Письма в ЖЭТФ, том 34, вып.5, стр. 278 – 281 *5 сентября 1981 г.*

ПРИБЛИЖЕННЫЙ ИНТЕГРАЛ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Е.А.Соловьев

Показано, что уравнение Шредингера для высоковозбужденных состояний атома водорода в магнитном поле **H** допускает разделение переменных (с точностью до H^4) в эллипсо-цилиндрических координатах на сфере в четырехмерном импульсном пространстве. Для этих состояний предложена новая классификация и приближенные правила отбора.

Задаче об атоме водорода в магнитном поле посвящено большое число работ. В последнее время существенно усилился интерес к этой задаче в связи с обнаружением экспоненциального убывания расщепления уровней энергии в точке квазипересечения с ростом главного квантового числа n [1, 2]. Для объяснения этого явления в работах [1, 2] была высказана догадка о существовании приближенной скрытой симметрии. В данной работе такая симметрия найдена с помощью квазиклассической теории возмущений по магнитному полю. Квазиклассическое приближение здесь оправдано, так как речь идет о больших значениях n. Применимость теории возмущений в области квазипересечений обсуждалась в работе [1].

В невозмущенной задаче движение электрона происходит по кеплеровским эллиптическим траекториям. Нетривиальной частью возмущения является диамагнитное взаимодействие $V = 1/2\,\omega^2\rho^2$ (магнитное поле **H** направлено по оси z, $\rho^2 = x^2 + y^2$, $\omega = 2H/c$, $\hbar = m = e = 1$, c – скорость света). Для расчета изменения кеплеровской траектории под действием магнитного поля воспользуемся методом вековых возмущений [3], в котором движение электрона разбивается на движение по невозмущенной эллиптической траектории и медленное изменение параметров эллипса под действием возмущения V. В качестве параметров, задающих форму и ориентацию эллипса, выберем момент импульса $\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ и вектор Рунге – Ленца $\mathbf{A} = [\mathbf{p}\mathbf{L}] - \mathbf{r}/r$. Дифференцируя по времени $\mathbf{L}$ и $\mathbf{A}$, получаем уравнения, описывающие изменение этих величин под действием магнитного поля

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\omega^2\,[\mathbf{r}\vec{\rho}], \quad \frac{d\mathbf{A}}{dt} = -\omega^2\,\{[\mathbf{p}[\mathbf{r}\vec{\rho}]] + [\vec{\rho}[\mathbf{r}\mathbf{p}]]\}. \qquad (1)$$

При $\omega^2 \to 0$ изменение $\mathbf{L}$ и $\mathbf{A}$ за период вращения электрона по эллипсу стремится к нулю, поэтому можно усреднить правую часть уравнений (1) по периоду, считая в первом приближении $\mathbf{L}$ и $\mathbf{A}$ постоянными. Из получающихся после усреднения уравнений следует существование трех независимых интегралов движения:

$$L_z, \quad Q = L^2/(1 - A^2), \quad \Lambda = 4A^2 - 5A_z^2.$$

L_z – известный точный интеграл движения для атома водорода в магнитном поле, а Q и Λ – приближенные интегралы движения, сохраняющиеся с точностью до H^4. Величина Q равна большой полуоси эллипса [4] и ее сохранение отражает тот факт, что в первом приближении происходит блуждание частицы по эллиптическим траекториям, соответствующим невозмущенному значению энергии.

Существование интегралов движения L_z, Q и Λ позволяет аналитически описать каустики и сформулировать условия квантования Бора – Зоммерфельда. Из трех условий квантования два условия дают очевидный результат: $L_z = m$ (m – азимутальное квантовое число) и невозмущенное значение энергии $E_0 = 1/(2Q) = -1/(2n^2)$. Нетривиальным является третье условие квантования, из которого определяется значение интеграла движения Λ. При формулировке этого условия выберем в качестве обобщенной координаты угол θ между вектором Рунге – Ленца и осью z. Сопряженным этой координате обощенным импульсом является компонента момента импульса $L_\perp$, перпендикулярная плоскости, проходящей через ось z и вектор Рунге – Ленца. Используя условие $(\mathbf{L}\mathbf{A}) = 0$, выразим $L_\perp$ через интегралы движения и угол θ

$$L_\perp(\theta) = \sqrt{n^2\left(1 + \frac{\Lambda}{1 - 5\sin^2\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}}. \qquad (2)$$

В результате условие Бора – Зоммерфельда принимает следующий вид:

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} L_{\perp}(\theta)\, d\theta = \pi (k + 1/2), \tag{3}$$

где θ_1 и θ_2 корни $L_{\perp}(\theta)$. Важным обстоятельством здесь является наличие полюса под корнем в выражении (2) в точках $\pi - \theta_o$ и θ_o ($\operatorname{ctg} \theta_o = 2$). Вследствие этого, все траектории разбиваются на два неперекрывающихся класса: траектории с $\Lambda < 0$ (из определения Λ следует, что $-1 < \Lambda < 4$), либрирующие внутри конуса $0 < \theta < \theta_o$ (либо $\pi - \theta_o < \theta < \pi$), и траектории с $\Lambda > 0$, либрирующие вне этого конуса ($\theta_o < \theta < \pi - \theta_o$). Энергия в первом порядке теории возмущений выражается через среднее значение ρ^2 по периоду и равна

$$E = E_o + 1/2\, \omega^2 \overline{\rho^2} = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\omega^2 n^2}{4} (n^2 + m^2 + n^2 \Lambda_k). \tag{4}$$

Значение Λ_k определяется из условия квантования (3).

Интеграл движения Λ получен в квазиклассическом приближении. Можно также непосредственно показать, что оператор $\hat{\Lambda} = 4\hat{A}^2 - 5\hat{A}_z^2$ коммутирует с полным гамильтонианом системы в n-слое при больших значениях n. В работе [5], посвященной разделению переменных для атома водорода, среди различных вариантов рассматривался и такой, в котором в качестве независимых интегралов движения выбирались L_z и Λ. Используя результаты этой работы, получаем, что уравнение Шредингера для высоковозбужденных состояний атома водорода в магнитном поле допускает приближенное разделение переменных (с точностью до H^4) в эллипсо-цилиндрических координатах на сфере в четырехмерном импульсном пространстве. Относительно расщепления уровней в точке квазипересечения следует заметить, что факт экспоненциального убывания расщепления с ростом n не связан непосредственно с существованием приближенной симметрии. Такое убывание вызвано специфическим для данной задачи разбиением состояний на два класса ($\Lambda_k < 0$ и $\Lambda_k > 0$), локализованных в квазиклассическом приближении в двух неперекрывающихся областях конфигурационного пространства, поэтому расщепление определяется произведением волновых функций в классически запрещенной области, где они экспоненциально малы. Расщепление уровней $\Delta = \langle \psi_1 | V | \psi_2 \rangle$ можно оценить, учитывая характерный масштаб ридберговских состояний, следующим образом: в классически запрещенной области $\psi_i \sim e^{-r/n}$, заменяя в волновой функции r на среднее значение в n-слое при фиксированном m, получаем $\Delta \sim \sim \exp(-2n + m)$. Эта простая оценка хорошо согласуется с результатами работ [1, 2]. Очевидно и другие матричные элементы между состояниями разного класса будут экспоненциально малы. Например это относится к силам осциллятора, для которых, таким образом, возникают дополнительные приближенные правила отбора. Если рассматривать два состояния, принадлежащих одному классу, то в этом случае расщепление должно степенным образом убывать с ростом n (по-видимому, как n^{-3}). Полученные результаты указывают, что помимо известного разбиения состояний при фиксированном m по четности существует приближенное разбиение, связанное со знаком Λ. Таким образом, естественно выделить четыре класса состояний: ψ^{+}_{mg}, ψ^{-}_{mg}, ψ^{+}_{mu} и ψ^{-}_{mu} (значки g и u определяют, как обычно, четность состояний, а верхний индекс ($\pm$) – знак Λ). Если у двух состояний отличаются нижние индексы, то для таких состояний, как известно, квазипересечение превращается в точное пересечение. Для состояний, у которых отличается только верхний индекс, расщепление экспоненциально мало по большому параметру n. И,наконец, если все три индекса совпадают, расщепление степенным образом зависит от n.

Ленинградский
государственный университет
им. А.А.Жданова

Поступила в редакцию
7 июля 1981 г.

Литература

[1] *Zimmerman M.L., Kash M.M., Kleppner D.* Phys. Rev. Lett., 1980, **45**, 1092.

[2] *Delande D., Gay J.C.* Phys. Lett., 1981, **82A**, 393.

[3] *Паули В.* Труды по квантовой теории. М.: Наука, 1975.

[4] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1965.

[5] *Kalnins E.G., Miller W., Winternitz P.* Siam. J. Appl. Math., 1976, **30**, 630.