

Дважды тяжелые барионы в приближении Борна-Оппенгеймера

Худова Анна

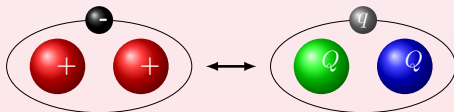
ЯрГУ им. П. Г. Демидова
Кафедра теоретической физики

18 февраля 2025 г.

Результаты получены совместно с А.Я. Пархоменко

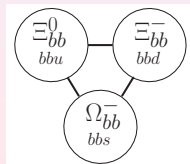
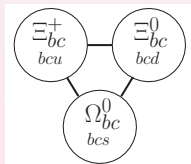
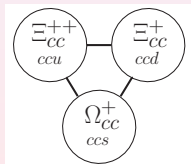
- Введение
- Ион молекулы водорода
- Дважды тяжелые барионы
- Заключение

Динамически дважды тяжелый барион сходен с положительнозаряженным ионом молекулы водорода



ион молекулы водорода ↔ дважды тяжелый барион

- Барions — бесцветные состояния из трех кварков
 - Легкие барions (легкие u -, d - и s -кварки)
 - Тяжелые барions (один из кварков — c - или b -кварк)
 - Дважды тяжелые барions (ДТБ), в составе которых два тяжелых кварка, один легкий
 - Трижды тяжелые барions (все кварки тяжелые)
- Дважды тяжелые барions объединяются в триплеты согласно $SU(3)_F$ -группе ароматов кварков

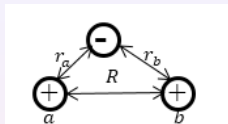


- Дважды тяжелые барions содержат тяжелый дикварк — антитриплетное по цвету состояние из двух тяжелых кварков Q_1 и Q_2

Квантовое описание иона молекулы водорода

- Уравнение Шредингера

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_{\text{ion}} \Psi(\vec{r}, \vec{R})$$



- Оператор Гамильтона иона

$$\hat{H} = -\frac{1}{M} \Delta_{\vec{R}} + \frac{e^2}{R} - \frac{1}{2m} \left(1 + \frac{m}{2M}\right) \Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b}$$

- M и m — массы протона и электрона ($M = 1836 m$)
- \vec{r} — расстояние от электрона до центра масс двух протонов
- Решение уравнения можно искать в виде

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi(\vec{r}, \vec{R}) \chi(\vec{R})$$

- $\psi(\vec{r}, \vec{R})$ — волновая функция электрона
- $\chi(\vec{R})$ — волновая функция системы из двух протонов

Учет динамики ядер в ионе водорода

- Уравнение Шредингера для нахождения $\chi(\vec{R})$

$$-\frac{1}{M} \frac{\Delta_{\vec{R}} \chi(\vec{R})}{\chi(\vec{R})} + \frac{e^2}{R} + \mathcal{E}(R) - \frac{1}{M} \frac{\Delta_{\vec{R}} \psi(\vec{r}, \vec{R})}{\psi(\vec{r}, \vec{R})} - \frac{2}{M} \frac{\nabla_{\vec{R}} \chi(\vec{R}) \nabla_{\vec{R}} \psi(\vec{r}, \vec{R})}{\psi(\vec{r}, \vec{R}) \chi(\vec{R})} = E_{\text{ion}}$$

- $\mathcal{E}(R)$ — энергия связи электрона в ионе

$$-\left[\frac{1}{2m} \left(1 + \frac{m}{2M} \right) \Delta_{\vec{r}} + \frac{e^2}{r_a} + \frac{e^2}{r_b} \right] \psi(\vec{r}, \vec{R}) = \mathcal{E}(R) \psi(\vec{r}, \vec{R})$$

- При $M \rightarrow \infty$ получим систему из двух неподвижных протонов, в электрическом поле которых движется электрон (приближение Борна-Оппенгеймера)

$$E_{\text{ion}}(R) = \frac{e^2}{R} + \mathcal{E}(R)$$

- Ион будет существовать, если $E_{\text{ion}}(R_{\text{min}}) = E_{\text{min}}$
- Динамика протонов определяется уравнением Шредингера

$$-\frac{1}{M} \Delta_{\vec{R}} \chi^{(0)}(R) + \left[\frac{e^2}{R} + \mathcal{E}(R) \right] \chi^{(0)}(R) = E_{\text{ion}}^{(0)}(R)$$

- Записано в нулевом приближении в разложении по $1/M$
- Решать это уравнение можно только численно

Вариационный метод Ритца

- Решается уравнение Шрёдингера для электрона по теории возмущений с использованием вариационного метода Ритца
- Считаем, что электрон находится в основном состоянии обоих атомов водорода
- Спиновая часть волновой функции электрона факторизуется и подразумевается неявно
- Волновые функции

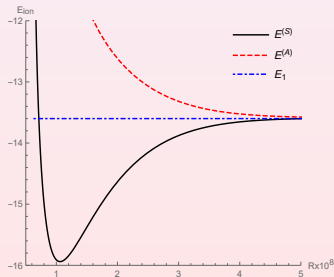
$$\psi_{100}(r_a) = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\gamma r_a/a}, \quad \psi_{100}(r_b) = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\gamma r_b/a}$$

- $a \simeq 0.53 \times 10^{-8}$ см — радиус первой боровской орбиты
- γ — вариационный параметр Ритца
- Используя эти функции, вычисляется среднее значение оператора Гамильтона
- Волновая функция иона в нулевом приближении

$$\psi(r_a, r_b) = \alpha \psi_{100}(r_a) + \beta \psi_{100}(r_b)$$

Энергия взаимодействия ядер в ионе водорода

- Из симметрии H следует: $\alpha = \beta$ — симметричная $\psi^{(S)}(r_a, r_b)$ или $\alpha = -\beta$ — антисимметричная $\psi^{(A)}(r_a, r_b)$
- Представлены зависимости энергии иона $E^{(S)}$ и $E^{(A)}$ от расстояния R между ядрами
- Связанное состояние наблюдается только у иона с симметричной волновой функцией
- Энергия связи этого состояния $E_{\min}^{(S)} = -15.9$ эВ и расстояние между ядрами $R_{\text{ион}} = 1.06 \times 10^{-8}$ см



Квантовая механика дважды тяжелого бариона

- Оператор Гамильтона для дважды тяжелого бариона

$$\hat{H}_{\text{ДНВ}} = -\frac{\Delta}{2m_q} + \alpha_s \left[\frac{\lambda_A}{r_A} + \frac{\lambda_B}{r_B} + \frac{\lambda_{AB}}{R} \right] + \frac{3k}{4} (|\lambda_A| r_A + |\lambda_B| r_B + |\lambda_{AB}| R)$$

- m_q — масса легкого кварка
- Индексами A и B обозначены тяжелые кварки
- Операторы потенциальной энергии взаимодействия между парами кварков — **корнеллские потенциалы**
- $\alpha_s(\mu)$ — постоянная сильных взаимодействий, зависящая от энергетического масштаба μ
- На масштабе массы дважды тяжелого дикварка:
 $\alpha_s(2M_c) = 0.30$, $\alpha_s(M_c + M_b) = 0.24$, $\alpha_s(2M_b) = 0.21$
- $k = 0.15 \text{ ГэВ}^2$ — коэффициент натяжения “глюонной струны”
[T. Kawanai & S. Sasaki, PRD 85 (2012) 091503]
- λ — коэффициент, определяемый цветовой группой $SU(3)_c$
- Используется система единиц, в которой $\hbar = c = 1$

Попарное взаимодействие кварков в барионе

- По цвету, пара кварков в дикварке образует либо антитриплет, либо секстет ($3 \times 3 = \bar{3} + 6$)
- При взаимодействии с третьим кварком в барионе только антитриплет позволяет получить синглетное (бесцветное) состояние, поскольку ($\bar{3} \times 3 = 1 + 8$) и ($6 \times 3 = 8 + 10$)
- Как следствие, любое попарное взаимодействие кварков в барионе должно быть антитриплетным по цвету
- Коэффициенты, определяемые цветовой группой

$$\lambda_A = \lambda_B = \lambda_{AB} \equiv -\lambda = -\frac{2}{3}$$

Волновая функция дважды тяжелого бариона

- Тяжелые кварки покоятся (прибл. Борна-Оппенгеймера)
- Волновые функции тяжелых дикварков (ТД) в нулевом приближении определяются кулоновским потенциалом и аналогичны волновым функциям атома водорода
- Легкий кварк в этих ТД находится в основном состоянии

$$\psi_{100}(r_A) = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi a_D^3}} e^{-\gamma r_A/a_D}, \quad \psi_{100}(r_B) = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi a_D^3}} e^{-\gamma r_B/a_D}$$

- Боровский радиус $a \simeq 0.53 \times 10^{-8}$ см \Rightarrow радиус ТД

$$a_D^{-1} = 2\alpha_s m_q/3, \quad a_D \simeq 3 \text{ Фм} \quad (m_q = 300 \text{ МэВ})$$

- Безразмерное расстояние между тяжелыми кварками

$$\rho_R = \gamma R/a_D$$

- Волн. функция ДТБ — суперпозиция $\psi_{100}(r_A)$ и $\psi_{100}(r_B)$

- Общее выражение для энергии иона $E_{\text{ion}} = E^{(S)}$

$$E_{\text{ion}} = f(\rho_R) \gamma^2 + g(\rho_R) \gamma$$

- Аналогичное выражение у дважды тяжелого бариона

$$E_{\text{ДТВ}} = F(\rho_R) \gamma^2 + G(\rho_R) \gamma + H(\rho_R) \frac{1}{\gamma}$$

- Появляется дополнительное слагаемое $\sim 1/\gamma$
- Энергия связанного состояния — минимум по γ и ρ_R

$$\frac{\partial E(\rho_R, \gamma)}{\partial \gamma} = 0, \quad \frac{\partial E(\rho_R, \gamma)}{\partial \rho_R} = 0$$

Общие выражения для энергии в ионе H_2^+ и ДТБ

- Из условия локального минимума получаем выражение для нахождения вариационного параметра Ритца

$$\frac{dE_{\text{ДНВ}}}{d\gamma} = 2\gamma F(\rho_R) + G(\rho_R) - \frac{1}{\gamma^2} H(\rho_R) = 0$$

- Вместо линейного уравнения на параметр γ для иона H_2^+ , получилось кубическое уравнение

$$2\gamma^3 F(\rho_R) + \gamma^2 G(\rho_R) - H(\rho_R) = 0$$

- Данное уравнение имеет три корня, причем один вещественный и два комплексных
- Поскольку энергия связи вещественная, то физический смысл имеет только вещественный корень уравнения

$$\gamma_1 = \frac{G}{6F} \frac{Y^3 + 1}{Y(Y + 1)}$$

- $Y(\rho_R)$ — вспомогательная функция из F , G и H

Дважды очарованный барион Ξ_{cc}^{++}

- Дважды очарованный барион Ξ_{cc}^{++} состоит из двух тяжелых c -кварков и одного легкого u -кварка
- Данный барион был зарегистрирован на детекторе LHCb (Large Hadron Collider beauty experiment) в CERN
- На эксперименте была определена его масса [PDG, 2024]

$$M(\Xi_{cc}^{++})_{\text{Exp}} = (3621.6 \pm 0.4) \text{ МэВ}$$

- Масса Ξ_{cc}^{++} -бариона — сумма масс кварков и энергии связи

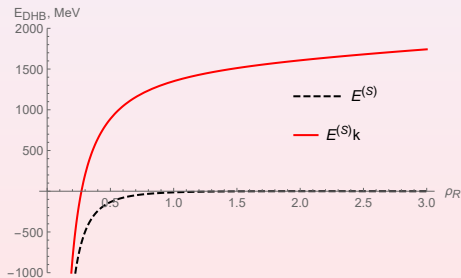
$$M(\Xi_{cc}^{++})_{\text{Th}} = 2M_c + m_u + E_{\text{ДНВ}} = 3782 \text{ МэВ} + E_{\text{ДНВ}}$$

- Значения параметров λ , α_s и k для Ξ_{cc}^{++}

$$\lambda = \frac{2}{3}, \quad \alpha_s(2M_c) = 0.3, \quad k = 1.5 \times 10^5 \text{ МэВ}^2$$

Функция $E^{(S)}(\rho_R)$ для дважды очарованных барионов

- Подставив функции $F^{(S)}(\rho_R)$, $G^{(S)}(\rho_R)$ и $H^{(S)}(\rho_R)$ в выражение для энергии $E^{(S)}$, получим зависимость энергии от ρ_R
- Минимум у энергии $E^{(S)}$ отсутствует
- Статический дикварк не существует
- Надо учитывать динамику тяжелых кварков



- Методы, примененные для расчета положительнозаряженного иона молекулы водорода, переносятся на дважды тяжелые барионы
- Вычислены добавочные члены в энергию ДТБ, обусловленные линейной частью потенциала взаимодействия между кварками
- $E_{\text{ДНВ}}$ как функция от ρ_R не имеет минимума
- Связанное состояние с двумя неподвижными тяжелыми кварками не реализуется; требуется учет динамики тяжелых кварков
- В дополнение, надо учесть спин-спиновое взаимодействие кварков в барионе
- Дважды очарованные барионы в приближении Борна-Оппенгеймера были рассмотрены ранее [L. Maiani, A. Polosa & V. Riquer, PRD 100 (2019) 074002], однако примененная там методика расчетов отличается от представленной в докладе

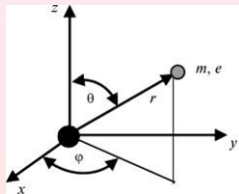
Backup Slides

Атом водорода

- Решим сначала квантовомеханическую задачу об электроном, находящемся в кулоновском поле ядра с $Z = 1$
- Уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{r} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

- m — масса электрона
- \hbar — постоянная Планка
- e — элементарный заряд (заряд протона)
- E — энергия электрона
- $\psi(\vec{r})$ — волновая функция
- Используется гауссова система единиц



Уравнение Шрёдингера в сферических координатах

- Оператор потенциальной энергии зависит только от модуля радиус-вектора r
- Разделение переменных возможно при переходе в сферическую систему координат

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \varphi)$$

- Волновая функция имеет вид:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

- Квантовое состояние определяется набором из трех квантовых чисел n, ℓ, m

- Опыты указывают на то, что у электрона имеется собственный механический момент — спин $s = 1/2$
- В нерелятивистском пределе координатная и спиновая части волновой функции электрона факторизуются

$$\psi_{nlm\sigma}(r, \theta, \varphi) = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \chi_{\sigma}$$

- χ_{σ} — спинор

$$\chi_{+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- $\sigma = \pm 1$ — удвоенное значение проекции спина на ось Oz

Вариационный метод Ритца

- Из симметрии оператора \hat{H}_{ion} следуют два решения: симметричное ($\alpha = \beta$) и антисимметричное ($\alpha = -\beta$)
- Каждое дает свою энергию иона

$$E^{(S)} = \frac{E_{aa} + E_{ab}}{1 + S}, \quad E^{(A)} = \frac{E_{aa} - E_{ab}}{1 - S}$$

- Интеграл перекрытия

$$S = \int \psi_{100}^*(r_a) \psi_{100}(r_b) dV$$

- Средняя энергия

$$E_{aa} = \int \psi_{100}^*(r_a) \hat{H}_{\text{ion}} \psi_{100}(r_a) dV$$

- Обменная энергия

$$E_{ab} = \int \psi_{100}^*(r_a) \hat{H}_{\text{ion}} \psi_{100}(r_b) dV$$

- Явный вид интеграла перекрытия, а также средней и обменной энергий

$$S = e^{-\rho_R} \left[\frac{1}{3} \rho_R^2 + \rho_R + 1 \right]$$

$$E_{aa} = \frac{\gamma e^2}{a} \left[\frac{\gamma}{2} - 1 + \frac{2 - (1 + \rho_R) e^{-2\rho_R}}{\rho_R} \right]$$

$$E_{ab} = \frac{\gamma e^2}{6a\rho_R} \left[\gamma\rho_R (3 + 3\rho_R - \rho_R^2) - 2 (3 - 3\rho_R - 5\rho_R^2) \right] e^{-\rho_R}$$

- Введено безразмерное расстояние между ядрами иона

$$\rho_R = \gamma R/a$$

- Из симметрии оператора $\hat{H}_{\text{ион}}$ следуют два решения: симметричное ($\alpha = \beta$) и антисимметричное ($\alpha = -\beta$)
- Выражение для энергии иона как функции расстояния между ядрами для симметричной волновой функции

$$E(S) = -\frac{e^2}{2a} \frac{[3\rho_R - (3 - 3\rho_R - 5\rho_R^2) e^{-\rho_R} - 3(1 + \rho_R) e^{-2\rho_R}]^2}{\rho_R^2 \left\{ 9[1 + (1 + \rho_R) e^{-\rho_R}]^2 - \rho_R^4 e^{-2\rho_R} \right\}}$$

- Аналогичное выражение для антисимметричной волновой функции иона

$$E(A) = -\frac{e^2}{2a} \frac{[3\rho_R + (3 - 3\rho_R - 5\rho_R^2) e^{-\rho_R} - 3(1 + \rho_R) e^{-2\rho_R}]^2}{\rho_R^2 \left\{ 9[1 - (1 + \rho_R) e^{-\rho_R}]^2 - \rho_R^4 e^{-2\rho_R} \right\}}$$

Цветовые коэффициенты в корнеллском потенциале

- Коэффициент λ неприводимого представления \mathcal{R} цветовой группы $SU(3)_C$, возникающего в результате прямого произведения неприводимых представлений \mathcal{R}_1 и \mathcal{R}_2

$$\lambda(\mathcal{R}) = \frac{1}{2} [C_2(\mathcal{R}) - C_2(\mathcal{R}_1) - C_2(\mathcal{R}_2)]$$

- $C_2(\mathcal{R})$ — квадратичный оператор Казимира представления \mathcal{R}
- Кварк q^α — цветовой триплет ($\mathcal{R} = 3$); $C_2(3) = 4/3$
- Дикварк $q^\alpha q^\beta$ — связанное состояние из двух кварков
- Имеет два цветовых состояния: $3 \times 3 = \bar{3} + 6$
- Антитриплет ($\mathcal{R} = \bar{3}$): $C_2(\bar{3}) = 4/3 \Rightarrow \lambda(\bar{3}) = -2/3$
- Секстет ($\mathcal{R} = 6$): $C_2(6) = 10/3 \Rightarrow \lambda(6) = 1/3$
- Дикварк — антитриплетное по цвету состояние, поскольку при $\lambda < 0$ кварки притягиваются друг к другу, образуя дикварк, а при $\lambda > 0$ отталкиваются

Интегралы, определяющие энергию связи в ДТБ

- Интеграл перекрытия S не изменяется
- У средней энергии появляются добавки

$$E_{AA} = E_{aa} - \frac{2\alpha_S \lambda}{R} + \Delta E_{AA}^{(A)} + \Delta E_{AA}^{(B)} + \frac{3}{4} k \lambda R$$

$$\Delta E_{AA}^{(A,B)} = \frac{3}{4} k \lambda \int \psi_{100}^*(r_A) r_{A,B} \psi_{100}(r_A) dV$$

- Аналогично и у обменной энергии

$$E_{AB} = E_{ab} - \frac{2\alpha_S \lambda}{R} + \Delta E_{AB}^{(A)} + \Delta E_{AB}^{(B)} + \frac{3}{4} k \lambda R S$$

$$\Delta E_{AB}^{(A)} = \Delta E_{AB}^{(B)} = \frac{3}{4} k \lambda \int \psi_{100}^*(r_A) r_A \psi_{100}(r_B) dV$$

- Добавочные члены, возникающие при переходе к дважды тяжелым барионам, вычисляются аналогично интегралам для иона молекулы водорода

- $\Delta E_{AA}^{(A)}$ не зависит от расстояния между кварками

$$\Delta E_{AA}^{(A)} = \frac{9\lambda}{8\gamma} ka_D$$

- В $\Delta E_{AA}^{(B)}$ такая зависимость возникает

$$\Delta E_{AA}^{(B)} = \frac{3\lambda}{16\gamma} ka_D \frac{1}{\rho_R} [1 + 2\rho_R^2 - 2(2 + \rho_R) e^{-2\rho_R}]$$

- Добавка к обменной энергии ищется посредством перехода к вытянутым эллипсоидальным координатам

$$\Delta E_{AB}^{(A)} = \frac{\lambda}{2\gamma} ka_D (9 + 9\rho_R + 4\rho_R^2 + \rho_R^3) e^{-\rho_R}$$

Явный вид функций $F(\rho_R)$, $G(\rho_R)$ и $H(\rho_R)$

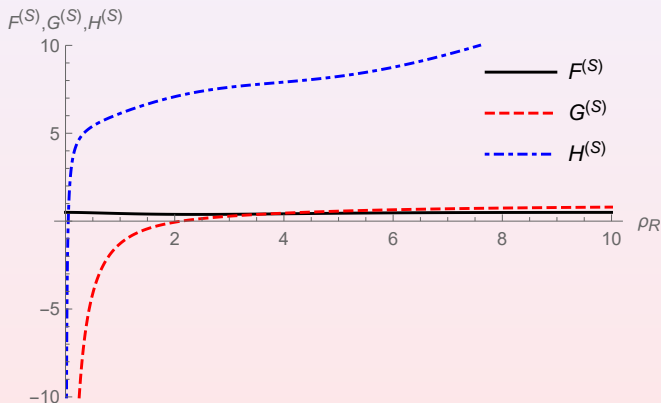
$$F^{(S)}(\rho_R) = \frac{|\lambda_A|\alpha_S}{2a_D} \left[\frac{3 + (3 + 3\rho_R - \rho_R^2) e^{-\rho_R}}{3 + (3 + 3\rho_R + \rho_R^2) e^{-\rho_R}} \right]$$

$$G^{(S)}(\rho_R) = \frac{|\lambda_A|\alpha_S}{a_D} \left[\frac{3\rho_R - (3 - 3\rho_R - 5\rho_R^2) e^{-\rho_R} - 3(1 + \rho_R) e^{-2\rho_R}}{-\rho_R [3 + (3 + 3\rho_R + \rho_R^2) e^{-\rho_R}]} \right]$$

$$H^{(S)}(\rho_R) = k|\lambda_A|a_D \left[\frac{e^{-\rho_R}(-12 - 6\rho_R + 3e^{2\rho_R}(1 + 6\rho_R + 6\rho_R^2))}{4\rho_R(3 + 3e^{\rho_R} + 3\rho_R + \rho_R^2)} + \frac{e^{-\rho_R}(4e^{\rho_R}\rho_R(36 + 39\rho_R + 19\rho_R^2 + 5\rho_R^3))}{4\rho_R(3 + 3e^{\rho_R} + 3\rho_R + \rho_R^2)} \right]$$

Графики функций $F^{(S)}(\rho_R)$, $G^{(S)}(\rho_R)$ и $H^{(S)}(\rho_R)$

- Функция $F^{(S)}(\rho_R)$ положительная, а $H^{(S)}(\rho_R)$ и $G^{(S)}(\rho_R)$ имеют как отрицательные, так и положительные значения



Решения кубического уравнения на параметр γ

- Уравнение на параметр γ имеет три решения

$$\gamma_1 = \frac{G}{6F} \left[Y - 1 + \frac{1}{Y} \right] = \frac{G}{6F} \frac{Y^3 + 1}{Y(Y + 1)}$$

$$\gamma_2 = -\frac{G(1 + Y)}{12FY} \left[1 + Y + i\sqrt{3}(1 - Y) \right]$$

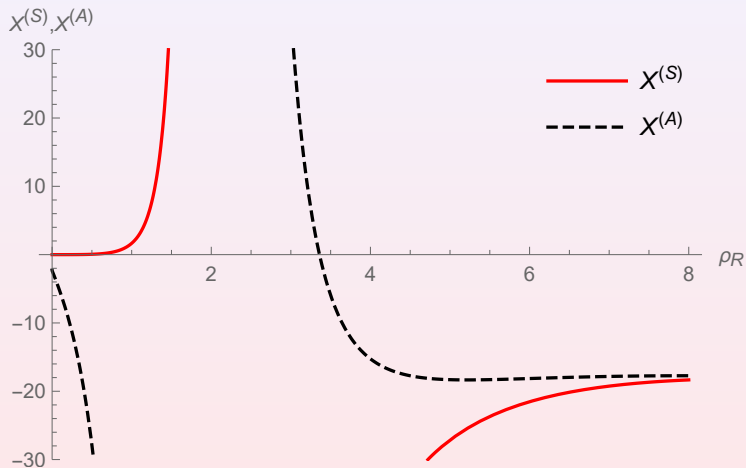
$$\gamma_3 = -\frac{G(1 + Y)}{12FY} \left[1 + Y - i\sqrt{3}(1 - Y) \right]$$

- Для удобства были введены следующие функции

$$X(\rho_R) = -\frac{3F^2(\rho_R) H(\rho_R)}{G^3(\rho_R)}$$

$$Y^3(\rho_R) = 18X(\rho_R) - 1 + 6\sqrt{9X^2(\rho_R) - X(\rho_R)}$$

Графики функций $\chi^{(S)}(\rho_R)$ и $\chi^{(A)}(\rho_R)$



- В 1927 г. датский физик О. Бурро выполнил квантовомеханический расчет характеристик иона молекулы водорода, решив уравнения Шрёдингера
- В том же 1927 году Э. У. Кондон, а также В. Гейтлер и Ф. Лондон выполнили независимо расчеты ковалентной химической связи в молекуле водорода
- Метод получения приближённого решения уравнения Шрёдингера для молекул был предложен Борном и Оппенгеймером также в 1927 г.
- Эти методы, использующиеся в частности для иона молекулы водорода, были применены и к дважды тяжелым барионам [L. Maiani, A. Polosa & V. Riquer, PRD 100 (2019) 074002]
- В данном докладе приводятся результаты приближенных расчетов методом Борна и Оппенгеймера для иона молекулы водорода, а также делается обобщение метода вычислений на дважды тяжелые барионы

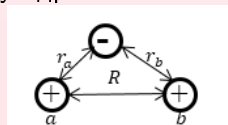
- В Стандартной модели фундаментальных взаимодействий вводится два типа фундаментальных фермионов — лептоны ($e, \mu, \tau, \nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$) и кварки (u, d, s, c, b, t)
- Частицы, состоящие из кварков, — адроны делятся на две группы: мезоны и барионы
- Большинство мезонов — состояния из кварка и антикварка
- Барионы — бесцветные состояния из трех кварков
 - Легкие барионы (легкие u -, d - и s -кварки)
 - Тяжелые барионы (один из кварков — c - или b -кварк)
 - **Дважды тяжелые барионы** (ДТБ), в составе которых два тяжелых кварка, один легкий
 - Трижды тяжелые барионы (все кварки тяжелые)
 - t -кварк очень тяжелый и быстро распадается; не успевает образовать связанное состояние с другими кварками

Приближение Борна-Оппенгеймера

- Основано на экспериментальном наблюдении

$$m_p = 1836 m_e$$

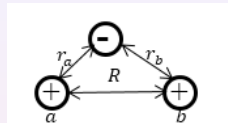
- В молекуле электроны движутся намного быстрее ядер, состоящих из протонов и нейтронов
- Рассмотрим ион двухатомной молекулы водорода
- Решается задача о движении электрона в поле двух неподвижных ядер
- Полученная по теории возмущений энергия электрона является функцией расстояния R между ядрами
- Ион будет существовать, если эта энергия имеет минимум при конечных значениях R



Ион молекулы водорода

- Оператор Гамильтона для иона

$$\hat{H}_{\text{ион}} = \hat{T} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b} + \frac{e^2}{R}$$



- m — масса электрона
- Первое слагаемое — оператор кинетической энергии электрона, второе и третье — операторы кулоновского притяжения электрона к ядрам, последнее — оператор кулоновского отталкивания ядер
- Ядра статичны, поэтому операторы кинетической энергии ядер вклада в энергию не дают
- Уравнение Шрёдингера решается только для электронов по теории возмущений, при этом используется вариационный метод Ритца