

## К ВОПРОСУ ОБ ЭНЕРГИИ «ДВУМЕРНОГО» ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

В. В. Скобелев\*

*Московский политехнический университет  
105066, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 14 мая 2017 г.

С использованием известного решения уравнения Шредингера для электрона в поле ядра в полярных координатах вычислена энергия «двумерного» двухэлектронного атома в основном состоянии и энергия его однократной ионизации как по теории возмущений, так и с применением почти вековой давности метода варьирования по параметру  $Z$  в пробной волновой функции основного состояния. Поскольку такие «двумерные» атомы, например, гелия, в принципе могут быть реализованы в эксперименте «замораживанием» одной степени свободы в фазе бозе-конденсата, это открывает возможность проверки наших выводов. Обсуждаются также принципиальные моменты вычисления энергии «одномерных» двухэлектронных атомов и получения их бозе-конденсата. В ряде частных случаев наши результаты совпали с результатами ранее опубликованной работы, в которой, однако, отсутствуют некоторые из них.

DOI: 10.7868/S0044451017120094

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В предыдущей работе [1]<sup>1)</sup> мы развили идеи более ранней нашей работы [2], касающиеся эффекта «превращения» атомов в пространственно-одномерные в сверхсильном магнитном поле  $B \gg (Z\alpha)^2 B_0$ ,  $B_0 = m_e^2 c^3 / e\hbar \approx 4.41 \cdot 10^{13}$  Гс,  $\alpha = e^2 / \hbar c$ , причем поперечные по отношению к полю эффективные размеры атомов с «замораживанием» соответствующих степеней свободы могут быть на несколько порядков меньше их продольных размеров. Однако конкретные результаты получены в работе [1] только для водородоподобных атомов. В частности, показано, что по спектру их излучения можно установить факт наличия магнитного поля такой величины в магнитарах (нейтронных звездах, коричневых карликах).

Основой математического аппарата является решение «одномерного» уравнения Шредингера, описывающее состояние водородоподобного атома с определенной четностью  $P \equiv \text{sign} = \pm 1$  и обычным «энергетическим» квантовым числом  $n = 1, 2, \dots$ . Это решение приведено в классической книге [3] и

выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию  $F$  с несколькими другими в нашем случае обозначениями:

$$\Psi_n^{(\text{sign})} = \begin{cases} \chi_n, & z > 0, \\ \text{sign} \chi_n, & z < 0, \end{cases} \quad (1)$$

$$\chi_n = K_n e^{-|\zeta|/n} \left( \frac{2|\zeta|}{n} \right) F \left( 1 - n, 2; \frac{2|\zeta|}{n} \right), \quad (1a)$$

$$K_n = \frac{1}{\sqrt{2nz_0}},$$

$$\zeta = \frac{z}{z_0}, \quad z_0 = \frac{\hbar^2}{m_e (Ze^2)} = \lambda_C (Z\alpha)^{-1}, \quad (1b)$$

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{m_e c},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_n^2 dz = 2 \int_0^{\infty} \chi_n^2 dz = 1. \quad (1c)$$

Представляет интерес дальнейшее развитие методов работы [1] применительно к двухэлектронным атомам (He, Li<sup>+</sup>, ...) в случае, когда «заморожены» или две степени свободы, как в магнитном поле, или одна, т. е. в ситуации «двумерного» атома. Их реализация, по-видимому, вполне возможна в экспериментах с бозе-конденсатами [4], причем в этом случае для реализации «одномерной» электронной структуры магнитное поле необязательно должно быть сверхсильным, как в водородоподобном атоме, поэтому имеет смысл рассчитать энергию двухэлектронного атома и методами теории возмущений

\* E-mail: v.skobelev@inbox.ru

<sup>1)</sup> Заметим, что в формуле (A.4b) этой работы есть опечатка, которая никак не влияет на ее результаты: в подынтегральном выражении пропущен коэффициент  $t$ .

(разд. 2), и более корректным в общем случае вариационным методом (разд. 3). В принципе это позволило бы идентифицировать и изменения в спектре излучения «одномерного» или «двумерного» атома по сравнению с «трехмерным», а также найти экспериментально проверяемое значение энергии ионизации.

Как замечено в работе [5], «двумерный» атом в общем случае может быть получен и при подборе соответствующей конфигурации электрического и магнитного полей (для реализации «одномерного» атома, как упомянуто выше, достаточно только магнитного поля). Данный аспект проблемы затронут также в работах [6, 7].

При этом в «одномерном» варианте возникают проблемы, связанные с расходимостью интегралов при вычислении энергии взаимодействия электронов.

Конкретно, аналогичные выражениям (7а), (7б), приведенным ниже, для кулоновской  $K$  и обменной  $A$  энергий в «трехмерном» случае, соответствующие вклады в энергию «одномерного» двухэлектронного атома по «одномерным» функциям (1) приводятся к виду

$$K = 2e^2 \int_0^\infty dz \chi_n^2(z) \int_0^\infty dz' \chi_{n'}^2(z') \times \left( \frac{1}{|z - z'|} + \frac{1}{z + z'} \right) \equiv K_- + K_+, \quad (2a)$$

$$A = 2e^2 \int_0^\infty dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \int_0^\infty dz' \chi_n(z') \chi_{n'}(z') \times \left( \frac{1}{|z - z'|} + PP' \frac{1}{z + z'} \right) \equiv A_- + PP' A_+. \quad (2b)$$

При любом  $z$  из области интегрирования интегралы по  $dz'$  от первых слагаемых в скобках (2а), (2б) (т.е. в  $K_-$ ,  $A_-$ ) логарифмически расходятся<sup>2)</sup> в окрестности  $z' = z$ . Вывод о расходимости этих

<sup>2)</sup> Неоконченные пока расчеты показывают, что расходящиеся в  $K_-$ ,  $A_-$  интегралы приводят к бесконечному значению энергии  $E'$  взаимодействия электронов с необходимостью приведенной ниже процедуры «регуляризации» только в ситуации абстрактного «одномерного» пространства, например, в синглетном состоянии «одномерного парагелия», когда при разных наборах  $\{n, P\}$ ,  $\{n', P'\}$  эта энергия равна  $E' = K + A$ , а в упомянутом выше реальном случае «одномерного» пространства, как подпространства «трехмерного» в магнитном поле, когда спины обоих электронов направлены против поля (а спиновые моменты в состоянии с наименьшей энергией — по полю), энергия  $E' = K - A$  и имеет конечное значение. Этот важный результат требует отдельного рассмотрения.

двойных интегралов в целом подтверждается и их численным расчетом в частном случае основного состояния  $n = n' = 1$ , когда в безразмерных переменных (1б) имеем

$$K_- = A_- = 8\alpha(Z\alpha)m_e c^2 \int_0^\infty d\zeta \zeta^2 e^{-2\zeta} \times \int_0^\infty d\zeta' \zeta'^2 e^{-2\zeta'} \frac{1}{|\zeta - \zeta'|}. \quad (2c)$$

При этом  $K_-$  представляет собой в этом частном случае вклад в энергию основного состояния при проведении «регуляризации» (см. ниже), а в ее отсутствие является, как и  $A_-$ , с большой вероятностью расходящимся и в общем случае произвольных  $n, n'$ ; последнее следует из того, что функции  $\chi_n, \chi_{n'}$  в (2а), (2б) при любых  $n, n'$  не имеют особенности при  $z' = z$ , а она определяется только множителем  $1/|z - z'|$  в подынтегральном выражении.

Как мы полагаем, для «борьбы» с расходимостью, когда она действительно имеет место (см. сноску<sup>2)</sup>), следует учесть модификацию кулоновского взаимодействия на расстояниях  $|z - z'|$  порядка или меньше комптоновской длины волны электрона  $\lambda_C$  (1б) из-за поляризации электронно-позитронного вакуума (см., например, [8]). В данной ситуации необходимо учитывать этот же эффект при наличии магнитного поля, рассмотренный ранее в нашей работе [9].

Согласно этим результатам, учет влияния поляризации вакуума на поле заряда  $Q$  сводится к зависимости  $Q(r)$ , причем только при  $r \gg \lambda_C$  можно считать, что  $Q(r) \rightarrow \text{const} = Q$ , а при  $r \ll \lambda_C$  эффективный заряд будет другим. В рассматриваемом случае под  $r$  следует понимать  $|z - z'|$ , а логарифмически расходящиеся интегралы  $K_-$ ,  $A_-$  в (2а), (2б), имеющие вид

$$I \equiv \int_0^\infty dz f(z) \int_0^\infty dz' \tilde{f}(z') \frac{1}{|z - z'|}, \quad (3a)$$

с логарифмической же точностью по  $(Z\alpha)^{-1}$  (см. ниже) можно записать следующим образом:

$$I = \int_0^\infty dz f(z) \int_0^{z-\lambda_C} dz' \tilde{f}(z') \frac{1}{z - z'} + \int_0^\infty dz' \tilde{f}(z') \int_0^{z'-\lambda_C} dz f(z) \frac{1}{z' - z}. \quad (3b)$$

Поскольку принципиальной разницы в процедуре «регуляризации» этих двух слагаемых не имеется,

схематично продемонстрируем ее для первого слагаемого, обозначаемого ниже как  $I_1$ :

$$I_1 \equiv \int_0^\infty dz f(z) \int_0^{z-\lambda_C} dz' \tilde{f}(z') \frac{1}{z-z'}. \quad (3c)$$

Интегрируя далее интеграл по  $dz'$  по частям и полагая, где это можно,  $\lambda_C \rightarrow 0$ , имеем после некоторых преобразований:

$$I_1 \rightarrow I_1^{reg} = \int_0^\infty dz f(z) \times \\ \times \left\{ \tilde{f}(z) \ln \frac{z}{\lambda_C} + [\tilde{f}(0) - \tilde{f}(z)] \ln z + \right. \\ \left. + \int_0^z dz' \frac{d\tilde{f}(z')}{dz'} \ln(z-z') \right\}, \quad (3d)$$

причем интеграл  $I_1^{reg}$  является сходящимся. Однако аналитически он, конечно, не берется; даже при его упрощении с учетом первых двух формул (1b) с заменой  $z/\lambda_C \rightarrow \zeta(Z\alpha)^{-1}$  и, в силу экспоненциальной сходимости интеграла по  $dz(d\zeta)$ ,  $\zeta_{eff} \sim 1$ , так что логарифмический фактор в первом слагаемом этого выражения можно с указанной точностью заменить на  $\ln(Z\alpha)^{-1}$ , тем не менее возможен только численный расчет по этой схеме интегралов  $K_-$ ,  $A_-$  (а также и  $K_+$ ,  $A_+$ ) при конкретных значениях  $n$ ,  $n'$  с последующей теорией «одномерного» двухэлектронного атома. По-видимому, точные численные расчеты особого смысла и не имеют из-за выясненного нами принципиально приближенного характера такой «теории», в отличие от теории «двумерного» атома.

Отчасти по этой причине в данной работе мы ограничиваемся «двумерным» вариантом теории. В значительной степени будем основываться на соответствующих «трехмерных» расчетах, изложенных в книгах [3, 10], в которых приведены результаты оригинальных работ [11–13]. Наиболее полное изложение и решение проблемы «трехмерного» двухэлектронного атома дано в классической книге [14].

Поскольку идеология получения рассматриваемого в данной работе «двумерного» двухэлектронного атома основана на свойствах бозе-конденсата в пространстве с числом измерений  $n = 2$  [4], предварительно прокомментируем принципиальную разницу в этом плане между пространствами  $n = 3$  и  $n = 2$  (совпадение с обозначением «одномерного» квантового числа « $n$ » в (1) не должно здесь вводить в заблуждение).

Именно, получаемое из обычной формулы статистики Бозе–Эйнштейна общее выражение для концентрации  $C_n \equiv N_n/V_n$ ,  $V_n = \prod_{i=1}^n L_i$ , нерелятивистского бозонного газа с массами атомов  $m_a$  в однородном пространстве можно записать в виде

$$C_n = \frac{2^{n/2-1}}{(2\pi)^n} \Omega_n \Gamma_S \left( \frac{T m_a}{\hbar^2} \right)^{n/2} \int_0^\infty \frac{dx x^{n/2-1}}{e^{x+|\mu|/T} - 1}, \quad (4a)$$

где  $\Omega_n = 2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$  — полный угол в пространстве  $n$  измерений [15],  $\Gamma_S = 2S + 1$  — спиновый статистический вес,  $\mu \leq 0$  — химический потенциал,  $T$  — температура.

При  $\mu = 0$ , когда интеграл сходится только для значений  $n \geq 3$ , отсюда, как обычно, можно получить значение температуры вырождения  $T \rightarrow T_{nD}$ .

Для значения  $n = 2$  легко найти и явный вид зависимости  $\mu(T, C_2)$ . Делая в получающемся при  $n = 2$  интеграле замену переменной  $y = e^{-x}$ , имеем

$$C_2 = \frac{\Gamma_S m_a T}{\hbar^2 2\pi} \int_0^1 \frac{dy}{e^{|\mu|/T} - y} = \\ = -\frac{\Gamma_S m_a T}{\hbar^2 2\pi} \ln(1 - e^{\mu/T}), \quad \mu = -|\mu|. \quad (4b)$$

Отсюда находим:

$$\mu(T, C_2) = T \ln(1 - e^{-T_{02}/T}), \quad T_{02} = \frac{2\pi C_2 \hbar^2}{m_a \Gamma_S}. \quad (4c)$$

Формальное значение температуры вырождения при конечной концентрации получается отсюда из условия  $\mu(T_{2D}, C_2) \rightarrow 0$ , т.е.  $T_{2D} \rightarrow 0$ , что фактически означает отсутствие вырожденного состояния «двумерного» бозе-газа, см. также [16, 17] (это же относится и к «одномерному»), в то время как  $T_{3D} \neq 0$ . В этом и состоит принципиальное различие бозе-газов в однородных пространствах  $n = 1, 2$  и  $n = 3$ . При нарушении же однородности пространства возможно появление «одномерных» и «двумерных» бозе-конденсатов со значениями  $T_{1D}, T_{2D} \neq 0$ . В эксперименте с атомами Na авторов работы [4] анизотропия пространства обеспечивалась цилиндрическими магнитными и дискообразными оптическими «ловушками» атомов. В первых при уменьшении числа атомов и, следовательно, энергии их взаимодействия, происходило превращение «трехмерного» бозе-конденсата в «одномерный», а во вторых — в «двумерный», что вполне согласуется со здравым смыслом, а также в первом случае — с результатами наших работ [1, 2].

Хотя, насколько нам известно, аналогичный эксперимент с атомами He не проводился, его принципиальная схема для этого случая остается, очевидно, той же. Далее речь пойдет о «двумерном» конденсате, образование которого связано в том числе и с энергетическими соображениями [4] для «трехмерного» и «двумерного», поэтому необходимо предварительное теоретическое вычисление энергии основного состояния «двумерного» атома He (для «трехмерного» оно давно известно — см., например, [3, 10]). Это и является основной целью данной работы (по поводу предыдущих результатов на эту тему см. также разд. 4).

## 2. ПОПРАВКА К ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА ЗА СЧЕТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ: ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Для формулировки теории «двумерного» двухэлектронного атома нам понадобится соответствующая «шредингеровская» волновая функция электрона в поле ядра в полярных координатах. Для водорода ( $Z = 1$ ) и в атомных единицах она получена в упомянутых работах [6, 7] и приведена также в [5]. В наших обозначениях и в общем случае произвольных  $Z$  в эквивалентном представлении она имеет вид

$$\Psi_{Nm} = R_{Nm}(r)\Phi_m(\varphi), \quad (5)$$

$$R_{Nm}(r) = \frac{1}{r_0} R_{Nm}(\rho), \quad \rho = \frac{r}{r_0},$$

$$R_{Nm}(\rho) = C_{Nm} \frac{(2\lambda\rho)^m}{(2m)!} \times e^{-\lambda\rho} F(-N+m, 2m+1; 2\lambda\rho), \quad (5a)$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e(Ze^2)}, \quad \lambda = \frac{1}{N+1/2}, \quad (5b)$$

$$C_{Nm} = \sqrt{2\lambda^3 \frac{(N+m)!}{(N-m)!}}; \quad N \geq m = 0, 1, \dots, \quad (5c)$$

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},$$

с нормировкой  $\int \Psi_{Nm}^* \Psi_{Nm} dS = 1, dS = r dr d\varphi$ , т. е.

$$\int_0^\infty R_{Nm}^2(r) r dr \equiv \int_0^\infty R_{Nm}^2(\rho) \rho d\rho = 1, \quad (5d)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^* \Phi_m d\varphi = 1,$$

и значением энергии

$$E \equiv E_N = -\frac{(Ze^2)^2 m_e}{2\hbar^2(N+1/2)^2}. \quad (6)$$

Обозначения  $\rho, r_0$  по смыслу идентичны «одномерным»  $\zeta, z_0$  (1b).

Вообще говоря, в формуле (5c) квантовое число  $m$  принимает значения  $0, \pm 1, \dots$ . В связи с этим в выражении для  $R_{Nm}$  (и в (5a), (5b)) под  $m$  следует понимать  $|m|$ , а знак модуля  $|\dots|$  для простоты записи опущен. Впрочем, в рассматриваемом в работе случае основного состояния  $N = 0, m = 0$  это обстоятельство не играет роли.

При этом используемая нами в дальнейшем волновая функция основного состояния зависит только от безразмерной переменной  $\rho$  и равна

$$\Psi_{00} = \frac{1}{r_0} \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2\rho}. \quad (6a)$$

Как известно (см., например, [3, 10]), в «трехмерном» варианте к энергии квантовомеханической системы из двух электронов с волновыми функциями  $\Psi_M(\mathbf{r}), \Psi_{M'}(\mathbf{r}')$  и наборами квантовых чисел  $M, M'$ , равной, например, в случае двухэлектронного атома, когда  $M = \{n, l, m\}$ ,

$$E_{MM'}^{(0)} = E_m^{(0)} + E_{M'}^{(0)}, \quad E_M^{(0)} = -\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} m_e c^2 \quad (7)$$

следует добавить энергию их кулоновского взаимодействия, усредненную по «размазанным» электронам (здесь мы используем обозначения книги [10], схемы рассуждений которой, несколько отличной от [3], мы в основном и придерживаемся):

$$K = e^2 \int dV [\Psi_M(\mathbf{r})]^2 \int dV' [\Psi_{M'}(\mathbf{r}')]^2 \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (7a)$$

и специфическую так называемую обменную энергию, не имеющую классического аналога:

$$A = e^2 \int dV \Psi_M(\mathbf{r}) \Psi_{M'}(\mathbf{r}) \times \int dV' \Psi_M(\mathbf{r}') \Psi_{M'}(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (7b)$$

Если  $M = M'$ , то вклад в энергию взаимодействия электронов дает только  $K$  (7a), а вклада обменной энергии (7b) не будет. Именно этот случай обычно и рассматривается как в «трехмерном» [3, 10], так и в «двумерном» (в данной работе) вариантах, когда оба электрона двухэлектронного атома находятся, например, в основном состоянии с действительной волновой функцией (в «одномерном»

(1) она действительна в любом состоянии, в остальных же двух случаях должно быть  $m = m' = 0$ ).

Выражение (7а) использовалось в [3, 10] для расчета поправки к энергии основного состояния «трехмерного» двухэлектронного атома, когда

$$M \equiv \{n = 1, l = 0, m = 0\},$$

$$M' \equiv \{n' = 1, l' = 0, m' = 0\}.$$

При разных подходах к проблеме и способе вычисления интеграла (7а) соответствующие результаты, полученные в книгах [3, 10], одинаковы и достаточно близки к экспериментальным, приведенным, например, в этой же книге [3]. В «двумерном» варианте в рамках теории Шредингера совокупность квантовых чисел есть  $M = \{N, m\}$  с основным состоянием  $M \equiv \{N = 0, m = 0\}$ .

Отметим, что формулы (7а), (7б), строго говоря, справедливы в рамках теории возмущений, в которой  $ee$ -взаимодействие считается малым по сравнению с взаимодействием электронов с ядром, т. е. должно быть  $|K|, |A| \ll |E_{M, M'}^{(0)}|$ , причем это сильное неравенство, как известно [10], в обычном «трехмерном» случае не выполняется, но тем не менее результат вычислений по формуле (7а) дает значение, достаточно близкое к экспериментальному (см. по этому поводу книгу [3]); кроме того, оно используется и для вычисления энергии более точным вариационным методом, в котором учитывается в том числе вариант  $|K| \sim |E_{M, M'}^{(0)}|$  [10] (применительно к «двумерному» атому это сделано в разд. 3).

Этой же схемы изложения мы придерживаемся и в данной работе со следующей ее модификацией.

В «двумерном» варианте по волновым функциям (5) выражения для  $K$ ,  $A$ , аналогичные приведенным выше (7а), (7б), получаются из них простыми заменами:

$$\Psi_M(\mathbf{r}), \Psi_{M'}(\mathbf{r}') \rightarrow \Psi_{Nm}(\mathbf{r})\Psi_{N'm'}(\mathbf{r}');$$

$$dV, dV' \rightarrow dS, dS'.$$

А с учетом (5) и при выражении через безразмерные переменные «кулоновский вклад»  $K$  в энергию при интересующих нас далее значениях  $m = m' = 0$  равен

$$K = \frac{1}{2\pi} \alpha(Z\alpha)m_e c^2 \int_0^\infty d\rho \rho R_{N0}^2(\rho) \times \int_0^\infty d\rho' \rho' R_{N'0}^2(\rho') \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\rho_{12}} \quad (8)$$

с очевидным представлением величины  $A$  и с обозначением

$$\rho_{12} = \sqrt{\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos \varphi}.$$

Для обоих электронов в основном состоянии (6а) используемое и далее в разд. 3 выражение (8) при  $N = N' = 0$  может быть записано в виде

$$K = 256\alpha(Z\alpha)m_e c^2 I_{00}, \quad (8a)$$

$$I_{00} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\rho \rho e^{-4\rho} \int_0^\infty d\rho' \rho' e^{-4\rho'} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\rho_{12}}. \quad (8b)$$

Тройной интеграл (8b), в отличие от выражения в «трехмерном» случае [3, 10], аналитически не вычисляется (по крайней мере, нам этого сделать не удалось); численный же его расчет дает  $I_{00} \approx 0.00920$  с полной энергией основного состояния двухэлектронного «двумерного» атома  $E_{tot}^{(0)} = 2E_0 + K$  со значениями  $E_0$  (6),  $K$  (8а).

### 3. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

В отличие от общей формулировки вариационного принципа, данной, например, в книге [3], мы, следуя книге [10], в которой изложен оригинальный метод Хиллерааса [11, 12], используем его упрощенную версию, сводящуюся к тривиальному исследованию соответствующих выражений на экстремум, в том числе с принципиальной возможностью увеличения числа варьируемых параметров [13] в целях более точного соответствия с экспериментальными данными.

В качестве первого приближения найдем среднее по «пробным» волновым функциям  $\Psi_{00}$  (6а) основного состояния значение  $\langle \hat{H} \rangle$  полного гамильтониана  $\hat{H}$  двухэлектронного атома, ограничиваясь простейшим случаем, когда, как и в «трехмерном» варианте теории двухэлектронного атома (см. также [10]), единственным параметром варьирования является атомный номер  $Z$ , используя для него с этой целью обозначение  $Z'$  в функции  $\Psi_{00}$  (он в неявном виде фигурирует в (6а) с учетом определения безразмерной переменной  $\rho$  (5) и в нормировочном коэффициенте  $1/r_0$  — (5), (5б)):

$$\langle \hat{H} \rangle = 2\langle \hat{T} \rangle + 2\langle \hat{P} \rangle + \langle \hat{P}' \rangle. \quad (9)$$

Здесь  $\langle \hat{T} \rangle$ ,  $\langle \hat{P} \rangle$  — средние значения кинетической и потенциальной (в поле ядра) энергии электрона в

двухэлектронном атоме по этим «пробным» функциям  $\Psi_{00}$  с упомянутой заменой в них  $Z \rightarrow Z'$  и для удобства с переобозначением переменной  $\rho \rightarrow \rho' = r/r'_0$ ,  $r'_0 = \hbar^2/m_e(Z'e^2)$ .

С учетом вида оператора

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{m^2}{r^2} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r_0^2} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \quad (10)$$

и очевидного соотношения  $\rho' = \rho(r_0/r'_0)$  получаем тогда после несложных вычислений в основном состоянии  $N = m = 0$ :

$$\langle \hat{T} \rangle = 2(Z'\alpha)^2 m_e c^2. \quad (10a)$$

Учитывая также, что

$$\hat{\Pi} = -\frac{(Ze^2)}{r} = -\frac{1}{r_0} \frac{(Ze^2)}{\rho},$$

аналогично находим

$$\langle \hat{\Pi} \rangle = -4(Z\alpha)(Z'\alpha) m_e c^2. \quad (10b)$$

Отметим попутно, что, если в (10a), (10b) положить  $Z' = Z$ , то

$$\langle \hat{T} \rangle = -E_0, \quad \langle \hat{\Pi} \rangle = 2E_0, \quad E_0 = -2(Z\alpha)^2 m_e c^2, \quad (10c)$$

как это и должно быть в соответствии с уравнением Шредингера  $(\hat{T} + \hat{\Pi})\Psi = E\Psi$  в пространстве с любым числом измерений, в том числе, естественно, и в «двумерном».

Фигурирующее же в (9) значение энергии взаимодействия электронов  $\langle \hat{\Pi}' \rangle$ , как указано в разд. 2, равно  $K$  (8) и было вычислено выше (8a), (8b), т. е. с заменой в (8a)  $Z \rightarrow Z'$  имеем

$$\langle \hat{\Pi}' \rangle = 256\alpha(Z'\alpha) m_e c^2 I_{00}. \quad (11)$$

Следовательно,

$$E(Z') \equiv \langle \hat{H} \rangle = 4\alpha^2 m_e c^2 \{ Z'^2 - 2ZZ' + 64I_{00}Z' \}, \quad (11a)$$

причем выражение в фигурных скобках, определяющее далее значение  $Z' \rightarrow Z_{eff}$  (12a) (обозначение книги [3]), соответствующее минимально возможной энергии  $E_{min}$  основного состояния в последующей процедуре варьирования, совпадает с аналогичными выражениями в книгах [3, 10] в смысле зависимости от  $Z$ ,  $Z'$  (кроме последнего слагаемого, численный коэффициент при  $Z'$  в котором зависит от

размерности пространства, в «трехмерном» он равен  $5/8$ ). Согласно основной идее этого метода варьирования [3, 10], значение  $E_{min}$  приблизительно определяет энергию основного состояния (см. ниже (12b)) и в «трехмерном» варианте для атома He несколько ближе к экспериментальному, чем при использовании метода возмущений, подобного использованному в разд. 2. Какому из этих методов следует отдать предпочтение в «двумерном» варианте, на данный момент неясно по причине отсутствия, как уже упоминалось, экспериментальных данных.

В обычном «трехмерном» случае корректность выбора «пробной» функции, числа и типа варьируемых параметров, как отмечено в [10], является в значительной степени интуитивным обстоятельством и определяется степенью совпадения с экспериментальным значением, например, энергии ионизации  $E_{ion}$ . В нашем же случае «двумерного» атома полученное ниже «теоретическое» значение  $E_{ion}$  (13) сравнивать не с чем, поскольку нам, как отмечено, неизвестны соответствующие экспериментальные данные по «двумерным» двухэлектронным атомам. Поэтому в качестве необходимого в любом случае первого шага мы ограничиваемся в данной работе упомянутым выше простейшим вариантом варьирования одного параметра  $Z'$  и «пробной» функцией  $\Psi_{00}$  основного состояния.

Далее, «варьированием» этого параметра  $Z'$  в (11a) находим минимальное значение энергии с соответствующим ему значением  $Z' \rightarrow Z_{eff}$ :

$$\frac{dE(Z')}{dZ'} = 0 \rightarrow Z' - Z + 32I_{00} = 0,$$

т. е.

$$Z_{eff} = Z - 32I_{00}, \quad (12a)$$

$$E_{min} \equiv E(Z_{eff}) = -4\alpha^2 m_e c^2 (Z - 32I_{00})^2. \quad (12b)$$

Как и в «трехмерном» случае [10], это означает, что действие одного электрона на другой сводится к экранировке заряда ядра (ср. со значением энергии без учета взаимодействия электронов:  $2E_0 = -4\alpha^2 m_e c^2 Z^2$ , см. также (10c)). При этом стоит отметить, что «постоянная экранирования»  $\sigma \equiv 32I_{00} \approx 0.3^3$  приблизительно совпадает со значением в «трехмерном» случае [3, 10], когда она вычисляется аналитически ( $\sigma = 5/16 \approx 0.3$ ).

Рассчитаем далее энергию однократной ионизации «двумерного» двухэлектронного атома, которую можно найти из следующих соображений. При

<sup>3)</sup> Практически это же значение получено в работе [18] при несколько ином выборе параметра варьирования (см. также разд. 4).

«удалении» одного электрона из такого атома в основном его состоянии с энергией  $E_{min}$  энергия получающегося «двумерного» водородоподобного атома станет равной  $E_0$ . Следовательно, для этого атому надо сообщить энергию ионизации, равную  $E_{ion} = E_0 - E_{min}$ . Подставляя значения  $E_0, E_{min}$ , получаем

$$E_{ion} = 2\alpha^2 m_e c^2 [2(Z - \sigma)^2 - Z^2]. \quad (13)$$

Как можно видеть, при упомянутом выше значении  $\sigma \approx 0.3$  и  $Z = 2, \dots$  имеем  $E_{ion} > 0$ , как, естественно, и должно быть.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, в данной работе мы распространили известные методы расчета энергии двухэлектронного атома на «двумерный» случай, иначе говоря, от «пространственно-трехмерного» варианта теории перешли к «двумерному». В перекрывающейся области результаты расчетов совпали с результатами работы [18], в которой применялся несколько иной способ подачи материала, включая выбор параметра варьирования. Как сопутствующие вопросы, не рассмотренные в [18], обсудили принципы расчета энергии «одномерных» двухэлектронных атомов, а также образование бозеконденсатов в  $n$ -мерном пространстве, которые, в частности, получены экспериментально в интересующих нас случаях  $n = 1, 2$  [4].

Это привело к следующим достаточно любопытным, на наш взгляд, результатам, в том числе частично (п. 2) совпадающим с [18].

1. Возможное в принципе согласно [4] экспериментальное измерение энергии ионизации «двумерного» атома He, как и в обычном «трехмерном» случае, позволило бы определить степень адекватности вариационного метода ее расчета (13) в эффективно двумерном пространстве.

2. Практическая идентичность эффекта «экранировки» заряда ядра в «двумерном» двухэлектронном атоме по сравнению с «трехмерным» случаем, очевидно, делает вполне реальными не только теоретические шансы на существование «двумерного» многоэлектронного атома, подобно «трехмерному», характеристики которого могут быть рассчитаны, например, методом Томаса – Ферми [19, 20] (см. также [3]); это, однако, не входит в задачу данной работы.

3. Сформулированы принципы «регуляризации» расходящихся интегралов, которые появляются при

расчете энергии «одномерного» двухэлектронного атома, что в дальнейшем открывает перспективы ее вычисления как в основном, так и в возбужденном состояниях.

4. Предварительные оценки, отсутствующие выше, показывают, что экспоненциально убывающее на бесконечности решение «двумерного» уравнения Томаса – Ферми для потенциала электростатического поля нейтрального «плоского» многоэлектронного ( $Z \sim 10^2$ ) атома в функции от безразмерной переменной  $x = r/a\sqrt{\tilde{d}}$  ( $a = Zr_0$  – боровский радиус,  $\tilde{d} = d/4a$ ,  $d$  – эффективная «толщина» такого многоэлектронного атома) действительно существует, как, следовательно, и сам «плоский» атом в рамках этой модели (см. также п. 2). Предварительные же оценки показывают, что такого достаточно быстро убывающего на бесконечности решения «одномерного» уравнения Томаса – Ферми не существует, как, очевидно, и самого нейтрального «одномерного» многоэлектронного атома в рамках этой модели. Это тема для отдельного исследования.

Предлагаемая методика расчетов может быть использована и при вычислении энергии первого возбужденного состояния «двумерного» двухэлектронного атома с электронами в состояниях  $M \equiv \{N = 0, m = 0\}$  и  $M' \equiv \{N' = 1, m' = 0\}$ . Расчеты при этом могут быть более громоздкими по причине необходимости учета обменной энергии  $A$ , о которой в работе [18] вообще не упоминается, в то время как она дает вклад в общую энергию возбужденного состояния, сравнимый с вкладом кулоновской энергии  $K$ . В связи с этим использованный в работе [18] метод вычисления энергии возбужденных состояний с  $N' \geq 1$  вызывает сомнения, поскольку наличие фактически постулированной экранировки  $Z \rightarrow (Z - 1)$  заряда ядра для «внешнего» электрона «внутренним» электроном надо еще доказать, как, например, формулу (12b), а этого автором [18] не сделано, не говоря уже об учете вклада  $A$ .

Это, очевидно, имеет смысл сделать в будущем, когда появятся экспериментальные данные по спектру излучения, например, «двумерного» атома He.

Таким образом, есть необходимость постановки соответствующих экспериментов с «двумерными» двухэлектронными атомами (реально – с He).

Отметим также, что автор [18] не был, очевидно, знаком с результатами эксперимента, описанного в работе [4], хотя его работа вышла значительно позже, и поэтому делал акцент только на методический и педагогический аспекты своей работы. Как следует из изложенного выше, по этой причине

он явно недооценил научное значение части своих результатов. А ведь с ними совпадают некоторые наши результаты настоящей работы.

Автор благодарит К. М. Ерохина и С. В. Копылова за техническую помощь.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **151**, 1031 (2017).
2. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **137**, 241 (2010).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. III, *Квантовая механика, нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
4. A. Gorlitz et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
5. Л. Г. Мардоян, Г. С. Погосян, А. С. Сисакян, В. М. Тер-Антонян, ТМФ **61**, 99 (1984).
6. V. Zaslav and C. E. Zandler, Amer. J. Phys. **35**, 1118 (1967).
7. A. Cisneros and N. V. McIntosh, J. Math. Phys. **10**, 277 (1968).
8. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
9. Yu. M. Loskutov and V. V. Skobelev, Phys. Lett. A **36**, 405 (1971).
10. А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов, *Квантовая механика*, Учпедгиз, Москва (1962).
11. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **63**, 291 (1930).
12. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **63**, 771 (1930).
13. S. Chandrasechar, Astrophys. J. **100**, 176 (1944).
14. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, Москва (1960).
15. Н. Я. Виленкин, *Специальные функции и теория представлений групп*, Наука, Москва (1965).
16. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1307 (1966).
17. P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
18. S. H. Patil, Eur. J. Phys. **29**, 517 (2008).
19. L. H. Thomas, Proc. Phil. Soc. **23**, 542 (1927).
20. E. Fermi, Rend. Accad. Naz. Lincei **6**, 602 (1927).