

RÉSZECSKÉK BELSŐ TÖMEGSZERKEZETE H₂⁺ MOLEKULA: RELATIVISZTIKUS SZÁMÍTÁS

Dezso Sarkadi

Research Centre of Fundamental Physics
HUNGARY

I. BEVEZETÉS

A speciális relativitás alapegyenlete

$$E^2 - c^2p^2 = m^2c^4, \quad (1)$$

ahol E az energia, p az impulzus, m a részecske tömege, c a fénysebesség. Évekkel ezelőtt azon töprengtem, hogy a részecskék belső mozgása hogyan határozza meg a részecskék kísérleti, mérhető tömegét. Például, a hidrogén atom tömegét a proton és elektron tömegén kívül meghatározza azok mozgási és potenciális energiája is. Mai ismereteink szerint a proton is összetett részecske, mely tömegét nemcsak a kvarkok tömege, hanem azok kinetikus és potenciális energiája is meghatározza. Ebből az egyszerű megfontolásból következett, hogy elvileg minden részecske tömege az összetevők tömegéből és azok kinetikus és potenciális energiájából áll. A részecskék létezésének feltétele a belső kötési energia (potenciál), melyhez minden esetben tömegcsökkenés is tartozik, az energia-tömeg einsteini ekvivalencia értelmében.

A legegyszerűbb részecske tömegszerkezet az előbbi relativitás képlettel adható meg, ahol a fénysebességet egységnyinek választjuk (a tömeg és energia dimenziója azonos lesz)

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \gg \gg E^2 = p^2 + m^2 = M^2; \quad c = 1, \quad (2)$$

ahol az E energia a részecske M kísérleti tömegével egyenlő. Bevezetjük a következő jelöléseket: m a részecske *zéruspon*ti tömege és p a részecske *sajátimpulzusa* (sajátimpulzus tömege).

II. KVANTÁLT HARMONIKUS OSZCILLÁTOR

A kvantummechanika születésének csírája a kvantált harmonikus oszcillátor (QHO) volt, amely Planck feketetest-sugárzás elméletén alapult. Einstein a foton részecske elméletének megjelenésével a kvantummechanika már a kezdetektől zavaros képet mutat, mely az anyag kettős természetét jelenti, a kapcsolt hullám- és részecskéképre.

Planck elméletében a hőszugárzás elektromágneses hullám, ezért a QHO kísérleti tömegének nullának kell lennie. Tehát akkor hogyan nézhet ki a QHO tömegszerkezeti egyenlete? A fentiek figyelembevételével a QHO tömegszerkezete csak a következő lehet

$$M^2 = E^2 = p^2 = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \right]^2 \neq 0; \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (3)$$

ahol \hbar a redukált Planck-állandó, ω pedig a QHO frekvenciája. Az M itt nem a kísérleti tömeget jelenti, hanem a kvantált oszcillátor energiáját.

Fontos eredményt kapunk a QHO nullponti energiájára

$$M_n^2 = (M - a_{n+1})^2 = (p - a_n)^2 = \left(\frac{1}{2} \hbar \omega \right)^2, \quad (4)$$

ahol

$$a_n = n \hbar \omega, \quad a_{n+1} = (n + 1) \hbar \omega; \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (5)$$

III. TÖMEGOSZCILLÁTOR

A fenti egyenlet alapján a QHO egyszerűen kiterjeszthető a tömeggel rendelkező részecskékre

$$M_n^2 = (M - a_{n+1})^2 = (p - a_n)^2 + m^2, \quad (6)$$

ahol m tömeg a *nullponti tömegnek* felel meg. Ez a képlet elvezet bennünket a tömeg kvantálására, azaz a tömegoszillátor fogalmára (QMO).

A tömegoszillátort meghatározó rekurziós egyenletek

$$\begin{aligned} M_0^2 &= (M - a_1)^2 = (p - a_0)^2 + m^2; \\ M_1^2 &= (M - a_2)^2 = (p - a_1)^2 + m^2; \\ M_2^2 &= (M - a_3)^2 = (p - a_2)^2 + m^2; \\ &\dots \dots \dots \end{aligned} \quad (7)$$

ahol

$$a_0 = p. \quad (8)$$

Felmerül a kérdés, hogy tömegoszillátor esetén mekkora a sajátimpulzus (p) értéke. QHO esetén az előjeltől függetlenül p értéke egyenlő az energiával. Aki először találkozik az itt felvázolt tömegoszillátor elmélettel, azonnal azt gondolja, hogy a sajátimpulzus és a kísérleti tömeg aránya a részecske típusától függhet. Ha a részecskék atomok, akkor az atomok anyagminősége nagyon változó, így az egyes atomok sajátimpulzusa nagyon változó lehet. Ugyanakkor, a Szerző hosszúságos vizsgálatainak során kiderült, hogy a sajátimpulzusok aránya az egyes atomok tömegéhez képest csak kismértékben függ az atomok megválasztásától.

A valóság szerint a fenti képletekben a $Q = p/M$ arány nagy pontossággal teljesül az atomokra, de a tapasztalatok szerint más részecskékre is

$$Q = p/M \approx 2/9. \quad (9)$$

Az atomok esetében az anyagminőséget a külső elektronhéj szerkezete határozza meg, amit az elektromágneses kölcsönhatás irányít. Következésképpen a Q értékének kis szórásában az elektromágneses kölcsönhatás játszhat szerepet.

Összegezve a fentieket, mely a részecskék belső tömegszerkezetének univerzális elméletét tartalmazza, a Szerző QPHYSICS elméletnek nevezte el. A QPHYSICS részecske elmélet minden bizonnyal egy relativisztikus elmélet, amelyben a fénysebesség egységnyi értékű (a tömeg-energia dimenziója azonos).

PÉLDA: A neutron tömegspektruma

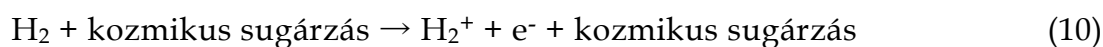
| n | $Mn(n)$ | $\Delta Mn(n)$ |
|-----|--------------|----------------|
| 8 | 9.395653E+02 | 1.302969E-04 |
| 7 | 9.395648E+02 | 5.863367E-04 |
| 6 | 9.395628E+02 | 2.638531E-03 |
| 5 | 9.395535E+02 | 1.187371E-02 |
| 4 | 9.395120E+02 | 5.343820E-02 |
| 3 | 9.393248E+02 | 2.406037E-01 |
| 2 | 9.384800E+02 | 1.085399E+00 |
| 1 | 9.346255E+02 | 4.939913E+00 |
| 0 | 9.160726E+02 | 2.349285E+01 |

Táblázat 1.: A neutron tömegoszillátor első kilenc gerjesztési szintje (MeV).

A táblázatban a proton tömege ($938.272 MeV$) jó közelítésben a neutron 2-es gerjesztési szintjének felel meg. A szabad neutron átlagos élettartama 15 perc, mely protonra bomlik, elektron és antineutrínó kibocsátásával (gyenge kölcsönhatás). Az eddigi erős tapasztalatok szerint a neutron nem bomlik tovább a proton tömegszintje alá. Ugyanakkor az atommagokban a neutron tömege a proton tömege alá csökken.

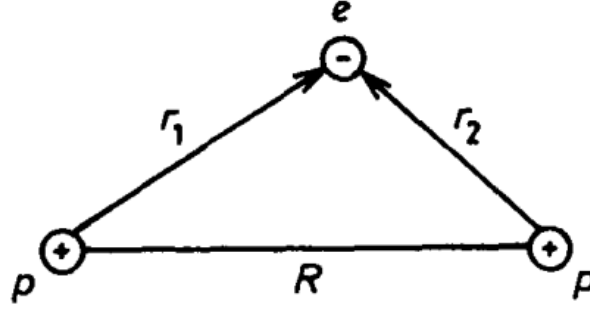
IV. A H_2^+ MOLEKULA TÖMEGSZERKEZETE

A H_2^+ molekula létezése kezdettől fogva nagy figyelmet keltett mind a kémiában, mind a fizikában (kvantummechanika). A természetben hidrogénmolekulák ionizálása során keletkezik



A természet legegyszerűbb molekulája mindössze két protonból és egy elektronból áll.

A jelen munkában a H_2^+ molekula tömegszerkezeti vizsgálatát végezzük el, figyelembe véve az elektron relativisztikus viselkedését, ami a Dirac egyenlet alkalmazását jelenti. Born-Oppenheimer közelítést alkalmazunk, amely nem veszi figyelembe a protonok mozgását, a protonok távolsága rögzített R érték. A munkákban ez a két hidrogénatom sugarának összegét jelenti; *Rydberg-egységben* $R = 2$.



1. Ábra: A H_2^+ molekula elliptikus koordinátái. (11)

Ami a kvantummechanikai leírásban megszokott, az elliptikus koordinátarendszert használjuk, ami az ábrán látható. Az elliptikus koordináták

$$\mu = \frac{(r_1+r_2)}{R}, \quad \nu = \frac{(r_1-r_2)}{R}, \quad \varphi \in [0 - 2\pi]. \quad (12)$$

A derékszögű koordináták

$$\begin{aligned} x &= \frac{R}{2} [(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)]^{1/2} \cos\varphi, \\ y &= \frac{R}{2} [(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)]^{1/2} \sin\varphi, \\ z &= \frac{R}{2} \mu\nu. \end{aligned} \quad (13)$$

Az impulzus operátor komponensei

$$\begin{aligned} p_x &= -\frac{2i\hbar}{R} \left[\frac{A \cos\varphi}{\mu^2 - \nu^2} \left(\mu \frac{\partial}{\partial \mu} - \nu \frac{\partial}{\partial \nu} \right) - A^{-1} \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ p_y &= -\frac{2i\hbar}{R} \left[\frac{A \sin\varphi}{\mu^2 - \nu^2} \left(\mu \frac{\partial}{\partial \mu} - \nu \frac{\partial}{\partial \nu} \right) - A^{-1} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \\ p_z &= -\frac{2i\hbar}{R} \left[\frac{\nu(\mu^2 - 1)}{\mu^2 - \nu^2} \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\mu(1 - \nu^2)}{\mu^2 - \nu^2} \frac{\partial}{\partial \nu} \right], \end{aligned} \quad (14)$$

where

$$A = [(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)]^{\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

A H_2^+ energia sajátérték egyenlete

$$\mathbf{H}\psi = E\psi, \quad (16)$$

ahol a Hamilton operátor a Dirac egyenletből

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} V\mathbf{I} & c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} & (V - 2mc^2)\mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

itt

$$\mathbf{V} = -\frac{4e^2\mu}{R(\mu^2 - \nu^2)}, \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Tömegszerkezeti számítás esetén

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} V\mathbf{I} & \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} & (V - 2m)\mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad (19)$$

ahol $c = 1$ és az elektron töltése $e = -1/3$!

A $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}$ operátor részletei

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z. \quad (20)$$

A $\boldsymbol{\sigma}$ operátor a 2x2-es Pauli mátrixokat tartalmazza

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (21)$$

A Hamilton operátor sajátfüggvénye

$$\psi(\mu, \nu) = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}; \quad (22)$$

ahol

$$\psi_1(\mu, \nu) = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix}, \quad \psi_2(\mu, \nu) = \begin{bmatrix} X_3 \\ X_4 \end{bmatrix}. \quad (23)$$

A H_2^+ molekula kötési energia várható értéke

$$\langle \psi | \mathbf{H} | \psi \rangle = \left[\begin{array}{c} \frac{\langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} + \frac{\langle \psi_1 | \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle} \\ \frac{\langle \psi_2 | \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p} | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle} + \frac{\langle \psi_2 | V - 2m | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle} \end{array} \right] = E \langle \psi | \psi \rangle \quad (24)$$

Az alapállapotú sajátfüggvénynek ($1s\sigma$) egy korábbi, nemrelativisztikus számításnál használt függvényt alkalmaztam [1]

$$X_1 \gg f(\mu, \nu) = \exp(-\alpha \mu) (1 + \beta \nu^2), \quad (X_2 = 0), \quad (25)$$

ahol α és β variációs paraméterek.

A bispinor további komponenseinek választása

$$\psi_2 = \sigma \mathbf{p} \psi_1 = \begin{bmatrix} X_3 \\ X_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{p}_z f(\mu, \nu) \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (26)$$

Az energia sajátérték egyenlet első sora

$$V\psi_1 + \sigma \mathbf{p} \psi_2 = E\psi_1. \quad (27)$$

A kötési energia várható értéke

$$E = \frac{\langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} + \frac{\langle \psi_1 | \sigma \mathbf{p} | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}, \quad (28)$$

ahol

$$\frac{\langle \psi_1 | \sigma \mathbf{p} | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle} = \frac{\langle \psi_2 | 1/f(\mu, \nu) | \psi_2 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}. \quad (29)$$

Az integrálok 12 pontos Gauss-Legendre kvadraturával kerültek számításra. Az $f(\mu, \nu)$ alapállapotú sajátfüggvény paramétereinek optimalizálása *Monte-Carlo* módszerrel történt. Az eredmények ($R = 2$)

$$\alpha = 0.739652 \dots; \quad \beta = 0.437179 \dots \quad (30)$$

$$E = -1.097392 \dots \text{Hartree}$$

Japán szerzők [2] iteratív számítási módszerrel a relativisztikus H_2^+ molekula kötési energiájára a következő eredményt kapták ($R = 2$)

$$E = -1.102634 \dots \text{Hartree} \quad (31)$$

Fontos megjegyezni, hogy ez az eredmény nagy pontossággal megegyezik az egzakt relativisztikus számítási eredménnyel, mely a H_2^+ molekulára elvégezhető.

A számítógépes program listája a dolgozat utolsó oldalain található.

V. HIVATKOZÁSOK

[1] H. M. James, *J. Chem. Phys.* **3**, 9 _1935_.

[2] Solving the Schrodinger and Dirac equations of hydrogen molecular ion accurately by the free iterative complement interaction method *The Journal of Chemical Physics* 128(12):124103

VI. SZÁMÍTÓGÉPES PROGRAM

Microsoft Visual Studio Community 2022 (64-bit) – Current Version 17.12.3

```
REM T20 H2+ REL
REM F = JAMES'S VARIATIONAL FUNCTION
REM Dezso Sarkadi
REM 02-03-2025
```

```
Imports System.IO
Imports System.Reflection
Imports System.Security.Cryptography
```

```
Public Class Form1
```

```
Public MU(), NU(), E0, EC, EE, ER, ERE, ERH, ERT, E2, EQ, S0 As Double
Public A0, B0, AA, BB, CE, DD, D2, R, P0, PC, PP, NP0, NP As Double
Public A(), B(), TR(), GMU, GNU, F0, F2, NE0, NE, TT, W, W2 As Double
Public ZA = "", SW As String, ST As Integer
Public FLAG1 As Boolean = True
'Rydberg  $h/2\pi = 2 * EM = 1$ 
'InMass  $C0 = 1 = \text{speed of light}$ :  $CE = -1 / 3$  electron charge
'ER = Rydberg energy
'ERE =  $ER * 13.6$  eV Rydberg energy
```

```
Private Sub Button1_Click(ByVal sender As System.Object,
                          ByVal e As System.EventArgs) Handles Button1.Click
    Main() : SW = MsgBox("STOP!", 1)
    If SW = 1 Then Application.Exit()
End Sub
```

```
Sub Main()
```

```
A0 = 0.741483568498842
B0 = 0.435376771806075
```

```
Input() : DD = 0.005 : R = 2 : CE = -1 / 3
'F =  $\text{Math.Exp}(-ALFA * MU) * (1 + BETA * NU ^ 2)$ 
```

```
100: Do While FLAG1 = True
```

```
DD *= Rnd() : AA = A0 * (1 + (Rnd() - 0.5) * DD)
DD *= Rnd() : BB = B0 * (1 + (Rnd() - 0.5) * DD)
```

```
EE = 0 : NE = 0 : PP = 0 : NP = 0 : ST += 1
```

```
For I = 1 To 12
    For J = 1 To 12
```

```
GMU =  $\text{Math.Exp}(-AA * MU(I))$  : GNU =  $1 + BB * NU(J) ^ 2$ 
F0 =  $GMU * GNU$  : F2 =  $F0 ^ 2$  : D2 =  $MU(I) ^ 2 - NU(J) ^ 2$ 
```

```
W =  $GMU * ((2 * BB * NU(J)) * MU(I) * (1 - NU(J) ^ 2)) -$   
 $AA * F0 * NU(J) * (MU(I) ^ 2 - 1)$  : W *=  $2 / (R * D2)$ 
```

```
TT = TR(I)
```

```
P0 =  $TT * W ^ 2 / F0$ 
PP +=  $A(I) * A(J) * P0$ 
```

```
NP0 =  $TT * F0 * W * D2 ^ 2$ 
NP +=  $A(I) * A(J) * NP0$ 
```

RÉSZECSKÉK BELSŐ TÖMEGSZERKEZETE ...
D. Sarkadi-HUNGARY-Március-2025 dsarkadi@gmail.com

```

        E0 = -TT * (2 * CE ^ 2 / R) * (2 * MU(I)) * F2
        EE += A(I) * A(J) * E0

        NE0 = TT * F2 * D2
        NE += A(I) * A(J) * NE0

    Next
Next

EC = EE / NE : PC = PP / NP : EQ = EC / PC
ER = EC + PC
ERH = -1 + ER / 2 'Hartree
ERT = -2 + ER 'Rydberg
ERE = ERT * 13.6 'eV Rydberg

'If ST > 6 Then Stop
If ER > S0 Then GoTo 200
A0 = AA : B0 = BB : S0 = ER
Display()
SW = MsgBox("OK = MORE!", 1)
If SW = 1 Then GoTo 200 Else FLAG1 = False
200: Loop
End Sub

Sub Input() 'GAUSS-LEGENDRE QUADRATURE

    ReDim A(12), B(12), MU(12), NU(12), TR(12)

    A(1) = 0.12793819534675219 : A(2) = 0.1258374563468283
    A(3) = 0.12167047292780341 : A(4) = 0.1155056680537256
    A(5) = 0.10744427011596561 : A(6) = 0.0976186521041139
    A(7) = 0.0861901615319533 : A(8) = 0.0733464814110803
    A(9) = 0.0592985849154368 : A(10) = 0.0442774388174198
    A(11) = 0.0285313886289337 : A(12) = 0.0123412297999872

    B(1) = 0.0640568928626056 : B(2) = 0.19111886747361631
    B(3) = 0.3150426796961634 : B(4) = 0.43379350762604513
    B(5) = 0.54542147138883956 : B(6) = 0.64809365193697555
    B(7) = 0.74012419157855436 : B(8) = 0.820001985973903
    B(9) = 0.88641552700440107 : B(10) = 0.9382745520027328
    B(11) = 0.97472855597130947 : B(12) = 0.99518721999702131

    For I = 1 To 12
        MU(I) = 1 / (1 - B(I) ^ 2)
        TR(I) = 2 * B(I) / (1 - B(I) ^ 2) ^ 2
        NU(I) = B(I)
    Next

End Sub

Sub Display()
    TextBox1.Text = ""
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + ST.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + EC.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + PC.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + EQ.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + ER.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + ERE.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + ERH.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + A0.ToString & Environment.NewLine
    TextBox1.Text = TextBox1.Text & ZA + B0.ToString & Environment.NewLine

```



```
        TextBox1.Text = TextBox1.Text & Environment.NewLine
    End Sub 'Display()
End Class
```

```
'18 RESULTS:
'-0.130409355024959
'-0.0644871245353475
'2.02225414708136
'-0.194896479560306
'-29.8505921220202
'-1.09744823978015
'0.741697926867463
'0.43519045626715
```