

KLASIČNO GIBANJE ELEKTRONA V DVOATOMNI MOLEKULI

LUKA MEDIC

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

V članku je predstavljeno klasično gibanje elektrona v dvoatomni molekuli H_2^+ , pri čemer protona mirujeta. Predstavljeni sta vpeljavi eliptičnih koordinat in prevedba problema v brezdimenzijsko obliko. Sledi analitična obravnava problema, kjer je najprej prikazana rešitev planarnega problema, za splošen primer pa je izpeljana Whittakerjeva konstanta gibanja. V numerični obravnavi so prikazane Poincaréjeve sečne ploskve, ki potrjujejo, da je sistem integrabilen. Na koncu so zbrane še nekatere trajektorije gibanja elektrona v H_2^+ .

CLASSICAL DYNAMICS OF AN ELECTRON IN A DIATOMIC MOLECULE

The article presents the classical motion of an electron in a diatomic molecule H_2^+ , where both protons are stationary. Firstly, elliptic coordinates are presented and the problem is rewritten in a dimensionless form. The following is an analytical treatment of the problem, where the solution of the planar problem is shown, and for the general case the Whittaker constant of motion is derived. Finally, some trajectories of electron motion in H_2^+ are pictured.

1. Uvod

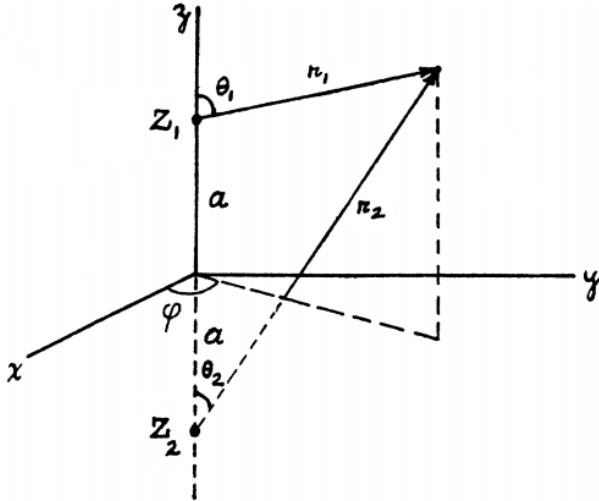
Problem treh teles je znan problem klasične fizike, za katerega vemo, da je v splošnem nerešljiv in kaotičen. S problemom treh teles so se med drugimi spoprijeli Euler, Lagrange, Liouville, Hamilton Poincaré, Whittaker... Prvi je poenostavitev problema predlagal Euler (1760), po katerem je imenovan Eulerjev problem treh teles, kjer privzamemo, da sta dve telesi mirujoči, določiti pa želimo trajektorijo tretjega telesa.

Eulerjev problem je bil sprva zastavljen kot planarni problem treh teles za približen izračun trajektorije lažjega telesa v gravitacijskem polju dveh masivnejših teles, ki krožita drug okoli drugega v konstantni oddaljenosti. Problem lahko gledamo tudi v vrtečem se sistemu masivnejših teles, v katerem le-ti mirujeta, lažje telo pa se giblje v njunem gravitacijskem potencialu, pri tem pa je potrebno upoštevati še sistemske sile, to sta centrifugalna in Coriolisova sila.

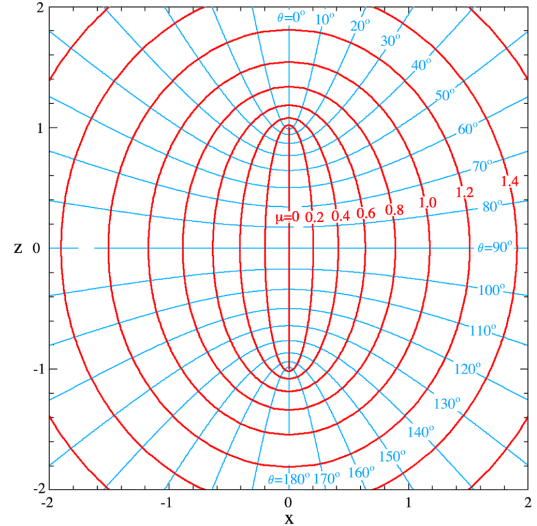
Wolfgang Pauli je kot prvi semiklasično obravnaval molekulo H_2^+ za študijo kemijske vezi, pri čemer je privzel, da protona mirujeta, elektron pa se giblje v njunem elektrostatskem potencialu. V tem članku je obravnavan slednji problem klasičnega gibanja elektrona v H_2^+ , pri čemer privzamemo, da sta protona mirujoča. Zanimala nas bo predvsem integrabilnost sistema, kar bomo preverili analitično z iskanjem konstant gibanja elektrona in numerično z izrisom Poincaréjevih sečnih ploskev.

2. Hamiltonov formalizem elektrona v H_2^+

Umestimo molekulo H_2^+ v koordinatni sistem. Naj bo molekula postavljena vzdolž osi z , protona pa se naj nahajata v fiksnih točkah $\mathbf{r}_{H1} = a \hat{e}_z$ in $\mathbf{r}_{H2} = -a \hat{e}_z$, torej njuna medsebojna razdalja je $2a$, kakor je prikazano na sliki 1. Označimo z $\mathbf{r} = x \hat{e}_x + y \hat{e}_y + z \hat{e}_z$ položaj elektrona, z r_1 in r_2 pa oddaljenosti elektrona od obeh protonov: $r_1 = \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{H1}\|$ in $r_2 = \|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{H2}\|$. Potencialna elektrostatska energija elektrona je $V = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$. Ker je problem osno simetričen, morda najprej pomislimo na vpeljavo cilindričnih koordinat (ρ, φ, z) , a vendar se ponuja še prikladnejši opis točke v prostoru z (r_1, r_2, φ) , ki pa je tesno povezan z elipsoidnim koordinatnim sistemom (ang. *prolate spheroidal coordinates*, tj. eliptični koordinatni sistem skupaj s kotom rotacije okoli



Slika 1. Koordinatni sistem dvocentralnega sistema. Prirejeno iz [2].



Slika 2. Eliptični koordinatni sistem s konstantnimi ploskvami μ in θ . Diagram je simetričen okoli osi z za rotacijo φ . Prirejeno iz [5].

zveznice skozi gorišči elipse φ) [1]

$$x = a \sinh \mu \sin \theta \cos \varphi \quad (1)$$

$$y = a \sinh \mu \sin \theta \sin \varphi \quad (2)$$

$$z = a \cosh \mu \cos \theta, \quad (3)$$

kjer so $\mu \geq 0$, $\theta \in [0, \pi]$ in $\varphi \in [0, 2\pi)$ nove koordinate. Za lažjo predstavo eliptičnih koordinat, so na sliki 2 prikazane ploskve s konstantnimi μ in θ .

Za oddaljenosti elektrona od protonov velja naslednja preprosta zveza

$$r_{1,2} = \sqrt{x^2 + y^2 + (z \mp a)^2} = a (\cosh \mu \mp \cos \theta), \quad (4)$$

ali obratno

$$\cosh \mu = \frac{r_1 + r_2}{2a} \quad (5)$$

$$\cos \theta = \frac{r_2 - r_1}{2a}. \quad (6)$$

Zapišimo še, kako se novi bazni vektorji $\mathbf{r}_\alpha \equiv \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \alpha}$ ($\alpha = \mu, \theta, \varphi$) izražajo s kartezičnimi baznimi vektorji \hat{e}_i ($i = x, y, z$):

$$\mathbf{r}_\mu = a (\cosh \mu \sin \theta \cos \varphi \hat{e}_x + \cosh \mu \sin \theta \sin \varphi \hat{e}_y + \sinh \mu \cos \theta \hat{e}_z) \quad (7)$$

$$\mathbf{r}_\theta = a (\sinh \mu \cos \theta \cos \varphi \hat{e}_x + \sinh \mu \cos \theta \sin \varphi \hat{e}_y - \cosh \mu \sin \theta \hat{e}_z) \quad (8)$$

$$\mathbf{r}_\varphi = a (-\sinh \mu \sin \theta \sin \varphi \hat{e}_x + \sinh \mu \sin \theta \cos \varphi \hat{e}_y). \quad (9)$$

Hitro se lahko prepričamo, da so novi bazni vektorji \mathbf{r}_α ortogonalni, vendar pa ne normirani, in sicer

$$\|\mathbf{r}_\mu\|^2 = \|\mathbf{r}_\theta\|^2 = a^2 (\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) \quad (10)$$

$$\|\mathbf{r}_\varphi\|^2 = a^2 \sinh^2 \mu \sin^2 \theta \quad (11)$$

$$\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{r}_\beta = 0, \quad \alpha \neq \beta. \quad (12)$$

Zapišimo časovni odvod položaja oz. hitrost elektrona v eliptični bazi kot

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{\mu}\mathbf{r}_\mu + \dot{\theta}\mathbf{r}_\theta + \dot{\varphi}\mathbf{r}_\varphi. \quad (13)$$

Iz ortogonalnosti baze sledi, da je velikost hitrosti enaka

$$\|\dot{\mathbf{r}}\|^2 = a^2(\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) (\dot{\mu}^2 + \dot{\theta}^2) + a^2 \dot{\varphi}^2 \sinh^2 \mu \sin^2 \theta. \quad (14)$$

Kinetična energija elektrona je $T = \frac{m}{2}\|\dot{\mathbf{r}}\|^2$, Lagrangeova funkcija je $L = T - V$, h koordinatam konjugirani impulzi pa so $p_\alpha \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}}$ ($\alpha = \mu, \theta, \varphi$), ki jih zapišemo kot

$$p_\mu = ma^2 \dot{\mu} (\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) \quad (15)$$

$$p_\theta = ma^2 \dot{\theta} (\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) \quad (16)$$

$$p_\varphi = ma^2 \dot{\varphi} \sinh^2 \mu \sin^2 \theta. \quad (17)$$

Označimo vrtilno količino elektrona vzdolž osi obeh protonov oz. z -osi z L_z in naj bo $\omega_z = \dot{\varphi}$ krožna frekvenca. Velja $L_z = m(x^2 + y^2)\omega_z = ma^2 \sinh^2 \mu \sin^2 \theta \dot{\varphi} = p_\varphi$. Torej impulz p_φ je vrtilna količina elektrona vzdolž z -osi.

Z dobljenimi količinami sedaj zapišimo Hamiltonovo funkcijo $H = T + V$, in sicer

$$H = \frac{p_\mu^2 + p_\theta^2}{2ma^2(\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta)} + \frac{p_\varphi^2}{2ma^2 \sinh^2 \mu \sin^2 \theta} - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a} \cdot \frac{2 \cosh \mu}{\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta}. \quad (18)$$

Ker H ni eksplicitno odvisen od φ (ciklična koordinata) in t , sta vrtilna količina vzdolž osi protonov p_φ (konjugiran moment φ) in energija E ohranjeni količini.

Problem poenostavimo v brezdimenzijsko obliko. Definirajmo enoto energije E_0 , vrtilne količine p_0 in časa t_0

$$E_0 = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a} \quad (19)$$

$$p_0 = \sqrt{ma^2 E_0} \quad (20)$$

$$t_0 = a\sqrt{m/E_0}. \quad (21)$$

S temi količinami lahko predefiniramo dimenzijske količine v brezdimenzijske na naslednji način:

$$H, E \rightarrow E_0 H, E_0 E \quad (22)$$

$$p_\mu, p_\theta, p_\varphi \rightarrow p_0 p_\mu, p_0 p_\theta, p_0 p_\varphi \quad (23)$$

$$t \rightarrow t_0 t, \quad (24)$$

tako da so po transformaciji H, p_μ, t brezdimenzijske količine merjene v enotah E_0, p_0, t_0 . Zgornje enačbe se tako prepišejo v

$$p_\mu = \dot{\mu} (\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) \quad (25)$$

$$p_\theta = \dot{\theta} (\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) \quad (26)$$

$$p_\varphi = \dot{\varphi} \sinh^2 \mu \sin^2 \theta \quad (27)$$

$$H(\mu, \theta, p_\mu, p_\theta; p_\varphi) = \frac{p_\mu^2 + p_\theta^2}{2(\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta)} + \frac{p_\varphi^2}{2 \sinh^2 \mu \sin^2 \theta} - \frac{2 \cosh \mu}{\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta} = E, \quad (28)$$

kjer sta edina neodvisna brezdimenzijska parametra E in p_φ , imamo pa dva para konjugiranih spremenljivk (μ, p_μ) in (θ, p_θ) . Za konjugirane spremenljivke veljajo Hamiltonove enačbe gibanja

$$\begin{aligned} \dot{\mu} &= \frac{\partial H}{\partial p_\mu} & \dot{p}_\mu &= -\frac{\partial H}{\partial \mu} \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H}{\partial p_\theta} & \dot{p}_\theta &= -\frac{\partial H}{\partial \theta}. \end{aligned} \quad (29)$$

3. Integrabilnost in separabilnost za $p_\varphi = 0$

Obravnavajmo primer za $p_\varphi = 0$. Tedaj je gibanje planarno, definicijsko območje pa je $\mu \in \mathbb{R}$ in $\theta \in [0, \pi]$. Zapišimo Hamiltonovo funkcijo (28) z $\dot{\mu}$ in $\dot{\theta}$

$$H = \frac{1}{2}(\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) (\dot{\mu}^2 + \dot{\theta}^2) - \frac{2 \cosh \mu}{\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta}. \quad (30)$$

V skladu z [3] definirajmo naslednje količine

$$F \equiv \dot{\mu}^2 + \dot{\theta}^2 \quad (31)$$

$$Y \equiv \cosh^2 \mu - \cos^2 \theta \quad (32)$$

$$W \equiv -2 \cosh \mu. \quad (33)$$

Ker sta Y in W oblike $Y = \chi_\mu(\mu) + \chi_\theta(\theta)$ in $W = \omega_\mu(\mu) + \omega_\theta(\theta)$ za poljubne funkcije χ_α in ω_α , Hamiltonova funkcija pa je oblike $H = \frac{1}{2}YF + \frac{W}{Y}$, je sistem separabilen, za posamezno posplošeno koordinato pa velja naslednje

$$\frac{1}{2}Y^2 \dot{\alpha}^2 = E\chi_\alpha - \omega_\alpha + \gamma_\alpha \quad \forall \alpha, \quad (34)$$

kjer so γ_α integracijske konstante, ki zaradi ohranitve energije zadoščajo zvezi $\sum_\alpha \gamma_\alpha = 0$ (za izpeljavo gl. [3]). Za naš primer dobimo torej

$$\frac{1}{2}(\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta)^2 \dot{\mu}^2 = E \cosh^2 \mu + 2 \cosh \mu - \gamma \quad (35)$$

$$\frac{1}{2}(\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta)^2 \dot{\theta}^2 = -E \cos^2 \theta + \gamma. \quad (36)$$

Slednji enačbi preuredimo in z vpeljavo parametra u dobimo

$$du = \frac{d\mu}{\sqrt{E \cosh^2 \mu + 2 \cosh \mu - \gamma}} = \frac{d\theta}{\sqrt{-E \cos^2 \theta + \gamma}}, \quad (37)$$

od tod pa sledi parametrična rešitev

$$u = \int \frac{d\mu}{\sqrt{E \cosh^2 \mu + 2 \cosh \mu - \gamma}} = \int \frac{d\theta}{\sqrt{-E \cos^2 \theta + \gamma}}, \quad (38)$$

katero se da zapisati v obliki eliptičnih integralov. Za $p_\varphi = 0$ smo torej pokazali, da je sistem separabilen in integrabilen.

4. Integrabilnost in Whittaker-jeva konstanta

Vrnimo se na splošen primer $p_\varphi \neq 0$. V tem primeru Liouvillovega izreka ne moremo uporabiti, vendar bomo pokazali, da je sistem kljub temu integrabilen.

V prostoru gibajoč elektron ima 6-dimenzionalni fazni prostor (x, y, z, p_x, p_y, p_z) . Ta sistem je *Liouvillovo integrabilen*, če obstajajo 3 neodvisne konstante gibanja F_j , za katere velja $\{F_j, F_k\} = 0$ za vsak par j, k .¹ Za primer elektrona smo že pokazali dve konstanti gibanja: energijo E in vrtilno količino vzdolž z -osi p_φ . Poiščimo še tretjo ohranjeno količino.

Kot v poglavju 2. imejmo vse količine v brezdimenzijski obliki. Zapišimo Newtonov zakon za elektron

$$\dot{\mathbf{p}} \equiv \ddot{\mathbf{r}} = -\frac{\mathbf{r}_1}{r_1^3} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2^3}, \quad (39)$$

¹ $\{\bullet, \bullet\}$ je Poissonov oklepaj

kjer je \mathbf{p} brezdimenzijska gibalna količina merjena v enotah $\sqrt{mE_0}$, \mathbf{r} je položaj elektrona glede na izhodišče (razpolovišče zveznice med protonoma), $\mathbf{r}_{1,2} = \mp \hat{e}_z$ sta položaja glede na prvi oz. drugi proton, $r, r_{1,2}$ in p pa označimo norme vektorjev.

Definirajmo vrtilni količini glede na oba protona $\mathbf{L}_{1,2} = \mathbf{r}_{1,2} \times \mathbf{p}$ in izračunajmo naslednjo količino:

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2) = \dot{\mathbf{L}}_1 \cdot \mathbf{L}_2 + \mathbf{L}_1 \cdot \dot{\mathbf{L}}_2. \quad (40)$$

Z upoštevanjem (39) in definicije gibalne količine $\mathbf{p} \equiv \dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{r}}_1 = \dot{\mathbf{r}}_2$ dobimo

$$\dot{\mathbf{L}}_{1,2} = \dot{\mathbf{r}}_{1,2} \times \mathbf{p} + \mathbf{r}_{1,2} \times \dot{\mathbf{p}} = \mp \frac{\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2}{r_{2,1}^3} = \mp 2 \frac{\mathbf{r}_{2,1} \times \hat{e}_z}{r_{2,1}^3}, \quad (41)$$

kjer smo v zadnjem koraku izračunali vektorski produkt $\mathbf{r}_{1,2} = \mp \hat{e}_z$ in upoštevali $\mathbf{r} \times \hat{e}_z = \mathbf{r}_{1,2} \times \hat{e}_z$.

Imamo torej

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2) = -2 \frac{(\mathbf{r}_2 \times \hat{e}_z) \cdot (\mathbf{r}_2 \times \dot{\mathbf{r}}_2)}{r_2^3} + 2 \frac{(\mathbf{r}_1 \times \dot{\mathbf{r}}_1) \cdot (\mathbf{r}_1 \times \hat{e}_z)}{r_1^3}. \quad (42)$$

Ker sta člena med seboj podobna, si približje ogljemo le drugi člen. Definirajmo enotski vektor $\hat{e}_1 \equiv \frac{1}{r_1} \mathbf{r}_1$. Velja naslednje:

$$\mathbf{r}_1 \times \dot{\mathbf{r}}_1 = r_1 \hat{e}_1 \times (\dot{r}_1 \hat{e}_1 + r_1 \dot{\hat{e}}_1) = r_1^2 \hat{e}_1 \times \dot{\hat{e}}_1. \quad (43)$$

Od tod z upoštevanjem $\|\hat{e}_1\|^2 = 1$ in $\hat{e}_1 \cdot \dot{\hat{e}}_1 = 0$ (kar dobimo iz časovnega odvoda $\|\hat{e}_1\|^2 = 1$) sledi

$$\begin{aligned} 2 \frac{(\mathbf{r}_1 \times \hat{e}_z) \cdot (\mathbf{r}_1 \times \dot{\mathbf{r}}_1)}{r_1^3} &= 2 (\hat{e}_1 \times \hat{e}_z) \cdot (\hat{e}_1 \times \dot{\hat{e}}_1) = 2 \left(\|\hat{e}_1\|^2 \hat{e}_z \cdot \dot{\hat{e}}_1 - (\hat{e}_z \cdot \hat{e}_1) (\hat{e}_1 \cdot \dot{\hat{e}}_1) \right) \\ &= 2 \hat{e}_z \cdot \dot{\hat{e}}_1 = 2 \hat{e}_z \cdot (\dot{\theta}_1 \hat{e}_{\theta_1} + \dot{\varphi}_1 \hat{e}_{\varphi_1}) = -2 \dot{\theta}_1 \sin \theta_1 = 2 \frac{d}{dt} \cos \theta_1, \end{aligned} \quad (44)$$

kjer smo v vmesnih korakih razpisali $\dot{\hat{e}}_1$ v sferičnih koordinatah glede na proton 1 in upoštevali skalarna produkta $\hat{e}_z \cdot \hat{e}_{\theta_1} = -\sin \theta_1$ in $\hat{e}_z \cdot \hat{e}_{\varphi_1} = 0$. Izraz (42) se tako poenostavi v

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2) = \frac{d}{dt} (2 (\cos \theta_1 - \cos \theta_2)), \quad (45)$$

s čimer smo dobili še tretjo konstanto gibanja, t. i. *Whittakerjevo konstanto*

$$w = \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 + 2 (-\cos \theta_1 + \cos \theta_2) = \text{konst.}, \quad (46)$$

kjer sta $\theta_{1,2}$ kota merjena od z osi do zveznice protona in elektrona, kakor je tudi označeno na sliki 1. Sistem je torej integrabilen tudi za $p_\varphi \neq 0$. [1, 2, 4]

Za planarni primer $p_\varphi = 0$ sta \mathbf{L}_1 in \mathbf{L}_2 vzporedna, zveza (46) pa se poenostavi v

$$r_1^2 r_2^2 \dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 + 2 (-\cos \theta_1 + \cos \theta_2) = \text{konst.} \quad (47)$$

4.1 Limitna zgleda

Kaj je Whittakerjeva konstanta v limitnih primerih $r \rightarrow \infty$, ko se elektron giblje v veliki oddaljenosti od obeh protonov, in $r_1 \rightarrow 0$, ko se giblje v bližini enega izmed njiju?

V limiti $r \rightarrow \infty$ hitro opazimo, da velja $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_2$ in $\theta_1 = \theta_2$, torej je Whittakerjeva konstanta enaka ohranitvi celotne vrtilne količine

$$w = \|\mathbf{L}\|^2. \quad (48)$$

V drugi limiti $r_1 \rightarrow 0$ opazimo, da velja $\theta_2 \rightarrow 0$ (gl. sliko 1) in $\cos \theta_2 = 1$, kar je le konstantni premik w , ki ga bomo izpustili. Z upoštevanjem $\mathbf{L}_2 = \mathbf{r}_2 \times \mathbf{p} = (\mathbf{r}_1 + 2\hat{e}_z) \times \mathbf{p}$ se tako v limiti $r_1 \rightarrow 0$ Whittakerjeva konstanta poenostavi v

$$w \approx \mathbf{L}_1 \cdot (2\hat{e}_z \times \mathbf{p}) - 2 \cos \theta_1 = 2\hat{e}_z \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}_1 - \hat{e}_1), \quad (49)$$

kjer smo upoštevali $\hat{e}_z \cdot \hat{e}_1 = \cos \theta_1$. V izrazu (49) prepoznamo *Laplace-Runge-Lenz-ov* (LRL) vektor $\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L}_1 - \frac{1}{r_1} \mathbf{r}_1$, ki je znana konstanta gibanja za delec v centralnem potencialu $V \propto -\frac{1}{r}$. Torej v limiti $r_1 \rightarrow 0$ je Whittakerjeva konstanta sorazmerna z LRL vektorjem:

$$w = 2\hat{e}_z \cdot \mathbf{A}. \quad (50)$$

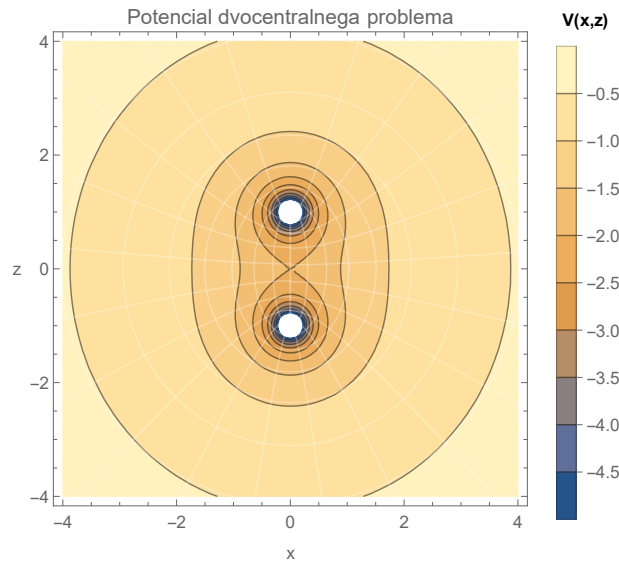
5. Vizualizacija (efektivnega) potenciala

Po analitični obravnavi problema še vizualizirajmo potencial dvocentralnega problema, kar nam bo pomagalo k boljši predstavi za nadaljnjo numerično obravnavo problema s Poincaréjevimi ploskvami. Za začetek izrišimo ekvipotencialne ploskve potenciala $V = -\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$, kar je prikazano na sliki 3.

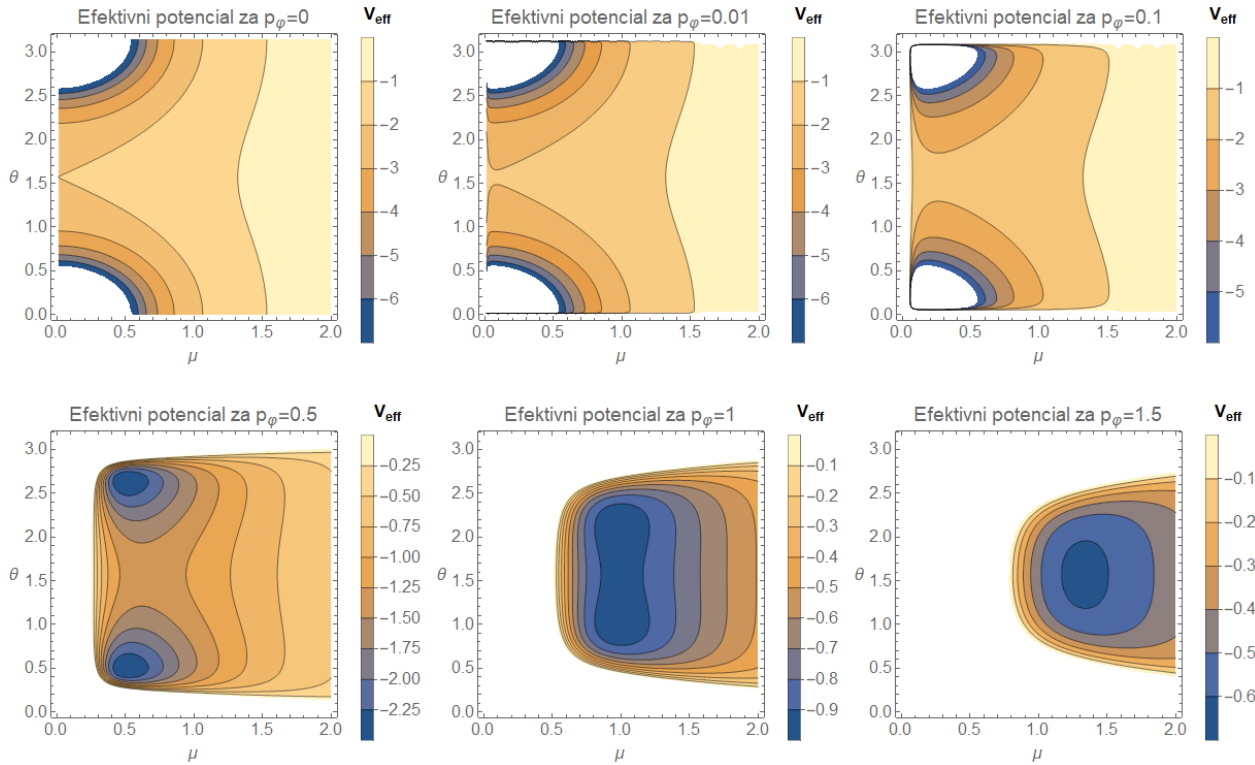
V poglavju 2. smo spoznali, da je sistem naravno obravnavati v eliptičnem koordinatnem sistemu (μ, θ) , ki je na sliki 3 vrisan z belo. Oglejmo si torej efektivni potencial za različne izbire p_φ

$$V_{\text{eff}}(\mu, \theta; p_\varphi) = -\frac{2 \cosh \mu}{\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta} + \frac{p_\varphi^2}{2 \sinh^2 \mu \sin^2 \theta}, \quad (51)$$

kar je prikazano na sliki 4. Za potencial V_{eff} opazimo, da se z večanjem p_φ spreminja več stvari. Najprej, območje $V_{\text{eff}} < 0$ z vezanimi orbitami se odmika od $\mu = 0$, $\theta = 0, \pi$, kar je razumljivo, saj se delec z veliko vrtilno količino p_φ težje približa z -osi. Drugič, vrednosti minimumov se s p_φ po absolutni vrednosti manjšajo, oba minimuma pa se približujeta po kotu θ . Za kritičen p_φ^* pa se minimuma združita, kar se zgodi nekje med $p_\varphi = 1$ in 1.5 .



Slika 3. Ekvipotencialne ploskve $V = -\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$ dvocentralnega problema v presečni xz -ravnini. Z belo je vrisan eliptični koordinatni sistem.



Slika 4. Ekvipotencialne ploskve efektivnega potenciala $V_{\text{eff}}(\mu, \theta; p_\varphi)$ za različne vrednosti parametra p_φ . Na zgornjih treh grafih ($p_\varphi = 0 - 0.1$) bela območja zavzemajo vrednosti $V_{\text{eff}} < -6$, na spodnjih ($p_\varphi = 0.5 - 1.5$) pa $V_{\text{eff}} \geq 0$.

Določimo kritičen p_φ^* . Zanima nas, za kakšen p_φ potencial V_{eff} nima sedla v točki $(\mu^*, \frac{\pi}{2})$. Pogoja sta torej naslednja

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial \mu} \left(\mu^*, \frac{\pi}{2}; p_\varphi^* \right) = 0 \quad (52)$$

$$\frac{\partial^2 V_{\text{eff}}}{\partial \theta^2} \left(\mu^*, \frac{\pi}{2}; p_\varphi^* \right) = 0, \quad (53)$$

kar je sistem dveh transcendentnih enačb za μ^* in p_φ^* , numerična rešitev pa je $\mu^* \doteq 1.14622$ in $p_\varphi^* \doteq 1.24081$.

6. Poincaréjeve sečne ploskve

Narišimo Poincaréjeve sečne ploskve za nekaj izbir brezdimenzijskih parametrov E in p_φ . Izberimo naslednjo sečno ploskev

$$\theta = \theta^* \quad (54)$$

$$p_\theta = \left(2 (\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta) E - p_\mu^2 - \frac{\cosh^2 \mu - \cos^2 \theta}{\sinh^2 \mu \sin^2 \theta} p_\varphi^2 + 4 \cosh \mu \right)^{1/2} > 0, \quad (55)$$

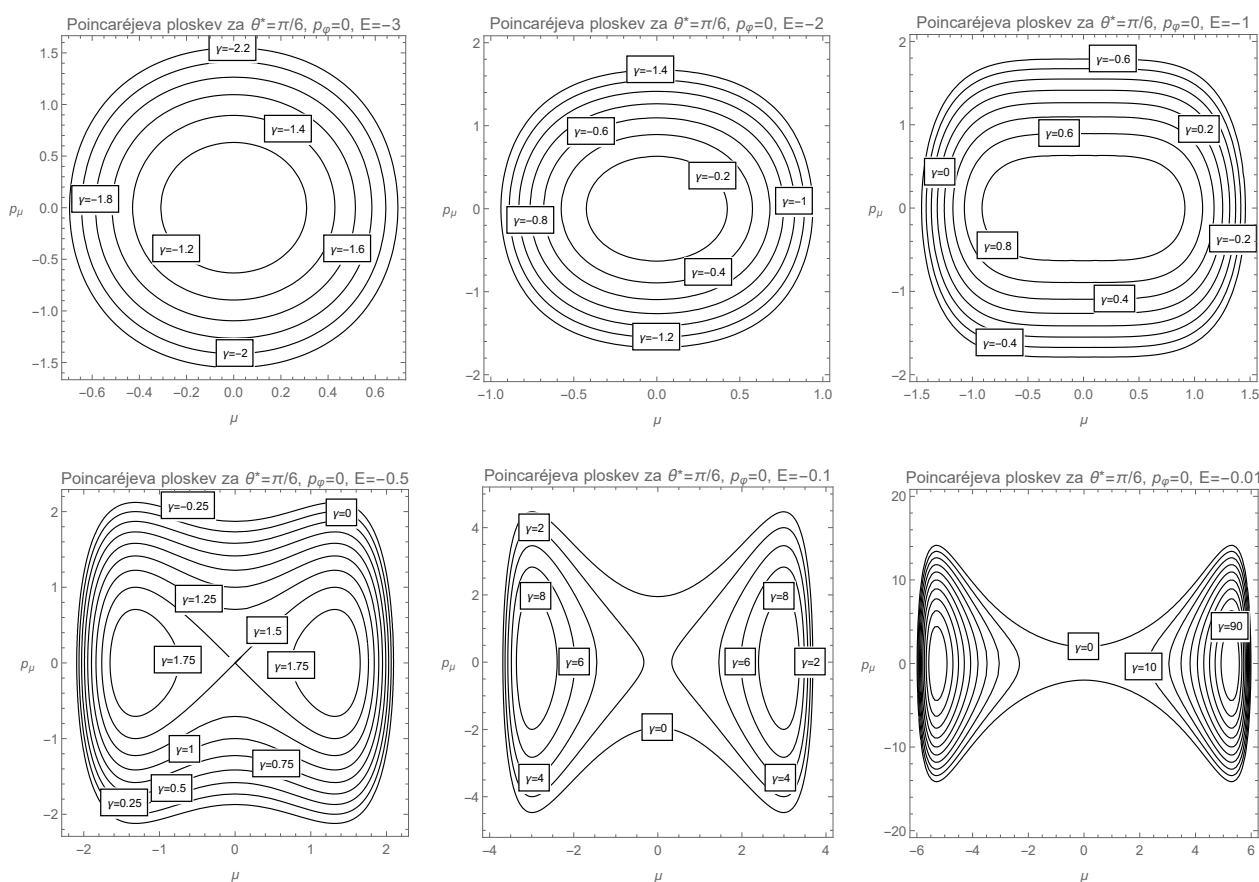
kjer je θ^* poljubno izbran in določa sečno ploskev. Torej numeričen pristop je sledeč: ko je izpolnjen pogoj $\theta = \theta^*$ in $p_\theta > 0$, zabeležimo par (μ, p_μ) in tako z večkratnim ponavljanjem za različne začetne pogoje izrišemo celotno Poincaréjevo ploskev. Iz opisanega je očitno, da vsaka točka Poincaréjeve sečne ploskve (μ, p_μ) skupaj s pogojem (54) in (55) enolično določa točko faznega prostora $(\mu, p_\mu, \theta, p_\theta)$ in posledično enolično določa orbito delca.

Za začetek se lotimo primera $p_\varphi = 0$. Spomnimo se zvez (35) in (36), ki ju z impulzoma p_μ in p_θ zapišemo kot

$$\frac{1}{2}p_\mu^2 = E \cosh^2 \mu + 2 \cosh \mu - \gamma \geq 0 \tag{56}$$

$$\frac{1}{2}p_\theta^2 = -E \cos^2 \theta + \gamma \geq 0. \tag{57}$$

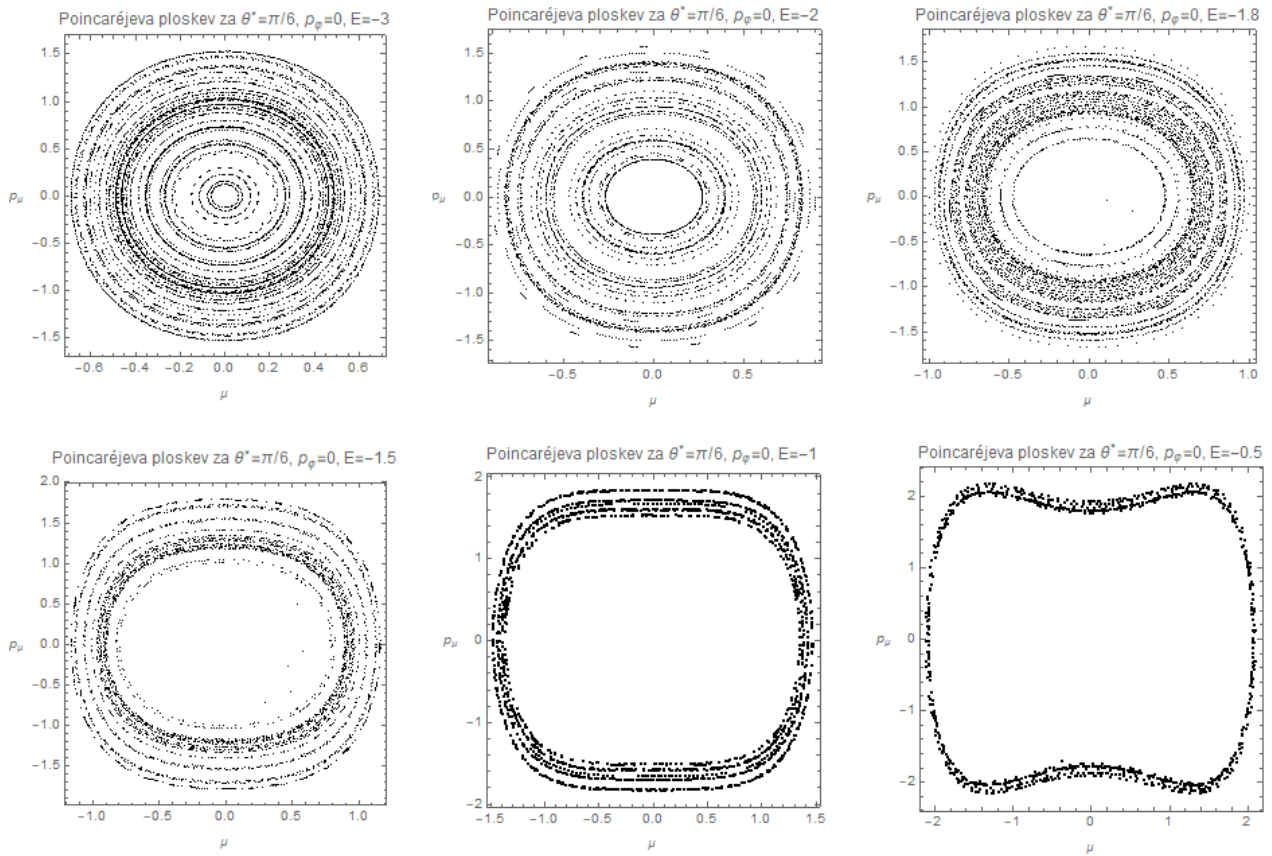
Vzemimo Poincaréjevo ploskev $\theta = \theta^*$, iz enačbe (57) pa sledi pogoj $\gamma \geq E \cos^2 \theta^*$. Izrišimo Poincaréjeve ploskve za $\theta^* = \pi/6$ in različne izbire energije E , kar je prikazano na grafih slike 5. Opazimo zanimivo spremembo strukture faznega prostora pri $E = -1$, ko dobimo dva minimuma za γ , vendar pa ta sprememba v faznem prostoru nima opaznih sprememb v oblikah trajektorij (poglavje 7). Analitične rezultate še primerjajmo z numeričnimi, ki so prikazani na sliki 6. Vidimo, da se fazni portreti ujema, opazimo pa, da se v centralnem območju pojavlja in večja praznina, ki je najverjetneje posledica integratorjeve nezmožnosti sledenja rešitvi zaradi singularnosti v Hamiltonovi funkciji.



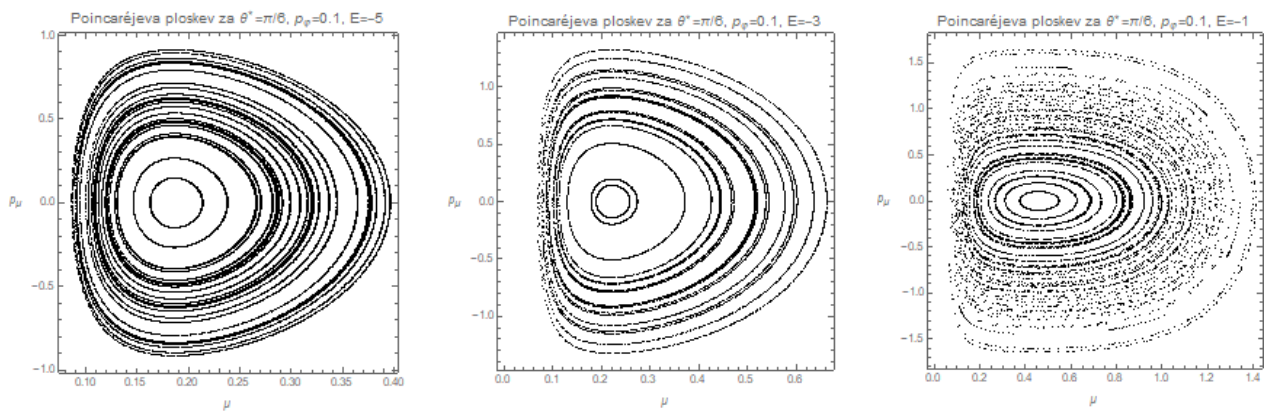
Slika 5. Analitični rezultati Poincaréjevih sečnih ploskev za $p_\varphi = 0$ in različne energije E .

Podobne fazne portrete kot za $p_\varphi = 0$ dobimo tudi pri majhnih p_φ , pri tem pa se zlomi simetrija za μ ($\mu \geq 0$). Na sliki 7 najprej vidimo, kako se fazni prostor spreminja z E , rešitve pa spominjajo na rešitve za $p_\varphi = 0$ (slika 5), npr. podobnost rezultatov za $E = -1$. Z nadaljnjim večanjem E se fazni diagram odcepi od $\mu = 0$, kar je za $p_\varphi = 0.1$ prikazano na zgornjih treh grafih na sliki 8. Rešitve so kvalitativno spet podobne tistim za $p_\varphi = 0$ in $E > -1$.

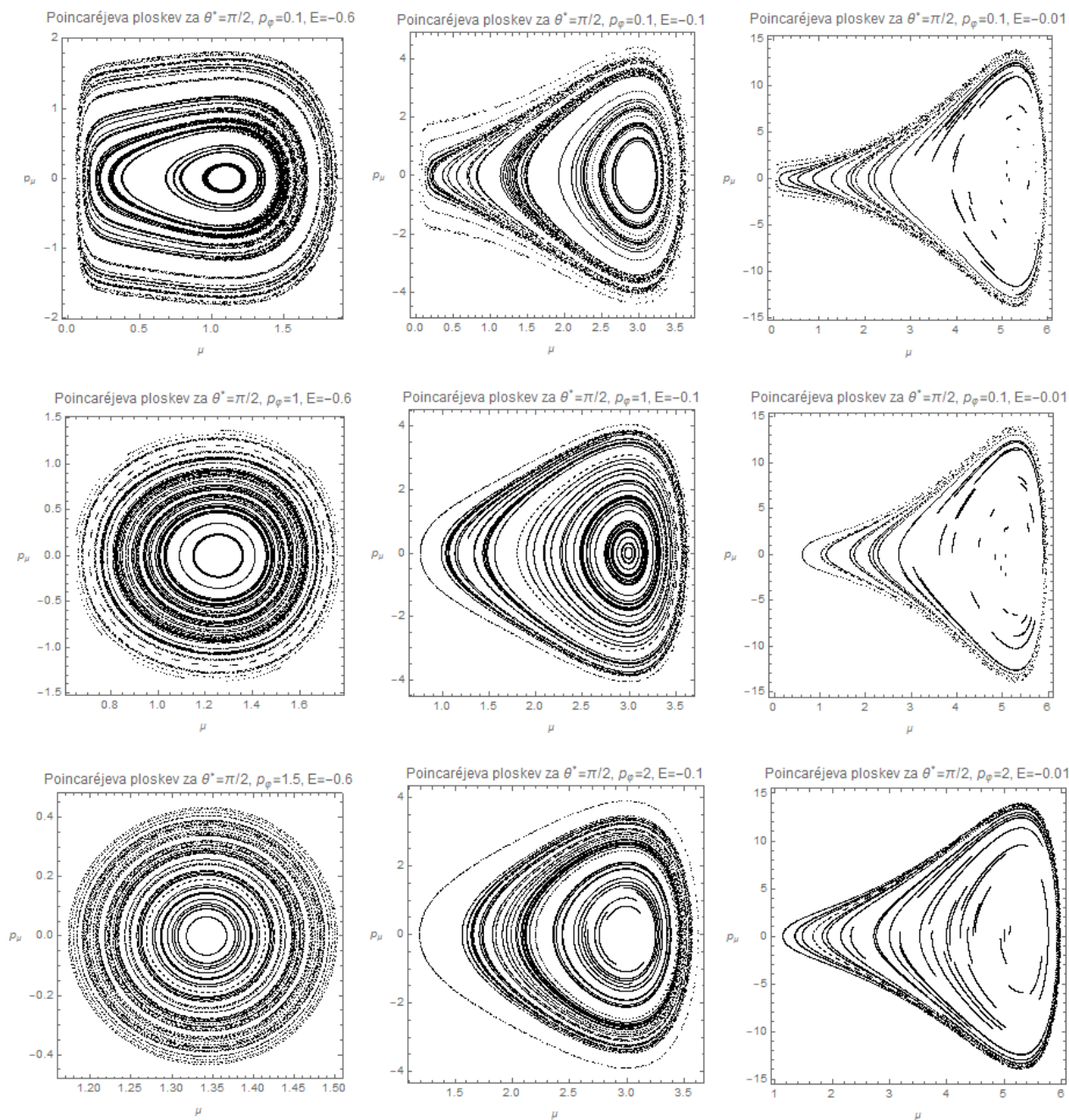
Na sliki 8 so prikazane Poincaréjeve sečne ploskve ($\theta^* = \pi/2$) za različne neničelne vrednosti p_φ in E . Iz grafov spoznamo, da se z večanjem obeh parametrov p_φ in E vrednosti μ v faznih prostorih odmaknejo od ničle, kar pa je pričakovano, saj se z večanjem vrtilne količine in energije delec v povprečju giblje na večji oddaljenosti od obeh protonov.



Slika 6. Numerični rezultati Poincaréjevih sečnih ploskev za $p_\varphi = 0$ in različne energije E . Osrednje belo območje je posledica integratorjeve nezmožnosti sledenja rešitvi zaradi singularnosti v Hamiltonovi funkciji za $p_\varphi = 0$.



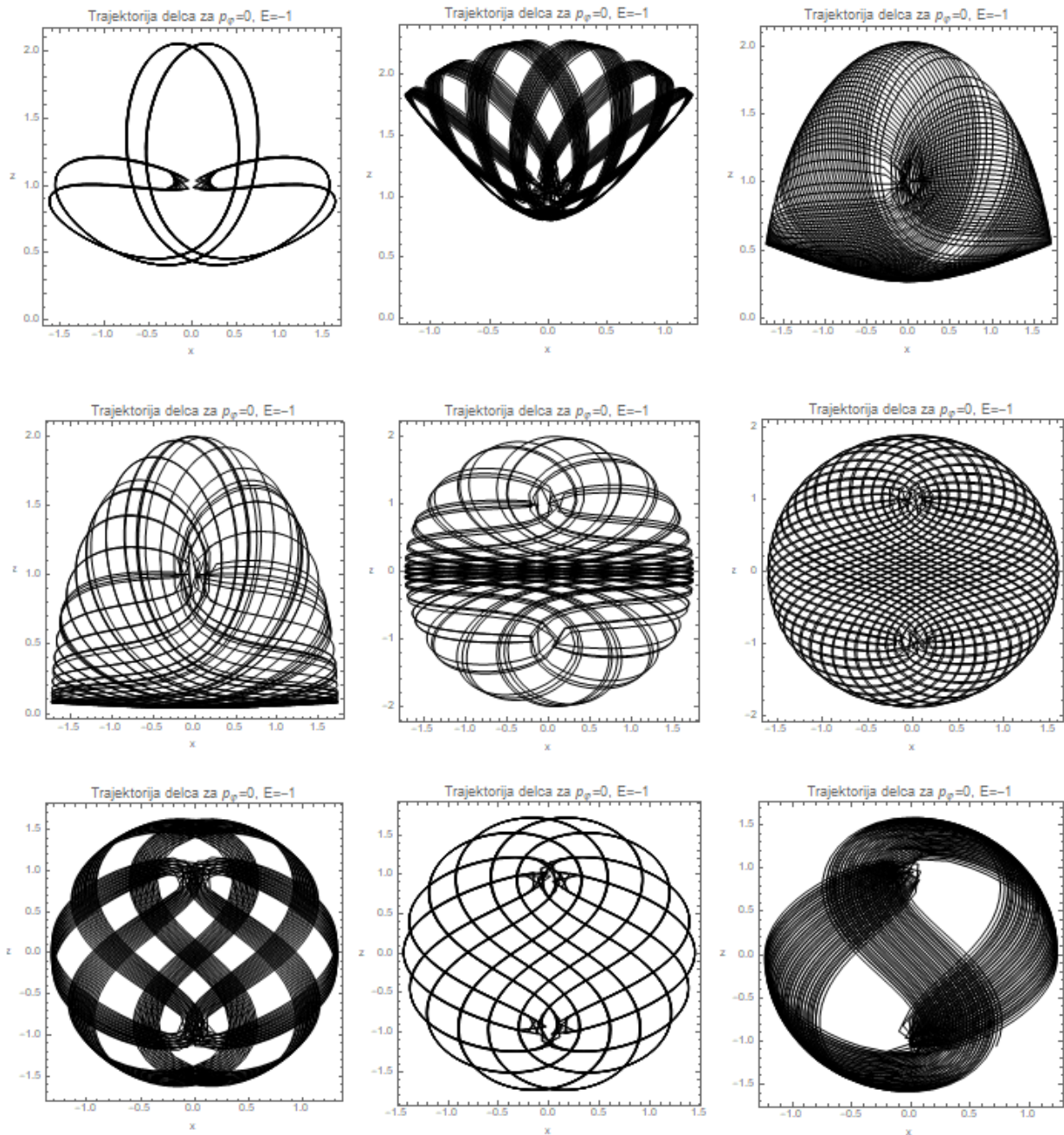
Slika 7. Numerični rezultati Poincaréjevih sečnih ploskev za $p_\varphi = 0.1$ in nizke energije $E \leq -1$.



Slika 8. Numerični rezultati Poincaréjevih sečnih ploskev za različne izbire p_φ in visoke energije $E > -1$.

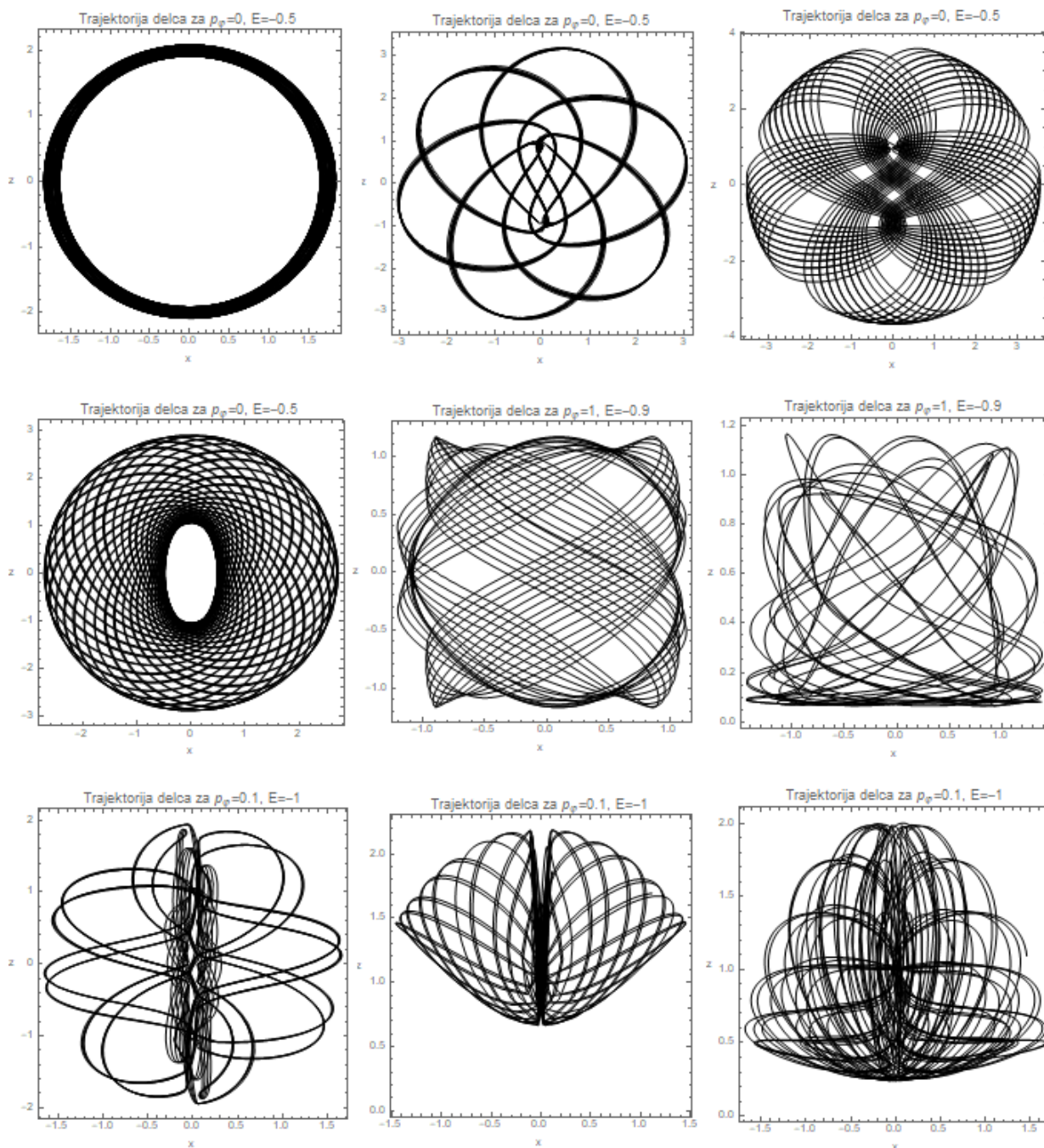
7. Trajektorije

Na koncu so zbrane še nekatere trajektorije elektrona za različne p_φ in E . Na slikah 9 in 10 so prikazani prerezi v xz -ravnini, na sliki 11 pa so trajektorije prikazane v prostoru. V prejšnjih poglavjih smo pokazali, da je obravnavan problem vedno integrabilen, vendar pa so trajektorije na slikah spodaj kljub temu še vedno precej zapletene, čeprav ne kaotične. Glavna značilnost trajektorij je ta, da je za dovolj nizke energije E gibanje elektrona vezano na enega izmed protonov, pri dovoljšnjih energijah pa si elektron delita oba protona. Vendar pa energija E , ki bi sicer zadostovala za gibanje elektrona med obema protonoma, ne vodi nujno do dejanskega gibanja med obema protonoma, ampak je lahko gibanje še vedno omejeno na enega izmed njiju, saj je za preskok med protonoma pomembna tudi smer gibanja elektrona. Na primer, na sliki 9 so zbrani primeri z enakimi

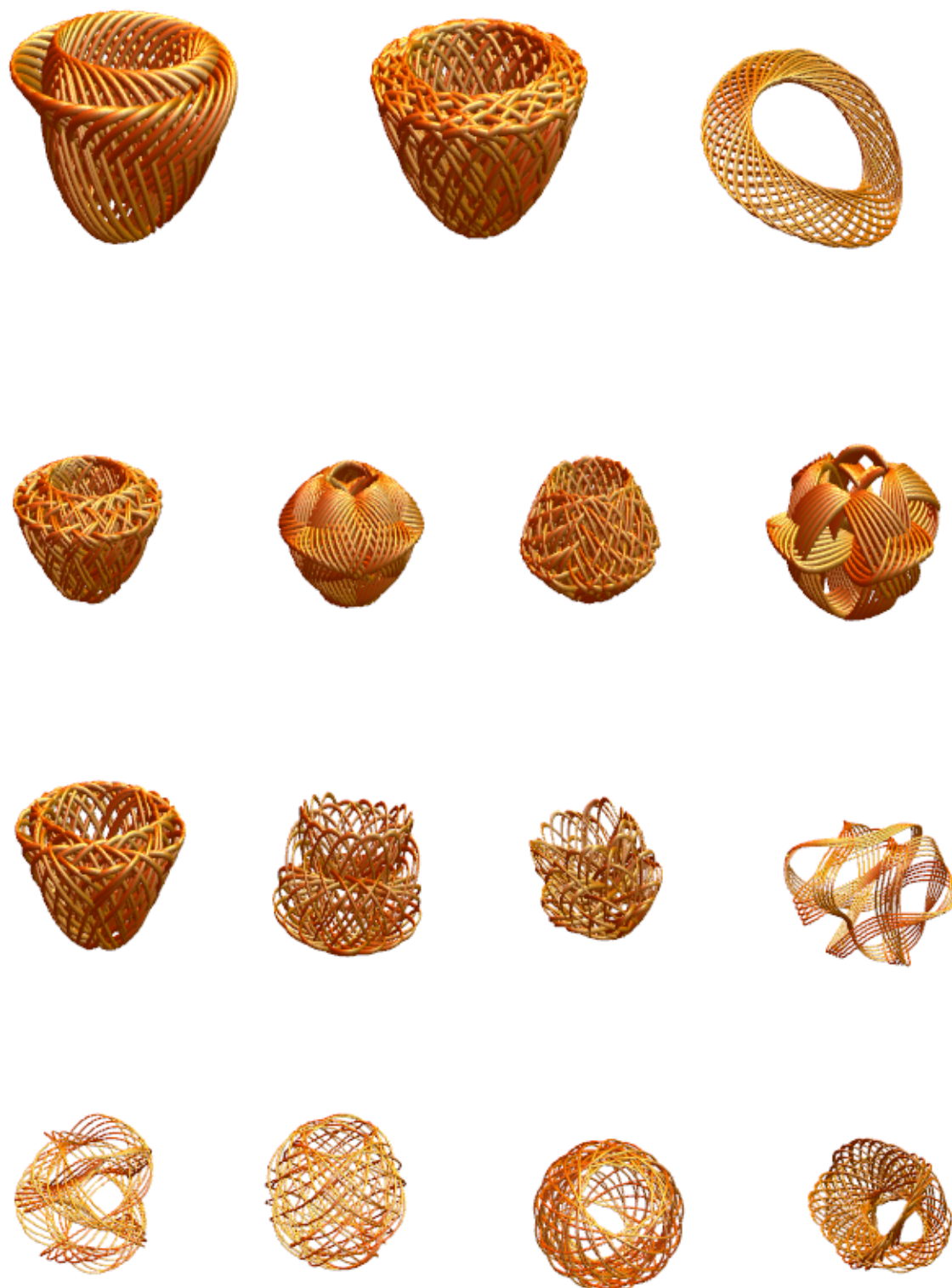


Slika 9. Tajektorije za $p_\varphi = 0$ in $E = -1$.

E in p_φ , pri tem pa so nekatere orbite omejene na okolico enega protona, druge pa se raztezajo med obema protonoma. Mejna primera na sliki 9 sta tako približno četrti in peti graf, kjer na prvem izmed njiju elektron nima zadostne komponente hitrosti v z -smeri, na drugem pa uspe premagati vmesno bariero s še ravno dovoljšnjo hitrostjo v z -smeri.



Slika 10. Tajektorije za različne p_φ in E .



Slika 11. Tajektorije za različne p_φ in E v prostoru.

8. Zaključek

Spoznali smo, da je obravnavan klasični model elektrona v potencialu dveh protonov integrabilen sistem, kar je razvidno iz dobljenih ohranitvenih količin, to so: ohranitev energije, ohranitev vrtilne količine vzdolž obeh protonov in Whittakerjeva konstanta. Posledica integrabilnosti so tako nekaotične Poincaréjeve sečne ploskve, ki pa se z večanjem energije in vrtilne količine odmikajo k večjim vrednostim μ , kar pomeni, da se delec giblje v povprečju na večji oddaljenosti od obeh protonov.

V osrednjem delu članka smo izpeljali Whittakerjevo konstanto gibanja, ki je v ustreznih limitah enaka velikosti celotne vrtilne količine ali pa je sorodna LRL vektorju, ki je znana konstanta gibanja Keplerjevega problema za dve telesi.

Z izrisom nekaj reprezentativnih trajektorij smo spoznali, da so trajektorije elektrona kljub integrabilnosti sistema netrivialne. Gibanje elektrona je lahko vezano bodisi na en proton ali oba protona, pri čemer pa je za preskok elektrona med protonoma poleg zadostne energije potrebna še ustrezna z -komponenta hitrosti v bližini bariere.

LITERATURA

- [1] E. T. Whittaker, *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge University Press, 2. izdaja, str. 97 (1917)
- [2] H. A. Erikson in E. L. Hill, *A Note on the One-Electron States of Diatomic Molecules*, Phys. Rev. **75**, 29 (1949)
- [3] *Liouville dynamical system*, Wikipedia, the free encyclopedia.
Pridobljeno iz: en.wikipedia.org/wiki/Liouville_dynamical_system (januar 2020)
- [4] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer, 1. izdaja, 30–44 (1990)
- [5] *Prolate spheroidal coordinates*, Wikipedia, the free encyclopedia.
Pridobljeno iz: en.wikipedia.org/wiki/Prolate_spheroidal_coordinates (januar 2020)