

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Л-869

P2-87-910

И.В.Луценко*, Л.Г.Мардоян*, Г.С.Погосян*,
А.Н.Сисакян, В.Н.Тер-Антонян*

К СПЕКТРОСКОПИИ
ОДНОМЕРНОГО АТОМА ВОДОРОДА

Направлено в "Journal Physics A"

*Ереванский государственный университет

1987

Одномерным атомом водорода (1Н) принято называть систему, гамильтониан которой в атомных единицах ($\hbar = m = e = 1$) записывается в виде

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{|x|} \quad (1)$$

Система с таким гамильтонианом используется при исследовании поведения атома водорода в сильных магнитных полях. Более наглядной задачей, приводимой к 1Н, является квантовый аналог задачи о движении заряженной частицы в присутствии бесконечной проводящей плоскости, когда согласно известному в электростатике методу изображений мы имеем дело с двумя противоположными зарядами, расположенными симметрично относительно указанной плоскости.

Известно два подхода к 1Н. Первый из них^{/1/} использует регуляризованный потенциал $U(x, a) = -(x+a)^{-1}$, где a - положительный параметр, который в конечном счете устремляется к нулю. Второй подход^{/2/} имеет дело непосредственно с потенциалом $U = -|x|^{-1}$. В рамках первого подхода все возбужденные уровни энергии описываются формулой $E_n = -(2n^2)^{-1}$. Основного состояния не существует (падение на центр), возбужденные уровни двукратно вырождены и им соответствуют четные $\psi^{(+)}$ и нечетные $\psi^{(-)}$ состояния, причем $\psi^{(-)} = \text{sgn } x \cdot \psi^{(+)}$ и $\psi^{(+)}(0) = \psi^{(-)}(0) = 0$. Во втором подходе реализуется совершенно иная спектроскопия: при $E < 0$ наряду с невырожденным дискретным спектром $E_n = -(2n^2)^{-1}$, описываемым упомянутыми выше функциями $\psi^{(-)}$, возникает сплошной спектр, состоящий из полос, расположенных между n -м и $(n+1)$ -м уровнями, каждому из которых соответствует своя, отличная от отмеченных выше, четная волновая функция. Как видно из сказанного, оба подхода приводят к весьма экзотическим для одномерной квантовой механики вариантам спектроскопии. В первом подходе дискретный спектр вырожден, во втором - минимальному дискретному уровню соответствует нечетная волновая функция. Как то, так и другое выходит за рамки общепринятых утверждений одномерной квантовой механики^{/3/} и поэтому требует

отдельного объяснения. В отличие от второго подхода, первый подход получил развитие в работах^{/4-6/}, где с разных позиций было дано объяснение факту двукратной вырожденности дискретного спектра ИИ. В работе^{/4/} показано, что задача о ИИ физически эквивалентна задаче о движении частицы в поле двух осциллятороподобных ям, разделенных непроницаемым барьером. Как известно^{/7/}, для таких систем уровни энергии двукратно вырождены. Второй вариант объяснения спектроскопии ИИ был предложен в работе^{/5/} в рамках подхода, разработанного Хиллераасом еще на заре квантовой механики^{/8/}. Более глубокое теоретико-групповое объяснение случайного вырождения в ИИ было дано в работе^{/6/}, авторам которой удалось полностью распространить известную программу В.А.Фока^{/9/} на случай пространства с одним измерением. В этом отношении для завершения аналогии с атомом водорода желательно было бы получить для ИИ добавочный интеграл движения, играющий роль известного оператора Рунге-Ленца^{/10/}.

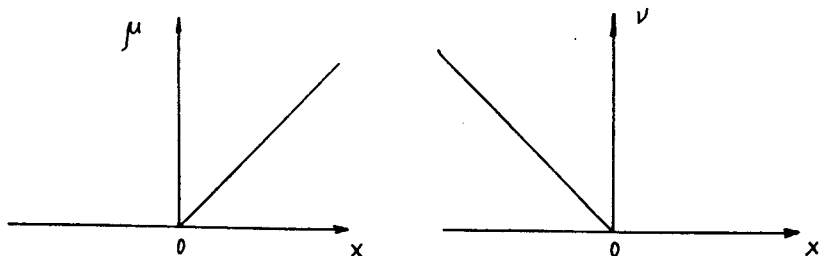
Для достижения этой цели мы используем своеобразный метод разделения переменных. Начнем с того, что для задания положения частицы в одномерье достаточно задать модуль координаты, т.е. $|x|$ и ее знак, т.е. $\text{sgn } x$. Такой подход аналогичен использованию, например, полярных координат в двумерье^{/11/}. В этом же смысле аналогом параболических координат являются координаты μ и ν , определенные следующим образом:

$$\mu = \theta(x) |x|, \quad \nu = \theta(-x) |x|. \quad (2)$$

Здесь $\theta(x)$ - ступенчатая функция, равная единице при положительных x , нулю - при отрицательных x и $1/2$ при $x=0$. Из (2) следует, что

$$\mu + \nu = |x|, \quad \mu - \nu = x. \quad (3)$$

Начертим для наглядности графики зависимости "параболических координат" μ и ν от реальной координаты x :



Как видно, координаты μ и ν играют роль координаты x при $x > 0$ и $x < 0$ соответственно. При $x \neq 0$ имеем

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \theta(x) \frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2} + \theta(-x) \frac{\partial^2\psi}{\partial\nu^2}. \quad (4)$$

Знак частной производной по каждой из параболических координат подразумевает, что вторая координата фиксирована и равна нулю. Это автоматически учитывается и функциями $\theta(x)$ и $\theta(-x)$.

Из (2) и (3) следует, что

$$\theta(x) = \frac{\mu}{\mu+\nu}, \quad \theta(-x) = \frac{\nu}{\mu+\nu},$$

и поэтому формулу (4) можно переписать в терминах координат μ и ν :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\mu}{\mu+\nu} \frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2} + \frac{\nu}{\mu+\nu} \frac{\partial^2\psi}{\partial\nu^2}. \quad (5)$$

После этого с помощью (5) и (3) для гамильтониана (I) имеем

$$\hat{H} = -\frac{\mu}{2(\mu+\nu)} \frac{\partial^2}{\partial\mu^2} - \frac{\nu}{2(\mu+\nu)} \frac{\partial^2}{\partial\nu^2} - \frac{1}{\mu+\nu}. \quad (6)$$

Записав теперь уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi \quad (7)$$

и представив функцию ψ в виде произведения $\psi_1(\mu)\psi_2(\nu)$, после разделения переменных и введения константы разделения A , приходим к двум уравнениям:

$$\mu\psi_1'' + 2\varepsilon\mu\psi_1 + \psi_1 = -A\psi_1,$$

$$\nu\psi_2'' + 2\varepsilon\nu\psi_2 + \psi_2 = A\psi_2.$$

Отсюда следует, что волновая функция ψ при $x \neq 0$ удовлетворяет уравнению

$$\hat{A}\psi \equiv \frac{\mu-\nu}{\mu+\nu}\psi = A\psi. \quad (8)$$

Это в свою очередь означает, что для произвольных X оператор \hat{A} может быть представлен в виде

$$\hat{A} = \text{sgn } x + \hat{B},$$

где оператор $\hat{B} = 0$ при $x \neq 0$ и выбран таким образом, чтобы соблюдалась коммутация оператора \hat{A} с гамильтонианом \hat{H} . Легко проверить, что указанным условиям удовлетворяет оператор

$$\hat{A} = \text{sgn } x - \frac{1}{2} E(x) \frac{d}{dx}, \quad (9)$$

где $E(x) = 4\theta(x)\theta(-x)$. В самом деле $E(x) = 0$ при $x \neq 0$ и поскольку

$$\left[\frac{d}{dx}, E(x) \right] = 0, \quad \left[\text{sgn } x, \frac{d^2}{dx^2} \right] = -2\delta'(x)$$

и вместе с этим

$$\left[E(x) \frac{d}{dx}, \frac{1}{|x|} \right] = -E(x) \frac{\text{sgn } x}{x^2} = -2E(x) \frac{\delta(x)}{x} = -2\delta'(x),$$

то $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$.

С гамильтонианом (I) коммутируют два оператора: оператор \hat{A} и оператор четности \hat{S} . Легко проверить, что операторы \hat{A} и \hat{S} антикоммутируют и потому не имеют общих собственных функций^{*}). Это означает, что оператор \hat{A} является добавочным интегралом движения и в отличие от \hat{S} отражает не геометрическую, а динамическую симметрию, установленную в работе [6], т.е. в самом деле \hat{A} — это аналог известного вектора Рунге-Ленца. Далее, не составляет труда убедиться, что собственные значения $\hat{A} = \pm 1$, а собственные функции, которые мы обозначим через ψ_R и ψ_L , имеют вид

$$\psi_R = \theta(x)\psi(x), \quad \psi_L = \theta(-x)\psi(x).$$

Согласно [1] каждому возбужденному уровню, как уже отмечалось, соответствуют две волновые функции: четная $\psi^{(+)}$ и нечетная $\psi^{(-)}$. Это общие собственные функции гамильтониана \hat{H} и оператора четности \hat{S} . Они аналогичны сферическим волновым функциям атома

^{*}) Коммутатор $[\hat{S}, \hat{A}] = 2\hat{S}\hat{A} = -2\hat{A}$ не приводит к новому интегралу движения.

водорода, причем роль момента импульса играет оператор \hat{S} , а роль сферических углов θ и φ - знак координаты X . В этом же смысле аналогом параболических волновых функций атома водорода в случае $1H$ являются введенные выше функции ψ_R и ψ_L . Известны линейные преобразования, связывающие между собой параболический и полярный базисы (т.е. волновые функции) атома водорода^{10/}. В случае $1H$ эти сложные преобразования заменяются тривиальными соотношениями $\psi_R = [\psi^{(+)} + \psi^{(-)}]/\sqrt{2}$ и $\psi_L = [\psi^{(+)} - \psi^{(-)}]/\sqrt{2}$.

Мы благодарны С.И.Виницкому, Л.С.Давтяну и Л.И.Пономареву за интересные обсуждения.

Литература

1. Loudon R. - Am. J. Phys., 27, 649-655, 1959.
2. Haines L., Roberts D. - Am. J. Phys., 37, 1145-1154, 1969.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Наука, М., 1974.
4. Давтян Л.С., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Препринт ОИЯИ, P2-87-45I, Дубна, 1987
5. Виницкий С.И., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, P2-86-57I, Дубна 1986.
6. Davtyan L., Pogosyan G., Sissakian A.N., Ter-Antonyan V.M. - J. Phys. A, Math. Gen. 20, 2765-2772, 1987.
7. Авакян М.Р., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Препринт ОИЯИ, P2-87-324, Дубна, 1987.
8. Hylleraas E. - Z. Phys. 74, 216, 1932
9. Fock V.A. - Z. Phys. 98, 145, 1935.
10. Bander M., Itzykson C. - Rev. Mod. Phys. 38, 330-345; 346-358, 1966.
11. Липкин Г. Квантовая механика. Новый подход к некоторым проблемам. Мир., М., 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 декабря 1987 года.

Луценко И.В. и др.

P2-87-910

К спектроскопии одномерного атома
водорода

Введено понятие об одномерных параболических координатах с помощью приема, напоминающего метод разделения переменных в уравнениях с частными производными, и установлен явный вид добавочного интеграла движения, аналогичного вектору Рунге-Ленца и объясняющего двухкратное вырождение возбужденных уровней энергии в одномерном атоме водорода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод авторов

Lutsenko I.V. et al.

P2-87-910

On Spectroscopy of a One-Dimensional
Hydrogen Atom

One-dimensional parabolic coordinates are introduced by a method similar to that of separation of variables in partial differential equations and an explicit form is established for an extra constant of motion analogous with the Runge-Lenz vector and responsible for the double generation of excited energy levels in a one-dimensional hydrogen atom.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987

6 коп.

Редактор Е.К.Аксенова. Макет Н.А.Киселевой.

Подписано в печать 29.12.87.

Формат 60x90/16. Офсетная печать. Уч.-изд.листов 0,43.

Тираж 490. Заказ 40049.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.
Дубна Московской области.