

УДК 539.1.01, 539.189.2

*А.Н. Ипатов*

## **ВЛИЯНИЕ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМ ФЕРМИОНОВ**

*A.N. Ipatov*

St. Petersburg State Polytechnical University,  
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

### **INFLUENCE OF INTERPARTICLE INTERACTION ON THE OPTICAL PROPERTIES OF FERMIONIC SYSTEMS**

В статье обсуждается влияние многочастичных корреляций в конечных ферми-системах, содержащих равное количество частиц противоположного заряда, на их оптические свойства.

**ФЕРМИОНЫ. КОРРЕЛЯЦИИ. ПЛАЗМОН. ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ.**

An influence of many-particle correlations in finite fermionic systems with equal numbers of opposite charge particles on their optical properties is discussed in the article.

**FERMIONS. CORRELATIONS. PLASMON. POLARIZABILITY.**

В последние десятилетия в мире ведутся интенсивные исследования свойств наноразмерных ферми-систем, содержащих конечное число частиц. Примерами подобных систем являются микроскопические атомные кластеры, в частности кластеры из атомов щелочных металлов, в которых валентные электроны полностью делокализованы по всему объему системы и образуют оболочечную структуру. Обобществленные электроны определяют такие физические свойства подобных систем, как высокая дипольная поляризуемость и наличие гигантских резонансов в их спектрах фотопоглощения [1]. Особенности оптических характеристик конечных систем, в которых свободные электроны движутся в поле ионного ко́ра, хорошо описываются в рамках модели «желе», где положительный остов представляется в виде заряженного фона с некоторой непрерывной функцией распределения [2], причем полная энергия системы зависит от выбора функции распределения плотности заряда остова. Оказалось, что абсолютный минимум полной энер-

гии достигается в рамках оптимизированной желе-модели (ОЖМ) [3–6] при условии локальной электронейтральности системы, когда кулоновские потенциалы электронной и ионной подсистем взаимно компенсируют друг друга. Интересным примером конечных ферми-систем, в которых взаимодействующие частицы полностью делокализованы, являются электрон-позитронные кластеры, возможность существования которых была предсказана в ряде недавних теоретических работ [7–9]. Подобные объекты предположительно могут находиться в связанном состоянии благодаря кулоновским и поляризационным силам притяжения между электронной и позитронной подсистемами и, таким образом, принципиально отличаются от недавно обнаруженной экспериментально [10] молекулы дипозитрония, в которой две электрон-позитронных пары (атомы позитрония) связаны между собой ван-дер-ваальсовым взаимодействием [11, 12]. В электрон-позитронной «капле» подсистемы электронов и позитронов движутся в совместно создаваемом самосогла-



сованном поле, сохраняя всю систему в целом электронейтральной. Если исходить из полной симметрии капли относительно положительно и отрицательно заряженных частиц, то их плотности должны быть по абсолютной величине равны друг другу во всем объеме. При этом, как было продемонстрировано в работах [7–9], оптимальное распределение плотности обеих подсистем, обеспечивающее абсолютный минимум полной энергии, соответствует оптимизированной желе-модели. Однако, в отличие от ситуации с металлическими кластерами, ионный остов которых при описании их физических свойств в рамках модели желе считается неподвижным, в электрон-позитронных системах квантованным оказывается движение как электронов, так и позитронов.

Характерные свойства металлических кластеров, в частности наличие плазмонных резонансов в спектре возбужденных состояний [1], высокая поляризуемость и непосредственно связанная с ней способность к образованию отрицательных ионов [6], проявляются благодаря корреляциям в системе делокализованных валентных электронов. Определенное сходство между микроскопическими кластерами щелочных металлов и наноразмерными электрон-позитронными каплями, обусловленное наличием свободно движущихся фермионов, дает основания полагать, что в системах, образованных из электронов и позитронов, коллективные многочастичные эффекты также будут играть заметную роль.

Цель данной работы – исследование влияния корреляционных эффектов на оптические свойства электрон-позитронных кластеров. В рамках поставленной задачи было выведено уравнение, описывающее возбужденные состояния системы, состоящей из фермионов противоположного знака, в приближении случайных фаз с обменом (ПФСО). На основании предложенной теоретической модели были вычислены статические дипольные поляризуемости для ряда наиболее стабильных систем, содержащих «магические» числа частиц обоих типов, а также исследованы спектры возбужденных состояний в окрестности предполагаемого дипольного резонанса. Основное внимание уделялось исследованию влияния взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами на

оптические свойства кластеров, в связи с чем был проведен сравнительный анализ результатов расчетов, полученных в рамках оптимизированной желе-модели с учетом движения позитронов и при «замороженном» распределении положительного заряда. Следует отметить, что в рамках данной работы не принимались во внимание процессы, связанные с возможным аннигиляционным распадом кластеров, и время жизни исследуемых подсистем предполагалось большим, чем характерный период колебаний коллективных дипольных возбуждений [1].

В статье использовалась атомная система единиц:  $\hbar = |e| = m_e = 1$ .

### Теоретический подход

Рассмотрим систему взаимодействующих фермионов, содержащую равное количество частиц положительного и отрицательного заряда, связанных между собой кулоновским полем. Примером такого кластера является электрон-позитронная капля, содержащая по  $N$  частиц каждого вида, то есть система, состоящая из отрицательно и положительно заряженных фермионов с одинаковыми массами  $m_e = m_p = m = 1$ . Полная волновая функция основного состояния подобной системы, описываемой полным гамильтонианом  $\hat{H}_0$  с потенциалом парного межчастичного взаимодействия

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N -\frac{\Delta_i}{2} - \sum_{a=1}^N \frac{\Delta_a}{2} + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i^{(e)} - \mathbf{r}_j^{(e)}) + \sum_{a \neq b} V(\mathbf{r}_a^{(p)} - \mathbf{r}_b^{(p)}) + \sum_{i,a} V(\mathbf{r}_i^{(e)} - \mathbf{r}_a^{(p)}), \quad (1)$$

может быть представлена в виде произведения

$$\Xi(\mathbf{r}_1^{(e)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(e)}, \mathbf{r}_1^{(p)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(p)}) = \Psi^{(e)}(\mathbf{r}_1^{(e)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(e)}) \Phi^{(p)}(\mathbf{r}_1^{(p)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(p)}). \quad (2)$$

При этом выполняются условия нормировки

$$\langle \Psi^{(e)} | \Psi^{(e)} \rangle = \langle \Phi^{(p)} | \Phi^{(p)} \rangle = 1.$$

Здесь и далее индексы  $i, j$  обозначают заполненные, индексы  $m, n$  – незаполненные

(виртуальные) одночастичные состояния, а  $\mathbf{r}^{(e)}$ ,  $\mathbf{r}^{(p)}$  – электронные и позитронные координаты, соответственно.

В приближении Хартри–Фока многочастичные функции представляются в виде детерминантов

$$\begin{aligned} \Psi^{(e)} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_1(\mathbf{r}_1^{(e)}) \times \\ &\times \varphi_2(\mathbf{r}_2^{(e)}) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N^{(e)}); \\ \Phi^{(p)} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \varphi_1(\mathbf{r}_1^{(p)}) \times \\ &\times \varphi_2(\mathbf{r}_2^{(p)}) \dots \varphi_N(\mathbf{r}_N^{(p)}), \end{aligned} \quad (3)$$

составленных из одночастичных функций, являющихся собственными функциями системы уравнений Хартри–Фока:

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta_i}{2} \varphi_i(\mathbf{r}) + U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) - U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) + \\ + U_{\text{ex}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i^{(e)} \varphi_i(\mathbf{r}); \\ -\frac{\Delta_a}{2} \varphi_a(\mathbf{r}) + U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) - U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) + \\ + U_{\text{ex}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) = \varepsilon_a^{(p)} \varphi_a(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $U_{\text{H}}^{(e)}$ ,  $U_{\text{H}}^{(p)}$  – соответствующие хартриевские потенциалы. В случае системы, имеющей заполненные оболочки, они выражаются как

$$\begin{aligned} U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_j^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'; \\ U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_b^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_b^*(\mathbf{r}') \varphi_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (5)$$

а  $U_{\text{ex}}^{(e)}$ ,  $U_{\text{ex}}^{(p)}$  – нелокальные обменные потенциалы:

$$\begin{aligned} U_{\text{ex}}^{(e)}(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) &= - \sum_j^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_j^*(\mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \varphi_j(\mathbf{r}); \\ U_{\text{ex}}^{(p)}(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}) &= - \sum_b^{\text{occ}} \int \frac{\varphi_b^*(\mathbf{r}') \varphi_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \varphi_b(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (6)$$

При этом в рассматриваемом случае системы, обладающей центральной симметрией,

одночастичные волновые функции могут быть представлены в виде произведения радиальной, угловой и спиновой составляющих:

$$\varphi(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{\mu}(\sigma) \quad (7)$$

и характеризуются набором квантовых чисел  $n, l, m, \mu$  [13].

В рамках оптимизированной желе-модели [3], обеспечивающей абсолютный минимум полной энергии системы, в случае равенства масс  $m_e = m_p = m$  взаимодействующих частиц хартриевские потенциалы удовлетворяют условию локальной эквипотенциальности

$$U_{\text{H}}^{(e)}(\mathbf{r}) = U_{\text{H}}^{(p)}(\mathbf{r}) \quad (8)$$

в сочетании с условием локальной электро-нейтральности системы:

$$\rho^{(e)}(\mathbf{r}) + \rho^{(p)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \rho^{(e)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_i^{\text{occ}} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}); \\ \rho^{(p)}(\mathbf{r}) &= -2 \sum_a^{\text{occ}} \varphi_a^*(\mathbf{r}) \varphi_a(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (10)$$

Выбор знаков электронной и позитронной плотностей в формулах (10) сделан условно и на конечный результат влияния не оказывает.

Таким образом, при выполнении условий (8), (9) уравнения (4) имеют одинаковые наборы одночастичных волновых функций и энергий для обеих подсистем. Уравнения (4) с учетом (8) и условия ортонормированности и идентичности одночастичных функций в рамках модели ОЖМ также могут быть переписаны в матричном виде:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle + \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha i | | \beta i \rangle - 2 \sum_a^{\text{occ}} \langle \alpha a | | \beta a \rangle = \\ \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle - \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha \beta | ii \rangle = \delta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha}^{(e)}; \\ \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle + \sum_a^{\text{occ}} \langle \alpha a | | \beta a \rangle - 2 \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha i | | \beta i \rangle = \\ \langle \alpha | -\frac{\Delta}{2} | \beta \rangle - \sum_i^{\text{occ}} \langle \alpha \beta | aa \rangle = \delta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha}^{(p)}. \end{aligned} \quad (11)$$



Здесь и далее по тексту индексы  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  обозначают как заполненные, так и виртуальные состояния электронной и позитронной подсистем.

Матричные элементы

$$\langle \alpha\beta || \gamma\delta \rangle = 2\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\gamma | \beta\delta \rangle$$

межчастичного взаимодействия состоят из «прямой» (хартриевской) и обменной (фоковской) компонент, множитель 2 учитывает суммирование по проекции спина в хартриевском члене,  $\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle$  – кулоновский матричный элемент;

$$\langle \alpha\beta | \gamma\delta \rangle = \delta_{\sigma_\alpha \sigma_\gamma} \delta_{\sigma_\beta \sigma_\delta} \iint dr dr' \frac{\varphi_\alpha^*(r) \varphi_\gamma(r) \varphi_\beta(r') \varphi_\delta^*(r')}{|r - r'|}, \quad (12)$$

а индексы  $\sigma_\alpha, \sigma_\beta, \sigma_\gamma, \sigma_\delta$  обозначают проекции спина соответствующих одночастичных состояний.

Уравнения, описывающие оптический отклик рассматриваемой системы, могут быть получены в рамках метода слабого внешнего возмущения [14, 15]. Рассмотрим малое внешнее возмущение в виде  $\delta U = \mathbf{E}(t)\mathbf{r}$ , в линейном режиме вызывающее изменение одночастичных функций системы (3):

$$\begin{aligned} \varphi_i(\mathbf{r}, t) &= a_i(t) \left( \varphi_i(\mathbf{r}) + \sum_m C_{im}(t) \varphi_m(\mathbf{r}) \right); \\ \phi_a(\mathbf{r}, t) &= b_a(t) \left( \phi_a(\mathbf{r}) + \sum_s D_{as}(t) \phi_s(\mathbf{r}) \right). \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} a_i(t) &= \left( 1 + \sum_m |C_{im}(t)|^2 \right)^{-1/2}, \\ b_a(t) &= \left( 1 + \sum_s |D_{as}(t)|^2 \right)^{-1/2} \end{aligned}$$

– нормировочные множители.

Здесь и далее индексы  $i, j, a, b$  соответствуют заполненным, а  $m, n, s, t$  – незаполненным (виртуальным) одночастичным состояниям.

Отклонения электронной и позитронной плотности от равновесного распределения (10), возникающие под действием возмущения, могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \delta\rho^{(e)}(\mathbf{r}) &= 2 \sum_i^{occ} \delta \left( \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}) \right) = \\ &= 2 \left( \sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \sum_m C_{im} \varphi_m(\mathbf{r}) + \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \sum_m C_{im}^* \varphi_m^*(\mathbf{r}) \right); \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \delta\rho^{(p)}(\mathbf{r}) &= -2 \sum_a^{occ} \delta \left( \phi_a^*(\mathbf{r}) \phi_a(\mathbf{r}) \right) = \\ &= -2 \left( \sum_a \phi_a^*(\mathbf{r}) \sum_s D_{as} \phi_s(\mathbf{r}) + \sum_a \phi_a(\mathbf{r}) \sum_s D_{as}^* \phi_s^*(\mathbf{r}) \right). \end{aligned}$$

Изменяющаяся во времени полная волновая функция (2) удовлетворяет уравнению

$$\langle \Xi^*(t) | \widehat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} | \Xi(t) \rangle = 0, \quad (15)$$

где  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \delta U$ .

В приближении слабого внешнего поля, сохраняя только первые неисчезающие члены разложения по коэффициентам  $C_{im}(t)$ ,  $D_{as}(t)$ , после суммирования по спиновым переменным из уравнения (15) получим:

$$\begin{aligned} &i \sum_{im} C_{im}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} C_{im}(t) + i \sum_{as} D_{as}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} D_{as}(t) = \\ &= \sum_{im} |C_{im}|^2 \left( \varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)} \right) + \sum_{as} |D_{as}|^2 \left( \varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)} \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{im, jn} \left( C_{im}^* C_{jn}^* \langle jm || ni \rangle + C_{im} C_{jn} \langle ji || nm \rangle + \right. \\ &\quad \left. + C_{im}^* C_{jn} \langle nm || ji \rangle + C_{im} C_{jn} \langle ni || jm \rangle \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{as, bt} \left( D_{as}^* D_{bt}^* \langle bs || ta \rangle + D_{as} D_{bt} \langle ba || ts \rangle + \right. \\ &\quad \left. + D_{as}^* D_{bt} \langle ts || ba \rangle + D_{as} D_{bt} \langle ta || bs \rangle \right) + \\ &+ \sum_{im, as} \left( 2C_{im}^* D_{as}^* \langle am | si \rangle + 2C_{im} D_{as} \langle ai | sm \rangle + \right. \\ &\quad \left. + 2C_{im}^* D_{as} \langle sm | ai \rangle + 2C_{im} D_{as} \langle si | am \rangle \right) + \\ &+ \sum_{im} \left( C_{im}^* \langle m | \delta U | i \rangle + C_{im} \langle i | \delta U | m \rangle \right) + \\ &+ \sum_{as} \left( D_{as}^* \langle s | \delta U | a \rangle + D_{as} \langle a | \delta U | s \rangle \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Варьируя равенство (16) по независимым коэффициентам  $C_{im}^*(t)$  и  $D_{as}^*(t)$ , опустив при этом слагаемые, которые не изменяются под действием возмущения, и вновь сохраняя толь-

ко первые не исчезающие члены разложения, получаем систему линейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} C_{im}(t) &= C_{im} \left( \varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{jn} \left( C_{jn}^* \langle jm || ni \rangle + C_{jn} \langle nm || ji \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{as} \left( 2D_{as}^* \langle am || si \rangle + 2D_{as} \langle sm || ai \rangle \right) + \langle m | \delta U | i \rangle; \\
 i \frac{\partial}{\partial t} D_{as}(t) &= D_{as} \left( \varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left( D_{bt}^* \langle bs || ta \rangle + D_{bt} \langle ts || ba \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{im} \left( 2C_{im}^* \langle am || si \rangle + 2C_{im} \langle ai || sm \rangle \right) + \langle s | \delta U | a \rangle.
 \end{aligned} \tag{17}$$

Уравнения для  $C_{im}^*(t)$  и  $D_{as}^*(t)$  могут быть получены аналогично в результате комплексного сопряжения (17):

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} C_{im}^*(t) &= C_{im}^* \left( \varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{jn} \left( C_{jn}^* \langle ji || nm \rangle + C_{jn} \langle ni || jm \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{as} \left( 2D_{as}^* \langle ai || sm \rangle + 2D_{as} \langle si || am \rangle \right) + \langle i | \delta U | m \rangle; \\
 i \frac{\partial}{\partial t} D_{as}^*(t) &= D_{as}^* \left( \varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left( D_{bt}^* \langle ba || ts \rangle + D_{bt} \langle ta || bs \rangle \right) + \\
 &+ \sum_{im} \left( 2C_{im}^* \langle sm || ai \rangle + 2C_{im} \langle si || am \rangle \right) + \langle a | \delta U | s \rangle.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Полагая возмущение  $\delta U(t)$  гармоническим, будем искать решения системы уравнений (17), (18) в форме

$$\begin{aligned}
 C_{im}(t) &= X_{im}^{(e)} \exp(-i\Omega t) + Y_{im}^{*(e)} \exp(i\Omega t); \\
 D_{ab}(t) &= X_{ab}^{(p)} \exp(-i\Omega t) + Y_{ab}^{*(p)} \exp(i\Omega t),
 \end{aligned} \tag{19}$$

где  $X_{im}^{(e)}$ ,  $Y_{im}^{(e)}$  ( $X_{as}^{(p)}$ ,  $Y_{as}^{(p)}$ ) – так называемые амплитуды «вперед-во-времени» и «назад-во-времени» для электронной (позитронной) подсистемы.

Комбинируя слагаемые с одинаковыми экспоненциальными множителями, получаем

систему линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов «вперед-» и «назад-во-времени», полагая их действительными и вводя обозначения для частот переходов между одночастичными состояниями:

$$\omega_{im}^{(e)} = \varepsilon_m^{(e)} - \varepsilon_i^{(e)}, \quad \omega_{as}^{(p)} = \varepsilon_s^{(p)} - \varepsilon_a^{(p)}.$$

В отсутствие внешнего поля, то есть при условии  $\delta U = 0$ , уравнения для собственных частот и колебательных амплитуд системы выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}
 &\sum_{jn} \left( X_{jn}^{(e)} A_{im,jn}^{(e)} + Y_{jn}^{(e)} B_{im,jn}^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left( X_{bt}^{(p)} C_{im,bt} + Y_{bt}^{(p)} D_{im,bt} \right) = \Omega X_{im}^{(e)}; \\
 &\sum_{jn} \left( X_{jn}^{(e)} B_{im,jn}^{(e)} + Y_{jn}^{(e)} A_{im,jn}^{(e)} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left( X_{bt}^{(p)} D_{im,bt} + Y_{bt}^{(p)} C_{im,bt} \right) = -\Omega Y_{im}^{(e)}; \\
 &\sum_{jn} \left( X_{jn}^{(e)} C_{as,jn} + Y_{jn}^{(e)} D_{as,jn} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left( X_{bt}^{(p)} A_{as,bt}^{(p)} + Y_{bt}^{(p)} B_{as,bt}^{(p)} \right) = \Omega X_{as}^{(p)}; \\
 &\sum_{jn} \left( X_{jn}^{(e)} D_{as,jn} + Y_{jn}^{(e)} C_{as,jn} \right) + \\
 &+ \sum_{bt} \left( X_{bt}^{(p)} B_{as,bt}^{(p)} + Y_{bt}^{(p)} A_{as,bt}^{(p)} \right) = -\Omega Y_{as}^{(p)},
 \end{aligned} \tag{20}$$

где элементы эрмитовых матриц **A**, **B**, **C**, **D** в предположении того, что кулоновские матричные элементы (12) от одночастичных функций, полученных в результате решения уравнений (4), являются действительными, записываются как

$$\begin{aligned}
 A_{im,jn}^{(e)} &= \delta_{ij} \delta_{mn} \omega_{im}^{(e)} + \langle nm || ji \rangle = \\
 &= \delta_{ij} \delta_{mn} \omega_{im}^{(e)} + \langle ji || nm \rangle; \\
 B_{im,jn}^{(e)} &= \langle jm || ni \rangle = \langle ni || jm \rangle; \\
 A_{as,bt}^{(p)} &= \delta_{ab} \delta_{st} \omega_{as}^{(p)} + \langle ts || ba \rangle = \\
 &= \delta_{ab} \delta_{st} \omega_{as}^{(p)} + \langle ba || ts \rangle; \\
 B_{as,bt}^{(p)} &= \langle bs || ta \rangle = \langle ta || bs \rangle; \\
 C_{im,as} &= 2 \langle ai || sm \rangle = 2 \langle sm || ai \rangle; \\
 D_{im,as} &= 2 \langle am || si \rangle = 2 \langle si || am \rangle.
 \end{aligned} \tag{21}$$

В матричном виде система уравнений (20) может быть переписана в виде задачи на собственные числа, имеющей  $2(N_{eh} + N_{ph})$  независимых решений, где будем полагать, что  $N_{eh} = N_{ph}$  – число учитываемых одночастичных электрон-дырочных и позитрон-дырочных пар:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(e)} & \mathbf{B}^{(e)} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{B}^{(e)*} & \mathbf{A}^{(e)*} & \mathbf{D}^* & \mathbf{C}^* \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} & \mathbf{A}^{(p)} & \mathbf{B}^{(p)} \\ \mathbf{D}^* & \mathbf{C}^* & \mathbf{B}^{(p)*} & \mathbf{A}^{(p)*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{(e)} \\ \mathbf{Y}^{(e)} \\ \mathbf{X}^{(p)} \\ \mathbf{Y}^{(p)} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{(e)} \\ -\mathbf{Y}^{(e)} \\ \mathbf{X}^{(p)} \\ -\mathbf{Y}^{(p)} \end{pmatrix} \quad (22)$$

При этом из симметрии уравнения (22) следует, что для каждого собственного числа  $\Omega_v$  с соответствующим собственным вектором  $(\mathbf{X}_v^{(e)}, \mathbf{Y}_v^{(e)}, \mathbf{X}_v^{(p)}, \mathbf{Y}_v^{(p)})$  существует парное ему решение  $-\Omega_v$ ,  $(\mathbf{Y}_v^{(e)}, \mathbf{X}_v^{(e)}, \mathbf{Y}_v^{(p)}, \mathbf{X}_v^{(p)})$ , в силу чего имеет смысл рассматривать только  $(N_{eh} + N_{ph})$  решений с положительными собственными числами.

Следует отметить, что уравнение (22) с матрицей размера

$$2(N_{eh} + N_{ph}) \times 2(N_{eh} + N_{ph})$$

имеет общий характер и может быть использовано при описании собственных колебательных мод системы, состоящей из двух взаимодействующих фермионных подсистем, причем не обязательно состоящих из частиц одинаковой массы и не только в рамках модели ОЖМ.

В случае если одна из подсистем, например позитронная, оказывается «замороженной» по отношению к малому возмущению, то есть  $\delta\rho^{(p)}(\mathbf{r}) = 0$ , уравнение (22) приобретает вид стандартного уравнения ПСФО [15, 16]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^* & \mathbf{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ -\mathbf{Y} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Элементы собственных векторов матрицы уравнения (22) удовлетворяют условиям ортонормированности:

$$\begin{aligned} \sum_{mi} (X_{mi}^v X_{mi}^\mu - Y_{mi}^\mu Y_{mi}^v) &= \delta_{v\mu}; \\ \sum_v (X_{mi}^{v*} X_{nj}^v - Y_{mi}^{v*} Y_{nj}^v) &= \delta_{mn} \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $v$  – индекс собственного вектора уравнения (25), соответствующего собственному числу  $\Omega_v$ , равному частоте перехода из основного в  $v$ -е многочастичное возбужденное состояние системы.

Для системы, состоящей из равного числа частиц противоположного заряда и одинаковой массы, примером которой является электрон-позитронная «капля», в рамках модели ОЖМ из соображений симметрии между подсистемами, а также исходя из условий (8), (10) и эквивалентности решений уравнений (4) для обеих подсистем, следует искать решение уравнения (22) при дополнительном требовании для матриц, входящих в уравнение

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^{(e)} &= \mathbf{X}^{(p)}, \\ \mathbf{Y}^{(e)} &= \mathbf{Y}^{(p)}, \\ \mathbf{A}^{(e)} &= \mathbf{A}^{(p)}, \\ \mathbf{B}^{(e)} &= \mathbf{B}^{(p)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Данное условие позволяет преобразовать уравнение (22) к эквивалентной форме с матрицей того же размера  $2N_{eh} \times 2N_{eh}$ , что и у уравнения (23):

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}} & \tilde{\mathbf{B}} \\ \tilde{\mathbf{B}}^* & \tilde{\mathbf{A}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ -\mathbf{Y} \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{im,jn} &= A_{im,jn} + C_{im,jn} = \\ &= \omega_{im} \delta_{ij} \delta_{mn} + 4 \langle nm | ij \rangle - \langle ni | mj \rangle; \\ \tilde{B}_{im,jn} &= B_{im,jn} + D_{im,jn} = \\ &= 4 \langle jm | ni \rangle - \langle in | mi \rangle, \end{aligned} \quad (27)$$

а собственные векторы по-прежнему удовлетворяют условиям (24).

Статическая дипольная поляризуемость электронейтральной электрон-позитронной капли может быть представлена в виде суммы равных по величине поляризуемостей электронной и позитронной подсистем:

$$\alpha^{(e+p)} = \alpha^{(e)} + \alpha^{(p)} = 2\alpha^{(e)}. \quad (28)$$

При этом ее значение каждой из подсистем, составляющих кластер, может быть вычислено следующим образом [15]:

$$\alpha^{(e)} = \sum_{\nu} \frac{f_{\nu}}{\Omega_{\nu}^2}. \quad (29)$$

Здесь суммирование проводится по всем возбужденным состояниям системы, а  $f_{\nu}$  – сила осциллятора дипольного перехода между основным и  $\nu$ -м многочастичным возбужденным состоянием, частота которого  $\Omega_{\nu}$  определяется в результате решения уравнения (25):

$$f_{\nu} = \frac{4}{3} \Omega_{\nu} D_{\nu}^2. \quad (30)$$

Матричные элементы  $D_{\nu}$ , в свою очередь, вычисляются путем суммирования по всем одночастичным возбуждениям:

$$D_{\nu} = \sum_{im} (X_{im}^{\nu} d_{im} + Y_{im}^{\nu} d_{mi}), \quad (31)$$

где  $d_{im}$  – одночастичные дипольные амплитуды [15]:

$$d_{im} = \int P_{n,l_i}(r) r P_{n,l_m}(r) dr, \dots, l_m = l_i \pm 1. \quad (32)$$

### Результаты расчетов и обсуждение

В результате проведенных численных расчетов были получены распределения сил осцилляторов  $f_{\nu}$  (29) для спектров фотопоглощения и статические дипольные поляризуемости  $\alpha^{(e+p)}$  (28) электрон-позитронных кластеров, содержащих различное число частиц. Одночастичные волновые функции и энергии, необходимые для вычисления матричных элементов (27), были получены путем численного решения уравнений Хартри-Фока (4) при соблюдении дополнительных условий (8), (9). Следует отметить, что практический расчет радиальных компонент всех волновых функций проводился с использованием нулевых граничных условий для некоторого конечного радиуса  $R_{\max}$ . Таким образом, состояния как дискретной, так и непрерывной (выше потенциала ионизации) областей спектра были представлены в виде набора дискретных базисных функций.

Амплитуды  $X_{im}^{\nu}$ ,  $Y_{im}^{\nu}$ , а также энергии многочастичных возбужденных состояний  $\Omega_{\nu}$ , необходимые для расчета оптических характеристик исследуемых систем, в свою очередь,

были получены в результате численного решения матричного уравнения (25). Поскольку одной из основных целей работы являлось исследование влияния корреляционного взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами на оптические характеристики всей системы, для сравнения были проведены аналогичные расчеты спектров фотопоглощения и статических дипольных поляризуемостей  $\alpha^{(e0)}$  для кластеров, у которых распределение плотности положительного (позитронного) заряда в процессе возбуждения оставалось «замороженным» (FCM – Frozen Core Model). Для этого амплитуды «вперед-» и «назад-во-времени», а также частоты  $\Omega_{\nu}$  определялись из уравнения (23), матричные элементы которого вычислялись с использованием того же набора хартри-фоковских одночастичных функций, что и для уравнения (26).

На рис. 1 представлены результаты расчетов спектров фотопоглощения электронейтральных электрон-позитронных капель, содержащих различное число частиц. Обращает на себя внимание присутствующая в спектрах кластеров с  $N=2$  (рис. 1,а) и  $N=8$  (рис. 1,б) доминирующая линия, соответствующая гигантскому дипольному резонансу (поверхностному плазмону), что также является отличительной особенностью спектров фотопоглощения металлических кластеров [1], валентные электроны которых делокализованы по всему объему системы. При этом, как видно из рис. 1,а,б, взаимодействие между электронной и позитронной системами при дипольном возбуждении уже при малых значениях  $N$  приводит к заметному уменьшению силы осциллятора плазмонного резонанса по сравнению с резонансной линией в поле «замороженного» остова (FCM) и смещением плазмонной частоты в сторону более высоких энергий. Дальнейший рост числа частиц в кластере, как показано на рис. 1,в,г, сопровождается снижением силы осциллятора дипольного резонанса как по отношению к остальной части спектра, так и по отношению к ее значению, соответствующему «замороженному» распределению положительного заряда.

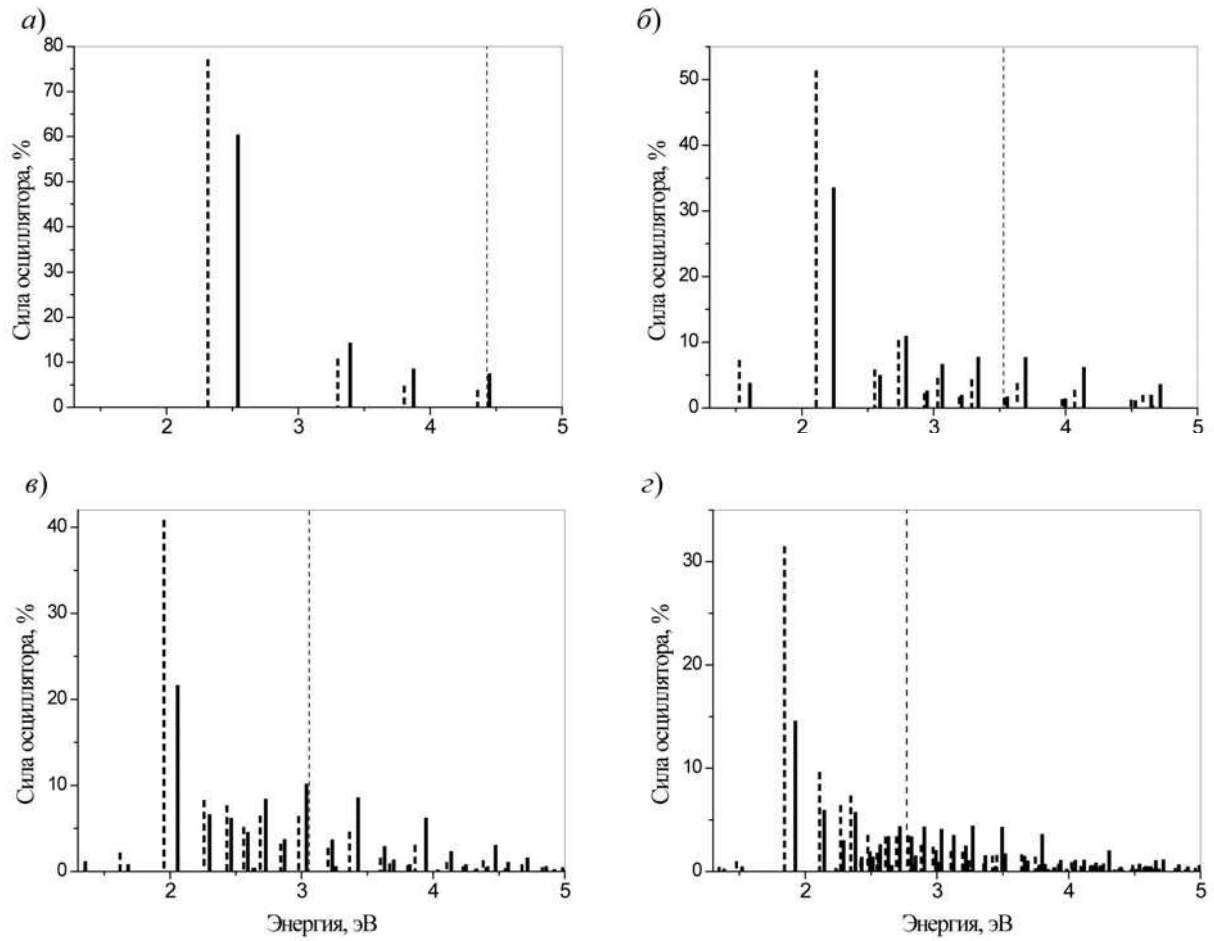


Рис. 1. Спектры дипольных возбуждений электрон-позитронных кластеров (сплошные линии), содержащих 2 (а), 8 (б), 20 (в) и 40 (з) частиц каждого вида. Жирными пунктирами показаны результаты расчетов в поле «замороженного остова» (FCM), тонкими пунктирами – положения потенциала ионизации системы

**Зависимость расчетных параметров электрон-позитронных кластеров от числа частиц  $N$  в системе**

$N$	$IP$ , эВ	$\sum_{\Omega_v < IP} f_v^{(e0)}, \%$	$\sum_{\Omega_v < IP} f_v^{(e+p)}, \%$	$\alpha^{(e+p)}$ , ат.ед.	$\alpha^{(e0)}$ , ат.ед.	$\alpha^{(e+p)}/\alpha^{(e0)}$
2	4,429	95,4	82,3	348	236	1,47
8	3,534	86,0	70,4	1598	1116	1,43
18	3,067	85,0	51,4	3504	2456	1,43
20	3,058	81,2	61,9	4092	2894	1,42
34	2,770	73,5	41,8	6450	4561	1,42
40	2,772	71,1	44,5	8260	5898	1,41
58	2,567	60,0	26,3	10768	7685	1,41
92	2,421	51,9	15,1	16864	12120	1,40

Обозначения:  $IP$  – потенциал ионизации;  $\Sigma \dots, \Sigma \dots$  – процентные доли сил осцилляторов, приходящихся на область энергий ниже  $IP$ ;  $\alpha^{(e+p)}, \alpha^{(e0)}$  – статические дипольные поляризуемости.

Примечание. Расчеты проводились как с учетом взаимодействия между подсистемами ( $e+p$ ), так и в поле «замороженного» положительного остова ( $e0$ ).



При этом, как видно из таблицы, по мере роста числа частиц в системе заметно уменьшается доля сил осцилляторов, приходящаяся на дискретную область спектра с энергиями переходов ниже потенциала ионизации  $IP$ . В случае «замороженного» остова уменьшение относительной доли дискретного спектра может быть объяснено снижением потенциала ионизации системы по мере увеличения числа частиц, что приводит к более интенсивному взаимодействию плазмонной моды с возбужденными состояниями из области непрерывного спектра и фрагментации резонансной линии.

Как видно из представленных на рис. 1, в, г спектров дипольных возбуждений, при увеличении числа частиц в кластере включение взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами практически приводит к полному распаду плазмонной моды в дискретной области спектра, что проявляется также в существенном снижении доли сил осцилляторов в этой области энергий по сравнению с результатами, полученными в рамках модели РСМ. Подобное перераспределение сил осцилляторов из дискретной области в непрерывный спектр может быть связано с тем, что по мере увеличения размеров системы распределение плотности заряда по объему становится более равномерным. С ростом  $N$  кластер по своим оптическим свойствам приближается к однородной электрон-позитронной плазме, для которой выполняется асимптотическое соотношение для частоты плазменных колебаний [17]:

$$\Omega_{pl}^{(e+p)} = \sqrt{2}\Omega_{pl}^{(e0)},$$

где  $\Omega_{pl}^{(e+p)}$ ,  $\Omega_{pl}^{(e0)}$  — соответственно, частоты с учетом динамического взаимодействия между электронной и позитронной системами и в поле «замороженного» положительного заряда.

С другой стороны, как было показано в работах [18, 19], в системах конечного размера многочастичные корреляции приводят к систематическому сдвигу резонансной частоты в область более низких энергий. Таким образом, заметный на рис. 1 сдвиг частоты доминирующего пика вправо по отношению к его положению в системе с «замороженным» остовом, сопровождаемый уменьшением его доли по

отношению к переходам в возбужденные состояния с более высокими энергиями, предположительно является результатом совместного влияния вышеупомянутых факторов.

Помимо изменений в спектрах возбужденных состояний в результате взаимодействия между электронной и позитронной подсистемами, интерес представляет влияние многочастичных корреляций на поляризуемость системы. В таблице приведены также результаты расчетов статической дипольной поляризуемости электрон-позитронных кластеров различного размера, полученные с учетом взаимодействия между подсистемами  $\alpha^{(e+p)}$  и в поле «замороженного» положительного остова  $\alpha^{(e0)}$ . Включение динамического взаимодействия между электронами и позитронами вызывает увеличение поляризуемости системы  $\alpha^{(e+p)}$  (28) по отношению к  $\alpha^{(e0)}$ . Однако, как видно из таблицы, корреляции между подсистемами приводят к тому, что полная поляризуемость кластера получается существенно меньше суммы поляризуемостей невзаимодействующих систем, т. е.

$$\alpha^{(e+p)} < \alpha^{(e0)} + \alpha^{(p0)} = 2\alpha^{(e0)},$$

а соотношение между их значениями оказывается практически одинаковым для кластеров, содержащих различное число частиц. Интересно отметить, что это соотношение остается практически постоянным независимо от сопутствующих изменений в спектре фотопоглощения.

В настоящей работе исследованы корреляционные эффекты в конечных системах, состоящих из противоположно заряженных фермионов на примере электрон-позитронных кластеров. Выведено уравнение, описывающее спектр многочастичных состояний подобной системы, учитывающее взаимодействие между подсистемами электронов и позитронов в рамках приближения случайных фаз с обменом. На основании предложенной теоретической модели проведены численные расчеты спектров дипольных возбуждений и статической дипольной поляризуемости электронейтральных электрон-позитронных капель, содержащих различное число частиц. Обнаружено, что учет



динамического взаимодействия между подсистемами приводит к заметным изменениям оптических свойств кластеров по сравнению с результатами, полученными в рамках модели, где электроны движутся в поле «замороженного» распределения положительного заряда. Оказалось, что взаимные корреляции вызывают существенный сдвиг частоты резонансной линии в сторону более высоких энергий с последующим смещением максимума фотопоглощения в область непрерывного спектра по мере увеличения числа частиц в кластере. Кроме того, наблюдается значительное уменьшение полной статической дипольной поляризуемости коррелированной системы по сравнению с суммой поляризуемостей электронной и позитронной

подсистем, полученных в рамках модели «замороженного остова». При этом обнаружено, что соотношение между ними остается практически постоянным для кластеров различного размера.

Учитывая существенное влияние корреляционного взаимодействия на оптические свойства конечных фермионных систем, в заключение следует отметить, что дальнейшее изучение многочастичных эффектов может, в частности, помочь решить вопрос о стабильности и времени жизни электрон-позитронных кластеров. Кроме того, исследование подобных объектов само по себе представляет немалый интерес в связи с развитием методов квантовой теории многих тел.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kreibig, U.** Optical properties of metal clusters [Текст]: Springer Series in Materials Science. Vol. 25. / U. Kreibig, M. Vollmer. — Berlin: Springer — Verlag, 1995. — 532 p.
2. **Ivanov, V.K.** Many-body calculations for metallic clusters using the jellium model [Текст] / V.K. Ivanov, A.N. Ipatov // Correlations of clusters and related systems. New perspectives on the many-body problem; ed. J.P. Connerade. — Singapore: World Scientific, 1996. — P. 141 — 167.
3. **Иванов, В.К.** Оптимизированная модель «желе» для металлических кластеров [Текст] / В.К. Иванов, В.А. Харченко, А.Н. Ипатов, М.Л. Жижин // Письма в ЖЭТФ. — 1994. — Т. 60. — С. 345 — 351.
4. **Иванов, В.К.** Оптимизированная модель «желе» для металлических кластеров с экранированным кулоновским взаимодействием [Текст] / В.К. Иванов, А.Н. Ипатов, В.А. Харченко // ЖЭТФ. — 1996. — Т. 109. — С. 902 — 916.
5. **Иванов, В.К.** Оптимизированная модель «желе» для кластеров с экранированным кулоновским взаимодействием [Текст] / В.К. Иванов, А.Н. Ипатов, В.А. Харченко // Известия РАН. Сер. физическая. — 1997. — Т. 61. — С. 1795 — 1807.
6. **Ipatov, A.N.** Many-particle effects in atomic clusters [Текст] / A.N. Ipatov, V.K. Ivanov, B.D. Agar'ev // Physics of clusters; Eds. V.D. Lakhno, G.N. Chuev. — Singapore: World Scientific, 1998. — P. 224 — 273.
7. **Solov'yov, A.V.** Electron-positron quantum droplets [Текст] / A.V. Solov'yov, V.K. Ivanov, R.G. Polozkov // Eur. Phys. J.; D. — 2006. — Vol. 40. — P. 313 — 316.
8. **Иванов, В.К.** К возможности существования электрон-позитронного кластера [Текст] / В.К. Иванов, Р.Г. Полозков, А.В. Соловьев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. — 2007. — № 1 (49). — С. 233 — 238.
9. **Яцышин, П.И.** Структура электрон-позитронных кластеров. Приближение Хартри — Фока [Текст] / П.И. Яцышин, В.К. Иванов, Р.Г. Полозков, А.В. Соловьев // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2009. — № 1 (73). — С. 9 — 16.
10. **Cassidy, D.B.** The production of molecular positronium [Текст] / D.B. Cassidy, A.P. Mills, Jr. // Nature. — 2007. — Vol. 449. — P. 195 — 197.
11. **Kinghorn, D.B.** Nonadiabatic variational calculations on dipositronium using explicitly correlated Gaussian basis functions [Текст] / D.B. Kinghorn, R.D. Poshusta // Phys. Rev. A. — 1993. — Vol. 47. — P. 3671 — 3681.
12. **Yabu, H.** Many positron and positronium interactions [Текст] / H. Yabu // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. — 2004. — Vol. 221. — P. 144 — 148.
13. **Ландау, Л.Д.** Теоретическая физика [Текст]: в 10 тт. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Наука, 1989. — 766 с.
14. **Amusia, M.Ya.** Collective effects in photoionization of atoms [Текст] / M.Ya. Amusia // Adv. At. Mol. Phys. — 1981. — Vol. 17. — P. 1 — 121.
15. **Амусья, М.Я.** Атомный фотоэффект [Текст] / М.Я. Амусья. — М.: Наука, 1987. — 272 с.
16. **Амусья, М.Я.** Процессы в многоэлектронных атомах [Текст] / М.Я. Амусья, В.К. Иванов, Н.А. Черепков, Л.В. Чернышева. — М.: Наука, 2006. — 326 с.
17. **Бучельникова, Н.С.** Начальные возмущения и ленгмюровские волны в электрон-позитронной плазме [Текст] / Н.С. Бучельникова, Е.П. Маточкин // Новосибирск: Изд-во ИЯФ, 1992. — 26 с.
18. **Gerchikov, L.G.** Multiple plasmons and anharmonic effects in small metallic clusters [Текст] / L.G. Gerchikov,

C. Guet, A.N. Ipatov // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 66. — P. 053201-1 — 053201-8.

19. **Ипатов, А.Н.** Нелинейное резонансное фотопоглощение металлическими кластерами в

сильном лазерном поле [Текст] /А.Н. Ипатов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. — 2009. — № 1 (73). — С. 17 — 27.

---

**ИПАТОВ Андрей Николаевич** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
andrei\_ipatov@mail.ru