

A 83
70270

КОНТРОЛЬНАЯ ПЕЧАТНОСТЬ

ЛЕНИНГРАДСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ им. М.И.КАЛИНИНА

На правах рукописи

52-1/-8:530.12; 539.183/.184;
539.193/.196

ОБРЕХТ МИХАИЛ СЕРГЕЕВИЧ

СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ В
СВЕРХСИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Специальность 01.04.02 – теоретическая и
математическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ленинград, 1983

Работа выполнена в Институте теоретической и прикладной механики СО АН СССР

Научные руководители: академик Н.Н.Яненко,
кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник Г.В.Гадияк

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Л.Н.Лабзовский,
кандидат физико-математических наук,
младший научный сотрудник Г.Г.Павлов

Ведущая организация: Физический институт академии наук
им. П.Н.Лебедева

Защита состоится " _____ " _____ 1983г. в _____ часов
на заседании Специализированного совета К 063.38.13
Ленинградского ордена Ленина политехнического института
им. М.И.Калинина (195251, Ленинград, Политехническая 29, ЛПИ).

Отзыв на автореферат в двух экземплярах, заверенный
печатью, просим выслать по вышеуказанному адресу на имя
ученого секретаря Специализированного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной
библиотеке ЛПИ.

Автореферат разослан " _____ " _____ 1983г.

Ученый секретарь
Специализированного совета

к.т.н., доцент

А.И.Мелькер

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Магнитное поле существенно изменяет свойства электронных систем, если ларморовский радиус электрона в нем становится сравнимым, или даже меньше, размеров орбиты электрона в нулевом магнитном поле. В настоящее время для ряда систем реализуются магнитные поля, удовлетворяющих этому условию, такие поля принято называть сверхсильными.

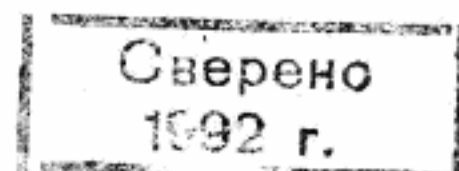
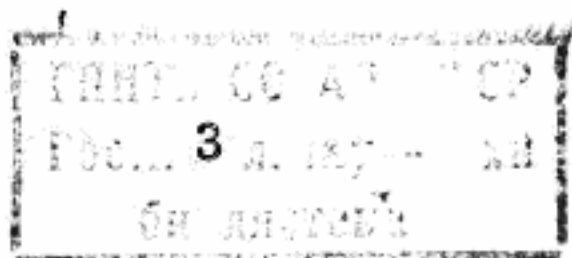
В первую очередь это заряженные и нейтральные примесные центры, экситоны и экситонно-примесные комплексы в полупроводниках. Для ряда полупроводников сверхсильными будут поля $10^3 - 10^4$ гаусс. Малая величина этих полей, а следовательно большой размер орбиты электрона в этих системах, обусловлены большим значением диэлектрической проницаемости и малостью эффективной массы.

Значительно большие поля вызывают аналогичные эффекты в атоме водорода (аналогом атома водорода является примесный центр, или экситон) или в водородоподобном ионе. Так для основного состояния атома водорода это поля $B \gg B_0 = m^2 e^3 c / \hbar^3 = 2.35 \cdot 10^9$ гаусс, а для водородоподобного иона с зарядом ядра Z $B \gg B_0 \cdot Z^2$. Такие поля существуют в компактных звездах - пульсарах ($10^{11} - 10^{12}$ гаусс) и белых карликах ($10^8 - 10^{10}$ гаусс). Таким образом атомоподобные системы в полупроводниках дают уникальную возможность моделирования атомов в полях $10^7 - 10^{13}$ гаусс. К настоящему времени уже можно говорить о количественном определении значения магнитного поля в белых карликах по идентификации спектров излучения индивидуальных атомов.

Значительный интерес представляет исследование поведения ридберговских атомов в сверхсильном магнитном поле ($10^4 - 10^5$ гаусс). Эти системы также аналогичны атому водорода.

Еще одна возможность реализации сверхсильных магнитных полей в лабораторных условиях связана с полуметаллами и полупроводниками, имеющими малозаполненные зоны. Для сплавов $BiSb$ сверхсильными будут поля $10^4 - 10^5$ гаусс.

Все вышесказанное обуславливает актуальность теоретическо-



го исследования свойств электронных систем в сверхсильном магнитном поле.

Цель работы.

1. Расчет спектров и сил осцилляторов гелиеподобных систем в сверхсильном магнитном поле.

2. Расчет нижних синглетного и триплетного термов молекулы водорода в сверхсильном магнитном поле методом Гайтлера-Лондона.

3. Расчет энергии и спиновой перестройки изолированного тяжелого атома в сверхсильном магнитном поле.

4. Расчет уравнения состояния вещества в сверхсильном магнитном поле.

Научная новизна. В работе впервые:

1. Проведен расчет квадрупольных моментов водородоподобных и гелиеподобных систем, позволяющих оценивать взаимодействие атомов в сверхсильном магнитном поле на больших расстояниях.

2. Построены изолинии электронной плотности указанных выше систем.

3. Рассчитаны спектры и силы осцилляторов гелиеподобных систем с произвольным зарядом ядра в сверхсильном магнитном поле.

4. Проведен расчет нижних термов молекулы водорода в сверхсильном магнитном поле методом Гайтлера-Лондона при произвольной ориентации оси молекулы по отношению к направлению внешнего магнитного поля.

5. Проведен расчет нижних термов молекулярного иона водорода в сверхсильном магнитном поле вариационным методом для произвольного угла между осью молекулы и направлением внешнего поля.

6. Построена интерполяционная модель Томаса-Ферми для описания многоэлектронных систем в сверхсильном магнитном поле.

7. В рамках интерполяционной модели Томаса-Ферми рассчитаны энергия и спиновая перестройка тяжелого атома и уравнения состояния вещества в сверхсильном магнитном поле.

8. Сформулирована модифицированная модель Томаса-Ферми, учитывающая квантование Ландау.

9. На основе модифицированной модели Томаса-Ферми рассчитано уравнение состояния вещества в сверхсильном магнитном

поле. Показано, что зависимости ряда характеристик вещества имеют осцилляционный характер.

Практическая ценность.

Результаты расчета спектров и сил осцилляторов двухэлектронных систем могут быть использованы для расчета магнитооптических свойств полупроводников, а также при расчете процессов переноса излучения в магнитосфере пульсара. Кроме этого данные расчетов можно использовать для идентификации спектров излучения определенных систем в пульсарах и белых карликах, и, тем самым, для определения величины магнитного поля в этих компактных звездах.

Проведенные расчеты уравнения состояния вещества в сверхсильном магнитном поле можно применить к расчету процессов распространения упругих волн в коре пульсара, а также к расчету магнитной восприимчивости электронного газа в металлах и полупроводниках с учетом действия температуры и неоднородности.

Апробация работы. Основные материалы диссертации докладывались на УІ Всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров (Воронеж, 1980), на I Всесоюзном симпозиуме по теории сверхплотных небесных тел (Ереван, 1980), на семинаре Теоретического отдела ФИАН, на семинаре Теоретического отдела института ядерной физики в Новосибирске, на семинаре кафедры физики металлов в ЛПИ, на Объединенном квантовохимическом семинаре СО АН, а также на семинарах отделов институтов Теплофизики, Гидродинамики и физики полупроводников СОАН.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 10 печатных работ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и содержит 120 страниц, включая 4 таблицы и 24 рисунка. Список литературы включает 172 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении формулируются основные задачи, решаемые в данной работе, и дается краткая аннотация выполненной работы.

В главе I рассматриваются одно и двухэлектронные системы

в сверхсильном магнитном поле.

Большинство свойств водородоподобной системы в сверхсильном магнитном поле к настоящему времени довольно хорошо изучены. В данной главе на основе вариационного способа решалась задача для атома водорода в сверхсильном магнитном поле $B \ll 1$, где B выражено в единицах $B_0 = m^2 e^3 c / \hbar^3$. В качестве базиса использовались слэтеровские орбитали, показатели экспонент которых варьировались для достижения хорошей точности воспроизведения волновой функции электрона при небольшом числе базисных функций. Подобное сужение базиса дало возможность рассчитать с точностью 0.1% основное и с точностью 2% низколежащие возбужденные состояния на базисе не более чем из 24 слэтеровских функций, что в свою очередь позволило провести расчет гелиеподобных систем по теории возмущения относительно электрон-электронного взаимодействия. Волновая функция электрона в водородоподобной системе записывалась в виде суммы

$$\chi_i = \sum_{j,l} c_{jl} \eta_{jl}(\xi_j r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где c_{jl} определялись при диагонализации матрицы гамильтониана в базисе (1), $\eta_{jl}(\xi_j r)$ - базисные радиальные функции, ξ_j - вариационные параметры

$$\eta_{jl}(r) = r^l \exp(-\xi_j r), \quad (2)$$

Y_{lm} - сферические функции.

Для водородоподобных систем кроме спектров, которые рассчитывались с точностью, указанной выше (сравнение проводилось с данными широко известных прецезионных расчетов Праддауда), были вычислены слабо представленные в литературе силы осцилляторов и не вычислявшиеся до сих пор квадрупольные моменты различных состояний водородоподобной системы в сверхсильном магнитном поле. Последние позволяют оценивать взаимодействие водородоподобных систем на больших расстояниях. Были также построены изолинии электронной плотности водородоподобных систем, наглядно демонстрирующих деформацию электронной оболочки водородоподобной системы в сверхсильном магнитном поле.

Гелиеподобные системы рассчитывались при помощи теории

возмущений по электрон-электронному взаимодействию, или, как ее еще называют, техники разложения по степеням $1/Z$. Энергия и волновая функция изоэлектронной последовательности (системы с равным числом электронов, но с разным зарядом ядра) выражается в виде ряда по степеням $1/Z$.

$$E_i = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon_{ik} Z^{2-k} \quad (3)$$

$$\psi_i = \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_{ik} Z^{-k} \quad (4)$$

Быстрый рост вычислительных затрат на расчет коэффициентов с ростом k (а также быстрое убывание этих коэффициентов, о чем говорят расчеты для нулевого магнитного поля и сравнение результатов расчета при помощи техники разложения по степеням $1/Z$ и других методов) вынуждает ограничиться первой поправкой к энергии. Тогда коэффициенты ряда будут иметь хорошо известный вид

$$\varepsilon_{i0} = E_{1,0} + E_{2,0} + 2S_z \cdot B, \quad (5)$$

$$\varepsilon_{i1} = \langle \varphi_{i0} | \frac{1}{r_{12}} | \varphi_{i0} \rangle, \quad (6)$$

где двухэлектронная волновая функция

$$\varphi_{i0} = (\chi_{i1}(1)\chi_{i2}(2) + (-1)^{S_i}\chi_{i1}(2)\chi_{i2}(1)) \quad (7)$$

выражается через волновые функции χ_i электрона в водородоподобной системе (I).

Проведенные расчеты для изоэлектронной последовательности гелия показали, что если для отрицательного иона водорода H^- отличие в энергии достигает 30%, то для атома гелия оно уменьшается до 8%, причем в обоих случаях отличие существенно уменьшается с ростом поля. Были также рассчитаны впервые силы осцилляторов для гелиеподобных систем и квадрупольные моменты состояний. Как и для водородоподобных систем были построены изолинии электронной плотности, показывающие, что распределение электронной плотности в основном состоянии атома гелия остается сферически симметричным и после завершения спиновой

перестройки электронной оболочки (нижним становится состояние с $M = -1$ и $S_z = 1$)

Были рассчитаны молекулярные системы: молекулярный ион водорода и молекула водорода. Молекулярный ион водорода рассчитывали вариационным методом с пробной волновой функцией в виде симметричной и антисимметричной комбинаций волновых функций для изолированного атома водорода в сверхсильном магнитном поле (I) домноженных на экспоненциальный множитель для достижения инвариантности матричных элементов относительно сдвига начала координат

$$\chi_{ia} = \exp(i\vec{A}_a \vec{r}) \cdot \chi_i(\vec{r} - \vec{r}_a), \quad (8)$$

где \vec{r}_a - радиус вектор a -того атома, а A_a - значение вектора потенциала в этой точке,

$$\psi_{i\pm} = (\chi_{ia}(\vec{r}) \pm \chi_{ib}(\vec{r})) / N, \quad (9)$$

где N - нормировочный множитель.

Расчеты с такой пробной волновой функцией привели к результатам, близким к имеющимся в литературе для ориентации оси молекулы вдоль направления поля и к несколько более низким для ориентаций под углом к полю. Для последнего случая расчеты проводились лишь в одной работе.

Основное состояние молекулы водорода рассчитывалось методом Гайтлера-Лондона. Волновую функцию представляли через атомные орбитали (8) в виде

$$\psi_{\pm} = (\chi_a(\vec{r}_1)\chi_b(\vec{r}_2) \pm \chi_b(\vec{r}_1)\chi_a(\vec{r}_2)) / N, \quad (10)$$

где индексы 1,2 относятся к электронам, а a, b - к протонам. Знак плюс относится к синглетному состоянию, знак минус к триплетному. Расчет низших синглетного и триплетного термов молекулы водорода с волновой функцией (10) дает более низкие значения энергии чем имеющиеся в литературе для расстояний, больших равновесного. Для упрощения расчета матричных элементов проводили переразложение слэтеровских экспонент по гауссовским

функциям (каждая слэтеровская экспонента представлялась в виде суммы трех гауссовских).

В главе 2 на основе интерполяционной статистической модели рассчитываются свойства тяжелых изолированных атомов и конденсированного вещества в сверхсильном магнитном поле. Ключевым соотношением этой модели является выражение плотности энергии (кинетической и обменной) квазиоднородного электронного газа через его плотность

$$\mathcal{E}(n_+, n_-) = \mathcal{E}_W(n_+, n_-)G(\xi) + \mathcal{E}_S(n_-)(1 - G(\xi)), \quad (\text{II})$$

где n_{\pm} плотности электронов со спином по и против направления поля, $\xi = \alpha n_-$, $\alpha = \pi^2/B^{3/2}$, \mathcal{E}_W - известное выражение для плотности обменной и кинетической энергии электронного газа в случае слабой его поляризации, $\mathcal{E}_W = \alpha_K (n_+^{5/3} + n_-^{5/3}) +$

$\alpha_{ex} (n_+^{4/3} + n_-^{4/3})$, α_K и α_{ex} - известные константы независимые от поля, выражение для \mathcal{E}_S также известно $\mathcal{E}_S = 2\pi^4 n_-^3 / 3B^2 +$

$2\pi n_- (\ln(\pi^2 n_- / B^{3/2}) + c) / B$, $c = 0.0395$, и представляет собой выражение для плотности кинетической и обменной энергии для полностью поляризованного газа электронов. Первая формула работает в случае $\xi \gg 1$, вторая при $\xi \ll 1$, тем самым $G(\xi)$ должна быть положительной, монотонной функцией, растущей от нуля при $\xi = 0$ до единицы при $\xi \rightarrow \infty$.

Неопределенность функции $G(\xi)$ в диапазоне значений $\xi \sim 1$ слабо влияет на значения рассчитываемых величин (около 5% в значении полного спина и энергии атома).

На основании формулы (II) были рассчитаны значения энергии и спина изолированного атома в ранее не исследованном промежуточном диапазоне полей. Кроме этого было рассчитано уравнение состояния конденсированного вещества в сверхсильном магнитном поле. Было выяснено, что вещество в таких условиях становится гораздо более жестким. Была также отмечена аномальная зависимость скорости звука от давления (падение ее с ростом давления).

В третьей главе на основе операторной формулировки метода Томаса-Ферми получены выражения для плотности энергии \mathcal{E} и

плотности n для квазиоднородного электронного газа в сверхсильном магнитном поле при произвольной температуре T :

$$n = \alpha \cdot T^{1/2} \sum_{s,k} I_{-1/2}(y_{s,k})$$

$$\varepsilon = \alpha T^{3/2} \sum_{s,k} (I_{1/2}(y_{s,k}) + (\frac{\varepsilon_F}{T} - y_{s,k}) I_{-1/2}(y_{s,k})),$$

где $\alpha = B/2\sqrt{2}\pi^2$; $y_{s,k} = (k + 1/2 + s)B/T$, $s = \pm 1/2$

(проекция спина электрона), k - номер уровня Ландау, $I_\nu(x)$ - функции Ферми-Дирака, определяемые соотношением

$$I_\nu(x) = \int_0^\infty \frac{t^\nu dt}{1 + \exp(t-x)}$$

При этом существенно использовалась квантованность движения электронов во внешнем магнитном поле, которая имеет место в слабых внешних полях, наложенных на магнитное (например кулоновское поле ядер вещества). Это дает ограничение на область применимости модели

$$z/R \ll B,$$

где z - атомный номер вещества, R - радиус атома или ячейки Вигнера-Зейтца.

Статистическое описание системы электронов возможно, если число заполненных состояний для движения вдоль и поперек поля велико. Это дает еще одно ограничение на область применимости модели

$$1 \ll BR^2 \ll z$$

На основе описанной выше статистической модели было рассчитано уравнение состояния и ряд других характеристик для конденсированного вещества в сверхсильном магнитном поле. Квантование движения электрона приводит к осцилляционным зависимостям в скорости звука и в других величинах от величины давления и магнитного поля. Учет влияния температуры приводит к уменьшению амплитуды осцилляции. Рассмотрена связь между

интерполяционной и модифицированной моделями Томаса-Ферми. Показано, что аномальная зависимость скорости звука от давления, полученная при расчете в интерполяционной модели, связана с заполнением первого уровня Ландау, и носит правильный качественный характер. Обсуждается возможное влияние поправок на неоднородность электронного газа — градиентных поправок. Для широкого диапазона температур, давлений и магнитных полей рассчитаны уравнение состояния, скорость звука и теплоемкость железа.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. Проведено исследование некоторых одно- и двухэлектронных систем в сверхсильном магнитном поле. Построены изолинии электронной плотности, наглядно демонстрирующие искажение электронной оболочки в магнитном поле. Рассчитаны энергии уровней и силы осцилляторов одно- и двухэлектронных систем с произвольным зарядом ядра. Вычислены энергии нижних уровней молекулярного иона водорода и молекулы водорода, для произвольной ориентации оси молекулы по отношению к направлению внешнего магнитного поля. Определены квадрупольные моменты водородоподобной и гелиеподобной системы в различных состояниях, которые позволяют оценивать взаимодействие атомов на больших расстояниях.

2. Предложена и реализована интерполяционная статистическая модель для описания свойств тяжелых атомов и конденсированного вещества в сверхсильном магнитном поле. Рассчитаны энергии тяжелых атомов в широком диапазоне значений магнитного поля, а также уравнение состояния вещества при различных величинах магнитного поля. Обнаружен аномальный рост скорости звука с уменьшением давления в некотором диапазоне значений поля и давления.

3. Предложена и реализована модифицированная модель Томаса-Ферми для описания свойств тяжелого атома и конденсированного вещества в сверхсильном магнитном поле. Рассчитаны уравнение состояния, скорость звука и теплоемкость вещества в широком диапазоне давлений, магнитных полей и температур. Зависимость скорости звука, теплоемкости и других величин носит осциллирующий характер, что связано с заполнением уровней Ландау замагниченными электронами. Первая осцилляция скорости звука с ростом

давления связана с заполнением первого уровня Ландау и качественно верно описывается интерполяционной моделью.

Основные материалы диссертации опубликованы в работах:

1. Gadiyak G.V., Lozovik Yu.E., Mashchenko A.I., Obrecht M.S. Spectra of helium-like systems in superstrong magnetic field. *Phys. Lett.*, 1981, v.87A, N 1-2, 18-20.
2. Gadiyak G.V., Lozovik Yu.E., Mashchenko A.I., Obrecht M.S. Spectrum, quadrupole and dipole moments of hydrogen- and helium-like ions in superstrong magnetic field. *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 1982, v.15, N 16, 2615-2626.
3. Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е., Мащенко А.И., Обрехт М.С. Водородоподобные и гелиеподобные системы в сверхсильном магнитном поле. *Оптика и спектроскопия*, 1983, т.54, в.1.
4. Гадияк Г.В., Лозовик Ю.Е., Мащенко А.И., Обрехт М.С. Биэкситон в сильном магнитном поле. *ФТТ*, 1983, т.25, №4.
5. Гадияк Г.В., Обрехт М.С., Яненко Н.Н. Численное моделирование атома в сверхсильном магнитном поле. В сб. "Численные методы механики сплошной среды", 1980, т.11, №3, 27-46.
6. Гадияк Г.В., Обрехт М.С. Уравнение состояния холодного вещества в сверхсильном магнитном поле, *ТВТ*, т.19, №1, 206-208.
7. Gadiyak G.V., Obrecht M.S., Yanenko N.N. Anomalous acoustic velocity at high pressure for condensed matter in a strong magnetic field. *Phys. Lett.*, 1980, v.80A, N 2-3, 191-192.
8. Гадияк Г.В., Обрехт М.С., Яненко Н.Н. Сжатый атом в сверхсильном магнитном поле в модифицированной модели Томаса-Ферми. Тезисы докладов VI Всесоюзной конференции по теории атомов и атомных спектров, Воронеж, 1980.
9. Гадияк Г.В., Обрехт М.С. Уравнение состояния коры пульсара в сверхсильном магнитном поле при конечной температуре. Тезисы I Всесоюзного симпозиума по теории сверхплотных небесных тел, Ереван, 1980.
10. Гадияк Г.В., Обрехт М.С., Яненко Н.Н. Уравнение состояния $A-e$ фазы коры пульсара с учетом действия сверхсильного магнитного поля. *Астрофизика*, 1981, т.17, №4, 765-774.

Ответственный за выпуск

Обрехт М.С.

Подписано к печати 14.04.83г.

МН 10094

Усл.п.л. 0.75; уч.изд.л. 0.75

Тираж 100

Формат бумаги 60x84/16

Заказ № 102

Бесплатно

Отпечатано на ротапринте ИТПМ СО АН СССР
630090, Новосибирск, 90, Институтская, 4/1