ИЗМЕНЕНИЕ ЭНЕРГИИ АТОМА ВОДОРОДА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОЛОСТИ ПРИ СМЕЩЕНИЯХ ЯДРА ВДОЛЬ ОСИ

Юренев П.В., Щербинин А.В., Пупышев В.И.
Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, г.Москва

Юренев П.В.
Щербинин А.В.
Пупышев В.И.
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Атом водорода в цилиндрической полости является простейшей моделью для описания электронных состояний атома, внедренного в нанотрубку. В предлагаемой работе получены простые аналитические оценки изменения электронной энергии атома при смещениях ядра из центра полости вдоль оси цилиндра, основанные на анализе поведения оценок теории возмущений теории при уменьшении размеров полости. В силу симметрии задачи первые производные энергии по смещениям ядра из центра полости равны нулю. Для второй производной энергии по смещению ядра из центра найдены интегральные выражения при условии, что волновые функции обращаются в нуль на поверхности конечного цилиндра (условия Дирихле), что соответствует случаю непроницаемого и неполяризуемого материала среды, окружающей полость.

Оценки вторых производных, полученные методами численного интегрирования, сравниваются с результатами выполненных ранее прямых конечно-разностных расчетов сдвигов энергии атома при смещениях ядра вдоль оси цилиндра [1]. Отмечено, что обсуждаемые пертурбационные оценки качественно согласуются с конечно-разностными. Обсуждаются законы изменения знака второй производной энергии по смещению из центра в зависимости от типа состояния, т.е. от проекции электронного углового момента на ось цилиндра и четности рассматриваемого электронного состояния.

Сформулированы простые правила, определяющие устойчивость положения ядра атома в центре цилиндра относительно его продольных смещений, которые подтверждаются численными расчетами. В частности, оптимальность положения протона в центре полости в случае основного состояния, ранее доказанная аналитически и конечно-разностными оценками, воспроизводится и при использовании предлагаемого пертурбационного подхода.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований (проект № 04-03-33115) и Федеральной Программы РИ-112.001.056

Литература

1. *P.V.Yurenev, A.V. Scherbinin, V.I. Pupyshev.* Estimates of energy levels of the hydrogen atom in a cylindrical cavity // Int J Quant Chem. 2005. (in press)