

УДК 539.12

DOI: 10.17223/00213411/62/12/21

В.В. СКОБЕЛЕВ, В.П. КРАСИН, С.И. СОЮСТОВА

О «ДВУМЕРНОЙ» МОЛЕКУЛЕ ВОДОРОДА

С использованием аналитических и численных методов впервые анализируется возможность существования «плоской» молекулы водорода H_2 в «двумерном» подпространстве трехмерного пространства, по аналогии с ранее теоретически доказанной (в т.ч. и одним из авторов) возможностью существования «двумерного» одно- и двухэлектронного атома и невозможностью наличия такого же многоэлектронного, на что впервые было указано этим же автором в одной из предыдущих работ. Показано, что «двумерные» молекулы водорода H_2 могут существовать с характеристиками, аналогичными обычным «трехмерным» молекулам. Выводы данной работы, в принципе, могут быть проверены экспериментально, так как «двумерные» атомы достаточно давно были получены на опыте.

Ключевые слова: двумерная молекула, водород.

Введение

Атомы с «пространственно-двумерными» электронными структурами достаточно давно получены экспериментально [1] (конкретно, это были атомы Na), а существование таких же водородоподобных (Ze) или двухэлектронных с аналогичными «трехмерными» характеристиками подтверждено теоретически (в т.ч. в предыдущих работах одного из авторов [2, 3]), многоэлектронные же «двумерные» атомы, как это показано им же в работе [4], по-видимому, нереализуемы. В связи с этим возникает естественный вопрос о возможности существования «двумерных» (т.е. «плоских») молекул, состоящих из двух таких же с соответствующим электронным распределением водородоподобных атомов.

Эта проблема, которая вообще не рассматривалась в доступной нам литературе, и является темой настоящей работы. Ссылки на другие источники, имеющие в упомянутом аспекте косвенное отношение к данному вопросу, можно найти в работах, приведенных в литературе. В наших рассуждениях мы будем ориентироваться на изложение материала для обычных «трехмерных» молекул H_2 , следуя традиционному курсу квантовой механики [5], или, в эквивалентной, более общей формулировке в классической работе [6].

Согласно [5], добавка к энергии обычных «трехмерных» атомов водорода в молекуле H_2 за счет их взаимодействия, рассматриваемого как малое возмущение, равна

$$V_{\text{SYM}}(R) = \frac{K + A}{1 + S}, \quad (1a)$$

для состояний, симметричных относительно перестановки координат электронов, и

$$V_{\text{ANT}}(R) = \frac{K - A}{1 - S} \quad (1b)$$

– для антисимметричных. При этом функции $S \equiv S(R)$, $K \equiv K(R)$, $A \equiv A(R)$ от расстояния R между ядрами определены следующим образом:

$$S = \int dV \psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (2a)$$

$$K = \int dV \psi_0^2(\mathbf{r}) \left[\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} \right], \quad (2b)$$

$$A = \int dV \psi_0(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \left[\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \right], \quad (2b)$$

где \mathbf{R} – радиус-вектор одного из ядер относительно другого; K представляет собой среднюю энергию его кулоновского взаимодействия с ионом водорода [5] (т.е. с другим ядром и «его» элек-

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>