

## КУМУЛЯЦИЯ ВОЛН ДЕ БРОЙЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ. ЭНДОИОНЫ И ЭНДОЭЛЕКТРОНЫ Фуллеренов. РЕЗОНАНСЫ В СВОЙСТВАХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ СО СЛОЯМИ ОБЪЕМНОГО ЗАРЯДА

ФГУ «Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов,  
ул. Центральная, дом 7а, г. Троицк, 142190, Московская обл., Россия, filvys@rambler.ru

**Введение.** Фуллерены, нанотрубки, клатраты, онионы представляют собой особый класс наноструктур, обладающих четко выраженным свойством формирования "ловушек" для других нанобъектов – отдельных атомов, молекул или подобных, вложенных друг в друга (матрешечных) структур, например для эндофуллеренов (фуллерены с заключенным внутри атомом или молекулой) [1, 2].

Для обозначения эндофуллеренов используется формула  $M_k@C_n$ , где  $M$  – инкапсулированный атом или молекула, а нижние индексы  $k$  и  $n$  указывают на число таких атомов и атомов углерода в молекуле фуллерена соответственно. Используемое обозначение позволяет отличать эндоэдральные молекулы от обычных химических соединений, которые в случае фуллеренов обозначаются символом  $M_kC_n$ . Во всех указанных случаях вложенные структуры сформированы электронейтральными атомами или молекулами, которые сами состоят из сложно распределенных в пространстве слоев положительных и отрицательных зарядов. (Основы такого понимания или фемтотехнологий со слоями объемного заряда заложил еще Резерфорд в начале прошлого века.) В то же время хорошо известно, что молекулы фуллеренов являются сильными акцепторами электронов, так, сродство к электрону у  $C_{60}$  – 2,7 эВ [1]. Благодаря этому молекулы фуллеренов способны захватывать электроны и легко образовывать химические соединения. Электроны из-за образования химической связи локализуются с внешней стороны молекулы фуллерена. Как показывают эксперименты, по-видимому, возможен и другой "сценарий" взаимодействия электрона с фуллереном (или иной полый молекулой).

Характерный размер ячейки  $L$  молекулы  $C_{60}$  (пентагон или гексагон) – не более 2,8 Å. Этот размер соответствует минимальной энергии электрона  $\sim 18$  эВ (в случае плоской волны де Бройля), способного покинуть через эти ячейки внутренний объем  $C_{60}$  ( $E = p^2/2m$ ,  $p = (h/L)$ , где  $h$  – постоянная Планка,  $m$  – масса электрона). Если электрон обладает энергией более 18 эВ, то он может проникать вовнутрь полый молекулы и покидать ее. Закономерно предположить наличие некоего диапазона значений резонансных энергий электрона, достаточного для того, чтобы электрон проник внутрь молекулы, но не смог покинуть её.

Иными словами, фуллерены представляют ловушку для электронов, обладающих резонансной энергией. В итоге резонансного захвата во внутреннюю полость возникает возможность формирования эндоэлектронов в фуллеренах и иных полых молекулах. Это свойство полых молекул – играть роль ловушек для электронов с резонансными энергиями – открывает новые возможности в плане управления свойствами композитных материалов (их параметрами). Так, подбирая концентрации полых молекул (квантовых резонаторов), например фуллерена, можно понижать теплопроводность материалов, увеличивать их прочностные характеристики, формируя двойные слои объемного заряда [3, 4], и т.д. Отрицательный ион фуллерена с эндоэлектроном или их системой в полости можно назвать эндоионом. Статья посвящена обоснованию возможности такого "сценария". Аналитические расчеты и имеющиеся многочисленные эксперименты [5–7] (см. ссылки в [6, 7]) свидетельствуют в пользу данного предположения. Если открытие эндоэдралов произошло практически одновременно с открытием фуллеренов, то о возможном появлении эндоэлектронов и соответственно эндоионов фуллеренов и иных полых молекул впервые сообщалось в [3, 4] в виде гипотезы и её качественного обоснования.

**Взаимодействие молекул  $C_{60}$  с электронами.** Взаимодействие молекул  $C_{60}$  с электронами изучалось во многих работах. По-видимому, нет другой молекулы (за исключением ее производных и  $C_{70}$ ), способной образовывать долгоживущие отрицательные молекулярные ионы (ОМИ) при энергии бомбардирующих электронов до 20 эВ [5–7]. Механизм стабилизации ОМИ относительно отщепле-

ния электрона при столь большой избыточной энергии, запасенной в нем, до сих пор неясен [5–7] (см. рис. 1). Действительно, если бы прилипание к молекулам фуллерена происходило по классическому механизму захвата электрона атомом углерода в потенциальную яму, без глубокого проникновения электрона вовнутрь фуллерена, то следовало ожидать единственный пик только в области малых энергий электронов, как это наблюдается в случае молекулы  $SF_6$  (рис. 1, б). В случае **полой** молекулы  $C_{60}$  наблюдается совсем другая картина (рис. 1). Так как в экспериментах обнаружен порог прилипания (рис. 1) активизированного электрона к  $C_{60}$  и  $C_{70}$ , то можно было бы привлечь механизмы диссоциативного прилипания, требующие определенной энергии активации электронов. Однако продуктов распада  $C_{60}$  после захвата резонансного электрона обнаружено не было [6]. У исследователей нет единого мнения относительно механизма резонансного захвата и более медленных ( $\approx 1 \div 1,5$  эВ) электронов [5–7]. Резонансные пики в сечениях прилипания (см. рис. 1), согласно [7], для  $C_{60}$  в экспериментах наблюдаются при энергиях активации электронов  $E_n = 0,2; 1,5; 4,5; 5,5; 8$  эВ.

Если первый резонансный уровень с  $n = 1$  четко идентифицируется на рис. 1, а и б (в [6] указывается, что  $E_1 = 0,24$  эВ), то уровни  $n = 2-5$ , отмеченные в работе [7], установлены менее точно и их наличие вызывает сомнение (так в [6] приводятся значения  $E_{2-5} = 2,25; 3,8; 4,9; 6,1$  эВ). При хорошем внешнем согласии результаты экспериментальных работ [5–7] существенно отличаются в деталях резонансных уровней (рис. 1, а, б и в). Так, энергия активации первого резонансного уровня иона  $C_{60}^-$ , установленная в [6], равна 0,24 эВ, что на 20% отличается от значения, приведенного в [7]. В разы отличаются относительные величины первых пиков по отношению ко вторым (рис. 1, а, б и в). Автор склоняется к большей достоверности результатов с абсолютными значениями сечений, приведенных в [6], хотя и эти результаты, по-видимому, могут быть уточнены в дальнейших, более точных экспериментах. Согласно [6] (рис. 1, а), эффективный радиус поляризационного взаимодействия превышает характерный радиус молекулы  $C_{60}$  (0,36 нм) и для электронов с энергией порядка 2 эВ достигает 0,62 нм, что на  $r_{ind} \approx 0,26$  нм превышает радиус молекулы. Это явление, несомненно, связано с поляризационными силами, возникающими между внешним (экзо-) электроном и поляризованной этим экзoeлектроном молекулой  $C_{60}$  (или иной поляризующейся молекулой). В результате поляризационного взаимодействия происходит формирование внутри полости молекулы стоячей сферической волны – эндоэлектрона.

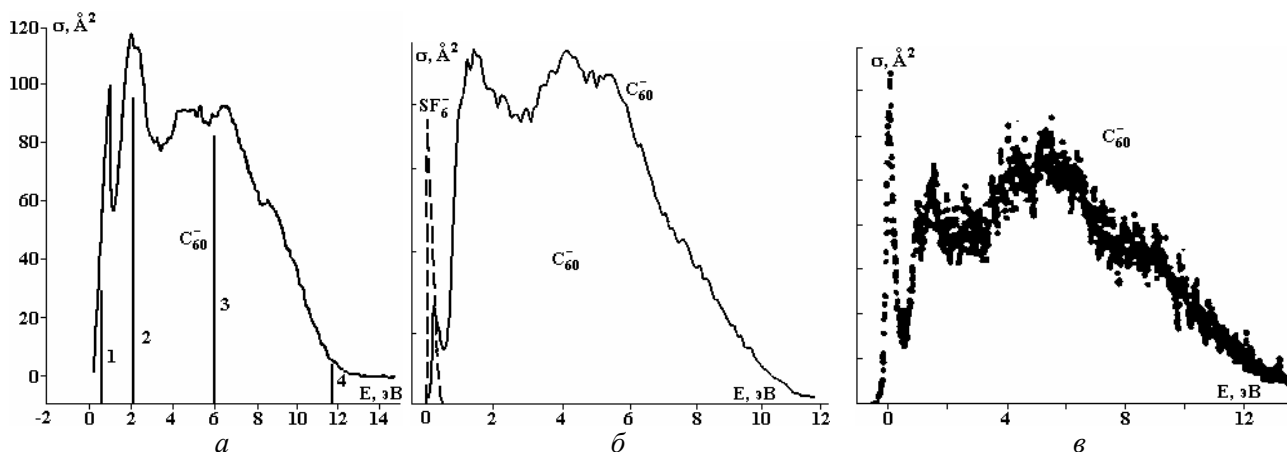


Рис. 1. Экспериментально измеренные сечения прилипания электрона к  $C_{60}$  в зависимости от его энергии: а) для  $C_{60}$  [6]. Прямыми жирными вертикальными линиями отмечены собственные энергии (с главными числами  $n = 1, 2, 3, 4$ ), рассчитанные по (9) с учетом действия сил поляризации  $C_{60}$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

Хорошо изучено взаимодействие молекулы  $C_{60}$  с внешним электроном в случае взаимодействия с атомами щелочного (или щелочно-земельного) металла. При комнатной температуре  $C_{60}$  кристаллизуется в форме гранецентрированной кубической решетки с относительно слабыми межмолекулярными силами связи. Такие молекулярные кристаллы  $C_{60}$  называют фуллеритами. В плотноупакованной ГЦК структуре (параметр решетки равен 1,417 нм) молекулы  $C_{60}$  представляются шарами радиусом 1,002 нм. На одну молекулу  $C_{60}$  приходится одна октаэдрическая и две тетраэдрические пустоты с радиусами 0,206 и 0,112 нм соответственно. Такие большие пустоты делают фуллерит перспективным для синтеза новых соединений внедрением в них разнообразных атомов и молекул. Та-

кое внедрение называется интеркалированием [1]. Если в результате интеркаляции атомов происходит передача валентных электронов молекулам  $C_{60}$ , то такие соединения называются фуллеридами и обозначают  $M_kC_{60}$ . Здесь  $M = K, Rb, Cs$  и др. Валентные электроны делокализируются по оболочке  $C_{60}$ , тем самым они образуют молекулярные анионы  $C_{60}^{-k}$ , при этом разница в длинах двойной и одинарной связей уменьшается. Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) таких интеркалированных фуллеренов смещаются по отношению к интрамолекулярным спектрам молекул фуллерена почти на  $6 \text{ см}^{-1}$  на каждый переданный молекуле  $C_{60}$  валентный электрон в низкочастотную область [8–10]. Из электронной структуры молекулы  $C_{60}$  следует, что при восстановлении  $C_{60}$  заполняется низший свободный уровень  $t_{1u}$ , на котором может разместиться до  $k = 6$  электронов [1, 2, 11]. Согласно [8–11] можно полагать, что если происходит захват электронов наноматериала (металла или полупроводника) на оболочку  $C_{60}$  (электрон садится в потенциальную яму) и концентрация анионов сравнима или превышает концентрацию недопированных электронами  $C_{60}$ , то спектр допированного электронами  $C_{60}$  также должен смещаться на  $6 \text{ см}^{-1}$  на захваченный электрон [8–11]. Однако если электрон с энергией  $E > 0$  сбрасывается во внутреннюю полость фуллерена из-за генерации поляризационных сил, которые исчезают при проникновении электрона внутрь полой молекулы, то такие сдвиги могут и не наблюдаться. Действительно, как показано в данной работе, эндоэлектрон с энергией активации  $E > 0,2$  эВ локализуется поляризационными силами в центре полых молекул (на примере  $C_{60}$ ), не образует с ними химических связей, а за границей области локализации ( $r \geq R$ ) вероятность его нахождения равна нулю (то есть  $\psi(r \geq R) \equiv 0$ ).

**Взаимодействие внешнего электрона с полыми наноструктурами. Кумулятивно-топологический механизм захвата электрона при формировании эндоионов.** Для оценки профиля захвата электрона по механизму резонанса формы рядом исследователей выбирается сферически-симметричный прямоугольный потенциал с энергетической ямой во всей полости  $C_{60}$  (с отрицательной энергией  $-2 \div 3$  эВ, см., например, [12] и ссылки в этой работе). Это ошибка в постановке задачи, так как никакой потенциальной ямы во внутренней полости  $C_{60}$  нет. Энергия захваченного электрона  $E$  в полости все время остается существенно больше нуля. В этих работах поляризация молекулы  $C_{60}$ , способствующая постоянному возврату (кумуляции) захваченного электрона к центру полой структуры, учитывается некорректно. Потенциальная яма с размерами порядка полой молекулы не образуется. В результате действия поляризационных сил происходит формирование отражающего электрон (к центру полой молекулы) барьера (квантово-кулоновского фокусирующего «зеркала»). Это фокусирующее к центру фуллерена поляризационное «зеркало» (барьер) для захваченного электрона формируется на короткий миг синергетическими (совместными) полями нескольких оголившись положительно заряженных ионов атомов углерода, появившихся из-за поляризации молекулы только в тот момент, когда этот эндоэлектрон покидает объем полой молекулы (то есть становится экзоэлектроном). Основное время электрон без действия кулоновских потенциалов движется по инерции к центру уже не поляризованной молекулы. Величина средней электронной поляризуемости полых молекул  $C_{60}$  велика –  $\alpha = 90 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3$ . Основной ошибкой в теоретических работах является не учет внутренней, существенной области без потенциала, в которую может происходить сброс налетающих на молекулу электронов с энергией от 0,2 до 12 эВ с последующим их постоянным отражением от вогнутой оболочки (поляризационного «зеркала»).

Сферическая потенциальная яма, формируемая оболочкой из атомов углерода, локализована только у поверхности молекулы на размерах толщины оболочки, а не занимает весь объем молекулы  $C_{60}$ . Основной внутренний объем молекулы  $C_{60}$  свободен от кулоновского потенциала (оболочки). Потенциал является оболочечным с характерной толщиной оболочки порядка диаметра атома углерода, то есть менее  $1 \text{ \AA}$ . Поэтому все квантово-механические расчеты, выполненные в предположении, что кулоновская потенциальная яма молекулы  $C_{60}$  занимает весь внутренний объем и электрон с начальной энергией, например 10 эВ, сразу садится в эту яму с отрицательной энергией  $-2$  эВ, по мнению автора, неверные. (Как будет доказано в данной работе, размер радиуса отражающей оболочки определяется силами поляризации и превышает геометрический радиус полой молекулы.)

Автор считает, что механизмом «стабилизации» электронов с энергиями менее 18 эВ, сталкивающихся с молекулой фуллерена, служат его отщепление во внутреннюю полость молекулы  $C_{60}$  (рис. 2) и последующая локализация электрона, то есть формирование во внутренней полости  $C_{60}$  стоячей волны – эндоэлектрона. В процессе проникновения электрона в фуллерен существенную роль играют поляризация молекулы  $C_{60}$  и её геометрическая сферическая форма (выпуклая с внешней стороны и вогнутая с внутренней). Как доказывается в данной работе, такая геометрия определяет не только ширину потенциального барьера, но и его высоту (до 18 эВ).

Попав во внутреннюю область после отщепления от внутренней поверхности молекулы  $C_{60}$ , электрон уже не может свободно покинуть замкнутую молекулу, если его энергия  $E$  находится в пределах  $0,2 \text{ эВ} \leq E \leq 18 \text{ эВ}$ . Только захват электрона во внутреннюю полость  $C_{60}$  как в ловушку с отражающими к центру «зеркалами» позволяет разумно объяснить значительные сечения «прилипания» (рис. 1) при энергиях электронов выше потенциала ионизации –  $I_{C_{60}} = 7,6 \text{ эВ}$ . Минимальная кинетическая энергия электронов, способных находиться во внутреннем объеме молекулы  $C_{60}$ , должна быть больше  $0,2 \text{ эВ}$ . Это определяется принципом неопределенности и диаметром молекулы  $C_{60}$ :  $D \approx 0,72 \text{ нм}$  ( $R = 0,36 \text{ нм}$ ).

В резонансном захвате электрона (в указанном диапазоне его энергий) молекулой  $C_{60}$  и соответствующим формированием эндоиона  $e_k @ C_n$  играют следующие факторы:

1) поляризация фуллерена (например, молекулы  $C_{60}$ ) при взаимодействии с налетающим электроном;

2) ускорение электрона синергетическим (совместным) полем ионов атомов углерода, возникших из-за поляризации  $C_{60}$ , и дальнейшее его ускорение к центру полой молекулы при движении в области ядра одного из атомов углерода;

3) отсутствие из-за геометрического фактора поляризации молекулы при наличии электрона внутри (внутри поверхность молекулы вогнута, а вовне – выпукла).

После поляризации молекулы подлетающим электроном последний ускоряется в поле иона углерода и приобретает кинетическую энергию, необходимую для проникновения и накопления (кумуляции) электронов во внутреннем объеме  $C_{60}$ . Электрон после огибания ядра иона покидает ускоряющий его ион, влетая во внутренний объем молекулы  $C_{60}$ . Теряя кинетическую энергию, эндоэлектрон внутри молекулы  $C_{60}$  опять «распухает»: растет его характерная длина волны де Бройля (рис. 2). При этом молекула возвращается в неполяризованное состояние и поляризационный потенциал исчезает до момента выхода электрона из полой молекулы. Из-за геометрического фактора электрон внутри молекулы  $C_{60}$  менее эффективно поляризует молекулу, чем вне ее. Обусловлено это вогнутостью внутренней поверхности молекулы  $C_{60}$ .

Такие различия геометрии электронных оболочек для внешнего и внутреннего электронов обуславливают резонансное рассеивание внутреннего электрона сразу десятком электронов оболочки (их число обратно пропорционально кинетической энергии электрона или квадрату длины волны де Бройля), а для внешнего электрона, наоборот, обуславливают возможность ускориться и фокусироваться к центру выпуклой положительно заряженной части  $C_{60}$ . При энергии эндоэлектрона порядка  $0,2 \text{ эВ}$  он вообще не может ее поляризовать согласно теореме Гаусса и взаимодействует со всеми электронами оболочки  $C_{60}$  одновременно. И, следовательно, "квантово-классический" эндоэлектрон с энергией от  $0,2 \text{ эВ}$ , попавший в сферическую молекулу  $C_{60}$ , не может выбраться из неё, если не разрушен каркас фуллерена. Для электрона с энергией существенно больше  $0,2 \text{ эВ}$  взаимодействие происходит с меньшим количеством электронов и тем самым повышается вероятность его проникновения через потенциальный барьер оболочки  $C_{60}$  (с увеличением энергии электрона уменьшается эффективный барьер оболочки). При энергии электрона больше  $18 \text{ эВ}$  он свободно покидает внутренний объем  $C_{60}$ .

Стабилизация отрицательного иона  $e_k @ C_n$ , таким образом, происходит из-за кумулятивного сброса налетающих электронов ядрами атомов углерода в ловушку – внутренний объем молекулы – и последующей генерации сил поляризации при выходе электрона за пределы полой молекулы. Это предположение обосновывается аналитическими исследованиями, выполненными в данной работе, и их сравнением с экспериментами, выполненными в [5–7].

Для нанотрубки геометрический фактор рассеивания электрона внутри нее имеет 2D-размерность. Аналогичное рассеивание в нанотрубке обеспечивает баллистическую проводимость нанотрубок. Так как в нанотехнологии были давно созданы тонкие протяженные квазиодномерные и квазидвумерные структуры сложной геометрии – нанотрубки и нанопленки, то одновременно возникла необходимость в теоретическом описании поведения электрона в рамках таких сложных структур. В теоретических моделях считается, что вне этих областей волновая функция  $\psi(r, t)$  квантовой частицы экспоненциально быстро убывает (модель мягких стенок) либо равняется нулю (модель жестких стенок). Выше нами была обоснована модель жестких стенок для слабоэнергетичных электронов (например,  $E_n < I_{C_{60}}$ ), обусловленная одновременным взаимодействием эндоэлектрона сразу с большим количеством электронов оболочки  $C_{60}$ .

В ряде теоретических работ в адиабатическом приближении рассматривались решения модели тонкого изогнутого цилиндра с «закрученной границей» или тонкой искривленной пленки [13]. Разномасштабность в тонких протяженных структурах удобно характеризовать малым «адиабатиче-

ским» параметром  $\chi = D/L$ , который в [13] полагался малым. Здесь  $D$  – диаметр нанотрубки,  $L$  – её длина. В рамках этих моделей было показано, что «геометрический потенциал» или наличие жестких стенок в пустом волноводе создает эффективное притяжение к точкам наибольшей кривизны оси. Термин «геометрический потенциал» впервые введен В.П. Масловым в [14]. В случае фуллеренов, как понятно, такой точкой кумуляции является центр фуллерена. Так как для фуллерена параметр адиабатичности  $\chi = D/L$  становится равным 1, то обобщенный адиабатический принцип для описания динамики электрона в искривленных наноструктурах, разработанный в [13], не пригоден для ловушек – фуллеренов. В этом случае  $D = L$ .

Однако в рамках сферической модели с жесткими стенками удастся рассчитать для эндоэлектронов собственные значения резонансных энергий и собственные функции для полых квантовых резонаторов Гельмгольца. Это доказывает возможность формирования на базе полых молекул (в частности,  $C_{60}$ ) квантовых ловушек (резонаторов) для электронов. Ловушка обусловлена все тем же геометрическим потенциалом [14], отражающим электрон от оболочки полый молекулы к её центру. (Следует отметить, что название работы [14] «Асимптотики собственных функций уравнения  $\Delta u + k^2 u = 0$  с краевыми условиями на эквидистантных кривых и рассеяние электромагнитных волн в волноводах» соответствует целям данной работы – найти решение для случая  $C_{60}$ , см. также (1).) Действительно, в такой сферически-вогнутой для эндоэлектрона ловушке внутренний электрон с энергией более 0,2 эВ одновременно взаимодействует со всеми электронами десятка атомов углерода и только при энергии более 18 эВ может свободно покинуть внутреннюю полость фуллерена. Таким образом, в случае фуллерена «геометрический потенциал» эффективно фокусирует электрон к центру внутренней полости и постоянно отражает к центру уже внутренний – эндоэлектрон. Из вышеприведенных соображений высоту потенциального барьера можно выбрать 18 эВ.

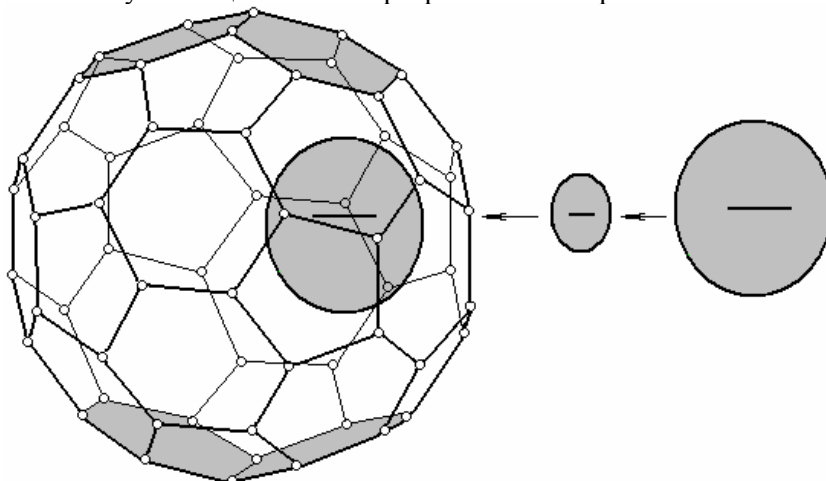


Рис. 2. Схема кумулятивного сброса электрона с энергией от 0,2 до 18 эВ в полость молекулы  $C_{60}$  и резонансного образования эндоиона  $e_k @ C_n$ . Приведено последовательное уменьшение длины волны де Бройля электрона, налетающего на поляризующуюся им же молекулу фуллерена [4]

**Взаимодействие эндоэлектрона с вогнутыми наноструктурами. Механизм отражения и кумуляции эндоэлектрона фуллерена поляризационным «зеркалом».** Рассчитаем влияние «геометрического потенциала» на кумуляцию электронов к центру фуллерена. Внутри фуллерена, где кулоновский потенциал равен нулю, электрон с полной энергией  $E_n \sim 0,2$  эВ можно рассматривать как запертую оболочкой сферически-симметричную стоячую волну, отражающуюся к центру фуллерена и описываемую стационарным уравнением Шрёдингера или уравнением Гельмгольца [15, 16]:

$$\Delta\psi(r) + k_n^2\psi(r) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $k_n^2 = 2E_n m / \hbar^2$ ,  $m$  – масса электрона.

Решением уравнения (1) в сферически симметричном случае без учета центробежного потенциала ( $l = 0$ ) является [16]:

$$\psi(r) = [A \cos(k_n r) + B \sin(k_n r)] / r. \quad (2)$$

В качестве граничных условий на внутренней границе отражающей оболочки, в модели с абсолютно жесткой оболочкой, ставим условие на полное внутреннее отражение:

$$\psi(r \geq R) \equiv 0, \text{ откуда } \rightarrow \text{ при } r \leq R \quad \psi(r) = A \cos(k_n r) / r. \quad (3)$$

Согласно [15, 16], в модели (1)–(3) внутри такой оболочки должны существовать собственные дискретные (резонансные) уровни энергии для запятого оболочкой электрона с энергией активации  $E_n \sim 0,2$  эВ:

$$E_n = \pi^2 (n-1/2)^2 \hbar^2 / 2mR^2 = 0,37 \cdot (n - 1/2)^2 / R^2 [\text{эВ}], \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (4)$$

В соответствии с (4), задаваясь, например,  $R = 0,36$  нм (радиус оболочки  $C_{60}$ ), получаем при  $n = 1-3$  энергетический спектр резонансных уровней захваченных электронов:

$$E_{n=1-3} = 0,71; 6,4; 17,7; \dots \text{ эВ.} \quad (5)$$

Если учесть реальную толщину оболочки  $C_{60}$ , то расчетная энергия уровней увеличится еще в 1,9 раза соответственно:

$$E_{n=1-2} = 1,3; 12,0; \dots \text{ эВ.} \quad (6)$$

Бесконечный спектр (5) или (6) обрывается тем фактом, что при кинетической энергии более 18 эВ электрон свободно может покинуть  $C_{60}$  как плоская волна де Бройля, так как его характерные размеры сравнимы с характерными размерами ячейки фуллерена (рис. 2). Даже эти результаты в первом приближении удовлетворительно согласуются с экспериментами [5–7] (рис. 1). Приведенные в [5] результаты громоздких численных расчетов по модели, восходящей к модели Томаса – Ферми, как указывают авторы [5], дают наименьшую энергию колебательной моды для случая  $C_{60} \sim 2,55$  эВ. Несомненно, следовало бы провести численные расчеты распределения плотности электронов в  $C_{60}$  методом функционала плотности (см., например, [17]) в присутствии налетающего электрона. Однако определенные детали структуры сечений и физика явления кумуляции электронов в полые молекулы могут быть уточнены далее и в рамках, предложенной автором аналитической модели (1)–(4).

#### Пространственное распределение электрона в полости молекулы фуллерена.

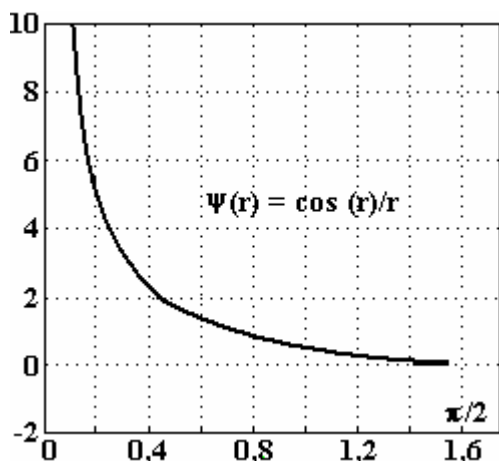


Рис. 3. Зависимость  $\psi_1$ -функции электрона от расстояния до центра полый молекулы ( $r$  – в радианах)

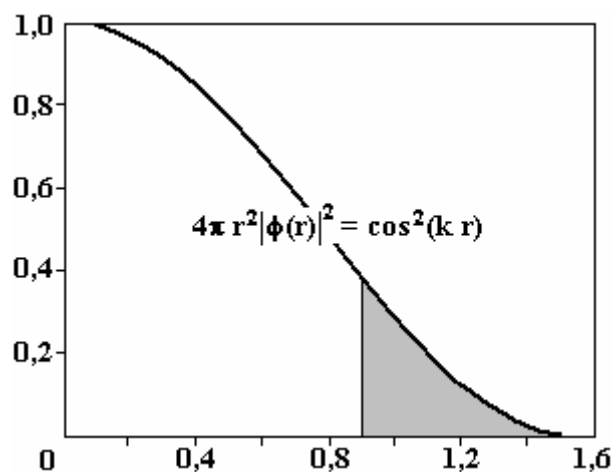


Рис. 4. Относительная вероятность найти электрон в полости  $C_{60}$  от расстояния до центра фуллерена. Затемнена относительная вероятность нахождения электрона вне оболочки  $C_{60}$ .

Итак,  $\psi$ -функция основного состояния электрона внутри полости фуллерена согласно (3) является гиперболически спадающей функцией от начала координат. Однако из (3) не следует, что вероятность найти электрон на нулевом расстоянии от центра молекулы фуллерена равна бесконечности. Вероятность того, что электрон находится в объеме  $dV$ , как мы знаем [18], равна  $|\psi(r)|^2 dV = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2 dr$ . Следовательно, относительная вероятность найти электрон в шаровом слое на расстоянии  $r$  от центра молекулы фуллерена определяется  $\cos^2(k_n r)$  (рис. 4). Максимальная вероятность найти электрон в полый сферической молекуле действительно достигается в её центре, так как оболочка с такими граничными условиями постоянно отражает электрон к центру структуры. Функция  $\psi(r)$  не является гладкой в начале координат и, более того, является неограниченной в центре фокусировки. Так работает геометрический потенциал искривленных поверхностей, введенный В. Масловым в 1958 г. [14], в случае полых сферически симметричных молекул. Этот геометрический потенциал и определяет кумуляцию электрона к центру структуры  $C_{60}$  и особенности формирования  $\psi$ -функции электрона в полости фуллерена. Геометрический потенциал обращается в бесконечность в начале координат, а  $\psi(r)$  не только терпит излом, но и сама становится бесконечной ( $\cos(k_n r)/r \rightarrow \infty$  при  $r \rightarrow 0$ ). В этом решении учитывается кумуляция электрона геометрическим потенциалом. Прежде

чем определить возможный спектр физических явлений, приводящих к возникновению этого потенциала, оценим вероятность проникновения электрона через потенциальный барьер оболочки  $C_{60}$ .

**Проникновение через «геометрический» потенциальный барьер.** Вероятность  $W$  проникновения эндоэлектрона через «геометрический» барьер определяется рядом параметров [15]:  
 $W \sim C \cdot \exp(-4\pi(2m(U-E))^{1/2} \cdot d/h) \approx \exp(-1,08 \cdot 10^{10} \cdot (U-E_n)^{1/2} \cdot d)$ .

Одним из них является величина характерной ширины барьера  $d$  [м] и вторым – величина потенциала  $U$  [эВ]. По-видимому,  $d$  можно считать для эндоэлектронов с энергией порядка 1 эВ, равным радиусу  $C_{60} \approx 0,36$  нм. Высота барьера пусть равна 18 эВ. Характерное время существования эндоиона фуллерена, согласно этим предположениям, порядка  $10^{-(8 \pm 9)}$  с. Если между протуннелировавшим электроном и фуллереном было бы кулоновское отталкивание, как в случае  $\alpha$ -распада атомных ядер, то обнаружить эндоионы фуллерена было бы практически невозможно, так как по этим оценкам время пребывания электрона внутри  $C_{60}$  ничтожно. Однако в результате распада эндоиона фуллерена происходит поляризация уже нейтральной молекулы фуллерена и экзэлектрон опять фокусируется к центру молекулы поляризационными силами. Поэтому ионы с эндоэлектронами с положительной энергией активации менее 12 эВ есть и в период времени, достаточного для их обнаружения и исследования [5–7] (рис. 1). Ответственным за их продолжительное существование является поляризационное взаимодействие  $C_{60}$  с электроном, только что покинувшим полую молекулу. Поляризационное взаимодействие возвращает протуннелировавший через оболочку  $C_{60}$  электрон обратно к центру фуллерена, если энергия этого электрона меньше энергии поляризационного взаимодействия электрона и молекулы фуллерена.

Наличие поляризационного взаимодействия молекулы  $C_{60}$  с внешним электроном в разы увеличивает эффективный радиус геометрического потенциала, то есть радиус электрона отражается обратно в молекулу  $C_{60}$ :  $R \rightarrow R + r_{ind}$ . При этом время жизни соответственно увеличивается до  $10^{-4}$  с. Однако для электронов с резонансной энергией активации  $E_n$ , способных зеркально отражаться в поляризационном потенциале (зеркале) молекулы  $C_{60}$ , время жизни в полую молекулу возрастает еще в большее число раз. Это явление формирования долгоживущего «солитона» в области  $C_{60}$  доказывает резонансным характером прилипания активизированных электронов, обнаруженного в экспериментах, например [5–7] (рис. 1), и аналитическим исследованием, проводимым в данной работе.

**Поляризационное взаимодействие. Подробное сравнение аналитических расчетов с экспериментальными исследованиями.** Эффективный радиус взаимодействия молекулы  $C_{60}$  с электроном можно оценить из экспериментальных данных [6] (см. рис. 1,а). Согласно эффективному сечению, приведенному на рис. 1,а, эффективный радиус взаимодействия  $R_1 \approx (\sigma/\pi)^{1/2}$  порядка 0,56 нм для первого резонанса и  $R_2 \approx 0,62$  нм для второго собственного значения энергии. Таким образом, поляризационное взаимодействие может существенно стабилизировать эндоион фуллерена при определенных энергиях эндоэлектрона (не превышающих энергию поляризационного взаимодействия), что согласуется с экспериментальными наблюдениями [5–7].

Оценим  $e\varphi_{ind}$  – характерную энергию поляризационного (индуцированного) взаимодействия электрона с поляризующейся им молекулой фуллерена. Электрическое поле диполя молекулы  $C_{60}$ , действующее на электрон, возбуждающий поляризацию этой же молекулы [19]:

$$E(r) = 2P/r^3 = 2\alpha E(r)/r^3 = 2\alpha e / 4\pi\epsilon_0 r^5. \quad (7)$$

Интегрируя (7) по  $r$ , найдем энергию поляризационного взаимодействия электрона и молекулы фуллерена  $e\varphi_{ind}(r)$ :

$$e\varphi(r) = -\alpha e^2 / 8\pi\epsilon_0 r^4 = 0,065 \cdot (r_0/r)^4 \text{ [эВ]}. \quad (8)$$

Здесь  $r_0 = 1$ , а  $r$  измеряется в нм. Задавшись расстоянием от электрона до молекулы фуллерена в 0,26 нм, что соответствует максимальному сечению прилипания электрона к  $C_{60}$  (см. рис. 1,а), получаем  $e\varphi(r_{ind}=0,26) \approx 14$  эВ. При таких энергиях длина волны де Бройля (0,33 нм) сравнима с радиусом молекулы фуллерена. Дальнейшее ускорение налетающего на фуллерен электрона, из-за поляризации  $C_{60}$ , происходит уже на нескольких ионах углерода (см. п. 2), что и позволяет электрону проникать во внутреннюю полость фуллерена. С другой стороны, если энергия налетающего электрона больше характерной энергии поляризации ( $e\varphi_{ind} \sim 14$  эВ), то инерционность электрона с такой кинетической энергией уже может противодействовать поляризационным силам. Это должно приводить к существенному уменьшению характерного времени жизни эндоиона фуллерена в зависимости от энергии эндоэлектрона по мере увеличения его энергии в области 14 эВ. Такая закономерность действительно наблюдается в экспериментах [5–7] (рис. 1). Экспериментальные наблюдения [5–7] позволяют сделать вывод, что  $e\varphi_{ind}$  для  $C_{60} \sim 12$  эВ.

**Модификация математической модели для учета поляризационных взаимодействий.** В соответствии с учетом поляризационных сил, возвращающих электрон обратно в  $C_{60}$ , можно выбрать характерный радиус стоячей волны для электрона не  $R = 0,36$ , а больший, например, на величину  $0,26$  нм, то есть  $R + r_{ind} = 0,62$  нм. В этом случае энергетический спектр, определяемый характерным размером поляризационного «колодца», согласно (4), следует модифицировать, отсюда:

$$E_{n=1-4} = 0,23; 2,1; 6,0; 11,8 \text{ эВ.} \quad (9)$$

При такой модификации наблюдается хорошее согласие (9) с экспериментальными данными, представленными на рис. 1, а, в. Если учесть, что  $r_{ind}$  для первого пика сечения несколько меньше, чем для второго, то модифицированное значение  $E_{n=1} \approx 0,28$  эВ. Следовательно, часть времени электрон находится внутри  $C_{60}$ , а меньшая часть времени (рис. 4) – в области действия сил поляризации, которые и определяют характерные размеры стоячей волны электрона и собственный энергетический спектр сферически-симметричного квантового резонатора для электрона ( $C_{60}$ ). Модифицированная модель, учитывающая поляризационное взаимодействие  $C_{60}$  с электроном с энергией  $E_n \sim 0,2$  эВ, представлена на рис. 5.

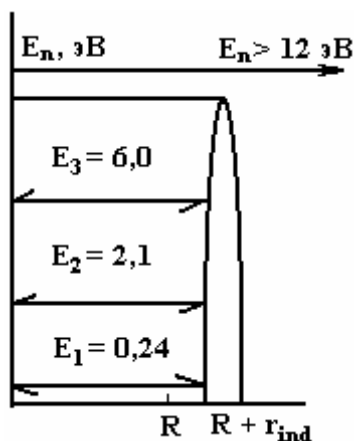


Рис. 5. Схема модифицированной модели эндоиона фуллерена, учитывающая влияние поляризационного барьера («зеркала») и соответствующее увеличение (на  $r_{ind}$ ) эффективного размера стоячей волны

По экспериментальным наблюдениям (рис. 1, а), энергия резонансного захвата не превышает 12 эВ, следовательно, согласно (9),  $k = 2n$  – главное число стабилизированных поляризационными силами эндоэлектронов в эндоионе  $e_k @ C_n$  не превышает 6. Согласно [11], анионы  $C_{60}^{-k}$  с  $k = 6$  в экспериментах не наблюдались.

Если создать искусственно условия, при которых фуллерены плотно покрывают наноматериал и электроны могут находиться на поверхности наноматериалов только внутри  $C_{60}$ , то в таких материалах могут формироваться слои объемного заряда, модифицирующие интегральные свойства композитных материалов, содержащих полые молекулы.

Электрические поля, возникающие вокруг эндоионов фуллеренов, могут в разы (в  $k$  раз) превышать электрические поля вокруг свободных электронов, а на поверхности модифицируемых эндоионами наноматериалов достигать и превышать кристаллические поля ( $10^{10}$  В/м) [4].

**Модификация свойств наноматериалов при формировании двойных слоев объемного заряда на их поверхности.** Молекулы фуллерена  $C_{60}$  в обычных условиях формируют кристалл – фуллерит [1]. Молекула фуллерена на протяжении последнего десятилетия является одним из наиболее часто исследуемых объектов самыми разнообразными спектральными методами [1, 2]. Напыление металлов и полупроводников кристаллами фуллеренов – фуллеритами – может приводить к ряду замечательных свойств, в частности к кулоновскому плавлению фуллеритов [3], кулоновскому упорочению нанообъектов при их сжатии, уменьшению теплопроводности, повышению термостойкости наноматериала [4] и др. Происходить это может из-за захвата существенной части электронов нанообъекта фуллеренами, выступающих ловушками для электронов с энергиями от 0,2 до 12 эВ. Потенциальная энергия кулоновского взаимодействия двух заряженных ионов в фуллерите с  $k = 1$  порядка 1,4 эВ ( $D \approx 1$  нм). Согласно результатам данной работы, 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  $k = 6$ .

**Расчеты для высших фуллеренов.** Если предположить, что  $r_{ind}$  слабо меняется для высших фуллеренов, а их геометрический эффективный радиус  $R$  пропорционален  $N^{1/2}$  ( $N$  – число атомов углерода в высшем фуллерене, при этом  $4\pi R^2 \sim N$ ), то расчеты собственных энергий квантовых резона-



торов представляют собой простую арифметическую задачу. Спектр (9) следует разделить на квадрат геометрического фактора для высшего фуллерена. Этот фактор  $\zeta_{70} = 1,03$  для  $C_{70}$ ;  $\zeta_{84} = 1,09$  и  $\zeta_{90} = 1,12$ .

Так, для  $C_{70}$  из (4) получаем

$$E_{n=1-4} = 0,21; 1,9; 5,6; 11,1 \text{ эВ.} \quad (10)$$

Приблизительно такое уменьшение величины резонансной энергии первого пика для  $C_{70}$  наблюдается в экспериментах согласно [5–7].

**Выводы.** В данной работе впервые аналитически исследованы квазистационарные взаимно резонансные процессы кумуляции и рассеивания (распыла) волн де Бройля электронов с **резонансной энергией активации** такого дуального пульсирующего кумулятивно-диссипативного процесса. Показано, что в результате локализации в области полой молекулы (квантового резонатора Гельмгольца) двух резонансных процессов – кумуляции и распыла (диссипации) – происходит формирование стационарной стоячей волны. Кумуляция электрона с энергией больше нуля к центру квантового резонатора (полый молекулы) происходит из-за фокусирующих поляризационных сил (поляризационных «зеркал», возвращающих электрон к центру молекулы). Поляризационные «зеркала» возникают, и их действие усиливается на определенном расстоянии от центра, только если электрон находится за оболочкой  $C_{60}$  (рис. 5). Поляризационные зеркала, возвращающие электрон к центру фуллерена, обусловлены генерацией синергетических (общих) электрических полей частью положительно заряженного каркаса фуллерена. При поляризации происходят смещение электронной оболочки и оголение положительного заряда ядер атомов углерода. В результате поляризации часть отрицательного заряда оболочки перемещается в дальнюю область от вышедшего из полости электрона. По мере удаления электрона от центра поляризующейся молекулы его энергия уменьшается в результате действия поля диполя  $C_{60}$ , а потенциальная энергия электронной оболочки  $C_{60}$  увеличивается. При этом кинетическая энергия электрона передается в энергию электронной оболочки  $C_{60}$ . Распыл эндоэлектронов от центра  $C_{60}$  обусловлен их инерционностью (импульсом или полной кинетической энергией  $E_n$ , отличной от нуля). Эндоэлектроны в эндоионах ( $e_k@C_{60}$ ) имеют положительную полную энергию  $E_n$ , но из-за поляризационных сил, действующих на них со стороны поляризующейся молекулы, локализуются (постоянно кумулируют) к центру этой полой сферически-симметричной молекулы (например,  $C_{60}$ ).

Проведенное сравнение аналитически (см. (9)) и экспериментально установленных величин резонансных энергий прилипания к  $C_{60}$  [6] показало хорошее совпадение. Так для первых двух резонансов (рис. 1,а) совпадение не превышает погрешностей в экспериментах [6] ( $\approx 10\%$ ). Проведенное исследование доказало важность не только поляризации полой молекулы в стабилизации эндоиона фуллерена с эндоэлектронами с энергией активации от 0,2 до 12 эВ, но и значимость резонанса (совпадения) энергии активации электрона и собственной энергии самоорганизующегося квантового резонатора Гельмгольца  $e_k@C_{60}$ , формирующегося из  $C_{60}$  в присутствии электрона с резонансной энергией активации.

Хорошим совпадением экспериментально полученных резонансов (рис. 1,а) и аналитически вычисленных собственных значений энергий квантовых резонаторов по предложенной автором модели (1)–(4) доказана возможность формирования отрицательно заряженных эндоионов фуллеренов  $e_k@C_{60}$  с захваченными электронами во внутреннюю полость (эндоэлектроны) с резонансными значениями энергии активации.

Долго живущие из-за резонансного поляризационного взаимодействия с  $C_{60}$  эндоэлектроны с резонансной энергией активации в  $e_k@C_{60}$  не вступают в химические связи с атомами углерода. Поэтому ожидать в экспериментах модификацию связей и спектров молекулы  $C_{60}$  в  $e_k@C_{60}$  даже на уровне  $5\text{--}6 \text{ см}^{-1}$  на электрон, как в случае интеркалированных фуллеридов [8–10], по-видимому, не приходится, но представляется возможным исследовать резонансное поглощение в области энергий  $\Delta E = E_i - E_{i-1}$ , где  $i = 2$  или  $3$  (рис. 5).

В качестве доказательства явления кумуляции электронов в  $e_k@C_{60}$  в данной работе аналитически решено стационарное уравнение Шреденгера (однородное уравнение Гельмгольца) (1) 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. (3) и рис. 5). Аналитически вычислены не только собственные (резонансные) значения энергии (9), но и соответствующие им профили собственных  $\psi$ -функций, определяющих вероятность нахождения электрона в полости молекулы (3). В соответствии с этим для сферически-симметричного квантового резонатора аналитически вычислена: вероятность нахождения электрона с резонансной энергией активации в полости полой молекулы (рис. 4). Оказывается, что, несмотря на

подавляющую вероятность ( $\approx 70\%$ ) нахождения электрона внутри молекулы фуллерена (рис. 4), эффективный радиус эндоиона из-за специфики зависимости сил поляризации от расстояния до поляризующейся молекулы превышает характерный размер молекулы на величину  $r_{\text{ind}}$ . Относительная величина  $\zeta = (R + r_{\text{ind}})/R$  – масштабная поправка на поляризационное взаимодействие (или просто масштабная поправка в терминологии [12]), как следует из сравнения аналитической модели и экспериментов [6] (рис. 1,а), растет от  $\zeta = 1,56$  до  $\zeta = 1,71$  с увеличением энергии налетающего электрона с 0,24 до 2,07 эВ. Соответственно  $r_{\text{ind}}$  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  $C_{60}$  ( $r_{\text{ind}}$ ) (или масштабная поправка в терминологии [12]) существенно зависит от энергии налетающего электрона (если величины максимумов в сечениях прилипания в [6] измерены с точностью  $\approx 10\%$ ). При энергиях электронов более 8 эВ сечение прилипания резко падает с увеличением энергии активации (рис. 1) [5–7]. 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) с экспериментально установленными резонансными энергиями активации, будет  $\approx 90\%$  (рис. 1,а).

Таким образом, в данной работе предложены реальный **физический механизм резонансного захвата электрона поляризующимися полыми молекулами** и его простая аналитическая модель, позволившая установить спектр энергии активации электронов и собственный спектр квантового резонатора  $e_{1-3}@C_{60}$  (см. (9)), согласующийся с экспериментально наблюдаемыми резонансами в сечениях прилипания электронов к  $C_{60}$  [6] с точностью не хуже  $\pm 10\%$  (по  $E_{1 и 2}$ ). Предложенная модель позволяет проводить верификацию экспериментальных результатов, полученных в [5–7], и уточнять масштабную поправку на поляризационное взаимодействие. В работе доказана не только важность поляризации полых молекул в стабилизации эндоиона фуллерена с эндоэлектронами с энергией от 0,24 до 12 эВ, но и значимость резонансного совпадения собственных энергий квантового резонатора – фуллерена с кинетической энергией электрона. Кинетическая энергия электрона выступает в качестве энергии активации пульсирующего резонансного процесса (захвата внутреннего «солитона»), формируемого резонансным поляризационным барьером (кулоновским «зеркалом»).

Эффект резонансного взаимодействия полых молекул с электронами с энергиями активации от 0,24 до 12 эВ определяется:

- 1) поляризационным взаимодействием (поляризационным кулоновским «зеркалом», фокусирующим электроны внутрь полости);
- 2) геометрией полых молекул фуллерена и
- 3) энергетическим резонансом (совпадением собственной энергии самого квантового резонатора с энергией активации электронов).

Из сравнения экспериментальных наблюдений за сечением резонансного прилипания [5–7] и аналитических расчетов энергетического спектра (см. (9)) обосновывается возможность формирования и продолжительного существования эндоионов (или эндоэлектронов) фуллерена  $e_k@C_{60}$  с  $n = 3$  или  $k = 6$  (согласно принципу Паули).

Эффект кумуляции электронов в полые молекулы (ловушки для электронов) может быть применен для управления в полупроводниках (концентрацией носителей заряда, их термическими, электрическими свойствами) и упрочнения материалов со свободными электронами. Свойство фуллеренов ловить электроны и формировать из эндоэлектронов эндоионы фуллеренов открывает возможность модифицировать наноматериалы, применяя кулоновские силы и локализованные в пространстве синергетические (внутренние, общие) электрические поля [3, 4]. Эта фемтотехнология микромира, обоснованная Резерфордом, обнаружившим существенное разделение заряда в атоме, как доказывает автор в своих работах [3, 4], начинает существенно проявляться уже в наномире из-за квантовых свойств электрона. Квантовые свойства поляризующихся резонаторов (проявляющиеся в зависимости сечения прилипания от энергии электронов), самосогласованные с резонансной энергией активации электронов, могут обуславливать резонансный (колебательный) характер изменения макропараметров нанокмозитов в зависимости от объемной концентрации квантовых модификаторов (например,  $C_{60}$ ).

Нами на примере  $C_{60}$  исследована кумуляция волн де Бройля (и  $\psi$ -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 как в случае нанотрубок, так и в случае других молекул 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 поляризующихся атомов с последующим формированием эндоэдральных структур – фуллеренов и нанотрубок, внутри которых заключены один или несколько электронов и атомов. Полученные результаты можно применить для описания поляризационных процессов между электронами с резонансной энергией активации и любыми сложными поляризующимися молекулами.

В соответствии с имеющимися экспериментами [3-5], проведенными аналитическими расчетами и их отличным совпадением с этими экспериментами, при учете поляризационного взаимодействия, в данной работе классифицированы квантовые точки, линии (провода) 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  $E_n < 0$  (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  $E_n > 0$  (IQ-частицы) в области поляризующегося квантового «ящика» (рис. 1). IQ-частицы кумулируют полную энергию электрона, приходящего из бесконечности, в области квантового «ящика». В отличие от них, FQ-частицы формируются при кумуляции электронов и сбросе части полной энергии электрона (диссипации энергии в окружающее пространство) в виде электромагнитного излучения.

Рассмотренные свойства, обусловленные формированием заряженных эндоэдральных структур и заряженных бислоев из таких структур, в частности из отрицательных ионов  $e_k @ C_n$ , на поверхности положительно заряжающихся наноматериалов представляют, по мнению автора, как научный, так и практический интерес и требуют дальнейших теоретических и подробных экспериментальных исследований.

**Заключение.** Опираясь на многочисленные эксперименты (см., например, [5–7]) и ссылки в этих работах, автор, на примере резонансного захвата электрона квантовым резонатором –  $C_{60}$ , доказал, что и в микромире происходит самоорганизация кумулятивно-диссипативных структур, открытых и исследованных в мезомире в [20]. Кумулятивные структуры, исследуемые нами, в отличие от диффузионных структур, открытых Тьюрингом, формируются в результате схлопывания к центру конвективных потоков [20], а не только на потоках диффузионных, как в [21]. В кумулятивно-диссипативных конвективных структурах возможны самокумуляция массы, энергии, импульса, заряда и электрического поля, обусловленные кулоновскими (поляризационными) силами. Эта идея в общем виде сформулирована автором в [20] и детализирована в данной работе с учетом важности квантовых свойств электронов и квантовых свойств резонатора  $C_{60}$ . Следовательно, в данной работе очередной раз доказана возможность самофокусировки (кумуляции) материи, обусловленная не силами гравитации, а электрическими силами, которые в  $10^{40}$  сильнее гравитационных (и в  $v/c$  раз магнитных). На такую мощную кулоновскую кумуляцию энергомассовоимпульсных потоков не рассчитывал в [22] Е.И. Забабахин, один из создателей самой мощной бомбы.

*Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования и науки РФ, государственный контракт № 02.513.12.3061 и РФФИ (проект № 09-08-13682-офи\_ц).*

## ЛИТЕРАТУРА

1. Сидоров Л.Н., Юровская М.А. и др. Фуллерены. Учебное пособие для вузов. М.: Изд-во. Экзамен, 2005. 688 с.
2. Елецкий А.В. Эндоэдральные структуры // УФН. 2000. 170. № 2. С. 113.
3. Высикайло Ф.И. Формирование иона фуллерена и кулоновское плавление фуллеритов / Тез. докл. науч.-практич. конференции «Нанотехнологии производству-2009», 1–3 декабря 2009. Фрязино, С. 18–19.
4. Высикайло Ф.И. Физические принципы упрочнения материалов слоями объемного заряда // Электронная обработка материалов. 2010. № 4. С. 4–12.
5. 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. С. 207–211.
6. Jaffke T., Illenbergen E., Lezius M., Matejčík S., Smith D. and 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. С. 213.

7. Huang J., Carman H.S. and Compton R.N. Low-Energy electron attachment to C<sub>60</sub> // J. Phys. Chem. 1995. 99. С. 1719.
8. 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. 1992. **B. 45**, 1955.
9. Denisov V.N., Mavrin B.N. et al. Raman Scattering and Lattice Dynamics of Fullerenes M<sub>x</sub>C<sub>60</sub> // Optics and Spectroscopy 1994. Vol. **76**. № 2. С. 242.
10. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. Academic Press. London. 1995.
11. Reed C.A. and Dolskar R.D. Discrete Fullerene Anions and Fullerenium Cations // Chem. Rev. Vol. 2000. **100**. С. 1075–1120.
12. Нафикова Е.П., Асфандиаров Н.Л., Фокин А.И., Ломакин Г.С. Применение модели объединенного атома для оценки времени жизни отрицательных молекулярных ионов относительно автоотщепления электрона // ЖЭТФ. 2002. **122**. № 4(10). С. 700–706.
13. Белов В.В., Доброхотов С.Ю., Маслов В.П., Тудоровский Т.Я. Обобщенный адиабатический принцип для описания динамики электрона в искривленных наноструктурах // УФН. 2005. **175**. № 9. С.1004.
14. Маслов В.П. Асимптотики собственных функций уравнения  $\Delta u + k^2 u = 0$  с краевыми условиями на эквидистантных кривых и рассеяние электромагнитных волн в волноводах // ДАН СССР. 1958. **123**. С. 631.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учеб. пособие. В 10-ти томах Т.3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1974. 752 с.
16. Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 576 с.
17. Yang S., Yoon M. et al. Electron transfer and localization in endohedral metallofullerenes: Ab initio density functional theory calculations // Phys. Rev. 2008. **B. 78**. С. 115435.
18. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в атомную физику. М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1969. 303 с.
19. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учеб. пособие. В 10-ти томах Т. 2. Теория поля. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 536 с.
20. Высокыйло Ф.И. Кумуляция электрического поля в диссипативных структурах в газоразрядной плазме // ЖЭТФ. 2004. **125**. № 5. С. 1071–1081.
21. Turing A.M. The chemical basis of the morphogenesis // Proc. Roy. Soc. B. 1952. V. 273. P. 37–71.
22. Забабахин Е.И., Забабахин И.Е. Явления неограниченной кумуляции. М.: Наука, 1988. С. 171.

Поступила 21.07.10

### Summary

The cumulation of de Broglie waves of electrons in the hollow molecules (for example, C<sub>60</sub>) was investigated. The existence of negatively charged endo-ions of fullerenes with trapped electrons in the inner cavity (endo-electrons) is proved. The stationary equation Schrödinger (Helmholtz) for hollow polarized molecules is solved analytically. An endo-electron has a positive total energy, but because of the polarization forces is localized (constantly cumulating) in the center of the hollow spherically symmetric molecule (C<sub>60</sub>). Analytically calculated own  $\psi$ -function and own energy, determine the probability of finding an electron in a cavity of a hollow molecule. Proper energy of a quantum cavity (C<sub>60</sub>) is compared with experimental studies of cross sections of electron attachment to C<sub>60</sub> dependencies on electron energy. The importance of the polarization hollow molecules in the stabilization of the fullerene endo-ions with endo-electrons (with energies from 0.2 to 12 eV) is proved. The effect of the cumulation of electrons in the hollow of the molecule (the trap for electrons) can be used to control the concentration of charge carriers, their thermal, electrical properties of semiconductors and hardening of materials with free electrons. Quantum properties of polarized cavities could cause a variation of parameters of nanocomposites with the concentration of quantum modifiers (C<sub>60</sub>).