

# Кумулятивная квантовая механика (ККМ). Часть II. Применение кумулятивной квантовой механики при описании поляризационных квантово-размерных эффектов Высикайло

Ф.И. Высикайло

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

Исследованы процессы физического легирования наноструктурированных (мета-) материалов. На базе сформулированной автором кумулятивной квантовой механики (ККМ) описаны: 1) два типа интерференции и дифракции (в центре) в полых квантовых резонаторах для волн де Бройля электронов; 2) два типа квантово-размерных эффектов Высикайло, обусловленных поляризационным захватом электронов в полости квантовых резонаторов. Первый тип интерференции и соответственно дифракции в центре резонатора соответствует интерференции де Бройля-Френеля (sin-волны с узлом волны в центре резонатора) и применяется для описания локализации (кумуляции) электронов в атоме (квантовом резонаторе с атомным ядром в центре резонатора). Второй тип интерференции и соответственно дифракции назван интерференцией Высикайло-де Бройля-Фраунгофера (дифракция с *пучностью* волны де Бройля электрона в центре *полого* резонатора), при которой  $\psi_n$ -функции электрона неограниченно кумулируют (фокусируются поляризационным «зеркалом») к центру *полого* квантового сферически- или цилиндрически-симметричного резонатора ( $\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r^k$ ).

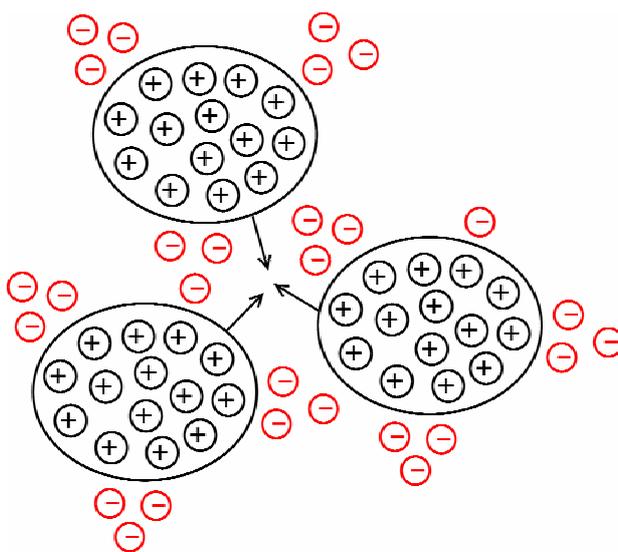
Показано, что нерегулярные в центре резонатора cos-решения для любых волновых явлений регуляризируются геометрическим коэффициентом. В рамках ККМ доказано, что наряду с классическим спектром энергий для асимметричных  $\psi_n$ -функций (sin-волн – обертонов) с  $E_n \sim n^2$  для полых квантовых резонаторов существуют и реализуются в экспериментах квантовые резонансы для симметричных  $\psi_n$ -функций (cos-волн – основной тон) с  $E_n \sim (n-1/2)^2$ . Спектр энергетических локализованных барьером состояний  $E_n > 0$  (*метастабильная IQ-частица* – частично открытая квантовая точка, линия или яма), как и в случае  $E_n < 0$  (*стабильная FQ-частица* – закрытая квантовая точка, линия или яма), определяется эффективными внутренними размерами ящика ( $R+r_{ind}$ ) с поляризационными силами, эффективно действующими на расстоянии  $r_{ind}$  от молекулы. Сравнения результатов аналитических расчётов с экспериментальными наблюдениями убедительно доказывают правомерность применения ККМ для описания квантово-размерных эффектов при физическом легировании метаматериалов. Впервые доказано, что в нанокompозитных материалах пара «собственная функция  $\psi_n$  – собственная энергия  $E_n$ », составляющая квантовое состояние в наномире, помеченное основным квантовым числом  $n$ , в мезомире физически легируемых ловушками нанокompозитов заменяется двумя параметрами наномира: диаметром нанокристалла  $D$  и резонансной относительной концентрацией модификатора (ловушки, например  $C_{60}$ ,  $\gamma_0$ )  $\zeta_n$ . Обсуждается самосборка полых аллотропных форм углерода на резонансных электронах.

УДК 537.86

## ВВЕДЕНИЕ. ФИЗИЧЕСКОЕ ЛЕГИРОВАНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ

Для повышения эффективности атомных электростанций разрабатывают наноструктурированные *термоэлектрики*. Они могут быть полезны при утилизации тепла двигателей внутреннего сгорания и в других задачах энергетики и энергосбережения. Решение этих проблем видится в комплексном подходе к конструированию метаматериалов (наноструктурированные материалы) и их свойств. Структурирование метаматериалов можно осуществить, применяя наноловушки для волн де Бройля электронов [1–3]. Резонансная кумуляция электронов в ловушки и формирование заряженных структур с захваченными электронами в эти квантовые резонаторы – очень важное явление в практике создания новых нанокompозитов с наноструктурированным объёмным зарядом – *бислойных метаматериалов* (рис. 1). В результате кумуляции части свободных электронов в ловушках происходит *физическое легирование* нанокристаллита. В кристаллите формируется объёмный положительный заряд, а в ловушках соответственно локализуется отрицательный заряд (рис. 1). У бислойных метаматериалов, структурированных слоями объёмного заряда (рис. 1), появляются свойства, существенно отличающиеся от свойств неструктурированных заряженными ловушками метаматериалов. Во-первых, физическое легирование нанокристаллов может приводить к генерации огромных давлений, обжимающих (упрочняющих) метаматериалы кулоновскими силами (рис. 1) до 100 ГПа [1]. Во-вторых, положительный заряд нанокристаллов, физически легированных ловушками (рис. 1), препятствует рекристаллизации заряженных нанокристаллов [3]. В-третьих,

согласно [3] резонансный захват (локализация) электронов с энергиями  $20 \text{ эВ} > E_n > 0$  может приводить к резкому колебательному изменению свойств метаматериала, таких как теплопроводность, проводимость и др. Для волн де Бройля электронов резонаторами, захватывающими электроны силами поляризации, являются любые полые *поляризующиеся* молекулы: фуллерены, нанотрубки, полые структуры, ограниченные листами графенов, в том числе и супрамолекулы ДНК [1–3]. В этих (гигантских) супрамолекулах могут формироваться стоячие или бегущие по каналу *cos-* (**основной тон**) и *sin-*волны (**обертон**) де Бройля (солитоны). Новые квантово-размерные свойства бислойных метаматериалов, обусловленных поляризационными эффектами, будут аналитически исследованы во второй части работы. Опираясь мы будем на результаты, полученные в первой части, где были сформулированы основы кумулятивной квантовой механики (*ККМ*). Отсутствие в центре полых (с любым типом симметрии) поляризующихся супрамолекул отражающего электрон атомного ядра, согласно *ККМ*, снимает необходимость постановки граничного условия  $\psi_n(0)=0$  и открывает возможность захвата стоячих *cos-*волн – **основного тона** или  $1/2$ -волнового резонанса в представлении рис. 3,в, часть I. В соответствии с этим, в случае сферической и цилиндрической симметрии резонатора, «реабилитируется» первый резонансный энергетический уровень (для *cos-*волны – **основного тона**). Это снижает минимальную энергию активации захвата электрона ровно в 4 раза по отношению к *sin-*волнам – **обертон**ам. Итак, наряду с собственным спектром для *sin-*волн ( $E_n \sim n^2$ ) в **полых** квантовых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторах, как и в случае плоскостной симметрии, может наблюдаться и собственный спектр *cos-*волн – **основного тона** ( $E_n \sim (n-1/2)^2$ ). При  $n \gg 1/2$  происходит вырождение энергетических уровней в полых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторах не в два раза – в соответствии с принципом Паули, – а в четыре раза соответственно (см. часть I). Вышеизложенное, согласно [1–3] и данной работе, соответствует любому типу симметрии квантового резонатора. Как доказано в части I, нерегулярные в центре резонатора *cos-*решения регуляризируются в центре резонатора соответствующим типом симметрии **нормировочным геометрическим коэффициентом**, равным  $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$  при  $k \neq 0$  (при  $k = 0, \chi = 1$ ). Сферической симметрии соответствует –  $k = 1$  и цилиндрической симметрии соответствует –  $k = 0,5$ . В итоге такой регуляризации становится возможным описание кумулятивных явлений в стоячих и сходящихся волнах, например в формирующихся в океанах волн убийц, при формировании пузырька в центре акустического резонатора, заполненного жидкостью (рис. 1, ч. I), и т.д. Своевременный учёт геометрического нормировочного коэффициента в случае сферической или цилиндрической симметрий (а не поспешный – требующий регулярности  $\psi_n$ -функции во всём пространстве) приводит к «реабилитации» решений, описывающих неограниченную кумуляцию в сферически- и цилиндрически-симметричных **полых** резонаторах для волн де Бройля электронов, а также во всех **полых** акустических резонаторах и **полых** резонаторах для электромагнитных волн с указанными типами симметрии.



**Рис. 1.** Схема физического легирования нанокристаллов квантовыми резонаторами для волн де Бройля электронов [1]. Фрактальная структуризация заряда обусловлена захватом свободных электронов ловушками – квантовыми резонаторами. «+» – положительно заряженный нанокристалл; «-» – квантовый резонатор, физически легирующий нанокристалл. Стрелками показаны силы кулоновского обжатия, обусловленные структуризацией объёмного заряда.

Во второй части аналитические расчёты всех собственных энергий квантовых резонаторов, проведенные в рамках *ККМ*, сравниваются с имеющимися в литературе экспериментальными наблюдениями за резонансным захватом электронов поляризующимися полыми молекулами фуллеренов ( $C_{60}$  и  $C_{70}$ ). Из этих сравнений определяется эффективный размер ( $r_{ind}$ ), на котором силы поляризации полых молекул фуллеренов достигают максимального значения, доказываемая реализация в экспериментах основного тона (cos-волн) при захвате электронов  $C_{60}$  и  $C_{70}$  и по характерным высоте и ширине поляризационного потенциального барьера оценивается характерное время ( $\sim 10^{-2}$  с) кумулятивного удержания свободных электронов в сферически-симметричных *полых* квантовых резонаторах  $C_{60}$  и  $C_{70}$ . Во всех расчётах масса электрона выбиралась равной классической массе.

Далее осуществляется применение *ККМ* для описания двух типов квантово-размерных эффектов Высикайло, обусловленных резонансным захватом электронов полыми поляризующимися молекулами фуллеренов и проявляющих себя на разных характерных размерах. Эти поляризационные квантово-размерные эффекты в электрических полях в физически легированных метаматериалах непосредственно следуют из теоретических работ автора [1–3].

### АВТОРСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

Для нерелятивистских частиц ( $v \ll c$ ) длина волны де Бройля  $\lambda = h/mv$ , где  $m$  – масса и  $v$  – скорость частицы, а  $c$  – скорость света. Следовательно, длина волны де Бройля тем меньше, чем больше масса частицы и её скорость. Так как электрон обладает меньшей массой, то все волновые (квантовые) явления с участием электронов начинаются в волновых или квантовых ящиках (атомы, квантовые ямы, проволоки и точки) с нанометровыми размерами. Действительно, характерный квантовый размер, занимаемый электроном с кинетической энергией  $\varepsilon$  при комнатной температуре (или его длина волны де Бройля), равен  $\lambda_e = 12,25[\text{Å}]/\sqrt{\varepsilon} \approx 7,6$  нм (полуволна  $\lambda_e/2 \approx 3,8$  нм, а радиус структуры в четверть волны –  $\lambda_e/4 \approx 1,9$  нм). Здесь  $\varepsilon$  – кинетическая энергия электрона в эВ. Если энергию электрона выбрать порядка 1 эВ, то  $1/2$ -волновой резонатор для такого электрона будет иметь радиус, равный  $\lambda_e/4 \approx 0,3$  нм. Для молекул фуллерена  $C_{60}$  радиус  $\approx 0,36$  нм [4, 5]. Эта величина соответствует и радиусу нанотрубок. В экспериментах с фуллеренами – идеальными сферически-симметричными поляризующимися квантовыми точками, способными захватывать свободные электроны с резонансной энергией  $E_n \sim 1$  эВ, и будем искать экспериментальные подтверждения *ККМ*. В средах влияние возмущения с характерным размером  $l$  (или  $\lambda_e = 7,6$  нм) оказывает существенное влияние на размеры в несколько раз большие, порядка  $10 \cdot l$  (или 76 нм). Следовательно, *нанотехнологии – это технологии, применяемые в комфортных для человека условиях (при комнатной температуре), в которых основным элементом конструирования композитных материалов может оказаться захват одного или нескольких свободных электронов ловушкой или квантовым ящиком* (рис. 1 и рис. 2, ч. I). Захват свободных в нанокристаллах электронов осуществляется наноструктурами – модификаторами, являющимися квантовыми резонаторами для волн де Бройля электронов (квантовыми ящиками, в которых локализуются свободные электроны, рис. 1). «Q-ящики» (сферы и цилиндры) находятся на поверхности нанокристалла, не вступают с атомами нанокристалла в химические связи, но осуществляют кулоновское обжатие материалов в единое целое (рис. 1). Поэтому особенности характеристик всего композита из наносистем могут быть обусловлены не просто уменьшением размеров частиц или структур и невозможностью рекристаллизации нанокристаллов, а принципиально новыми взаимодействиями, открытыми автором в [1–3], между электронами, захватывающими их наночастицами – резонаторами для волн де Бройля электронов и уже *дальнодействующим кулоновским взаимодействием* с огромными фрактализованными электрическими нанополями (рис. 1) [1]. Электрические потенциалы у поверхности положительно заряженных нанокристаллов обеспечивают свободные электроны у их поверхности дополнительной кинетической энергией и тем самым выполняют роль внутреннего катализатора, меняющего макросвойства всего нанокompозита [1–3]. В итоге фрактального кулоновского взаимодействия частей нанокompозита в его свойствах проявляется *синергетическое* влияние на макроскопические параметры материалов: закономерностей квантовой механики (квантование резонансных энергий, захваченных электронов), взаимодействия объёмных зарядов дырок и структур с захваченными электронами, *синергетических электрических полей* и всей совокупности размерных поверхностных и объёмных эффектов одновременно [1–3]. Возникновение синергетических электрических полей, обусловленных резонансной локализацией электронов в ловушках на границе положительно заряженного нанокристалла, приводит к появлению двух типов

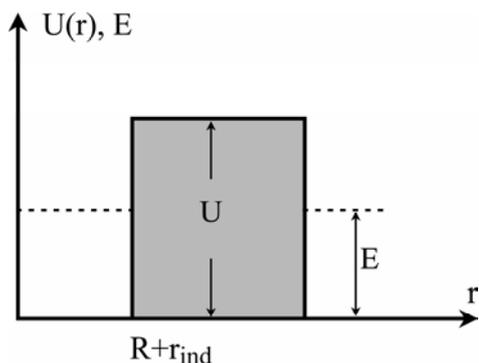
поляризационных квантово-размерных резонансных эффектов Высикайло. Согласно поляризационному эффекту Высикайло первого типа [2], захват электронов может происходить в результате формирования стоячей волны де Бройля в квантовом полумесяце резонатора для волн де Бройля (Q-частицы: квантовые точки, проволоки и ямы). Характерный размер поляризационного эффекта Высикайло первого типа порядка характерного размера ловушки ( $\sim 1$  нм для  $C_{60,70}$  и др. фуллеренов и нанотрубок). Уже согласно поляризационному эффекту Высикайло второго типа, в зависимости от количества ловушек в нанокompозите будет меняться положительный заряд нанокристаллита (рис. 1), физически легированного ловушками, и, следовательно, изменится средняя энергия электронов у поверхности нанокристаллитов на размерах кристаллита. В результате из-за поляризационного резонансного взаимодействия, меняя концентрацию легирующей добавки (концентрации ловушек), можно эффективно управлять макропараметрами бислойных метаматериалов с размерами от 10 нм до мезоразмеров всего материала. Итак, согласно [1–3] мы приходим к открытию нового метода легирования – *физическому легированию или формированию бислойных метаматериалов* (рис. 1) и их эффективному применению на практике.

### ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЗАХВАТ В КВАНТОВЫЙ РЕЗОНАТОР. КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ ВЫСИКАЙЛО ПЕРВОГО ТИПА

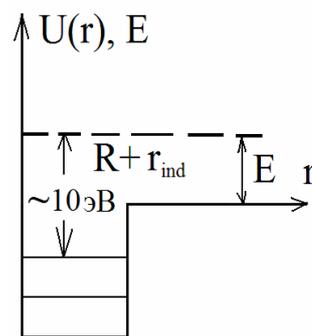
На рис. 2 (ч. I) приведена схема поляризационного захвата молекулой фуллерена электрона [1–3]. Величина средней электронной поляризуемости полых фуллеренов велика и для  $C_{60} - \alpha = 90 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3$ . Налетающий на фуллерен электрон постоянно ускоряется в электрическом поле им же поляризованной молекулы. Электрон, покидающий фуллерен, наоборот, притягивается поляризованной молекулой и тем самым возвращается к её центру, отражаясь в поляризационном «зеркале» – барьере (рис. 2, ч. I и рис. 2) [1–3]. Для более точного исследования влияния поляризационных сил в ближней зоне поляризованного диполя  $C_{60}$  (рис. 2, ч. I) следовало бы провести численные расчеты распределения плотности электронов в  $C_{60}$  методом функционала плотности (см., например, [6]) в присутствии налетающего электрона и тем самым рассчитать пространственный и временной профиль поляризационного барьера. Но определенные детали структуры сечений прилипания (захвата в резонатор) от энергии электронов и физика явления кумуляции электронов в полые поляризующиеся молекулы с радиусом  $R$  могут быть уточнены и в рамках простой, предложенной автором аналитической консервативной модели, сводящейся к уравнению (1), из ч. I и граничному условию  $U(R+r_{\text{ind}}) = \infty$  на отражение от поляризационного барьера – «зеркала» (рис. 2). Эта модель поляризационного захвата электрона полый поляризующейся молекулой (рис. 2) совпадает с моделью Гамова, применённой им для моделирования  $\alpha$ -распада атомных ядер, то есть для фемтометровых структур. Основной проблемой в поставленной так задаче является выбор эффективного расстояния от поляризующейся полый молекулы  $r_{\text{ind}}$ , на котором располагается поляризационное «зеркало», отражающее электрон обратно в полость квантового резонатора (рис. 2).

В модели предполагается, что основное время электрон без действия кулоновских потенциалов движется по инерции к центру уже не поляризованной полый молекулы (рис. 2). При этом считаем, что поляризационное «зеркало» для электронов (с резонансной энергией) находится на определенном расстоянии от поверхности молекулы фуллерена –  $r_{\text{ind}}$  (рис. 2 и рис. 2, ч. I), то есть ближний край потенциальной ямы расположен от центра резонатора на расстоянии  $R+r_{\text{ind}}$  (рис. 2).  $R$  – радиус сферически-симметричной молекулы. Формирование отражающего электрон (к центру полый молекулы) поляризационного барьера (квантово-кулоновского фокусирующего «зеркала») происходит в результате действия поляризационных сил (рис. 2). Фокусирующее к центру фуллерена поляризационное «зеркало» для захваченного электрона формируется на короткий миг синергетическими (совместными) полями нескольких оголившихся положительно заряженных ионов атомов углерода, появившихся из-за поляризации молекулы только в тот момент, когда этот эндэлектрон покидает объем полый молекулы, то есть становится экзоэлектроном, вышедшим из молекулы, но не проникшим через барьер  $U(r)$  (рис. 2,а). Этот поляризационный квантово-размерный эффект Высикайло первого типа с поляризационной геометрической поправкой  $\zeta = (R+r_{\text{ind}})/R$ , обусловленный поляризацией полый молекулы, впервые, по-видимому, был открыт автором в [2–3]. При этом захвате частота плазмона (обобществлённых в оболочке электронов) в молекуле  $C_{60}$  должна быть больше, чем характерная частота захватываемого электрона. Согласно гипотезе де Бройля, этот эффект аналогичен формированию акустических стоячих волн в резонаторе (рис. 1, ч. I) и, как упоминалось, аналогичен явлениям, происходящим при  $\alpha$ -распаде атомных ядер (модель

Г.А. Гамова). Но в случае квантового резонатора для волн де Бройля он обусловлен притяжением электрона к им же поляризованной молекуле (рис. 2, ч. I).



**Рис. 2,а.** Схема метастабильной (квазиоткрытой) квантовой частицы с поляризационным зеркалом (с конечным размером), захватывающим электрон с энергией  $E > 0$  в поляризационную ловушку с характерным размером  $R+r_{ind}$ . Поляризационное зеркало затемнено. Модель соответствует модели Г.А. Гамова, применённой им впервые для моделирования  $\alpha$ -распада атомных ядер.



**Рис. 2,б.** Схема стабильной (закрытой) квантовой частицы с бесконечным потенциальным барьером для частиц с полной энергией меньше нуля.

В [8] не только установлена резонансная архитектура сечения захвата электронов молекулами фуллеренов, как в [7, 9], но и определено абсолютное максимальное значение сечения  $\sigma_{maxC60} \approx 120 \text{ \AA}^2$ . Зная характерный радиус молекулы  $C_{60}$ , можно оценить  $r_{ind}$  для  $C_{60}$ . Согласно [8]  $r_{ind C60} \approx 0,26 \text{ нм}$ . (По совпадению уже резонансных профилей сечений захвата электронов для  $C_{N=70}$  можно получить  $r_{ind C70} \approx 0,28 \text{ нм}$ .)  $r_{ind C60}$  – единственный параметр, полученный из анализа экспериментальных исследований [7–9] по резонансному захвату электронов и использованный для аналитических расчётов резонансного спектра электронов  $E_n$  и сравнения этих расчётов с имеющимися экспериментальными результатами (резонансными профилями сечений захвата). При этом значение для  $C_{60}$   $r_{ind} \approx 0,26 \text{ нм}$  одновременно: 1) обеспечивает хорошее совпадение с максимальным значением экспериментально измеренного в [8] сечения захвата электрона с резонансной энергией  $\sigma_{max}(E_n) = \pi(R+r_{ind})^2$ ; 2) позволяет в авторской аналитической модели удовлетворительно описать резонансную архитектуру сечения захвата электронов молекулами фуллеренов ( $C_{60}$  и  $C_{70}$ ), то есть аналитически установить резонансный энергетический спектр  $E_n = E_n(R+r_{ind})$ , и 3) все эти наблюдения [7–9] и аналитические расчёты [1–3] обосновывают *ККМ и доказывают реализацию в экспериментах в сферически-симметричных квантовых резонаторах  $C_{60}$  и  $C_{70}$  основного тона или cos-волн*. Согласно верифицированной модели автора, характерный размер поляризационного эффекта Высикайло первого типа порядка  $R+r_{ind} \approx 0,72 \text{ нм} \sim 1 \text{ нм}$  для  $C_{60}$  и  $C_{70}$ . Для нанотрубок характерный размер  $R+r_{ind}$  поляризационного эффекта Высикайло первого типа может существенно определяться их длиной ( $r_{ind} = r_{ind}(L)$ ).

## КЛАССИФИКАЦИЯ Q-ЧАСТИЦ: КВАНТОВЫХ ТОЧЕК, ЛИНИЙ И ЯМ

На базе сравнения аналитических расчетов с экспериментальными наблюдениями [7–9] и в части I доказано, что в природе существуют два типа квантовых точек и, следовательно, два типа квантовых линий и ям. Поэтому в соответствии с изложенным выше и имеющимися экспериментами [7–9] в данной работе классифицированы квантовые точки, линии и ямы в зависимости от знака полной энергии электронов на бесконечности от квантового «ящика» (рис. 2). В классических строго финитных квантовых структурах – атомах полная энергия квантовой локализованной частицы с полной энергией  $E_n < 0$  (рис. 2,б). Такие частицы будем называть FQ-частицами, или закрытыми квантовыми точками, линиями или ямами. В закрытых квантовых резонаторах длина потенциального барьера бесконечна (рис. 2,б). В ограниченных поляризационными силами инфинитных квантовых структурах полная энергия квантовой частицы на бесконечности от поляризующегося квантового «ящика»  $E_n > 0$ , но тем не менее поляризационные силы локализуют заряженные частицы с резонансными кинетическими энергиями в области квантового «ящика» (рис. 2,а) на продолжительное время. Характерный размер потенциального барьера в этом случае конечен, и время захвата электрона определяется этим размером. Такие частицы с  $E_n > 0$  на бесконечности от квантового ящика будем называть IQ-частицами, или частично открытыми квантовыми точками,

линиями или ямами. Еще раз отмечу, в классических квантовых структурах типа квантовых точек, линий и ям (аналогов атомов и молекул) полная энергия захваченных электронов меньше нуля, а в поляризующихся структурах с потенциальными барьерами (рис. 2,а) может происходить захват электронов с полной энергией существенно больше нуля на бесконечности от поляризующегося квантового «ящика». В случае поляризующихся полых молекул поляризационное «зеркало» кумулирует (фокусирует) электрон во внутреннюю полость молекулы. При этом электрон не излучает лишнюю энергию и не локализуется в области оболочки полой молекулы, то есть не садится в узкую потенциальную яму, например по резонансу Фешбаха, а именно захватывается во внутренний объём всей полости молекулы и не вступает в химические реакции. Физика поляризационного захвата электрона в полую молекулу – 3D-размерного квантового поляризационного эффекта Высикайло первого типа [2–3] – проста, опирается на модель Гамова и иллюстрируется рис. 2,а. В этом отличие модели автора от моделей, применявшихся для объяснения захвата электрона полыми молекулами фуллеренов [7–9]. Аналитическое описание двух типов квантовых структур (Q-частиц), отличающихся по знаку полной энергии квантовой частицы на бесконечности, удается провести в рамках общей аналитической модели (восходящей к модели Гамова (рис. 2,а)), связывающей размер ямы с кинетической энергией квантовой частицы (электрона). Это находится в полном соответствии с принципом неопределенности Гейзенберга, в котором связаны импульс частицы и соответствующий размер, при этом в принципе Гейзенберга полная энергия квантовой частицы может быть как больше, так и меньше нуля (на бесконечности от квантового «ящика»). Ускорение электрона в результате поляризационного взаимодействия обеспечивает его ускорение и возможность проникновения вовнутрь резонатора сквозь сетку атомов фуллеренов и нанотрубок. Оценка энергии синергетического поляризационного взаимодействия электрона с поляризованной молекулой  $C_{60}$  на расстояниях 0,26 нм дает величину  $\sim 14$  эВ [2–3].

Полностью аналогичен и переход от нестационарного уравнения Шредингера к стационарному уравнению Гельмгольца, применяющемуся для описания классических квантовых точек, линий, ям и атомов (FQ-частиц) и квантовых точек с энергией захваченных электронов больше нуля (IQ-частиц). Следует отметить, что если FQ-частицы являются стабильными и для их разрушения (ионизации) требуется подвод энергии (рис. 2,б), то IQ-частицы являются в общем случае частицами метастабильными (рис. 2,а). Через определенное время жизни (как показывают эксперименты  $\sim 0,1$  с [7–9]) захваченные частицы туннелируют через потенциальный поляризационный барьер (рис. 2,а), и там IQ-частицы распадаются на стабильный пустой резонатор и нелокализованный (свободный) электрон с  $E > 0$  (или иную, ранее захваченную соответствующим резонатором квантовую частицу). В этом плане IQ-частицы являются аналогами электромагнитных и акустических волн (с полной энергией больше нуля), захваченных соответствующими резонаторами, так как они все – метастабильные, в то время как атомы с электронами с энергией меньше нуля – стабильные структуры.

## ИНТЕРФЕРЕНЦИИ И ДИФРАКЦИИ ДЕ БРОЙЛЯ-ФРЕНЕЛЯ И ВЫСИКАЙЛО-ДЕ БРОЙЛЯ-ФРАУНГОФЕРА

В атомах для  $\psi_n$ -функции локализованной волны де Бройля в качестве граничных условий выбирается дополнительное условие  $\psi_n \equiv 0$  в центре атома. Это условие в классической квантовой механике навязывается ошибочным математическим требованием регулярности решений ( $\psi_n$ ) в нуле [10, стр. 131–132; 11, стр. 303], хотя существует и другое принципиальное условие, приводящее к селекции решений в атоме. Этим физическим условием является наличие в центре любого атома атомного ядра (или протона), через которое проникновение электрона оболочки в принципе невозможно. Вот эта физическая причина, а не ошибочное математическое требование регулярности  $\psi_n$  в нуле и приводит к условию отражения волны де Бройля от центра атома с ядром в центре, то есть к условию  $\psi_n \equiv 0$  в центре атома с ядром в центре. Именно на этом основании следует отбрасывать решения нерегулярные (неограниченные) в нуле – в центре атома. При выборе таких граничных условий в нуле решением уравнения Гельмгольца служат функции, регулярные в нуле  $\psi_n(r) \sim A_n \sin(k_n r)/r$  [10], а соответствующий энергетический спектр запертых в яме электронов  $E_n \sim n^2$ . Эти стоячие волны, как отмечалось, следует называть *sin-волнами* (обертонны). При учете  $U(r)$  с выбранными граничными условиями в центре квантового резонатора получают модель водородоподобного атома, решения для которого приведены в [10]. В этих *sin-волнах* период  $\psi_n$ -функции кратен  $2\pi$ , а  $E_n < 0$  (это FQ-частицы). Этот тип интерференции (дифракции в центре атома или полого резонатора) волн де Бройля электронов в первой части работы был отнесён к обобщённой автором *интерференции (дифракции) де Бройля–Френеля. Этому типу интерференции*

(дифракции) в центре квантового резонатора соответствует узел волны де Бройля электрона, и  $\psi_n(0) = 0$ .

В первой части работы теоретически доказано, что в **полых** поляризующихся супрамолекулах поляризационными силами, фокусирующими захваченные электроны к центру квантового резонатора любого типа симметрии, могут формироваться, в зависимости от величины резонансной энергии электрона, два типа интерференции. При этом *ККМ* позволяет при  $E_n > 0$  описать как ограниченную кумуляцию  $\psi_n(r)$  – функций при обобщенной интерференции **де Бройля-Френеля**, так и неограниченную кумуляцию  $\psi_n(r)$  – функций к центру квантового резонатора при обобщенной интерференции **Высикайло-де Бройля-Фраунгофера** в полых поляризующихся сферически- или цилиндрически-симметричных квантовых резонаторах для волн де Бройля электронов. **Этому типу интерференции (дифракции) в центре полого резонатора соответствует пучность волны де Бройля электрона**, и  $\psi_n(0) = \infty$ , а на границе резонатора  $\psi_n(R) = 0$ . Другими словами, в первой части работы обоснован выбор граничных условий в полых резонаторах, приводящий к установлению как резонансных квазистационарных  $\sin$ -волн (обертон), так и основного тона –  $1/2$ -волновому резонансу ( $1/4$ -резонансу – рис. 3,2, ч. I), как и в аналогичных волновых акустических явлениях (рис. 1, ч. I). Таким выбором (решений в нуле регулярных и регуляризуемых с учётом геометрического нормировочного коэффициента) сформулированы основы кумулятивной квантовой механики, согласно которым считается, что реально существуют сферически- и цилиндрически-симметричные стоячие волны де Бройля основного тона с неограниченно кумулирующими к центру  $\psi_n$ -функциями для электронов с  $E_n > 0$  и захваченных (локализованных) полыми поляризующимися молекулами (рис. 2,а). Опираясь на гипотезу де Бройля, в первой части автором было доказано, что учёт геометрического нормировочного коэффициента «реабилитирует» неограниченные в нуле решения и реально в полых поляризующихся молекулах (фуллеренах, нанотрубках и др.), как и в классических резонаторах Гельмгольца, возможно формирование как стоячих  $\sin$ -волн (обертонов), так и резонансных  $\cos$ -волн (основного тона) де Бройля для электронов с энергией  $E_n > 0$ . Для  $\cos$ -солитонов  $\psi_n$ -функции неограниченно кумулируют (рис. 2, 3, ч. I) к центру фокусировки электронов полой поляризующейся молекулой. В рамках сформулированной модели квантового резонатора для волн де Бройля электронов установлено, что энергетический спектр стоячей  $\cos$ -волны (основного тона) с  $E_n \sim (n-1/2)^2$ , период  $\psi_1$ -функции =  $\pi$ . (Поэтому, согласно (5), ч. I, нижний энергетический уровень для  $\cos$ -волны  $E_{\cos 1}$  в 4 раза меньше, чем  $E_{\sin 1}$  для стоячей  $\sin$ -волны (4), ч. I.) Эти соотношения соответствуют соотношениям, полученным для акустических волн (см. ч. I и [1–3]). Более подробный анализ и критику работ, ошибочно обосновывающих выбрасывание основного тона из решений для квантовых резонаторов со сферической или цилиндрической симметрией, смотрите в следующей работе.

#### ЭНДОИОНЫ И ЭНДОЭЛЕКТРОНЫ В $C_{60}$ и $C_{70}$ .

#### РАСЧЁТЫ $\psi_n$ -ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ, ЗАХВАЧЕННЫХ ПОЛЫМИ РЕЗОНАТОРАМИ

Выбрав граничные условия в центре полого резонатора и обосновав переход от уравнения Шредингера к однородному уравнению Гельмгольца, мы без труда можем решить однородное уравнение Гельмгольца (1) при  $U(R+r_{ind}) = \infty$  (рис. 2,а) и получить энергетические резонансные спектры  $E_n$ , профили для собственных  $\psi_n$ -функций электронов, захваченных полыми квантовыми резонаторами, и вероятность  $W_n(r)$  стратифицированного нахождения локализованного силами поляризации электрона в слое  $dr$  внутри полой молекулы (рис. 3, 4).

Итак,  $\psi_1$ -функция основного состояния электрона с  $E_{\cos 1}$  внутри полости полой поляризующейся сферически-симметричной молекулы, согласно (2), ч. I, является гиперболически спадающей функцией от начала координат (рис. 3). Вероятность того, что электрон с резонансной энергией  $E_n$  находится в объеме  $dV$  сферически-симметричного слоя, как мы знаем, равна  $|\psi_n(r)|^2 dV = 4\pi r^2 |\psi_n(r)|^2 dr$  [11]. Следовательно, относительная вероятность найти электрон в шаровом слое на расстоянии  $r$  от центра полой поляризующейся сферически-симметричной молекулы (например, фуллерена) определяется для  $\cos$ -волны как  $\cos^2(k_n r)$  (рис. 4), а для  $\sin$ -волны (с  $E_{\sin 1}$ ) – как  $\sin^2(k_n r)$  (рис. 4). Совпадающие профили имеем и в случае плоскостной и цилиндрической симметрии. Максимальная вероятность найти электрон в полой сферической молекуле для  $\cos$ -волны действительно достигается в её центре (рис. 4), так как оболочка с такими граничными условиями постоянно отражает электрон к центру структуры с  $\cos$ -волной де Бройля. Так проявляется интерференция Высикайло-де Бройля-Фраунгофера электрона, налетающего с резонансной энергией на поляризующуюся молекулу. (Этот факт находится в полном согласии с акустическими наблю-

дениями для  $\cos$ -резонансов – основного тона.) Согласно аналитическим расчетам (рис. 4) для  $\cos$ -волны (с  $n = 1$ ) вероятность нахождения электрона вне полой поляризующейся молекулы в три раза меньше, чем в случае  $\sin$ -волны (с  $n = 1$ ). Следовательно,  $\cos$ -волны (с  $n = 1$ ) будут более стабильными, чем  $\sin$ -волны (с  $n = 1$ ). Проведенные исследования показывают, что основы предлагаемой автором кумулятивной квантовой механики не противоречат никаким основам классической квантовой механики, кроме как постулату, ограничивающему всюду  $\psi_n(r)$ -функцию частицы. Этот постулат в кумулятивной квантовой механике автором заменяется на требование ограниченности вероятности нахождения электрона в любом слое  $|\psi_n(r)|^2 dV = 4\pi r^2 |\psi_n(r)|^2 dr < 1$  – в случае сферической симметрии или  $|\psi_n(r)|^2 dV = 2\pi r |\psi_n(r)|^2 dr < 1$  – в случае цилиндрической симметрии. При этом в центре фокусирующего электрон полого резонатора для стоячих  $\cos$ -волн  $\psi_n(0)$  может равняться  $\infty$ . Вот и вся модификация, предлагаемая автором [3]. Эта модификация не противоречит и принципу неопределенности Гейзенберга, так как кинетическая энергия электрона увеличивается при его ускоряющемся падении на фуллерен. Внутри фуллерена полная (то есть кинетическая) энергия захваченного электрона  $E_n = p_n^2/2m$  при прохождении через центр резонатора остаётся постоянной, как и его импульс  $p_n = \text{const}$ .

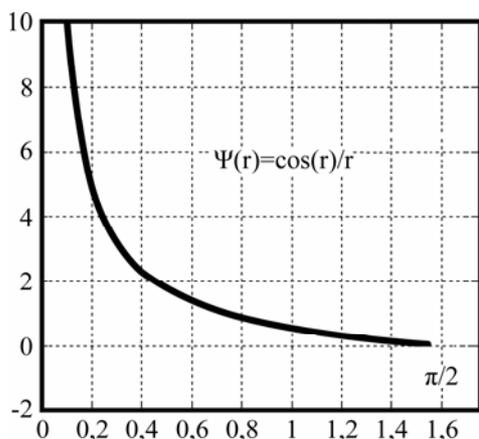


Рис. 3. Зависимость  $\Psi_{1\cos} \sim \cos(k_{1\cos}r)/r$  от расстояния до центра полой молекулы ( $r$  – в радианах) [3].

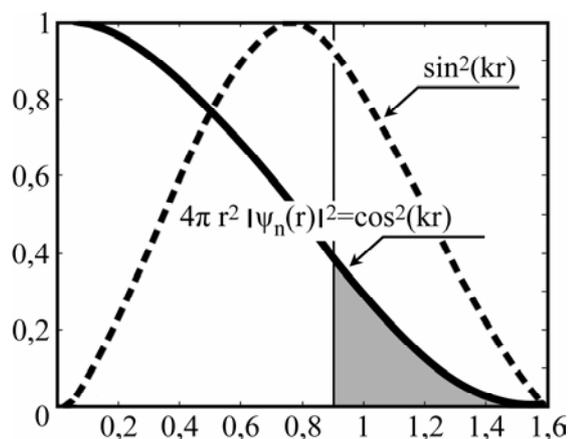


Рис. 4. Относительная вероятность  $4\pi r^2 |\psi_n(r)|^2 dr$  найти электрон в области полой сферически-симметричной молекулы от расстояния до её центра для  $1/2$ -резонанса (с  $E_{\cos 1}$ ) обозначается сплошной линией и для волнового резонанса (с  $E_{\sin 1}$ ) – штриховой. Прямой вертикальной линией разделены внутренние и внешние области полой поляризующейся сферически-симметричной молекулы. Затемнена относительная вероятность нахождения электрона при  $1/2$ -резонансе вне оболочки полой молекулы (расчеты выполнены для  $C_{60}$ ).

### СРАВНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ НА БАЗЕ ККМ С ЭКСПЕРИМЕНТАМИ

Аналитические расчеты резонансных энергий электронов для  $C_{60}$ , старших фуллеренов и нанотрубок, выполненные по предложенной автором модели квантовых резонансов, хорошо качественно и количественно совпадают с экспериментами [7–9], если учесть  $\cos$ -волны. Так, аналитически рассчитанные в [3] для  $C_{60}$  резонансы для  $\cos$ -волн – основного тона:

$$E_{n\cos} = \pi^2 (n-1/2)^2 \hbar^2 / 2mR^2 = 0,37 \cdot (n-1/2)^2 / (R_{C60} + r_{ind})^2 [\text{эВ}], \quad n = 1, 2, 3, \dots ;$$

$$E_{n\cos C60, n=1,2,3,4} = 0,24; 2,2; 6,0; 11,8 [\text{эВ}], \quad (1)$$

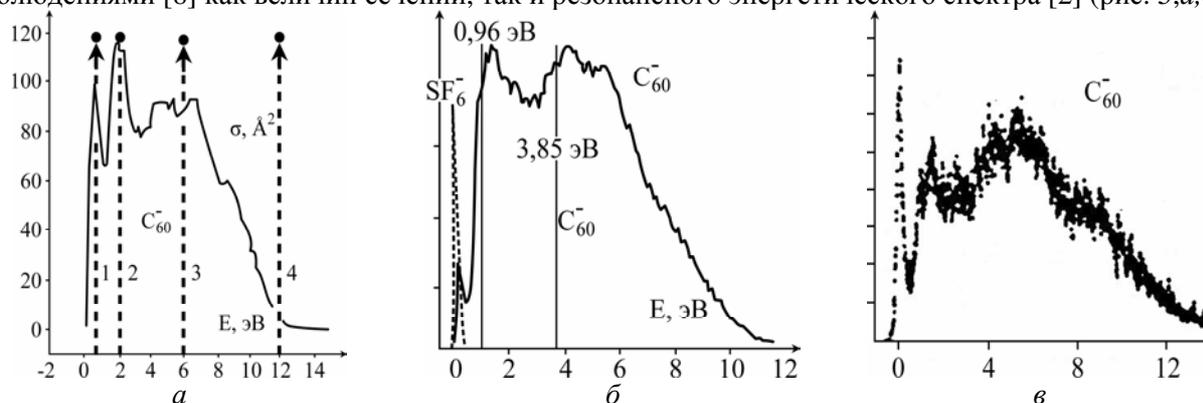
а для  $\sin$ -волн – обертонов:

$$E_{n\sin} = \pi^2 (n-1/2)^2 \hbar^2 / 2mR^2 = 0,37 \cdot n^2 / (R + r_{ind})^2 [\text{эВ}], \quad n = 1, 2, 3, \dots ;$$

$$E_{n\sin C60, n=1,2,3} = 0,96; 3,85; 8,66 [\text{эВ}]. \quad (2)$$

Что касается экспериментов по захвату электронов полыми поляризующимися молекулами фуллеренов (рис. 2 и рис. 2, ч. I), то в одних экспериментах без выделения типа волн приводятся значения резонансных энергий электронов:  $E_n = 0,24; 2,25; 3,8; 4,9; 6,1$  [8], а в других –  $0,2; 1,5; 4,5; 5,5; 8$  эВ [9]. Во всех экспериментах, в скрещенных пучках, фуллеренами захватываются электроны с

резонансной энергией  $E_n > 0$ , но меньше 12 эВ. (По этой причине обрезание энергетического спектра по  $n$  в (1) и (2) проводилось для  $E_n > 12$  эВ.) Во всех экспериментах (рис. 5) четко определены первый резонанс и резонансная энергия захвата для  $C_{60}$   $E_1 \approx 0,2 \pm 0,24$  эВ [8, 9], что отлично совпадает с аналитически рассчитанной энергией для установившейся  $\cos$ -волны  $E_{\cos 1 C_{60}} = 0,24$  эВ. Такую энергию резонансного захвата электрона формированием стоячей  $\sin$ -волны объяснить невозможно, для этого необходимо предположить  $r_{\text{ind}} \approx 0,9$  нм, что явно будет не согласовано с величинами сечений резонансного захвата, измеренными в экспериментах  $\sigma \approx \pi(R + r_{\text{ind}})^2 \approx 120 \text{ \AA}^2$  [8] (рис. 5,а). При  $r_{\text{ind}} = 0,26$  нм получаем хорошее совпадение аналитических расчётов с экспериментальными наблюдениями [8] как величин сечений, так и резонансного энергетического спектра [2] (рис. 5,а,б).



**Рис. 5.** Экспериментально измеренные сечения захвата электрона в  $C_{60}$  в зависимости от его энергии: а) для  $C_{60}$  [8]. Прямыми жирными вертикальными линиями отмечены собственные энергии для  $\cos$ -волн в  $C_{60}$  (с главными числами  $n = 1, 2, 3, 4$ ), рассчитанные по (5), ч. I, с учетом действия сил поляризации  $C_{60}$  на стабилизацию эндоиона фуллерена; б) относительные сечения прилипания электрона к  $SF_6$  и  $C_{60}$  для потока  $C_{60}$  ( $T = 673$  К) [9]. Прямыми вертикальными линиями отмечены собственные энергии для  $\sin$ -волн в  $C_{60}$  (с главными числами  $n = 1, 2$ ), рассчитанные по (6), ч. I, с учетом действия сил поляризации  $C_{60}$  на стабилизацию эндоиона фуллерена; в) экспериментальные кривые эффективного выхода резонансного захвата электронов молекулами фуллерена  $C_{60}$  [7].

### ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ ВЫСИКАЙЛО ПЕРВОГО ТИПА ДЛЯ ВЫСШИХ ФУЛЛЕРЕНОВ И НАНОТРУБОК

Если предположить, что  $r_{\text{ind}}$  слабо меняется для высших фуллеренов, а их геометрический эффективный радиус  $R$  пропорционален  $N^{1/2}$  ( $N$  – число атомов углерода в высшем фуллерене, при этом  $4\pi R_N^2 \sim N$ ), то расчеты собственных энергий квантовых резонаторов представляют собой простую арифметическую задачу. Спектр (1) или (2) следует разделить на квадрат геометрического фактора для высшего фуллерена, учитывающий зависимость радиуса молекулы фуллерена от  $N$  и соответствующий поляризационный геометрический фактор  $\zeta_{RN}$ :

$$\zeta_{RN} = (R_{C_{60}} \sqrt{N/60} + r_{\text{ind}}) / (R_{C_{60}} + r_{\text{ind}}).$$

Этот геометрический фактор  $\zeta_{R70} = 1,03$  для  $C_{70}$ ;  $\zeta_{R84} = 1,09$  и  $\zeta_{R90} = 1,12$  для  $C_{84}$  и  $C_{90}$  соответственно. Так, для  $C_{70}$  из (4), ч. I, с учетом геометрического фактора, получаем для  $\cos$ -волн:

$$E_{n=1-4} = 0,21; 1,9; 5,6; 11,1 \text{ эВ.} \quad (3)$$

Приблизительно такое, соответствующее геометрическому фактору уменьшение величины резонансной энергии первого пика для  $C_{70}$ , по отношению к  $C_{60}$ , наблюдается в экспериментах согласно [7–9]. Полученные аналитически результаты ( $E_{\cos n=1} = 0,21$  эВ для  $C_{70}$ ) хорошо согласуются с экспериментальными значениями для  $C_{70}$  (0,2 эВ [8]). При этом в расчётах резонансных энергий для всех типов интерференций и дифракций (и де Бройля-Френеля и Высикайло-де Бройля-Фраунгофера) использовалась **классическая масса электрона**.

Для старших фуллеренов и нанотрубок следует проводить учет увеличения характерных размеров на величину поляризационной длины  $r_{\text{ind}}$  из-за поляризационного взаимодействия электрона с любыми полыми наноструктурами, в том числе и для нанотрубок. Следовательно, результаты работы [12] при сравнении с реальными экспериментами необходимо модифицировать соответствующим образом (учесть  $r_{\text{ind}}$ ), что приведет к понижению резонансных энергий захвата свободных электронов полыми нанотрубками. При выборе  $r_{\text{ind}} = 0,28$  нм для  $C_{70}$  наблюдается идеальное

совпадение первого энергетического уровня, рассчитанного аналитически, с экспериментом [8]  $E_{1\cos} = 0,2$  эВ.

## САМОСБОРКА ПОЛЫХ АЛЛОТРОПНЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА НА РЕЗОНАНСНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ И РАЗРУШЕНИЕ НАНОАЛМАЗОВ

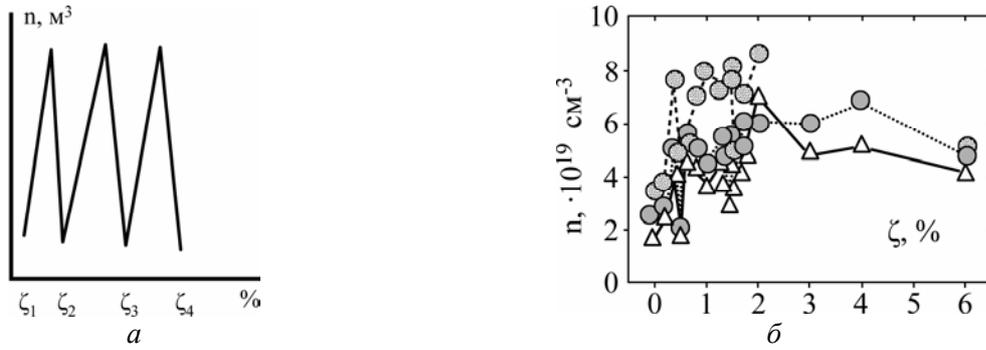
Возможно, механизмом формирования полых аллотропных форм углерода с идеальными формами, как у  $C_{60}$ , в газовых разрядах является последовательная сборка атомов углерода на электроны с резонансной энергией активации  $E_n > 0,2$  эВ, захваченном гексагонами углерода (нанографенами). Вероятно, по этой причине эффективен метод наработки фуллеренов в газовом разряде, где средняя энергия электронов  $\sim 1$  эВ, что соответствует резонансному захвату электрона фуллеренами.

Известно, что алмаз является метастабильной формой углерода и при обычных условиях наноалмазы трансформируются в графит. В процессе графитизации наноалмазов могут принимать активную роль захватываемые графеновыми листами на наноалмазе свободные электроны. Эти механизмы на резонансном электроны не противоречат экспериментальным фактам и требуют дальнейших экспериментальных исследований.

### КУЛОНОВСКОЕ ПЛАВЛЕНИЕ.

#### КОНЦЕНТРАЦИОННО-КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЙ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ ВЫСИКАЙЛО ВТОРОГО ТИПА. УПРАВЛЕНИЕ ПАРАМЕТРАМИ НАНОКОМПОЗИТОВ

Молекулы фуллерена  $C_{60}$  в обычных условиях формируют кристалл – фуллерит [4, 5]. Сферически-симметричная молекула фуллерена является одним из часто исследуемых объектов самыми разнообразными спектральными методами [4, 5]. Добавление к металлам и полупроводникам кристаллов фуллеренов – фуллеритов может приводить к ряду замечательных свойств, в частности к кулоновскому плавлению фуллеритов, покрытию монослоем фуллеренов поверхности нанокристаллов и кулоновскому упрочнению модифицируемых фуллеренами наноструктурированных материалов при их обжати заряженным слоем модификатора (рис. 1) [1], уменьшению теплопроводности из-за захвата высокоэнергетичных электронов с  $E_n \sim 10$  эВ, повышению термостойкости наноструктурированного материала [3], увеличению напряженности электрического поля на поверхности нанокристалла, для предотвращения рекристаллизации нанокристаллов (рис. 1) [1–3] и др. Происходить это может и из-за захвата существенной части электронов нанокристалла (рис. 1) фуллеренами, выступающими ловушками для свободных электронов с энергиями от 0,2 до 12 эВ (рис. 2–5). Потенциальная энергия кулоновского взаимодействия двух ближайших заряженных анионов в фуллерите с  $k = 1$  порядка 1,4 эВ ( $D \approx 1$  нм – расстояние между ионами). Согласно результатам работы [3] накопление энергии в полости  $C_{60}$  может достигать  $E_{\Sigma} = 2 \cdot (E_1 + E_2 + E_3) \approx 17$  эВ на один эндоанион  $e_k @ C_{60}$  с  $k = 6$ . Захват электронов с энергиями активации резонанса от 0,2 до 20 эВ, полыми молекулами – квантовыми резонаторами для волн де Бройля электронов – давно установленный в экспериментах факт (см., например, [7–9]). Ловушки с эндоэлектронами формируют слой отрицательного заряда (рис. 1 [1–3]) на поверхности легируемого наноматериала. Такое легирование следует называть физическим легированием, так как химических реакций при таком покрытии не происходит. Собственные значения энергий для квантовых резонаторов  $C_{60}$  рассчитаны аналитически для cos-волн [3] (1) и для sin-волн (2). Эти энергии близки к экспериментально измеренным энергиям активации электронов при их резонансном захвате в ловушку ( $C_{60}$ ) [7–9]. На этой базе удастся выполнить аналитические расчеты квантовых скачков параметров наноконкомпозитных материалов, обусловленных последовательным изменением концентраций квантовых резонаторов, физически легирующих нанокристаллы по схеме рис. 1 и тем самым меняющих электрические поля на поверхности нанокристаллитов. Аналитически установлено, что в мезом мире радиус нанокристаллов  $R$  формирует квантовую пару с резонансной концентрацией ловушек  $\zeta$  (см. рис. 6 [3, 13]). Такой тип коцентрационно-квантово-размерного эффекта будем называть поляризационным квантово-размерным эффектом Высикайло второго типа (рис. 1 и рис. 6,а). Квантово-размерный эффект Высикайло второго типа имеет характерные размеры от характерных размеров нанокристалла (17 нм в [13]) до размеров всего наноструктурированного композита (рис. 1). Обусловлены два типа поляризационных эффектов, рассмотренных в данной работе, дальнедействием электрических полей или синергетическим действием электрических полей от отдельных ионов.



**Рис. 6.** а) Проявление в макропараметрах нанокompозита квантово-размерного эффекта Высикайло второго типа, обусловленного поляризационным захватом электронов поляризующимися полыми молекулами [1–3]. Характерная зависимость параметров нанокompозита, например концентрации ионов или электронов  $n$  от объемного содержания квантовых резонаторов  $C_{60}$  в композите. Профили сдвигаются с изменением характерного радиуса нанокристаллитов, формируя с относительной концентрацией ловушек квантово-размерную пару, меняющую параметры наноструктурированного композита в мезомире [3]. б) Результаты экспериментальных измерений резонансных профилей концентрации электронов при изменении относительной концентрации ловушек при легировании фуллеренами  $C_{60}$  нанокристаллов полупроводников (термоэлектриков) [13] при различных температурах (от 295 до 77 К). Характерный радиус нанокристаллитов после отжига  $R = 17$  нм.

*Расчеты объемного процентного содержания модификатора*

Объем нанокристалла в приближении сферической симметрии:  $V = 4\pi R^3/3$ . Здесь  $R$  – радиус кристаллита. Объем, занимаемый модификатором, покрывающим одним плотным слоем модифицируемый (физически легируемый) нанокристалл:  $V_C = 4\pi R^2 \cdot h$ . Здесь  $h$  – характерный размер молекулы, конгломерата атомов и др. (или даже электрона [1–3, 13, 15, 16]), выполняющих роль модификатора. Имеем [1]:

$$\zeta = V_C/V = 3h/R. \quad (4)$$

Мультипликатор 3 в (4) учитывает трёхмерность пространства (пространственный фактор). При модификации нанокристаллов прямоугольной формы этот мультипликатор равен 2, а в качестве  $R$  следует брать величину  $(1/X + 1/Y + 1/Z)^{-1}$ . Здесь  $X, Y, Z$  – высота, длина и ширина модифицируемого прямоугольника соответственно. Далее будем работать в рамках сферической симметрии. Если модифицируемый материал полностью покрывается модификатором и нет излишков последнего, то такую концентрацию будем называть **оптимальной** объемной концентрацией модификатора. Согласно (4) **оптимальное** процентное объемное содержание модификатора с характерным размером  $h$ :  $x = 300 \cdot h/R$  [%]. С увеличением  $R$  – характерного радиуса кристаллита – **оптимальная** объемная доля модификатора уменьшается [1].

*Расчеты прочностных характеристик структур со слоями объемного заряда*

Рассмотрим модификацию прочностных свойств материалов при выборе в качестве ловушки для электронов (модификатора) молекулу  $C_{60}$  (рис. 1). Коэффициент эффективности захвата электронов молекулой  $C_{60}$  может изменяться от  $k = 1$  до 6 электронов на молекулу  $C_{60}$  [1–3]. Сила Кулона, сжимающая материал и тем самым его упрочняющая: растет жесткость модифицированной структуры всего наноструктурированного объемным зарядом материала (рис. 1):  $F_{C_{60}} = K(eN)^2/R^2 = K(ekN_{C_{60}})^2/R^2 = K(ek4\pi R^2/h^2)^2/R^2$ . Здесь  $N$  – полное число электронов, захваченных модификатором в режиме **оптимальной** концентрации;  $N_{C_{60}} = 4\pi R^2/h^2$  – количество ловушек для электронов, то есть молекул фуллерена на поверхности модифицируемого кристалла радиусом  $R$ ;  $e$  – заряд электрона;  $K = 1/4\pi\epsilon_0 = 0,9 \cdot 10^{10}$  Н·м<sup>2</sup>·К<sup>-2</sup>. Давление, модифицирующее свойства кристалла:  $P_{C_{60}} = F_{C_{60}}/S$ . Здесь  $S = 4\pi R^2$ . Откуда [1]:

$$P_{C_{60}} = K(ekS/h^2)^2/(S \cdot R^2) = 4\pi K(ek/h^2)^2 = 2,9 \cdot k^2 (h_0/h)^4 [\text{ГПа}]. \quad (5)$$

Здесь  $h_0 = \text{const} = 1$  нм;  $h$  – размер модификатора для  $C_{60}$   $h \approx 1$  нм. Если  $k = 6$ , то упрочнение фуллеренами с характерным размером 1 нм может достигать 104 ГПа. Согласно [14] мягкая (отожженная) медь имеет прочностные характеристики на уровне 400 МПа, а наклепанная – до 1,1 ГПа. Согласно полученным результатам и предложенной в [1–3] методике модификации любых материалов (имеющих свободные электроны), слоями объемного заряда можно упрочнить кристаллы до 2,9 ( $k = 1$ ) и максимум – до 104 ГПа (при  $k = 6$ ). Упрочнение, согласно (5), обратно пропорционально четвертой степени характерного размера модификатора и не зависит от сорта материала и модификатора. (В качестве модификаторов могут выступать и высокоэнергетичные

электроны [15, 16].) При легировании нанокристаллов алюминия молекулами фуллерена в режиме неразрушения фуллерена предлагаемый физический принцип легирования может оказаться более эффективным, чем обычный химический способ карбидизации, который повышает хрупкость наноматериала.

#### Особенности синергетических (общих) полей заряженных нанокристаллов

Сравним кулоновские силы между эндоионами, стремящимися отодвинуть их друг от друга:

$$F_{1-1} = K(ke)^2/h^2, \quad (6)$$

и силами, кумулирующими все отрицательно заряженные частицы эндоионов к общему, положительно заряженному центру (аттрактору), то есть к модифицируемому нанокристаллу (рис. 1). Сила притяжения к аттрактору эндоиона при *оптимальной* концентрации модификатора [1]:

$$F_{1-N} = Kек(eN)/R^2 = 4\pi K(ke)^2/h^2. \quad (7)$$

Из (6) и (7) следует, что сила притяжения к общему, положительно заряженному аттрактору в  $4\pi$  раз больше, чем сила отталкивания между отрицательно заряженными частицами модификатора. Это означает, что частицы модификатора, при *оптимальной* объемной концентрации модификатора, могут плотно покрывать модифицируемый кристалл только одним монослоем. Второй слой не может формироваться, так как отрицательно заряженные частицы второго слоя отталкиваются в этом случае отрицательно заряженными частицами первого слоя, то есть слои фуллерита при захвате свободных электронов плавятся из-за кулоновского «плавления» (разрушения) [1–3]. Кулоновское разрушение фуллерита на поверхности нанокристаллов со свободными электронами может применяться для ограничения процессов рекристаллизации нанокристаллов, их упрочнения и модификации их физических свойств [1, 13].

#### Расчеты кинетических энергий электронов на поверхности заряженного нанокристалла

Согласно (7) напряженность электрического поля у поверхности нанокристалла с радиусом  $R$ , равномерно одним слоем покрытого ловушками для электронов (рис. 1) [1]:  $E(R) = K(eN)/R^2 = 4\pi K(ke)/h^2$ . Характерная энергия электронов у поверхности нанокристалла, приобретаемая ими во внешнем электрическом поле на размере  $h/2$  (половине размера модификатора):  $\varepsilon(R, h) \approx 2\pi K(ke)/h \approx 9 \cdot k$  [эВ] [3]. Если концентрация модификатора существенно меньше, чем *оптимальная*, и поверхность физически легируемого наноматериала не покрыта полностью молекулами модификатора, то средняя энергия электронов, приобретаемая ими в области модификатора на поверхности положительно заряженного нанокристалла  $\varepsilon(R, h)$ , будет меньше и может совпасть с собственной энергией квантового резонатора  $C_{60} - E_{n\cos C_{60}}$  (1) или  $E_{n\sin C_{60}}$  (2). В случае достижения таких резонансов на поверхности нанокристалла из-за резонансного захвата электронов фуллеренами должны наблюдаться в этой области значений относительных объемных концентраций квантовых резонаторов  $\zeta_n(E_n, R)$  резкие колебания средних концентраций электронов и ионов во всём легируемом нанокompозитном материале (рис. 6). Резонансный захват электронов с энергиями больше нуля, ловушками приводит также к колебаниям иных параметров нанокompозита (рис. 6). Размах колебаний концентраций свободных электронов, согласно поляризационному эффекту Высикайло второго типа, может достигать  $2nN_{C_{60}} = kN_{C_{60}}$ . Здесь  $N_{C_{60}}$  – концентрация молекул фуллерена в единице объема нанокompозита,  $k$  – среднее число захваченных электронов одной молекулой фуллерена. При средних значениях радиуса нанокристалла  $R \approx 17$  нм [13] получаем следующий спектр собственных значений относительных объемных концентраций квантовых резонаторов  $C_{60}$  в поляризационном эффекте Высикайло второго типа с учётом *cos-* [3, 13] и *sin-волн* [13] (согласно (1) и (2) соответственно):

$$\zeta_{nC_{60}} = E_n \cdot 300h/(18Rn) = 0,22; 0,96; 1,0; 1,88; 2,0; 2,9 [\%]. \quad (8)$$

Следует отметить, что если энергия первого резонанса установлена достаточно точно, то для второго в литературе приводятся энергии  $E_2 = 1,5$  эВ [9], а в теории получено значение 1 эВ для первого обертона – *sin-волны*. Для такой энергии колебания параметров будут наблюдаться в области  $\zeta_{2\cos C_{60}} = V_c/V = 0,6\%$ , а не 1%. На рис. 6 представлены качественная (рис. 6,а) и экспериментально полученная в [13] (рис. 6,б) схемы колебания параметров (концентрации электронов) нанокompозита в зависимости от концентрации квантовых резонаторов – ловушек для электронов ( $C_{60}$ ).

Впервые (8) доказано, что при реализации концентрационно-квантово-размерного поляризационного эффекта Высикайло второго типа в метаматериалах пара «собственная функция

( $\psi_n$ ) – собственная энергия ( $E_n$ ), составляющая квантовое состояние в наномире, помеченное основным квантовым числом  $n$ , в мезомире физически легируемых наноконкомпозитов заменяется двумя параметрами нано- и мезомира: радиусом наноконкомпозита  $R$  и резонансной относительной концентрацией модификатора  $\zeta_n$ . Этот, рассчитанный в данной работе концентрационно-квантово-размерный поляризационный эффект Высикайло второго типа обусловлен поляризацией полых молекул и захватом электронов, то есть и квантово-размерным поляризационным эффектом Высикайло первого типа. Концентрационно-квантово-размерный поляризационный эффект Высикайло второго типа существен для полупроводников, покрытых IQ-частицами (квантовыми IQ точками – эндоионами фуллеренов с эндоэлектронами с энергией  $E_n > 0$ ) –  $e_k @ C_{60}$ , и является аналогом квантово-размерному эффекту в магнитном поле, исследованному в [17] и предсказанному для квантовых ям ещё в 1953 г. в [18].

## ВЫВОДЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В [1–3] и данной работе аналитически исследованы взаимно резонансные процессы кумуляции к центру сферически-симметричной молекулы  $C_{60, 70}$  и рассеивания (распыла, диссипации) от этого центра электрона как стоячей волны де Бройля с *резонансной энергией активации* –  $E_n$  этого дуального конвективного пульсирующего *кумулятивно-диссипативного* (КД) интерференционного процесса в квантовом резонаторе для волн де Бройля электронов с характерным размером  $\sim 1$  нм (для  $C_{60} D = 2(R+r_{ind}) \approx 1,24$  нм). Кумуляция электрона к центру квантового резонатора (полый молекулы) происходит из-за фокусирующих электрон поляризационных сил – поляризационных «зеркал», периодически возвращающих электрон к центру молекулы – квантового резонатора. В этом КД процессе, или в квантово-размерном поляризационном эффекте Высикайло первого типа, совместно интерферируют обобществлённые электроны оболочки  $C_{60, 70}$  и захваченный на времена до  $\sim 0,1$  с [7–9] внешний для нейтрального фуллерена электрон с полной резонансной энергией –  $20$  эВ  $> E_n > 0$  (рис. 2–5). В результате поляризации, при приближении внешнего электрона с резонансной энергией, часть отрицательного заряда оболочки перемещается в дальнюю область от вышедшего из полости электрона, тем самым оголяя положительно заряженные ионы (рис. 2, часть I). Поляризационные «зеркала» электрона возникают, и их действие резко усиливается на определенном расстоянии от центра резонатора –  $R+r_{ind}$ , только если электрон находится за оболочкой  $C_{60}$  (рис. 2, часть I). Эти «зеркала», возвращающие электрон с полной энергией  $E_n > 0$  к центру фуллерена, обусловлены генерацией синергетических (общих) электрических полей, разнесенными в пространстве более близкой к электрону положительно заряженной и более удаленной отрицательной частью каркаса поляризованного фуллерена (рис. 2, часть I). При поляризации происходят резонансное смещение электронной оболочки  $C_{60}$  и оголение положительного заряда десятков ядер атомов углерода, что и приводит к эффективному увеличению силы, возвращающей электрон к центру, и увеличению характерного радиуса квантового резонатора по отношению к геометрическому радиусу каркаса полый поляризующейся молекулы  $R$  (рис. 2, часть I) на эффективный дополнительный размер  $r_{ind}$ . По мере удаления электрона от центра поляризующейся молекулы его кинетическая энергия уменьшается в результате действия поля 3D-диполя  $C_{60}$  (рис. 2, часть I). Распыл эндоэлектронов (электронов, захваченных в объём резонатора) от центра  $C_{60}$  обусловлен их инерционностью (импульсом или полной энергией  $E_n > 0$ ). Предлагается в соответствии с [1–3] для обозначения эндоиона (с эндоэлектронами, захваченными поляризующимися фуллеренами) сохранить обозначение  $e_k @ C_N$  (по аналогии с эндофуллеренами [4, 5]). Здесь  $k$  – число захваченных электронов (для  $C_{60} k \leq 6$  [13, 19]),  $N$  – число атомов углерода в молекуле фуллерена. Эндоэлектроны в  $e_k @ C_N$  имеют положительную полную энергию  $E_n$ , но из-за поляризационных сил, действующих на них со стороны поляризующейся молекулы, локализуются (постоянно кумулируют) к центру этой полый сферически-симметричной молекулы (например,  $C_{60}$ ).

Эндоэлектрон в полый молекуле не излучает фотон с энергией более  $E_n$ , а, значит, электрон не садится в потенциальную яму к обобществлённым электронам оболочки фуллерена и поэтому применение модели Томаса-Ферми или теорий резонансов Фешбаха (рис. 2, б) с переходом в стабильную квантовую точку для описания резонансного поляризационного эффекта Высикайло первого типа (поляризационного захвата свободных электронов) применять нельзя. Для описания этого эффекта следует привлекать модель потенциального барьера Гамова (рис. 2, а). В рамках модели, модифицированной автором, исследованы ограниченная (sin-волны или интерференция де Бройля-Френеля с узлом волны в центре резонатора) и *неограниченная кумуляции* (cos-волны или интерференция Высикайло-де Бройля-Фраунгофера с пучностью волны в центре квантового резонатора)  $\psi_n$ -функции электронов (IQ-частиц), захваченных  $C_{60}$  – сферически-симметричными, *квантовыми поляризующимися резонаторами для волн де Бройля электронов* с  $E_n > 0$  (рис. 3, 4).

Сравнение аналитически (см. (1)–(3)) и экспериментально установленных величин резонансных энергий захвата (интерференции с продолжительным удержанием) электрона молекулой  $C_{60}$  [7–9] (рис. 5) и более старших фуллеренов [7–9] с учётом поляризационных и геометрических коэффициентов показало их хорошее количественное и качественное совпадение. Так, для первых двух резонансов (рис. 5,а) расхождение энергий в экспериментах и аналитических расчётах не превышает погрешностей в экспериментах [8] ( $\approx 10\%$ ). Такое совпадение с экспериментами [8] доказывает *определяющую роль поляризационного захвата электрона* в процессе его интерференции с полый поляризуемой молекулой фуллеренов и обоснованность применения *ККМ* для описания поляризационных квантово-размерных кумулятивных эффектов Высикайло в наномире. Этим доказана возможность формирования отрицательно заряженных эндоионов фуллеренов с захваченными во внутреннюю полость электронами (эндоэлектронами) с резонансной энергией  $E > 0$ .

Долго живущие эндоэлектронами в эндоионе  $e_k @ C_{60}$  (фуллеренов и нанотрубок) с резонансной энергией  $E_i$  (активации кумулятивно-диссипативного процесса) из-за резонансного поляризационного взаимодействия с  $C_{60}$  не вступают в химические связи с атомами углерода, не садятся в потенциальные ямы, и поэтому ожидать модификацию связей в  $C_{60,70}$  и т.д. или нанотрубке и соответствующий сдвиг КР-спектров, например молекулы  $C_{60}$  на  $5\text{--}6\text{ см}^{-1}$ , как в случае интеркалирования [20, 21], не приходится, что и наблюдалось в [13]. Представляется возможным исследовать резонансное поглощение и излучение (IQ-частицами – метастабильными квантовыми точками) в области энергий  $\Delta E = E_i - E_{i-1}$ , где  $i = 2$  или  $3$ . Как показали эксперименты [7–9], время жизни эндоионов (с эндоэлектронами внутри) может достигать  $\sim 10^{-1}$  с. По этой причине метастабильные состояния или IQ-частицы при добавлении таких квантовых резонаторов в композит могут захватывать (вытягивать) свободные электроны нанокристаллитов и тем самым **физически легировать** нанокристаллы, формируя метастабильные квантовые точки (КТ) или линии. Как доказано, захват свободных электронов в ловушки и применение ловушек для физического легирования нанокристаллов может приводить к концентрационно-квантово-размерному поляризационному эффекту Высикайло второго типа. Поляризационные квантово-размерные эффекты Высикайло как первого, так и второго типа являются эффектами поляризационными и синергетическими. Синергетизм в поляризационном эффекте Высикайло первого типа заключается в коллективном отклике обобществлённых электронов оболочки модификатора (полый молекулы фуллерена и др.) на приближение или удаление электрона, внешнего для поляризуемой молекулы-резонатора. Синергетизм поляризационного эффекта Высикайло второго типа заключается в том, что по мере захвата электронов нанокристалла квантовыми резонаторами (ловушками) происходит зарядка нанокристалла положительным зарядом, существенно превосходящим заряд одного модификатора. В результате зарядки нанокристалла положительным зарядом, существенно превосходящим по модулю заряд одного модификатора, появляются на поверхности положительно заряженного кристалла огромные синергетические (обусловленные синергетическим действием нескольких ловушек) электрические поля  $\sim 10^{10}$  В/м [1]. Из-за поляризационного эффекта Высикайло второго типа возникает ряд замечательных явлений не только на размерах нанокристаллов, но и на размерах всего наноструктурированного композита. Общим для двух типов поляризационных эффектов Высикайло является дальнедействующий характер электрических полей, стягивающих (кумулирующих) заряд или фокусирующих двойные слои объёмного заряда в единое целое (рис. 1).

В рамках *ККМ* классифицированы квантовые точки, линии и ямы, в зависимости от полной энергии частиц их формирующих доказано, что стратификация ограниченной вероятности нахождения частицы в объёме квантового резонатора  $W_n$  аналогично определяется резонансной энергией частицы (соответствующим полным набором квадратов квантовых чисел:  $(n-1/2)^2$  для cos-волн и  $n^2$  для sin-волн) и не зависит от типа (плоскостной, сферической или цилиндрической) симметрии резонатора.

Проведенные в [1–3, 7–9, 13] и данной работе исследования доказали:

1) реальность формирования отрицательно заряженных эндоионов фуллеренов  $e_k @ C_{60,70}$  с захваченными электронами во внутреннюю полость (эндоэлектронами) с резонансными значениями энергии активации наноразмерного солитона –  $E_n > 0$ , определяемыми согласно (1)–(3). Наноразмерный солитон – стоячая волна (нанострата или квантовая точка) в квантовом резонаторе для волн де Бройля электронов;

2) важность поляризации полый молекулы в стабилизации эндоиона фуллерена с эндоэлектронами с энергией активации от 0,2 до 12 эВ для  $C_{70}$  и до 20 эВ для  $C_{60}$ ;

3) необходимость учёта при аналитическом моделировании увеличения характерного геометрического размера квантового резонатора  $R \rightarrow R + r_{ind}$ , из-за поляризационного фактора ( $\zeta$ );

4) важность резонанса (совпадения) энергии активации внешнего электрона и собственной энергии самоорганизующегося квантового резонатора –  $e_k @ C_{60}$ , формирующегося из  $C_{60}$ , его пульсирующей поляризуемой электронной оболочки, ионного каркаса и электрона с резонансной энергией активации такого процесса;

5) необходимо **в полых** квантовых резонаторах учитывать **дополнительный спектр** резонансных энергий для cos-волн ( $E_n \sim (n-1/2)^2$ ) наряду с классическим спектром энергий для sin-волн ( $E_n \sim n^2$ ).

В качестве доказательства явления кумуляции электронов в  $e_k @ C_{60}$  в данной работе в соответствии с гипотезой де Бройля аналитически решено стационарное уравнение Шредингера (однородное уравнение Гельмгольца (1), ч. I) для полых сферически-симметричных молекул с учетом поляризационных сил (кулоновских «зеркал», вдруг возникающих при туннелировании электрона сквозь сетку  $C_{60}$ ) на периферии поляризующихся молекул (см. (2), ч. I и рис. 2,a). Аналитически вычислены собственные (резонансные) значения энергии (1)–(3) и соответствующие им профили собственных  $\psi_n$ -функций, определяющих вероятность нахождения электрона в полости молекулы. В соответствии с этим для сферически-симметричного квантового резонатора аналитически вычислены: вероятность нахождения электрона с резонансной энергией активации в полости полой молекулы (рис. 3, 4) [3]. Оказывается, что, несмотря на подавляющую вероятность ( $\approx 85\%$ ) нахождения электрона внутри молекулы фуллерена (рис. 4), эффективный радиус эндоиона из-за специфики зависимости сил поляризации от расстояния до поляризуемой молекулы превышает характерный размер молекулы на величину  $r_{ind}$ , то есть характерный размер квантового резонатора увеличивается на  $r_{ind}$  ( $R \rightarrow R+r_{ind}$ ). Для полых аллотропных форм углерода, формирующихся на базе пентагонов или гексагонов с  $sp^2$ -связью (в своей основе), из сравнения с экспериментами [7–9] определено  $r_{ind} \approx 0,26$  нм – оптимальное расстояние от полой молекулы  $C_{60}$ , на котором наиболее эффективно действует поляризационное «зеркало». *При описании поляризационных эффектов Высикайло масса электрона считалась классической.* Следует внимательно относиться к характерным размерам поляризующихся структур, захватывающих свободные электроны с  $E_n > 0$  (например, в случае нанопузырьков, квантовых точек и др.). Их эффективные размеры  $R+r_{ind}$  (и объёмы), с учётом поляризационной длины  $r_{ind}$ , могут существенно превышать размеры  $R$  и объёмы реальных полостей. Величина  $\zeta_{RN} = (R_{C60} + r_{ind})/R_{C60}$  – масштабная поправка на поляризационное взаимодействие (или просто масштабная поправка), как следует из сравнения аналитической модели и экспериментов [8] (рис. 5,a), для  $C_{60}$  растет с увеличением энергии электрона от 1,56 до 1,71 с изменением энергии налетающего электрона от 0,24 до 2,07 эВ. Соответственно, согласно [8],  $r_{ind}$  от первого резонанса ко второму изменяется от 0,2 до 0,26 нм. Из сравнения экспериментальных наблюдений и аналитических расчетов следует, что характерный размер эффективной поляризации молекулы  $C_{60}$  ( $r_{ind}$ ) (или масштабная поправка  $\zeta_{RN}$ ) зависит от энергии налетающего электрона (если величины максимумов в сечениях прилипания в [8] измерены с точностью  $\approx 10\%$ ). Следует отметить, что для всех фуллеренов, в том числе и для старших фуллеренов, хорошего согласия экспериментальных результатов [7–9] с аналитическими расчетами удастся добиться при выборе для  $C_{60}$   $r_{ind} = 0,26$  нм, а для  $C_{70}$   $r_{ind} = 0,28$  нм. При этом выбранное значение  $r_{ind} \approx 0,26$  нм одновременно: 1) обеспечивает хорошее совпадение с максимальным значением экспериментально измеренного в [8] сечения захвата электрона с резонансной энергией  $\sigma_{max}(E_n) = \pi(R+r_{ind})^2$  и 2) позволяет в аналитической модели поляризационного захвата удовлетворительно описать резонансную архитектуру сечения захвата электронов молекулами фуллеренов ( $C_{60}$  и  $C_{70}$ ), то есть установить резонансный энергетический спектр  $E_n = E_n(R+r_{ind})$ . Таким образом, согласно верифицированной модели Гамова, характерный размер поляризационного эффекта Высикайло первого типа порядка  $R+r_{ind} \approx 1$  нм для фуллеренов. (Для нанотрубок характерный размер поляризационного эффекта Высикайло первого типа может существенно определяться их длиной.)

При энергиях электронов более 8 эВ экспериментально измеренное сечение резонансного прилипания резко падает с увеличением энергии активации (рис. 5) [7–9]. Если в аналитической модели учесть зависимость эффективного сечения прилипания (радиуса эндоиона) от энергии налетающего электрона, то точность совпадения энергий первого и второго резонансов (рассчитанных по (4), ч. I) с экспериментально установленными в [8] резонансными энергиями активации будет  $\approx 90\%$  (рис. 5,a).

Квантово-размерный поляризационный эффект Высикайло первого типа [1–3], обусловленный поляризационным резонансным взаимодействием полых поляризующихся молекул с электронами с энергиями активации от 0,2 до 20 эВ, наблюдаемый в экспериментах [7–9, 13], определяется:

1) геометрией и характерным размером  $R$  (объемом) полый молекулы фуллерена;

2) поляризационным взаимодействием поляризующейся полый молекулы (поляризационным кулоновским «зеркалом») с электроном, фокусирующимся внутрь полости (рис. 2, 5), и соответствующей этому взаимодействию поляризационной геометрической поправкой  $\zeta_{RN} = (R+r_{ind})/R$ ;

3) энергетическим резонансом (совпадением собственной энергии самого квантового резонатора с энергией активации электрона  $E_n$ ).

Открытые и исследованные автором в [1–3] и данной работе квантово-размерные поляризационные эффекты Высикайло первого и второго типов, обусловленные кумуляцией электронов в полые молекулы (ловушки для электронов) кулоновскими силами поляризации и структуризацией объемного заряда в пространстве и времени (рис. 1), могут быть применены для управления в полупроводниках: концентрацией носителей заряда, их термическими, электрическими свойствами, транспортными характеристиками и упрочнения материалов со свободными электронами [1–3, 13] (по схеме рис. 1). Свойство фуллеренов ловить электроны и тем самым формировать из эндоэлектронов эндоанионы фуллеренов открывает возможность модифицировать наноматериалы, применяя кулоновские силы и локализованные в пространстве синергетические (внутренние, общие) электрические поля [1–3, 13].

Квантовые свойства поляризующихся резонаторов – квантовых точек, самосогласованные с резонансной энергией активации электронов, обуславливают резонансный (колебательный) характер изменения параметров наноконструкций в зависимости от их характерного размера  $D$  и объемной концентрации ловушек – квантовых модификаторов  $C_{60}$  (рис. 6). Покрывая нанокристаллы оптимизированными по концентрации слоями ловушек для электронов, можно управлять параметрами наноконструктивных полупроводников, применяя концентрационно-квантово-размерный поляризационный эффект Высикайло второго типа (рис. 6).

Именно синергетизм (совместное действие наноловушек электронов) через электрические поля позволяет при физическом легировании существенно модифицировать в практике свойства наноконструкций (см., например, [13]). Эта фемтотехнология микромира, открытая Резерфордом, обнаружившим существенное разделение заряда в атоме, как доказывается в [1–3, 13, 15, 16] и данной работе, начинает существенно проявляться уже в наном мире из-за квантовых свойств электрона. Квантовые свойства поляризующихся резонаторов, проявляющиеся в резонансной зависимости сечения захвата (удержания) электронов от их энергии, самосогласованные с резонансной энергией активации электронов, могут обуславливать резонансный (колебательный) характер изменения макропараметров наноконструкций в зависимости от объемной концентрации квантовых модификаторов (например,  $C_{60}$ , (рис. 6 [3, 13])) в концентрационно-квантово-размерном поляризационном эффекте Высикайло второго типа. Автором исследована возможность управления параметрами композитных материалов в результате формирования на их поверхности слоев объемного заряда. Управление может осуществляться выбором: размеров нанокристаллов ( $R$ ) и процентного содержания концентрации модификатора  $\zeta_n$ , формирующего слои объемного заряда на поверхности нанокристалла. Согласно расчетам, можно надеяться на упрочнение до 104 ГПа для кристаллитов меди, алюминия и других материалов со свободными электронами. Аналитические расчеты оптимальных и резонансных процентных концентраций модификатора  $\zeta_n$ , при известных характерных размерах нанокристалла  $R$  и самого модификатора  $h$ , представляют собой простую арифметическую задачу (8) (с учетом (1)–(3)). Согласно проведенным исследованиям, впервые доказано, что при реализации концентрационно-квантово-размерного поляризационного эффекта Высикайло второго типа в наноконструктивных материалах пара «собственная функция ( $\psi_n$ ) – собственная энергия ( $E_n$ )», составляющая квантовое состояние в наном мире, помеченное основным квантовым числом  $n$ , в мезом мире физически легируемых ловушками наноконструкций заменяется двумя параметрами наном мира: радиусом нанокристалла  $R$  и резонансной относительной концентрацией модификатора (ловушки, например,  $C_{60}$ )  $\zeta_n(E_n, R)$  (рис. 6).

В качестве ловушек, формирующих отрицательно заряженный слой, можно использовать любые наноструктуры с большим сродством к электрону и поляризационной способностью. Наноструктуры с этими свойствами вытягивают в себя свободные электроны и тем самым заряжают положительным зарядом модифицируемый метаматериал. Рекристаллизация заряженных, отталкивающих друг от друга нанокристаллов становится невозможной. Но ловушки не должны отрицательный заряд (электроны) сбросить в нанокристаллы. Иначе эффекты будут исчезать. Захват электронов приводит к изменению концентраций и средних энергий электронов и тем самым обеспечивает изменение проводимости и иных параметров метаматериалов с квантовыми

резонаторами для волн де Бройля электронов. Существенно модифицировать транспортные и термические характеристики полупроводников *n*- и *p*-типа можно в случае, когда концентрация ловушек порядка концентрации носителей заряда, осуществляющих перенос тока и отвечающих за термические свойства полупроводника как изделия.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В [1–3, 13] предложены и исследованы реальный *физический поляризационный механизм резонансного захвата электрона полыми поляризующимися молекулами* и его простая аналитическая модель, позволившая установить спектр энергии активации электронов и собственный спектр квантового резонатора  $e_{1-6}@C_{60}$  (см. (1)–(3)), согласующийся с экспериментально наблюдаемыми резонансами в сечениях захвата (интерференции с продолжительным во времени удержанием) электронов полыми молекулами  $C_{60,70}$  [8] с точностью не ниже  $\pm 10\%$  (по  $E_{1-2}$ ). Предложенная автором модель, восходящая к модели Г.А. Гамова, позволяет проводить верификацию экспериментальных результатов, полученных в [7–9], и уточнять масштабную поправку на поляризационное – интерференционное взаимодействие ( $\zeta_{RN} = R+r_{ind}/R$ ). Кинетическая энергия электрона выступает в качестве энергии активации пульсирующего резонансного поляризационного процесса интерференции в молекуле  $C_{60}$  или  $C_{70}$  с захватом налетающего электрона – «солитона», формируемого резонансным поляризационным барьером (кулоновским «зеркалом» или потенциальным барьером – рис. 2).

На базе гипотезы де Бройля автором впервые сформулированы основы кумулятивной квантовой механики. В рамках *ККМ* подробно исследованы и классифицированы явления интерференции налетающего электрона с электронной оболочкой поляризующихся полых квантовых резонаторов для волн де Бройля электронов (на примере фуллеренов и нанотрубок). Сравнение с имеющимися в литературе экспериментами [7–9, 13] доказало, что гипотеза де Бройля и *ККМ* хорошо работают в наном мире для описания квантовых резонаторов для волн де Бройля электронов и квантово-размерных поляризационных эффектов. Высикайло двух типов, обусловленных поляризационными захватами электронов полыми сферически- и цилиндрически-симметричными поляризующимися молекулами фуллеренов и нанотрубок. В частности, из сравнения аналитических расчётов энергетического спектра (1)–(3) и экспериментальных наблюдений за сечением резонансного поляризационного захвата электронов [7–9] (см. рис. 3–6) получены следующие результаты:

1) сформулированы основы *кумулятивной квантовой механики*, способной описывать в квантовых резонаторах любого типа симметрии интерференцию и дифракцию де Бройля-Френеля (sin-волны) в квантовых резонаторах для волн де Бройля электронов (Q-частицы) (дифракция с узлом волны в центре резонатора) и интерференцию и дифракцию Высикайло–де Бройля–Фраунгофера, при которой  $\psi_n$ -функции электрона неограниченно кумулируют к центру полого квантового сферически- или цилиндрически-симметричного резонатора (дифракция с пучностью волны де Бройля электрона в центре резонатора). Регуляризация неограниченных, в центре сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов, решений в нуле осуществляется своевременным учётом соответствующих геометрических нормировочных коэффициентов  $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$  при  $k \neq 0$  (при  $k = 0$ ,  $\chi = 1$ ) для  $\psi_n$ -функций электронов. Сферической симметрии соответствует  $k = 1$ , и цилиндрической симметрии –  $k = 0,5$ ;

2) гипотеза де Бройля работает в случае нанометровых полых поляризующихся резонаторов для волн де Бройля электронов с  $\psi_n$ -функцией электрона, неограниченно кумулирующей к центру сферически- или цилиндрически-симметричной метастабильной квантовой точки или линии;

3) доказано формирование [1–3] и продолжительное существование эндоионов (или эндоэлектронов) фуллерена  $e_k@C_{60}$  с  $n = 3$  или  $k = 2n = 6$  (согласно принципу Паули) [13, 19];

4) классифицированы квантовые точки, линии (проволоки) и ямы в зависимости от знака полной энергии электронов на бесконечности от квантового «ящика», захватывающего электрон (с  $E > 0$  или с  $E < 0$ ). В классических строго финитных квантовых структурах полная энергия квантовой частицы  $E_n < 0$  (стабильные FQ-частицы), а в ограниченных поляризационными силами инфинитных квантовых структурах полная энергия квантовой частицы на бесконечности от поляризующегося квантового ящика  $E_n > 0$ , но тем не менее поляризационные силы локализуют такие заряженные частицы с резонансными кинетическими энергиями  $E_n > 0$  (метастабильные IQ-частицы) в области поляризующегося квантового «Q-ящика» (рис. 2). Отмечу, что авторы в [22, 23] придерживаются аналогичной классификации, хотя и отличающейся терминами. Метастабильные квантовые точки с  $E_n > 0$  они называют открытыми, а стабильные с  $E_n < 0$  – закрытыми квантовыми точками;

5) IQ-частицы *кумулируют полную энергию электрона*, приходящего из бесконечности, в области квантового «ящика». В отличие от них FQ-частицы формируются при кумуляции (локализации) электронов и сбросе части полной энергии электрона (диссипации энергии в окружающее пространство) в виде электромагнитного излучения.

Отличное совпадение аналитических расчетов для квантовых точек (IQ-частиц) в фуллеренах с имеющимися в литературе экспериментальными наблюдениями за резонансным захватом электронов в [7–9] подтверждает достоверность предложенной аналитической модели для описания поляризационного захвата полыми молекулами свободных электронов с резонансной энергией  $E_n > 0$  и формирования ими *метастабильных* квантовых точек. В результате аналитического исследования и сравнения с экспериментами доказано, что в полном квантовом ящике  $C_{60}$  устанавливается квантовый  $1/2$ -волновой и т.д.  $\cos$ -резонанс (с  $E_{\cos n} \sim (n - 1/2)^2$ ), обусловленный интерференцией Высикайло-де Бройля-Фраунгофера, отличающийся сдвигом энергетического спектра на  $1/2$  от классических – волновых  $\sin$ -резонансов в атомах (с  $E_{\sin n} \sim n^2$ ), обусловленных обобщенной интерференцией де Бройля-Френеля. Такие особенности связаны с отсутствием положительно заряженного ядра, а следовательно, и любого электрического потенциала в центре полой поляризующейся молекулы при интерференции Высикайло-де Бройля-Фраунгофера её обобществлённой электронной оболочки с налетающим на неё электроном с резонансной энергией  $E_n$ .

Впервые доказано, что в метастабильных кумулятивно-диссипативных конвективных структурах микромира (IQ-частицах) возможна самокумуляция (в виде явно выраженной пульсирующей в резонаторе солитонной волны де Бройля электрона) массы, энергии, импульса, заряда и электрического поля, обусловленная кулоновскими (поляризационными) силами. Электроны, захваченные полыми поляризующимися сферически-симметричными молекулами (например,  $C_{60}$ ), являются одномерными квантовыми метастабильными IQ-точками с полной квантуемой энергией  $E_n > 0$ , зависящей от эффективного размера квантового ящика  $R + r_{ind}$ .

На основе многочисленных экспериментов (см., например, [7–9, 13] и ссылки в этих работах) на примере резонансного захвата электрона квантовым резонатором  $C_{60,70}$  доказано, что и в наномире происходит самоорганизация *кумулятивно-диссипативных структур* (КДС), открытых и исследованных в мезомире в [16, 24]. На примере  $C_{60}$  исследована кумуляция волн де Бройля (неограниченная кумуляция  $\psi_n$ -функции) электронов в поляризующихся, квантовых, сферических резонаторах – полых молекулах. Апробированный на  $C_{60}$  и старших фуллеренах метод может быть применен для моделирования явлений, обусловленных поляризацией молекул в случае как нанотрубок, так и других молекул или иных квантовых резонаторах со значительными величинами поляризуемости ( $\alpha$ ). Механизм резонансного кумулятивно-диссипативного захвата электрона и формирование отрицательного иона  $e_k @ C_n$  с электроном внутри полости молекулы, согласно схеме на рис. 2, может быть модифицирован для механизма кумулятивно-диссипативного захвата во внутреннюю полость фуллеренов, поляризующихся атомов с последующим формированием эндодральных структур – фуллеренов, нанотрубок и других квантовых резонаторов, внутри которых в итоге заключен один или несколько атомов. Полученные результаты можно применить для описания поляризационных процессов между электронами с резонансной энергией активации и любыми сложными поляризующимися молекулами или фрактальными системами атомов. Если будет уточнен потенциал поляризационного взаимодействия электрона с молекулой  $C_{60}$ , то можно будет модифицировать решение (2) ч. I согласно, например, решению задачи 4 в [10] в гл. V, § 36 «Движение в кулоновом поле (сферические координаты)», рис. 12. Так, учет реального профиля потенциала  $U(r) \sim Br^2$ , как в [10], приведет к появлению равноотстоящих значений энергий захваченных электронов, то есть спектры (1)–(3) могут модифицироваться в зависимости от реальных поляризационных потенциалов.

Кумулятивные структуры, исследованные автором в [1–3, 13, 22], в отличие от диффузионных структур, открытых Тьюрингом [25], формируются в результате схлопывания к центру конвективных потоков [24], а не только на потоках диффузионных, как в структурах Тьюринга [25]. В кумулятивно-диссипативных конвективных структурах в наномире возможны *неограниченная кумуляция  $\psi$ -функции* частиц и соответствующая этому процессу самокумуляция массы, энергии, импульса, заряда и электрического поля, обусловленные кулоновскими (поляризационными) силами. Эта идея о кумуляции конвективных потоков кулоновскими силами в общем виде сформулирована в [16, 24] и детализирована в данной работе для процессов в наномире с учетом важности квантовых и поляризационных свойств резонатора  $C_{60,70}$  и квантовых свойств электронов. Следовательно, в данной работе в очередной раз доказана возможность самофокусировки (кумуляции) материи, обусловленной не силами гравитации, а электрическими силами, которые в

$4 \cdot 10^{42}$  раз сильнее гравитационных для электрона (и в  $v/c$  раз – магнитных). На такую мощную кулоновскую кумуляцию энергомассовоимпульсных потоков не рассчитывал в [26] Е.И. Забабахин, один из архитекторов и создателей самой мощной бомбы.

Рассмотренные свойства квантовых резонаторов, кумулирующих заряд, обусловленные формированием заряженных эндодральных структур и заряженных бислоев из таких структур, в частности из отрицательных ионов  $e_k @ C_n$ , на поверхности положительно заряжающихся наноматериалов представляют как научный, так и практический интерес и требуют дальнейших теоретических и подробных экспериментальных исследований. Большой интерес представляют эксперименты в скрещенных пучках электронов и фуллеренов с двумя и более (до 6) электронными пучками с тремя резонансными энергиями. Эти эксперименты могут прояснить не только ряд свойств анионов  $e_k @ C_n$  с  $k$  больше 1, но и поведение электронов, локализованных как ферми-газ (с плотностью  $10^{21} \div 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , находящийся в вырожденном состоянии и подчиняющийся статистике Ферми-Дирака) в кумулятивно-диссипативных структурах наномира. Эти эксперименты прояснили бы суть поверхностного натяжения, обусловленного кулоновскими силами и силами поляризации, и многое другое в области кумулятивной квантовой механики от фемто- до макромира [27].

*Предложенная автором модель поляризационного захвата после определённой модификации может быть применена для моделирования кумулятивно-диссипативных процессов в атомном ядре, поляризующемся после  $\beta$ -распада в нём одного из нейтронов, если гипотеза де Бройля в полном объёме работает и в фемтометровом диапазоне характерных размеров.*

Проведенное исследование подытожу утверждением из [24]: «Кулоновская самофокусировка есть, и её не может не быть на всех масштабах самоорганизации материи, на которых существуют кулоновские силы». Кулоновская кумуляция, или самофокусировка объемного заряда, есть, как показал в экспериментах Резерфорд, в фемтомире, есть в мезомире согласно [24], как показано в данной работе, она есть и в наномире. Кулоновская кумуляция, или самофокусировка объемного заряда, есть, несомненно, и в макромире (звезд, галактик и всей Вселенной), но это отдельная задача [15, 16, 27], касающаяся проблем астрофизики.

*Работа проводилась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации ГК № 16.552.11.7014 и ГК № 16.523.11.3002 (работы по термоэлектрическим материалам).*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Vysikaylo Ph.I. Physical Fundamentals of Hardening of Materials by Space Charge Layers. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2010, **46**(4), 291–298.
2. Vysikaylo Ph.I. Cumulation of de Broglie Waves of Electrons, Endoions and Endoelectrons of Fullerenes, and Resonances in the Properties of Nanocomposite Materials with Spatial Charge Layers. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2010, **46**(6), 547–557.
3. Высикайло Ф.И. Поляризация аллотропных полых форм углерода и её применение в конструировании нанокompозитов. *Нанотехника*. 2011, (1), 19–36.
4. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. London: Academic Press, 1995.
5. Сидоров Л.Н., Юровская М.А. и др. *Фуллерены*. Учебное пособие для вузов. М.: Экзамен, 2005. 688 с.
6. Yang S., Yoon M. et al. Electron Transfer and Localization in Endohedral Metallofullerenes: Ab Initio Density Functional theory Calculations. *Phys. Rev. B*. 2008, **78**, 115435.
7. Туктаров Р.Ф., Ахметьянов Р.Ф., Шиховцева Е.С., Лебедев Ю.А., Мазунов В.А. Плазменные колебания в молекулах фуллеренов при электронном захвате. *Письма ЖЭТФ*. 2005. **81**(4), 207–211.
8. Jaffke T., Illenbergen E., Lezius M., Matejcek S., Smith D., Mark T.D. Formation of  $C_{60}^-$  and  $C_{70}^-$  by Free Electron Capture. Activation Energy and Effect of the Internal Energy on Lifetime. *Chem. Phys. Lett.* 1994, **226**, 213–218.
9. Huang J., Carman H.S., Compton R.N. Low-Energy Electron Attachment to  $C_{60}$ . *J. Phys. Chem.* 1995, **99**, 1719–1726.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика*. Учеб. пособие в 10-ти т. Т.3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1974. 752 с.
11. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. *Введение в атомную физику*. М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1969. 303 с.
12. Белов В.В., Доброхотов С.Ю., Маслов В.П. и др. Обобщенный адиабатический принцип для описания динамики электрона в искривленных наноструктурах. *УФН*. 2005, **175**(9), 1004–1007.
13. Blank V., Vysikaylo Ph. et al.  $C_{60}$ -doping of Nanostructured Bi-Sb-Te Thermoelectrics. *Phys. Status Solidi A*. 2011, 208, 2783–2789.

14. *Свойства элементов*. Справ. изд. под ред. М.Е. Дрица М.: Металлургия, 1985. 672 с.
15. Высикайло Ф.И. Архитектура кумуляции и отражающие зеркала в структурах от фемто- до макромасштабов. Неустойчивость фокусирующейся массы. *Сборник трудов международной конф. МСС-09 «Трансформация волн, когерентные структуры и турбулентность»*, 23-25 ноября 2009 г. М.: ЛЕНАРД, 2009. 512 (с. 141; 288, 310; 341; 387; 432; 468).
16. Высикайло Ф.И. *Архитектура кумуляции в диссипативных структурах*. М.: МФТИ–ФГУ ТИС-НУМ, НОЦ «Физика и химия наноструктур». 2009. 192 с.
17. Rogacheva E.I. et al. Quantum Size Effects in PbSe Quantum Well. *Appl. Phys. Lett.* 2002, **80**(15), 2690–2692.
18. Лифшиц И.М., Косевич Ф.М. К теории магнитной восприимчивости тонких слоев металла при низких температурах. *ДАН СССР*. 1953, **91**(4), 795–798.
19. Reed C.A., Dolskar R.D. Discrete Fulleride Anions and Fullerenium Cations. *Chem. Rev.* 2000, **100**, 1075–1120.
20. Wang K.A., Wang Y., Dresselhaus M.S. et al. Raman Scattering in C<sub>60</sub> and Alkali – Metal – Doped C<sub>60</sub> Films. *Phys. Rev. B*. 1992, **45**, 1955–1963.
21. Denisov V.N., Mavrin B.N. et al. Raman Scattering and Lattice Dynamics of Fullerides M<sub>x</sub>C<sub>60</sub>. *Optics and Spectroscopy*. 1994, **76**(2), 242–253.
22. Ткач Н.В., Головацкий В.А. Квазистационарные состояния электронов и дырок в открытой сложной цилиндрической квантовой проволоке. *Физика твердого тела*. 2001, **43**(2), 350–356.
23. Королёв Н.В., Стародубцев С.Е., Бормонтов Е.Н., Клиньских А.Ф. Особенности электронного спектра открытой сферической квантовой точки с дельта-потенциалом. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2011, **13**(1), 67–71.
24. Высикайло Ф.И. Кумуляция электрического поля в диссипативных структурах в газоразрядной плазме. *ЖЭТФ*. 2004, **125**(5), 1071–1081.
25. Turing A.M. The Chemical Basis of the Morphogenesis. *Proc. Roy. Soc. B*. 1952, **273**, 37–71.
26. Забабахин Е.И., Забабахин И.Е. *Явления неограниченной кумуляции*. М.: Наука, 1988. 173 с.
27. Vysikaylo Ph.I. Detail and General Model of Electronic Processing of Surface of Charged Plasmons from Atomic Nuclei to white Dwarfs, Neutron Stars and Galactic Nuclei. Self-contraction and the Classification of Charged Plasma Structures. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2012, **48**(1), 14–25.

Поступила 15.08.11

### Summary

The processes of physical doping of nano-structured (meta-) materials are investigated. Cumulative quantum mechanics (CQM) as stated by the author was the base for the following: 1) Two types of interference and diffraction (in the center) in the hollow quantum cavities for de Broglie waves of electrons, and 2) Two types of Vysikaylo's quantum-size effects due to polarization capture of electrons in the cavity quantum resonators. The first type of interference and, accordingly, the diffraction at the center of the cavity corresponds to the interference of de Broglie-Fresnel (sin-wave with a node in the center of the resonator). This type is used to describe the localization (accumulation) of electrons in the atom (quantum cavity with an atomic nucleus in the center of the cavity). The second type of interference and, accordingly, diffraction is called Vysikaylo – de-Broglie-Fraunhofer interference (diffraction with the antinode of the de Broglie wavelength of an electron in the center of a **hollow** resonators), in which  $\psi_n$  – the functions of an electron are indefinitely accumulated (focus polarization "mirror") towards the center of a hollow spherical or cylindrically symmetrical quantum resonator ( $\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r^k$ ). It is shown that the irregular cos-solutions in the center of the cavity, for all of the wave phenomena, are regularized by the regularized geometric factor. In the framework of CQM, the following is proved: along with the classical energy spectrum for asymmetric  $\psi_n$ -functions (sin-waves – harmonics) with  $E_n \sim n^2$  for **hollow** quantum resonators there are also symmetric  $\psi_n$ -functions (cos-waves – the fundamental tone) with  $E_n \sim (n-1/2)^2$  realized in the experiments. Energy spectrum of states localized by barrier, with  $E_n > 0$  (metastable IQ-particle – partially open quantum dot, line or well), as in the case of  $E_n < 0$  (FQ-stable particle – a closed quantum dot, line or well), is determined by effective internal box dimensions ( $R + r_{ind}$ ) with polarization forces, effective at the distance  $r_{ind}$  from the **hollow** molecule. Comparisons of the results of analytical calculations with experimental observations conclusively prove the validity of CQM for the description of quantum-size effects in the physical doping of metamaterials. For the first time it was demonstrated that in nanocomposite materials a couple of "proper function  $\psi_n$  – eigenenergy  $E_n$ " that constitutes a quantum state in the nanoworld, marked by the main quantum number  $n$ , in the mesoworld of nanocomposites physically doped by traps is replaced by two parameters: diameter of the nanocrystal –  $D$  and the resonance of the relative concentration of the modifier (traps, such as C<sub>60</sub>, 70) –  $\zeta_n$  in the present work the self-assembly of hollow allotropic forms of carbon in resonant electrons is discussed.