

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<sup>/1/</sup> использует регуляризованный потенциал  $U(x, a) = -(x+a)^{-1}$ , где  $a$  - положительный параметр, который в конечном счете устремляется к нулю. Второй подход<sup>/2/</sup> 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  $\psi^{(\pm)}$ , 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<sup>/3/</sup> и поэтому требует

отдельного объяснения. В отличие от второго подхода, первый подход получил развитие в работах<sup>/4-6/</sup>, где с разных позиций было дано объяснение факту двукратной вырожденности дискретного спектра 1Н. В работе<sup>/4/</sup> показано, что задача о 1Н физически эквивалентна задаче о движении частицы в поле двух осциллятороподобных ям, разделенных непроницаемым барьером. Как известно<sup>/7/</sup>, для таких систем уровни энергии двукратно вырождены. Второй вариант объяснения спектроскопии 1Н был предложен в работе<sup>/5/</sup> в рамках подхода, разработанного Хиллераасом еще на заре квантовой механики<sup>/8/</sup>. Более глубокое теоретико-групповое объяснение случайного вырождения в 1Н было дано в работе<sup>/6/</sup>, авторам которой удалось полностью распространить известную программу В.А.Фока<sup>/9/</sup> на случай пространства с одним измерением. В этом отношении для завершения аналогии с атомом водорода желательно было бы получить для 1Н добавочный интеграл движения, играющий роль известного оператора Рунге-Ленца<sup>/10/</sup>.

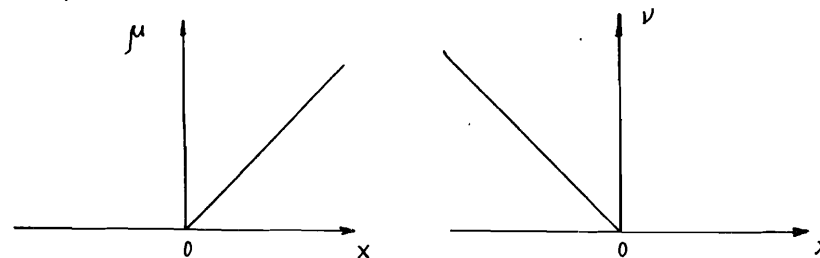
Для достижения этой цели мы используем своеобразный метод разделения переменных. Начнем с того, что для задания положения частицы в одномерье достаточно задать модуль координаты, т.е.  $|x|$  и ее знак, т.е.  $\text{sgn } x$ . Такой подход аналогичен использованию, например, полярных координат в двумерье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



Как видно, координаты  $\mu$  и  $\nu$  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  $\mu$  и  $\nu$ :

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

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  $\psi$  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  $\psi$  при  $x \neq 0$  удовлетворяет уравнению

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

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  $\hat{P}$ . Легко проверить, что операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{P}$  антикоммутируют и потому не имеют общих собственных функций<sup>\*</sup>. Это означает, что оператор  $\hat{A}$  является добавочным интегралом движения и в отличие от  $\hat{P}$  отражает не геометрическую, а динамическую симметрию, установленную в работе [8], т.е. в самом деле  $\hat{A}$  — это аналог известного вектора Рунге-Ленца. Далее, не составляет труда убедиться, что собственные значения  $A = \pm 1$ , а собственные функции, которые мы обозначим через  $\psi_R$  и  $\psi_L$ , имеют вид

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

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  $\hat{P}$ . Они аналогичны сферическим волновым функциям атома

<sup>\*</sup> Коммутатор  $[\hat{P}, \hat{A}] = 2\hat{P}\hat{A} = -2\hat{A}$  не приводит к новому интегралу движения.

водорода, причем роль момента импульса играет оператор  $\hat{S}$ , а роль сферических углов  $\theta$  и  $\varphi$  - знак координаты  $\chi$ . В этом же смысле аналогом параболических волновых функций атома водорода в случае 1Н являются введенные выше функции  $\psi_R$  и  $\psi_L$ . Известны линейные преобразования, связывающие между собой параболический и полярный базисы (т.е. волновые функции) атома водорода<sup>10/</sup>. В случае 1Н 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, P2-87-451, Дубна, 1987
5. Виницкий С.И., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, P2-86-571, 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 двукратное 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