

сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

722/2-80

25/2-80  
P4 - 12842

С.И.Виницкий, Ф.Р.Вукайлович, М.С.Касчиев

АТОМ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ИОН ВОДОРОДА  
В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1979

P4 - 12842

С.И.Виницкий, Ф.Р.Вукайлович \*; М.С.Касчиев

АТОМ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ИОН ВОДОРОДА  
В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

---

\* Институт ядерных наук "Борис Кидрич",  
Белград, Югославия.

Виницкий С.И., Вукайлович Ф.Р., Касчиев М.С. P4 - 12842

Атом и молекулярный ион водорода в сильном магнитном поле

Метод конечных элементов использован для вычисления энергии и волновых функций связанных состояний атома и молекулярного иона водорода в однородном магнитном поле  $H$  в интервале  $0 \leq H \leq 10^{14}$  Гс. В таблицах приведены вычисленные с относительной точностью  $10^{-8} - 10^{-4}$  значения уровней энергии основных состояний атома и молекулярного иона водорода при изменении поля в указанном интервале. Для сравнения даны соответствующие значения уровней энергии, полученные ранее с помощью обычных вариационных методов в интервале  $0 \leq H \leq 10^{10}$  Гс. Для атома водорода оба метода приводят к одному результату, а для молекулярного иона водорода точность вычислений по методу конечных элементов выше. Приведены рисунки узловых линий волновых функций возбужденного состояния атома в зависимости от величины поля, которые в отсутствие поля переходят в узловые линии волновой функции  $2s$ -состояния изолированного атома водорода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ. Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Vinitsky S.I., Vukajlovic F.R., Kaschiev M.S. P4 - 12842

The Hydrogen Atom and Molecular Ion in the Strong Magnetic Field

The finite element method is applied to calculating the energy and wave functions of bound states of the hydrogen atom and molecular ion in the uniform magnetic field  $H$  in the range  $0 \leq H \leq 10^{14}$  Gs. In this range the energy levels of ground states of the hydrogen atom and molecular ion have been calculated with the relative accuracy  $10^{-8} - 10^{-4}$  and comparison has been made with those found earlier by usual variational methods in the interval  $0 \leq H \leq 10^{10}$  Gs. For the ground state of the hydrogen atom these values coincide while for the molecular ion the values obtained by the finite element method are more accurate than those coming from the variational methods. Pictures are also drawn of nodal lines of wave functions of the atomic excited state as a function of the field strength which, in the absence of the field, turns into nodal lines of the wave function of  $2s$ -state of an isolated hydrogen atom.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

1. Задача о связанных состояниях атома и молекулярного иона водорода /  $H$  и  $H_2^+$  / в сильных магнитных полях возникает в астрофизике при рассмотрении нейтронных звезд<sup>/1/</sup>. Эти поля достигают величины порядка  $10^{13}$  Гс. В лабораторных условиях аналогичная задача возникает при исследовании полупроводников. В этом случае экситоны представляют собой квазиатомы водорода с малой эффективной массой и большой диэлектрической проницаемостью<sup>/2/</sup>. Удобный безразмерный параметр, который определяет поле, равен  $\gamma = \mu_B H / R_\infty$ . Где  $\mu_B$  - магнетон Бора,  $H$  - напряженность поля в Гс и  $R_\infty$  - ридберг (Ry) или эффективный ридберг в случае атома или экситона соответственно.

Обычно в области малых, средних и больших значений  $\gamma$  используются различные приближенные подходы. При этом границы их применимости не определены достаточно четко, а значения энергии связи систем  $H$  и  $H_2^+$ , полученные с их помощью, отличаются иногда уже первой значащей цифрой.

Первая попытка расчета спектра  $H$  и  $H_2^+$  в рамках одного подхода во всей области изменения  $\gamma$  была предпринята в работе<sup>/3/</sup>. Однако при  $\gamma = 0$  для  $H_2^+$  этот метод дает энергию связи 15,1 эВ вместо 16,39 эВ. Таким образом, до настоящего времени проблема вычисления энергии связи  $H$  и  $H_2^+$  как функции величины  $\gamma$  во всей области  $0 \leq \gamma \leq 10^4$  с заданной точностью остается открытой.

В данной работе предложен общий подход к решению с заданной точностью задачи о связанных состояниях  $H$  и  $H_2^+$  в полях, для которых значение  $\gamma$  лежит в интервале  $0 \leq \gamma \leq 10^4$ , а также в более сильных полях.

2. Гамильтониан атома водорода в однородном магнитном поле  $H$ , направленном по оси  $\hat{z}$ , имеет вид

$$H_a = -\nabla_{\vec{r}}^2 - 2/r + \gamma l_z + \frac{1}{2} \gamma^2 r^2 \sin^2 \theta,$$

где  $l_z$  - компонента оператора орбитального момента,  $\vec{l} = -i[\vec{r} \times \nabla_{\vec{r}}]$ ,  $r, \theta$  - сферические координаты вектора  $\vec{r} = \{r, \theta, \phi\}$ .

Гамильтониан молекулярного иона водорода в однородном магнитном поле  $\mathcal{H}$ , направленном по вектору  $\vec{R}_{ab}$ , соединяющему ядра  $a$  и  $b$  /протоны/, в приближении Борна-Оппенгеймера имеет вид

$$H_I = -\nabla_{\vec{r}}^2 + \gamma \ell_z + \frac{1}{2} \gamma^2 r^2 \sin^2 \theta - 2/r_a - 2/r_b + 2/R_{ab},$$

где  $r_a = |\vec{r} - \frac{1}{2}\vec{R}|$ ,  $r_b = |\vec{r} + 1/2\vec{R}|$ ,  $R_{ab} = |\vec{R}_{ab}|$ ,  $\vec{r}$  - вектор положения электрона с началом в центре отрезка  $R_{ab}$ . Гамильтониан  $H_I$  естественно записать в сфероидальных координатах

$\xi = \frac{r_a + r_b}{R_{ab}}$ ,  $\eta = \frac{r_a - r_b}{R_{ab}}$  и  $\phi$ , в которых переменные разделяются в отсутствие магнитного поля ( $\gamma=0$ )<sup>6/</sup>.

Проекция  $\ell_z$  орбитального момента  $\vec{l}$  на ось  $\hat{Z}$  /для  $H_2^+$  ось  $Z$  направлена вдоль вектора  $\vec{R}_{ab}$ / в обоих случаях,  $H$  и  $H_2^+$  сохраняется,  $\ell_z = m$ , а угловая зависимость волновой функции имеет обычную форму  $(2\pi)^{-1/2} e^{im\phi}$ . После отделения азимутальной зависимости обе задачи о связанных состояниях систем  $H$  и  $H_2^+$  с гамильтонианами  $H_a$  и  $H_I$  сводятся к решению задач на собственные значения для уравнений в частных производных в плоскостях  $(r, \theta)$  и  $(\xi, \eta)$  соответственно:

$$H_a \psi_a(r, \theta) = -\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{m^2}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r} - \gamma m - \frac{1}{4} \gamma^2 r^2 \sin^2 \theta \right\} \psi_a(r, \theta) = E_a \psi_a(r, \theta) \quad /1/$$

при  $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$  с граничными условиями

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 \frac{\partial \psi_a(r, \theta)}{\partial r} = 0, \quad \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\partial \psi_a(r, \theta)}{\partial \theta} = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \psi_a(r, \theta) = 0; \quad /2/$$

$$H_I \psi_I(\xi, \eta; R) = -\left\{ \frac{1}{2} \frac{4}{R^2} \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] + \frac{4}{R} \frac{\xi}{\xi^2 - \eta^2} - \frac{2}{R^2} \frac{m}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} - \gamma m - \frac{R^2}{32} \gamma^2 (1 - \eta^2)(\xi^2 - 1) \right\} \psi_I(\xi, \eta; R) = E_I(R) \psi_I(\xi, \eta; R) \quad /3/$$

при  $1 \leq \xi < \infty$ ,  $-1 \leq \eta \leq 1$  с граничными условиями

$$\lim_{\xi \rightarrow 1+0} (\xi^2 - 1) \frac{\partial \psi_I(\xi, \eta; R)}{\partial \xi} = 0, \quad \lim_{\substack{\eta \rightarrow -1+0 \\ \eta \rightarrow 1-0}} (1 - \eta^2) \frac{\partial \psi_I(\xi, \eta; R)}{\partial \eta} = 0, \quad /4/$$

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi_I(\xi, \eta; R) = 0.$$

Т а б л и ц а 1

Энергии основного состояния  $E_a(R_0)$  и  $E_1(R_0)$  атома и молекулярного иона водорода в магнитном поле  $H$  /Гс/.  
Значения  $\gamma$  и  $R_0$  совпадают с приведенными в работе <sup>9/</sup>.

$M, Гс$	$\gamma$	$R_0$	$E(R_0)$	$W_0 = 2(E(R_0) + \frac{1}{R_0^2})$	$E_a$	$E_{12} = W_0 - E_a$	$E_{occ}$
$10^9$	0,4255022	1,9	-1,10139	-1,15015	-0,92078	-0,22937	
$5 \cdot 10^9$	0,2127511	1,7	-0,75771	-0,33894	0,04946	-0,38840	
$10^{10}$	0,4255011	1,2	-0,28699	1,09269	1,64034	-0,54765	
$5 \cdot 10^{10}$	0,2127511	0,8	6,50247	15,50494	16,7544	-1,2493	
$10^{11}$	0,4255022	0,6	15,87009	35,67352	36,84789	-1,77437	
$5 \cdot 10^{11}$	0,2127511	0,354	96,96319	199,5561	203,54342	-3,98732	
$10^{12}$	0,4255022	0,287	201,1893	409,3473	416,43125	-7,08395	429,19
$5 \cdot 10^{12}$	0,2127511	0,181	1049,031	2109,111	2151,7669	-42,655	2164,92
$10^{13}$	0,4255022	0,15	2115,95	4245,234	4323,2055	-77,97	4337,22
$5 \cdot 10^{13}$	0,2125711	0,104	10678,75	21376,72	21928,05	-551,33	21948,30
$10^{14}$	0,4255022	0,086	21402,58	42828,41	45396,85	-2568,44	45404,33

3. Эти задачи решались в настоящей работе методом конечных элементов<sup>/4,5/</sup>, который позволяет вычислить собственные значения  $E_a, E_I(R)$  и волновые функции  $\psi_a(r, \theta)$  и  $\psi_I(\xi, \eta; R)$  с заданной относительной точностью, которая была выбрана равной  $10^{-3} \div 10^{-4}$ .

В табл. 1 приведены вычисленные этим методом значения энергии основного состояния  $E_a$  атома и  $E_I(R_0)$  молекулярного иона водорода при некоторых значениях безразмерного параметра  $0,425 \leq \gamma \leq 0,425 \cdot 10^5$ , соответствующих напряженности  $10^9 \leq H \leq 10^{14}$  Гс однородного магнитного поля<sup>/9/</sup>. В точке  $R_0$  полная энергия иона водорода  $W(R) = 2(E_I(R) + R^{-1})$  имеет минимум/. Кроме того, в табл. 1 приведены значения полной энергии  $W_0 \equiv W(R_0)$  и энергии связи иона водорода  $E_{CB} = W_0 - E_a$ , которая отсчитывается от энергии  $E_a$  основного состояния атома водорода в соответствующем магнитном поле.

При  $\gamma = 0$  задача о связанных состояниях  $H_2^+$  сводится к задаче двух кулоновских центров, которая решена с большой точностью  $\sim 10^{-12}$  /<sup>6/</sup>. В рамках метода конечных элементов эта задача была решена с точностью  $10^{-4} \div 10^{-5}$  /<sup>5/</sup>.

В последней колонке табл. 1 для сравнения даны значения  $E_{осц}$  - энергии основного состояния анизотропного осциллятора, к которым с ростом напряженности поля  $H$  приближаются соответствующие значения энергии  $E_a$  атома водорода. Так,

Т а б л и ц а 2

Энергия основного состояния  $E_a(R\gamma)$  атома водорода в магнитном поле  $H = \gamma R_\infty / \mu_B$

$\gamma$	H.S.Brandt <sup>/7/</sup>	D.Cabib <sup>/2/</sup>	Dos Santos <sup>/3/</sup>	R.K.Bhaduri <sup>/8/</sup>	Данная работа
0				-1,0	-0,999957
1	-0,52386	-0,66241	-0,63308	—	-0,66228
2	0,09190	-0,04450	-0,02759	-0,0294	-0,04443
3	0,80911	0,67087	0,68402	—	0,67119
4	1,5798	1,4384	1,4502	—	1,43872
5	2,3842	2,2392	2,2510	—	2,2396
20	—	—	—	15,68383	15,5927
100	—	—	—	92,74	92,5223
300	—	—	—	289,868	290,3622
1000	—	—	—	985,758	991,8777

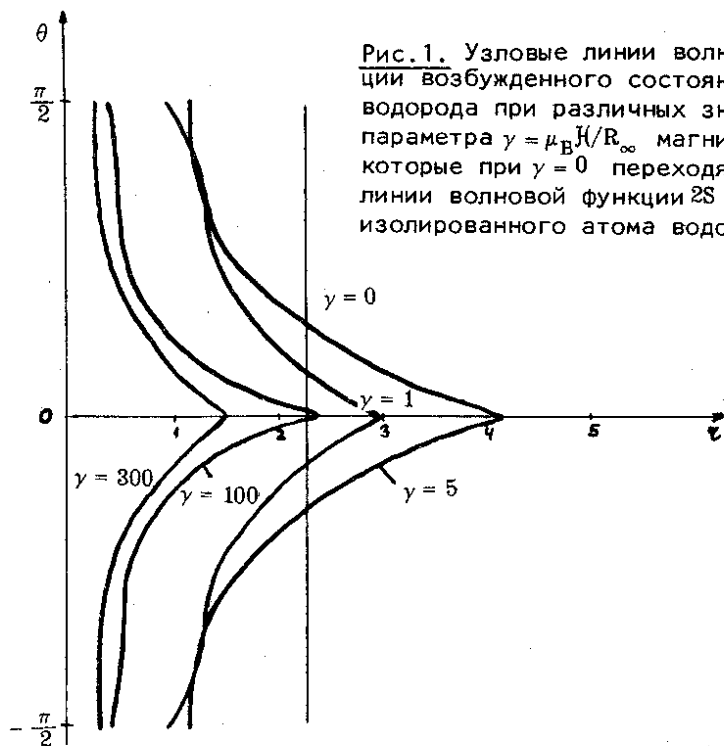


Рис. 1. Узловые линии волновой функции возбужденного состояния атома водорода при различных значениях параметра  $\gamma = \mu_B \mathcal{H} / R_\infty$  магнитного поля, которые при  $\gamma = 0$  переходят в узловые линии волновой функции  $2S$ -состояния изолированного атома водорода.

например, при  $\mathcal{H} = 10^{14}$  Гс  $E_{\text{осц}} - E_a \approx 7,5Ry$ , что составляет  $\sim 0,02\%$  от соответствующего значения энергии анизотропного осциллятора.

Отметим, что известные вариационные расчеты <sup>[2,3,7]</sup>, которые проводились при значениях  $0 \leq \gamma \leq 5$ , дают значения энергии связи  $E_{\text{св}}$  основного состояния молекулярного иона водорода на 50% выше, чем полученные в настоящей работе.

На рис. 1 в плоскости  $r, \theta$  изображены узловые линии волновых функций возбужденного состояния атома водорода при разных значениях параметра  $\gamma = 0, 1, 5, 100, 300$ , которые при  $\gamma = 0$  совпадают с узловыми линиями волновой функции  $2s$ -состояния изолированного атома водорода. С ростом  $\gamma$  начиная с  $\gamma > 5$  узловые линии прижимаются к оси  $\theta$  и при всех значениях симметричны относительно направления поля по оси  $\hat{z}$ .

В табл. 2 сравниваются значения  $E_a$  энергии основного состояния атома водорода в однородном магнитном поле при некоторых значениях  $0 \leq \gamma \leq 1000$ , полученные в настоящей работе и другими авторами. Во всей области  $0 \leq \gamma \leq 1000$  наши результаты совпадают с результатами лучших вариационных



расчетов с точностью  $\sim 10^{-4}$ . Расчеты в работах <sup>/2,3,7/</sup> проводились при значениях  $\gamma$  в области  $0 \leq \gamma \leq 5$  и лишь в работе <sup>/8/</sup> — во всей области  $0 \leq \gamma \leq 1000$ . При  $\gamma > 10^4$  в принципе нужно учитывать релятивистские поправки <sup>/10/</sup>.

4. Алгоритм <sup>/5/</sup>, основанный на методе конечных элементов <sup>/4/</sup>, используемый в настоящей работе, позволяет решать задачу о связанных состояниях  $H$  и  $H_2^+$  в однородном магнитном поле с заданной точностью в широкой области изменения напряженности поля  $H$  без каких-либо дополнительных предположений и специального выбора пробных функций для разных значений  $\gamma$ , как это принято в работах <sup>/2,3,7,8,9/</sup>. Кроме того, этот алгоритм может быть полезен для решения других задач на собственные значения для уравнений в частных производных на плоскости.

Авторы благодарят И.В.Комарова за полезные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Кадомцев Б.Б., Кудрявцев В.С. Письма в ЖЭТФ, 1970, 13, с.15.
2. Cabib D., Fabrio E., Fiorio G. Nuovo Cimento, 1972, B10, p.185.
3. Dos Santos R.R., Brandi H.S. Phys.Rev., 1976, A13, p.1970-1974.
4. Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. "Наука", М., 1976.
5. Лазаров Р., Касчиев М. ОИЯИ, P11-12307, Дубна, 1979.
6. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
7. Brandi H.S. Phys. Rev., 1975, A11, p.1835.
8. Bhaduri R.K., Nogami Y., Warke C.S. Astrophys.J., 1977, 217, p.324-329.
9. De Melo C.P. et al. Phys.Rev.Lett., 1976, 37, p.676.
10. Classer M.L., Kaplan J.I. Phys.Lett., 1975, 53A, p.373.

Рукопись поступила в издательский отдел  
5 октября 1979 года.