

КУМУЛЯТИВНАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА (ККМ). Часть I. ПРЕДПОСЫЛКИ И ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ОСНОВЫ ККМ

Ф.И. Высикайло

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

Сформулированы основы кумулятивной квантовой механики (**ККМ**), позволяющей описывать резонансные \cos -волны с неограниченной (при $k \neq 0$) в центре резонатора ψ_n -функцией электрона ($\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r^k$) в полых квантовых резонаторах с любым типом симметрии (плоскостной – $k = 0$, сферической – $k = 1$ и цилиндрической – $k = 0,5$). Нерегулярные в центре резонатора \cos -решения регулируются в центре резонатора соответствующим типом симметрии нормированным геометрическим коэффициентом, равным $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$, при $k \neq 0$ (при $k = 0$, $\chi=1$). Стратификация вероятности нахождения частицы в объёме квантового резонатора аналогично определяется энергией частицы или соответствующим полным набором квадратов квантовых чисел $((n-1/2)^2$ для \cos -волн и n^2 для \sin -волн) для любого типа симметрии резонатора.

В рамках **ККМ** предложена аналитическая модель поляризационных резонансных захватов электронов (динамической локализации из-за самоформирования потенциального барьера, кумулирующего этот электрон внутрь молекулы). При поляризационном захвате аллотропными полыми формами углерода: фуллеренами и нанотрубками – энергия электронов $E_n > 0$. Задача о поляризационном эффекте Высикайло первого типа (или задача о *поляризационной кумуляции* волн де Бройля электронов с характерным размером ~ 1 нм) сведена к задаче Г.А. Гамова: «квантовая частица в ящике с потенциальным барьером на его границе». 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 поляризующейся молекулы. **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.

В рамках **ККМ** аналитически вычислены собственные квантовые пары: $\psi_n(r)$ -функции, соответственно стратифицированные профили вероятности нахождения частицы в полости резонатора – $W_n(r)$, и $E_n > 0$ – собственные энергии электронов, локализованных в квантовом резонаторе (C_{60} и 70 и др.) силами поляризации. Доказано, что наряду с классическим спектром энергий для асимметричных ψ_n -функций (\sin -волн) с $E_n \sim n^2$ для полых квантовых резонаторов существуют и реализуются в экспериментах квантовые резонансы для симметричных ψ_n -функций (\cos -волн) с $E_n \sim (n-1/2)^2$.

УДК 537.86

ВВЕДЕНИЕ

В полупроводниковых технологиях и технологиях наноматериалов есть ряд теоретических задач, связанных с аналитическим описанием и численным моделированием процессов пространственной неограниченной кумуляции ψ_n -функции электронов в фокусах сферически- и цилиндрически-симметричных квантовых резонаторов (точек, линий и ям) для этих частиц. Эти явления аналогичны явлениям в обычных акустических резонаторах (см. рис. 1) и резонаторах для накопления электромагнитных волн (лазерах, волноводах, световодах и т.д.).

Обычно стационарные процессы кумуляции (фокусировки) всегда дополняются (уравновешиваются) или сопровождаются процессами диссипации (разбрасывания, диффузии, рассеивания). Например, после прохождения кумулирующего потока электронов плазменного фокуса или точки либрации (кумуляции) Высикайло-Эйлера происходит его распыл (диссипация) [1]. Так формируются страты [1]. Кумуляция или фокусировка электромагнитных волн и, в частности, солнечного света обычными стеклянными линзами и сферическими зеркалами хорошо известное сферически-симметричное кумулятивное явление, которое можно описать в рамках геометрической или волновой оптики. Тем не менее, как правило, процессы диссипации и процессы кумуляции исследуются отдельно различными школами.

Процессы *диффузии* исследовались Колмогоровым с соавторами (1937), Тьюрингом (1952), Велиховым и Дыхне (1968), Пригожиным с соавторами, Курдюмовым с соавторами и др. В

результате их исследований были открыты и исследованы диффузионные волны, распространяющиеся в диссипативной среде со скоростью $V \approx 2(D\nu)^{1/2}$ (здесь D – эффективный коэффициент диффузии вещества, размножающегося с частотой – ν), и *диффузионные* 2D-структуры Тьюринга, обусловленные различными частотами реакций и диффузий компонент, взаимодействующих в диссипативных средах. Диффузионные структуры Пригожиным были названы *диссипативными структурами*. Регулярные системы из диссипативных диффузионных структур можно назвать диффузионными диссипативными кристаллами [2].

Кумулятивные *конвективные* процессы изучались Кеплером (1621), Ньютоном (1687), Безантом (Besant, 1859), Рэлеем (1917), Забабахиним (1988), Рабиновичем (1999), Маргулисом (2000), Нигматулиным (2002), Высикайло (2004). В результате этих исследований были изучены такие явления, как неограниченная и ограниченная кумуляции, сонолюминесценция, кавитация, открыты *конвективные кумулятивно-диссипативные структуры* и их регулярные системы – кумулятивно-диссипативные кристаллы. В этих кумулятивно-диссипативных структурах ограниченные квазистационарные *конвективные* процессы кумуляции уравниваются диссипативными процессами, например диффузией [2].

Оказывается, и в наном мире возможно формирование *метастабильных (частично открытых) кумулятивно-диссипативных квазистационарных конвективных структур*, обусловленных квантовыми эффектами и отражением диссипирующих конвективных потоков электронов обратно к центру поляризованными сферически- или цилиндрически-симметричными полыми «зеркалами» (потенциалами) [3]. Эти структуры, например метастабильные эндоанионы с эндоэлектронами внутри, формируются в результате поляризационного захвата (кумуляции к центру – фокусу или фокусной оси) электронов полыми молекулами фуллеренов или поляризующимися нанотрубками [3] (рис. 2). Во внутреннюю полость супрамолекул фокусировка электрона происходит в результате действия на него сил поляризации (кулоновских полей от разноудалённых разноимённо заряженных поверхностей им поляризующейся молекулы). В данной работе в части I проведено подробное историческое и аналитическое исследование *неограниченной* кумуляции ψ_n -функции электронов в *квантовых сферически- (0D-точках) и цилиндрически-симметричных (1D-проводах) резонаторах*. В результате проведенных аналитических исследований конвективных кумулятивных динамических процессов внутри квантовых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов и сравнения аналитических результатов с результатами имеющихся экспериментов автором четко сформулированы основы *кумулятивной квантовой механики (ККМ)* и выполнена классификация квантовых резонаторов и соответствующих им *квантовых точек, проволок и ям* при любой (плоскостной [4], цилиндрической [3] и сферической [3]) симметрии с локализованными в них электронами с ограниченными и неограниченными ψ_n -функциями и собственным энергетическим спектром $E_n > 0$ и $E_n < 0$. (Электрон с энергией больше нуля локализуется в области полой молекулы поляризационным барьером [3].) В качестве иллюстрации в части II данной работы ККМ применена для аналитического описания *квантово-размерного эффекта Высикайло I типа*, исследованного в [3] и обусловленного поляризационным захватом электронов во внутреннюю полость аллотропных полых форм углерода: фуллеренов и нанотрубок [3]. ККМ в данной работе в части II применена для аналитического описания концентрационно-квантово-размерного эффекта Высикайло II типа, а также для аналитического выявления и исследования параметров, управляющих макросвойствами наноструктурированных материалов. Аналитические расчёты в части II детально сравниваются с имеющимися в литературе экспериментальными наблюдениями и специально организованными экспериментальными исследованиями в ФГБНУ «ТИСНУМ» г. Троицк.

Для световых волновых явлений при плоскостной симметрии известны два ярких явления – это дифракция (соответственно интерференция) Френеля и дифракция (интерференция) Фраунгофера. Обобщенные автором интерференции Френеля и Фраунгофера волн де Бройля электронов с $E_n > 0$ кумулирующих к центру квантовых резонаторов для этих волн исследуются в данной работе в части I в рамках простой модели – «квантовая частица в ящике, цилиндре или шаре». В результате регуляризации неограниченных решений для трёх типов симметрии (плоскостная – $k = 0$, сферическая – $k = 1$ и цилиндрическая – $k = 0,5$) получено общее выражение для решений (E_n , $\psi_n(r)$, $W_n(r)$ – плотность вероятности нахождения частицы в слое dr) и вычислены нормировочные коэффициенты кумуляции ψ_n -функций – $A_n = B_n$ для соответствующих $\psi_n(r)$ в зависимости от параметра k , определяемого типом симметрии резонатора (ч. I). Простая модель после ряда упрощений, применённая мною для описания квантовых резонансов при захвате электрона, свелась к хорошо известной модели Г.А. Гамова, предложенной им для описания проникновения α -частицы через потенциальный барьер атомного ядра. Модель Гамова применялась для аналитического

вычисления вероятности распада радиоактивных ядер, наблюдаемого в экспериментах, и для выяснения возможности распада атомных ядер с испусканием одного или двух протонов (В.И. Гольданский, 1960, 1965). В историческом плане значение теории особенно велико потому, что теория Гамова была первым успешным применением квантовой механики к атомному ядру, то есть к объектам фемтомира (с размерами $\sim 10^{-15}$ м). По-видимому, в [3] впервые модель, аналогичная модели Гамова, была использована для описания процессов поляризационного захвата электронов полыми поляризующимися молекулами углерода в наномире (с размерами $\sim 10^{-9}$ м). Предложенная автором регуляризация неограниченных решений или ККМ может быть применена для описания кумулятивных явлений в атомных ядрах и явлений кумуляции в классической физике.

ИСТОРИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ, ПАРАДОКСЫ И ОСНОВЫ КУМУЛЯТИВНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Квантовые резонаторы для электронов в случае плоскостной симметрии изучены как экспериментально, так и теоретически [4]. Такие резонаторы называются квантовыми 0D-точками (ящиками), 1D-проводами и 2D-ямами или 2D-ваннами (при сложном профилировании потенциала ямы). Вероятность нахождения электронов максимальна в центре плоскостных резонаторов в случае симметричных собственных ψ_n -функций электронов относительно центра резонатора (cos-волн) и равна нулю на их границах (рис. 3). Для асимметричных ψ_n -функций электронов (или для sin-волн) в центре резонатора и на его границах $\psi_n=0$. Таким образом, в плоскостных резонаторах, в области их центра, происходит **ограниченная кумуляция** собственных ψ_n -функций электронов только для cos-волн (см. рис. 2 на с. 110 в [4] и рис. 3). В результате самоорганизации волны реализоваться могут два типа волн – это cos-волны (основной тон) и sin-волны (обертоны) с соответствующими энергетическими спектрами $E_{n\cos} \sim (n-1/2)^2$ и $E_{n\sin} \sim n^2$.

Общее понятие о кумуляции. В геометрической оптике поток энергии сохраняется, и по мере схождения лучей к фокусу линзы его интенсивность растет обратно пропорционально квадрату расстояния до фокуса – $1/r^2$ – в случае сферической симметрии и $1/r$ – в случае цилиндрической симметрии (обобщенная теорема Гаусса о сохранении потока). В рамках волновой оптики к явлению геометрической кумуляции при сферической или цилиндрической симметрии добавляются такие явления, как интерференция и дифракция Френеля (узел волны в центре резонатора) и интерференция и дифракция Фраунгофера (пучность в центре резонатора).

Определение кумуляции Я.Б. Зельдовича, приведенное в [5]: “Кумуляция, то есть концентрация в малом объеме (ΔV) силы, энергии или другой физической величины (W), представляет собой *важнейшее явление природы*”, – полно определяет явления фокусировки и самофокусировки энергомассовоимпульсных потоков в любых, в том числе и *экстремальных*, природных явлениях в любых средах. Кумуляция называется неограниченной, если величина $W \rightarrow \infty$ при $\Delta V \rightarrow 0$. Кумуляция – *важнейшее явление в природе*, тем не менее до сих пор игнорируется в рамках классической квантовой механики, в частности требованием ограниченности всюду ψ_n -функции локализованной частицы. При кумуляции частиц квантовыми сферически-симметричными или цилиндрически-симметричными «зеркалами» (рис. 3) ψ_n -функции так же должны неограниченно кумулировать (расти) к центру фокусировки, как и плотность интенсивности электромагнитного луча, сходящегося к фокусу, или плотность энергии стоячих cos-волн в сферически- или цилиндрически-симметричных акустических резонаторах (рис. 1). В противном случае для кумулятивных явлений с частицами в квантовой механике должен нарушаться принцип де Бройля.

Эффективная кумуляция ψ_n -функций частиц (к центру – фокусу) осуществляется сферически-симметричными $\psi_n \sim 1/r$. Казалось бы, менее эффективна кумуляция (к оси) при цилиндрической симметрии квантового резонатора, так как $\psi_n \sim 1/r^{1/2}$. Не следует забывать о поляризационных силах, возникающих вдоль оси цилиндрической структуры (по z и направленных по r). Эти 2D-эффекты мы не будем рассматривать. Направим читателя к [6] и [4] (случай плоскостной симметрии). Сферически-симметричные квантовые резонаторы называют *сферически-симметричными 0D-квантовыми точками* (см., например, [3, 7, 8]). (Эта классификация уместна и в рамках ККМ. Она полностью соответствует классификации квантовых точек в виде ящика при плоскостной симметрии [4].) Аналогично цилиндрически-симметричные квантовые резонаторы называют 1D-проводами (квантовыми линиями и т.д.) [3], что соответствует названиям при плоскостной симметрии [4]. К цилиндрически-симметричным квантовым проводам можно отнести поляризующиеся углеродные нанотрубки постоянного диаметра [3].

Известны работы по исследованию вероятности нахождения электрона в сферически-симметричных квантовых точках – 0D-резонаторах, например [7, 8]. Для этих резонаторов авторы

выбирают граничные условия как на границе резонатора [8], так и дополнительное граничное условие в его центре [7]. Такая постановка граничного условия в центре резонатора может осуществляться непосредственно требованием равенства нулю ψ_n -функции или требованием регулярности ψ_n -функции в нуле (в центре резонатора.) (Несмотря на то что граничные условия потому и называются граничными, что выбираются только на границе резонатора, а в центре решение самоорганизуется в результате резонанса.) Дополнительное требование о регулярности решений приводит к: 1) исключению явления кумуляции и 2) исключению ряда решений в случае сферической и цилиндрической симметрии из полного спектра решений, имеющих в случае плоскостной симметрии. В итоге таких требований явления с плоскостной симметрией становятся более богатыми, чем явления со сферической и цилиндрической симметрией, хотя физических оснований для этого нет. В формальном включении нерегулярных в нуле решений в случае сферической симметрии особенно преуспели бразильские физики [8]. Они честно на компьютере, но формально по сути работы посчитали вероятность ($W_n = 4\pi r^2 |\psi_n|^2$) нахождения электрона в слое dr внутри сферически-симметричного квантового 0D-резонатора с бесконечным потенциалом только на его внешней границе (сфере) и опубликовали эти модельные численные расчёты профилей функций Бесселя и соответствующих им $W_n(r)$ в [8]. Решения, приведенные в их работе по численному моделированию профилей $W_n(r)$ в колоде на границе с бесконечным потенциалом (согласно аналитическим решениям [9] $W_n \sim \sin^2(k_n r)$ и $W_n^* \sim \cos^2(k_n r)$), имеют как узлы в центре резонатора (sin-волны), так и пучности (cos-волны*), что полностью соответствует резонансным решениям, известным Гельмгольцу, для акустических сферических резонаторов с кумуляцией плотности энергии в центре таких резонаторов cos-волнами [9]. При этом авторы [8] не заметили (проигнорировали) проблему **неограниченного** роста собственных ψ_n -функций электронов – $\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$ в случае решений с пучностями в центре сферически-симметричного квантового 0D-резонатора (или сферически-симметричной квантовой точки). Решения $\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r$ в ряде работ по квантовым точкам [7] и в учебниках по атомной физике отбрасываются по причине нерегулярности собственных ψ_n -функций в центре сферического или цилиндрического резонатора (в нуле). Невнимание к этой проблеме в [8] обусловлено тем, что весовой коэффициент $4\pi r^2$ ограничил неограниченный рост $|\psi_n|^2 \sim \cos^2(k_n r)/r^2$ в области центра сферической квантовой точки, и поэтому проблема неограниченного роста $\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r$ к центру сферического резонатора авторами [8] была успешно проигнорирована (не замечена). Неограниченная кумуляция собственных ψ_n -функций в сферически-симметричных квантовых точках в [8] для cos-волн осталась без обсуждения. *Проблема неограниченной кумуляции собственных ψ_n -функций электронов для cos-волн в сферической квантовой 0D-точке до сих пор достойно не исследовалась научным сообществом, чтобы модифицировать постулат об ограниченности всюду любых собственных ψ_n -функций частиц в нано- и фемтомирах.*

Регуляризация (и соответствующая легализация) неограниченных в центре резонатора решений для cos-волн. Парадоксы при описании в рамках обычной квантовой механики заключаются в двух явных несостыковках. Первый парадокс состоит в том, что cos-волны (с симметричными относительно центра резонатора собственными ψ_n -функциями) в классической квантовой механике имеют право на существование только в случае плоскостной симметрии [4] (см. рис. 3 и 2 на с. 110 в [4]), и никто из исследователей против этого не возражает. (При этом не обсуждается, какова энергия электрона на бесконечности за реальным барьером, в [4].) Как показано в [3], при поляризационном захвате в резонаторе локализуются электроны с резонансной энергией $E_n > 0$, что является полной аналогией захвата акустической или электромагнитной волны, энергия у которой всегда больше нуля, поэтому все эти состояния являются метастабильными и после диссипации энергии остается пустой резонатор. Электроны в атомах имеют энергию меньше нуля, и эти волновые явления стационарные.

В случае *сферической* ($k = 1$) или *цилиндрической* ($k = 0,5$) симметрии, согласно постулату об ограниченности ψ_n -функций, собственные ψ_n -функции cos-волн с $\psi_{ncos} \sim \cos(k_n r)/r^k$ [9] отдельными исследователями считаются не имеющими места в реальной жизни [7], то есть при $k \neq 0$ часть решений запрещается этим, как считает автор, *ошибочным* постулатом, требующим регулярности ψ_{ncos} -функций в центре резонатора.

Решение этого парадокса следует искать в одновременном учёте энергетического спектра cos-волн и нормировочного коэффициента $2^k \pi^{1/2} r^k$, регуляризирующего ψ_{ncos} -функцию $\sim 2^k \pi^{1/2} r^k \cos(k_n r)/r^k = 2^k \pi^{1/2} \cos(k_n r)$ в центре резонатора с соответствующим типом симметрии. Действительно, ψ_{ncos} -функция во всех манипуляциях над ней используется одновременно с нормировочным коэффициентом, определяемым типом симметрии. И только при плоскостной симметрии ($k = 0$) коэффициент равен 1. При других типах симметрии этот коэффициент отличен от 1 и регуляризирует

ψ_{ncos} -функции. Случайно решение этого парадокса и было выполнено в [8] при расчёте возможных профилей вероятности нахождения электрона в сферически-симметричном квантовом резонаторе в зависимости от расстояния до центра резонатора для разных кинетических энергий. Поэтому в [8] приведены регулярные профили вероятности нахождения электронов в сферически-симметричных квантовых точках и для запрещённых обычной квантовой механикой квантовых состояний с собственными ψ_{ncos} -функциями.

При выборе другими авторами [7] дополнительного условия в центре резонатора ($\psi_n(0) = 0$ или требования регулярности в нуле ψ_n -функции) выбрасываются из рассмотрения все кумулятивные процессы к фокусу, то есть весь спектр решений с пучностями в центре резонатора (\cos -волны и их энергетические спектры) исключается и для сферически- и для цилиндрически-симметричных обычных и квантовых резонаторов (квантовых точек или проволок). И это происходит только на основании постулата об ограниченности всюду собственных ψ_n -функций для любых частиц, ошибочно действующего до сих пор в классической квантовой механике.

На основании этого постулата практически всюду в работах по квантовой механике авторы требуют регулярности в нуле собственной ψ_n -функции для всех частиц. Однако, как известно, физический смысл несёт не собственная ψ_n -функция, а вероятность нахождения частицы в объёме dV . В случаях сферической и цилиндрической симметрий квантовых точек в нуле возникает особенность для ψ_{ncos} -функции электрона, но, как указывалось, этой особенности нет для вероятности нахождения частицы в нуле, так как весовой коэффициент $4\pi r^2$ для случая сферической симметрии и весовой коэффициент $2\pi r$ в случае цилиндрической симметрии регулируют в нуле вероятность нахождения частицы с бесконечным значением $\psi_{\text{ncos}}(0) \sim \cos(kr)/r \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$. Физический смысл и соответственно требование к регулярности ψ_n -функции следует относить к нормированной на корень из весового коэффициента ψ_n -функции (для сферической симметрии $-r\psi_{\text{ncos}} \sim r\cos(k_n r)/r = \cos(k_n r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow 0$). В результате снятия требования регулярности собственных ψ_{ncos} -функций в нуле в сферически- и цилиндрически-симметричных случаях появляется целый класс резонансных решений с \cos -волнами, соответствующих решениям при плоскостной симметрии. Решения с \cos -волнами следует отбрасывать, если в центре ($r = 0$) существует реальный объект (например, атомное ядро), через который не может проникнуть электрон, и электрон, как \sin -волна де Бройля, отражается от этого объекта. Но отбрасывать \cos -волны в полых квантовых резонаторах из-за требования регулярности собственной ψ_n -функции в центре резонатора нет никаких физических оснований. Это доказывается в данной работе аналитически и в сравнении с экспериментами.

Второй парадокс заключается в том, что в рамках классической волновой механики (акустике и электродинамике) кумулятивные решения типа $\sim \cos(k_n r)/r^{k \neq 0}$ признаются со времён Гельмгольца [9] и исследуются при решении проблем солюминесценции и кавитации (рис. 1). Непризнание \cos -волн (или обобщённой автором интерференции Фраунгофера) для полых квантовых резонаторов для электронов со сферической и цилиндрической симметриями – это и есть ошибка, на которую автор обращает внимание научной общественности в данной работе. Такое непризнание эквивалентно непризнанию кумулятивных явлений в квантовой механике и ограничению действия гипотезы де Бройля в рамках квантовых явлений и исключению для сферически- и цилиндрически-симметричных квантовых 0D- и 1D-резонаторов **интерференции (и дифракции в центре резонатора) Высикайло-де Бройля-Фраунгофера** для волн де Бройля электронов и других частиц в соответствующих им квантовых резонаторах. И это в то время, как **интерференции (и дифракции в их центре) де Бройля-Френеля** для волн де Бройля электронов изучены как теоретически – математически, так и экспериментально. Эти явления давно изучены и для классических акустических и электромагнитных волн и их резонаторов как теоретически — математически [9], так и экспериментально. В части I мы решили парадоксы и проблемы, имеющиеся в **классической** квантовой механике по отношению к акустике и физике электромагнитных волн, где таких проблем уже давно нет. Решение этих парадоксов в части II будет доказано сравнением экспериментально измеренных резонансных энергий захвата электронов полыми молекулами C_{60} и 70 с аналитическими расчётами, проведенными в рамках ККМ. Следует отметить, что большое число парадоксов (несовпадения явлений с математическими моделями) порождается несвоевременным (поспешным) взятием математических пределов. Если пределы взяты в соответствии с физическими явлениями (в частности, с законами кумуляции), то парадоксы исчезают (решаются) сами собой (становятся очевидными), и появляются в ряде задач новые решения (\cos -волны).

Общие положения о граничных условиях. Граничные условия потому и называются граничными, что ставятся на границе, а не в центре резонатора. Если в центре резонатора расположен некий объект, например атомное ядро или иной непроницаемый шарик или точка, то на этом объекте,

действительно, следует ставить дополнительное граничное условие. Так, П. Дирак для описания поведения свободных электронов ввел δ -функцию и обосновал дополнительное граничное условие ($\psi_n(0) = 0$) для электронов, стабильных по отношению к их К-захвату атомным ядром. Но если резонатор пуст, то граничные условия следует ставить только на его границах [3, 9] и соответственно исследовать все возможные резонансы как для акустических и электромагнитных, так и для квантовых резонаторов [3, 9]. Поэтому для полых квантовых резонаторов следует исследовать и обобщённую интерференцию (дифракцию в центре резонатора) Френеля (\sin -волны), и обобщённую автором интерференцию (дифракцию в центре резонатора) Фраунгофера (\cos -волны) [3]. Еще раз отмечу, что *дополнительное условие о регулярности собственных ψ_n -функций в центре полого (абсолютно пустого) резонатора, по мнению автора, является ошибкой, приводящей к исключению ряда решений в случае полых квантовых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов.* Таких ошибок не делают исследователи в случае плоскостной симметрии [4]. А вот при сферической или цилиндрической симметрии из-за требования в классической квантовой механике об ограниченности ψ_n -функции (или регулярности собственных ψ_n -функций в центре резонатора) во всём пространстве приходится выбрасывать ряд решений, ответственных за неограниченную кумуляцию $\psi_{n\cos}$ -функций, тем самым нарушая постулат де Бройля об эквивалентности волновых явлений в классической физике и квантовой механике. Автор считает, что следует модифицировать требование об ограниченности собственной ψ_n -функции и тем самым сформулировать основы **кумулятивной квантовой механики.**

Отмеченные проблемы, парадоксы и их решения затрагивают основы описания баллистической проводимости нанотрубок, их теплопередачи и т.д. и являются очень важными 4D-проблемами нанотехнологий [10, 11]. Эти проблемы согласно принципу де Бройля должны решаться по аналогии с акустическими и электромагнитными явлениями [3]. Остановимся на принципе Луи де Бройля подробнее.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В 1924 г. французский физик Луи де Бройль (L. de Broglie) высказал гипотезу о том, что установленный ранее для фотонов корпускулярно-волновой дуализм (закрывающийся в том, что фотоны обладают и свойствами частиц – корпускул, и волновыми свойствами) присущ **поведению** всех частиц: электронов, протонов, атомов и т.д., причем количественные соотношения между волновыми и корпускулярными свойствами частиц те же, что и для фотонов. При этом если частица имеет импульс, абсолютное значение которого равно p , то с ней не только формально связана волна с длиной $\lambda = h/p$ и частотой $\nu = E/h$ (здесь $h = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка; E – кинетическая энергия частицы), но и весь спектр определенных волновых, в том числе и резонансных, **диссипативных и кумулятивных** явлений, аналогичных явлениям, наблюдаемым с акустическими и электромагнитными волнами в соответствующих им резонаторах (рис. 1, 2). *Это означает, что все уравнения, решения ($\psi_n(r,t)$ -функции, профили параметров в пространстве) и граничные условия должны быть аналогичными или совпадающими в безразмерном виде для аналогичных соответствующих волновых явлений как в классической, так и в квантовой механике.* Следовательно, аналогичные явления, в том числе и захвата и кумуляции энергии, массы, импульса в квантовой теории и обычной волновой механике, теории фокусировки и **метастабильной** локализации электромагнитных и звуковых волн, должны аналогично классифицироваться и соответственно определяться одной и той же системой уравнений, системой таких же (общих) граничных условий и системой безразмерных параметров, достигающих критических значений. *В этом и заключается принцип эквивалентности квантовых для частиц и классических акустических или электромагнитных волновых явлений, сформулированный Луи де Бройлем.* Справедливость гипотезы де Бройля доказана в многочисленных экспериментах и теориях. На этом основании принцип Луи де Бройля нами будет применён для описания поляризационного захвата электронов квантовыми резонаторами для волн де Бройля электронов – молекулами фуллеренов $C_{60, 70}$, нанотрубками и другими полыми поляризующимися молекулами.

Резонансы – стоячие волны в сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторах (рис. 1) изучены для акустических и электромагнитных волн. Профили их параметров описываются однородным 3D-уравнением Гельмгольца: $\Delta_3\psi + \lambda\psi = 0$. **В случае стоячих \sin -волн в центре резонатора находится узел волны, а в случае \cos -волны – пучность, что соответствует в центре резонатора дифракции Френеля или дифракции Фраунгофера соответственно при любом типе симметрии резонатора** (рис. 3). К трёхмерному уравнению Гельмгольца при $\lambda > 0$ приводит широкий класс задач, связанных с установившимися колебаниями (механическими,

акустическими, тепловыми, электромагнитными и др.). К уравнению Гельмгольца сводятся задачи о квантовых точках, линиях, ямах или колодцах в рамках плоскостной симметрии, если кулоновский потенциал можно представить в виде ступеньки [3, 4, 12, 13]. Сферическая (сферически-симметричные квантовые точки) и цилиндрическая симметрии квантовых резонаторов также привлекали внимание исследователей [3, 7, 8]. Поляризуемые структуры с такой симметрией уже открыты экспериментально. Это фуллерены и нанотрубки [10, 11, 14–16]. К уравнению Гельмгольца (1) сводится нестационарное уравнение Шредингера для квазистационарных задач в квантовых резонаторах (где $\lambda = E_n - \text{резонансная энергия частицы}$), если потенциалы $U(r)$ имеют вид ступенек [4] (с $E_n > 0 - \text{IQ}$ – резонанс или с $E < 0$ и $E_n - U > 0 - \text{FQ}$ – резонанс). Действительно, для грубого, но частого и достаточно точного моделирования явлений локализации электрона в том или ином резонаторе (в том числе и в атоме) в квантовой механике применяется приближение прямоугольной потенциальной ямы (или отражающего зеркала) [3, 4, 7, 8, 12, 13, 17–27].

Описание резонансных захватов электронов квантовыми резонаторами для волн де Бройля при временах существования резонансов $\tau \gg l/v$, где l – размер резонатора, v – средняя скорость частицы в резонаторе, осуществляется в общем случае в рамках стационарного уравнения Шредингера для собственных ψ_n -функций частицы (например, электрона с массой m) [3, 4, 7, 8, 12, 13, 17–27]:

$$\Delta\psi_n + \lambda\psi_n = 0, \Delta\psi_n + (2m/\hbar^2)(E_n - U)\psi_n = \Delta\psi_n + (2m/\hbar^2) E_n\psi_n = 0, \quad (1)$$

как и для атома [12, 13]. Итак, при $E - U = \text{const}$ или $U = 0$ приходим к однородному уравнению Гельмгольца (1), применяемому для описания акустических и электромагнитных волн, в соответствующих резонаторах ψ_n -функция описывает плотность вероятности нахождения захваченного электрона (квантовой частицы) в пространстве ящика (как для FQ-частиц, так и для IQ-частиц, см., например, [3] или даже [12], рис. 12).

Следует отметить, что для вычисления квазистационарных профилей параметров (собственных $\psi_n(r)$ -функций) переход от нестационарной задачи Шредингера к стационарной задаче Гельмгольца (1) в случае всех резонаторов и квантовых ящиков (пузырьках в жидкостях, атомах, полых поляризуемых молекул, атомных и молекулярных кластерах) обосновывается совершенно аналогично [3, 4, 7, 8, 12, 13, 17–27]. Общим условием такого перехода является малость характерных времен внутренних процессов переноса по сравнению с временем существования резонанса в резонаторе, т.е. добротность резонатора должна быть \gg , например, 10 (для полых молекул, атомов и кластеров эта величина может быть более 10^{14}). Эти предположения или условия, следующие из экспериментов по исследованию таких резонансных захватов электронов, позволяют рассчитать спектр резонансных энергий E_n и соответствующие им профили $\psi_n(r)$ -функций электронов для большого класса квазистационарных задач, в том числе и для метастабильных состояний, обусловленных захватом электронов поляризуемыми полыми формами молекул углерода, применяя простую модель Г.А. Гамова с потенциальным барьером.

Сферически- и цилиндрически-симметричные волновые явления в акустических и электромагнитных резонаторах описываются однородным уравнением Гельмгольца (1). Решения, удовлетворяющие уравнению (1) для всех типов симметрии, известны в случае первой краевой задачи [9] – это функции с моментом количества движения относительно центра резонатора $l = 0$:

$$\psi_n = (A_n \sin \mu_n r + B_n \cos \mu_n r)/r^k, \quad (2)$$

и ряд известных решений в виде произведения функций Бесселя и присоединённых функций Лежандра с $l \neq 0$. Далее мы опустим анализ решений с функциями Бесселя и Лежандра с $l \neq 0$ и ограничимся только анализом решений в виде (2). (Учтёшь решения с $l \neq 0$ не представляет труда [9]. Действительно, если $\mu_{l,n}R = \varphi_{l=0,n=1} = \pi$, то $\varphi_{l=1,0} \approx 4,49$; $\varphi_{l=2,0} \approx 5,76$; $\varphi_{l=0,2} = 2\pi$. Откуда для дискретного энергетического спектра с $l \neq 0$ получаем следующее уравнение: $(\mu_{l,n})^2 = (\varphi_{l,n}/\pi R)^2$.) Здесь $\lambda = \mu^2$, $k = 1$ для случая сферической и $k = 0,5$ для случая цилиндрической симметрии, для случая плоскостной симметрии $k = 0$ [3, 4, 7, 8, 12, 13, 17–27]. Sin-волны не фокусируют энергию к центру резонатора (в центре для таких волн формируется узел волны – обобщённая дифракция Френеля, рис. 3). Cos-волны (с пучностью в центре резонатора – обобщённая дифракция Фраунгофера, рис. 3) кумулируют плотность энергии звука или электромагнитной волны, захваченной резонатором к его центру как в случае сферически-, цилиндрически-, так и в случае плоско-симметричного акустического, электромагнитного и квантового резонаторов (см. выше и рис. 3). Явление кумуляции плотности энергии в центре сферически-симметричных резонаторов из-за кумуляции плотности энергии

сферически-симметричной \cos -волны (обобщенная интерференция Фраунгофера) используется для создания полости в жидкости при исследовании сонолюминесценции и кавитации (рис. 1). \sin -волна (обобщенная интерференция Френеля) не кумулирует энергию к центру, а значит, и не может формировать полость в жидкости в центре акустического резонатора. *Формировать полость в жидкости в центре сферически- или цилиндрически-симметричных резонаторов могут только \cos -волны, кумулирующие энергию к центру резонатора (рис. 1 и 3) (дифракция Фраунгофера акустических \cos -волн в центре резонатора, заполненного жидкостью, порождает пузырьёк или их систему).*

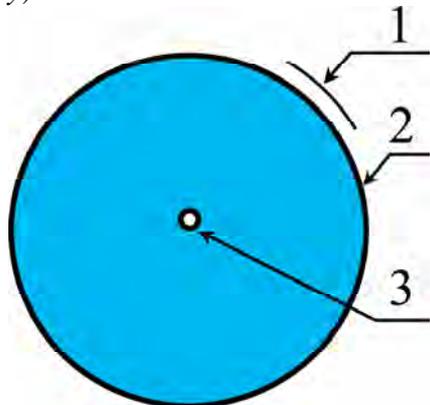


Рис. 1. Схема акустического резонатора для неограниченной кумуляции и накопления энергии колебаний жидкости, проявляющаяся в формировании полости в жидкости в центре резонатора. 1 – источник ультразвука, 2 – поверхность акустического сферически-симметричного резонатора; 3 – полость (пузырек) в жидкости, обусловленная кумуляцией энергии в центре резонатора

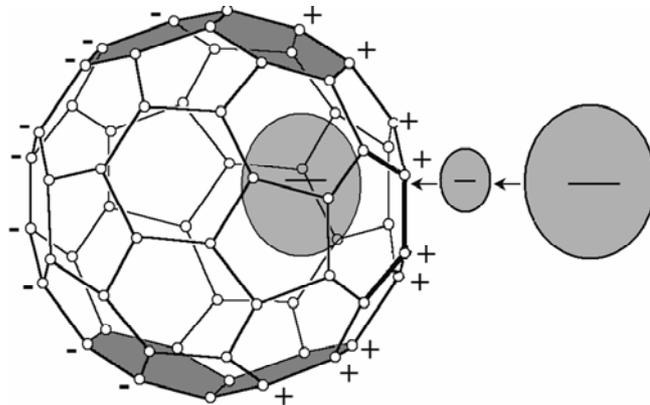


Рис. 2. Схема [3] кумулятивного сброса электрона с энергией от 0,24 до 12 эВ в полость молекулы C_{60} и резонансного образования эндоиона $e_k @ C_n$ (пульсирующего солитона в C_{60}). Приведено последовательное уменьшение длины волны де Бройля электрона, налетающего на поляризующуюся им же молекулу C_{60} . Радиус эндоиона (расположение отражающего «зеркала») $R_i = R_{C60} + r_{ind}$

Согласно принципу де Бройля в квантовых резонаторах для волн де Бройля электронов должны наблюдаться в том числе и такие явления, как обобщенная интерференция, соответствующая ей дифракция *де Бройля-Френеля* (дифракция Френеля – дифракция \sin -волн, обобщенная согласно принципу де Бройля на случай дифракции электронов в центре квантового резонатора), а также интерференция и дифракция *Высикайло-де Бройля-Фраунгофера* (дифракция Фраунгофера – дифракция \cos -волн, обобщенная мною согласно принципу де Бройля, на случай дифракции волн де Бройля электронов в центре квантового резонатора). При этом и та и другая интерференции в объеме и дифракции в центре резонатора обязательно должны иметь место при любой симметрии квантового полого резонатора для волн де Бройля электронов и описываться аналогично тому, как описываются эти типы дифракции в явлениях в акустике и в явлениях с электромагнитными волнами (в частности, с видимыми световыми волнами). В противном случае принцип де Бройля будет нарушаться для квантовых явлений в квантовых (сферически- или цилиндрически-симметричных) полых резонаторах для волн де Бройля электронов. Вот эти два типа интерференций в объеме резонатора (или дифракций в центре резонатора) при кумуляции (локализации) электрона в сферически- или цилиндрически-симметричные полые квантовые резонаторы для волн де Бройля электронов (рис. 2, 3) в части I будем подробно исследовать с помощью ККМ аналитически и сравнивать эти результаты с экспериментально измеренными в [14–16] резонансными сечениями захвата электронов (см. ч. II). В соответствии с гипотезой де Бройля и наблюдающимися явлениями кумуляции в акустических и электромагнитных резонаторах в данной работе автор подробно рассмотрит явления неограниченной кумуляции собственных ψ_n -функций (электронов) в рамках кумулятивной квантовой механики и тем самым расширит рамки классической квантовой теории (считающей необходимым введение условия ограниченности всюду в пространстве собственных ψ_n -функций электронов). Для этого в качестве доказательства явления кумуляции свободных электронов с полной энергией $E_n > 0$ (IQ-частиц) к центру полой молекулы поляризационными силами, действующими на электрон со стороны поляризующейся молекулы, аналитически будет решено стационарное уравнение Шредингера (Гельмгольца (1)) с учетом граничных условий, обусловленных кумулирующими свободный электрон

поляризационными силами. Кумуляция электрона к центру резонатора осуществляется внешним для полых поляризующихся молекул кулоновским потенциальным барьером.

Явления сферической и цилиндрической кумуляции частиц \cos -волнами (кумулятивная интерференция или дифракция электронов *Высикайло-де Бройля-Фраунгофера*) в рамках классической теоретической квантовой механики, требующей регулярности собственных ψ_n -функций в нуле, невозможны и, как отмечалось, не привлекали достойного внимания исследователей. В то время как интерференция *де Бройля-Френеля* волн де Бройля электронов уже исследовалась численно в [7] даже в магнитных полях. Экспериментальные исследования таких резонаторов и резонансов, по мнению автора, уже приводятся в ряде работ по резонансному захвату (интерференции с локализацией) электрона полый сферически-симметричной поляризующейся молекулой C_{60} или C_{70} [14–16]. При этом для объяснения явлений локализации (кумуляции к геометрическому центру) свободного ранее электрона на времена $\sim 0,1$ с, как считает автор, привлекаются неадекватные экспериментам аналитические и численные модели, в принципе, не учитывающие явления кумуляции электрона к центру квантового резонатора поляризационными силами, выступающими в роли сферически-симметричных квантовых «зеркал»-резонаторов с размерами несколько большими ($R+r_{ind}$), чем размеры полых наномолекул (с радиусом R) (см. рис. 2). Данная работа (см. ч. II) посвящена также классификации квантовых точек, линий и ям в зависимости от знака полной энергии захваченных в квантовый резонатор электронов.

SIN- И COS-ВОЛНЫ В РЕЗОНАТОРАХ. ОТРАЖАЮЩИЕ И ФОКУСИРУЮЩИЕ «ЗЕРКАЛА». ПРИМЕНЕНИЕ КУМУЛЯТИВНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Цилиндрически-симметричные явления отражения и соответствующая кумуляция энергии электромагнитных волн к центру наблюдаются в волноводах и гибких световодах. Хорошо изучены явления кумуляции акустических волн в специальных резонаторах – резонаторах Гельмгольца (рис. 1). Это явление в акустике давно применяется в замках (гнездах феодалов), костелах (например, для организации баллистической передачи звуковых волн, для подслушивания и улучшения акустических свойств концертных залов), в печных трубах (печники вставляют бутылку – воющий резонатор Гельмгольца в дымоход для наказания жадных хозяев, мало им заплативших), дольменах (построенных до нашей эры), в горах, скрипках, органах и др. (Есть мнение, что структура Стоунхенджа выполняла роль акустического резонатора для боя барабанов.) Квантовые резонаторы для электромагнитных волн называются лазерами. Это квантовые ящики для накопления (кумуляции) электромагнитного излучения с полной энергией больше нуля. На рис. 3 представлены схемы плоскостного (резонатора Фабри – Перо) и сферически-симметричного резонаторов. Атомы являются квантовыми ящиками для волн де Бройля электронов с полной энергией меньше нуля. Итак, если профиль потенциала для электрона в атоме выбрать в виде ступеньки, то все эти резонансные стационарные и квазистационарные явления описываются однородным уравнением Гельмгольца (1) при заданных граничных условиях на «зеркалах», отражающих волны или электрон к центру квантового или соответствующего резонатора. Как указывалось ранее, нестационарное уравнение Шредингера для квазистационарных задач при выборе потенциала в виде ступеньки сводится к уравнению Гельмгольца [3, 4, 7, 8, 12, 13, 17–27]. Согласно справочнику линейных уравнений математической физики [9], энциклопедии [4] и учебникам для вузов [12, 13], уравнение Гельмгольца (1) при граничных условиях $\psi_n(R) = 0$ в случаях сферически- ($k=1$) [9], цилиндрически-симметричного и [9] ($k=0,5$) и плоскостного [4, 12, 13] ($k=0$) резонаторов ($0 \leq r \leq R$) и $E_n = \text{const} > 0$ имеет частные решения (см. (2), где $\mu_n^2 = k_n^2 = (2m/\hbar^2)R^2 E_n > 0$, k_n – волновой вектор электрона (или при $l \neq 0$ $\mu_{l,n}^2 = (\varphi_{l,n}/\pi R)^2$). При наступлении резонансного захвата электрона полый молекулой C_{60} в качестве краевого условия на границе такого резонатора (с добротностью $\sim \infty$, см. рис. 2) следует выбирать условие на зеркальное отражение от **эффективной** границы резонатора (см. рис. 2), то есть $\psi_n(R + r_{ind}) = 0$ [3]. (Как показывают оценки, выполненные в [3], потенциальный барьер: его высота и характерный размер, обусловленные поляризацией всей полый молекулы C_{60} , существенно превышают параметры поляризации отдельных атомов, что дает возможность пренебречь внутренней структурой потенциальных полей в этой задаче и учитывать только один потенциальный барьер. Сказанное позволяет свести задачу к классической задаче Г.А. Гамова.) Это первая крайняя задача при решении уравнения Гельмгольца [9]. Собственные значения резонансной энергии электрона первой краевой задачи [9] при эффективном поляризационном размере резонатора $R + r_{ind}$ следующие:

$$(2m/\hbar^2)E_n = k_n^2/(R + r_{ind})^2. \quad (3)$$

Согласно (2)–(3) и рис. 3 как в плоскостных резонаторах, так и в любых сферически- или цилиндрически-симметричных резонаторах устанавливаются резонансные стоящие *sin*-волны с $k_n(R+r_{\text{ind}}) = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$ и *cos*-волны с $k_n(R+r_{\text{ind}}) = (n - 1/2)\pi$, если рассматривать решения относительно центра резонатора (рис. 3,а). Следовательно, для *sin*-волн:

$$E_{\text{nsin}} = (\hbar^2/2m)\pi^2 n^2 / (R+r_{\text{ind}})^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

для *cos*-волн:

$$E_{\text{ncos}} = (\hbar^2/2m)\pi^2 (n-1/2)^2 / (R+r_{\text{ind}})^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

Здесь же отмечу, что для решения уравнения второй степени (1) в случае резонанса с *плоскостной* симметрией мы имеем два граничных условия $\psi_n = 0$ при $x = R$ и $\psi_n = 0$ при $x = -R$ (рис. 3,в). При сферической и цилиндрической симметрии в общем случае достаточно одного граничного условия при $r = R+r_{\text{ind}}$ [9], так как для противоположного края резонатора это условие при заданной симметрии выполняется автоматически, то есть происходит вырождение граничных условий на границе, и это вырождение не требует дополнительного граничного условия в центре резонатора [3, 9]. Частица и в этих случаях, как и в пустом плоскостном резонаторе, резонирует с краями резонатора (отражается от его «зеркал»), а не с *пустым центром*. В центре пустого резонатора осуществляется свободный пролёт электрона или прохождение фокусирующейся поляризованной «зеркалом» волны самой через себя. Для любых полых резонаторов выбрасывать неограниченные в центре решения – *cos*-волны, описывающие *интерференцию (дифракцию в центре резонатора) Высикайло-де Бройля-Фраунгофера* электронов на квантовом резонаторе, нет никаких оснований (о чём говорилось выше). Для атомов эти решения, определяющие *интерференцию Высикайло-де Бройля-Фраунгофера*, для электронов оболочки выброшены из-за наличия в центрах атомов положительно заряженных атомных ядер, не способных пропустить сквозь себя кумулирующие к центру атома электроны оболочки. Зеркало, отражающее электроны оболочки от центра, поставлено дополнительным условием: $\psi_n(r=0) = 0$ для электронов оболочки в атоме. Этим в классической квантовой механике для электронов оболочки в атоме оставлена только обобщенная интерференция (или дифракция в центре атома) *де Бройля-Френеля* [12, 13].

При одних и тех же граничных условиях на границе резонатора мы имеем два типа решений для $\psi_n(r)$, существенно отличающихся в центре резонатора для любого типа симметрии [3, 4, 9, 12, 13, 17–24]. Эти решения качественно и особенно количественно отличаются в случаях сферической и цилиндрической симметрий ($k \neq 0$ в (2) [3, 9]). Так, $\psi_n(r)$ *cos*-волн из-за их геометрической кумуляции геометрической формой резонатора неограниченно растёт к центру таких резонаторов (2). Квантовые резонаторы, квантовые фокусы и соответствующие им новые *cos*-спектры нанознергий, открытые автором аналитически в [3] и систематизированные в данной работе, представляют интерес для нового направления в нанотехнологиях, опирающегося на наноструктурирование объёмного заряда в нанокompозитах (рис. 1, ч. II), что создаёт возможность применения в практике физического легирования нанокристаллов, открытого автором в [19]. Сравним дискретный энергетический спектр *cos*- и *sin*-волн для различных типов симметрии резонаторов (без учёта центробежных потенциалов, при $l=0$). Согласно (3) собственные энергетические спектры не зависят от типа симметрии квантового резонатора и определяются только характерным размером (0D-мерной квантовой точки, 1D-провода или 2D-ямы).

Для задач с плоскостными резонаторами и с граничными условиями $\psi_n(r) = 0$ при $r = \pm R$ (рис. 3,а): при $n = 1$ для *sin*-волны имеем резонанс на полной волне при $\psi_{1\text{sin}}(0) = 0$ с $k_1 R = \pi$ (рис. 3,в), а для *cos*-волны – полуволновой резонанс с $k_1 R = \pi/2$ и ограниченную кумуляцию всех ψ_{ncos} -функций к центру резонатора (рис. 3,в,г) $\psi_{\text{ncos}}(0) \sim \cos(k_n r) = 1$ (пусть $B = 1$). В случае резонатора с плоскостной симметрией решения (2) распадаются на решения для стоячих, *кумулярующих* к центру плотность энергии *cos*-волн и *sin*-волн, фокусирующих энергию между краями резонатора и его центром (рис. 3,в). В соответствии с этим в центре (при $r = 0$) значения собственных ψ_n -функций электронов этих двух типов волн расщепляются: для *sin*-волн с асимметричными собственными функциями: $\psi_{\text{nsin}}(0) = 0$ (обобщенная 3D-интерференция Френеля с обобщенной дифракцией Френеля в центре квантового резонатора), а для *cos*-волн с симметричными собственными функциями: $\psi_{\text{ncos}}(0) = 1$ ($B = 1$) (обобщенная 3D-интерференция Фраунгофера с обобщенной дифракцией Фраунгофера в центре квантового резонатора).

Для задач со сферически- и цилиндрически-симметричными резонаторами, фокусирующими к центру квантовые частицы: для *sin*-волн, согласно рис. 3,в и [9], имеем также резонанс на полной волне (асимметричные $\psi_{\text{nsin}}(r)$ -функции) при $\psi_n(0) = 0$ с $k_n R = n\pi$, а для *cos*-волн (симметричные $\psi_{\text{ncos}}(r)$ -функции) – полуволновой (рис. 3,в и [9]) резонанс с $k_n R = (n-1/2)\pi$, но уже и с

неограниченной кумуляцией всех ψ_{ncos} -функций к центру резонатора и $\psi_{\text{ncos}}(0) = B_n \cos(k_n r) / r^k = \infty$, где $k = 1$ или $0,5$ соответственно. Согласно (4) собственная энергия $E_{1\text{cos}}$ для cos -резонанса в четыре раза меньше энергии $E_{1\text{sin}}$ sin -волны для любого типа симметрии (k) квантового резонатора. Согласно решениям (2) можно построить профили $\psi_n(r)$ в зависимости от типа симметрии (k) и типа установившегося резонанса (это cos - или sin -волна). Для плоскостного случая эти профили приведены во многих учебниках по атомной физике (см., например, [20, с. 513], рис. 232). Там же указывается, что «физический смысл имеет не сама функция $\psi_n(r)$, а квадрат её модуля» – плотность вероятности в элементе объема $dx dy dz$. В случае плоскостной симметрии и одномерной задачи это уже слой с размером dx . А вот в случае симметрии цилиндрической и сферической необходимо учесть пространственные особенности слоя с размером dr , то есть вероятность нахождения частицы в слое dr [13]. Из сказанного и (2) следует, что вероятность найти частицу в слое dr внутри 0-мерных квантовых точек или 1-мерной линии с любым типом симметрии, с $k \neq 0$, равна с учётом коэффициента регуляризации $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$ для cos -волн:

$$W_n(r) = \chi^2(r) |\psi_n(r)|^2 = 2^{2k} \pi r^{2k} |\psi_n(r)|^2 = \cos^2(k_n r), n = 1, 2, 3 \dots \quad (6)$$

При $k=0$, $\chi(r)=1$ [4, 20]:

$$W_n(r) = |\psi_n(r)|^2 = \cos^2(k_n r), n = 1, 2, 3 \dots \quad (7)$$

Аналогично для sin -волн с учётом соответствующего нормировочного коэффициента (регуляризатора $\chi(r)$) определяем вероятность нахождения электрона в слое dr :

$$W_n(r) = 2^{2k} \pi r^{2k} |\psi_n(r)|^2 = \sin^2(k_n r) dr, n = 1, 2, 3 \dots \quad (8)$$

При $k=0$, $\chi(r)=1$ [4, 20]:

$$W_n(r) = |\psi_n(r)|^2 = \sin^2(k_n r), n = 1, 2, 3 \dots \quad (9)$$

В случае плоскостной симметрии ($k=0$) и (7), и (9) описывают профиль sin - или cos -стратификации вероятности, нахождения частицы в объёме резонатора, абсолютно совпадающий с профилем, приведенным в [20] на рис. 232.б. Согласно (6)–(9) профиль плотности вероятности (sin - или cos -стратификации), нахождения частицы в объёме резонатора, абсолютно совпадает для всех трёх типов симметрии (не зависит от геометрии кумуляции, то есть от k или $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$) и определяется типом волны (cos - или sin -волна) и резонансной энергией частицы ($E_n > 0$ или $E_n < 0$) или квадратом квантовых чисел ($(n-1/2)^2$ и n^2). Таким образом, и профиль стратификации вероятности нахождения частицы $W_n(r)$, и резонансная энергия частицы E_n , как отмечалось, также не зависят от типа симметрии квантового резонатора и определяются только эффективным характерным размером ($R+r_{\text{ind}}$) квантовой точки, линии или ямы, типом волн (sin - или cos -волна) или в общем случае только значением полной резонансной энергии частицы.

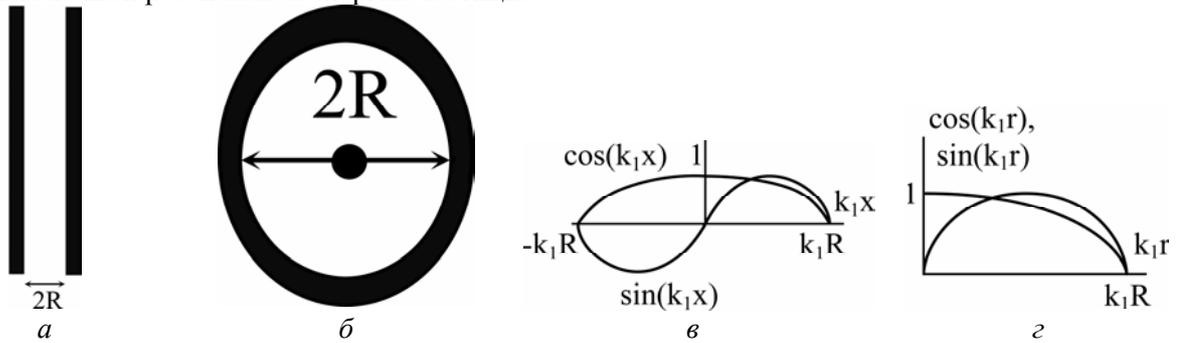


Рис. 3. Схема плоскостного резонатора типа Фабри – Перо с характерным размером $2R$ (а); схема сферически-симметричного резонатора с радиусом R (б); стоячие cos - (или sin -) волны в плоскостном резонаторе; cos - и sin -стоячие волны в сферическом резонаторе (г)

Отличается только нормировка собственной $\psi_n(r)$ -функции для разных типов симметрии. Так, для сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов, а также для cos - и для sin -волн, согласно (6)–(9) и условию, что во всей области локализации ($0 \leq r \leq R$) вероятность найти частицу равна 1, $A_n = B_n = (2^{2k} \pi (R+r_{\text{ind}}))^{-1/2}$, а для плоскостной симметрии $A_n = B_n = R^{-1/2}$ (без учёта поляризационной длины) [4, 20]. Следует отметить, что в (2) функции $\cos(\mu_n r)$ и $\sin(\mu_n r)$ удовлетворяют граничным условиям для ψ_n -функции на границе резонатора ($\psi_n(r=R+r_{\text{ind}}) = 0$), а функции r^k с коэффициентами A_n и B_n ответственны за нормировку ψ_n -функций и определяются из условия $\int_0^{R+r_{\text{ind}}} 2\pi r |\psi_n|^2 dr = 1$ в случае цилиндрической симметрии и $\int_0^{R+r_{\text{ind}}} 4\pi r^2 |\psi_n|^2 dr = 1$ при сферической симметрии, то есть учитывают геометрическую кумуляцию волн к центру резонатора.

Неограниченной кумуляцией плотности энергии акустических сферически-симметричных \cos -волн, порождающей пузырьки в жидкостях (см. рис. 1), и уже схлопыванием этих пузырьков (кавитация, сонолюминесценция), как указывалось, интересовались Безант (1859), Рэлей (1917), Забабахин (1988), Маргулис (2000), Нигматулин (2002) и др. Для создания пузырьков в центре акустического резонатора используется простая схема (рис. 1), обеспечивающая кумуляцию энергии источника ультразвука к центру резонатора. Согласно сказанному эффективно фокусируют акустическую энергию к центру резонатора только \cos -волны с $k_n R = (n - 1/2)\pi$ и соответственно с пучностями в центре резонатора. Формирование стоячих акустических волн в сферических и цилиндрических резонаторах давно изучено и применяется в практике, например для коагуляции примесей в центре резонатора, для очистки труб в нефтедобывающей промышленности и т.д. Таким образом, в акустических и электромагнитных явлениях в зависимости от граничных условий в центре резонатора можно наблюдать и применять в практике \cos - или \sin -резонансы. Выбрасывать \cos -решения в случае полых квантовых резонаторов в угоду *принципу ограниченности всюду собственных ψ_n -функций электронов*, по мнению автора, является ошибкой. Приведём в виде цитаты ошибочные основания для выбрасывания \cos -волн. Так, в [12, с. 131]: «Если потенциальная энергия $U(r)$ (см., например, (1)) везде конечна, то должна быть конечной во всём пространстве, включая начало координат, также и волновая функция ψ_n . И уже на с. 135 [12] выписывается единственное решение в виде \sin -волны: «... = $\sin(kr)/r$ ». В [25, с. 303] во внутренней области резонатора также требуется регулярность собственной ψ_n -функции частицы: «Чтобы она была регулярна в нуле, коэффициент перед косинусом должен исчезать...» Однако все признают, что физический смысл несёт не сама ψ_n -функция частицы, а её плотность вероятности W_n , то есть нормированная на регуляризатор ψ_n -функция частицы. Следует ограничивать единицей интеграл квадрата ψ_n -функции электронов во всей области локализации частицы с резонансной энергией E_n . Это условие соответствует физическому смыслу вероятности нахождения частицы во всей области её локализации. Решение этого парадокса (исправление ошибки) в учёте энергетического спектра \cos -волн и нормировочного коэффициента $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$, регуляризирующего $\psi_{n\cos}$ -функцию $\sim 2^k \pi^{1/2} r^k \cos(k_n r)/r^k = 2^k \pi^{1/2} \cos(k_n r)$ как в случае сферической, так и в случае цилиндрической симметрии ($k = 1$ при сферической симметрии, $k=0,5$ при цилиндрической симметрии). Только этим положением отличается кумулятивная квантовая механика *Высикайло* от классической квантовой механики, в которой не было места процессам неограниченной кумуляции *ψ_n -функции* и обобщенной автором дифракции Фраунгофера в квантовых резонаторах для волн де Бройля электронов.

Кумуляция и интерференция волн де Бройля в квантовых резонаторах. В квантовой механике \sin -волны де Бройля, или \sin -резонансы, используются для описания волновых или квантовых явлений в атоме. При этом для стоячих волн де Бройля ставится дополнительное граничное условие в центре атома (в области его ядра): $\psi_n(0) = 0$. В результате выбора такого граничного условия в центре квантового резонатора с заряженным атомным ядром, учитываются решения для \sin -волн и отбрасываются решения для \cos -волн (для них, как мы знаем, при сферически- и цилиндрически-симметричных резонансах $\psi_{n\cos}(0) = \infty$). Тем не менее явление кумуляции волн де Бройля существует и наблюдается в экспериментах, например К-захват электронов атомным ядром (нейтронизация вещества или обратный β -распад). Наблюдается стабилизация β -распада нейтронов в атомных ядрах. В этих явлениях явно происходит динамическая локализация (кумуляция) ψ_n -функции электрона в квантовом ящике размером в атомное ядро (фемтомир). Следовательно, наряду с формированием захваченными электронами стоячих \sin -волн де Бройля, в общем случае для квантовых резонаторов необходимо учитывать и возможность формирования стоячих \cos -волн. *Выбрасывать \cos -решения, особенно для полых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторов, нет оснований и в квантовой механике.* Кумулятивная квантовая механика дополняет классическую (с регулярной или ограниченной собственной ψ_n -функцией частиц) квантовую механику спектром \cos -волн, интерференцией и дифракцией *Высикайло-де Бройля-Фраунгофера* и возможностью неограниченно кумулировать ψ_n -функции частиц сферически- и цилиндрически-симметричными полыми резонаторами. Согласно ККМ ограничивается единицей только полная вероятность нахождения частицы в области её локализации. При этом правила нормировки собственных ψ_n -функций остаются теми же, что и в классической квантовой механике. Волна де Бройля и в ККМ является характеристикой поведения электрона. Следует отметить, что проведенная автором классификация квантовых стабильных (закрытых) и метастабильных (частично открытых) резонаторов проведена в соответствии с работами [26, 27], но вместо термина открытой квантовой точки предлагается термин частично открытой или IQ-точки.

Интерференция волн и частиц. Следует отметить, что каждой установившейся в квантовом резонаторе стоячей волне де Бройля или локализованной частице соответствуют своя собственная ψ_n -функция и своя собственная резонансная энергия частицы (квантовая пара), и это наблюдается как для \cos -, так и для \sin -резонансов. По этой причине говорить о суперпозиционных решениях (интерференции) типа $\psi_n = (A_n \sin k_n r + B_n \cos k_n r)/r^k$ только для одной захваченной в резонатор частицы в рамках квантовой механики не приходится. Для одной частицы, согласно рис. 3, в, з, возможно установление в сферически- или цилиндрически-симметричном резонаторе стоячей \cos - или \sin -волны с соответствующим единственным резонансным значением энергии $E_{n\cos} \sim (n - 1/2)^2$ или $E_{n\sin} \sim n^2$ и соответствующим единственным профилем $\psi_{n\cos}(r)$ или $\psi_{n\sin}(r)$. Таким образом, суперпозиция (2) в квантовой механике соответствует нескольким частицам $\psi_n = (A_n \sin k_n r + B_n \cos k_n r)/r^k = A_n \psi_{n\cos}/r^k$ и $B_n \psi_{n\sin}/r^k$. (Отметим, что по принципу Паули возможен резонанс с одним значением энергии для двух частиц, имеющих противоположно направленные импульсы.) Нелинейным взаимодействием двух электронов в одном квантовом резонаторе, как и проблемой проникновения частицы через потенциальный поляризационный барьер, мы в данной работе заниматься не будем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенного анализа решений первой краевой задачи Гельмгольца, опирающегося на *KKM*, мы получили решение для собственных ψ_n -функций, включающее как \sin -, так и \cos -волны. В рамках *KKM* класс \cos -волн следует учитывать в качестве возможных решений в любых *полых* квантовых резонаторах с любым типом симметрии. При этом энергетический дискретный спектр E_n и пространственная стратификация вероятности нахождения частицы в объёме резонатора W_n как для \cos -волн с $E_n \sim (n-1/2)^2$, так и для \sin -волн с $E_n \sim n^2$ зависят только от эффективного размера резонатора и n – главного квантового числа (n – \sin -волн или $(n-1/2)$ – для \cos -волн) и не зависят от типа симметрии квантовой точки, линии или ямы, как и в случае обычной квантовой механики. При этом минимально возможные резонансные энергии в рамках *KKM* (для \cos -волн) ровно в четыре раза меньше, чем минимальная энергия (для \sin -волн) в рамках классической квантовой механики, требующей регулярности ψ_n -функции в нуле сферических или цилиндрически-симметричных резонаторов. В рамках *KKM* при значениях $n > 1/2$ происходит вырождение квантовых уровней полых резонаторов не в два раза, как по принципу Паули, а в четыре раза, так как следует учитывать \cos - и \sin -волны. Это вырождение при $n \gg 1/2$ снимается только вблизи центра квантового резонатора. (Это явление можно отнести к асимптотическим парадоксам [6].)

В рамках *KKM* проводить расчёты всех параметров обязательно следует с учётом геометрических нормировочных коэффициентов $\chi(r)$, соответствующих типу симметрии задачи и регуляризирующих неограниченно растущие, например, к центру резонатора собственные ψ_n -функции для частиц.

Не следует спешить с преждевременным взятием пределов или осуществлением предельных переходов без подробного анализа кумулятивных явлений и соответствующего учёта геометрических нормировочных коэффициентов, отличных от единицы. Ошибки с преждевременным взятием пределов или преждевременными предельными переходами во всех учебниках по квантовой механике возникли из-за непонимания и отсутствия должного анализа кумулятивных явлений как в квантовой механике, так и в обычной математике, если не учитываются геометрические нормировочные коэффициенты, регуляризирующие неограниченные в центре резонатора кумулятивные решения.

В связи с гипотезой де Бройля и вышесказанным встает вопрос: а существуют ли реально квантовые сферически- или цилиндрически-симметричные резонаторы для волн де Бройля частиц (электронов и др.), неограниченно кумулирующие собственную ψ_n -функцию захваченной частицы к центру резонатора, и соответствующие им решения (2) с $\psi_{n\cos}(0) \sim \cos(k_n r)/r^k = \infty$ с регуляризуемыми решениями или постулат де Бройля в экспериментах всё же нарушается для \cos -волн де Бройля в полых квантовых резонаторах для этих волн, например электронов? Постулат (гипотеза) де Бройля оказался эффективен для огромного числа волновых явлений, поэтому автор в части II приступит к расчетам квантовых резонаторов для электронов типа сферического резонатора, представленного на рис. 2, и практическому обоснованию возможности формирования резонансных состояний с $\psi_{n\cos}(0) \sim \cos(k_n r)/r = \infty$, но ограниченных (регуляризованных) при правильном учёте геометрических нормировочных коэффициентов A_n и $B_n = 2^k \pi^{1/2} r^k / R^k$, регуляризирующих в нуле ψ_n для \cos -волн $\psi_n(0) = 2^k \pi^{1/2} r^k \cos(k_n r)/(rR)^k = 2^k \pi^{1/2} / R^k$ (наряду с решениями для \sin -волн, исследованных в том числе и для электронов в атомах [12, 13]). Тем самым автор применит общие принципы

кумулятивной квантовой механики, сформулированные им ранее, для описания кумулятивных явлений в квантовых полых сферических или цилиндрических резонаторах для \cos -волн де Бройля электронов. Предложенный автором подход, решающий ряд парадоксов классической квантовой механики в кумулятивных явлениях, может быть применён согласно гипотезе Луи де Бройля для описания поведения любых частиц в соответствующих квантовых сферически- и цилиндрически-симметричных резонаторах, в том числе и в фемторазмерных резонаторах (атомных ядрах), а также в классических резонаторах для различных типов волн. В частности, эта модель может быть применена, например, для решения таких загадочных явлений, как волны-убийцы в океанах или для моделирования мезобаллистической проводимости в поляризуемых протяжённых нанотрубках.

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. The Analytic Calculation of Ionization – Drift Waves (3D-Strata) of Nanosecond Discharges. The Determination of the Cathode Drop in Nanosecond Discharges According to the Number of Visualized Plasma Structures. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2011, **47**(1), 139–144.
2. Высикайло Ф.И. Кумуляция электрического поля в диссипативных структурах в газоразрядной плазме. *ЖЭТФ*. 2004, **125**(5), 1071–1081.
3. 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.
4. *Нанонаука и нанотехнологии. Энциклопедия систем жизнеобеспечения*. Гл. редакторы: О.О. Аваделькарим (Awadelkarim, США), Ч. Бай (КНР), С.П. Капица (Россия). М.: Юнеско, изд. Дом МАГИСТР-ПРЕСС, 2009. С. 106–138.
5. Забабахин Е.И., Забабахин И.Е. *Явления неограниченной кумуляции*. М.: Наука, 1988. 173 с.
6. Vysikaylo Ph.I. Detail and General Model of Electronic Processing of Surface of Charged Plasmoids from Atomic Nuclei to white Dwarfs, Neutron Stars and Galactic Nuclei. Self-contraction and the Classification of Charged Plasma Structures – Plasmoids. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2012, **48**(1), 11–21.
7. Zhigang Xiao. Exciton Binding Energy in Spherical Quantum Dots in a Magnetic Field. *J. of Applied Physics*. 1999, **38**(8), 4509–4514.
8. Prado S.J., Marques G.E., Trallero-Giner C. Electronic Structure in Narrow-Gap Quantum Dots. *Brazilian J. of Physics*. 1999, **29**(4), 730–733.
9. Полянин А.Д. *Справочник по линейным уравнениям математической физики*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. с. 511, 515.
10. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. London, Academic Press, 1995.
11. Сидоров Л.Н., Юровская М.А. и др. *Фуллерены. Учебное пособие для вузов*. М.: Экзамен, 2005. 688 с.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика: Учеб. пособие. Т.3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1974. 752 с.
13. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. *Введение в атомную физику*. М.: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1969. 303.
14. 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.
15. Jaffke T., Illenbergen E., Lezius M., Matejcek 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**, 213–218.
16. Huang J., Carman H.S. and Compton R.N. Low-Energy Electron Attachment to C_{60} . *J. Phys. Chem*. 1995, **99**, 1719–1726.
17. Rosenblit M., Jortner J. Binding of Electrons to the Surface of Helium Clusters. *Phys. Rev. B*. 1995, **52**, 17461–17467.
18. Каширина Н.И., Лахно В.Д. Биполярон большого радиуса и взаимодействие поляронов. *УФН*. 2010, **180**(5), 449–473.
19. Vysikaylo Ph.I. Physical Fundamentals of Hardening of Materials by Space Charge Layers. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2010, **46**(4), 291–298.

20. Шпольский Э.В. *Атомная физика. Том первый. Введение в атомную физику*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1963. 576 с.
21. 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.
22. 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), 1004–1007.
23. Высикайло Ф.И. Поляризация аллотропных полых форм углерода и её применение в конструировании нанокомпозитов. *Нанотехника*. 2011, **1**(25), 19–36.
24. Blank V., Vysikaylo Ph. et al. C₆₀ – doping of Nanostructured Bi-Sb-Te Thermoelectrics. *Phys. Status Solidi A*. 2011, **208**, 105–113.
25. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*. М.: Наука, 1971. 544 с.
26. 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.
27. 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.

Поступила 15.08.11

Summary

A formulation is proposed of the fundamentals of cumulative quantum mechanics (CQM), which allows to describe the resonant cos-waves with unlimited (with $k \neq 0$), in the center of the cavity, ψ_n -function of electron ($\psi_n(r) \sim \cos(k_n r)/r^k$) in the hollow-space quantum resonators with any type of symmetry: plane – $k = 0$, spherical – $k = 1$ and cylinder – $k = 0.5$). Irregular in the center of cavity, cos-solutions are regularized of the respective type of symmetry, geometric normalization factor being equal to $\chi(r) = 2^k \pi^{1/2} r^k$, with $k \neq 0$ (if $k = 0$, then $\chi = 1$). Stratification of the probability of finding the particle in the volume of quantum cavity similarly is determined by the energy of a particle or a full set of squares of the corresponding quantum numbers $((n-1/2)^2$ for the cos-waves and n^2 for a sin-waves) for any type of symmetry of the quantum cavity. An analytical CQM model of polarization resonant electron capture (dynamic localization due to the self-formation of the potential barrier, cumulating this electron inside the molecule) is proposed. When the polarization capture of an electron by the allotropic forms of hollow carbon: fullerenes and nanotubes, occurs, the electron energy $E_n > 0$. The problem of polarization cumulation of the de Broglie waves of electrons is reduced to the problem of G.A. Gamow: "a quantum particle in a box, with a potential barrier on its boundary." The energy spectrum of localized states of the barrier $E_n > 0$ (*metastable* IQ-particle – a partially open quantum dot, line or pit), as in the case of $E_n < 0$ (FQ-stable particle – a closed quantum dot, line or pit) is determined by effective internal dimensions of a quantum box ($R + r_{ind}$) with polarization forces, effectively acting at a distance r_{ind} from the polarizable molecules. CQM allows for $E_n > 0$ described as a limited cumulation $\psi_n(r)$ -functions for generalized interference of de Broglie-Fresnel and unlimited cumulation $\psi_n(r)$ -functions to the center of the quantum cavity with the generalized *interference Vysikaylo-de Broglie-Fraunhofer* in hollow polarizable spherically or cylindrically symmetric quantum resonators for the de Broglie electron waves. CQM allows for the analytical calculation of eigen quantum pairs: $\psi_n(r)$ -functions, respectively, the probability of finding the particle in the cavity – $W_n(r)$ and $E_n > 0$ – eigenenergy of electrons localized in a quantum cavity (C₆₀ and 70, etc.) by polarization. It is proved that, along with the classical energy spectrum for asymmetric ψ_n -functions (sin-wave) with $E_n \sim n^2$ for cavity quantum resonators, quantum resonances for symmetric ψ_n -functions (cos-waves) with $E_n \sim (n-1/2)^2$ can be realized.