Письма в ЖЭТФ, том 13, стр. 61 – 64 *5 января 1971 г.*

АТОМЫ В СВЕРХСИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Б.Б.Кадомцев, В.С.Кудрявцев

Огромные магнитные поля порядка 10^{12} *гс*, которые по современным представлениям имеются в нейтронных звездах, могут существенно изменить физические свойства вещества, в частности, изолированных атомов [1, 2]. В работе одного из авторов [1] было показано, что в интервале магнитных полей $Z^{4/3} < B < Z^3$) (Z – атомный номер, B – магнитное поле в атомных единицах $m^2e^3c\hbar^{-3} = 2,35 \cdot 10^9$ *гс*) основное состояние очень тяжелого атома может быть описано в рамках модифицированной модели Томаса – Ферми. При этом атом сохраняет сферическую симметрию, а его радиус изменяется как $Z^{1/5}B^{-2/5}$. В этой же статье были приведены качественные соображения о возможном сохранении сферической симметрии и при $B > Z^3$, когда на каждом уровне остается не более одного электрона. Однако, это последнее утверждение оказывается неправильным – приводимое ниже более точное количественное рассмотрение для предельного случая $B >> Z^3$ показывает, что при этом основному состоянию с минимальной энергией соответствует несферическое, как при $B < Z^3$, а сильно вытянутое вдоль магнитного поля распределение электронной плотности. В этом смысле случай $B >> Z^3$ соответствует атому водорода при $B >> 1$ [3–6].

При $B >> Z^3$ в основном состоянии происходит заполнение нижних по азимутальному квантовому числу m уровней с числом электронов не более одного на каждом уровне [1]. В приближении самосогласованного поля энергия атома или иона в сверхсильном поле определяется выражением (в атомных единицах):

$$E = \int \left[\frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z_i} \right)^2 - \sum_i \frac{Z}{r_i} \Psi^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} \Psi^2 \right] \prod_i d\mathbf{r}_i, \qquad (1)$$

где $\mathbf{r}_i$ – координата i-го электрона, r_i – его расстояние от ядра, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, а волновая функция Ψ берется в виде антисимметризованного произведения одночастичных волновых функций вида $e^{im\theta} R_m(\rho)\, \psi_{om}(z)$, причем радиальная часть R_m соответствует нижнему уровню Ландау (ρ, θ, z – цилиндрические координаты), а ψ_{om} – нижнему уровню продольного движения для данного m. В выражении (1), как мы видим, остается только кинетическая энергия продольного движения и потенциальная энергия. Пренебрежем обменной поправкой и заменим Ψ просто на произведение одночастичных волновых функций в самосогласованном электрическом поле. При этом выражение (1) перейдет в сумму интегралов по одночастичным волновым функциям, и E может быть выражена через среднюю плотность электронов $n = \sum_i \Psi_i^2$. Определим среднюю волновую функцию $\tilde{\psi}$, соотношением $\tilde{\psi}^2 = n/N$; из (1) получим

$$E = N \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial z} \right)^2 - \frac{Z}{r} \tilde{\psi}^2 + \frac{N-1}{2} \left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle \tilde{\psi}^2 \right] d\mathbf{r}, \qquad (2)$$

где

$$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle = \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \tilde{\psi}^2(\mathbf{r}_2)\, d\mathbf{r}_2.$$

Энергия основного состояния определяется из условия минимума функционала (2) при дополнительном условии $\int \tilde{\psi}^2 d\mathbf{r} = 1$, причем числа заполнения не превосходят единицы. Радиальная волновая функция $R_m(\rho)$ сравнительно узко локализована при $\rho_m = \sqrt{2m/B}$, и при заполнении всех оболочек от $m = 0$ до $m = N$ электронная плотность ограничена цилиндром радиуса $\rho_N \cong \sqrt{2N/B}$, т. е. $n(\rho, z)$ быстро спадает при $\rho > \rho_N$. Выберем пробную функцию в виде [1]

$$n = \tilde{\psi}^2 = \frac{a}{\pi \rho_N^2} \exp\left(-2a|z| - \rho^2/\rho_N^2\right), \tag{3}$$

где a – параметр, определяемый из условия минимума E.

При очень больших B величина $a\rho_N \ll 1$, т. е. электронное облако сильно вытянуто вдоль магнитного поля. Учитывая это, получаем после подстановки (3) в (2) с логарифмической точностью

$$E = \frac{Na^2}{2} - 2NZLa + \frac{1}{2}N(N-1)La, \quad \text{где } L = \ln\frac{1}{a\rho_N} \gg 1. \tag{4}$$

Выражение (4) может быть получено совсем просто из следующих соображений. Второе слагаемое в (4) соответствует усреднению величины $\frac{1}{r} \cong \frac{1}{z}$ с погонной плотностью $\lambda = a\exp(-2a|z|)$ и обрезанием логарифмической расходимости при малых z на значении $z_{min} \sim \rho_N$. В третьем слагаемом в (2), (4) величину $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$ можно рассматривать как потенциал ϕ в точке z тонкого линейного заряженного тела радиуса ρ_N с погонной плотностью λ. Но с логарифмической точностью потенциал ϕ определяется локальным значением погонной плотности заряда λ и равен $\phi = 2\lambda\ln\frac{1}{a\rho_N}$, где $\frac{1}{a}$ – характерная длина распределения заряда. Усреднение этого потенциала с весом λ и дает третье слагаемое в (4). Из условия минимума (4) по a, приближенно считая $L = \text{const}$, находим с логарифмической точностью

$$a = \frac{1}{2}(4Z - N + 1)L; \qquad E = -\frac{N}{8}L^2(4Z - N + 1)^2. \tag{5}$$

По известному a находим с логарифмической точностью L при $N = Z$

$$L \cong \frac{1}{2}\ln\frac{B}{Z^3}. \tag{6}$$

---

[1] Экспоненциальная зависимость ψ от z соответствует "глубокости" основного уровня.

Оценка энергии связи по сферической модели [1] дала бы величину $E \sim Z^3$, что в L^2 раз меньше, чем (5). Таким образом при $B >> Z^3$ более низкой энергией обладает вытянутое вдоль магнитного поля электронное облако. Заметим, что при $Z = N = 1$ выражение (5) с логарифмической точностью совпадает с энергией основного состояния атома водорода [6]: $E = -\frac{1}{2}(\ln B)^2$, так что формула (5) пригодна и для небольших z.

Из (5) находим энергию ионизации нейтрального атома $E_I = -\left.\frac{\partial E}{\partial N}\right|_{N=Z}$:

$$E_I = \frac{3}{8} L^2 Z^2. \qquad (7)$$

Как видно из (7), в предельном случае $B >> Z^3$ энергия ионизации очень быстро возрастает с Z, в отличие от результатов работы [2], где энергия ионизации при $B = 2 \cdot 10^{12}$ *гс* примерно постоянна в интервале $1 < Z < 10$. Объясняется это тем, что параметры в работе [2], относятся к промежуточной области $B \sim Z^3$, и асимптотическая формула (7), возможно, еще не применима. Заметим, что поправка на обменное взаимодействие оказывается небольшой по сравнению с (7) при больших Z [2].

Из формулы (5) следует, что при $N > Z$ энергия E убывает с N. Поэтому энергетически выгодно образование отрицательных ионов вплоть до $N \cong \frac{4}{3} Z$, где $\frac{\partial E}{\partial N} = 0$. Еще выгоднее при не слишком высоких температурах образование молекул с большой энергией связи. Кроме того, поскольку сильно вытянутые при $B >> Z^3$ атомы обладают большим квадрупольным моментом, и их энергия взаимодействия должна быть очень велика, то по-видимому, даже при температурах $\sim 10^6$ *град* тяжелое вещество в сверхсильном поле даже на поверхности пульсара может конденсироваться в твердую фазу. Это будет рассмотрено отдельно.

Поступила в редакцию
13 ноября 1970 г.

Литература

[1] Б.Б.Кадомцев. ЖЭТФ, 58, 1765, 1970.

[2] R.Cohen, J.Lodenquai, M.Ruderman. Phys. Rev. Lett., 25, 467, 1970.

[3] R.J.Elliott, R.Loudon. J.Phys. Chem. Sol., 15, 196, 1960.

[4] H.Hasegawa, R.E.Howard. J.Phys. Chem. Sol., 21, 179, 1961.

[5] Б.С.Монозон, А.Г.Жилич. ФТТ 8, 3559, 1966; ФТТ 1, 673, 1967.

[6] L.K.Haines, D.H.Roberts. Amer. J. Phys., 37, 1145, 1969.