

01;02

# Двухъядерный атом — связанное состояние протона и тяжелого атома

© В.П. Чалый,<sup>1</sup> В.Л. Гуревич,<sup>2</sup> М.Ю. Погорельский<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ЗАО „Научное и технологическое оборудование“,  
194156 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: yuripogorelsky@mail.ru

<sup>2</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 5 декабря 2007 г.)

Предсказано существование связанного состояния протона и тяжелого атома. Атом описывается методом Томаса–Ферми. Электроны экранируют поле протона, что уменьшает силу отталкивания между протоном и атомным ядром. С другой стороны, сила притяжения между протоном и электронами направлена по градиенту электронной плотности, т.е. к ядру. Сделан вывод, что при  $Z = 80$  обе силы сравниваются на расстоянии от ядра, составляющем приблизительно 0.6 боровского радиуса. Установлено, что минимум потенциальной энергии протона глубиной в несколько десятков электронов оказывается в области отрицательных энергий (притяжение). Предложено название „двухъядерный атом“ для такой системы. Подчеркнуто, что в отличие от молекул, где связь с атомом водорода обусловлена перестройкой состояний внешних (валентных) электронов, двухъядерный атом образуется в результате коллективного отклика системы внутренних электронов на потенциал протона.

PACS: 31.15.Ne, 31.15.Gy, 31.15.Md, 31.15.Bs

## Введение

Цель настоящей работы — показать, что протон может образовывать связанное состояние с тяжелым атомом, у которого заряд ядра удовлетворяет условию  $Z \gg 1$ . Основную идею статьи можно сформулировать так: при приближении протона к ядру его потенциал экранируется атомными электронами.

Как показал Теллер [1] (см. также [2]), два атома, описываемых теорией Томаса–Ферми (ТФ), не могут образовать связанное состояние. В настоящей работе рассматривается в некотором смысле противоположный случай. Его принципиальное отличие от проблемы, рассмотренной Теллером, заключается в следующем. Теорема Теллера гласит, что суммарная энергия двух тяжелых атомов ниже энергии системы, в которой эти атомы образуют молекулу. В настоящей работе рассматривается ситуация, при которой один из взаимодействующих объектов — это тяжелый атом ( $Z \gg 1$ ), который можно описать методом ТФ, в то время как другой объект — это протон с  $Z = 1$ . Мы хотим показать, что в этом случае (к которому теория Теллера неприменима) связанное состояние может образоваться. Экранированный потенциал протона можно рассматривать как возмущение, действующее на электроны атома Томаса–Ферми. Связанное состояние возникает в результате совместного действия на протон большого числа внутренних электронов такого атома. Энергия колебаний протона вблизи его положения равновесия гораздо меньше его энергии связи. Поэтому можно считать, что протон находится в  $S$ -состоянии на сфере фиксированного радиуса.

Имеется много теоретических работ, в которых рассматривается связанное состояние позитрона на ато-

ме (см. [3–5] и содержащиеся в них ссылки). Как было указано в этих работах, основную роль играет взаимодействие позитрона с внешними (валентными) электронами атома.

Однако результаты этих работ нельзя использовать для анализа ситуации, рассмотренной в данной статье, из-за большого различия в массах протона и позитрона. В двухъядерном атоме расстояние между тяжелым ядром и протоном оказывается меньше радиуса Бора  $a$ . Это означает, что в данном случае приходится иметь дело с принципиально иной физической ситуацией, когда протон взаимодействует практически только с внутренними электронами атома.

## 1. Предварительные соображения

Чтобы представить себе физику явления, начнем с анализа простой вспомогательной задачи. Рассмотрим в приближении Томаса–Ферми экранирование поля протона пространственно однородной системой электронов, имеющей среднюю плотность  $N$ . Система предполагается нейтральной за счет наличия неподвижных положительных зарядов. Для изменения электронной концентрации  $\delta N$  по сравнению с ее средним значением имеем

$$\delta N = \frac{1}{\pi^2} \frac{p_F m}{\hbar^3} e\varphi, \quad \nabla_{\mathbf{R}}^2 \varphi + q^2 \varphi = 0,$$

$$\varphi(R) = \frac{1}{R} \exp(-qR), \quad (1)$$

где  $\varphi$  — электростатический потенциал,  $p$  — импульс Ферми,  $q$  — обратный радиус экранирования; он опре-

деляется выражением (см. [6], § 40)

$$q^2 = \frac{4 \cdot 3^{1/3}}{\pi^{1/3}} \frac{me^2}{\hbar^2} N^{1/3} = \frac{4 \cdot 3^{1/3}}{\pi^{1/3}} \frac{1}{a} N^{1/3}. \quad (2)$$

Здесь  $e$  — элементарный заряд,  $m$  — масса электрона. Энергия электростатического корреляционного взаимодействия потенциала протона с электронами

$$E = -e^2 N \int_0^\infty a^3 R \frac{1}{R} \exp(-qR) = -\frac{\pi^{4/3}}{3^{1/3}} a e^2 N^{2/3}. \quad (3)$$

Будем теперь считать  $N$  медленной (по сравнению с  $1/q$ ) функцией координаты  $\mathbf{R}$ :  $N = N(\mathbf{R})$ . Тогда электронная система будет действовать на протон с силой  $\mathbf{F}$ :

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial E}{\partial \mathbf{R}} = 2 \left( \frac{\pi}{3} \right)^{4/3} a e^2 N^{-1/3}(R) \nabla_{\mathbf{R}} N, \quad (4)$$

она направлена параллельно вектору  $\nabla_{\mathbf{R}} N$ .

## 2. Вычисление потенциала взаимодействия

Перейдем к рассмотрению непосредственно интересующей нас проблемы, а именно определим силу, действующую на протон со стороны электронов и тяжелого ядра. Электронную систему будем описывать в рамках теории ТФ (см., например, [7], § 70 или [8]). Эта теория была сформулирована сравнительно давно, но в последние годы интерес к ней оживился [9–11]. Согласно теории ТФ, половина электронного заряда атома заключена в сфере радиуса  $1.33aZ^{-1/3}$  (где  $a$  — радиус Бора). Пусть расстояние между ядром и протоном порядка  $a$ . Потенциал протона экранируется электронами, и это должно привести к значительному уменьшению сил отталкивания между протоном и ядром. Поскольку по мере приближения к ядру плотность электронов возрастает, электронное облако должно притягивать протон. Однако силу притяжения в этом случае нельзя вычислять по формуле (4), поскольку абсолютная величина вектора  $\nabla_{\mathbf{R}} N$  теперь не мала. Ниже будет показано, что, например для  $Z = 80$ , сила притяжения электронами уравновешивается силой отталкивания ядром при  $R \approx 0.6a$ . Это указывает на возможность образования связанного состояния. Нас будет интересовать связанное состояние с наиболее низкой энергией, т.е.  $S$ -состояние.

Следует еще раз подчеркнуть, что имеется принципиальное различие между особым связанным состоянием, которое здесь рассматривается, и обыкновенной молекулой химического соединения, содержащей атом водорода. Обыкновенная химическая связь осуществляется за счет перестройки состояний нескольких внешних (валентных) электронов. Специфический эффект, которому посвящена данная работа, заключается в коллективной

перестройке распределения внутренних электронов атома под действием поля протона. По отношению к отдельному электрону такое воздействие можно рассматривать как возмущение. Эти возмущения суммируются, что и приводит к образованию связанного состояния. Обычно образование связанного состояния нельзя получить по теории возмущений. Здесь, однако, особый случай, когда связанное состояние формируется в результате участия большого числа возмущенных электронов в формировании потенциального рельефа.

Переходим к количественному рассмотрению экранирования протона электронами тяжелого атома. Пусть расстояние между протоном и атомом меньше или порядка  $a$ . Иными словами, протон целиком находится „внутри“ атома. Именно по этой причине и предлагается называть такую систему двухъядерным атомом. Вычислим энергию такой системы в рамках теории ТФ. В первом приближении теории возмущений изменение электронной плотности  $\delta N$  есть

$$\delta N(\mathbf{r}) = 4 \sum_i^{i_{\max}} \sum_k^\infty \langle k | \varphi | i \rangle \frac{1}{\varepsilon_i - \varepsilon_k} Y_{lm}(\theta, \chi) Y_{l'm'}(\theta, \chi) \times \psi_{nl}(r) \psi_{n'l'}(r). \quad (5)$$

Здесь индекс  $i = nlm$  обозначает занятые состояния,  $k = n'l'm'$ , причем  $n \neq n'$  и (или)  $l \neq l'$ ;  $\theta, \chi$  — сферические углы,  $\psi_{nl}$  — радиальная квазиклассическая (т.е. вычисленная в приближении ВКБ) волновая функция электрона в поле потенциала  $\Phi(r)$  атома ТФ. Здесь и далее используются атомные единицы  $e = \hbar = m = 1$ .

Формулу (5) можно преобразовать к такому виду, чтобы связь между  $\delta N$  и  $\varphi$  приобрела локальную форму. Если  $\delta N$  задано,  $\varphi$  определяется из уравнения Пуассона. Воспользовавшись соотношением между  $\delta N$  и  $\varphi$ , получим уравнение для  $\varphi$ .

Изменение электронной энергии в первом приближении теории возмущений есть

$$\delta \varepsilon_i = \langle i | \varphi | i \rangle. \quad (6)$$

Изменение энергии ядра записывается аналогичным образом, оно равно  $Z\varphi(0)$ , поскольку волновая функция ядра локализована в точке  $R = 0$ .

Потенциал возмущения  $\varphi$  для каждого электрона есть потенциал протона плюс потенциал, обусловленный  $\delta N$ , т.е. экранированный потенциал протона. При таком методе расчета изменение энергии данного электрона вычисляется в виде суммы по всем электронам, включая данный. Это сказывается на выражениях (5) и (6) через посредство экранированного потенциала. Соответствующая неточность, возникающая из-за учета „самодействующего электрона“, пренебрежимо мала, поскольку велико полное число электронов  $Z$ . Полное изменение энергии системы  $\Delta E_1$  — это сумма выражений (6) по всем частицам, включая ядро

$$\Delta E_1 = Z\varphi(0) - \int N(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (7)$$

В пренебрежении экранированием величина  $Z\varphi(0)$  переходит в  $Z/R$ , т.е. в чисто кулоновское взаимодействие между протоном и ядром. Экранирование вызывает существенное ослабление величины  $\varphi(0)$ .

Направим ось  $z$  от ядра к протону. При этом величина  $\varphi(\mathbf{r})$  не должна зависеть от азимутального угла, и ее можно представить в виде

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_s \varphi_s(r) P_s(\cos \theta), \quad (8)$$

где  $P_s$  — полиномы Лежандра. Поскольку  $N(r)$  имеет сферическую симметрию, в формуле (7) фигурирует только  $\varphi_0(r)$ . Произведем разложение  $\delta N$  по типу (8) и проинтегрируем (5) по  $\theta$ , воспользовавшись известным тождеством

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 = (4\pi)^{-1} (2l+1). \quad (9)$$

В результате (5) примет вид

$$\begin{aligned} \delta N_0(r) &= \pi^{-1} \sum_l (2l+1) \\ &\times \sum_{n'}^{\infty} \sum_n^{n_{\max}} \langle n' | \varphi_0 | n \rangle \frac{1}{\varepsilon_{nl} - \varepsilon_{n'l}} \psi_{nl}(r) \psi_{n'l}(r). \end{aligned} \quad (10)$$

Радиальная квазиклассическая функция состояния  $(n, l)$  с энергией вблизи уровня Ферми имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_{nl}(r) &= \frac{a_{nl}}{r\sqrt{p_l}} \cos \left[ \int_{r_1}^r (p_l + \varepsilon_{nl} p_l^{-1}) dr' + C_l \right], \\ p_l^2 &= 2\Phi_l(r) \equiv 2\Phi(r) - \frac{1}{r^2} \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 \end{aligned} \quad (11)$$

( $C_l$  — постоянная порядка 1). При выводе (11) мы воспользовались приближенным соотношением  $(p_l^2 + 2\varepsilon_{nl})^{1/2} \approx p_l + \varepsilon_{nl} p_l^{-1}$ . Оно справедливо при  $|\varepsilon_{nl}| \ll \Phi_l$ , где  $\Phi_l$  — характерные значения  $\Phi_l(r)$ ,  $a_{nl}^2 = (2/\pi) d\varepsilon_{nl}/dn = 4T_l^{-1}$ ,  $T_l$  — классический период обращения электрона с энергией, близкой к энергии Ферми,  $r_1$  (и  $r_2$ ) — это классические точки поворота.

Введем переменную

$$t_l(r) = \int_{r_1}^r [p_l(r')]^{-1} dt', \quad 2t_l(r_2) = T_l$$

и разложим  $\varphi_0(r)$  в ряд Фурье

$$\varphi_0(r) = \sum_{v=0}^{\infty} \varphi_{0v} \cos(2\pi v T_l^{-1} t_l). \quad (12)$$

Отбросив осциллирующую часть произведения функций (11), получим

$$\begin{aligned} \delta N_0(r) &= \sum_l \frac{2l+1}{2\pi^2 r^2 p_l} \sum_{v=0}^{\infty} \varphi_{0v} \int_{-\Phi_l(r)}^0 d\varepsilon' \int_{-\Phi_l(r)}^0 d\varepsilon \frac{\cos[(\varepsilon' - \varepsilon)t_l]}{\varepsilon' - \varepsilon} \\ &\times \left[ \delta \left( \varepsilon - \varepsilon' + \frac{2\pi v}{T_l} \right) + \delta \left( \varepsilon - \varepsilon' - \frac{2\pi v}{T_l} \right) \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

Интеграл по  $\varepsilon'$  можно представить в виде суммы интегралов по интервалам  $[-\Phi_l, 0]$  и  $[0, \infty]$ . Первый интеграл равен нулю, так как замена переменных  $\varepsilon \leftrightarrow \varepsilon'$  обращает знак этого выражения. Условия  $\varepsilon \leq 0$  и  $\varepsilon' \geq 0$  выполняются для первой  $\delta$ -функции и  $\varepsilon \in [-2\pi v T_l^{-1}, 0]$ . В разложении (12) физически существенны только гармоники с  $2\pi v T_l^{-1} \ll \Phi_l$ . Интегрировав по  $\varepsilon'$  с учетом  $\delta$ -функции и по  $\varepsilon$  в интервале  $2\pi v T_l^{-1}, 0$ , получим, принимая во внимание (12),

$$\delta N_0(r) = \frac{1}{2\pi^2 r^2} \sum_l \frac{2l+1}{p_l} \varphi_0(r). \quad (14)$$

Координата  $r$  находится в классической области для квантовых чисел  $l$ , удовлетворяющих условию  $\Phi_l(r) \geq 0$ . Интегрирование по  $l$  от нуля до максимального значения, соответствующего  $\Phi_l(r) \geq 0$  дает

$$\delta N_0(r) = \pi^{-2} p(r) \varphi_0(r), \quad p = (2\Phi)^{1/2}. \quad (15)$$

Выражение (15) совпадает с первым уравнением (1). Следовательно, связь между  $\delta N$  и  $\varphi$  сохраняется также для неоднородной электронной плотности. Соотношение (15) приводит к уравнению Пуассона

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi_0) = q^2 \varphi_0, \quad q^2 = 4\pi^{-1} \sqrt{2\Phi} \quad (16)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} r\varphi(r)|_{r \rightarrow 0} &= 0, \quad \varphi(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0, \\ \frac{d}{dR} (r\varphi_0)|_{r=R-0} - \frac{d}{dR} (r\varphi_0)|_{r=R+0} &= \frac{1}{R}. \end{aligned} \quad (17)$$

Скачок производной отражает наличие протона на расстоянии  $R$  от ядра. Для малых значений  $r$  будем решать эти уравнения численно. Для  $r > R$  можно воспользоваться приближением эйконала, которое справедливо при  $d\Phi/dr \ll 2p^2 q$ . Вводя переменные  $T\Phi$   $x = \gamma R$ ,  $\gamma = Z^{1/3}/0.885$ , можно убедиться, что решения (но не последнее граничное условие при  $x = \gamma R$ ) не зависит от  $Z$ . Для  $x < \gamma R$   $x\varphi_0(x) = cP(x)$ . Это соотношение представляет собой определение функции  $p(x)$ . В таблице приведены значения  $P(x)$  для ряда значений  $x$ .

Для  $x \rightarrow R$ ,  $P = x$ . Для  $x > \gamma R$

$$\begin{aligned} x\varphi_0(x) &= b q_x^{-1/2} \exp \left( - \int_{\gamma R}^x q_x dx \right), \\ q_x^2 &= 1.5 x^{-1/2} X^{1/2}, \quad \Phi = ZX/r. \end{aligned} \quad (18)$$

Постоянные  $c$  и  $b$  определяются из непрерывности функций  $x\varphi_0$  и скачка производной функции (17) при  $x = \gamma R$ .

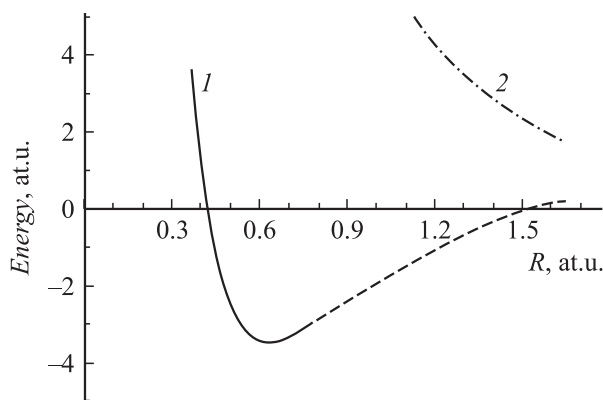
Воспользовавшись соотношением между  $N(r)$  и  $\Phi(r)$ , справедливым для атома  $T\Phi$  и значениями  $\Phi$ , приведенными в таблице, можно вычислить  $\Delta E_1$  (7) для различных значений  $R$ . Строго говоря, к данному расчету следовало бы ввести поправку (которая, однако, окажется

Значения функции  $P(x)$  для разных значений  $x$ 

$x$	$P(x)$	$x$	$P(x)$	$x$	$P(x)$
0.2	0.207	1.4	2.25	2.6	6.71
0.4	0.437	1.6	2.79	2.8	7.78
0.6	0.703	1.8	3.40	3.0	8.97
0.8	1.01	2.0	4.09	3.2	10.3
1.0	1.37	2.2	4.87	3.4	11.7
1.2	1.78	2.4	5.74	3.6	13.3

малой по сравнению с  $\Delta E_1$ ). Было рассмотрено экранирование протонного потенциала в нейтральном атоме. За счет экранирования полный избыточный электронный заряд вблизи протона равен  $-1$ . В самом деле, как экранированный потенциал протона, так и  $\delta N$  (18) стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$  быстрее, чем  $r^{-1}$ . Соответствующая поправка к энергии  $\Delta E_2$  не должна превышать энергию одноэлектронной ионизации атома. В теории ТФ эта энергия оказывается ниже экспериментальных значений. Объясняется это тем, что в модели ТФ такого рода свойства существенно связаны с расстояниями  $r \gg 1$ , где приближение ТФ работает плохо. Усредненное (по ряду различных атомов) экспериментальное значение энергии ионизации составляет около 0.3 атомной единицы. Полное изменение энергии  $\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2$  представлено на рисунке. Здесь для  $\Delta E_2$  принято значение 0.3 а.е.

Проанализируем приближения, которые легли в основу расчета  $\Delta E$ . Во-первых, это — одноэлектронное приближение. Характерное значение кинетической энергии электронов должно превышать потенциальную энергию их кулоновского взаимодействия, т. е. должно выполняться неравенство  $p^2/2 \gg N^{1/3}$ . Для атомов с  $Z \gg 1$  это условие удовлетворяется. Во-вторых, это — квазиклассическое приближение. Оно выполняется в интервале  $Z^{-1} < r < 1$ . При  $r > R$  решение (18) убывает экспоненциально. По этой причине интеграл (7) определяется интервалом  $r \lesssim R$ .



Потенциальная энергия системы протон-тяжелый атом как функция расстояния: 1 — энергия системы протон-тяжелый атом ( $Z = 80$ ) как функция расстояния  $R$  между протоном и ядром. 2 — потенциал  $\Phi(R)$ . Один из возможных вариантов поведения кривой, переходный между 1 и 2, показан пунктиром.

Нами была вычислена  $\Delta E$  для  $Z = 80$  и  $R < 1$ . Для  $R > 1$  наша теория неприменима. (При вычислении интеграла (7) интервал интегрирования брался от 0 до 1; можно считать, что в этом интервале подынтегральное выражение определяется достаточно надежно.) Значение  $N(r)$  при возрастании  $r$  убывает;  $\varphi_0(r)$  возрастает при  $r < R$  и убывает при  $r > R$ . Подынтегральное выражение сравнительно медленно изменяется при  $r < R$  и быстро спадает при  $r > R$ . В итоге при  $R < 0.8$  отброшенная добавочная энергия мала.

Из рисунка видно, что энергия системы протон-тяжелый атом ( $Z \approx 80$ ) с учетом экранирования оказывается отрицательной при  $R > 0.4$  а.е. и имеет минимум при  $R \approx 0.6$  а.е. ( $\approx 0.3 \text{ \AA}$ ). Следует ожидать, что при  $R > 1$  кривая 1 должна стремиться к  $\Phi(R)$  (кривая 2). Следует также ожидать, что при больших  $R$ , соответствующих периферии атома,  $\Delta E$  станет положительной (потенциальный барьер). Происхождение барьера можно наглядно представить следующим образом. Величина  $\Delta E_1$  спадает с  $R$  при  $R > 0.6$  а.е. При больших  $\Delta E_1$  должна стать меньше положительной энергии  $\Delta E_2$ . Это означает наличие барьера высотой в несколько электронвольт.

Расстояние между ядром и связанным протоном ( $\approx 0.3 \text{ \AA}$  для  $Z \approx 80$ ) гораздо меньше характерного размера волновых функций валентных электронов. Это означает, что химическое поведение такой системы после того, как к ней присоединился лишний электрон, чтобы нейтрализовать ее, должно быть похожим на поведение атома с порядковым номером  $Z + 1$ .

## Заключение

Скорее всего, искать на опыте предсказанное явление нужно, исследуя плазму или используя источник медленных протонов. Энергия, освобождающаяся при захвате протона, может сопровождаться процессами Оже или испусканием рентгеновских лучей. Описанный метод можно также применить для оценок энергии связи двух протонов с тяжелым атомом. Если среднее расстояние между протонами порядка  $0.3 \text{ \AA}$ , энергия их кулоновского отталкивания равна  $1/R = 1.7$  а.е. Эта величина меньше энергии связи, полученной в настоящей работе. В частности, это означает, что атомная система, рассмотренная в настоящей работе, может обеспечить стационарное сближение протона и дейтрона или двух дейтронов. Впрочем, детальный анализ основного состояния таких систем требует специального рассмотрения и находится за пределами настоящей работы. Можно добавить, что оценки указывают на возможность захвата также  $\alpha$ -частиц и  $\mu^+$ -мезонов.

Другой способ поиска двухъядерных атомов могут дать исследования атомных спектров. Энергетические уровни таких атомов не могут совпадать с уровнями обычных атомов ни с зарядом  $Z$ , ни с зарядом  $Z + 1$ .

Теория ТФ описывает средние атомные характеристики. Она не может описать индивидуальные свойства атомов, связанные с их периодичностью. Это относится и к нашим оценкам.

В настоящей работе не принимались во внимание релятивистские эффекты. Наши результаты справедливы для  $Z \gg 1$ . Общий вид кривых на рисунке одинаков для любых  $Z \gg 1$ : только положение и глубина потенциального минимума могут испытывать небольшие изменения. Наши численные расчеты проделаны для  $Z = 80$ . Для таких тяжелых атомов определенную роль могут играть релятивистские эффекты. Однако соответствующие поправки к волновым функциям могут быть существенны в непосредственной близости к ядру на расстояниях, гораздо меньших, чем положение потенциального минимума. В области, где существенно экранирование, это может сказаться на некотором изменении нормировочных постоянных волновых функций с малыми значениями  $l$ .

Особый интерес для нашей задачи представляют значения  $Z \sim 70-80$ , так как в этих случаях достаточно велико число  $f$ -электронов. Область, где их движение можно рассматривать классически, расположена далеко и от ядра, и от периферии атома. Эти электроны должны испытывать наиболее сильные возмущения со стороны протона и играть активную роль в экранировании. В то же время чем больше  $Z$ , тем точнее вследствие большого числа электронов производится процедура усреднения.

Несколько слов относительно точности наших вычислений. Как указывал Бете [12], теория ТФ оказывается полезной для расчета свойств, которые зависят от средних характеристик электронной системы. Например, уравнение Шрёдингера с потенциалом Томаса—Ферми—Дирака дает положение электронных уровней, отличающееся от значений, полученных по методу Хартри—Фока самое большее на несколько процентов [12,13]. Такая же точность получается при расчете электронного потенциала в точке, где расположено ядро [14]. Ландау и Лифшиц при анализе предельных значений  $Z$ , соответствующих появлению состояний с определенным значением  $l$ , оценивают точность, которую можно ожидать от модели ТФ, приблизительно в 10% (см. [7], § 73).

В наших расчетах потенциальная кривая получается в виде разности двух больших величин. Это означает, что разность должна превышать 10% от каждой из них. Вблизи минимума потенциальной кривой эти две величины отличаются на 30%. Это означает, что, скорее всего, точность наших расчетов достаточна. Желательно, однако, в будущем использовать более продвинутые методы для более детального исследования этой задачи и, в частности, чтобы получить более точные значения положения потенциального минимума у различных атомов, равно как и форму потенциальной кривой вблизи минимума. Это, в частности, должно облегчить экспериментальный поиск двухъядерных атомов. Экранированный потенциал (см. рисунок) может использоваться в качестве отправной точки при использовании более совершенных методов расчета. Следует подчеркнуть, что расчет, проделанный в настоящей работе, позволяет

проследить основные характеристики структуры двухъядерного атома. Более совершенные методы позволят уточнить форму кривых на рисунке. Однако физическая интерпретация результатов более совершенных методом расчета окажется несравненно сложнее, чем ясная физическая картина, основанная на приближении Томаса—Ферми.

Работа поддержана грантом РФФИ.

## Список литературы

- [1] *Teller E.* // *Rev. Mod. Phys.* 1962. Vol. 34. P. 627.
- [2] *Lieb E.H., Simon B.* // *Adv. Mathematics.* 1977. Vol. 23. P. 532.
- [3] *Dzuba V.A., Flambaum V.V., and Harabati C.* // *Phys. Rev. A.* 2000. Vol. 535. N 62. P. 042 504.
- [4] *Bromley M.W.J. and Mitroy J.* // *Phys. Rev. A.* 2002. Vol. 65. P. 062 506.
- [5] *Bromley M.W.J. and Mitroy J.* // *Phys. Rev. A.* 2006. Vol. 73. P. 032 507.
- [6] *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2001. 535 с.
- [7] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Физматлит, 2000. 752 с.
- [8] *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975. 335 с.
- [9] *Datta O., Jääskeläinen, and Meiste P.* // *Phys. Rev. A.* 2006. Vol. 73. P. 043 610.
- [10] *Laarman T. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 063 402.
- [11] *Pieri P., Stringari G.C.* // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96. P. 150 404.
- [12] *Bethe H.A.* Intermediate quantum mechanics. N.Y.: Behjamine, 1964. 428 p.
- [13] *Latter R.* // *Phys. Rev.* 1955. Vol. 99. P. 510.
- [14] *March N.H., Young W.H., and Sampanthar S.* The many-body problem in quantum mechanics. Cambridge: University Press, 1967. 315 p.