектронов, то транзистор имеет выходную S - образную вольтамперную характеристику (ВАХ) с характерным участком отрицательного сопротивления: $R_d < 0$.

Следовательно, в лавинном сверхпроводящем режиме необходимо обеспечивать минимальную концентрацию электронов и дырок. Вклад I_{me} в ток пробоя (I_{me}) можно оценить, сняв экспериментально ВАХ.

Далее производится расчет по формулам:

$$I_{me} = U_{лп} / R_{лп} - R_{лп} / R_d * U$$

Или

$$I_{me} = I_{\Sigma} / (1 + 1/M)$$

Здесь $U_{лп}, R_{лп}$ - напряжение и сопротивление в режиме лавинного пробоя по справочным данным для выбранного перехода;

U, R_d - текущие напряжение и дифф. сопротивление;

I_{Σ} - суммарный (измеряемый) ток через p-n переход;

M - коэффициент лавинного умножения, зависит от $U_{лп}$ и U , рассчитывается по формуле Миллера для выбранного германиевого или кремниевого перехода:

$$M = 1 / (1 - (U/U_{лп})^n), \quad n = 2..6, \text{ в зависимости от типа перехода.}$$

Для реализации этого положения следует применять изовалентное легирование канала (Ge, Sn). Есть данные, что гетероструктура Ge-Si обеспечивает увеличение подвижности носителей не менее 25%.

2. Управлять лавинным пробоем и переводом транзистора в сверхпроводящее состояние следует путем изменения напряжения на электрически изолированном управляющем электроде (затворе).

Обычно лавинный режим достигается путем подачи повышенного напряжения, вызывающего пробой, между истоком и стоком. В этом случае для создания высокой напряженности электрического поля используется обратновключенный стоковый p-n переход, имеющий высокое сопротивление. Однако при использовании в транзисторе безпереходных структур, (что целесообразно для снижения $r_{кан}$) получить необходимую напряженность электрического поля таким способом становится невозможно, так как эти структуры имеют малое сопротивление.

В случае управления лавинным пробоем через затвор, канал мультиэлектронного транзистора может быть изготовлен в виде аналога v – базы полевого тиристора (высокоомной области n-типа, которая из-за малой концентрации доноров по своим характеристикам близка к собственной

проводимости полупроводника [Si]). Рассчитанные зонные диаграммы для различных пленочных технологий канала представлены на рис.33.

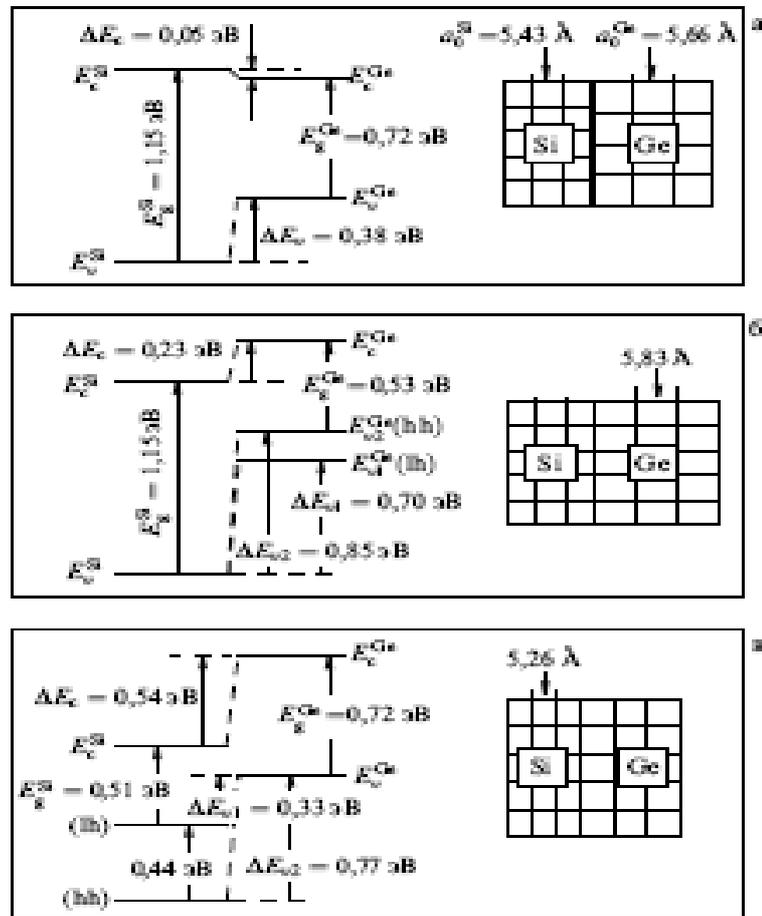


Рис.33. Зонные диаграммы при изовалентном легировании Ge/Si пленок:

а)– без упругих деформаций; б) – на подложке Ge(001);

в) – на подложке Ge (001).

В таблице 7 рассмотрены возможные практические варианты технологий сверхпроводящего канала мультиэлектронного транзистора, учитывающие указанные положения.

Технология КТСП транзистора

№ п/п	Этапы технологии КТСП	Рекомендации мультиэлектронной теории сверхпроводимости	Существующая технология полимерных сверхпроводников (Патенты US 5,777,292 6,804,105)	Технология мультиэлектронного транзистора
1	2	3	4	5
1	Выбор материала КТСП	Материалы с преобладанием ковалентной связи	> 76,8 % ковалентной связи: полипропилен, полиуретан, вискоза	Применение [Si], [Ge]
2	Создание сверхпроводящих носителей тока и необходимой структуры решетки	Формирование подрешетки из Мультиэлектронов с заданными размерами и величиной КЛТР	Образование свободных электронов, создание из них суперполяронов, упорядочивание структуры сверхпроводящих каналов	Электронная решетка типа алмаза в [Si], [Ge]
3	Обеспечение необходимой электронной концентрации носителей	Создание электронной концентрации для формирования свободных мультиэлектронов	Обогащение материала суперполяронами до $10^8 \cdot 10^9 \text{ см}^3$ путем электростатической обработки напряжением 5..10 КВ	Изовалентное легирование [Sn], [Ge], [C]
4	Создание слоевой структуры КТСП	Реализация эффекта обратнотемпературной сверхпроводимости путем применения слоев с различным КЛТР	Формирование Нанпылением слоевой пленочной структуры с различными КЛТР для подложки и полимера	Эпитаксиальная технология сверхпроводящего канала транзистора
5	Стабилизация сверхпроводящих носителей	Лазерная и электромагнитная обработка с термозакалкой	Лазерная, магнитная, ультрафиолетовая обработка	Лазерная и электромагнитная обработка с термозакалкой
6	Технологический контроль	Измерение постоянной решетки с точностью 10^{-7}	Не предусмотрено	Прецизионная томография

Основные положения нанотехнологии также были подтверждены экспериментально, путем снятия рабочих выходных ВАХ изготовленного сверхпроводящего транзистора (рис.34).

6. Управление сверхпроводящим током

Биполярный транзистор с изолированным затвором (IGBT)
- *Insulated Gate Bipolar Transistors*

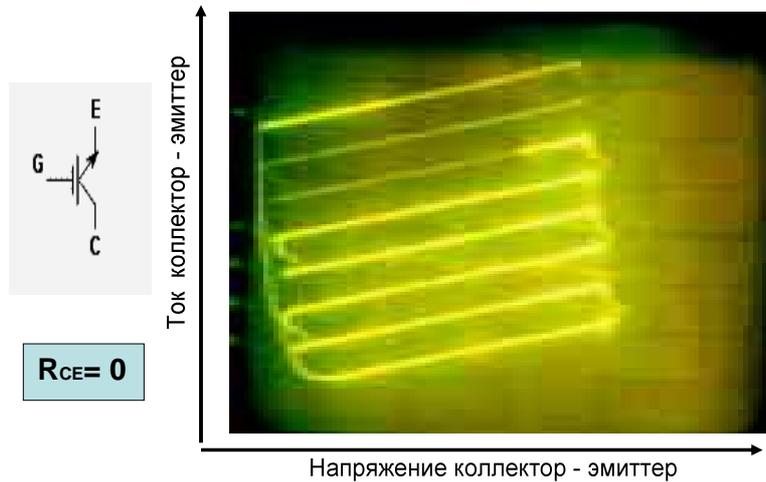


Рис.34. ВАХ сверхпроводящего транзистора при комнатной температуре (300К).

16. Технологические требования к изготовлению КТСП и ВТСП

Комнатно- и высокотемпературные сверхпроводники в виде оболочек с изоляцией необходимо изготавливать в виде гетероструктур по нанотехнологии из соединений с преобладанием ковалентной связи. Эти соединения необходимо подвергать лазерной и электромагнитной обработке с термозакалкой для устойчивого образования и стабилизации мультиэлектронных носителей тока [44-47].

Основным требованием к средствам диагностики технологического процесса является контроль размеров кристаллической решетки КТСП и ВТСП с точностью не менее 10^{-7} (семь знаков после запятой).

ВЫВОДЫ

1. С помощью обобщения теоретических и экспериментальных данных получены косвенные доказательства наличия у электронов, наряду с электрическим, цветового заряда. Тем самым, фактически находит свое подтверждение гипотеза известного физика-теоретика М.Б. Менского о том, что лептоны (электроны) – это кварки, вырвавшиеся на свободу [48].
2. Создана инженерная методика, позволяющие расчетным методом находить условия возникновения связанного состояния электронов на основе цветового электронного взаимодействия, применительно к молекулярной связи и кристаллической связи в комнатотемпературных сверхпроводниках.
4. Выполнено экспериментальное подтверждение созданного метода, путем синтеза гетероструктуры, сверхпроводящей в диапазоне температур 77.. 620К.
5. Практическое значение разработанного метода заключается в том, что он позволяет определить основные операции нанотехнологии комнатотемпературных и высокотемпературных сверхпроводников, а также дать рекомендации по их изготовлению.

Использованные источники:

1. Nature Phys. 2006, **2**, 595 (см. также cond-mat/0608069).
2. Морозов С.В., Новоселов К.С., Гейм А.К., Электронный транспорт в графене, УФН, 2008, т.178, № 7, с.776-780.
3. Novoselov K.S. et al. Nature 438, 201, 2005.
4. Кецапис А.А. Алгебраические основы физики. Пространство-время и действие как универсальные алгебры. Изд.2-е.– М.:Едиториал УРСС, 2004.–280с.(Relata Refero). Сайт <http://ketsaris.1gb.ru>.
5. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. – 752 с.
6. Pati J.C., A. Salam. Lepton number as fourth “color”// Physycal Review D, vol 10, num 1, 1974, p.275-289).
7. Франк-Каменецкий Д.А. Лекции по физике плазмы. М., Атомиздат, 1968. – 288 с.
8. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела, М., 1978,– 792 с.: ил.
9. Якубов А. Р. Юкавский потенциал и энергия химических связей //Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. 2002. № 6. с.35.
10. Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б., Якушина Е.В., Дьячкова Т.В. Мультиэлектронная теория сверхпроводимости // Объединенный научный журнал.- 2007. №17. с.43-56 . Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
11. Арбузов Б.А. Квантовая хромодинамика на больших расстояниях, “Физика элементарных частиц и атомного ядра”, 1988, т.19, вып.1 с.5-50.
12. Эмсли Дж. Элементы: Пер. с англ.-М.: Мир,1993.-256 с.
13. Краткий справочник физико-химических величин. Изд.7-е, испр. Под ред. К.П. Мищенко и А.А. Равделя, Изд-во “Химия”, Л., 1974. – 200с.
14. Лавров Б.П. Исследование элементарных и кинетических процессов в газоразрядной плазме с участием атомов и молекул водорода. Сайт: <http://lavserv.phys.spbu.ru/about/review.pdf>;
15. The hydrogen molecule wavelength tables of G.H.Dieke, ed.H.M.Crosswhite, N.Y.: Wiley-Intersci. 1972, 642p.
16. Freund R.S., Schiavone J.A., Crosswhite H.M. // J.Phys.Chem.Ref.Data. 1985. V.14. P. 235.
17. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия: Молекулярная спектроскопия / Предисл. Л.А.Грибова. Изд. 4-е, стереотипное – М.: Комкнига, 2007. – 528 с.
18. J.Itatani, J.Levesque, D.Zeidler, Hiromichi Niikura, H.Pepin, J.C.Kieffer, P.V.Gorkum, and D.V.Villeneuve. Nature, v.432, 467 (2004).
19. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул./Серия “Учебники и учебные пособия”. Ростов –на-Дону:”Феникс” , 1997 – 560 с.
20. Гросс Е.Ф. Магнито-оптические свойства биэлектрона в кристалле BiI_3 // Письма в ЖЭТФ, 1971,Т.13, с.503-506.

21. Селькин А.В., Стамов И.Г., Сырбу Н.Н., Уманец А.Г. Обратная водородноподобная серия в оптических спектрах кристаллов ZnP_2 //Письма в ЖЭТФ, 1982, том 35, вып.2 стр51-53.
22. Г.Т.Петровский, Н.В.Старостин. Вращательные состояния экситона и биэлектрона в кристаллах. Доклады АН, 1993, т. 329, № 3, с. 300 – 301
Сайт института спектроскопии РАН (Троицк):
<http://www.isan.troitsk.ru/win/achiev03.htm>.
23. HIRSCH J.E. QUASIPARTICLE UNDRRESSING: A NEWROUTE TO COLLECTIVE EFFECTS IN SOLIDS //arXiv:cond-mat/0211642v1 [cond-mat.str-el] 27.11.2002.
24. Hirsch J. E., Marsiglio F. , *Phys. Rev. B* 62, 15131 (2000).
25. Симонов В.И. Прецизионные рентгеноструктурные исследования монокристаллов ВТСП//УФН, 1995, т.165, вып.2, с.222-223.
26. Н. Yukawa. On the interaction of elementary particle. *Proc. Phys. Math. Soc. Japan.* 1935. V. 17. P. 48.
27. Сантилли Р. М. Основы адронной химии. Р.О.ВОХ 1577, Palm Harbor, FL34682,USA, www.magnegas.com.
28. Карякин Н.И., Быстров К.Н., Куреев П.С., Краткий справочник по физике. Изд. Второе, стереотип., М.:“Высшая школа”, 1963.- 560с.: ил.
29. . Кулеева Н.А., Кучинский Э.З. Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели “горячих точек”: уравнения Горькова//ФТТ,2004, т.46,вып.9,с.1557-1565.
30. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.:изд-во «Мир»,1979, Т.1,2 с.357-362.
31. В.Л. Гинзбург КОМНАТНОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СВЕРХПРОВОДНИКИ. ИХ СОЗДАНИЕ – АКТУАЛЬНАЯ ЗАДАЧА ФИЗИКИ И ЭНЕРГЕТИКИ. Физический институт им. П.Н.Лебедева, Москва, 20 июня 2006.
32. Литтл У. Сверхпроводимость при комнатной температуре//УФН, 1965, т.86,вып.2. с.315-326.
33. В. Гинзбург: Нанотехнологии и сверхпроводимость
<http://www.poisknews.ru/2008/02/23/>.
34. А.А. Leggett, *Natur Physics*, 2006, 2, 134.
35. Паринов И.А. Микроструктура и свойства высокотемпературных сверхпроводников. Ростов н/Д: Изд-во Рост. ун-та, 2004.-Т1,2 -416 с.
36. Гуревич А.Г. Физика твердого тела: Учеб. пособие для вузов/ФТИ им.А.Ф. Иоффе РАН.- Спб.: Невский Диалект; БХВ-Петербург,2004.- 320 с.
37. Alexandrov A.S.,Mott N.F.//Rep. Prog. Phys., 1994. v.57.p.1197.
38. Н. Ogasawara, М. Matsukawa, К. Noto, Н Kimura. Proc. Intern. Cryogenic Material Conf., Hawaii, Oct., 1994, p. 315.
39. Гинзбург В.Л. Сверхпроводимость: позавчера, вчера, сегодня, завтра // журнал «Успехи физических наук»,2001, №10,том 171, стр.1059-1068.

40. *D. Djurek, Z. MeduniĀ, M. Paljevic, and A. Tonejc*, Phys. Status Solidi A **201**, 544 (2004).
41. *D. Djurek, Z. MeduniĀ, M. Paljevic, and A. Tonejc*, cond-mat/0403027, 2004.
42. *D. Djurek, Z. MeduniĀ, M. Paljevic, and A. Tonejc*
Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen
№ DE 100 07 915 A1.
43. *Дерунов В.Л.* Высокотемпературные сверхпроводники и металлы в особых условиях. Актуальные проблемы физики твёрдого тела» (ФТТ-2005) г. Минск, 2005. Сайт <http://derunov.narod.ru/Experiment.htm>.
44. *Хорошавин Л.Б., Щербатский В.Б., Якушина Е.В.* От систем химических элементов до нанотехнологии материалов и изделий. // Объединенный научный журнал.- 2005. №32. с.67-76. Сайт: [http:// refractories1.narod.ru](http://refractories1.narod.ru).
45. *Гусев А.И.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.:Физматлит.-2005,-416 с.
46. *Суздалев И.П.* Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов.//М.:КомКнига,-2006.-529 с.
47. *Кобаяси Н.* Введение в нанотехнологию . М.: Бином. Лаборатория знаний, 2005. – 134 с.
48. *Менский М.Б.* Группа путей: измерения, поля, частицы. Изд. 2-е, исправл. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 32- с.