ВІСНИК ЛЬВІВ. УН-ТУ *VISNYK LVIV UNIV.*
Серія фізична. 2006. Вип. 39. С. 54-59 *Ser. Physic. 2006. N 39. P.54-59*

УДК 530.145:539.184
PACS number(s): 03.65.Ge

ВИСОКОЗБУДЖЕНИЙ ДВОВИМІРНИЙ АТОМ ВОДНЮ У МАГНІТНОМУ ПОЛІ

А. Кротько[1], Ю. Степановський[2]

[1] *Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, пл. Свободи, 4, 61077 Харків, Україна*
[2] *Національний науковий центр Харківський фізико-технічний інститут, вул. Академічна, 1, 61108 Харків, Україна*
e-mail: itl1496@online.kharkov.ua

Проблема двовимірного атома водню у магнітному полі зведена до задачі про ангармонічний осцилятор шостого степеня. Розглянуто задачу про власні значення енергії високозбудженого атома. Особливо ретельно проаналізовано рівні енергії поблизу області іонізації. Одержані результати відповідають емпіричному масштабному законові. Обчислені енергетичні рівні добре узгоджуються з експериментальними даними.

Ключові слова: високозбуджений атом водню, магнітне поле, ангармонічний осцилятор.

Корисність застосування спінорної регуляризації [1–3] задачі Кеплера у небесній механіці вже доведена часом. Спінорна регуляризація кеплерової задачі також значно спрощує квантовомеханічну проблему атома водню. Наприклад, знана O(4) – симетрія атома водню стає цілковито очевидною. Спрощується також і задача про атом водню в однорідному зовнішньому електромагнітному полі. За допомогою спінорної регуляризації остання задача зводиться до задачі про ангармонічний осцилятор четвертого (електричне поле) або шостого (магнітне поле) степеня ангармонічності [4, 5].

Ми розглянемо спрощену версію спінорної регуляризації двовимірного кеплерового руху у площині *XY*, яка історично передує спінорній регуляризації тривимірної задачі. Введемо (за Т. Леві-Чивітою [6]) замість змінних *x, y* та часу *t* нові змінні *u,v* та *τ*, які визначаються співвідношеннями

$$x + iy = (u + iv)^2 / 4 \tag{1}$$

та

$$dt = r \cdot d\tau , \tag{2}$$

де $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Тепер рівняння

$$\frac{d^2u}{d\tau^2} + \omega^2 u = 0 , \quad \frac{d^2v}{d\tau^2} + \omega^2 v = 0 \tag{3}$$

відповідають кеплеровому руху, де $\omega = \pi a/T$ (a – велика піввісь кеплерового еліпсу, T – період руху). Кутова швидкість ω пов'язана з енергією руху формулою

$$E = -2\omega^2 m\,. \tag{4}$$

Заміна змінних (1) та (2) є регуляризацією, оскільки рівняння кеплерового руху у сингулярному потенціалі звелися до регуляризованих рівнянь гармонічного осцилятора.

Введемо канонічні координати та імпульси $q_1=u$, $q_2=v$, $p_1=du/d\tau$, $p_2=dv/d\tau$. Ми можемо тепер записати рівняння (3) у звичайному вигляді

$$\begin{aligned} dp_i/d\tau &= -\partial H/\partial q_i\,, \\ dq_i/d\tau &= \partial H/\partial p_i\,, \end{aligned} \tag{5}$$

де гамільтоніан

$$H = \frac{p_i^2}{2} + \frac{\omega^2 q_i^2}{2}\,. \tag{6}$$

Елементарні обчислення свідчать, що для кеплерового руху у потенціалі $-e^2/r$ гамільтоніан (6) дорівнює константі

$$H = \frac{e^2}{m}\,. \tag{7}$$

Зауважимо, що, по суті, з точністю до множника змінна τ збігається з ексцентричною аномалією ε, яка була введена у "Новій астрономії" (1609) Й. Кеплером. Нехай

$$\mathrm{u} = \mathrm{A}\sin\omega\,\mathrm{t}, \quad \mathrm{v} = \mathrm{B}\cos\omega\,\mathrm{t}\,. \tag{8}$$

Тоді для r одержимо рівняння Кеплера

$$r = (u^2 + v^2)/4 = a(1 - e\cos\varepsilon), \tag{9}$$

де

$$a = \frac{A^2 + B^2}{8}, \quad e = \frac{B^2 - A^2}{A^2 + B^2}, \quad \varepsilon = 2\omega\tau. \tag{10}$$

Розглянемо тепер рівняння Шрьодінгера для двовимірного атома водню, який перебуває у зовнішньому полі $V(x,y)$ (користуватимемося атомними одиницями $e=\hbar=m=1$)

$$E\varphi(x,y) = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \frac{1}{r} + V(x,y)\right]\varphi(x,y)\,. \tag{11}$$

Перейдемо до функції

$$\mathbf{\Phi}(u,v) = \varphi\left(\frac{u^2 - v^2}{4}, \frac{uv}{2}\right). \tag{12}$$

При такій заміні

$$r\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi = \left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)\mathbf{\Phi}\,. \tag{13}$$

Тепер (11) перепишемо як

$$\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2}\right) + \frac{\omega^2\left(u^2 + v^2\right)}{2} + \frac{u^2 + v^2}{4}V\right]\mathbf{\Phi} = H\mathbf{\Phi} = \mathbf{\Phi}\,, \tag{14}$$

де $\omega^2 = -E/2$. Рівняння (14), як бачимо, має вигляд рівняння Шрьодінгера для двовимірного ангармонічного осцилятора з ангармонічністю

$$\left(u^2+v^2\right)\cdot V\left[\frac{\left(u^2-v^2\right)}{4},\frac{uv}{2}\right]\Big/4\,.$$

Нехай W_n – власні значення гамільтоніану ангармонічного осцилятора H. Тоді з (13) випливає умова

$$W_n(\omega)=1$$

для визначення власних значень енергії атома водню

$$E_n=-2\omega_n^2. \tag{15}$$

У тому випадку, коли зовнішнє поле не існує, тобто $V=0$, рівняння (13) може бути переписане у такому вигляді

$$\omega(a_1^+a_1+a_2^+a_2+1)\mathbf{\Phi}=W_n(\omega)\mathbf{\Phi}=\mathbf{\Phi}, \tag{16}$$

де a_i та a_i^+ – звичайні оператори знищування та створення, побудовані з величин $u,v,\frac{\partial}{\partial u},\frac{\partial}{\partial v}$. Оскільки $\mathbf{\Phi}(u,v)$ є парна функція u та v, маємо

$$W_n(\omega)=(2n+1)\,\omega,\qquad n=1,2,3\ldots \tag{17}$$

З (14) та (15) знаходимо енергетичні рівні атома двовимірного атома водню

$$E_n=-\frac{1}{2(n+\frac{1}{2})^2}. \tag{18}$$

Очевидно, що співвідношення (16) інваріантне відносно O(3) – перетворень

$$\mathbf{\Phi}\to\mathbf{\Phi}'=\exp\left(i\,\vec{I}\,\vec{\Theta}\right)\mathbf{\Phi}, \tag{19}$$

де

$$\vec{I}=\frac{1}{2}\left(a^+\vec{\sigma}a\right) \tag{20}$$

є оператор кутового моменту Швінгера [7]. Це є фоківською O(3) – симетрією двовимірного атома водню.

Задача про двовимірний атом водню у зовнішньому полі є не тільки привабливою математичною проблемою. Двовимірному атому водню відповідає досить цікава фізична дійсність, наприклад, у випадку високозбуджених атомів водню у сильному магнітному полі [8]. Нехай магнітне поле **B** ортогональне до площини XY. У системі відліку, яка обертається з ларморовою частотою $\Omega=B/2c$, магнітне поле відсутнє, а функція $V(x,y)$ в (10) має вигляд

$$V=\frac{B^2}{8c^2}\left(x^2+y^2\right). \tag{21}$$

Рівняння (13) тепер перетворюється на рівняння

$$\frac{1}{2}\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial u^2}+\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)+\omega^2\left(u^2+v^2\right)+\left(\frac{B}{16c}\right)^2\left(u^2+v^2\right)^3\right]\mathbf{\Phi}=\mathbf{\Phi}\,. \tag{22}$$

Введемо в площині uv полярні координати ρ та φ, $u=\rho\cos\varphi$, $v=\rho\sin\varphi$. Нехай $\mathbf{\Phi}$ має вигляд $\mathbf{\Phi}=\exp(2iM\varphi)\chi(\rho)/\sqrt{\rho}$. Тоді з (22) одержимо:

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{16M^2-1}{4\rho^2}+\omega^2\rho^2+\left(\frac{B}{16c}\right)^2\rho^6\right]\chi=\chi\,. \qquad (23)$$

Для високозбуджених рідбергівських атомів не візьмемо до уваги доданок $1/\rho^2$ в (23) і одержимо рівняння

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{d^2}{d\rho^2}+\omega^2\rho^2+\left(\frac{B}{16c}\right)^2\rho^6\right]\chi=\chi\,. \qquad (24)$$

Рівняння (24) з граничними умовами $\chi(0)=\chi(\infty)=0$ визначає рівні енергії високозбудженого атома водню у магнітному полі B.

Енергетичні рівні рівняння (24) для великих значень n можна знайти за допомогою правила квантування Бора-Зоммерфельда, яке у нашому випадку набуває вигляду (на верхній межі інтегрування підінтегральний вираз обернеться на нуль)

$$\int_0^{\rho_0}\sqrt{1+2f(\beta)\rho^2-\beta^2\rho^6}\,d\rho=\frac{\pi}{4}, \qquad (25)$$

де $\beta=n^3B/c$ є новою змінною, яка визначає рівні енергії атома водню за допомогою функції $f(\beta)$,

$$n^2E_n=f(\beta). \qquad (26)$$

Співвідношення (26) відображає емпіричний масштабний закон [8], відповідно до якого величина n^2E_n є функцією тільки від $\beta=n^3B/c$.

Для від'ємних значень енергії ми знайшли таку формулу

$$n^2E_n=-\frac{1}{2}\left(1-\frac{5}{2^4}\beta^2+\frac{93}{2^{10}}\beta^4-\frac{315}{2^{13}}\beta^6\right)^2, \qquad (27)$$

яка добре узгоджується з експериментальними даними [8] при $0<\beta<0{,}7$.

В області іонізації, де змінюється знак енергії при $\beta=1{,}56$, n^2E_n визначається формулою

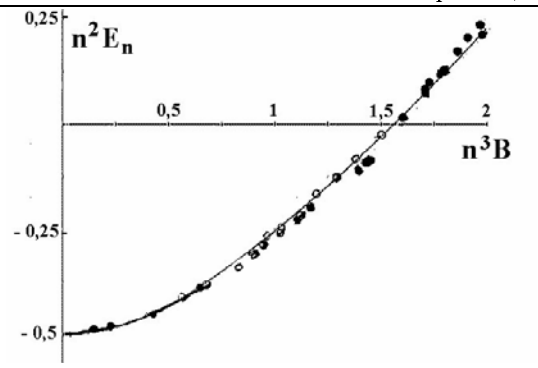
$$n^2E_n=\tfrac{3}{2}\beta^{2/3}(\xi-0{,}35659\xi^2+0{,}44758\xi^3-0{,}57130\xi^4+0{,}70593\xi^5-0{,}82253\xi^6), \qquad (28)$$

де

$$\xi=\beta^{1/3}-1{,}1596. \qquad (29)$$

Рівні енергії, які визначаються формулами (28) та (29), добре узгоджуються з експериментальними даними [8] при $0{,}4<\beta<4{,}0$.

На нижченаведеному рисунку, де обчислені рівні енергії (суцільна крива) порівнюються з експериментальними даними, ми бачимо добре узгодження теорії і експерименту.



Порівняння результатів обчислень з експериментальними даними

Скориставшись тим, що при малих α інтеграл

$$\int_0^{\rho_0} \sqrt{\alpha+2\rho^2-\rho^6}\,d\rho = \frac{\pi}{4}+\frac{\alpha}{4\sqrt{2}}\left(1+ln\frac{16\sqrt{2}}{\alpha}\right), \tag{30}$$

можна обчислити значення функції $f(\beta)$ для $\beta>>1$ за допомогою ітерацій, використовуючи співвідношення

$$f(\beta)=\beta-0,92713\frac{\beta}{\sqrt{f}}+0,22508\frac{\beta}{\sqrt{f}}ln\frac{\beta}{f^{3/2}}. \tag{31}$$

Обчислена за допомогою формули (31) функція $f(\beta)$ добре узгоджується з експериментом при $\beta>5$.

1. *Бакай А.С., Степановский Ю.П.* Адиабатические инварианты. К.: Наук. думка, 1981. 284 с.
2. *Степановский Ю.П.* Атом водорода во внешнем поле как ангармонический осциллятор // УФЖ. 1987. Т. 32. № 9. С. 1316–1321.
3. *Штифель Е., Шейфеле Г.* Линейная и регулярная небесная механика. М.: Наука, 1975. 304 с.
4. *Feneuille S.* Semiempirical scaling laws for diabatic energy levels of highly excited hydrogen atom in high magnetic fields // Phys. Rev. A. 1982. Vol. 26. № 1. P. 673–675.
5. *Kibler M., Negadi T.* Hydrogen atom in uniform electromagnetic field as an anharmonic oscillator // Letters al Nuovo Cimento. 1984. Vol. 39. № 14. P. 319–323.
6. *Kustaanheimo P.* Spinor regularization of Kepler motion // Ann. Univ. Turkuensis A. 1964. Vol. 73. N 1. P. 3–7.
7. *Levi-Civita T.* Trajettorie singolari ed urti nel problema ristretto dei tre carpi // Ann. Math. 1903. Vol. 9. № 1. P. 1–27.
8. *Schwinger J.* On angular momentum // In: Quantum theory of angular momentum. New York, London: Academic Press, 1964. P. 229–279.

HIGHLY EXCITED TWO-DIMENSIONAL HYDROGEN ATOM IN MAGNETIC FIELD

A. Krot'ko[1], Yu. Stepanovsky[2]

[1] Karazin Kharkiv National University,
Svoboda Square, 4, UA-61077 Kharkiv, Ukraine
[2] National scientific center Kharkiv Institute of physics and technology,
Akademichna St., 1, UA-61108 Kharkiv, Ukraine

The problem of two-dimensional hydrogen atom in magnetic field is reduced to the problem of anharmonic oscillator with a sextic anharmonicity. The eigenvalue problem of energy levels of two-dimensional highly excited atom is considered. The eigenvalue values in ionization limit are carefully investigated. The results are in accordance with empirical scaling law. The calculated quantity energy levels are in good agreement with experimental data.

Key words: highly excited hydrogen atom, magnetic field, anharmonic oscillator.

Стаття надійшла до редколегії 19.05.2004
Прийнята до друку 21.11.2005