

ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И ТЕОРИЯ ПОЛЯ

УДК 539.12

DOI: 10.17223/00213411/62/9/73

В.В. СКОБЕЛЕВ

К ВОПРОСУ О СУЩЕСТВОВАНИИ «ОДНОМЕРНОЙ» МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

С использованием аналитических и численных методов впервые анализируется возможность существования «одномерной» (т.е. «вытянутой») молекулы водорода H_2 . Выводы данной работы в принципе могут быть проверены экспериментально: например, «одномерные» атомы Na достаточно давно были получены на опыте. По причине принципиальных вычислительных трудностей, связанных с расходимостью «одномерных» интегралов на малых расстояниях, доказана лишь сама возможность существования таких молекул без конкретизации их энергетических характеристик (энергии связи и т.п.).

Ключевые слова: одномерная молекула, водород.

Введение

Атомы с пространственно-«одномерными» электронными структурами достаточно давно получены экспериментально [1, 2], а существование таких же водородоподобных или двухэлектронных с аналогичными «трехмерными» характеристиками подтверждено теоретически (в т.ч. в наших предыдущих работах [3–5]). В связи с этим возникает естественный вопрос о возможности существования «одномерных», т.е. «вытянутых» молекул, состоящих из двух таких же с соответствующим электронным распределением водородоподобных атомов (Ze) (например, при $Z=1$ это молекулярный водород H_2).

Эта проблема, которая не затрагивалась в доступной нам литературе, и является предметом рассмотрения в данной работе. В наших рассуждениях мы будем в основном ориентироваться на изложение материала для обычных «трехмерных» молекул H_2 , следуя традиционному курсу квантовой механики [6], или, в эквивалентной, более общей формулировке, – в классической работе [7].

Согласно [6], добавка к энергии двух «трехмерных» атомов водорода в молекуле H_2 за счет их взаимодействия, рассматриваемого как малое возмущение, равна

$$V_{\text{SYM}}(R) = \frac{K + A}{1 + S} \quad (1a)$$

– для состояний, симметричных относительно перестановки координат электронов, и

$$V_{\text{ANYT}}(R) = \frac{K - A}{1 - S} \quad (1б)$$

– для антисимметричных.

Функции $S \equiv S(R)$, $K \equiv K(R)$, $A \equiv A(R)$ от расстояния $R \equiv |\mathbf{R}|$ между ядрами имеют вид

$$S = \int dV \psi_0(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \quad (2a)$$

$$K = \int dV \psi_0^2(\mathbf{r}) \left[\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} \right], \quad (2б)$$

$$A = \int dV \psi_0(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \left[\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}|} \right], \quad (2в)$$

причем K представляет собой среднюю энергию кулоновского взаимодействия одного из ядер с другим нейтральным атомом (с ядром и «его» электроном), величина же A не имеет классического аналога и является так называемой обменной энергией; ψ_0 есть действительная волновая функция основного состояния электрона в водородоподобном атоме (Ze).

Наша задача далее – модификация формул (2a), (2б), (2в) для случая «одномерных» молекул с последующим выяснением вида зависимости величин (1a), (1б) от расстояния R между ядрами на

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>