ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2000, том 74, № 1, с. 80–83

МОДЕЛИ И МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

УДК 539.193

ПОЛУКЛАССИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДВУМЕРНОГО АТОМА ВОДОРОДА В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

© 2000 г. А. А. Гусев, В. В. Красильников, Н. А. Чеканов
Белгородский государственный университет

Для исследования плоского атома водорода при наличии внешнего однородного магнитного поля применен метод нормальных форм Биркгоффа–Густавсона. С помощью преобразования Леви–Чивита получен новый регуляризованный классический гамильтониан, соответствующий гамильтониану двух нелинейно связанных осцилляторов, для которого выведены классическая и квантовая нормальные формы Биркгоффа–Густавсона. Для квантового аналога нормальной формы решена задача на собственные значения, из которой в аналитическом виде получены энергетический спектр и волновые функции атома водорода в постоянном магнитном поле.

В последнее время растет интерес к исследованию динамических систем, допускающих классическое хаотическое движение. Известно, что хаотическое движение возможно, например, в гамильтоновых системах с двумя степенями свободы, для которых соответствующие классические уравнения движения неинтегрируемы. Очень важной задачей для таких систем является исследование квантового поведения энергетических уровней и волновых функций [1].

В настоящей работе рассматривается двумерный атом водорода при наличии однородного магнитного поля. Несмотря на то, что данная задача интегрируема, аналитический вид ее энергетического спектра неизвестен. Цель работы состоит в том, чтобы найти приближенные собственные значения гамильтониана данной задачи. Для этого применен метод нормальных форм [2] как в классическом, так и в квантовом случаях. Упомянутый метод применяется не к исходному гамильтониану, который имеет сингулярность в начале координат, а к регуляризованному гамильтониану, совпадающему с гамильтонианом системы двух нелинейным образом связанных осцилляторов. В работе найдены квантовая нормальная форма и алгебраическое уравнение, определяющие энергетический спектр регуляризованного гамильтониана в полуклассическом приближении.

Как известно, классический гамильтониан H для плоского атома водорода, находящегося в однородном магнитном поле B, перпендикулярном к плоскости (x, y), может быть записан в виде:

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{1}{(x^2+y^2)^{1/2}} + \frac{\gamma}{2}(xp_y - yp_x) + \frac{\gamma^2}{8}(x^2+y^2), \tag{1}$$

где p_x и p_y – импульсы, канонически сопряженные с координатами x и y. Здесь использованы атомные единицы и $\gamma = B/(2.35 \times 10^5 T)$.

Гамильтониан (1) может быть приведен к задаче двух связанных нелинейных осцилляторов с помощью преобразования Леви–Чивита [3] $(x, y, p_x, p_y) \longrightarrow (q_1, q_2, p_1, p_2)$, $t \longrightarrow \tau$:

$$x = (q_1^2 - q_2^2)/2(-2E)^{1/2}, \quad y = q_1q_2/(-2E)^{1/2},$$

$$\begin{aligned} p_x &= (q_1p_1 - q_2p_2)(-2E)^{1/2}/(q_1^2+q_2^2), \\ p_y &= (q_2p_1 + q_1p_2)(-2E)^{1/2}/(q_1^2+q_2^2), \end{aligned} \tag{2}$$

$$dt/d\tau = r/(-2E)^{1/2}, \quad r = (x^2+y^2)^{1/2},$$

где $E < 0$ – полная энергия атома водорода в однородном магнитном поле. При этом гамильтониан (1) принимает следующий вид:

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + q_1^2 + q_2^2) + \frac{\beta}{8}(q_1p_2 - q_2p_1)(q_1^2+q_2^2) + \frac{\beta^2}{128}(q_1^2+q_2^2)^3 - (-2/E)^{1/2}, \tag{3}$$

где $\beta = \gamma/(-E)$. Гамильтонианы $H(x, y, p_x, p_y) = E$ и $\tilde{H}(q_1, q_2, p_1, p_2) = 0$ дают одни и те же классические траектории, за исключением начала координат. Легко видеть, что гамильтониан (3) является гамильтонианом двух нелинейно связанных осцилляторов и не имеет сингулярности в нуле в отличие от исходного гамильтониана (1).

Далее с помощью канонических преобразований $(q, p) \longrightarrow (\xi, \eta)$, где $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ и $\eta = (\eta_1, \eta_2)$ гамильтониан (3) (без последнего постоянного члена) приводится к нормальной форме Биркгоффа–

Густавсона [2] в виде суммы однородных полиномов от переменных (ξ, η)

$$\tilde{H}(q, p) \longrightarrow \Gamma(\xi, \eta) = \sum_{s=2}^{s_{\max}} \Gamma^{(s)}(\xi, \eta). \tag{4}$$

При помощи REDUCE-программы GITA [4] мы получили нормальную форму Биркгоффа–Густавсона вплоть до членов степени $s_{\max} = 10$:

$$\Gamma(\xi, \eta) = \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(6)} + \Gamma^{(8)} + \Gamma^{(10)},$$

где

$$\Gamma^{(2)} = \frac{1}{2}(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2),$$

$$\Gamma^{(4)} = \frac{1}{16}\beta(\eta_1\xi_2 - \eta_2\xi_1)(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2),$$

$$\Gamma^{(6)} = \frac{5}{2048}\beta^2(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2)^3 - \frac{5}{512}\beta^2(\eta_1\xi_2 - \eta_2\xi_1)^2(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2),$$

$$\Gamma^{(8)} = \frac{15}{16384}\beta^3(\eta_1\xi_2 - \eta_2\xi_1)^3(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2) - \frac{11}{4096}\beta^3(\eta_1\xi_2 - \eta_2\xi_1)(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2)^3, \tag{5}$$

$$\Gamma^{(10)} = -\frac{393}{8388608}\beta^4(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2)^5 + \frac{495}{1048576}\beta^4(\eta_1\xi_2 - \eta_2\xi_1)^2(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2)^3 - \frac{469}{524288}\beta^4(\eta_1\xi_2 - \eta_2\xi_1)^4(\eta_1^2 + \eta_2^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2).$$

Для удобства последующего квантования введем комплексные переменные

$$z_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_k + i\xi_k),$$
$$z_k^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_k - i\xi_k), \quad (k = 1, 2), \tag{6}$$

тогда нормальная форма Биркгоффа–Густавсона примет вид

$$\Gamma(z, z^*) = \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(4)} + \Gamma^{(6)} + \Gamma^{(8)} + \Gamma^{(10)},$$

где

$$\Gamma^{(2)} = (z_1z_1^* + z_2z_2^*),$$

$$\Gamma^{(4)} = \frac{1}{8}i\beta(z_2z_1^* - z_1z_2^*)(z_1z_1^* + z_2z_2^*),$$

$$\Gamma^{(6)} = \frac{5}{256}\beta^2(z_1z_1^* + z_2z_2^*)^3 + \frac{5}{256}\beta^2(z_2z_1^* - z_1z_2^*)^2(z_1z_1^* + z_2z_2^*),$$

$$\Gamma^{(8)} = \frac{15}{2048}i\beta^3(z_1z_2^* - z_2z_1^*)(z_1z_1^* + z_2z_2^*)^3 + \frac{11}{2048}i\beta^3(z_1z_2^* - z_2z_1^*)^3(z_1z_1^* + z_2z_2^*), \tag{7}$$

$$\Gamma^{(10)} = -\frac{393}{262144}\beta^4(z_1z_1^* + z_2z_2^*)^5 - \frac{990}{262144}\beta^4(z_1z_2^* - z_2z_1^*)^2(z_1z_1^* + z_2z_2^*)^3 - \frac{469}{262144}\beta^4(z_1z_2^* - z_2z_1^*)^4(z_1z_1^* + z_2z_2^*).$$

Используя известное правило Вейля

$$z_k^m z_k^{*n} \longrightarrow \frac{1}{2^m}\sum_{l=0}^{m} \frac{m!}{l!(m-l)!}\hat{a}_k^{+l}\hat{a}_k^n\hat{a}_k^{+m-l}, \tag{8}$$

где операторы $\hat{a}_k^+$, $\hat{a}_k$ $(k = 1, 2)$ определяются соотношениями

$$\hat{a}_k^+ = \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi_k} - \xi_k\right), \quad \hat{a}_k = \frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\xi_k} + \xi_k\right) \tag{9}$$

с обычным правилом коммутации

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_k^+] = \delta_{lk}, \tag{10}$$

можно получить квантовую нормальную форму в виде следующего оператора:

$$\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^{(2)} + \hat{\Gamma}^{(4)} + \hat{\Gamma}^{(6)} + \hat{\Gamma}^{(8)} + \hat{\Gamma}^{(10)},$$

где

$$\hat{\Gamma}^{(2)} = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1,$$

$$\hat{\Gamma}^{(4)} = \frac{1}{8}i\beta(\hat{a}_2^+\hat{a}_1 - \hat{a}_1^+\hat{a}_2)(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1),$$

$$\hat{\Gamma}^{(6)} = \frac{5}{256}\beta^2(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1)^3 + \frac{5}{256}\beta^2(\hat{a}_2^+\hat{a}_1 - \hat{a}_1^+\hat{a}_2)^2(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1) + \frac{5}{256}\beta^2(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1),$$

$$\hat{\Gamma}^{(8)} = \frac{15}{2048}i\beta^3(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1)(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1)^3 + \frac{11}{2048}i\beta^3(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1)^3(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1) + \frac{7}{1024}i\beta^3(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1)(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1), \tag{11}$$

$$\hat{\Gamma}^{(10)} = -\frac{393}{262144}\beta^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1)^5 -$$
$$-\frac{990}{262144}\beta^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1)^2(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1)^3 -$$
$$-\frac{469}{262144}\beta^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1)^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1) -$$
$$-\frac{1950}{262144}\beta^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1)^3 -$$
$$-\frac{1198}{262144}\beta^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1)^2(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1) -$$
$$-\frac{1185}{262144}\beta^4(\hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1).$$

Для диагонализации квантовой нормальной формы (11) введем новые операторы так, как это делается в работе [5]

$$\hat{b}_1^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_1^+ + i\hat{a}_2^+), \quad \hat{b}_2^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(i\hat{a}_1^+ + \hat{a}_2^+) \tag{12}$$

с правилом коммутации

$$[\hat{b}_l, \hat{b}_k^+] = \delta_{lk}. \tag{13}$$

Заметим, что гамильтониан $\hat{N}$ двух несвязанных осцилляторов и оператор углового момента $\hat{L}$ имеют следующие выражения:

$$\hat{L} = i(\hat{a}_1^+\hat{a}_2 - \hat{a}_2^+\hat{a}_1) = -\hat{b}_1^+ b_1^+ + \hat{b}_2^+\hat{b}_2, \tag{14}$$

$$\hat{N} = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + 1 = \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1, \tag{15}$$

с помощью которых можно определить квантовую нормальную форму.

Гамильтониан (11) принимает вид

$$\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^{(2)} + \hat{\Gamma}^{(4)} + \hat{\Gamma}^{(6)} + \hat{\Gamma}^{(8)} + \hat{\Gamma}^{(10)},$$

где

$$\hat{\Gamma}^{(2)} = \hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1,$$

$$\hat{\Gamma}^{(4)} = \frac{1}{8}\beta(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1),$$

$$\hat{\Gamma}^{(6)} = \frac{5}{256}\beta^2(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1)^3 +$$
$$+\frac{5}{256}\beta^2(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)^2(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1) +$$
$$+\frac{5}{256}\beta^2(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1),$$

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma}^{(8)} = {} & \frac{15}{2048}\beta^3(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1)^3 + \\ & + \frac{11}{2048}\beta^3(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)^3(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1) + \\ & + \frac{7}{1024}\beta^3(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1),\end{aligned} \tag{16}$$

$$\hat{\Gamma}^{(10)} = -\frac{393}{262144}\beta^4(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1)^5 -$$
$$-\frac{990}{262144}\beta^4(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)^2(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1)^3 -$$
$$-\frac{469}{262144}\beta^4(-\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2)^4(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1) -$$
$$-\frac{1950}{262144}\beta^4(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1)^3 -$$
$$-\frac{1198}{262144}\beta^4(\hat{b}_1^+\hat{b}_2 - \hat{b}_2^+\hat{b}_1)^2(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1) -$$
$$-\frac{1185}{262144}\beta^4(\hat{b}_1^+\hat{b}_1 + \hat{b}_2^+\hat{b}_2 + 1).$$

Чтобы вычислить энергетический спектр E нашего исходного гамильтониана (1), сперва необходимо решить задачу на собственные значения для оператора (16)

$$\hat{\Gamma}|\lambda\rangle = \lambda(E)|\lambda\rangle, \tag{17}$$

где $|\lambda\rangle$ – векторы состояния и $\lambda(E)$ – собственные значения, которые зависят от энергии E начального гамильтониана (1). Легко проверить, что векторы состояния

$$\begin{aligned}|\lambda\rangle := |n, l\rangle = {} \\ = ((n+l)!(n-l)!)^{-1/2}(\hat{b}_1^+)^{(n+l)}(\hat{b}_2^+)^{(n-l)}|0\rangle,\end{aligned} \tag{18}$$

где вакуумное состояние $|0\rangle$ определено в виде $\hat{b}_1|0\rangle = \hat{b}_2|0\rangle = 0$, являются собственными векторами уравнения (17). Квантовые числа n, l являются собственными значениями операторов (14), (15)

$$\hat{N}|n, l\rangle = n|n, l\rangle, \quad \hat{L}|n, l\rangle = l|n, l\rangle \tag{19}$$

и должны принимать следующие значения: $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ и $l = \pm n, \pm(n-1), \ldots$, чтобы волновая функция атома водорода была однозначной [6].

Таким образом, можно легко определить собственные значения $\lambda(E)$ в виде

$$\lambda(E_{nl}) = 2n+1-\frac{\beta}{4}l(2n+1)+$$
$$+\frac{5\beta^2}{128}(-4l^2n-2l^2+4n^3+6n^2+4n+1)+$$
$$+\frac{\beta^3}{1024}l(-88l^2n-44l^2+120n^3+$$
$$+180n^2+118n+29)+\frac{\beta^4}{32768}(-1876l^4n-938l^4+ \tag{20}$$
$$+3960l^2n^3+5940l^2n^2+4168l^2n+1094l^2-$$
$$-1572n^5-3930n^4-5880n^3-4890n^2-2250n-441).$$

Уравнения (17) и (20) приводят к следующему алгебраическому соотношению:

$$\lambda(E_{nl}) = (-2/E_{nl})^{1/2}, \tag{21}$$

которое определяет энергетический спектр E_{nl} двумерного атома водорода при наличии однородного магнитного поля.

В заключение авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований (код проекта № 98-02-16160) и Конкурсный центр при Санкт-Петербургском университете (код проекта № 97-0-143-5) за финансовую поддержку.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Gutzwiller M.C.* Chaos in Classical and Quantum Mechanics. N.Y.: Springer, 1990.
2. *Gustavson F.* // Astron. J. 1966. V. 21. P. 670.
3. *Stiefel E.L., Scheifele G.* Linear and Regular Celestial Mechanics. Berlin: Springer, 1971.
4. *Basios V., Chekanov N.A., Markovski B.L. et al.* // Comp. Phys. Commun. 1995. V. 90. P. 355.
5. *Uwano Y.* // Physica D. 1989. V. 35. P. 1.
6. *Cisneros A., McIntosh H.* // J. Math. Phys. 1969. V. 10. P. 277.