ПОЛУКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ К ЗАДАЧЕ ПЛОСКОГО АТОМА ВОДОРОДА В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В.В. Красильников, В.И. Куприков, В.Г. Сыщенко, Н.А Чеканов

В работе изучен двумерный атом водорода во внешнем однородном магнитном поле. С помощью преобразований Леви - Чивита классическая гамильтонова функция приводится к осцилляторной форме с нелинейными членами, к которой применяется процедура нормализации. Для гамильтоновой функции в нормальной форме получен ее квантовый аналог, и в результате решения уравнения Шредингера получено аналитическое выражение для энергетического спектра. Предложенный полуклассический подход может быть применен к описанию ридберговских состояний атома водорода в магнитном поле.

В последнее время наблюдается постоянно возрастающий интерес к изучению динамических систем, допускающих хаотическое движение в классическом пределе [1]. Известно, что хаотическое движение возможно, например, в гамильтоновых системах всего с двумя степенями свободы, если соответствующие классические уравнения движения не интегрируемы.

Еще более интригующим вопросом является квантовое поведение энергетических уровней и волновых функций в системах с неразделяющимися переменными [1]. В настоящей работе рассматривается двумерный атом водорода в постоянном магнитном поле [2-5]. Для его классического и квантового изучения применяется метод нормальных форм [6], который применяется не к исходному гамильтониану, содержащему сингулярность в начале координат, а к регуляризованному, который представляет собой систему из двух связанных нелинейно осцилляторов [7].

Для регуляризации гамильтониана получена квантовая нормальная форма и алгебраическое уравнение, из которого определяется энергетический спектр в квазиклассическом приближении.

1. Классический гамильтониан

Гамильтонова функция двумерного атома водорода в магнитном поле может быть получена при помощи известного «удлинения» импульсов p_x, p_y в гамильтониане свободного электрона, записанного с использованием матриц σ_x, σ_y Паули в виде

$$H_0 = \frac{1}{2}(\sigma_x p_x)^2 + \frac{1}{2}(\sigma_y p_y)^2. \qquad (1)$$

Выбирая компоненты векторного потенциала $A(A_x, A_y, A_z)$ в виде:

$$A_x = -\frac{1}{2} yB, \quad A_y = -\frac{1}{2} xB, \quad A_z = 0, \qquad \textbf{(2)}$$

где магнитное поле $B(0,0,B)$ перпендикулярно к плоскости (x,y) движения электрона, производим подстановку

$$p_x \to p_x - A_x, \qquad p_y \to p_y - A_y \qquad (3)$$

в гамильтонову функцию (1). Здесь и далее используются атомные единицы, и скорость света положена равной единице.

После обычных несложных преобразований, с учетом потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электрона с протоном ядра, получаем классический гамильтониан для двумерного атома водорода во внешнем магнитном поле:

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} + \frac{B}{2}(yp_x - xp_y) + \frac{B^2}{8}(x^2 + y^2). \qquad (4)$$

2. Регуляризация

Известно, что классическую систему, описываемую гамильтонианом (4), можно свести к задаче о двух связанных осцилляторах при помощи канонического преобразования Леви - Чивита [7].

Сначала для простоты записи перепишем гамильтониан (4) следующим образом

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{1}{r} + V, \qquad (5а)$$

где $r = \sqrt{x_x^2 + y_y^2}$, (5б)

$$V = \frac{1}{2}(yp_x - xp_y) + \frac{B^2}{8}(x^2 + y^2). \qquad (5в)$$

Следуя книге [7], произведем замену переменных $(x, y, p_x, p_y) \to (q_1, q_2, p_1, p_2)$:

$$x = \frac{q_1^2 - q_2^2}{2\sqrt{-2E}}, \quad y = \frac{q_1 q_2}{\sqrt{-2E}}, \qquad (6а)$$

$$p_x = \frac{(q_1 p_1 - q_2 p_2)\sqrt{-2E}}{q_1^2 + q_2^2}, \quad p_y = \frac{(q_1 p_2 + q_2 p_1)\sqrt{-2E}}{q_1^2 + q_2^2}, \qquad (6б)$$

где величина $E < 0$ обозначает полную энергию атома водорода в магнитном поле. Затем вводим новую гамильтонову функцию

$$H \to \tilde{H} = \frac{r}{\sqrt{-2E}}(H - E) \qquad (7)$$

и одновременно совершаем переход $t \to \tau$ к новой временной переменной τ согласно соотношению

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{r}{\sqrt{-2E}}, \qquad (8)$$

при этом система с функцией $\tilde{H}$ и новым временем τ будет гамильтоновой.

После выполнения указанных выше преобразований гамильтониан (7) примет следующий вид

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + q_1^2 + q_2^2) + \frac{B}{(-2E)}(q_1p_2 - q_2p_1)(q_1^2 + q_2^2) +$$
$$+ \frac{B^2}{32E^2}(q_1^2 + q_2^2)^3 - \sqrt{\frac{2}{-E}}, \qquad (9)$$

и при сохраняющейся полной энергии E гамильтонианы

$$H(x, y, p_x, p_e) = E \qquad (10а)$$

и

$$\tilde{H}(q_1, q_2\, p_1, p_2) = \sqrt{\frac{2}{-E}} \qquad (10б)$$

генерируют одинаковые классические траектории, исключая начало координат.

Однако гамильтониан (9), как легко видеть, состоит из двух осцилляторов, связанных нелинейно, и не содержит сингулярности в нуле, в отличие от исходного гамильтониана (4). Новая форма записи гамильтониана позволяет применить к нему метод нормальных форм [6] для построения классических решений, а также описать атом водорода в магнитном поле в полуклассическом приближении.

3. Нормализация

Так как гамильтониан (9) имеет вид

$$\tilde{H}(q, p) = \tilde{H}^{(2)}(q, p) + \sum_{s>2} \tilde{H}^{(s)}(q, p), \qquad (11)$$

где $\tilde{H}^{(s)}(q,p)$ обозначает однородный полином степени s по канонически сопряженным координатам $q=(q_1,q_2)$ и импульсам $p=(p_1,p_2)$, то его можно привести к так называемой нормальной форме, выполнив соответствующие канонические преобразования $(q,p)\to(\xi,\eta)$, где $\xi=(\xi_1,\xi_2)$; $\eta=(\eta_1,\eta_2)$. В результате гамильтониан (11) преобразуется в новый гамильтониан $G(\xi,\eta)$, который также представляется в виде суммы однородных полиномов по переменным (ξ,η) -

$$\tilde{H}(q,p)\to G(\xi,\eta)=\sum_{s=2} G^{(s)}(\xi,\eta), \qquad (12)$$

причем его члены, начиная от полинома степени s=2 до полинома степени $s=S_{max}$, будут в нормальной форме, то есть удовлетворять условию

$$D(\xi,\eta)G(\xi,\eta)=0, \qquad (13)$$

где $D(\xi,\eta)$ обозначает оператор нормальной формы [6].

Из-за сложности процедуры приведения исходного гамильтониана (9) к нормальной форме аналитические вычисления были проведены при помощи программы GITA [8] на REDUCE. Ниже для гамильтониана двумерного атома водорода в постоянном магнитном поле приводится явный вид модифицированной нормальной формы [9] до членов степени $S_{max}=6$ включительно:

$$G(\xi,\eta)=G^{(2)}+G^{(4)}+G^{(6)};$$

$$G^{(2)}=\xi_1\eta_1+\xi_2\eta_2;$$

$$G^{(4)}=\frac{B}{(-2E)}(\xi_2^2\eta_2^2-\xi_1^2\eta_1^2); \qquad (14)$$

$$G^{(6)}=\frac{1}{2}\left(\frac{B}{-2E}\right)^2(\xi_1\eta_1\xi_2^2\eta_2^2+\xi_1^2\eta_1^2\xi_2\eta_2-\xi_1^3\eta_1^3-\xi_2^3\eta_2^3)+$$

$$+\left(\frac{B}{-4E}\right)^2(\xi_1^3\eta_1^3+\xi_2^3\eta_2^3+9\xi_1\eta_1\xi_2^2\eta_2^2+9\xi_1^2\eta_1^2\xi_2\eta_2).$$

4. Квантовая нормальная форма

Теперь получим квантовый аналог для нормальной формы (14). Из приведенной выше нормальной формы видно, что она выражается через целые степени только двух комбинаций $(\xi_1\eta_1)$ и $(\xi_2\eta_2)$, т. е.

$$\hat{G}(\xi,\eta) = \sum_{i+k\geq 2} g_{\nu k}(\xi_1\eta_1)^{\nu}(\xi_2\eta_2)^{k}. \qquad (15)$$

Для получения квантового аналога при замене классических переменных на их квантовомеханические величины будем использовать правило соответствия Вейля

$$(\xi_\nu\,\eta_\nu)^n \to W\{(\xi_\nu\,\eta_\nu)^n\} = \frac{1}{2^n}\sum_{l=0}^{n}\frac{n!}{l!(n-l)!}\prod_{j=1}^{n}(\hat{\xi}_\nu\,\hat{\eta}_\nu - n + l + j),$$

$$\nu = 1, 2, \qquad (16)$$

где операторы $\hat{\eta}_\nu$ и $\hat{\xi}_\nu$ определяются как

$$\hat{\eta}_\nu = -i\frac{\partial}{\partial\xi_\nu} \text{ и } \hat{\xi}_\nu = \hat{\eta}_\nu^{+} \qquad (17а)$$

с правилом коммутации

$$\hat{\xi}_\nu\hat{\eta}_\nu - \hat{\eta}_\nu\hat{\xi}_\nu = i. \qquad (17б)$$

Проведя соответствующие вычисления, получим квантовую нормальную форму $\hat{G}$, которую представим в следующем виде

$$\hat{G}(\xi,\eta) = \hat{G}^{(2)} + \hat{G}^{(4)} + \hat{G}^{(6)},$$

$$\hat{G}^{(2)} = \hat{A}_1 + \hat{A}_2 + 1;$$

$$\hat{G}^{(4)} = \frac{B}{-2E}(\hat{A}_2^2 - \hat{A}_1^2 + \hat{A}_2 - \hat{A}_1); \qquad (18)$$

$$\hat{G}^{(6)} = \frac{1}{2}\left(\frac{B}{-2E}\right)^2(-\hat{A}_1^3 - \hat{A}_2^3 + \hat{A}_1^2\hat{A}_2 + \hat{A}_1\hat{A}_2^2 - \hat{A}_1^2 - \hat{A}_2^2 + 2\hat{A}_1\hat{A}_2 - \hat{A}_1 - \hat{A}_2 - 1) +$$
$$+ \left(\frac{B}{-4E}\right)^2(\hat{A}_1^3 + \hat{A}_2^3 + 9\hat{A}_1^2\hat{A}_2 + 9\hat{A}_1\hat{A}_2^2 + 6\hat{A}_1^2 + 6\hat{A}_2^2 + 18\hat{A}_1\hat{A}_2 + 11\hat{A}_1 + 11\hat{A}_2 + 6),$$

где введены операторы $\hat{A}_1 \equiv \hat{\xi}_1\hat{\eta}_1$ и $\hat{A}_2 \equiv \hat{\xi}_2\hat{\eta}_2$. (19)

5. Энергетический спектр

Описание двумерного атома водорода в постоянном магнитном поле при помощи квантовой нормальной формы (18) будем называть полуклассическим. В таком приближении сейчас вычислим энергетический спектр нашей задачи. Для этого необходимо решить уравнение Шредингера, которое запишем в виде

$$[\hat{G}^{(2)} + \hat{G}^{(4)} + \hat{G}^{(6)}]|\lambda\rangle = \lambda(E)|\lambda\rangle, \tag{20}$$

где величина $|\lambda\rangle$ обозначает вектор состояния, причем собственные значения $\lambda(E)$ уравнения (20) зависят от энергии E исходной задачи с гамильтонианом (4).

Известно [9], что решение уравнения Шредингера (20) может быть записано следующим образом

$$|\lambda\rangle \equiv |N, L\rangle = \mathrm{const}\, \hat{\xi}_2^{\frac{N-L}{2}} \hat{\xi}_1^{\frac{N+L}{2}} |0\rangle, \tag{21}$$

где вакуумное состояние $|0\rangle$ находят из условий

$$\hat{\eta}_1|0\rangle = \hat{\eta}_2|0\rangle = 0,$$

и N обозначает целое положительное число, а квантовое число

$$L = \pm(N-2), \pm(N-4), \cdots.$$

Так как вектор состояния $|\lambda\rangle$ в виде (21) является собственным для уравнения (20), то можно определить собственные значения $\lambda(E)$, которые при учете членов нормальной формы до степени S_{max} =6, включительно, равны

$$\begin{aligned} \lambda(E_{NL}) = N + 1 - \frac{B}{(-2E)} L(N+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{B}{-2E}\right)^2 (L^2N + L^2 + N + 1) - \\ \frac{1}{2}\left(\frac{B}{-2E}\right)^2 (3L^2N + 3L^2 - 5N^3 - 15N^2 - 2LN - 12). \end{aligned} \tag{22}$$

В силу равенств (10) получаем следующее уравнение

$$\lambda(E_{NL}) = \sqrt{-\frac{2}{E_{NL}}}, \tag{23}$$

из которого находят энергетический спектр E_{NL} для двумерного атома водорода в постоянном магнитном поле.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты № 98-02-16160 и № 97-0-143-5).

ЛИТЕРАТУРА

1. Gutzwiller M.C., Chaos in classical and quantum mechanics. Springer - Verlag, New York Inc., 1990.

2. Taut M. Two-dimensional hydrogen in a magnetic field: analytical solutions. J. Phys. A: Math. Gen. v. 28 (1995), P. 2081.

3. Ридберговские состояния атомов и молекул/ Пер. с анг. Под ред. Р.Стеббинса, Ф. Даннинга. - М.: Мир, 1985.

4. Лисица В.С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода// УФН. - Т.153. - Вып. 3. - 1987. - С.379.

5. Степановский Ю.П. Атом водорода в магнитном поле, супер ВКБ-квантование и уравнение Майорана // Проблемы теоретической физики: Сб. - Киев: Наукова думка, 1991.

6. Gustavson F.G. On constructing formal integrals of a Hamiltonian system near an equilibrium point. Astron. J., 1966, v. 71, N 8, P.670.

7. Штифель Е., Шейфеле Г. Линейная и регулярная небесная механика. - М.: Наука, 1975.

8. Basios V., Chekanov N.A., Markovski B.L., Rostovtsev V.A., Vinitsky S.I. GITA: a REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. Computer Physics Communication, v.90, 1995, P.355.

9. Чеканов Н.А. Квантование нормальной формы Биркгофа - Густавсона//ЯФ. - 1989. - Т.50. - Вып.8. - С.344.

ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ГЕНЕРАЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ В МАКРОСКОПИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

В.П.Воронов, Н.В. Камышанченко, М.А. Кумахов, Н.Н. Насонов, В.А. Насонова

Конструктивная интерференция полей переходного излучения, испускаемого движущейся в регулярной стопке диэлектрических пластин релятивистской частицей, приводит к реализации механизма резонансного переходного излучения (РТР) (см., например, [1]). Фотоны РТР распространяются под малыми углами к скорости излучающей частицы, поэтому механизм РТР практически не может быть использован для эффективной генерации мягкого рентгеновского излучения (сотни эВ) ввиду исключительно малой величины длины поглощения такого излучения в среде (единицы мкм).

С другой стороны, при движении быстрой заряженной частицы в слоистой среде реализуется параметрический механизм излучения, обусловленный отражением кулоновского поля частицы от слоев вещества с последующей интерференцией. Для случая взаимодействия быстрой частицы с кристаллом такой механизм назван параметрическим рентгеновским излучением (ПРИ) (см., например, обзор [2]).

Характерной особенностью ПРИ является большая величина угла