

I.V. СИМЕНОГ, В.В. МИХНЮК, М.В. КУЗЬМЕНКО

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

УМОВИ СТАБІЛЬНОСТІ ДВОВИМІРНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ ТРЬОХ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК

УДК 539

Досліджено умови існування симетричних та антисиметричних зв'язаних енергетичних рівнів (умови стабільності) на площині маса-заряд (m, Z) для двовимірних кулонівських систем трьох заряджених частинок, коли розглядаються дві тотожні частинки одного сорту, а третя частинка іншого сорту. Високоточні тричастинкові чисельні розрахунки виконано на основі стохастичного варіаційного методу з гаусоїдними базисами. Встановлено низку аномальних ефектів у поведінці характерних відстаней між частинками та наявності ненульового квадрупольного моменту у двовимірному полярно-симетричному полі. Виконано систематичне порівняння результатів дослідження для дво- та тривимірних систем. Для декотрих еталонних систем трьох частинок отримано енергії, розміри, розподіли густини та кореляційні функції.

Ключові слова: три заряджені частинки, двовимірні системи, стабільність, варіаційний метод, структурні функції

1. Вступ

Інтерес до двовимірних квантових систем виникає під час дослідження тонких плівок, що складаються з одного, чи декількох атомних шарів, дефектів у твердих тілах, фізики графену та при вивченні самих різноманітних поверхневих явищ у конденсованих середовищах. І в загальному плані для більш глибокого розуміння різноманітних фізичних закономірностей принципового значення набуває вивчення залежності фундаментальних фізичних характеристик від розмірності простору та відмінність основних закономірностей від тривимірних задач. Крім того, у різних підходах виникає потреба розглядати крім елементарних кулонівських систем фундаментальних частинок ще різноманітні системи квазічастинок та екситонів, коли природно можна вар'ювати фізичні параметри мас та зарядів. Залежність від розмірності простору легко виявити для найпростіших кулонівських систем двох заряджених частинок, де задача допускає явний аналітичний розв'язок. Наступний крок за складністю полягає у вивченні загальної задачі трьох заряджених частинок типу тріонів ХХУ (див. [1]), де на сьогодні маємо можливість досягти прецизійної точності досліджень. Для три-

вимірного простору загальна задача трьох заряджених частинок є в значній мірі вже дослідженою (див. [2, 3]).

У даній роботі розглянуто загальні умови можливого існування зв'язаних станів для трьох заряджених частинок на площині, встановлено діаграми для порогів стабільності і виявлено певні аномальні закономірності для двовимірних кулонівських систем.

2. Постановка задачі та методи дослідження

Розглянемо двовимірні системи для симетричних тріонів, що складаються з двох тотожних частинок з масами $m_1 = m_2 = m$ та зарядами $Z_1 = Z_2 = 1$ і третьою частинкою з масою $m_3 = M$ і протилежним за знаком зарядом $Z_3 = -Z$ (будемо використовувати атомні одиниці, коли $\hbar = e^2 = 1$) з гамільтоніаном

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

У роботі буде розглядатися лише нульовий повний кутовий момент і в більшості подальших розрахунків без втрати загальності можна прийняти $M = 1$. Приймемо, як і в попередній роботі [3], за визначення умов стабільності квантової системи у відповідному стані (умови існування зв'язаних станів)

той факт, коли енергія цього стану системи лежить нижче енергії основного стану (порога) найбільш стабільної підсистеми. У випадку трьох частинок з гамільтоніаном (1) умови стабільності квантової системи трьох частинок в n -му стані відносно розпаду (123) \rightarrow (23) + (1) такі:

$$E_n(3; m, Z) \leq E_0(2; m, Z). \quad (2)$$

Тут $E_n(3; m, Z)$ – розрахункова енергія n -го стану трьох частинок з (1). Порогова енергія основного стану двочастинкової підсистеми, очевидно, знаходиться явно аналітично

$$E_0(2; m, Z) = -\frac{2mZ^2}{m+1} \frac{1}{(d-1)^2}, \quad (3)$$

де d – значення розмірності простору. Відзначимо, що енергія зв'язку двох заряджених частинок зростає зі зменшенням значення розмірності і стає невизначеною для одновимірного випадку (настає колапс для основного стану), а тим більше для потенціалу $-1/r$ основний стан не можна визначити для фрактальної розмірності менше одиниці. Для $2D$ задачі двох частинок енергія зв'язку в 4 рази перевищує енергію зв'язку $3D$ задачі.

Дослідження зв'язаних станів тричастинкової системи (1) виконаємо у рамках варіаційного методу Гальборкіна з гаусоїдним базисом (позначення аналогічні тривимірній задачі [3]):

$$\phi_i(r_{12}, r_{13}, r_{23}) = \exp \{-a_i r_{12}^2 - b_i r_{13}^2 - c_i r_{23}^2\}. \quad (4)$$

Тоді повна хвильова функція з нульовим кутовим моментом представляється як

$$\psi(r_{12}, r_{13}, r_{23}) = \sum_{i=1}^K N_i \hat{S} \phi_i(r_{12}, r_{13}, r_{23}), \quad (5)$$

де \hat{S} – оператор симетризації відносно перестановок 1-ї та 2-ї тотожних частинок, а K – кількість базисних функцій.

Енергетичний спектр і відповідні симетризовані тричастинкові хвильові функції (точніше, лінійні коефіцієнти розкладу N_i , або вектори станів) знаходяться із розв'язків лінійних алгебраїчних рівнянь на власні значення

$$\sum_{l=1}^K N_l \left\{ \langle \hat{S} \phi_k | \hat{H} - E | \hat{S} \phi_l \rangle \right\} = 0, \quad k = \overline{1, K}, \quad (6)$$

де енергетична матриця на базисних функціях (4) для довільної розмірності простору $d \in$ такою:

$$\begin{aligned} \langle \hat{S} \phi_i | \hat{K} + V - E | \hat{S} \phi_j \rangle &= \left(1 + s \hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i) \right) \times \\ &\times \left\{ d \frac{1}{D^{d/2+1}} \left[\frac{2}{m} a_i a_j (b+c) + \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \times \right. \right. \\ &\times (b_i b_j (a+c) + c_i c_j (a+b)) + \frac{1}{m} (b(a_i c_j + a_j c_i) + \\ &+ c(a_i b_j + a_j b_i)) + \frac{1}{M} a(b_i c_j + b_j c_i) \left. \right] + \\ &+ \frac{\Gamma(d-1/2)}{\Gamma(d/2)} \frac{1}{D^{(d-1)/2}} \times \\ &\times \left[\frac{1}{\sqrt{b+c}} - Z \left(\frac{1}{\sqrt{a+c}} + \frac{1}{\sqrt{a+b}} \right) \right] - E \frac{1}{D^{d/2}} \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

де D – визначник відповідної квадратичної форми, що діагоналізується при взятті інтегралів з гаусоїдами

$$D = ab + ac + bc. \quad (8)$$

Тут $a = a_i + a_j$, $b = b_i + b_j$, $c = c_i + c_j$, а $\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i)$ – оператор перестановки відповідних параметрів, $\Gamma(x)$ – стандартна гама-функція, $s = \pm 1$ – для симетричних та антисиметричних станів відносно перестановок координат 1-ї та 2-ї тотожних частинок. Всі розрахунки тут будемо виконувати лише для $d = 2$ (двовимірний простір) і частково для $d = 3$ (тривимірний простір), але для загальності приведено енергетичну матрицю для довільної розмірності включно з фрактальною.

Наступний практично важливий крок у варіаційних розрахунках полягає у виборі оптимальної схеми мінімізації енергії за нелінійними варіаційними параметрами $\{a, b, c\}$. Ми систематично використовували певні варіанти стохастичної версії (див., наприклад, [3–5]) мінімізації енергії певного стану за варіаційними параметрами. Виявилось, що найбільш оптимальною стратегією нарощування базису хвильових функцій відносно часових затрат і точності розрахунків є збільшення кількості базисних функцій на одиницю на кожному кроці зі стохастичною вибіркою для варіаційних параметрів базисної функції, яка додається, а решта нелінійних параметрів у головному були замороженими. Вибірка змінювалась від декількох тисяч

(на початку нарощування базису) до декількох сотень (коли вже і базис був із декількох сотень функцій). При цьому розмірність базису коливалась від 600–700 до 1000 і точність досягала краще частки відсотка. Наголосимо також, що для отримання найкращої точності енергій кожного окремого тричастинкового стану подібні оптимізаційні схеми можна використовувати незалежно для кожного стану, що дуже важливо з практичної точки зору, коли нас цікавить лише структура енергетичного спектра. При цьому, звичайно, ми отримуємо найкращі значення для енергетичних рівнів, але дещо порушуємо строгу ортогональність відповідних хвильових функцій.

3. Діаграми для порогів стабільності

Сформулюємо в першу чергу головний результат даної роботи, який полягає в отриманні загальних умов існування зв'язаних станів (діаграми стабільності) $2D$ систем трьох заряджених частинок з гамільтоніаном (1) залежно від параметрів маси m та заряду Z . Ми також детально порівняємо такі діаграми стабільності з відповідними діаграмами стабільності $3D$ задачі, отриманих у роботі [3].

Для $2D$ задачі перш за все зауважимо, що для $Z < 0$ (відштовхування) зв'язок відсутній, а для $Z > 1$ і будь-якій масі $m > 0$, як і в $3D$ випадку, кількість зв'язаних станів є безмежною. Дійсно, у безполяризаційному кластерному варіаційному наближенні, коли хвильова функція (х.ф.) трьох частинок має вигляд добутку х.ф. основного стану підсистеми з двох частинок (2 і 3) на х.ф. першої частинки відносно центра тяжіння двох інших:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3,) \approx \exp \left\{ -\sqrt{\frac{2m}{m+1} |E_0(2, m, Z)| r_{23}} \right\} f(r), \quad (9)$$

то по координаті $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \frac{m\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3}{m+1}$ ефективний потенціал взаємодії буде мати асимптотику кулонівського потенціалу притягування:

$$V_{\text{eff.}}(r) \simeq -\frac{Z-1}{r} - \frac{(d+1)(3-d)(d-1)^2}{32Z^2} \times \left(Z - \frac{1}{m^2} \right) \frac{1}{r^3} + \dots, \quad (10)$$

де d – розмірність простору. Тоді, очевидно, спектр для $Z > 1$ навіть в цьому наближенні зверху є безмежним (аналог теореми Като у $3D$ просторі). Важливо зазначити тут, що для $3D$ задачі асимптотика потенціалу $V_{\text{eff.}}(r)$ є кулонівською з експоненційною точністю. У $2D$ ж задачі головні поправки до кулонівської асимптотики *степеневі*, оскільки *квадрупольний момент*

$$Q_2 = \langle (3z^2 - r^2) \rangle = (d+1)(3-d)(d-1)^2 \times \left(1 + \frac{1}{m} \right)^2 \frac{1}{16Z^2} \quad (11)$$

(і всі мультипольні моменти парного порядку) відмінний від нуля навіть в полярно-симетричному полі. Цікаво також, що у молекулярному режимі $m \gg 1$ поправка $1/r^3$ в (10) для $d < 3$ є притягувальною, а для $d > 3$ – відштовхувальною. В атомному ж режимі $m \ll 1$ – відповідь протилежна.

Більш складною є область проміжних зарядів $0 < Z < 1$ (зауважимо, що нецілі значення заряду допустимі, оскільки тут розглядається відносний заряд двох сортів частинок, чи квазічастинок), де ми виконали високоточні розрахунки порогів стабільності і результати представлено на площині (m, Z) (рис. 1) у вигляді діаграм порогів. Лінії порогів стабільності симетричних s_i та антисиметричних a_i відносно перестановки тотожних частинок показують (схематично), що даний зв'язаний стан існує вище певної лінії. Як видно з рис. 1, в атомному режимі (одноцентрова задача) $m \ll M = 1$, як приклад, атомний йон водню H^- (зв'язану систему (pee) ми позначимо традиційно) та йон позитронію Ps^- (зв'язана система (eee^+)) існує у двовимірному випадку лише один симетричний зв'язаний стан для $Z > Z_0 = 0,8085$ (і $m = 0$). У порівнянні з $3D$ випадком, коли $Z_0 = 0,911$ [3], ми бачимо, що для $2D$ задачі трьох частинок існують ширші можливості для появи зв'язаного стану. Основний симетричний стан існує для всіх мас m . В табл. 1 для більшої конкретності ще наведено для кривої s_0 деякі характерні точки, які отримано в результаті наших розрахунків. Зауважимо, що лінія порога стабільності для основного стану немонотонна – максимум досягається для $m = 0,285$, що в 1,93 раза менше від $3D$, а само значення Z_0 при цьому в 1,14 менше за тривимірне. В області максимуму кривої s_0 утворення зв'язаного стану найменш вигідно. У випадку молекулярного режиму

$m \gg 1$ (двоцентрова задача), коли область існування зв'язаних станів у $2D$ задачах ширше, в границі $m \rightarrow \infty$ і для $Z > Z_{s(\text{crit.})}(2) = 0,64656$ (а для $3D$ задачі $Z_{s(\text{crit.})}(3) = 0,8101$) кількість коливних симетричних зв'язаних станів прямує до безмежності. У випадку антисиметричних відносно перестановок тотожних частинок у молекулярному режимі аналогічно всі лінії порогів лежать вище критичного значення $Z_{a(\text{crit.})} = 0,9977$, що достатньо близько до аналогічного тривимірного значення $Z_{a(\text{crit.})} = 0,9997$. Наголосимо, що коливні антисиметричні зв'язані стани існують лише в області $Z \sim 1$.

Цікаві закономірності маємо у верхній частині діаграм стабільності, коли $Z = 1$. У цьому випадку кожний новий коливний енергетичний рівень з'являється для все зростаючих критичних значень мас, що наведені для симетричних станів в табл. 2, а для антисиметричних станів – в табл. 3. Тут варто відзначити загальне правило, що точність розрахунків наведених в цих таблицях значень погіршується для більш високих збуджень. Для більшої конкретності в табл. 2 (третьій рядок) ще наведено відношення критичних значень для $2D$ та $3D$ просторів, які в середньому близькі до 0,68, звідки видно ступінь більшої зв'язності у двовимірних задачах. Зауважимо в першу чергу, що якщо основний зв'язаний стан існує для всіх мас m , то 1-й збуджений стан s_1 для $Z \leq 1$ і $2D$ простору з'являється лише для $m \geq 6,0$. Відзначимо (табл. 2), що для симетричних станів лінії порогів стабільності досить суттєво зсунуті у бік менших мас порівняно із тривимірною задачею (аналогічні закономірності мають місце і для антисиметричних станів). Корисно відзначити, що критичні значення мас задовольняють квадратичний закон від номера стану, як це мало місце [3] і для $3D$ простору. Але, на відміну від $3D$, де цей закон обґрунтовано з квазикласичних умов квантування, у випадку $2D$ задачі квазикласика вимагає істотних модифікацій і безпосередньо не може бути використана. Наведемо апроксимаційні формули для критичних значень мас, коли з'являються нові зв'язані симетричні та антисиметричні стани:

$$m_{n(\text{crit.})}^{(s)} \approx 3,4n(n+1),$$

$$m_{n(\text{crit.})}^{(a)} \approx 367n(n+1) + 156. \quad (12)$$

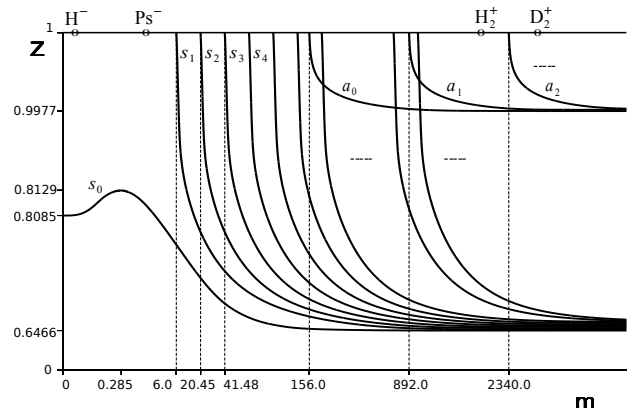


Рис. 1. Діаграми (схематично) стабільності енергетичних рівнів двовимірних систем трьох заряджених частинок

Таблиця 1. Залежність $Z_0(m)$ для лінії порогів стабільності основного стану (s_0)

m	Z_0	m	Z_0
0	0,80853	0,5	0,81177
0,001	0,80857	1,0	0,80487
0,01	0,80890	2,0	0,78953
0,1	0,81136	5,0	0,75817
0,2	0,81262	10,0	0,73234
0,28	0,8128865	10^4	0,64835
0,285	0,8128868	10^6	0,64668
0,3	0,8128793	10^8	0,64656

Таблиця 2. Критичні значення мас для симетричних станів ($Z = 1$)

Номер стану n	0	1	2	3	4	5
$m_{n(\text{crit.})}^{(s)}$	0,0	6,0	20,45	41,48	68,56	101,2
$\frac{m_{n(\text{crit.})}^{(s)}(2D)}{m_{n(\text{crit.})}^{(s)}(3D)}$	–	0,63	0,69	0,70	0,69	0,68

Зауважимо, що такі квадратичні за номером стану апроксимації тим точніші, чим вищий збуджений рівень. Корисно також відзначити, що апроксимаційні формули типу (12) для антисиметричних станів в $2D$ і $3D$ просторах містять коефіцієнти, які майже у два рази відрізняються, що свідчить про лінійну залежність $m_{n(\text{crit.})}^{(a)}$ від $(d-1)$. З розрахунків (табл. 3) і з апроксимаційної формули (12) випливає, що відношення критичних

мас $2D$ до $3D$ задачі для антисиметричних станів близьке до 0,51.

Вгорі на рис. 1 відмічено місця для певних еталонних систем, звідки якісно видно наявну кількість зв'язаних станів. З апроксимаційних формул (12) видно, що для молекулярного йона водню H_2^+ (зв'язана система (*ppe*) і маса $m \sim 1836$) симетричних станів близько 24, а антисиметричних станів 2. Імовірно, що у $2D$ для молекулярного йона дейтерію D_2^+ симетричних станів буде близько 33, а антисиметричних станів буде 3.

4. Середньоквадратичні відстані та структурні функції

Визначимо середньоквадратичні відстані R_{ik} (с.к.в.) між частинками:

$$R_{ik} = \left(\langle \Psi | (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k)^2 | \Psi \rangle \right)^{1/2}, \quad (13)$$

та середньоквадратичні радіуси R_j (с.к.р.):

$$R_j = \left(\langle \Psi | (\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_{c.m.})^2 | \Psi \rangle \right)^{1/2}, \quad (14)$$

де $\mathbf{R}_{c.m.} = \frac{m(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + \mathbf{r}_3}{2m + 1}$ – координата центра тяжіння трьох частинок. І в базисі (5) маємо у випадку довільної розмірності простору d для відстані R_{12} між тотожними частинками:

$$R_{12}^2 = \frac{d}{2N} \sum_{i,j=1}^K N_i N_j (b+c) \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i) \right) \frac{1}{D^{d/2+1}}, \quad (15)$$

і для відстані між різними частинками R_{13} :

$$R_{13}^2 = \frac{d}{2N} \sum_{i,j=1}^K N_i N_j \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i) \right) \times$$

Таблиця 3. Критичні значення мас для антисиметричних станів (з $Z = 1$)

Номер стану n	0	1	2	3
$m_{n(crit.)}^{(a)}$	156,0	892,0	2340,	4960,
$\frac{m_{n(crit.)}^{(a)}(2D)}{m_{n(crit.)}^{(a)}(3D)}$	0,47	0,51	0,51	0,55

$$\times \left(1 + s\hat{P}(b \leftrightarrow c) \right) \frac{a+c}{D^{d/2+1}}, \quad (16)$$

де повний інтеграл нормування задається як

$$N = \sum_{i,j=1}^K N_i N_j \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i) \right) \frac{1}{D^{d/2}}, \quad (17)$$

а D визначається із (8). Оператор перестановки $\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i)$ в (15), (16) і (17) той самий, що і в (7).

Відзначимо, що між с.к.р. системи (відстань від даної частинки до центра мас всієї системи) та с.к.в. мають місце загальні співвідношення для довільної розмірності простору:

$$R_1^2 = R_2^2 = \frac{1}{(1+2m)^2} [m(m+1)R_{12}^2 + R_{13}^2], \quad (18)$$

$$R_3^2 = \frac{m^2}{(1+2m)^2} [4R_{13}^2 - R_{12}^2]. \quad (19)$$

Легко отримати і обернені співвідношення

$$R_{12}^2 = 4R_1^2 - R_3^2/m^2, \quad (20)$$

$$R_{13}^2 = R_1^2 + (1+1/m)R_3^2. \quad (21)$$

У гаусоїдному базисі вирази типу (15) і (16) мають універсальний вигляд для різних збуджених станів і ці вирази залежать від стану лише через лінійні $\{N_i\}$ та нелінійні $\{a_i, b_i, c_i\}$ варіаційні параметри. До речі, з (18) і (19) видно також, що такого вигляду співвідношення не залежать явно від розмірності простору і завжди повинні виконуватися нерівності $R_{12} < 2R_{13}$ та $R_1 > R_3/2m$. Крім того, з (18) у випадку безмежних мас m отримується очевидне граничне співвідношення $R_1 = R_2 \sim R_{12}/2$, оскільки центр тяжіння всієї системи трьох частинок збігається з центром тяжіння двох важких частинок.

Розглянемо функціональну залежність відстаней R_{12} і R_{13} від маси та заряду. Природно, в $3D$ випадку відстань R_{12} між однаковими частинками, що відштовхуються по закону Кулона, є більшою за відстань R_{13} між частинками з притягуванням [3] (нерівність трикутника). Це має місце для всіх мас і, як приклад, така структура молекулярного йона водню H_2^+ та атомного йона водню H^- . У $2D$ просторі, де суттєво більший зв'язок, для основного симетричного стану виявлено *аномальне* співвідношення для відстаней між тотожними важкими частинками та різними частинками, що

притягуються. Із розрахунків згідно з (15) і (16) отримано, що у $2D$ просторі для симетричних станів у молекулярному режимі для достатньо важких мас m виконується нерівність $R_{12} < R_{13}$ – відстань між важкими однаковими частинками менша за відстань між різними частинками. На рис. 2 для основного стану і $Z = 1$ наведено залежність відповідних відстаней між частинками від значення маси більш важких тотожних частинок. Тоді, зокрема, в молекулярному йоні водню відстань між протонами (два фіксованих центри) дещо менша за відстань між електроном та протоном. Для $Z = 1$ нерівність $R_{12} < R_{13}$ має місце для $m > 540$. На рис. 3 на площині (m, Z) у всіх можливих інтервалах мас і зарядів ми схематично, але з відповідними позначеннями положень асимптотик кривих, представили діаграми, де лінії s_0 і s_1 для основного стану та першого збудженого симетричного стану відповідають рівності відстаней $R_{12} = R_{13}$ і розділяють всю область на дві частини. Так, вище лінії s_0 маємо аномальну нерівність $R_{12} < R_{13}$ і аналогічно для першого збудженого рівня. Для більш високих збуджених рівнів маємо аналогічну картину, коли відповідна лінія s_n зсувається вправо і вгору зі зростанням номера збудження. Що стосується антисиметричних станів, то у всій розумній області площини (m, Z) реалізується нормальна структура, коли $R_{12} > R_{13}$.

Аномальна структура з $R_{12} < R_{13}$ може бути інтерпретована таким чином. Для $2D$ задачі в молекулярному режимі (приклад молекулярного йона H_2^+), коли дві важкі частинки відштовхуються і фактично знаходяться на фіксованій відстані R_{12} (така фіксація відстані більш суттєва порівняно з $3D$ простором через значно більший зв'язок), а легка частинка, яка зв'язує всю систему, швидко рухається лише в площині навколо то одного, то другого центра (в цей час легка частинка знаходиться на значній відстані від першого центра) і в сумі ці відстані становлять R_{13} , що і є більше за відстань між фіксованими центрами. Для легкої частинки відсутні можливості маневру, оскільки вона рухається строго в площині. В той самий час, якщо маса m важких частинок зменшується, то амплітуда руху важких частинок зростає (і зростає відстань між цими частинками) і легка частинка більше часу проводить в проміжку між центрами – тоді відстань R_{13} зрівнюється з відстанню R_{12} і поступово (див. рис. 2) відстань

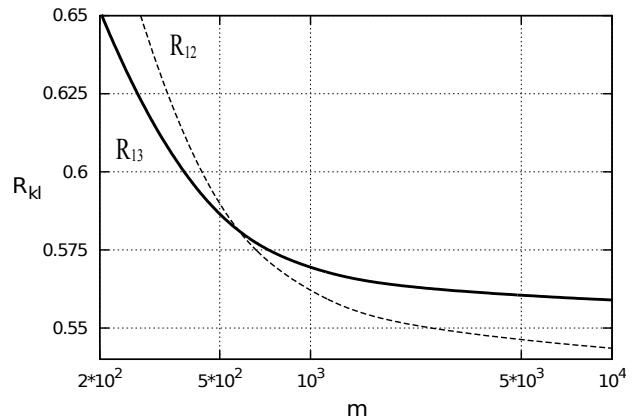


Рис. 2. Залежність с.к.в. між частинками від маси m тотожних частинок ($Z = 1$, основний стан)

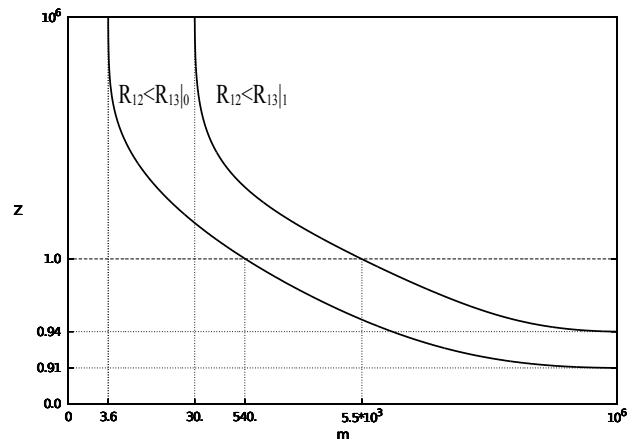


Рис. 3. Залежність $Z_c(m)$ (схематично) за умови $R_{12} = R_{13}$

між різними частинками стає меншою за R_{12} . І нарешті, коли дві тотожні частинки стають легкими (атомний йон водню H^-), то напевно відстань між ними за рахунок відштовхування значно збільшується і має місце нормальна ситуація. У випадку $3D$ задачі (і більшої розмірності), коли зв'язок значно зменшується і амплітуда відносного коливання двох важких частинок значно збільшується, результат є нормальним, коли відстань між однаковими частинками більша за відстань між різними частинками для всіх мас m . При цьому для легкої частинки, яка зв'язує всю систему, є істотна ймовірність за рахунок значної розмірності простору знаходитись в просторі між важкими частинками і завжди $R_{13} < R_{12}$. На-

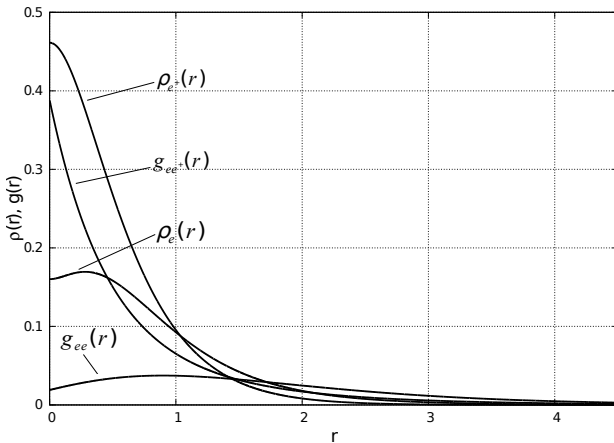


Рис. 4. Структурні функції для основного стану Ps^-

решті, якщо розмірність простору d є фрактальною і прямує до одиниці, то настає колапс і зв'язуюча третя частинка може знаходитися лише в проміжку між тотожними частинками і знову $R_{13} < R_{12}$. Таким чином, наявна немонотонність в цьому аномальному ефекті для співвідношень між відстанями в залежності від зміни розмірності простору d .

Корисно зазначити також деякі закономірності розрахункового плану, пов'язані з використанням стохастичних схем варіаційного методу з гауссідним базисом. Так, характерні с.к.в. для основного стану зі збільшенням кількості базисних функцій, як і енергія цього стану, монотонно зменшуються і прямують до точних значень. Виконується природна закономірність – чим більший зв'язок, тим менші розміри системи згідно з $R \sim 1/\sqrt{|E|}$. Зауважимо також, що для збуджених станів лише енергія монотонно наближається до свого точного значення (варіаційний принцип), в той самий час для розмірів (та інших середніх) можуть бути певні незначні коливання і лише в середньому такі характеристики збігаються до своїх точних значень.

Розглянемо тепер основні структурні функції, такі як розподіли густини частинок та парні кореляційні функції, в різних зв'язаних станах трьох частинок. Розподіли густини частинок

$$\rho_i(r) = \langle \Psi | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i + \mathbf{R}_{c.m.}) | \Psi \rangle \quad (22)$$

визначають ймовірність знаходження i -ї частинки на відстані r від центра мас системи і в гауссідно-

му базисі (4) для довільної розмірності простору d задаються виразами

$$\rho_3(r) = \frac{(1+2m)^d}{\pi^{d/2} m^d N} \sum_{i,j}^K \frac{N_i N_j}{(4a+b+c)^{d/2}} \times \\ \times \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i)\right) \exp\left\{-\frac{(1+2m)^2}{m^2} \frac{D}{4a+b+c} r^2\right\}, \quad (23)$$

$$\rho_1(r) = \frac{(1+2m)^d}{2\pi^{d/2} N} \sum_{i,j}^K N_i N_j \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i)\right) \times \\ \times \left(1 + s\hat{P}(b \leftrightarrow c)\right) \frac{1}{(a+m^2b+(m+1)^2c)^{d/2}} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{(1+2m)^2 D}{a+m^2b+(m+1)^2c} r^2\right\}. \quad (24)$$

Аналогічно парні кореляційні функції

$$g_{kl}(r) = \langle \Psi | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{kl}) | \Psi \rangle \quad (25)$$

визначають ймовірність знайти пару частинок kl на відстані r і мають вигляд

$$g_{12}(r) = \frac{1}{\pi^{d/2} N} \sum_{i,j}^K \frac{N_i N_j}{(b+c)^{d/2}} \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i)\right) \times \\ \times \exp\left\{-\frac{D}{b+c} r^2\right\}, \quad (26)$$

$$g_{13}(r) = \frac{1}{2\pi^{d/2} N} \sum_{i,j}^K N_i N_j \left(1 + s\hat{P}(b_i \leftrightarrow c_i)\right) \times \\ \times \left(1 + s\hat{P}(b \leftrightarrow c)\right) \frac{1}{(a+c)^{d/2}} \exp\left\{-\frac{D}{a+c} r^2\right\}. \quad (27)$$

У всіх виразах (23), (24), (26), (27) через N позначено повний інтеграл нормування (17), D визначаються із (8), а оператор перестановки $\hat{P}(b \leftrightarrow c)$ аналогічний позначенням в (7).

Як приклад радіальної залежності структурних функцій для двовимірних систем розглянемо спочатку розподіли густини частинок та кореляційні функції (рис. 4) в йоні позитронію Ps^- ($Z = 1$ і $m = 1$ відповідає проміжному випадку між атомним та молекулярним режимами). Відзначимо, по-перше, що електронний розподіл густини $\rho_e(r)$ (формула (24)) через відштовхування між

електронами має незначний провал на початку координат (по відношенню до центра мас всієї тричастинкової системи), по-друге, кореляційні функції порівняно з розподілами густини мають значно більш протяжну асимптотичну поведінку і, як наслідок, с.к.в. завжди значно більші с.к.р., по-третє, кореляційна функція двох тотожних електронів $g_{ee}(r)$ (формула (26)) через відштовхування має відчутний провал на малих відстанях. Останній факт поведінки кореляційних функцій є загальним, якщо на малих відстанях ця пара частинок має відштовхування.

Тепер розглянемо розподіли густини частинок у молекулярному йоні водню (H_2^+ , $M = 1$, $m = 1836,152701$). З рис. 5 видно, по-перше, що важкі частинки (протони p) розташовані практично на фіксованій відстані від центра мас, який знаходиться посередині між важкими частинками, в той самий час розподіл густини легкої частинки (електрона e) має максимум на початку координат (відносно центра мас), по-друге, для більшої наочності на рисунку ще зображено вирази $r\rho(r)$, що безпосередньо відповідають ймовірності знаходження відповідних частинок на відстані r і видно, що с.к.р. легкої частинки суттєво більший від с.к.р. важких частинок. На рис. 6 для H_2^+ наведено кореляційні функції. Знову підтверджується, що важкі частинки знаходяться практично на фіксованій відстані, оскільки $g_{pp}(r)$ сильно локалізована на відстані порядку 0,55. В той самий час кореляційна функція різних частинок $g_{pe}(r)$, особливо та, що помножена на r , більш протяжна і характерний її радіус може бути більшим за відстань між однаковими частинками, що вже було обговорено.

Нарешті зазначимо загальні тенденції стосовно структурних функцій зі зміною мас m (і для фіксованого заряду) від дуже малих значень в атомному режимі (або $m = 1$ і дуже велика маса третьої частинки M) до значних m у молекулярному режимі. В атомному режимі (наприклад, атомний йон водню) важка частинка сильно локалізована в околі центра мас і розподіл густини має дельтаподібний вигляд, а два електрони знаходяться на значних відстанях один від одного і від фіксованого центра. При цьому електронний розподіл густини монотонно спадає зі зростанням відстані. Підкреслимо, що в атомному режимі (одноцентрова задача) кореляційна функція між легкою та важ-

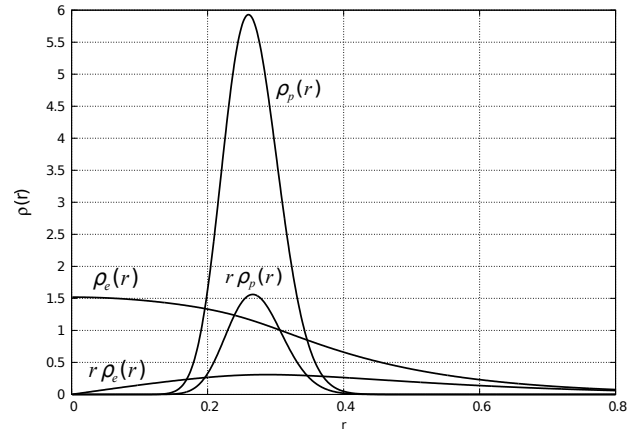


Рис. 5. Розподіли густини для основного стану H_2^+

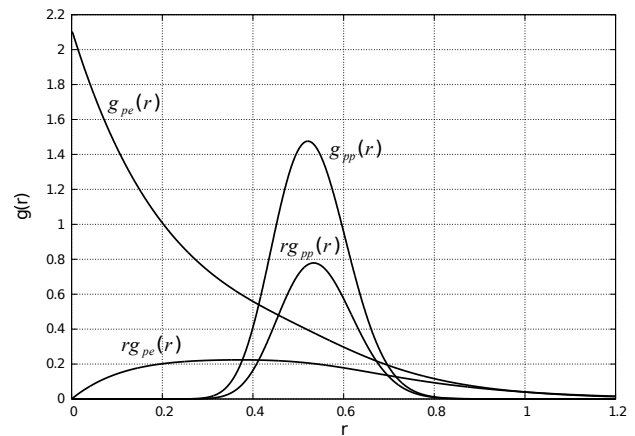


Рис. 6. Парні кореляційні функції для основного стану H_2^+

кою частинками в значній мірі подібна до розподілу густини легкої частинки. В той самий час парна кореляційна функція $g_{ee}(r)$ на малих відстанях через відштовхування значно подавлена і має значну протяжність на великих відстанях. Особливо значною є протяжність кореляцій між легкими частинками в основному стані, коли система близька до двочастинкового розвалу (близько до порогової кривої s_0 на рис. 1). Зі зростанням маси m (зменшення M) центр мас стає все менш фіксованим, а амплітуда коливань двох тотожних частинок стає меншою і для ще більших мас m дві тотожні частинки стають двома фіксованими центрами. Якщо ж $Z > 1$ і маса M велика (наприклад, атом гелію), то в основному стані два електрони знаходяться в полі фіксованого центра, коли міжелектронне відштовхування стає несуттєвим, то-

ді електронні розподіли є монотонно спадаючими зі зростанням відстані і радіус розподілу густини істотно зменшується.

5. Еталонні системи трьох частинок

У цьому розділі ми коротко обговоримо результати розрахунків енергій та розмірів для конкретних еталонних двовимірних тріонів і порівняємо з наявними літературними результатами та тривимірною задачею.

1. Розглянемо в першу чергу молекулярний йон водню H_2^+ (система (ppe) , де $m = 1836,152701$), для якого в табл. 4 наведено розраховані енергії дисоціації $D_n = E_0(2) - E_n(3)$ декількох перших коливних симетричних (s) збуджених станів (згідно з (12) всіх симетричних станів буде 24) та наявних двох антисиметричних (a) станів. В порівнянні з $3D$ задачею [3] в $2D$ просторі для симетричних станів енергії дисоціації майже на порядок більші (близько 8 разів), а для збудженого ан-

тисиметричного стану майже на 4 порядки більше. В табл. 5 (другий рядок) наведено розраховані для основного стану енергії і характерні відстані (енергія основного стану атома водню $E_{0(2D)}(2) = -1,99891$). Дані в цьому параграфі відносно тривимірної системи взято із роботи [3]. Корисно кількісно порівняти ступінь більш сильного зв'язку двовимірних систем порівняно з тривимірними. Виконуються нерівності

$$\frac{E_{0(2D)}(3)}{E_{0(3D)}(3)} = 4,65 > 4, \tag{28}$$

$$\frac{R_{0(2D)}(3)}{R_{0(3D)}(2)} = 1/3,2 < 1/2\sqrt{2}, \tag{29}$$

що відображає більш загальні закономірності відносно зростання зв'язку зі зростанням кількості частинок і відповідне зменшення розмірів. Варто ще раз наголосити на аномальному співвідношенні для с.к.в. у випадку молекулярного режиму, що вже обговорювалося вище – відстань R_{pe} між різними частинками, що притягуються, є дещо більшою за відстань R_{pp} між тотожними важкими частинками, що відштовхуються.

2. Для йона позитронію Ps^- , який є найбільш характерним прикладом системи, яка відповідає проміжному випадку між молекулярним та атомним режимами, маємо лише один слабкозв'язаний стан, що є демонстрацією діаграми стабільності на рис. 1. Розраховані енергія та характерні відстані наведено в табл. 5 (третій рядок). Тут також варто відзначити, що тричастинкова система більш сильно зв'язана від двочастинкової ($E_{0(2D)}(2) = -1,0$) і виконуються нерівності (28) і (29), хоча і менш сильно, ніж для H_2^+ .

Відзначимо, що в роботі [6] отримано також енергію основного стану йона позитронію і результат збігається зі значенням з табл. 5.

3. Наступним тріоном уже атомного характеру розглянемо атомний йон водню H^- , для якого також маємо лише один слабкозв'язаний енергетичний рівень з параметрами в 4-му рядку табл. 5. Для цієї системи характерно одноцентрові закономірності, коли важкий протон знаходиться практично в центрі мас (R_3 дуже мале), а міжелектронна відстань R_{12} відчутно більша за відстань від електрона до протона. Крім того, нерівності (28) і (29) ще менш сильні, ніж для системи Ps^- .

Таблиця 4. Енергії дисоціації найнижчих енергетичних станів H_2^+

Стани n	s_0	s_1	s_2	a_0	a_1
D_n	0,779	0,696	0,615	$1,97 \cdot 10^{-4}$	$1,89 \cdot 10^{-5}$

Таблиця 5. Енергія та характерні відстані для основних станів систем H_2^+ , Ps^- , H^-

$E_{0(2D)}(3)$	R_{12}	R_{13}	R_1	R_3	$E_{0(3D)}(3)$
-2,778	0,5489	0,5611	0,2747	0,4907	-0,59713682
-1,1215948	3,0178	2,1889	1,5988	1,0571	-0,26200507
-2,239	1,646	1,132	1,131	$8,46 \cdot 10^{-4}$	-0,5274458

Таблиця 6. Енергія та характерні відстані для атома He

$E_{0(2D)}(3)$ $E_{0(3D)}(3)$	R_{12}	R_{13}	R_1	R_3
s_0 -11,89811 -2,90330444	0,559954	0,386898	1,131	$7,3195 \cdot 10^{-5}$
a_0 -8,2948 -2,17493011	2,948	2,083	2,083	$4,04 \cdot 10^{-4}$
s_1 -8,2493 -2,14567849	3,437	2,429	2,429	$4,707 \cdot 10^{-4}$

Відзначимо також, що енергія зв'язку H^- слабо залежить від маси ядра (протона) і для маси $M = \infty$ енергія така $E_{0(2D)}(3) = -2,2402$, що узгоджується з результатом із [6].

4. Розглянемо також в $2D$ просторі деякі результати для атома гелію He ($Z = 2$, $m = 1$, $M = 7294,2995$). Перш за все нагадаємо, як це вже було вказано вище, що оскільки $Z > 1$, то спектр для цього атома є безмежним, як для симетричних, так і для антисиметричних станів. Тут ми наводимо конкретні дані лише для перших трьох (симетричних s_0 і s_1 та антисиметричного стану a_0) найнижчих станів (табл. 6), а порогова енергія двох частинок $E_0(2) = -7,99891$. Для атома He роль скінченності маси ядра ще менша. Розрахунок енергії основного стану атома гелію з безмежною масою ядра такий $E_{0(2D)}(3) = -11,89982$, що узгоджується з [7].

Відзначимо, що якщо для основного стану атома гелію зв'язок в $2D$ більше ніж в 4 рази сильніший від $3D$ задачі, то для збуджених рівнів це співвідношення дещо менше і монотонно спадає до одиниці зі зростанням збудження. Зокрема, це має місце для двох частинок, де спектр з нульовим кутовим моментом і розмірністю d такий:

$$E_n(2; m, Z) = - (2mZ^2 / (m + 1)) / (2n + d - 1)^2. \quad (30)$$

Зауважимо, що в енергетичному спектрі атома гелію рівні різної симетрії чергуються, як це має місце [3] і в $3D$ задачі. Крім того, відзначимо, що для атома енергія основного стану відділена від збуджених рівнів відчутним інтервалом, або щільною в спектрі – цей факт є характерним для атомного режиму.

6. Заключні зауваження

У підсумку зазначимо основний результат, яким встановлено умови стабільності на площині маса-заряд для основного та збуджених симетричних і антисиметричних станів з нульовим кутовим моментом двовимірної задачі трьох заряджених частинок. Побудовані діаграми стабільності дозволяють встановити загальну картину наявності зв'язаних станів систем тріонів в $2D$ просторі.

Нетривіальними виявилися структурні особливості як окремих еталонних систем трьох заряджених частинок, так і загальні закономірності залежно від мас та зарядів симетричних тріонів

XXY в $2D$ просторі. По-перше, встановлено, що квадрупольний момент на сферично-симетричних хвильових функціях є нульовим лише в $3D$ просторі, а для двовимірної задачі квадрупольний момент завжди додатний і це породжує притягувальний ефективний мультипольний потенціал взаємодії з асимптотикою $-1/r^3$ навіть для полярно-симетричного поля. По-друге, для трьох заряджених частинок у молекулярному режимі, зокрема для молекулярного йона H_2^+ в $2D$ просторі, виявлено, що відстань між двома протонами, де діє відштовхування, все ж менша за відстань між протоном і електроном, хоча вони і притягуються. Як загально відомо, для тривимірних задач таких аномалій не існує.

Ці питання в подальшому будуть розглянуті в адіабатичному наближенні, де вже на прозорому фізичному рівні буде надано їм належне обґрунтування.

Виконані дослідження мають перспективи вивчення загальних проблем низьковимірних кулонівських систем декількох частинок чи центрів з урахуванням належним чином кореляцій та багаточастинкових ефектів і відповідних симетрій багаточастинкових задач, а також специфіки кулонівських задач в просторах довільної розмірності d , включно з фрактальною.

Робота виконана по цільовій темі 0112U000056 "Мікроскопічні та феноменологічні моделі фундаментальних фізичних процесів у мікро- та макросвіті" програми фундаментальних досліджень Відділення фізики і астрономії НАН України.

1. Д. Бондар, В. Лазур, М. Гнатіч, ЖФД **10**, 1 (2006); Д.И. Бондарь, М. Гнатич, В.Ю. Лазур, ТМФ **148**, 269 (2006).
2. Т.К. Ребане, А.В. Филинский, ЯФ **60**, №11, 1985 (1997).
3. І.В. Сименог, Ю.М. Бідасюк, М.В. Кузьменко, В.М. Хряпа, УФЖ **54**, 881 (2009).
4. Y. Suzuki and K. Varga, *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1998).
5. С.М. Бубін, І.В. Сименог, ЖФД **4**, 124 (2000).
6. E.A.G. Armour, J.-M. Richard, and K. Varga, Phys. Rep. **413**, 1 (2005).
7. L. Hilico, B. Grémaud, T. Jonckheere *et al.*, Phys. Rev. A **66**, 022101 (2002).

Одержано 16.01.13

И.В. Симоног, В.В. Михнюк, М.В. Кузьменко

УСЛОВИЯ СТАБИЛЬНОСТИ ДВУХМЕРНЫХ
КВАНТОВЫХ СИСТЕМ ТРЁХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Резюме

Исследованы условия существования симметричных и антисимметричных связанных энергетических уровней (условия стабильности) на плоскости масса–заряд (m, Z) для двухмерных кулоновских систем трех заряженных частиц, когда рассматриваются две тождественные частицы одного сорта, а третья частица другого сорта. Высокоточные трехчастичные чисельные расчёты выполнены на основе стохастического вариационного метода с гауссоидными базисами. Установлен ряд аномальных эффектов в поведении характерных расстояний между частицами и наличия ненулевого квадрупольного момента в двухмерном полярно-симметричном поле. Выполнено систематическое сравнение результатов исследования для двух- и трехмерных систем. Для некоторых эталонных систем трех частиц получены энергии, размеры, распределения плотности и корреляционные функции.

I.V. Simenog, V.V. Mikhnyuk, M.V. Kuzmenko

THE CONDITIONS OF STABILITY
OF TWO-DIMENSIONAL QUANTUM
SYSTEMS OF THREE CHARGED PARTICLES

S u m m a r y

For a two-dimensional Coulomb system of three charged particles, among which two particles are identical and the third particle is of different nature, we study the conditions of existence for symmetric and antisymmetric bound energy states (conditions of stability) in the mass–charge (m, Z) plane. High-precision three-body numerical calculations based on a stochastic variational method with Gaussian bases are performed. Several anomalous effects in the behavior of the characteristic distances between particles are revealed, and the nonzero quadrupole moment is found in a two-dimensional polar-symmetric field. The systematic comparison of the results for two- and three-dimensional systems is performed. The values of energy and size, the density distributions, and the correlation functions for the various reference three-particle systems are obtained.