ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р-2871

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

В.Б. Беляев

О ВОЗМОЖНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КВАРКОМОЛЕКУЛ

1966

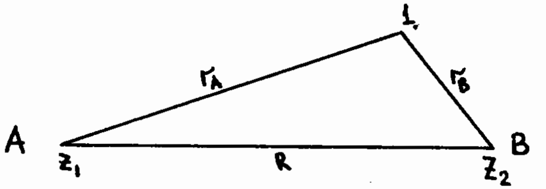
P-2871

В.Б. Беляев

О ВОЗМОЖНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КВАРКОМОЛЕКУЛ

В связи с поисками кварков, существование которых предсказывается SU_3-симметрией сильных взаимодействий, представляет интерес рассмотреть возможность образования различных молекулярных "водородоподобных" систем, содержащих один кварк и протон или два кварка. Ниже будет обсуждаться возможность образования систем 2-х типов: $(Z_1 Z_2 e^-)$ и $(Z_1 Z_2 \cdot 2e^-)$, где Z_1 и Z_2 – заряды положительных кварков или кварка и протона. Очевидно, что измерения интенсивности излучения от таких систем могут дать независимую оценку концентрации кварков[x)].

Рассмотрим сначала систему $(Z_1 Z_2 e^-)$.



Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -\frac{h^2}{2\mu}\Delta_1 - \frac{Z_1}{r_A} - \frac{Z_2}{r_B} + \frac{Z_1 Z_2}{R}.$$

Ищутся два электронных терма, соответствующие при $R \to \infty$ электрону у ядра Z_1 и ядра Z_2 в основном состоянии[xx)]. Расчет на машине проводился по алгоритму точного решения 2-центровой одноэлектронной задачи, изложенному в работе /1/.

Полученные кривые приведены на рис. 1–5. Аналитические выражения для этих термов, рассчитанные в приближении LCAO, приведены в Приложении. Термы систем $(Q^{1/3} Q^{1/3} e^-)$ и $(Q^{2/3} Q^{2/3} e^-)$ рассчитаны в приближении LCAO.

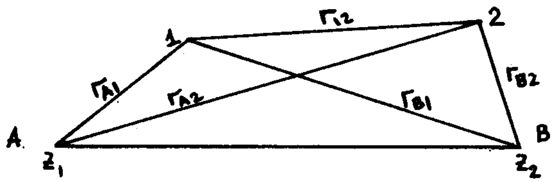
---

x) Заметим, что из-за электрической нейтральности системы $(Q^{1/3+} Q^{2/3+} e^-)$ возможно накопление таких образований в какой-либо среде (например, в атмосфере).

xx) Ясно, что при $Z_1 \neq Z_2$ между рассматриваемыми в тексте термами возможны другие термы, соответствующие при $R \to \infty$ электрону у ядра с большим Z в возбужденном состоянии. Это же замечание относится и к системам с двумя электронами.

Из вида кривых следует, что, во-первых, системы $(Q^{1/3}pe^-)$, $(Q^{2/3}pe^-)$, $(Q^{1/3}Q^{1/3}e^-)$, $(Q^{1/3}Q^{2/3}e^-)$, $(Q^{2/3}Q^{2/3}e^-)$ могут образовывать связанные состояния, во-вторых, в отличие от молекулярного иона обычного водорода оба рассматриваемых терма во всех этих системах имеют минимумы, как функции относительного расстояния между ядрами R. Вследствие этого в спектрах таких молекул будут наблюдаться линии, связанные с переходами между состояниями дискретного спектра, по которым и можно установить наличие таких систем. Поскольку глубины всех ям меньше глубины ямы в H_2^+, равной 0,6 а. ед., то спектры электронных переходов $2p \to 1s$ в рассматриваемых системах будут смягчены по сравнению со спектром соответствующего перехода в H_2^+.

При рассмотрении систем типа $(Z_1Z_2\cdot 2e^-)$, где Z_1, Z_2 – заряды протона и кварка или 2 кварков, потенциальные энергии синглетного и триплетного состояний можно представить в виде (для систем с 2 электронами рассмотрение ведется в приближении LCAO, которое из-за больших размеров кваркоатомов является достаточным для ответа на интересующий нас вопрос):



$$V_s = \epsilon_s - E_{1s} - E_{2s} = U_1(x) + \frac{I(x)}{1+S^2},$$

$$V_t = \epsilon_t - E_{1t} - E_{2t} = U_2(x) - \frac{I(x)}{1-S^2}.$$

Здесь $U_1(x)$ и $U_2(x)$ – функции, которые вычисляются в явном виде, а
$I(x) = \int \frac{\psi_A(1)\psi_B(1)\psi_A(2)\psi_B(2)}{r_{12}}\, dr_{1,2}$ – обменный интеграл, остальные обозначения приведены в Приложении.

В отличие от молекулы обычного водорода обменный интеграл $I(x)$ не выражается через известные функции, поэтому для выяснения вопроса о возможности связанных состояний в указанных выше электронных термах систем $(Q^{1/3}p\cdot 2e^-)$, $(Q^{1/3}Q^{2/3}\cdot 2e^-)$ $(Q^{2/3}p\cdot 2e)$, рассмотрим поведение $V_s(x)$ и $V_t(x)$ при $x \to \infty$. Если $V(x) < 0$ при

$x \gg 1$, то кривая имеет минимум и связанные состояния могут быть. В случае $V(x) > 0$ при $x \gg 1$ потенциал положителен при всех x и связанные состояния отсутствуют.

Для оценки $I(x)$ при $x \gg 1$ воспользуемся разложением

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{2}{R}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\ell=0}^{n} D_{n\ell}\, P_n^{\ell}(\mu_1)Q_n^{\ell}(\mu_2)P_n^{\ell}(\nu_1)P_n^{\ell}(\nu_2)\cos\ell(\phi_1-\phi_2) \qquad \mu_1<\mu_2 \,.$$

$$\mu_1 \rightleftarrows \mu_2 \quad \text{при} \quad \mu_1>\mu_2$$

Проводя интегрирование по ϕ_1, ϕ_2, ν_1, ν_2, получим

$$I = \frac{R^5}{\pi a_1^3 a_2^3}\cdot\frac{1}{16}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)B_n(x) \,,$$

где

$$B_n(x) = \int_1^{\infty} d\mu_1 e^{-\alpha x\mu_1} Q_n(\mu_1)\,[\mu_1^2\phi_n(\alpha_1 x)-\psi_n(\alpha_1 x)\,]\int_1^{\mu_1} e^{-\alpha x\mu_2}P_n(\mu_2)\cdot$$

$$[\mu_2^2\phi_n(\alpha_1 x)-\psi_n(\alpha_1 x)]\,d\mu_2 +$$

$$+\int_1^{\infty} d\mu_1 e^{-\alpha x\mu_1} P_n(\mu_1)[\mu_1^2\phi_n(\alpha_1 x)-\psi_n(\alpha_1 x)]\int_{\mu_1}^{\infty} e^{-\alpha x\mu_2}Q_n(\mu_2)[\mu_2^2\phi_n(\alpha_1 x) -$$

$$-\psi_n(\alpha_1 x)]\,d\mu_2 \,.$$

Здесь $P_n(x)$ – полином Лежандра 1-го рода,

$Q_n(x)$ – полином Лежандра 2-го рода;

$$\phi_n(\alpha\ x) = (-1)^n\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha\ x}}\, I_{n+1/2}(\alpha_1 x) \;;$$

$$\psi_n(\alpha_1 x) = (-1)^n\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha_1 x}}\,\{I_{n+1/2}(\alpha\ x)[\,1+\frac{(n+1)(n+2)}{(\alpha_1 x)^2}] - \frac{2I_{n-1/2}(\alpha_1 x)}{\alpha_1 x}\,\} \;;$$

$I_\nu(x)$ – функция Бесселя от мнимого аргумента; $\alpha = \dfrac{1+\xi}{2}$, $\alpha_1 = \dfrac{1-\xi}{2}$, $\xi = \dfrac{a_1}{a_2}$;
при $x \gg 1$ $I_{n\pm 1/2}(x) \approx \dfrac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}$.

Пользуясь разложением

$$\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\,Q_n(\mu_1)\,P_n(\mu_2) = \frac{1}{\mu_1-\mu_2} \,,$$

для суммы $\Sigma(2n+1)B_n$ находим

$$J(x)=\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)B_n(x)=\frac{2e^{-\xi x}}{[\frac{1-\xi}{2}]^4[\frac{1+\xi}{2}]x^5}\{\ln ½+C_1+E_i[-x(1+\xi)]-E_i[-\frac{x}{2}(1+\xi)]\},$$

$$C_1=\int_0^1\frac{e^{-y}-1}{y}dy\quad,$$

откуда для обменного интеграла в единицах e^2/a_1 получим оценку при

$$I(x)\approx\frac{4\xi^3e^{-2\xi x}}{\pi(1-\xi)^4(1+\xi)}\cdot C\ ,\quad C-\text{константа}\ ,$$

т.е. для системы $Q^{1/3}p2e^-$, $\xi=3$ и $Q^{2/3}p2e^-$, $\xi=\frac{3}{2}$ обменный интеграл спадает при больших x, как e^{-6x} и e^{-3x} соответственно.

Рассмотрим теперь поведение потенциалов $U_1(x)$ и $U_2(x)$ при больших x. Для $U_1(x)$ и $U_2(x)$ имеем:

$$U_1(x)=\frac{Z_1Z_2}{x}-\frac{1}{1-S^2}[Z_1(SF_3(x)+F_1(x))+Z_2(SF_4(x)+F_2(x))-F_2(x)+F_5(x)+F_6(x)]\ ;$$

$$U_2(x)=\frac{Z_1Z_2}{x}+\frac{1}{1+S^2}[Z_1(SF_3(x)-F_1(x))+Z_2(SF_4(x)-F_2(x))+F_2(x)-F_5(x)-F_6(x)]\ .$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$F_1(x)=\frac{1}{x}-(\xi+\frac{1}{x})e^{-2\xi x}\ ;\ F_2(x)=\frac{1}{x}-(1+\frac{1}{x})e^{-2x}\ ;\ S=\frac{2}{1-\xi^2}[F_3(x)-\xi F_4(x)]\ ;$$

$$F_3(x)=\frac{4\xi^{3/2}}{(1-\xi^2)^2}[\frac{2\xi e^{-x}}{x}+e^{-\xi x}(1-\xi^2-\frac{2\xi}{x})]\ ;\ F_4(x)=\frac{4\xi^{3/2}}{(1-\xi^2)^2}[\frac{2e^{-\xi x}}{x}-e^{-x}(1-\xi^2+\frac{2}{x})]\ ;$$

$$F_5(x)=\frac{1}{(1-\xi^2)^2}[\frac{e^{-2\xi x}}{x}-e^{-2x}(1-\xi^2+\frac{1}{x})]\ ;\ F_6(x)=\frac{\xi}{2(1-\xi^2)^2}[e^{-2\xi x}(1-\xi^2-\frac{2\xi}{x})+$$

$$+\xi e^{-2x}(1-\xi^2+\frac{2}{x})]\ .$$

Отсюда при $x\gg1$ для $U_1(x)$ и $U_2(x)$ получаем:

$$\left.\begin{aligned}U_1(x)&=\frac{e^{-2x}}{(1-\xi^2)^2}[\frac{64\xi^4+(1-\xi^2)(2-3\xi^2)}{2(1-\xi^2)}]<0\\ U_2(x)&=\frac{e^{-2x}}{(1-\xi^2)^3}[1-\frac{5}{2}\xi^2+(\frac{3}{2}-32)\xi^4]>0\end{aligned}\right\}\ \text{для}\quad \xi=3\ \text{и}\ \xi=3/2\ .$$

Сравнивая асимптотические выражения $I(x), U_1(x)$ и $U_2(x)$, видим, что для систем $(Q^{1/3}p\cdot 2e^-)$ и $(Q^{2/3}\ p\cdot 2e^-)$ обменным интегралом при $x \gg 1$ можно пренебречь, т.е. для этих систем связанным состоянием является, как и в обычной молекуле водорода, синглетное состояние. Для систем типа $(Q^{Z_1}Q^{Z_2}\cdot 2e^-)$, где $Z_1, Z_2 = \frac{1}{3}$ и $\frac{2}{3}$, оба терма, и синглетный и триплетный, оказываются положительными при всех x , т.е. в этих состояниях электронного движения таких систем не существует.

В заключение выражаю благодарность проф. Нгуену Ван Хьеу за предложение темы и интерес к работе, Л. Пономареву за проведение некоторых расчетов на машине и Л.М. Беляевой за помощь в работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Потенциал одноэлектронной задачи для $Z_1 \neq Z_2$ в ед. e^2/a_1 $(x = \frac{R}{a_1}, a_1 a_2$ – боровские радиусы у ядер Z_1 и Z_2 соответственно):

$$V_{1,2}(x) = \mp \frac{Z_2^2 - Z_1^2}{4Z} + \frac{Z_1 Z_2}{x} - \frac{1}{2(1-S^2)} \{ Z_1[F_1(x) - SF_3(x)] + Z_2[F_2(x) - SF_4(x)] \} \pm$$

$$\pm \frac{1}{2(1-S^2)} \{ [S(Z_1F_1(x) + Z_2F_2(x)) - Z_1F_3(x) - Z_2F_4(x)]^2 + (1-S^2)^2 [\frac{Z_2^2 - Z_1^2}{2Z_1} + Z_1F_1(x) - Z_2F_2(x)]^2 \}^{1/2} ;$$

для $Z_1 = Z_2 = Z$

$$V_{1,2}(x) = \frac{Z^2}{x} - \frac{Z}{1 \pm S} [\frac{1}{x} - (1 + \frac{1}{x})e^{-2x} \pm (1+x)e^{-x}] ;$$

$$S = e^{-x}(1 + x + \frac{x^2}{3}) .$$

При рассмотрении систем с двумя электронами использовались следующие обозначения:

$$\epsilon_s = \int \phi_s H \phi_s d\tau \quad , \quad \epsilon_t = \int \phi_t H \phi_t d\tau \ .$$

Здесь

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_1 + \Delta_2) - e^2 (\frac{Z_1}{r_{A_1}} + \frac{Z_1}{r_{A_2}} + \frac{Z_2}{r_{B_1}} + \frac{Z_2}{r_{B_2}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{Z_1 Z_2}{R}) ;$$

$$\phi_s = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} [\psi_A(1) \psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1)] ;$$

$$\phi_t = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}} [\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1) ;$$

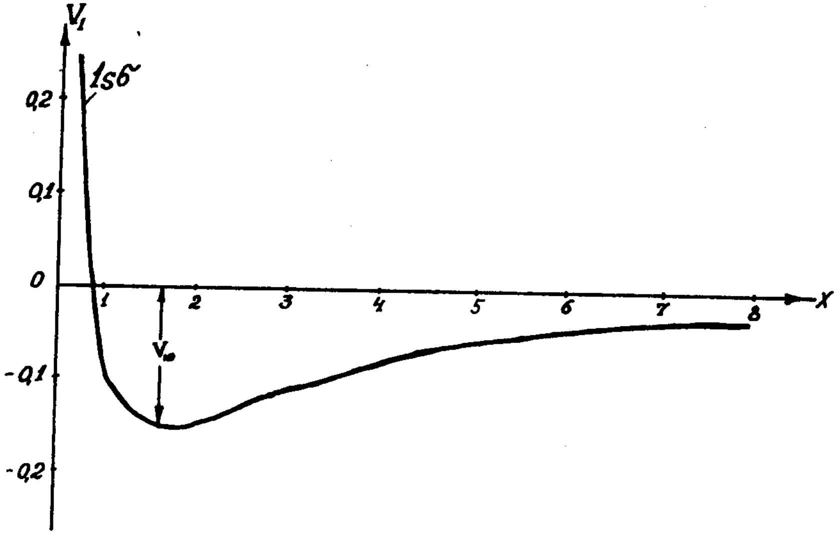
причем

$$(-\frac{h^2}{2\mu} \Delta_1 - \frac{e^2 Z_1}{r_{A_1}}) \psi_{A_1} = E_{1s}\psi_{A_1} .$$

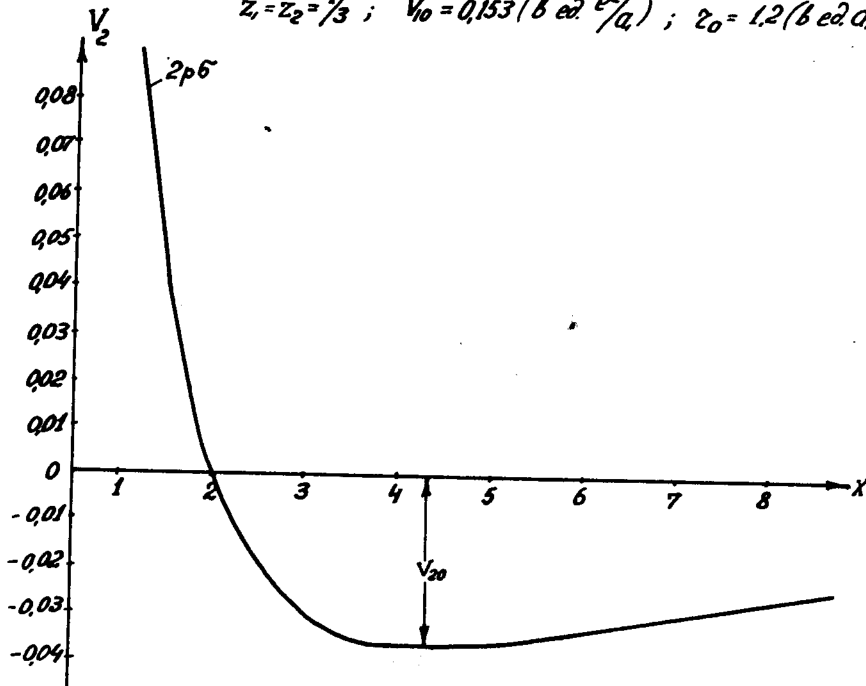
Литература

1. Л.И. Пономарев, Т. Пузынина. Препринт ОИЯИ, Р-2798, Дубна, 1966.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 августа 1966 г.

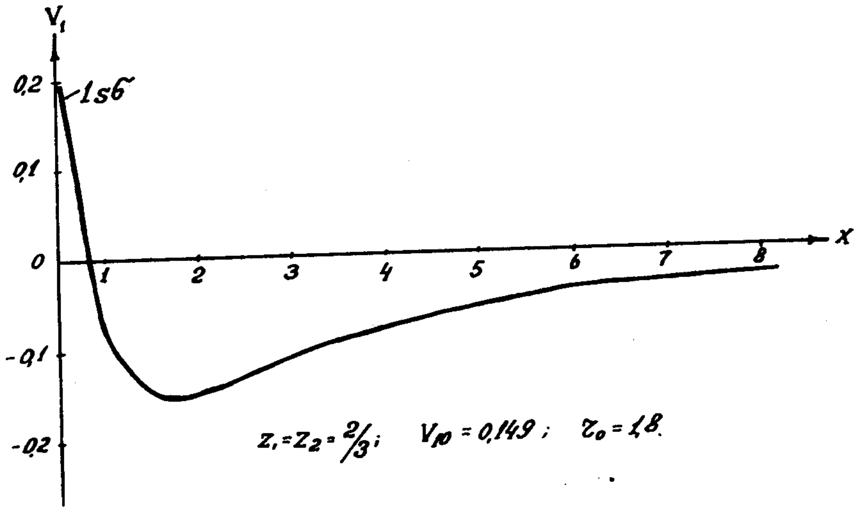


$Z_1 = Z_2 = 1/3$; $V_{10} = 0{,}153$ (в ед. e^2/a_1) ; $r_0 = 1{,}2$ (в ед. a_1)

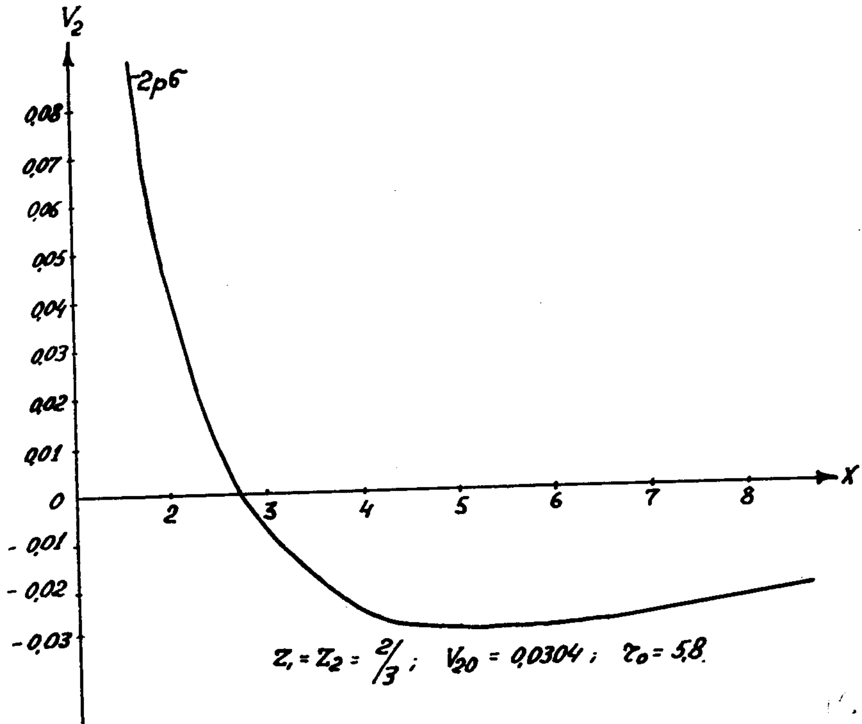


$Z_1 = Z_2 = 1/3$; $V_{20} = 0{,}0374$ (в ед. e^2/a_1); $r_0 = 4{,}3$ (в ед. a_1);
$a_1 = a_2 = a_H/Z_1$ Отсчет от энергии изолированных атомов

Рис. 1.

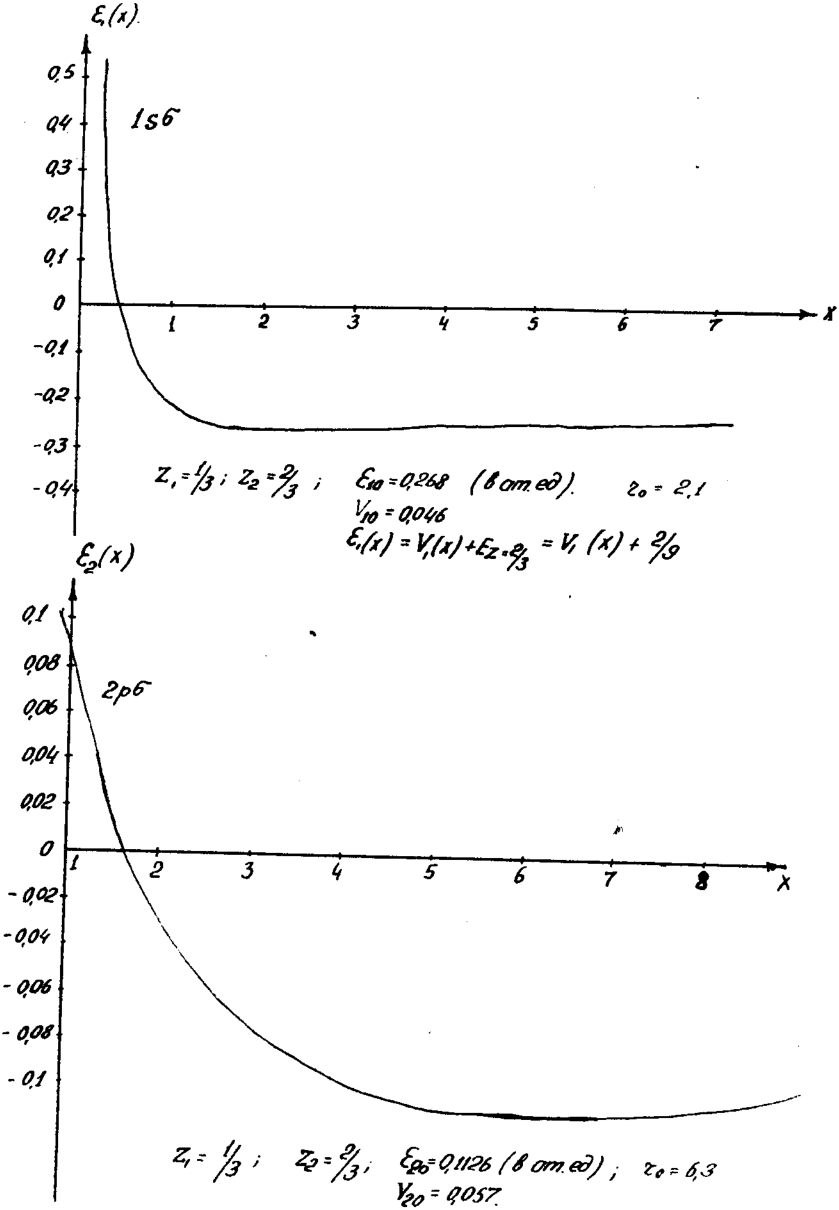


V_1
0,2
0,1
0
-0,1
-0,2
1sб
X
1
2
3
4
5
6
7
8
$z_1 = z_2 = 2/3$; $V_{10} = 0{,}149$; $\tau_0 = 1{,}8$



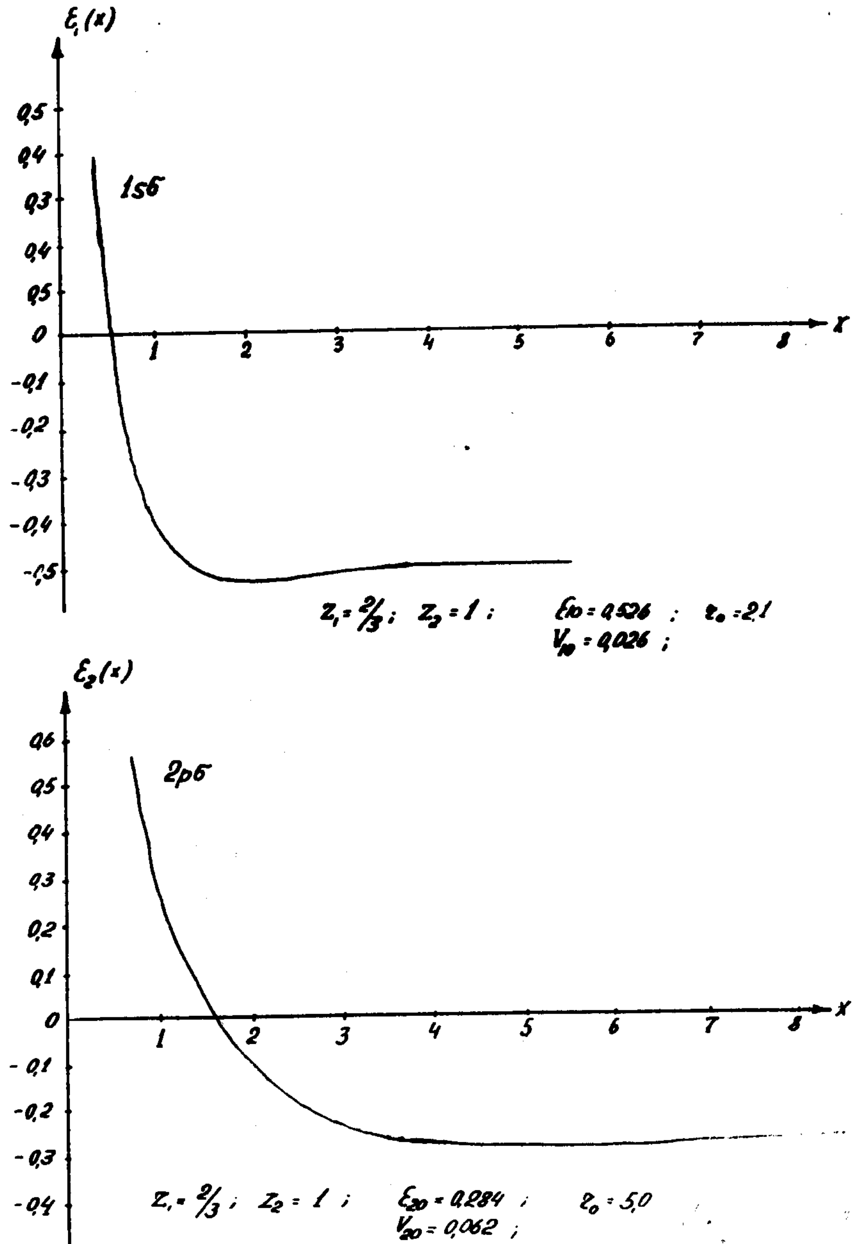
V_2
0,08
0,07
0,06
0,05
0,04
0,03
0,02
0,01
0
-0,01
-0,02
-0,03
2pб
X
2
3
4
5
6
7
8
$z_1 = z_2 = 2/3$; $V_{20} = 0{,}0304$; $\tau_0 = 5{,}8$

Рис. 2.



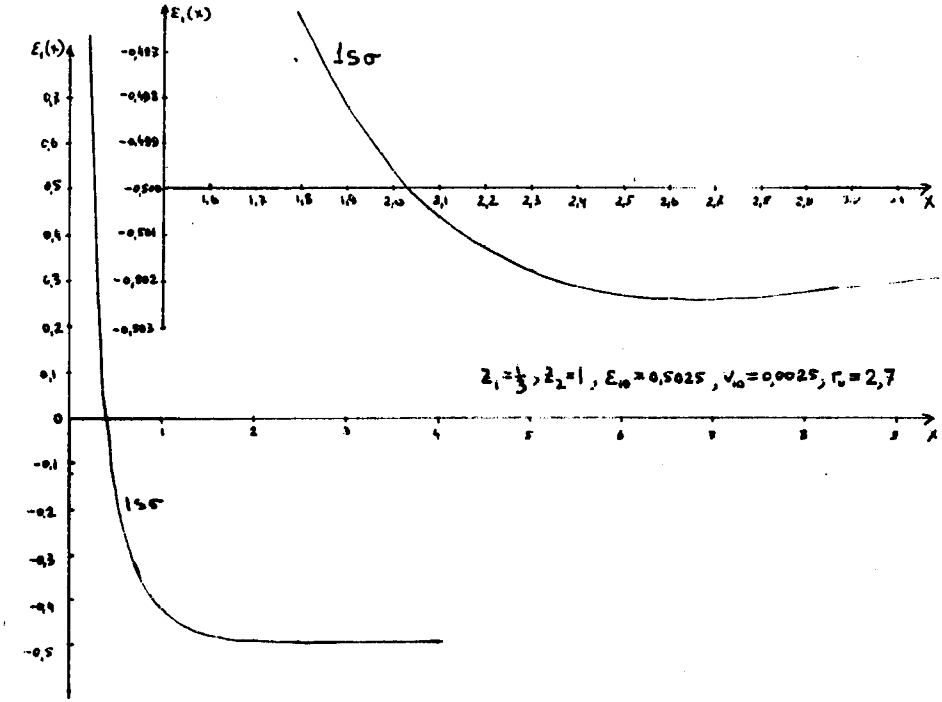
отсчет от нуля

Рис. 3.

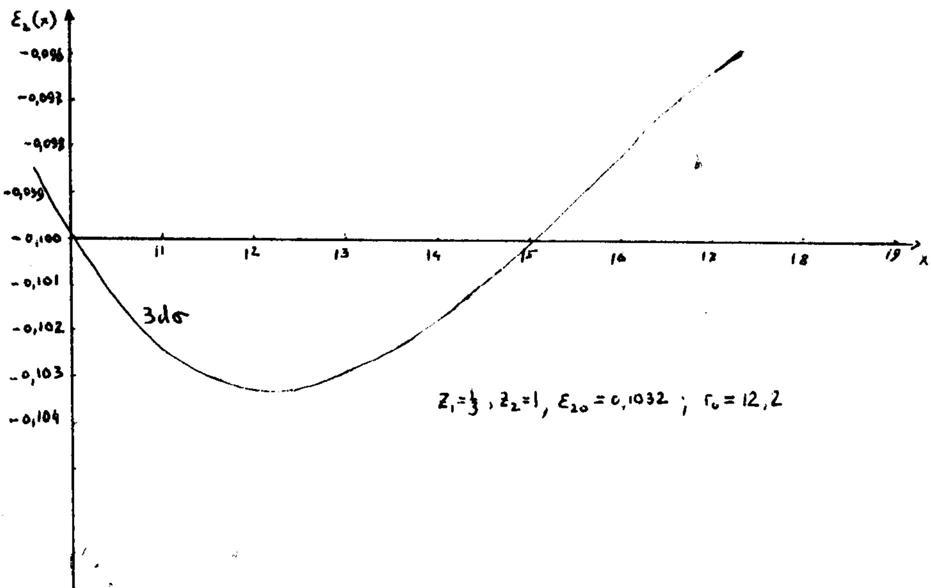


$\mathcal{E}_1(x)$
1s6
0,5
0,4
0,3
0,4
0,5
0
-0,1
-0,2
-0,3
-0,4
-0,5
1 2 3 4 5 6 7 8 x
$Z_1 = 2/3$; $Z_2 = 1$; $\mathcal{E}_{10} = 0{,}526$; $r_0 = 2{,}1$
$V_{10} = 0{,}026$;
$\mathcal{E}_2(x)$
2p6
0,6
0,5
0,4
0,3
0,2
0,1
0
-0,1
-0,2
-0,3
-0,4
1 2 3 4 5 6 7 8 x
$Z_1 = 2/3$; $Z_2 = 1$; $\mathcal{E}_{20} = 0{,}284$; $r_0 = 5{,}0$
$V_{20} = 0{,}062$;

Рис. 4.



1sσ
1sσ
Z₁ = 1/3 , Z₂ = 1 , E₁₀ = 0,5025 , V₁₀ = 0,0025 , r₀ = 2,7
X



3dσ
Z₁ = 1/3 , Z₂ = 1 , E₂₀ = 0,1032 ; r₀ = 12,2
x

Рис. 5.