

МОЛЕКУЛА ВОДОРОДА В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ.

A.B.Tурбинер

Впервые проведено количественное изучение молекулы водорода в произвольном постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси молекулы. Получено, что во всей исследованной области полей (вплоть до 10^{12} Гс) молекула устойчива. Показано, что на далеких расстояниях в присутствии поля два атома водорода в основном состоянии отталкиваются.

Недавно были открыты гигантские магнитные поля (вплоть до $10^{12} \div 10^{13}$ Гс) на поверхности нейтронных звезд¹. Ранее уже было известно, что большие поля $10^7 - 10^8$ Гс существуют на некоторых белых карликах (см., например,²). В лабораторных условиях магнитные поля больших интенсивностей эффективно возникают в полупроводниках, где имеются связанные состояния электронов с дырками с малыми эффективными массами (см., например,^{2,3}). Все это обусловило возникший в последнее время повышенный интерес к поведению материи в сильных магнитных полях. Качественное рассмотрение проблемы было проведено в работах⁴, где были предсказаны интересные физические явления. С количественной точки зрения надежно был рассмотрен только атом водорода, хотя имеется несколько попыток изучения иона H^+ .

В данной работе представлен первый количественный расчет молекулы водорода в магнитном поле произвольной интенсивности. Исследование проведено в приближении Борна – Оппенгеймера и ограничено изучением состояния ${}^1\Sigma_g^+$ в случае, когда поле направлено по оси молекулы. Подход основан на использовании процедуры „нелинейаризации“⁵, позволяющей единным образом рассмотреть атом водорода, молекулярный ион H_2^+ и молекулу H_2 . Кроме того мы покажем, что на далеких расстояниях атомы в основном состоянии отталкиваются.

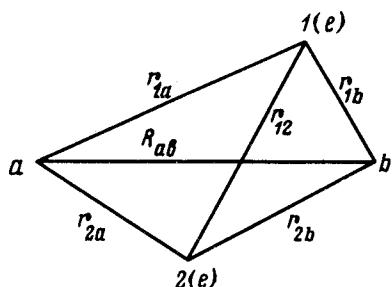


Рис. 1

Гамильтониан, описывающий молекулу H_2 в постоянном магнитном поле B , направленном по оси молекулы (ось z), в приближении Борна – Оппенгеймера имеет следующий вид (обозначения даны на рис.1)

$$\mathcal{H}_{H_2} = -\frac{2}{r_{1a}} - \frac{2}{r_{1b}} - \frac{2}{r_{2a}} - \frac{2}{r_{2b}} + \frac{2}{r_{12}} + \frac{B^2}{4} (\rho_1^2 + \rho_2^2), \quad (1)$$

где $\rho_i^2 = x_i^2 + y_i^2$; поле B и энергия E измеряются в атомных единицах ($B_0 = 2,3505 \cdot 10^9$ Гс, $E_0 = Ry = 13,6$ эВ). В (1) уже учтено, что рассматривается состояние ${}^1\Sigma_g^+$ и проекции угловых моментов на ось z – нулевые. Одна из простейших волновых функций нулевого приближения, разумная с точки зрения „аргумента Дайсона“⁶ (применительно к случаю квантовой механики см. обсуждение в⁵), может быть выбрана в следующей форме

$$\psi_0 = \exp \left\{ -\alpha(r_{1a} + r_{1b} + r_{2a} + r_{2b}) + \beta r_{12} - \frac{B}{4} (\rho_1^2 + \rho_2^2) \right\}. \quad (2)$$

Потенциал, который ей соответствует $V_0 - E_0 = \Delta\psi_0/\psi_0$, равен

$$V_0 = \left[-2\alpha \left(\frac{1}{r_{1a}} + \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2a}} + \frac{1}{r_{2b}} \right) + \frac{4\beta}{r_{12}} + \frac{B^2}{4} (\rho_1^2 + \rho_2^2) \right] + 2\alpha^2 (n_{1a}n_{1b} + n_{2a}n_{2b}) - 2\alpha\beta [(n_{1a} + n_{1b})n_{12} + (n_{2a} + n_{2b})n_{21}] + \alpha B [\rho_1^2 \left(\frac{1}{r_{1a}} + \frac{1}{r_{1b}} \right) + \rho_2^2 \left(\frac{1}{r_{2a}} + \frac{1}{r_{2b}} \right)] - \beta B \frac{(\vec{\rho}_1 \cdot \vec{\rho}_2)^2}{r_{12}}; E_0 = -4\alpha^2 - 2\beta + 2B - \frac{2}{R_{ab}}. \quad (3)$$

Потенциал (3) содержит много характерных свойств исходного потенциала (1): при $\alpha = 1$, $\beta = 1/2$ точно воспроизводит кулоновские полюса, имеет правильные асимптотические свойства на больших расстояниях, обладает правильными симметричными свойствами относительно замен $1 \leftrightarrow 2$, $a \leftrightarrow b$. Поэтому можно надеяться, что теория возмущений по разности потенциалов $V_1 = (V - V_0)$ будет сходящейся (см. обсуждение в ⁵). Мы ограничимся в ряду теории возмущений для энергии вычислением первой поправки, что эквивалентно проведению вариационного расчета с пробной функцией (2). Для повышения точности будем считать параметры α и β свободными и проведем по ним минимизацию.

Из аналогичных соображений можно написать волновую функцию основного состояния атома водорода в магнитном поле ⁷

$$\psi_0 = \exp(-\alpha r - \frac{B}{4} \rho^2) \quad (4)$$

и молекулярного иона H_2^+

$$\psi_0 = \exp(-\alpha(r_{1a} + r_{1b}) - \frac{B}{4} \rho_1^2) \quad (5)$$

и провести вариационный расчет с минимизацией по параметру α .

Результаты расчетов энергии и междуядерного расстояния для атома, иона, молекулы водорода

B гс	Атом	Ион H_2^+		Молекула H_2^2	
		R_{ab}	E	R_{ab}	E
0	-1	1,998	-1,205	1,401 (1,4008)	-2,2925 (-2,3488)
10^9	-0,904 (-0,921)	1,907 (1,9)	-1,146 (-1,150)	1,337	-2,1644
$5 \cdot 10^9$	0,125 (0,049)	1,489 (1,7)	-0,331 (-0,339)	1,203	-0,3622
10^{10}	1,775 (1,640)	1,272 (1,2)	1,173 (1,093)	0,859	2,6651
$5 \cdot 10^{10}$	17,047 (16,754)	0,745 0,8	15,667 (15,505)	0,528	32,1192
10^{11}	37,136 (36,848)	0,607 (0,6)	35,338 (35,674)	0,463	71,520
$5 \cdot 10^{11}$	202,636 (203,543)	0,366 (0,354)	199,83 (199,56)	0,400	399,116
10^{12}	411,945 (416,431)	0,309 (0,287)	408,92 (409,35)	0,263	814,463

Для атома и иона цифры в скобках – расчет, выполненный в ⁸, в случае молекулы – экспериментальное значение (см., например, ⁹). Для иона H_2^+ использовалось слегка более сложное приближение чем (5)

Результаты расчетов при различных полях приведены в таблице. Сразу отметим, что при небольших полях простейшие пробные функции (4) и (5), содержащие один свободный параметр, приводят к точностям на уровне нескольких процентов, тогда как при больших полях $\gtrsim 10^{11}$ гс они дают практически наилучшие значения энергии. Подчеркнем тот факт, что единная функция описывает область как малых, так и больших полей. Это большое достоинство. Результаты, касающиеся молекулы водорода, можно сравнить только с расчетами при $B = 0$ (см., например, таблицу различных расчетов в⁹). Мы видим, что отличие от экспериментального значения на уровне 0,05 Ry и волновая функция (2) является одной из лучших двухпараметрических функций, которая причем ранее неиспользовалась. Особого внимания заслуживает такой факт, как резкое уменьшение междуядерного расстояния с ростом величины магнитного поля. Я не знаю простого физического объяснения этого явления, хотя в случае, когда поле перпендикулярно оси молекулы, объяснение тривиально и связано с уменьшением поперечного размера электронного облака. Отметим, что с ростом поля монотонно нарастает и энергия ионизации, и энергия диссоциации молекулы на атомы¹⁾. Имеется противоречие с качественным рассмотрением, проведенным в⁴: при полях $10^{11} \div 10^{12}$ гс энергия связи атома приблизительно в 2,7 раза меньше, чем молекулы, а не в четыре раза, как предсказывалось в⁴. Возможно, это связано с поздним выходом на асимптотический режим.

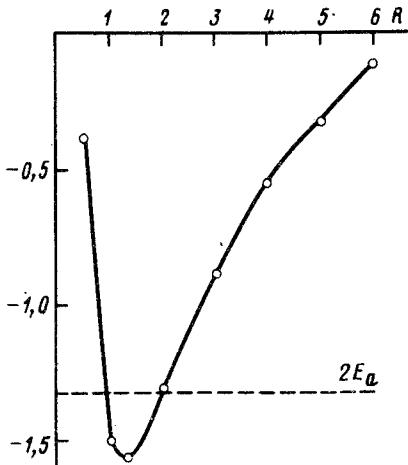


Рис.2. Зависимость энергии молекулы H_2 от междуядерного расстояния R_{ab}

Последний вопрос, который хотелось бы обсудить — это взаимодействие атомов на далеких расстояниях в присутствии поля. Хорошо известно, что атомы в S-состояниях на далеких расстояниях притягиваются по закону $E(R) \sim -1/R^6$ (например¹⁰), благодаря диполь-дипольному взаимодействию наведенных диполей. При наличии магнитного поля возникает второй механизм взаимодействия. Дело в том, что атом в магнитном поле приобретает квадрупольный момент, пропорциональный J^2 ⁴. Поэтому наряду с диполь-дипольным взаимодействием во втором порядке теории возмущений имеется квадруполь-квадрупольное взаимодействие в первом порядке. Легко показать, что последний механизм доминирует на больших расстояниях и энергия взаимодействия (когда поле параллельно оси молекулы) равна

$$E(R) = \frac{3}{2} \frac{D^2}{R^5}. \quad (6)$$

Эта формула остается справедливой при произвольном угле между полем и осью молекулы. Меняется только коэффициент: его максимальное значение равно $3/2$, а минимальное равно $9/16$ (когда поле перпендикулярно оси). Таким образом при разведении атомов притяже-

¹⁾ Это явление важно при рассмотрении плазмы в сильных полях.

ние в некоторый момент сменяется отталкиванием и молекула диссоциирует на атомы. Данное качественное рассмотрение иллюстрируется количественным расчетом (см. рис.2), выполненным при поле $B = 2,3505 \cdot 10^9$ гс.

В заключение, я хочу поблагодарить К.Г.Борескова, Б.Б.Кадомцева, В.С.Карактанова и К.А.Тер-Мартиросяна за интерес к работе и полезные обсуждения.

Литература

1. *Trümper J., Pietsch W., Reppin C. et al.* Ann. New-York Acad. Science, 1977, **302**, 538.
2. *Garstang R.H.* Rept. Prog. Physics, 1977, **40**, 105.
3. *Cabib D., Fabrio E., Fiorio G.* Nuovo Cim., 1972, **B10**, 185.
4. *Кадомцев Б.Б., Кудрявцев В.С.* Письма в ЖЭТФ, 1971, **13**, 15; 61.
5. *Турбинер А.В.* ЖЭТФ, 1980, **79**, 1719; Jour. of Phys., 1981, **14A**, 164.
6. *Dyson F.* Phys. Rev., 1952, **85**, 631.
7. *Turbiner A. V.* Preprint ITEP-79, 1982; Journ. of Phys. A (in print).
8. *Kaschiev M.S., Vinitsky S.I., Vukajlovic F.* Phys. Rev., 1980, **A22**, 55.
9. *McLean A.D., Weiss A., Yoshimine M.* Rev. Mod. Phys., 1960, **32**, 211.
10. *Ландау Л.Д., Либшиц Е.М.* Квантовая механика, М.: Наука, 1974.

Институт теоретической
и экспериментальной физики

Поступила в редакцию
10 октября 1983 г.