

Письма в ЖЭТФ, том 13, стр. 15 – 19

5 января 1971 г.

МОЛЕКУЛЫ В СВЕРХСИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Б.Б.Кадомцев, В.С.Кудрявцев

В очень сильном магнитном поле, значительно превышающем 10^9 э (такие поля могут быть в нейтронных звездах) атомы с атомным номером Z принимают форму, сильно вытянутую вдоль магнитного поля B [1–3]. Такие атомы обладают большим электрическим квадрупольным моментом и должны связываться в устойчивые молекулы. При этом оказывается возможным образование молекул совершенно необычного вида, когда электронное облако полностью

обобщается, и все электроны образуют отрицательно заряженную "иглу", вдоль оси которой располагаются ядра. Мы приближенно определим энергию связи таких молекул, не рассматривая взаимодействия атомов на далеких расстояниях.

Рассмотрим сначала двухатомную молекулу с ядрами, расположенными на одной магнитной силовой линии на расстоянии R друг от друга и имеющими заряд Z каждое. В пренебрежении обменной поправкой энергия может быть приближенно записана в виде (ср. с формулой (2) работы [3]):

$$E = N \int \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial z} \right)^2 - \left(\frac{Z}{r} + \frac{Z}{|r - R|} \right) \tilde{\psi}^2 + \frac{N-1}{2} \left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle \tilde{\psi}^2 \right\} d\mathbf{r} + \frac{Z^2}{R}. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{\psi}$ — средняя волновая функция, так что величина $N \tilde{\psi}^2$ равна средней плотности электронов, N — число электронов, $\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle = \int \frac{1}{|r - r_2|} \tilde{\psi}^2(r_2) d\mathbf{r}_2$, всюду используются атомные единицы.

Энергия основного состояния определяется минимумом функционала (1) при дополнительном условии $\int \tilde{\psi}^2 d\mathbf{r} = 1$. При $B \gg Z^3$ (магнитное поле измеряется в единицах $m^2 e^3 c \hbar^{-3} = 2,35 \cdot 10^9 \text{ э}$) заполняются самые нижние уровни по продольному движению [1-3], и электронное облако принимает иглообразную форму с малым радиусом $\rho_N = \sqrt{2N/B}$. В этих условиях для определения минимума энергии (1) можно воспользоваться приближением тонкого линейного заряженного тела с погонной плотностью заряда $\lambda(z) = \tilde{\psi}^2 2\pi r dr$. Выбираем для λ пробную функцию вида $\lambda = \beta = \text{const}$ между ядрами, т. е. при $0 < z < R$ и экспоненту снаружи от ядер: $\lambda = \beta \exp(-2\alpha|z|)$ при $z < 0$, $\lambda = \beta \exp[-2\alpha(z-R)]$ при $z > R$. Из условия нормировки $\tilde{\psi}$ следует, что $\beta = (\alpha^{-1} + R)^{-1}$. С логарифмической точностью интегралы в (1) без труда вычисляются, и в приближении $R \ll \alpha^{-1}$, когда ядра расположены вблизи центра электронного облака, приближенное выражение для E имеет вид:

$$E \cong N \left\{ \frac{\beta^2}{2} - 4ZL\beta + \frac{N-1}{2} L(\beta + R\beta^2) \right\} + \frac{Z^2}{R}, \quad (2)$$

где $L = \ln(1/\beta\rho_N) \gg 1$ при $B \gg Z^3$. Из условия минимума E по R , т. е.

из $\partial E/\partial R = 0$, находим $R^2 = \left(\frac{1}{\beta^2} \right) \left(\frac{2Z^2}{N(N-1)} \right) \left(\frac{1}{L} \right)$. Для нейтральной двухатом-

ной молекулы $N = 2Z$ и $R\beta = (1/\sqrt{2L}) \ll 1$, т. е. при $L \gg 1$ расстояние между ядрами действительно оказывается малым по сравнению с характерной

длиной электронного облака $\beta^{-1} = a^{-1}$, но велико по сравнению с его радиусом ρ_N . Из (2) видно, что при $R\beta \ll 1$ член с R в фигурных скобках мал, следовательно минимум E по β определяется так же как и для изолированного атома с зарядом ядра $2Z$ [3], так что получаем

$$\beta = \frac{1}{2}(8Z - N + 1); \quad E = -\frac{N}{8}(8Z - N + 1)^2 + \sqrt{\frac{N(N-1)}{2}}(8Z - N + 1)L_2^{3/2}, \quad (3)$$

$L_n = \ln(1/\beta\rho_{nZ}) \approx 1/2 \ln[B/(nZ)^3]$ (n — целое число). Второе слагаемое в выражении (3) для E соответствует учету кулоновского отталкивания ядер. Для нейтральной молекулы ($n = 2Z$) выражение (3) приближенно равно

$$E = -9Z^3L_2^2 + 6\sqrt{2}Z^3L_2^{3/2}. \quad (4)$$

Напомним, что энергия изолированного атома в сверхсильном магнитном поле $B \gg Z^3$ равна $E_a = -\frac{9}{8}Z^3L_1^2$ [3]. Таким образом из (4) следует,

что энергия связи двухатомной молекулы в поле $B \gg Z^3$ имеет колоссальное значение — она вшестеро превышает величину E_a .

Для трехатомной молекулы с ядрами, расположенными вдоль одной силовой линии с интервалом R друг от друга, можно опять воспользоваться прежней аппроксимацией: $\lambda = \beta = \text{const}$ между ядрами, а снаружи от них — экспонентой. При $R \ll \beta$ и $N = 3Z \gg 1$ выражение для энергии E принимает вид

$$E = 3Z \left\{ \frac{\beta^2}{2} - 6ZL\beta + \frac{3Z}{2}L(\beta + 2R\beta^2) \right\} + \frac{5Z^2}{2R}. \quad (5)$$

Повторяя выкладки, приведшие к (3), (4), находим:

$$E = -\frac{9}{8}L^2(3Z)^3 + \sqrt{\frac{5}{2}}L^{3/2}(3Z)^3. \quad (6)$$

Для трехатомной молекулы энергия связи, т. е. разность между энергией системы, состоящей из двухатомной молекулы и изолированного атома и энергий (6), положительна только при значении логарифма $L > 6$, т. е. при очень больших B . Это значит, что однородные атомы в сверхсильном магнитном поле должны образовывать двухатомные молекулы с большой энергией связи. Разумеется, при этом не исключена возможность слипания таких молекул друг с другом в более сложные комплексы, но с меньшей энергией связи.

Рассмотрим теперь молекулу, образованную одним тяжелым атомом Z и двумя легкими атомами Z' , расположенными на одной и той же силовой линии по обе стороны от него на одинаковых расстояниях R . Для электронной погонной плотности естественно воспользоваться аппроксимацией $\lambda = a \exp(-2a|z|)$. Тогда при $aR \ll 1$ получаем для E

$$E = N \left\{ \frac{a^2}{2} - 2ZLa - 4Z'La(1 - 2aR) + \frac{N-1}{2} La \right\} + \frac{2ZZ'}{R}. \quad (7)$$

Аналогично прежнему находим минимальные значения для E при $Z' \ll Z$ и $N = Z + 2Z'$:

$$E = E_0 - \frac{27}{4} Z^2 Z' (L^2 - 16L^{3/2}) = E_0 - \frac{27}{4} Z^2 L^2 Z'. \quad (8)$$

Из (8) видно, что при $L > 1$ энергия связи положительна, она значительно больше энергии прилипания к атому $2Z'$ электронов, равной $2Z'E_1 = \frac{3}{4} L^2 Z^2 Z'$,

где E_1 — энергия ионизации [3]. Таким образом при наличии наряду с тяжелыми легкими атомами (скажем с $Z' < 10$) энергетически выгодно образование разнородных молекул. Нетрудно убедиться, что легкие ядра при этом располагаются в точках минимума потенциала $\phi(z)$ вдоль оси тяжелого атома. При дальнейшем добавлении новых легких атомов их ядра будут опять располагаться вблизи этих же точек, поскольку электростатическое расталкивание добавленных ядер меньше взаимодействия с основным полем. При этом под Z' можно понимать полусумму зарядов легких ядер в молекуле вида TJ_n , где T — тяжелый, J — легкий атом, а n — целое число. При приближении Z' к Z такая молекула, по-видимому, должна перестраиваться.

Эффект включения легких атомов в молекулу должен иметь место и для рассмотренной выше молекулы вида T_2 . Для энергии связи такой молекулы вида $T_2 J_n$ качественно можно пользоваться формулой (8), если вместо E_0 подставить выражение для энергии молекулы (3) и заменить Z на $2Z$. Энергия такой молекулы минимальна.

Итак, мы показали, что в сверхсильном магнитном поле $B \gg Z^3$ энергетически выгодно образование молекул. В чистом веществе должны образовываться двухатомные молекулы, а в смеси тяжелого и легкого вещества должны образовываться молекулы типа $T_2 J_n$, где $n \sim Z_T/Z_L$. Такие молекулы имеют очень большую энергию связи — гораздо большую, чем энергия ионизации. Поэтому при нагревании вещества должна образовываться плазма с молекулярными ионами.

Литература

- [1] Б.Б.Кадомцев. ЖЭТФ, 58, 1765, 1970.
 - [2] R.Cohen, J.Lodenquai, M.Ruderman. Phys. Rev. Lett., 25, 467, 1970.
 - [3] Б.Б.Кадомцев, В.С.Лудрявцев. Письма в ЖЭТФ, данный номер, стр. 61.
-