

І.В. СИМЕНОГ, В.В. МИХНЮК, Ю.М. БІДАСЮК

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголобова НАН України
(Вул. Метрологічна, 14б, Київ 03143; e-mail: ivsimenog@bitp.kiev.ua)

УДК 539

ЕНЕРГЕТИЧНІ ТЕРМИ ТА ДІАГРАМИ СТАБІЛЬНОСТІ ДЛЯ 2D ЗАДАЧІ ТРЬОХ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК

Для двовимірних кулонівських систем типу симетричних тріонів ХХУ у варіаційному підході отримано симетричний та антисиметричний терми. Дано якісне пояснення діаграм стабільності та певних аномалій в 2D просторі на основі адиабатичного наближення Борна–Опенгаймера. Виконано аналіз отриманих для довільної вимірності простору асимптотик енергетичних термів на великих відстанях, і запропоновано апроксимаційні формули для 2D термів. Встановлено аномальну залежність мультипольних моментів від вимірності простору у випадку сферично-симетричного поля. Проведено кількісне порівняння основних результатів для 2D і 3D задач двох кулонівських центрів.

Ключові слова: енергетичні терми, діаграми стабільності, кулонівські системи, варіаційний підхід, наближення Борна–Опенгаймера, вимірність простору.

1. Вступ

Двовимірні задачі для кулонівських систем виникають в самих різноманітних фізичних проблемах: для шаруватих та приповерхневих матеріалів, у фізиці графену та у зв'язку з загальними проблемами вивчення залежностей фізичних спостережуваних від вимірності простору (див., наприклад, [1, 2]). Дослідження умов появи зв'язаних станів у двовимірній задачі трьох заряджених частинок, в порівнянні з задачею в 3D просторі [3, 4], виявили певні важливі аномалії в 2D просторі, особливо в молекулярному режимі [5]. Це викликає необхідність більш ясного розуміння на фізичному рівні таких двовимірних особливостей, які відсутні в стандартній постановці задач у тривимірному просторі. В молекулярному режимі 3D задачі для симетричного тріона ХХУ, коли фактично ми маємо справу з двома кулонівськими центрами, ця проблема досить повно вивчена (див., зокрема, [6–8]). На сьогодні окремі результати для

асимптотик енергетичних термів на малих та великих відстанях вже отримано і для двох кулонівських центрів в 2D просторі [1, 2], але використання термів для вивчення діаграм стабільності ще потребують окремого розгляду.

У даній роботі було розраховано енергетичні терми у достатньо точному варіаційному підході без використання розділення змінних, який можна поширити на більш складні системи. Запропоновано апроксимаційні формули для термів з урахуванням асимптотичних формул для великих та малих відстаней між центрами і обговорено специфічні особливості термів для різних вимірностей простору. Отримані терми використано для аналізу діаграм стабільності на площині маса-заряд (m, Z) в адиабатичному наближенні Борна–Опенгаймера.

2. Варіаційний розрахунок енергетичних термів

Гамільтоніан двовимірної (2D) симетричної задачі ХХУ трьох заряджених частинок є

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2m} + \frac{\hat{p}_3^2}{2} + \frac{1}{r_{12}} - Z \left(\frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \right), \quad (1)$$

© І.В. СИМЕНОГ, В.В. МИХНЮК,
Ю.М. БІДАСЮК, 2014

де будемо вважати для ізольованих малих систем за кулонівський потенціал для плоскої задачі стандартний вираз

$$V_C = \frac{1}{r}. \quad (2)$$

Відносно досить делікатних питань вибору потенціалу взаємодії між зарядженими частинками в низьковимірних системах тут обмежимося лише зауваженням, що ця проблема в тонких плівках розглядалася ще Келдишем в [9], і на більш спрощеному рівні у [10], а також у більш сучасних дослідженнях [11]. Використання потенціалу (2) для малих систем заряджених частинок на площині (2D задача) можна виправдати тим, що система як би поміщена в тонкий шар, тобто рух системи в одному з напрямків обмежено дуже вузькою і глибокою квантовою ямою. Товщина цього шару не фігурує в подальших розрахунках, але її допустимі значення можуть бути оцінені з вигляду енергетичних термів. Наявність скінченної товщини буде деформувати енергетичні терми двовимірної задачі лише на відстанях порядку цієї товщини, при цьому відштовхувальна область на малих відстанях не впливає суттєво на коливний спектр терму. Таким чином, товщина шару повинна бути меншою, ніж відштовхувальна область терму (відстань R_0 , що наведена в табл. 1), тоді енергетичний спектр системи не буде суттєво відрізнятися від двовимірної задачі. Отже вважаємо, що в напрямку y , перпендикулярному до площини, рух заморожено і відстань на площині задається як

$$r^2 = x^2 + z^2. \quad (3)$$

Перепишемо (1) у системі центра мас у відносних координатах

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)Z \left(1 + \frac{1}{2m}\right)^{-1}, \\ \mathbf{r} &= \left(\mathbf{r}_3 - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}\right)Z \left(1 + \frac{1}{2m}\right)^{-1}, \end{aligned} \quad (4)$$

де \mathbf{R} – відносна координата між однаковими частинками. Тоді рівняння Шрьодінгера (р.Ш.) має вигляд

$$\left\{ -\frac{1}{m+1/2}\Delta_R - \frac{1}{2}\Delta_r + \frac{1}{ZR} - \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|} - \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|} \right\} \Psi(r, R) = \epsilon \Psi(r, R), \quad (5)$$

що зручно для роздільного аналізу швидкого електронного руху за координатою \mathbf{r} та повільного коливного руху за координатою \mathbf{R} в молекулярному режимі, коли $m \gg 1$. Енергія E задачі (1) визначається через енергію рівняння (5) ϵ таким чином:

$$E = \frac{2mZ^2}{1+2m}\epsilon. \quad (6)$$

Розглянемо молекулярний режим з двома важкими частинками, коли можна використати адіабатичне наближення Борна–Опенгаймера (БО) з розділенням швидких електронних та повільних коливних рухів:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \approx \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})\chi(\mathbf{R}), \quad (7)$$

де $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ – електронна хвильова функція по швидкій координаті \mathbf{r} для фіксованих \mathbf{R} . Тоді р.Ш. для електронної динаміки є двовимірною двоцентровою кулонівською задачею на власні значення:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\Delta_r - \frac{1}{|\mathbf{r}|} - \frac{1}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}|} \right\} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = U(R)\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (8)$$

для визначення термів $U(R)$. Окрім того, терми $U_{(s,a)}(R)$ ще відповідають симетричним s чи антисиметричним a станам відносно перестановок тождних кулонівських центрів. Зауважимо, що двоцентрова задача (8) може бути розглянута і для довільної вимірності простору, що становить інтерес для аналізу специфічних особливостей розв'язків залежно від вимірності і проливає світло на аномалії в 2D задачі. Для визначення енергетичних станів у наближенні БО в р.Ш для коливних спектрів використовується терми як ефективні потенціали взаємодії

$$\left\{ -\frac{1}{m+1/2}\Delta_R + \frac{1/Z-1}{R} + V_{(s,a)}(R) \right\} \chi_{n(s,a)}(R) = \epsilon \chi_{n(s,a)}(R), \quad (9)$$

де

$$V_{(s,a)}(R) = U_{(s,a)}(R) - U_{(s,a)}(\infty) + \frac{1}{R}. \quad (10)$$

Для знаходження термів $U(R)$ із двоцентрової задачі (8) стандартно розглядається розділення

змінних в еліпсоїдальних координатах (див., наприклад, [8] для тривимірної задачі та [2] для двовимірної задачі) і при цьому для двох одновимірних рівнянь аналізуються розв'язки на сумісність. В даній роботі ми використаємо для знаходження розв'язків двоцентрової $2D$ задачі (8) альтернативний варіаційний метод з перспективою в майбутньому поширити такий підхід на релятивістські задачі, задачі з більшою кількістю центрів та для систем з більшою ніж 3 кількістю частинок, де вже на розділення змінних годі сподіватися. Для знаходження власних значень задачі (8) для різних відстаней R між центрами використаємо варіаційний метод Гальоркіна з базисними функціями (природно з порушенням сферичної чи полярної симетрії):

$$\phi_i = e^{-a_i x^2} \left(e^{-b_i z^2} + s e^{-b_i (z+R)^2} \right), \quad (11)$$

де $s = \pm 1$ для симетричних s та антисиметричних a станів відносно перестановки центрів. Крім того, для більшої загальності ми будемо розглядати d -вимірну задачу (основні ж розрахунки тут буде зроблено для $2D$ задачі) для довільної вимірності простору, коли за координату між центрами ми вибрали z , поперечних координат x_i ($d-1$) кількість з поперечною відстанню

$$x^2 = \sum_{i=1}^{d-1} x_i^2. \quad (12)$$

Повна варіаційна функція задається як

$$\Phi = \sum_{i=1}^K N_i \phi_i, \quad (13)$$

а відповідні спектри для термів двоцентрової задачі (8) та власних функцій знаходяться із розв'язків систем лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{j=1}^K N_j \left\{ \langle \phi_i | \hat{H} - E | \phi_j \rangle \right\} = 0, \quad i = \overline{1, K}. \quad (14)$$

Відзначимо, що у (8) та (11) для зручності подальших розрахунків початок координат поміщено в один з центрів, а не посередині між центрами, як виглядає природним. Тоді загальна енергетична матриця для d -вимірної задачі ($d > 1$) у (14) на базисних функціях (11) буде

$$\langle \phi_i | H - E | \phi_j \rangle = (d-1) \frac{a^i a^j}{a^{(d+1)/2} b^{1/2}} \times$$

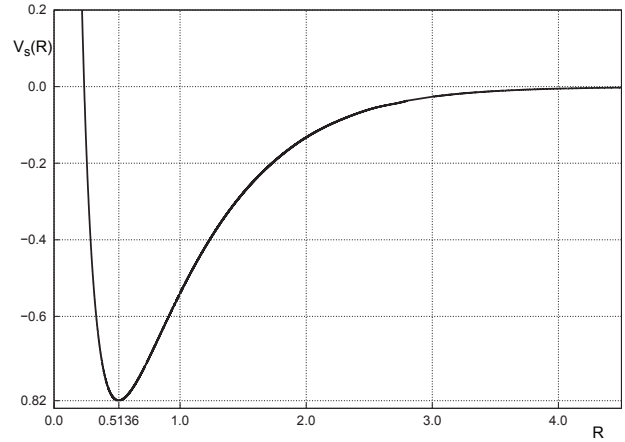


Рис. 1. Симетричний електронний терм ($V_s(R) = U_s(R) + 2,0 + 1/R$)

$$\begin{aligned} & \times \left(1 + s \exp \left\{ -\frac{b^i b^j}{b} R^2 \right\} \right) + \frac{b^i b^j}{a^{(d-1)/2} b^{3/2}} \times \\ & \times \left(1 + s \left(1 - \frac{2b^i b^j}{b} R^2 \right) \exp \left\{ -\frac{b^i b^j}{b} R^2 \right\} \right) - \\ & - I - E \frac{\left(1 + s \exp \left\{ -\frac{b^i b^j}{b} R^2 \right\} \right)}{a^{(d-1)/2} b^{1/2}}, \end{aligned} \quad (15)$$

де однократний інтеграл I для потенціальної енергії двох центрів визначений як

$$\begin{aligned} I = & \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 dx \frac{x^{d-2} (2-x^2)^{(d-3)/2}}{\sqrt{(a+(b-a)(1-x^2)^2)}} \times \\ & \times \left\{ 1 + \exp \left\{ -b(1-x^2)^2 R^2 \right\} + s \times \right. \\ & \times \left(\exp \left\{ -\frac{b^j (b^i + b^j (1-x^2)^2)}{b} R^2 \right\} + \right. \\ & \left. \left. + \exp \left\{ -\frac{b^i (b^j + b^i (1-x^2)^2)}{b} R^2 \right\} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Особливості розв'язку задачі (14) в адіабатичному наближенні БО аналогічні проблемам розв'язку задачі трьох частинок [5] незважаючи на труднощі з чисельними розрахунками інтегралів (16), на чому ми не будемо зупинятися. В результаті розрахунків отримано для $2D$ задачі найнижчі терми (основні стани) в симетричному та антисиметричному станах, які наведено на рис. 1 та 2 відповідно. Результати розрахунку для симетричного терму повністю узгоджуються з результатом

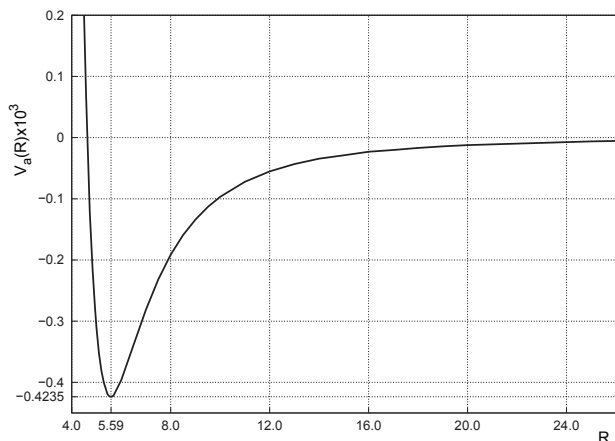


Рис. 2. Антисиметричний електронний терм $(V_a(R) = -U_a(R) + 2,0 + 1/R)$

з [12], отриманим іншим чином. Зауважимо, що в даній постановці задачі відсутня полярна (сферична) симетрія і в загальному плані класифікація всіх станів може бути виконана в гіперсфероїдальних координатах, де реалізується повне розділення змінних (див. [1, 2, 12]). Для зручності ми представили терми (10) так, щоб на безмежності по R вони занулялись, як це зручно для ефективних потенціалів взаємодії. Тут $U_{(s,a)}(\infty) = -2,0$ – енергія основного стану одного центра (атома водню), що є двочастинковим порогом розвалу. Наголосимо, що обидва терми $V_{(s,a)}(R)$ 2D задачі в найнижчих станах на значних відстанях ($R \gg 1$) залишаються від’ємними (притягування) і в границі безмежних відстаней двократно-виродженими (оскільки двоцентрова задача), як це має місце і в 3D просторі. На малих відстанях (об’єднані два центри і $U_{(s)}(0) = -8$, $U_{(a)}(0) = -8/9$) тер-

Таблиця 1. Параметри симетричного (s) та антисиметричного (a) термів в 2D та 3D задачах

s				
	R_{\min}	V_{\min}	R_0	R_{13}
2D	0,51357	-0,820	0,2391	0,5821
3D	1,99719	-0,102635	1,10	
a				
	R_{\min}	V_{\min}	R_0	R_{13}
2D	5,59	$-4,235 \cdot 10^{-4}$	4,625	3,9994
3D	12,55	$-6,08 \cdot 10^{-5}$	10,69	

ми $V_{(s,a)}(R \rightarrow 0)$ є додатними (відштовхування), завдяки наявності відштовхувального кулона між однаковими центрами.

Характерні параметри симетричного та антисиметричного 2D термів (притягувальних потенціалних ям) показано в табл. 1, де також дано порівняння з відповідними параметрами 3D задачі з [4]. Тут наведено положення мінімумів (R_{\min}) значення термів (V_{\min}) в мінімумі та відстань R_0 , більше якої терми від’ємні. Підкреслимо, що симетричний 2D терм майже у вісім разів глибший (більш сильний зв’язок) за 3D терм, а його положення приблизно у чотири рази менше відповідно. При цьому відстань R_0 для 2D також приблизно у чотири рази менша, ніж для 3D задачі. Для антисиметричного 2D терму значення в мінімумі аномально велике порівняно з 3D термом, але значно менше значення симетричного терму. Тобто, як і для 3D простору, умови для появи антисиметричних станів значно бідніші від умов для існування симетричних станів для заданих значень заряду Z та маси m , але в 2D просторі антисиметричний терм відповідає значно більшому притягуванню, ніж для 3D стану.

Відзначимо, що середньоквадратичні відстані між легкою третьою частинкою та одним із центрів R_{31} в набл. БО, які визначимо на електронних функціях $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{\min})$ як

$$R_{31}^2 \equiv \langle R_{31}^2 \rangle = \int d\mathbf{r} R_{31}^2 \Phi^2(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{\min}) / \int d\mathbf{r} \Phi^2(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{\min}) \quad (17)$$

в точці R_{\min} для симетричного основного терму задовольняють аномальне співвідношення

$$R_{31} > R_{\min}, \quad (18)$$

яке було виявлено в тричастинкових розрахунках у роботі [5]. Тобто, для великих мас двох центрів у молекулярних системах підтверджується факт, що відстань від легкої частинки до притягувального центра в 2D задачі стає більшою, ніж відстань між відштовхувальними центрами (яку визначимо як R_{\min}). У випадку ж 3D задачі реалізується природне співвідношення $R_{31} < R_{\min}$. Для антисиметричного стану в 2D задачі як у тричастинкових розрахунках [5], так і в наближенні БО, також має місце природне співвідношення.

Корисно тут також зауважити, що для подальшого розгляду коливних станів у наближенні БО має сенс розглядати лише наведені терми для симетричного та антисиметричного основних станів, оскільки всі інші збуджені терми лежать вище двочастинкового порога розвалу $E_0(2) = -2,0$. На рис. 3 наведено як основні терми s_0 та a_0 , так і збуджений симетричний терм s_1 (для зручності в позначенні $U(R)$) зсунуті на енергію двочастинкового порога і без зсуву на кулонівський потенціал, аналогічно $3D$ задачі, звідки видно, що лише основні терми можуть відповідати за появу зв'язаних станів у рівнянні (9).

3. Асимптотики термів

Розглянемо асимптотики $2D$ термів на великих та малих відстанях із р. Ш. (8) і по можливості з ширшим узагальненням на довільну вимірність простору d . Ця задача вже розглядалась в серії робіт Лазура зі співробітниками [1, 2] і ми тут лише приділимо більше уваги фізичним висновкам. Двоцентрова кулонівська d -вимірною задачею в гіперсфероїдальних координатах (дві координати $\xi = (r_1 + r_2)/R$ і $\eta = (r_1 - r_2)/R$ та $(d - 2)$ кутових змінних в повній аналогії з тривимірним простором (див., наприклад, [4, 12]) допускає розділення всіх змінних. В просторі координат ξ і η для найнижчих не залежних від кутів станів задача зводиться до системи двох одновимірних рівнянь на сумісність

$$\begin{aligned} &(\xi^2 - 1)\frac{d^2 X}{d\xi^2} + 2\sigma\xi\frac{dX}{d\xi} + \\ &+ \left(\frac{ER^2}{2}(\xi^2 - 1) + 2R(\xi - 1) + 2R + RA\right) X = 0, \\ &(1 - \eta^2)\frac{d^2 Y}{d\eta^2} - 2\sigma\eta\frac{dY}{d\eta} + \\ &+ \left(\frac{ER^2}{2}(1 - \eta^2) - RA\right) Y = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

де $\xi \geq 1$ і $-R < \eta < R$, $U(R)$ – терм, A – параметр розділення, а $\sigma = (d - 1)/2$ – визначає вимірність простору.

Система одновимірних рівнянь (19) у всіх відношеннях аналогічна відомій задачі в $3D$ просторі і для аналітичного розв'язку стандартно може бути побудована теорія збурень як для великих відстаней R , так і для малих відстаней R . Для великих відстаней, де симетричний та антисиметричний

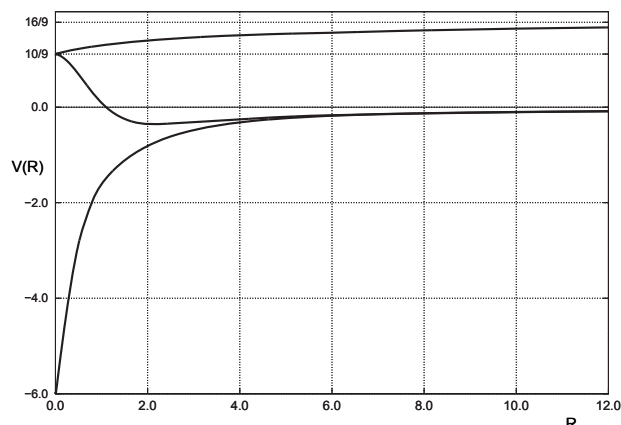


Рис. 3. Основні (s_0, a) та збуджений (s_1) електронні терми

чний терми з експоненційною точністю вироджені, зручно ввести змінні $\xi = 1 + \frac{2x}{R}$, $x \geq 0$, $\eta = 1 - \frac{2y}{R}$, $0 \leq y \leq R$ і з заміною

$$X = \exp\left\{-\int^x C(x')dx'\right\}, \quad Y = \exp\left\{-\int^y D(y')dy'\right\} \quad (20)$$

перейти до рівнянь типу Ріккати:

$$\begin{aligned} &x\left(1 + \frac{x}{R}\right)\left(-\frac{dC}{dx} + C^2\right) - \sigma\left(1 + \frac{2x}{R}\right) \times \\ &\times C + 2 + A + 2Ex\left(1 + \frac{x}{R}\right) + \frac{4x}{R} = 0, \\ &y\left(1 - \frac{y}{R}\right)\left(-\frac{dD}{dy} + D^2\right) - \sigma\left(1 - \frac{2y}{R}\right) \times \\ &\times D - A + 2Ey\left(1 - \frac{y}{R}\right) = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Будемо використовувати так звану логарифмічну теорію збурень по малому параметру $1/R$, коли енергія, параметр розділення та розв'язки шукаються у вигляді степеневих рядів за малим параметром $1/R$ і задовольняють рівняння типу Ріккати (21). Таким чином, отримано із відповідних рекурентних співвідношень остаточно степеневий ряд для симетричного терму основного стану (і виродженого з ним в степеневих наближеннях антисиметричного терму) для довільної вимірності $d > 1$ у вигляді

$$\begin{aligned} U_0(R) = &-\frac{1}{2\sigma^2} - \frac{1}{R} - \frac{1}{R^3}\frac{1}{2}\sigma^2(1 - \sigma^2) - \\ &-\frac{1}{R^4}\frac{1}{8}\sigma^4(1 + \sigma)(5 + 4\sigma) - \frac{1}{R^5}\frac{3}{8}\sigma^4(1 - \sigma^2)(4 - \sigma^2) - \\ &-\frac{1}{R^6}\frac{1}{4}\sigma^6(1 + \sigma)(28 + 5\sigma - 14\sigma^2 - 4\sigma^3) + O\left(\frac{1}{R^7}\right), \end{aligned} \quad (22)$$

де перші чотири доданки збігаються з розвиненнями з роботи [1]. При цьому логарифмічні похідні від хвильових функцій мають в теорії збурень вигляд

$$C(x, R) = \frac{1}{\sigma} + \frac{1}{R^2} \sigma \left(x + \frac{\sigma}{2}(1 + \sigma) \right) - \frac{1}{R^3} \sigma x(x + \sigma) + \frac{1}{R^4} \sigma \left[x^3 + x^2 \frac{\sigma}{2} (3 - 2\sigma) - x \frac{\sigma^2}{4} (6\sigma^2 + 7\sigma - 6) + \frac{3}{8} \sigma^3 (1 - \sigma^2)(2 + \sigma) \right] + O\left(\frac{1}{R^5}\right), \quad (23)$$

$$D(x, R) = \frac{1}{\sigma} - \frac{1}{R^2} \sigma \left(y + \frac{\sigma}{2}(1 + \sigma) \right) - \frac{1}{R^3} \sigma y(y + \sigma) - \frac{1}{R^4} \sigma \left[y^3 + y^2 \sigma \frac{3}{2} + y \frac{\sigma^2}{4} (6 + \sigma) + \frac{3}{8} \sigma^3 (1 - \sigma^2)(2 + \sigma) \right] + O\left(\frac{1}{R^5}\right). \quad (24)$$

Зсув же антисиметричного терму по відношенню до симетричного для довільної розмірності буде мати експоненціальний характер:

$$\delta E = \frac{16}{\sigma^3 \Gamma(\sigma)} \left(\frac{R}{2\sigma} \right)^\sigma e^{-R/\sigma - \sigma} \left[1 + \frac{\sigma}{2R} + O\left(\frac{1}{R^2}\right) \right] \quad (25)$$

у відповідності з [1] та [4, 10] (тут $\Gamma(\sigma)$ – гамма-функція). Зробимо декілька загальних зауважень. По-перше, $2D$ терми (10) з урахуванням (22) мають аномальну притягувальну асимптотику (22) порядку $-1/R^3$. По-друге, асимптотичний ряд (22), і тим більше степеневий ряд біля експоненти в (25) завжди розбіжні за факторіальним законом (що є загальним правилом, як це відомо для широкого кола задач самої різної природи в $3D$ просторі) і такі ряди можуть служити певною оцінкою лише для достатньо великих відстаней. По-третє, з формальної точки зору можна отримати на комп'ютері і значну кількість таких степеневих членів рядів (22)–(25), але за великим рахунком це втрачає сенс через розбіжність рядів. До речі, характер розбіжності таких асимптотичних рядів дещо послаблюється зі зменшенням вимірності простору d . Зокрема, в границі $d \rightarrow 1$ (підкреслимо, що d строго більше одиниці), якщо б це мало фізичний зміст, варто очікувати гарної апроксимації терму лише першими доданками з (22) навіть для помірних значень відстані R .

Звернемо увагу на ще один важливий висновок, що у $2D$ просторі вже в першому порядку теорії збурень між нейтральними атомами в основних станах з нульовими кутовими моментами для потенціалів взаємодії типу Ван-дер-Ваальса на великих відстанях головною асимптотикою є аномальний відштовхувальний закон C/R^5 замість стандартного притягувального закону $-A/R^6$ (в $3D$ просторі). Зокрема, між двома атомами водню в $2D$ просторі (і для довільної вимірності d) матимемо на дуже великих відстанях відштовхувальний потенціал взаємодії квадруполь-квадрупольного та квадруполь-дипольного типу

$$\frac{1}{R^5} \left[\frac{3}{4} \langle \hat{Q}_2(1) \rangle \langle \hat{Q}_2(2) \rangle + \frac{1}{2} \left(\langle \hat{d}(1)^2 \rangle \langle \hat{Q}_2(2) \rangle + \langle \hat{d}(2)^2 \rangle \langle \hat{Q}_2(1) \rangle \right) \right] = \frac{123}{1024} \frac{1}{R^5}.$$

Більше того, така аномальна відштовхувальна асимптотика має суттєве значення для достатньо великої вимірності d , окрім тривимірного простору, де вона зануляється та для d дещо більше і близько до 3, де реалізується слабка притягувальна асимптотика $-C/R^5$. Нагадаємо, що при цьому ще наявний відцентровий бар'єр кінематичного походження $(d-3)(d-1)/4R^2$. Наступний член асимптотики $-A/R^6$, породжений другим порядком теорії збурень за диполь-дипольною взаємодією, є завжди притягувальним для довільної вимірності i , скоріше всього, константа A може бути значно більшою від константи в порядку $-C/R^5$, так що прояв відштовхувальної асимптотики у зв'язаних станах для малої вимірності може бути сильно поданим. Це підкріплюється ще наявністю доцентрового протягування кінематичного походження.

Окремо звернемо увагу на те, що третій, п'ятий та частина від всіх наступних членів при непарних степенях за оберненим радіусом у (22) є внесками від першого порядку теорії збурень і визначаються середніми за хвильовою функцією одноцентрової задачі від квадруполь (доданок порядку $1/R^3$ у (22), який в загальному порядку зануляється лише в $3D$ просторі), октуполь (доданок порядку $1/R^5$), мультиполь шостого порядку (частина доданку порядку $1/R^7$). Dodanok порядку $1/R^4$ є внеском другого порядку теорії збурень і відображає диполь-дипольну взаємодію, доданок порядку $1/R^6$ є суперпозицією в другому порядку

теорії збурень внеску від диполь-октупольної взаємодії та квадруполь-квадрупольної взаємодії, частина порядку $1/R^7$ зобов'язана внеску третього порядку теорії збурень від диполь-квадрупольної взаємодії, і т. д. Дійсно, оскільки для великих відстаней між центрами R маємо мультипольне розвинення

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} = \frac{1}{R} \sum \left(\frac{r}{R}\right)^k P_k \left(\frac{\mathbf{r}\mathbf{R}}{rR}\right) = \frac{1}{R} \left(1 + \frac{\hat{d}}{R} + \frac{\hat{Q}_2}{2R^2} + \sum \frac{\hat{Q}_k}{R^k}\right), \quad (26)$$

де P_k – поліноми Лежандра від косинуса кута $\cos(\phi) = (\mathbf{r}\mathbf{R})/|\mathbf{r}||\mathbf{R}|$, $\hat{d} = z = r \cos(\phi)$ – оператор дипольного моменту, $\hat{Q}_2 = (3z^2 - r^2)$ – оператор квадрупольного моменту, $\hat{Q}_k = r^k P_k(\cos(\phi))$ – оператори вищих мультипольних моментів. Тоді середні за сферично-симетричною кулонівською хвильовою функцією основного стану в d -вимірному просторі

$$\psi_0(r) = B e^{-r/\sigma} \quad (27)$$

від парних мультипольних моментів будуть взагалі-то відмінними від нуля. Квадрупольний момент буде (на це вже вказано у роботі [5]):

$$\langle \hat{Q}_2 \rangle = \langle (3z^2 - r^2) \rangle = \frac{(3-d)(1+d)(d-1)^2}{16} \quad (28)$$

і для $2D$ простору (як і в інтервалі $1 < d < 3$) квадрупольний момент є додатним (система видовжена вздовж осі z), а для $d > 3$ – від'ємний (система сплюснута вздовж z) і зростає по модулю по закону z^4 . Цікаво, що квадрупольний момент і всі мультипольні моменти прямує до нуля, якщо вимірність простору прямує до одиниці, що є наслідком колапсу. Наступний, октупольний момент залежно від вимірності d має вигляд

$$\langle \hat{Q}_4 \rangle = \left\langle \frac{1}{8} (35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4) \right\rangle = \frac{3(d-1)^4(1+d)(9-d^2)(5-d)}{2048} \quad (29)$$

і занулюється для вимірності простору $3D$ і $5D$, залишаючись додатним для $1 < d < 3$ і від'ємним для $3 < d < 5$ (як і всі парні мультипольні моменти). Потім, для $d > 5$ октупольний момент $\langle Q_4 \rangle$

знову додатний. Загальна формула для ненульових парних мультипольних моментів в основному стані така

$$\langle \hat{Q}_{2n} \rangle = \frac{(2n-1)!!}{2^{5n} n!} (d-1)^{2n} (d+1) (3^2 - d^2) \times \times (5^2 - d^2) (7^2 - d^2) \dots ((2n-1)^2 - d^2) (2n+1-d). \quad (30)$$

Наслідком загальної формули (30) є той факт, що мультипольні моменти $\langle \hat{Q}_{2n} \rangle$ в залежності від вимірності простору d занулюються для непарних вимірностей, якщо $d \leq 2n+1$ і n разів осцилюють при $d > 2n+1$, а для парних вимірностей $d = 2n$ вони завжди є ненульовими. Таким чином, лише у $3D$ просторі (та формально для $1D$ простору внаслідок колапсу) всі середні на сферично-симетричних хвильових функціях від мультипольних моментів будуть нулями, а для парних вимірностей (та інших непарних та фрактальних вимірностей) – це не так. Для $5D$ простору крім квадруполя (який є від'ємним) всі мультиполі в сферично-симетричному полі занулюються, для $7D$ всі мультиполі занулюються окрім квадруполя (який є від'ємним) і октуполя (який є додатним), і т. д. Зауважимо також, що середнє від мультипольного розвинення (26) представляється розбіжними асимптотичними рядами (розбіжними факторіально) і зі зростанням вимірності d характер розбіжності зростає.

Аналогічні закономірності спостерігаються і для середніх мультипольних моментів у збуджених станах. Так, для першого радіально збудженого стану кулонівська хвильова функція

$$\Psi_1(r) = B \left\{1 - \frac{r}{\sigma(\sigma+1)}\right\} \exp\left\{-\frac{r}{\sigma+1}\right\}. \quad (31)$$

Кутова частина залишається такою самою як і для основного стану і квадрупольний момент буде

$$\langle 1 | \hat{Q}_2 | 1 \rangle = \frac{(d+1)^2(d+11)(3-d)}{16}, \quad (32)$$

а октупольний момент такий

$$\langle 1 | \hat{Q}_4 | 1 \rangle = \frac{3(d+1)^4(d+29)(3^2-d^2)(5-d)}{128} \quad (33)$$

зі всіма загальними закономірностями, аналогічними основному стану. Для стану з одиничним

кутовим моментом (P стан), коли хвильова функція одноцентрової задачі

$$\Psi_P(r) = Bz \exp \left\{ -\frac{r}{\sigma + 1} \right\} \quad (34)$$

і енергія $E_1 = -2/(d + 1)^2$, то квадрупольний момент такий:

$$\langle P|\hat{Q}_2|P \rangle = \frac{(d + 1)^2(d + 3)(7 - d)}{16} \quad (35)$$

і очевидно відмінний від нуля для тривимірної задачі. Октупольний момент

$$\langle P|\hat{Q}_4|P \rangle = \frac{3(d + 1)^4(d + 5)(3^2 - d^2)(21 - d)}{2048} \quad (36)$$

і вищі мультипольні моменти також осцилюють і занулюються для все більшої кількості непарних значень d . Знову для парних значень d всі мультиполі є ненульовими.

Окремої уваги заслуговує урахування дипольної взаємодії z/R^2 (другий доданок в (26)) по теорії збурень для $2D$ простору і довільних d у високих порядках по малому параметру $1/R^2$, коли маємо багатовимірну задачу Штарка для атома водню в однорідному електричному полі:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + \epsilon z \right\} \Psi = E\Psi, \quad (37)$$

де $\epsilon \equiv 1/R^2$. Розглянемо зсув енергетичного рівня для основного стану, коли внески по ϵ будуть лише парних степеней – квадратичний ефект Штарка, четвертої степені і т. д. Зауважимо, що квадратичний ефект Штарка вже містився у формулі (22) як четвертий доданок. Як і для тривимірного випадку (див. [12]) в гіперпараболічних координатах реалізується розділення змінних в рівнянні (37) і для незалежного від кутів основного стану маємо одновимірну задачу на сумісність:

$$\begin{aligned} \left(\xi \frac{d^2}{d\xi^2} + \sigma \frac{d}{d\xi} + \frac{E}{2}\xi - \frac{\epsilon}{4}\xi^2 + \beta_1 \right) \chi(\xi) &= 0, \\ \left(\eta \frac{d^2}{d\eta^2} + \sigma \frac{d}{d\eta} + \frac{E}{2}\eta + \frac{\epsilon}{4}\eta^2 + \beta_2 \right) \phi(\eta) &= 0, \\ \beta_1 + \beta_2 &= 1, \end{aligned} \quad (38)$$

яка формально ідентична до рівнянь для тривимірного ефекту Штарка із заміною $1 \rightarrow \sigma = (d -$

$-1)/2$ у доданках перед першою похідною. Після заміни

$$\chi = \exp \left\{ -\int^\xi F(\xi') d\xi' \right\}, \quad \phi = \exp \left\{ -\int^\eta G(\eta') d\eta' \right\} \quad (39)$$

для основного стану лінійні рівняння другого порядку зводяться до системи двох нелінійних рівнянь першого порядку типу Ріккати на сумісність. Система рівнянь (38) досить зручна для розвитку теорії збурень (логарифмічна теорія збурень у вигляді рекурентних співвідношень), якщо

$$\begin{aligned} -\frac{dF}{d\xi} + F^2 - \frac{\sigma}{\xi}F + \frac{E}{2} - \frac{\epsilon}{4}\xi + \frac{\beta_1}{\xi} &= 0, \\ -\frac{dG}{d\eta} + G^2 - \frac{\sigma}{\eta}G + \frac{E}{2} + \frac{\epsilon}{4}\eta + \frac{\beta_2}{\eta} &= 0, \\ \beta_1 + \beta_2 &= 1 \end{aligned} \quad (40)$$

шукати розв'язки у вигляді степеневих рядів з малим параметром ϵ

$$\begin{aligned} F(\epsilon, \zeta) &= \sum_n \epsilon^n F_n(\zeta), \\ G(\epsilon, \eta) &= \sum_n \epsilon^n G_n(\eta) \end{aligned} \quad (41)$$

з коефіцієнтними функціями у вигляді поліномів. Тоді для енергії з урахуванням лише дипольної взаємодії отримаємо ненульові внески в парних порядках теорії збурень (узагальнений закон Штарка):

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{1}{2}\sigma^2 - \frac{1}{R^4} \frac{\sigma^4}{8}(1 + \sigma)(5 + 4\sigma) - \frac{1}{R^8}\sigma^{10}(1 + \sigma) \times \\ &\times (192\sigma^3 + 933\sigma^2 + 1550\sigma + 880) + O\left(\frac{1}{R^{12}}\right). \end{aligned} \quad (42)$$

Очевидно, що другий доданок в (42) збігається з четвертим доданком за малим параметром $1/R$ в формулі (22). Зауважимо, що ряд (42) за малим параметром $1/R^4$ для фіксованих $\sigma = (d - 1)/2$ також розбіжний за факторіальним законом.

З урахуванням отриманих вище результатів для мультиполів у асимптотичних виразах для терму (22) зауважимо, що наявна асимптотика $1/R^3$ (поляризованість першого порядку по теорії збурень) з'являється завдяки квадруполью і є від'ємною (притягувальною) для $1 < d < 3$. Зокрема,

для 2D задачі, а для $d > 3$ така асимптотика додатня (відштовхування). Більше того, чим більша вимірність простору, тим більше відштовхування в асимптотиці $1/R^3$. Член другого порядку по диполь-дипольній взаємодії (поляризованість другого порядку) для основного стану завжди відповідає притягуванню (від'ємний доданок у термі).

Для малих відстаней, де проблема знаходження асимптотик більш ускладнюється (див. [2], ми на цьому тут не будемо зупинятися), терми мають таку поведінку: для симетричного основного стану

$$U_s(R) = -8 + 64R^2 \ln\left(\frac{1}{2}e^C R\right) + O(R^2), \quad (43)$$

де $C = 0,57722$ – стала Ойлера, для найнижчого стану антисиметричного терму

$$U_a(R) = -\frac{8}{9} - \frac{80}{9}R^2 + O(R^4), \quad (44)$$

а для першого збудженого симетричного терму це

$$U_s(R) = -\frac{8}{9} + \frac{64}{27}R^2 \ln\left(\frac{3}{2}e^{C+1}R\right) + O(R^2), \quad (45)$$

4. Апроксимаційні формули для термів

Для зручності використання енергетичних термів наведемо апроксимаційні формули для 2D основного симетричного та антисиметричного термів $V_{s,a}(R)$, які враховують прямі розрахунки, що зображені на рис. 1 та 2, та асимптотичну поведінку термів на малих та великих відстанях, що обговорено у попередньому розділі.

Для симетричного терму в області малих відстаней $R < 0,1$ – використаємо асимптотику [1, 2] $V_s(R) = 1/R - 6 + 64R^2 \ln(1/2e^C R)$, в області ж великих відстаней $R > 6,5$ використаємо асимптотику (22), (25), коли можна покласти

$$V_s(R) = -\frac{3}{32} \frac{1}{R^3} - \frac{21}{256} \frac{1}{R^4} - \frac{135}{2048} \frac{1}{R^5} - \frac{159}{1024} \frac{1}{R^6} - \frac{32}{\pi e} e^{-2R} \left(1 + O\left(\frac{1}{R}\right)\right). \quad (46)$$

Поза цими областями використаємо апроксимаційні формули у вигляді відношення поліномів за відстанню R з урахуванням перших двох асимптотичних членів на малих відстанях та всіх відомих степеневих асимптотик на великих відстанях

$$V_{s,\text{appr}}(R) = \frac{b_0 + b_1 R + b_2 R^2 + \dots + b_{n-2} R^{n-2}}{R(a_0 + a_1 R + a_2 R^2 + \dots + a_n R^n)}. \quad (47)$$

Урахування степеневих асимптотик на великих та малих відстанях та лінійність по параметрах в чисельнику та знаменнику накладає такі додаткові співвідношення:

$$\begin{aligned} b_0 &= a_0, \\ b_1 &= a_1 - 6a_0, \\ b_2 &= a_2 - 6a_1, \\ b_3 &= 1,0, \\ b_{n-2} &= -(3/32)a_n, \\ b_{n-3} &= -(3/32)a_{n-1} - (21/256)a_n, \\ b_{n-4} &= -(3/32)a_{n-2} - (21/256)a_{n-1} - (135/2048)a_n, \\ b_{n-5} &= -(3/32)a_{n-3} - (21/256)a_{n-2} - \\ &\quad - (135/2048)a_{n-1} - (159/1024)a_n. \end{aligned} \quad (48)$$

Параметри a_k, b_i апроксимаційної формули визначимо по χ^2 найкращої підгонки до розрахованого терму в інтервалі $0,1 < R < 6,5$, яке виявилось $1,2 \cdot 10^{-6}$. В (47) достатньо було взяти $n = 9$ і знехтувати останнім аномальним доданком у (46), коли досягалась задовільна апроксимація, при цьому вільними параметрами підгонки були лише 10 параметрів a_k у знаменнику (46), які наведено в табл. 2. Всі параметри в чисельнику (46) були однозначно визначені зі співвідношень (48).

Аналогічна до (47) апроксимаційна формула використана також і для антисиметричного терму

$$\begin{aligned} V_{a,\text{appr}}(R) &= \{b_0 + b_1 R + b_2 R^2 + \dots + b_{n-2} R^{n-2} + \\ &\quad + b_{n-1} 32R^{n+1} \exp(-2R - 1)/\pi\} / \\ &\quad / \{R(a_0 + a_1 R + a_2 R^2 + \dots + a_n R^n)\}, \end{aligned} \quad (49)$$

за виключенням того, що тут врахована аномальна асимптотика (останній доданок з протилежним

Таблиця 2. Апроксимаційні коефіцієнти для симетричного та антисиметричного термів

i	a_i, s	a_i, a	b_i, a
0	0,13241	1,5067	
1	1,84394	0,9674	
2	4,12047	1,3044	
3	1,30497	0,073	
4	1,29747	2,5425	-2,1696
5	0,03477	0,8491	0,4898
6	-0,00581	-0,3083	
7	0,19956	-3,4974	
8	-0,06119	3,0725	1,8518
9	0,01156	0,072605	

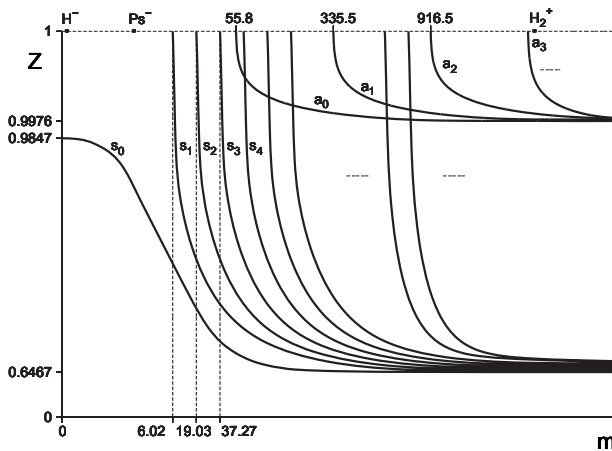


Рис. 4. Діаграми (схематично) стабільності енергетичних рівнів двовимірних систем трьох заряджених частинок

знаком) з (46), а також на малих відстанях маємо тепер асимптотику $V_a(R) = 1/R + 10/9 + O(R^2)$, а це означає, що в (48) у другій та третій формулі замість -6 варто підставити $10/9$. Крім того, в чисельнику (49) для апроксимації антисиметричного терму нами було знехтувано останніми двома співвідношеннями з (48). Інші параметри в чисельнику (49) однозначно задано співвідношеннями (48). Значення апроксимаційних параметрів (при $n = 9$) для антисиметричного терму наведено в табл. 2 (третій та четвертий стовпчики).

Таблиця 3. Значення критичних мас $m_{crit}^{(n)}$ для симетричних станів з урахуванням (другий рядок) та без урахування (третій рядок) аномального доцентрового притягування $-(1/4)/r^2$

Стан n	0	1	2	3	4	5
Повний потенціал	0	6,01	19,03	37,27	59,03	84,43
без $-(1/4)/r^2$	0,75	8,09	22,19	42,67	68,92	99,89
3-част. розр.	0	5,9	20,2	40,9	67,2	98,3

Таблиця 4. Критичні значення мас $m_{crit}^{(n)}$ для антисиметричних станів (підписи аналогічні табл. 3)

Стан n	0	1	2	3	4
Повний потенціал	55,8	335,5	916,5	1741,5	2807
без $-(1/4)/r^2$	128,3	509,2	1155,5	2063,5	3229
3-част. розр.	111	643	1675	3266	5690

Ми сподіваємося, що точність отриманих нами апроксимацій як симетричного, так і антисиметричного термів достатньо висока, що може бути використано в подальших дослідженнях.

Корисно тут зауважити, що в передасимптотичній області великих відстаней симетричний терм двовимірної задачі спадає зі зростанням R по асимптотичному закону $-1/R^3$ і не має підстав для реалізації передасимптотичного закону $-1/R^2$, який свого часу для нейтральних атомів у тривимірному випадку обговорювався в роботі [13].

5. Діаграми стабільності в адіабатичному наближенні Борна–Опенгаймера

Встановлені терми дозволяють згідно з (9) визначити в наближенні БО коливні спектри і для них відповідні діаграми стабільності, які для $2D$ задачі в тричастинкових розрахунках встановлено в роботі [5]. На рис. 4 схематично наведено для симетричних (s_n) та антисиметричних (a_n) станів лінії порогів стабільності в адіабатичному наближенні БО. Відповідні лінії на площині (m, Z) означають, що n -й симетричний стан існує лише справа від відповідної лінії s_n ; а n -й антисиметричний існує справа від лінії a_n . Звичайно, хоча діаграми побудовані для всіх значень співвідношення мас m , нагадаємо, що адіабатичне наближення БО є фізично виправданим лише для молекулярного режиму і результати в області малих m тут наведено лише для більш повного порівняння з прямими тричастинковими розрахунками з [5]. В табл. 3 та 4 наведено також результати розрахунку конкретних значень із простого рівняння (9) критичних величин мас $m_{crit}^{(n)}$ для симетричних та антисиметричних станів, коли $Z = 1$ і енергія $\epsilon = 0$. Ці значення частково показано на рисунку і вони визначають вертикальні асимптоти на рис. 4. При цьому виконано розрахунки простої одновимірної задачі (9) з ефективними потенціалами $V_{eff}(r) = V(r) - (1/4)/(m+1/2)/r^2$ як у повному варіанті (другий рядок в табл. 3 та табл. 4), так і у випадку ігнорування другим доданком, породженим кінетичною енергією $2D$ із (9) доцентрового притягування (третій рядок). В останньому рядку наведені уточненні (на гаусоїдальному базисі з 1300 компонентами) в порівнянні з [5] тричастинкові розрахунки критичних значень $m_{crit}^{(n)}$.

Зупинимося більш детально на порівнянні різних варіантів наборів критичних значень мас m_{crit} . В першу чергу зауважимо, що адіабатичне наближення БО є варіаційною оцінкою зверху для енергій і критичних значень $m_{\text{crit}}^{(n)}$ і тому всі лінії на рис. 4 в наближенні БО повинні напевно лежати вище розрахованих в тричастинковій задачі і тим точніше, чим більше маса m . Із порівняння 2-го та 4-го рядків табл. 3 випливає, що в симетричному стані для тричастинкових розрахунків лише для перших двох станів досягається точність вище наближення БО. Тим самим і в цьому відношенні виправданим з точки зору точності та розуміння закономірностей є розрахунки в адіабатичному наближенні термів, та положень коливань рівнів. Ще в більшій мірі ці зауваження відносяться до аномально слабо зв'язаних антисиметричних станів. Із порівняння другого та четвертого рядків табл. 3 випливає, що навіть суттєво тут уточнені (на базисах порядку 1100 гаусоїдних компонент) в порівнянні з [5] розрахунки є кількісно незадовільними в порівнянні з результатами в наближенні БО. Нарешті, порівняння результатів в табл. 3 та 4 в другому рядку з повним ефективним термом та в третьому рядку, де ми знехтували доцентровим протягуванням $-(1/4)/r^2$ дає нам порядок внеску цього доцентрового притягування в структуру діаграм стабільності. Так, ігнорування доцентрового притягування в симетричному основному стані дає завжди скінченну критичну масу, а для більш високих збуджень зростає все більше різниця між результатами другого та третього рядків. Особливо заслуговує на увагу те, що в $2D$ задачі, в адіабатичному наближенні для основного стану маємо зв'язаний тричастинковий рівень для всіх мас, що впливає із відомого [15, 16] факту, що для двох частинок і для притягувальних потенціалів завжди існує хоча б один слабо зв'язаний стан з експоненційно залежною від потенціалу енергією $E_0 = -(\hbar^2/mr_0^2) \exp(\text{const}/v_0 + C2)$, де v_0 – компонента Фур'є з нульовим імпульсом від притягувального потенціалу $v_0 < 0$.

Що стосується горизонтальних асимптот на рис. 4, то для симетричних та антисиметричних станів лінії порогів в асимптотиці великих мас m визначають мінімальне значення заряду Z_{crit} :

$$Z_{\text{crit}} = \min \{ [1 - RV_s(R)]^{-1} \}. \quad (50)$$

Це дає $Z_{\text{crit}(s)} = 0,64686$ для відповідних $R_{\text{crit}(s)} = 0,89$ в симетричному стані і $Z_{\text{crit}(a)}$ збігається з відповідними тричастинковими розрахунками [5]. Відповідно антисиметричні лінії порогів мають мінімальне $Z_{\text{crit}(a)} = 0,9976$ і $R_{\text{crit}(a)} = 5,7$. Ці значення визначено більш точно, ніж це можна зробити з тричастинкових розрахунків.

Зауважимо також, що з тричастинкових розрахунків з (14) випливає, що антисиметричні зв'язані стани для всіх мас відсутні вже для вимірності $d > 3,337$, оскільки існує відштовхування як за рахунок відцентрового бар'єра $l_{\text{eff}}(l_{\text{eff}} + 1)/R^2$, де ефективний кутовий гіпермомент $l_{\text{eff}} = (d - 3)/2$, так і за рахунок відштовхувальної асимптотики $\langle Q_2 \rangle / 2R^3$ терму (22) з аномальним квадрупольним моментом атома водню. В такому разі зі зростанням вимірності антисиметричний терм стає суттєво відштовхувальним, залишається притягувальним лише для дво- та тривимірної (якщо вважати вимірність цілими числами) задачі. В свою чергу, із тричастинкових розрахунків з (14) випливає, що симетричні стани для всіх мас m відсутні лише для великих вимірностей простору, коли $d > 9$, а зв'язаний стан атомного йона водню відсутній для $d > 6$. Причиною цього знову є наявність відцентрового бар'єра $(d - 3)(d - 1)/4R^2$ та аномального квадрупольного моменту і відштовхування $\langle Q_2 \rangle / 2R^3$.

Нарешті визначимо ще, що для критичних мас $m_{\text{crit}(s)}$ різних станів розрахунки в наближенні БО можуть бути апроксимовані квадратичним законом залежно від номера стану, як це мало місце [5] для тривимірної задачі. Так, для симетричних станів маємо:

$$m_{\text{crit}(s),n} = 2,47(n + 1)^2 - 3,3, \quad (51)$$

що є значно більш точною (особливо для високих збуджених станів), ніж апроксимаційна формула з тричастинкових розрахунків [5]. Загальна константа при n^2 в (51) визначається як асимптотика квазікласичного наближення

$$m_{\text{crit}} = (\pi/J)^2 n(n + 1), \quad (52)$$

де квазікласичний інтеграл (з ігноруванням доцентрового притягування):

$$J = 1,84785$$

і відповідно

$$\left(\frac{\pi}{J}\right)^2 = 2,89$$

визначається лише від'ємною частиною терму. Аналогічно для антисиметричних критичних станів маємо апроксимацію

$$m_{\text{crit}(s),n} = 138,6n(n+1) + 51, \quad (53)$$

а з квазікласичного наближення для антисиметричних станів

$$\left(\frac{\pi}{J}\right)^2 = 129,845.$$

Зауважимо, що квазікласична оцінка для асимптотики енергетичних рівнів у двовимірному випадку не є повністю обґрунтованою і існують принципові проблеми оцінок квазікласичних інтегралів як на великих, так і на малих відстанях за рахунок доцентрового притягування $-1/(4R^2)$.

Як наслідок цих апроксимацій з адіабатичного наближення впливає, що для молекулярного йона водню H_2^+ (з масою $m = 1836,152701$) в симетричному стані будемо мати близько 26 збуджених рівнів, а в антисиметричному стані всіх станів чотири.

6. Заключні зауваження

У підсумку відзначимо, що виконаними дослідженнями в наближенні Борна–Опенгаймера для трьох заряджених частинок встановлено низку аномальних закономірностей для двовимірного простору та просторів довільної вимірності. В загальному для $2D$ простору мультипольні розклади для кулонівських потенціалів у сферично-симетричному полі є ненульовими, як і ненульовими є квадрупольний, октупольний та інші мультипольні моменти в d -вимірних задачах. В $2D$ задачі квадрупольний момент атома водню є додатним і породжує притягувальну асимптотику для терму основного стану порядку $-1/R^3$, а для $3D$ задачі такий внесок є нульовим. Встановлено тим самим, що поляризованість атома водню в $2D$ просторі має місце уже в першому порядку теорії збурень. Отримано і проаналізовано вирази для вищих мультипольних моментів в просторах довільної вимірності. Показано, що антисиметричні терми тріонів XXY є притягувальними лише для дво-

та тривимірних задач і існує таке критичне значення вимірності простору $d_{\text{crit.}} = 3,337$, коли для $d > d_{\text{crit.}}$ зв'язані антисиметричні стани відсутні. Продемонстровано аномальну поведінку асимптотики потенціалів взаємодії типу Ван-дер-Ваальса для нейтральних атомів водню в $2D$ просторі.

В роботі запропоновано для $2D$ термів зручні у використанні апроксимаційні формули. В адіабатичному наближенні Борна–Опенгаймера отримано діаграми стабільності для $2D$ простору, проаналізовано основні характерні асимптотики для ліній порогів стабільності тріонів XXY , що узгоджуються з отриманими раніше діаграмами стабільності у тричастинкових розрахунках.

Автори висловлюють подяку М.В. Кузьменку за участь у виконанні даних досліджень на початковому етапі, а також Б.Є. Гринюку за корисні обговорення ефективних схем чисельних розрахунків.

1. Д.І. Бондар, В.Ю. Лазур, І.М. Шваб, С. Халупка, ЖФД **9**, 304 (2005).
2. Д.И. Бондарь, М. Гнатич, В.Ю. Лазур, ТМФ **148**, 269 (2006).
3. Т.К. Ребане, А.В. Филинский, ЯФ **60**, 1985 (1997).
4. І.В. Сименюг, Ю.М. Бідасюк, М.В. Кузьменко, В.М. Хряпа, УФЖ **54**, 881 (2009).
5. І.В. Сименюг, В.В. Михнюк, М.В. Кузьменко, УФЖ **58**, 290 (2013).
6. M.A. Lampert, Phys. Rev. Lett. **1**, 450 (1958).
7. K. Kheng *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 1752 (1993).
8. И.В. Комаров, Л.И. Пономарев, С.Ю. Славянов, *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции* (ФМ, Наука, Москва, 1970).
9. Л.В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ, **20**, 716 (1979).
10. Y. Suzuki and K. Varga, *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems* (Springer, Berlin, 1998).
11. P. Duclos, P. Stovicek, and M. Tusek, J. Phys. A **43**, 474020 (2010).
12. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика* (ФМ, Москва, 1963).
13. D. Yiwu, Z. Guanghui, B. Chengguang *et al.*, Sci. China A **39**, 317 (1996).
14. Д.А. Киржниц, Ф.М. Пеньков, ЖЭТФ **85**, 80 (1983).
15. L.V. Bruch and J.A. Tjon, Phys. Rev. A **19**, 425 (1979).
16. I.V. Simenog, preprint ITP-80-12E (Institute for Theoretical Physics, Kiev, 1980).

Одержано 28.10.13

И.В. Симоног, В.В. Михнюк, Ю.М. Бидасюк

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ТЕРМЫ
И ДИАГРАММЫ СТАБИЛЬНОСТИ
ДЛЯ 2D ЗАДАЧИ ТРЕХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Резюме

Для двумерных кулоновских систем типа симметричных трионов XXY в вариационном подходе получены симметричный и антисимметричный термы. Дано качественное объяснение диаграмм стабильности и определенных аномалий в $2D$ пространстве на основе адиабатического приближения Борна–Оппенгеймера. Проведен анализ полученных для произвольной размерности пространства асимптотик энергетических термов на больших расстояниях и предложены аппроксимационные формулы для $2D$ термов. Установлена аномальная зависимость мультипольных моментов от размерности пространства в случае сферически симметричного поля. Проведено количественное сравнение основных результатов для $2D$ и $3D$ задач двух кулоновских центров.

I. V. Simenog, V. V. Mikhnyuk, Yu. M. Bidasjuk

ENERGY TERMS AND STABILITY
DIAGRAMS FOR THE 2D PROBLEM
OF THREE CHARGED PARTICLES

Summary

Symmetric and antisymmetric terms have been obtained in the framework of the variational approach for two-dimensional ($2D$) Coulomb systems of symmetric trions XXY . Stability diagrams and certain anomalies arising in the $2D$ space are explained qualitatively in the framework of the Born–Oppenheimer adiabatic approximation. The asymptotics of energy terms at large distances obtained for an arbitrary space dimensionality are analyzed, and some approximation formulas for $2D$ terms are proposed. An anomalous dependence of multipole moments on the space dimensionality has been found in the case of a spherically symmetric field. The main results obtained for the $2D$ and $3D$ problems of two Coulomb centers are compared.