

УДК 538.9

ОБ ИЗОТОПНЫХ ЭФФЕКТАХ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

П. ДЖ. КЕРВАЛИШВИЛИ

АКАДЕМИЯ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК ГРУЗИИ

Исследование изотопных эффектов в конденсированных средах тесно связано с созданием новых и дальнейшим улучшением существующих методов получения изотопнообогащенных материалов, с развитием новых подходов к разработке наноструктурных веществ и наноустройств на основе квантовых эффектов. Оценка условий и механизмов влияния изотопных эффектов на свойства материалов открывает новые возможности перехода от технологий чистых изотопных веществ к технологиям изотопно чистых материалов. Такие подходы приводят нас к появлению перспективной отрасли физики и технологии – физике изотопно стимулированных явлений и изотопному материаловедению. Это сравнительно новое направление физики твердого тела и молекулярной физики включает изучение изотопных эффектов в различных средах и получение материалов заданного изотопного состава.

Ключевые слова: материал, изотоп, эффект, масса, ядерный, аморфный, кристаллический.

Свойства разных изотопов одного и того же химического элемента различны, что обуславливает различие физических и химических процессов, протекающих в изотопнозамещенных конденсированных средах, называемых изотопными эффектами [4].

Чаще всего изотопные эффекты вызваны различием масс ядер – изотопные эффекты первого рода. Наиболее сильно они выражены в случае легких элементов (H, He, Li, Be, C, B), для которых величина относительного изменения массы $\Delta M/M$ сравнительно высока (ΔM – разность масс изотопов одного элемента). Массовые изотопные эффекты, непосредственно проявляющиеся в химических превращениях, и связанные с различием в распределении изотопов одного элемента между различными фазами или химическими формами, называют термодинамическими изотопными эффектами. Кинетические изотопные эффекты

ABOUT ISOTOPE EFFECTS IN CONDENSED MATTER

P. J. KERVALISHVILI

Investigation of isotope effects in condensed matter is closely bound with the creation of new and farther acceleration of existing methods of isotope enriched materials preparation, as well as development of novel approaches to elaboration of quantum effects based nanostructured substances and nanodevices. Estimation of conditions and mechanisms of the influence of isotope effects on the properties of the medium gives new possibilities to pass from the technology of isotope enriched pure substances to the technology of pure isotope substances. Such approach leads us to perspective branches of physics and technology – physics of isotope stimulated phenomenon and isotope material science.

This relatively new field of solid state physics as well as of molecular physics includes the study of isotope effects in various media and elaboration of materials with strictly fixed isotope composition.

KEYWORDS: material, isotope, effect, mass, nuclear, amorphous, crystalline.

вызваны смещением наименьшей энергии колебаний атомов в молекуле из-за различия масс изотопов, что обуславливает изменение скоростей химических реакций.

Изотопные эффекты второго рода являются следствием различия в ядерных свойствах изотопов, обусловленных изменением структуры ядерных оболочек при увеличении или уменьшении количества нейтронов. В реальных случаях наблюдаемые изотопные эффекты являются суперпозицией изотопных эффектов первого и второго рода. Главное влияние на ядерные свойства изотопов оказывают силы, удерживающие нуклоны в ядре, которые многократно превышают электростатические силы взаимодействия между ними. Ядерные силы не зависят от зарядового состояния нуклонов, поэтому ядерные свойства в основном определяются их числом и сильно различаются у изотопов,

в отличие от изобар (ядра с одинаковым количеством нуклонов), и, тем более отличаются от физико-химических свойств, определяемых количеством электронов в атоме.

Вопросы влияния изотопного состава на физико-химические и электромагнитные свойства конденсированных систем являются одной из наиболее интересных и дискутируемых тем в современной науке и технике. Это обусловлено появлением ряда модельных и экспериментальных работ, в которых показана важная, а в некоторых случаях и определяющая роль изотопного состава на характеристические параметры процессов, протекающих в реальных системах [12].

Наша группа активно включилась в исследования изотопных эффектов в конденсированных средах в 70 годы прошлого века, в связи с разработкой новых высокоэффективных методов разделения изотопов легких и средних масс с одной стороны, и задачами создания изотопомодифицированных материалов, с другой.

Наблюдение изотопных эффектов и определение их параметров в основном связано с их последующим использованием в организации процессов переноса массы, электрического заряда и тепла в различных материалах, изменения спектральных характеристик в активных средах и др. Ряд результатов, уже полученных экспериментально и опробованных практически, указывает на высокую перспективность дальнейших разработок в этом направлении.

ИЗОТОПНЫЕ ЭФФЕКТЫ В РАЗЛИЧНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Одним наиболее интересных и важных, а также простым изотопным эффектом является явление, наблюдаемое при окислении химических элементов различного изотопного состава.

Эффект селективного окисления изотопов ^{10}B и ^{11}B в порошках аморфного бора был обнаружен и исследован группой ученых из Грузии в начале 1980-х годов [2, 6]. Эта экспериментальная работа была проведена с помощью дериватографического и калориметрического исследования процессов окисления образцов бора при различных скоростях нагрева. С использованием неизотермических методов стало возможным идентифицировать кинетику эффекта оксидации, который, как выяснилось, определяется зависимостью коэффициента окисления (α) и скорости окисления $d\alpha/dt$ от скорости нагрева (β), температуры (T) и времени (t). Сравнивались образцы аморфного и кристаллического изотопомодифицированного бора (^{10}B и ^{11}B , табл. 1). На рис. 1 приведены кривые кинетики окисления: зависимости коэффициента окисления от времени для образцов аморфного бора, изотопомодифицированного по ^{10}B и ^{11}B при скорости их нагрева 2,5 градус/мин. Процесс окисления проходит гораздо более интенсивно в интервале температур 475–550°С.

В этом случае процесс окисления ^{11}B более интенсивен. Результаты подобных термогравиметрических экспериментов по окислению порошков кристаллического бора показаны на рис. 2. Необходимо отметить, что сравнительно высокая интенсивность окисления наблюдалась для порошка, изотопомодифицированного по ^{10}B . В этом случае участок селективного окисления сдвигается к более высоким температурам: 575–675°С. Энергии активации реакции окисления в этих условиях равны: 225 ± 8 кДж/моль для ^{10}B и 249 ± 9 кДж/моль для ^{11}B .

При рассмотрении полученных результатов по зависимости скорости окисления бора от его изотопного состава мы пришли к известным понятиям об изменении колебательной энергии молекул для начального и активированного состояний. Согласно современным представлениям, эффект окисления связан с наличием активированного комплекса, переходящего в продукт взаимодействия (комплекс \rightarrow продукт). Можно в принципе представить активированное состояние как переходящую структуру между реагента-

ТАБЛИЦА 1.

Характеристические параметры образцов изотопомодифицированного бора

Образец	% ^{10}B	% ^{11}B	Размер образца, микрометры	Структура
S1	96.4	3.6	3	аморфная
S2	19.9	80.1	3	аморфная
S3	0.4	99.6	3	аморфная
S4	96.4	3.6	3	кристаллическая
S5	19.9	80.1	3	кристаллическая
S6	0.4	99.6	3	кристаллическая

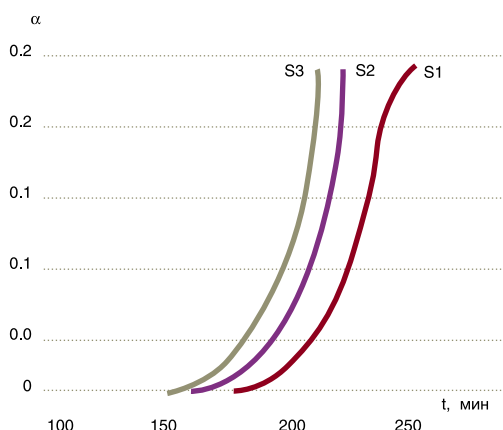


РИС. 1.

Уровень окисления как функция времени для аморфного ^{10}B (S1), аморфного ^{11}B (S3) и аморфного бора естественного изотопного состава (S2)

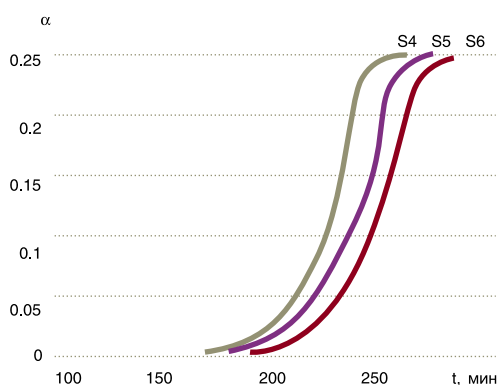


РИС. 2.

Уровень окисления как функция времени для кристаллического ^{10}B (S4), кристаллического ^{11}B (S6) и кристаллического бора естественного изотопного состава (S5)

ми и продуктом их взаимодействия. Естественно, что в случае бора уровень этого состояния определяется величиной его межатомных связей, и, вместе с тем, нулевой уровень активированного комплекса прямо не зависит от структуры образца (аморфная она или кристаллическая) – однако его «энергетика» существенно различна для комплексов с разным содержанием изотопов. В случае, когда участником реакции окисления является изотопомодифицированный бор, разница в положении нулевых уровней на кривой потенциальной энергии для его кристаллических образцов существенно выше, чем в активированном комплексе. В случае же аморфного бора, где отсутствует дальний порядок расположения атомов, то есть дальние связи разрушены, заметное различие между энергиями нулевых уровней отсутствует. В соответствии с выше сказанным, диаграмму потенциальной энергии при наличии эффекта окисления бора можно представить в виде, показанном на рис. 3.

В случае с кристаллическим бором определенная разница между значениями нулевых энергетических уровней для связей $^{10}\text{B} - ^{10}\text{B}$ и $^{11}\text{B} - ^{11}\text{B}$, также как раз-

ница для их активированных состояний обуславливает уменьшение энергии активации реакции окисления ^{10}B . Для аморфного бора разница в энергии нулевых уровней активированных комплексов одинакова с кристаллическим состоянием: нулевые энергии для легких и тяжелых изотопов в начальном состоянии одинаковы. Вследствие этого, энергия активации реакции окисления изотопа ^{11}B будет ниже, то есть более тяжелые изотопы одного и того же элемента окисляются более интенсивно, чем легкие.

Важные результаты были получены в экспериментах по изучению изотопных эффектов в высокочистом германии [13, 10]. Для начала с помощью методов дифференциального термического анализа и термогравиметрии было проведено исследование кислородосодержащих комплексов в сверхчистом монокристаллическом германии [10]. Удалось установить, что наличие свободных атомов кислорода приводит либо к образованию сложных кислородно-вакансионных комплексов, либо при соответствующих термодинамических условиях – к практически полному химическому связыванию кислорода в низшие окислы германия. Основной задачей являлось получение с помощью калориметрических исследований в температурном интервале 20–900° С данных о процессе образования и разложения квазихимических комплексов в монокристаллах германия, выращенных в атмосфере протия и дейтерия. При этом исходили из того, что рекомбинация-диссоциация комплекса при его термической обработке должна сопровождаться тепловыми эффектами. Ставилась также задача изучения и сравнения влияния двух изотопов водорода на процесс комплексобразования.

Исследования проводили на высокотемпературном калориметре НТ-1500 фирмы «Setaram» (Франция), который позволяет регистрировать термокинетику и тепловые эффекты в термоактивированных процессах до температуры 1750° С. При этом стабильность температуры составляет 0,001° С. В процессе экспериментов чувствительность микрокалометриче-

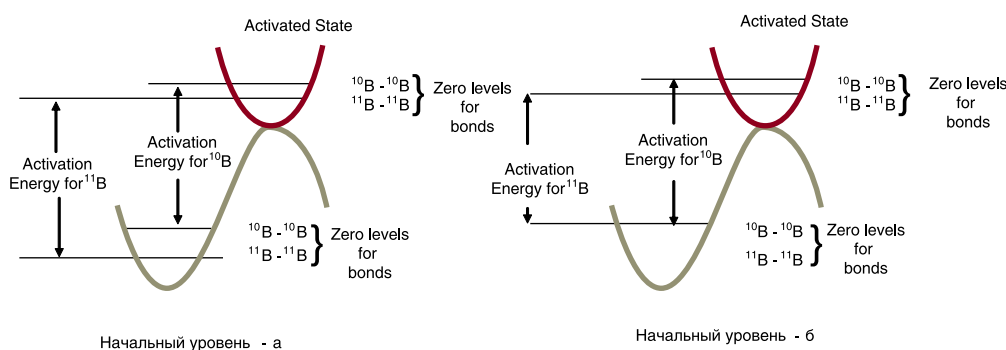


РИС. 3.

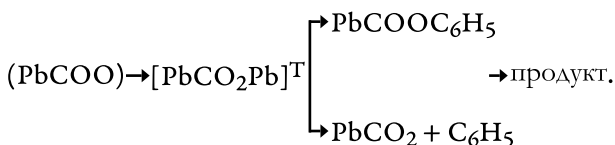
Диаграмма потенциальной энергии связей для кристаллического (а) и аморфного (б) бора

ского датчика составляла около 10 мДж. Величины наблюдаемых термических эффектов значительно превышали вышеуказанные нижние пределы измеряемой энергии. Эндо- и экзотермические пики термограмм относятся к водородосодержащим комплексам, образованным на основе вакансий и многовалентных примесей, причем дейтерий в отличие от протия комплексов практически не создает.

Обнаруженные эффекты находятся в соответствии с не старой, но уже ставшей классической моделью изотопных эффектов в радикальных химических реакциях и взаимодействиях различных веществ с азотом и кислородом, когда изотопы с нечетным количеством протонов и нейтронов (^{11}B , ^{13}C) являются более активными донорами, чем изотопы с их четным числом [4, 9].

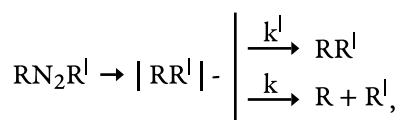
Как было установлено [4], вероятность протекания химической реакции зависит от энергии сверхтонкого взаимодействия, другими словами от ядерного спина и его магнитного момента. Это явление обуславливает использование различных химических реакций для разделения изотопов и создания изотопообогащенных веществ. Для примера, когда один из радикалов вещества, участвующего в фотохимической реакции, содержит магнитный изотоп, он претерпевает более быстрое триплет-синглетное преобразование, чем другие, не содержащие немагнитный изотоп ^{12}C . То есть, пары с ^{13}C быстрее становятся синглетными, и быстрее рекомбинируют в стартовые молекулы, чем пары с ^{12}C , в случае которых триплет-синглетное преобразование протекает медленнее, так же как и рекомбинация в начальные молекулы.

Экспериментально показано, что изотопный состав изменяется в процессе химической реакции в зависимости от степени синглет-триплетного преобразования магнитных и немагнитных пар. С 70-х годов прошлого века этот эффект был обнаружен и изучен в химических соединениях, содержащих бензол. К примеру, при фотолизе бензола его разложение протекает по схеме:



Рекомбинация триплетных пар происходит через триплет-синглетное преобразование, которое протекает быстрее в случае пар, содержащих изотоп ^{13}C .

В другом эксперименте, при термическом разложении двухизотопной формы визазобутилонитрила



где $\text{R}=(\text{CH}_3)\text{CCN}$ и $\text{R}^{\text{I}}=(\text{CD}_3)_2\text{CCN}$ был обнаружен изотопный эффект магнитной природы при его рекомбинации.

Сверхтонкое взаимодействие с протонами в радикале $(\text{CD}_3)\text{CCN}$ более чем в шесть раз выше, чем в случае радикала $(\text{CD}_3)_2\text{CCN}$. Термическое разложение протекет через синглетные радикальные пары, поэтому протонсодержащие пары быстрее переходят в триплетное состояние и диссоциируют с большей вероятностью, чем дейтерированные радикалы. Соответственно, вероятность рекомбинации у противных радикальных пар ниже.

В конце 80-х годов прошлого века были проведены масштабные исследования характеристик изотопно селективного процесса синтеза двуокиси углерода в электрическом разряде смеси $\text{CO} + \text{Ar}$. Нашим коллегам [3, 5] теоретически и экспериментально удалось показать, что наблюдаемый изотопный эффект является следствием осцилляционной накачки, а не кинетического масс-эффекта. Изотопно селективная зависимость параметров синтеза CO_2 от энергии протекания процесса в электрическом разряде смеси $\text{CO} + \text{Ar}$, а также ее состава определяет монотонность увеличения выхода CO_2 в процессе синтеза. В этом случае наблюдается уменьшение температуры газовой рабочей смеси ($T_{\text{газ}} \sim 100\text{K}$) и значительная изотопная селективность процесса синтеза CO_2 (≈ 80).

Физическая сущность разделения изотопов в электрическом разряде заключается в том, что при взаимодействии изотопных модификаций молекулы устанавливается квазиравновесное состояние, при котором верхние колебательные уровни преимущественно заселены молекулами, содержащими более тяжелый изотоп. Теоретическое и экспериментальное исследование изотопного эффекта в азотно-кислородной смеси показало, что он при синтезе окиси азота в термодинамически неравновесных условиях электрического разряда связан с колебательно-колебательным обменом между изотопными модификациями молекулы азота и реакцией колебательно-возбужденных молекул азота с атомарным кислородом. Удалось также установить, что образование атомов азота происходит по изотопно селективным каналам вследствие реакции взаимодействия колебательно-возбужденных молекул азота с атомарным кислородом, а также возбуждения молекул азота (N_2) до границы диссоциации [1].

Важные результаты в направлении изотопного материаловедения были получены группой ученых Московского инженерно-физического института, Российского научного центра «Курчатовский институт», Грузинского технического университета и Института стабильных Изотопов. Среди них особо следует отметить изучение изотопного эффекта в процессе выращивания пленочных кристаллов карбида бора B_4C [15, 18]. Как известно, последний является тугоплавким, высокопрочным, высокоабразивным и

химически весьма стойким, материалом, широко используемым в ядерных технологиях. В настоящее время наиболее хорошие результаты по получению пленок (в том числе наноструктурных) B_4C достигнуты при использовании лазерно-плазменных технологий их выращивания. Этим методом можно получать различные соединения и композиционные материалы без нарушения их стехиометрии.

Высокоэнергетические ионы лазерной плазмы позволяют существенно снизить температуру роста кристаллической пленки вещества по сравнению с другими методами получения пленок. Испарением поверхности горячепрессованного образца B_4C (мишень в виде шайбы) природного изотопного обогащения (концентрация ^{10}B порядка 19% мас.) и стехиометрического состава в высоковакуумной камере была получена лазерная плазма, исследованная с помощью лазерного масс-спектрометра. Удалось установить, что плазма при широком спектре плотности лазерного излучения $q=4 \cdot 10^8 - 5 \cdot 10^9 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$ преимущественно состоит из однократно заряженных ионов бора (^{10}B , ^{11}B) и углерода (^{12}C , ^{13}C). Состав пара B_4C в случае плотности лазерного излучения, близкого к порогу ионизации, был изучен с помощью дигностического комплекса на базе динамического масс-спектрометра. В пределе всего интервала полученных плотностей лазерного излучения пар карбида бора содержит единичные атомы ^{10}B , ^{11}B , ^{12}C и ^{13}C . При этом молекулы и кластеры, состоящие из двух и более атомов, во всех проведенных экспериментах практически не наблюдались. Природное изотопное соотношение $^{10}B/^{11}B$ в плазменном паре также соответствовало изотопному соотношению в первичных образцах-мишенях.

Проведенные эксперименты показали, что плазма, полученная лазерным испарением при лазерном импульсе порядка 10 наносекунд и плотности мощности в пределах $8 \cdot 10^7 - 5 \cdot 10^9 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$, преимущественно состоит из единичных атомов и ионов бора и углерода. Стехиометрическое содержание пара составляет примерно 4:1, что соответствует стехиометрии карбида бора. В экспериментах также была изучена зависимость ионного тока от времени $I(t)$ при различных плотностях лазерного излучения. Скорость ионов V и их энергия E определялись во времени от момента испарения до их регистрации в плазменном потоке. Концентрация ионов в плазме и функция их распределения оценивалась по осциллограмме насыщенного ионного тока $I(t)$ по формуле:

$$n = \frac{I(t) t}{eZLS} \quad \text{и} \quad f(E) = \frac{1}{S} \frac{dN}{dE} = \frac{I(t)t^3}{emL^2S},$$

где eZ является ионным зарядом (в наших опытах $Z=1$); m – масса иона; L – расстояние между мишенью и плазменным облаком; S – размер плазменного облака.

Распределение энергии ионов в основном зависит от плотности мощности лазерного излучения (рис. 4). В случае, когда мощность лазерного излучения находится вблизи предела ионизации ($q=4 \cdot 10^8 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$), большинство ионов обладают энергией 10–300 эВ при средней энергии 100 эВ. При увеличении плотности мощности лазерного излучения до $2.6 \cdot 10^9 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$ соответственно растет и концентрация высокоэнергетических ионов (большинство ионов обладает энергией 20–800 эВ при среднем ее значении 120 эВ).

Как показали эксперименты, по результатам которых были построены зависимости максимальной и средней энергий ионов – $E_{\text{макс}}$ и $E_{\text{ср}}$ от плотности мощности лазерного излучения, величина максимальной энергии ионов линейно зависит от значения q , тогда как величина их средней энергии пропорциональна $q^{1/2}$.

Наличие высокоэнергетических ионов в лазерной плазме в процессе лазерно-плазменной эпитаксии обуславливает появление на поверхности осажденной на подложке пленки вакансий и межузельных атомов при уменьшении температуры подложки в начале ориентированного роста кристаллической пленки. Это объясняется стабильным зародышеобразованием в местах нарушения структуры кристаллической решетки, и, так как степень равновесия невысока температура подложки должна быть достаточна для поддержки движения атомов к центрам роста кристаллической структуры. Создание вакансионных дефектов играющих роль искусственных центров роста, позволяет вырастить кристаллические пленки при более низких миграционных характеристиках атомов, то есть при более низких температурах подложки.

Пленки карбида бора естественного изотопного обогащения осаждались на свежие сколы $NaCl$ и при температуре подложки $T=20-35^\circ \text{ C}$ они имели аморфную структуру. При ее повышении ($T=350^\circ \text{ C}$)

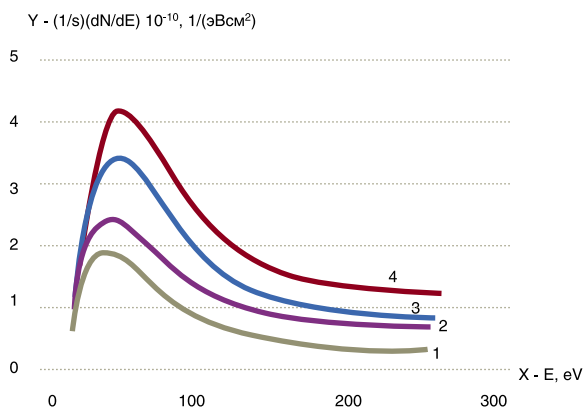


РИС. 4.

Энергетический спектр ионов в борокарбидной лазерной плазме для различных значений q : 1 - $q=4.0 \cdot 10^8 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$; 2 - $q=9.6 \cdot 10^8 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$; 4 - $q=2.6 \cdot 10^9 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$

их структура постепенно превращалась в кристаллическую (толщина более 30 нанометров), а после температуры, превышающей $T=470^\circ\text{C}$, пленка уже целиком имела кристаллическую структуру. В этих условиях (температура подложки NaCl $450\text{--}480^\circ\text{C}$) были получены текстурированные пленки B_4C с толщиной порядка 40 нанометров.

Существенное уменьшение температуры роста кристаллической пленки на подложке NaCl было установлено при использовании в качестве мишени карбида бора, обогащенного изотопом ^{10}B до 90% мас. В этом случае кристаллический рост начинался с температуры подложки 300°C , а практически полная кристаллизация наблюдалась уже при температуре подложки 440°C . Толщина кристаллических пленок при этом достигала 20–60 нанометров, а их кристаллографическая ориентация была $(100)\text{B}_4\text{C}|| (100)\text{NaCl}$. Структурные исследования пленок, полученных лазерно-плазменным осаждением, проведенные рентгенографическим и электронно-микроскопическим анализами показали, что пленки B_4C , выращенные из изотопообогащенного материала (^{10}B – 90% мас), кристаллизуются при значениях температуры подложки на несколько десятков градусов ниже, чем пленки, где в качестве мишени использовался B_4C с бором естественного изотопного состава.

В последние годы интенсивно исследуются возможности использования изотопномодифицированных материалов при создании функциональных систем квантового компьютера, для работы которого необходима организация заданного (спинового) движения квантовых битов (кубитов) в твердотельных материалах. В связи с этим предполагается использовать изотопные эффекты в кремнии и фосфоре, а именно, электронный и ядерно-спиновый эффекты в ^{31}P и ^{28}Si [19]. Известно, что в качестве квантово-информационной частицы кубита – может быть использована частица с двумя основными квантовыми состояниями:

$$\begin{array}{l} E_1 \text{ ————— } |\Psi_1\rangle \quad |1\rangle \quad \text{Возбужденное состояние} \\ \updownarrow \\ E_0 \text{ ————— } |\Psi_0\rangle \quad |0\rangle \quad \text{Основное состояние} \end{array}$$

В качестве примера здесь можно назвать: основное и возбужденное состояния атома, состояния вертикально и горизонтально поляризованного фотона, нормальное и сверхпроводящее состояния у частиц с $\frac{1}{2}$ спина в магнитном поле и т.д. [16]. Два кубита преимущественно находятся в состоянии

$$|\Psi_2\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle,$$

где $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$

Кубиты находящиеся в таких условиях, коррелируют по правилам, не соответствующим классической физике. Явление их взаимодействия, называемое «запутанностью», описывается законами квантовой механики.



Рис. 5.

Состояние N кубитов, определяемое комплексным вектором размерностью 2^N

Для реализации квантовых вычислений в первую очередь необходимо наличие двухуровневых систем, сравнительно высокое время декогеренции квантовых частиц (в $10^4\text{--}10^5$ раз больше, чем время работы квантовых ворот (затвора, регулирующего двухкубитное взаимодействие), возможность измерения и контроля параметров тока и свойств носителей квартовой информации. Использование в качестве кубитов ядерных спинов во многих случаях является более предпочтительным, так как ядерные спины более изолированы и защищены от внешнего влияния, что обуславливает более высокие значения времени их декогеренции.

Как показали теоретические исследования, а также работы по моделированию квантовых процессов, использование изотопов ^{31}P и ^{28}Si позволяет в несколько раз усилить ядерно-магнитный и электронно-спиновые эффекты в рабочем элементе, изготовленного из изотопномодифицированном кремния полученного нейтронно-трансмутационным методом и легированного также изотопномодифицированным фосфором [8]. При том надо подчеркнуть, что фосфор – мелкий донор в кремнии.

НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

На основе экспериментальных результатов по изучению влияния изотопного состава различных веществ на их физические и химические свойства, полученных в последние годы, сделан ряд попыток теоретического анализа этих эффектов. Расчетные модели зависимости скорости химических реакций от изотопного состава реагентов, построенные с учетом магнитного изотопного эффекта, ясно указывают на изменение электронного каркаса атомов при изменении их ядерной массы и спина. Это наиболее четко подтверждается в экспериментах по исследованию электронного сродства $^{15}\text{N} > ^{14}\text{N}$ и $^{13}\text{C} > ^{12}\text{C}$ в некоторых простых химических процессах [12], также как при изотопно-селективном массо-

переносе в поле лазерного луча для малых частиц бора.

На основе этих результатов и принимая во внимание, что движение электронов в атоме всегда сопровождается колебанием его ядра с той же частотой вокруг общего центра гравитации, корреляцию между центробежными и кулоновыми силами можно представить в виде $m r_e \omega^2 = M r_n \omega^2$, где m и M являются массами электрона и ядра соответственно; r_e и r_n – радиусами орбит электрона и ядра; ω^2 – циклическая частота.

Зная, что энергия ионизации атома с основного состояния равна: $E = - (Z^2 e^4 m \omega^2 / 8)^{1/3}$, где Z порядковый номер химического элемента, e – заряд электрона

Можно записать:

$$E = - [Z^2 e^4 m M \omega^2 / 8 (m + M)]^{1/3} = \\ = - [Z^2 e^4 \omega^2 / 8 (1 + m/M)]^{1/3}.$$

Отсюда, изменение массы ядре не приводит к существенному изменению энергии ионизации атома: например, в случае с бором замена изотопа ^{10}B изотопом ^{11}B обуславливает рост величины энергии его ионизации до 0,01 эВ.

Вследствие этого, в процессе формирования атомов бора чисто ионных связей например с кислородом изотопный эффект составляет порядка десятков джоулей на моль. Это достаточно малые значения даже для элементов легких масс, таких как бор, чтобы таким образом объяснить экспериментальные результаты, полученные в радикально-химических реакциях по окислению изотопномодифицированных образцов бора.

Нам представляется, что при формировании ковалентных связей в случае с бором и кислородом, а также азотом, углеродом и т.д. изотопный эффект может быть намного более сильным, чем при ионных связях. Вместе с синглет-триплетными переходами электронов он определяет 10–100 кратно более ярко выраженный изотопный эффект для этих процессов, чем можно было предположить по моделям, предложенным ранее.

Во многих селективных и резонансных процессах, таких как лазерно-стимулированные эффекты в различных средах, электронно-фотонные взаимодействия, квантово-спиновые эффекты в наноструктурах и многих других, изотопные эффекты могут сыграть определяющую роль. Систематическое исследование изотопных эффектов в конденсированных средах

имеет огромное значение для развития новых подходов в современной физике и химии. Они также стимулируют создание новых прикладных направлений таких как, изотопное материаловедение, спинтроника и др. [12, 17].

В заключение выражаю глубокую благодарность всем моим коллегам, совместно с которыми были проведены теоретические, экспериментальные и технологические исследования, и без которых подготовка этой статьи была бы невозможна.

ЛИТЕРАТУРА

1. АНДРЮЩЕНКО В.И., БАИАДЗЕ К.В., БАРАНОВ В.Ю. и др. О природе изотопного эффекта в реакциях N_2 с O_2 в электрическом разряде // Химическая Физика. 1989. Т. 8, №8. С. 1092–1101.
2. БАИРАМАШВИЛИ И.А., ДЖАНДИЕРИ Т.Г., КЕРВАЛИШВИЛИ П.ДЖ. Окисление элементарного бора. Изв.АН СССР. Сер. Неорг. Матер. 1984. Т. 20, №7. С. 1117–1122.
3. БАРАНОВ В.Ю. Изотопы. Сборник статей Том I: Свойства, получение, применение. М., Физматлит, 2005. 600 с.
4. БУЧАЧЕНКО А.А. Обогащение магнитных изотопов – новый метод исследования механизмов химических реакций // Журнал физической химии. 1977. Т. LI, №10. С. 2461–2473.
5. ГРИГОРЬЕВ И.С. Разделение изотопов с помощью света // Доклад на XIII Киконских чтениях 1997. Препринт ИАЭ 6246/12, 2002, 66 с
6. ДЖАНДИЕРИ Т.Г., КАЛАНДАДЗЕ Г.И., КЕРВАЛИШВИЛИ П.ДЖ. Калориметрическое исследование фазовых превращений в боре // Изв. АН СССР. Неорг. материалы. 1988. Т. 24, № 12. С. 1982–1987.
7. ДЖОБАВА Д.Ш., МАКАРОВ В.С., ПЕТРОВ В.И., КЕРВАЛИШВИЛИ П.ДЖ. Особенности кинетики окисления изотопомодифицированного аморфного бора. Высокочистые вещества. 1990. № 5. С. 137–141.
8. КАРУМИДЗЕ Г.С., КЕРВАЛИШВИЛИ П.ДЖ. Особенности низкотемпературного нейтронно-ядерного легирования кремния // Физика и химия обработки материалов. 1989. №4. С. 17–25.
9. КЕРВАЛИШВИЛИ П.ДЖ. Об изотопном эффекте при взаимодействии с кислородом Атомная энергия. Т. 68, 1990, вып. 1. С. 36–38.
10. КЕРВАЛИШВИЛИ П.ДЖ., МАЧАЛАДЗЕ Т.Е. Образование кислородных ассоциатов в германии при термической обработке. Физика и техника полупроводников. Т. 18, вып. 9, 1984. С. 1719–1921.
11. ABDUSHELISHVILI G.I., TKESHELASHVILI G.I., BAKHTADZE A.G., KERVALISHVILI P.J. Boron particles production in nonequilibrium laser-chemical radical reactions during the IR multiphoton dissociation. Laser Chemistry. 1989. V.10. P. 81–92.
12. BEREZIN A.A. Stable Isotopes in Nanotechnology. Nanotechnology Perceptions. 1984. Vol. 5, N 1. P. 27–36.
13. KERVALISHVILI P., KALANDADZE G. Calorimetric Study of Hydrogen-Containing Complexes in Germanium of high purity / Proceedings of 20th International Conference on the Physics of Semiconductors. Thessaloniki, Greece, World Scientific. Vol. 1, 1990. P. 799–805.
14. KERVALISHVILI P.J. Isotope effects in condensed matter: some views and prospects // Proc. of the XVI Pan Hellenic conference on Solid State Physics, September 2000, Nafleon, Greece. P. 7–20.

15. KERVALISHVILI P., SHALAMBERIDZE S., ESADZE G., PORTA P. Semiconductor material film production by laser plasma deposition *Le Vide, le Couches minces*, N-167, 1993. P. 189–198.
16. KERVALISHVILI P. 2011 Quantum information science: some novel views. In Book *Computer Science Technology and Applications*. Nova Science Publishers, Boston, USA, 2011, 518 p.
17. KERVALISHVILI P. Quantum Processes in Semiconducting Materials and Spinelectronics. *Rev. Adv. Mater. Sci. (RAMS)*. 2007, Vol. 14, № 1. P. 371–379.
18. SHALAMBERIDZE S., KERVALISHVILI P. ET AL. Isotopic effect during Boron Carbide film production by a laser plasma deposition method // *J. of Material Processing and Manufacturing Science*. 1998. Vol. 6, N 4. P. 321–328.
19. SHLIMAK I., VAGNER I. Si and SiGe layers from isotopically engineered Si and Ge. *Phys. Rev. B*. 75, 2007. P. 045336-41.

Кервалишвили Паата Джамлетович,
д.ф.-м.н., профессор, президент Академии естественных наук Грузии, президент Евро-Средиземноморской академии искусств и наук

☛ Грузия, г. Тбилиси 0160, пр-т А. Казбеги, № 9а,
тел.: +995 322 378857, e-mail: kerval@global-erty.net