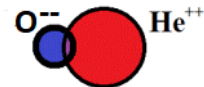


Специфика формирования крупномасштабной структуры Вселенной в модели темных атомов

Студент: Карни Мд Вейс Ал

Руководитель: Проф., д.ф.-м.н. Хлопов М. Ю.

Москва 2023г.

Темные атомы OHe Рис. 1: Темный атом OHe

- Система темных атомов OHe похожа на боровскую систему атомов водорода. В отличие от атома водорода, у темного атома OHe очень тяжелое ядро, которое состоит из равномерно отрицательно заряженных частиц O (-2) и частицы He ($+2$), связанных вместе.
- Уже найденую энергию связи OHe для точечного заряда 4He

$$E_{OHe} = \frac{Z_{O--}^2 - Z_{\alpha}^2 \alpha^2 m_{He}}{2} \approx -1.6 MeV$$

$$\text{и радиус Бора } R_b = \frac{\hbar c}{Z_{O--} - Z_{\alpha} m_{He} \alpha} \approx 2 \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

Цель

- Энергетические уровни и вероятности переходов, определяются взаимодействием между частицами O и He. Система OHe представляет интерес для исследователей, изучающих секретную массу, эта модель позволяет объяснить противоречия в результатах поиска частиц скрытой массы в подземных экспериментах.
- Образованию атомов OHe может сопутствовать их связывание в более сложные молекулярные структуры. Это требует разработки методов расчета образования таких структур с целью последующего анализа образования первичных O-нуклеоритов (связанных систем ядерной и темной материи)

- Решили следующее одномерное уравнение Шредингера:

$$\Delta_r \Psi + \frac{2m_{He}}{\hbar^2} \left(E + \frac{4e^2}{r} \right) \Psi = 0$$

- Вероятность образования ковалентной связи между двумя атомами OHe определяется интегралом перекрытия орбиталей He и O : $P = S^2$ где S - интеграл перекрытия, заданный формулой: $S = \int \psi_{He(r)} \psi_{O(r)} dr$
- В сферических координатах волновая функция может быть выражена как: $\psi_{He}(r) = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{r}{a_0} \right)$
- В декартовых координатах волновая функция может быть выражена как: $\psi_O(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi(2a_0)^3}} \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right)$
- Подставляя их в интегральное выражение перекрытия, мы получаем:

$$S = \int \psi_{He}(r) \psi_O(r) dr = 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi(2a_0)^3}} \int \exp \left(-\frac{r}{a_0} \right) \exp \left(-\frac{r}{2a_0} \right) r^2 dr$$

Теперь, поместив интегральное значение S в $P = S^2$, мы получаем,

$$P \approx 0.005$$

Чтобы найти длину ковалентной связи и радиальную плотность вероятности между двумя атомами ОНе, нам нужно решить уравнение Шредингера для системы ОНе.

- Радиальная часть волновой функции для основного состояния системы ОНе задается следующим образом:

$$\psi_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-Zr/na_0} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)$$

где a_0 - радиус Бора, n и l - главные квантовые числа и квантовый момент импульса, Z - эффективный заряд ядра, а $L_n^m(x)$ - соответствующий полином Лагерра степени n и порядка m .

$$|\psi_{10}(r)|^2 = \frac{32}{\pi} \left(\frac{1}{a_0^3} \right) e^{-4r/3a_0}$$

Radial Probability Density of OHe System Ground State

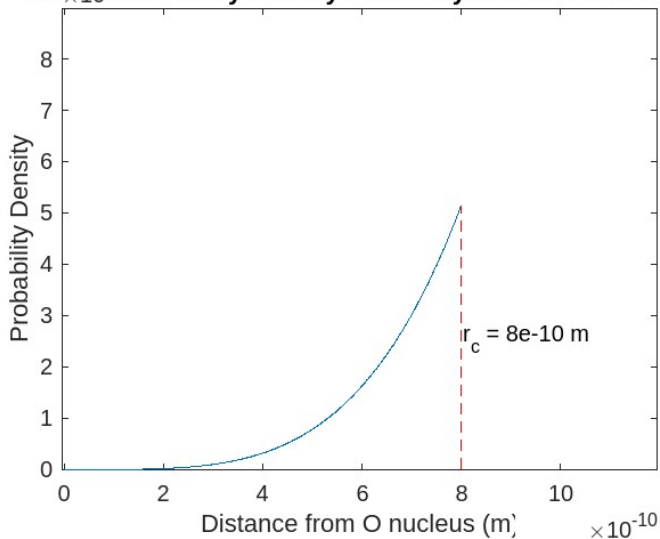
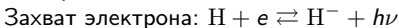


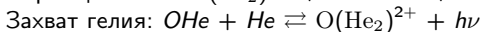
Рис. 2: радиальная плотность вероятности

Будем рассматривать молекулу OHe как двустороннюю реакцию, аналогичную образованию молекулы водорода.

Для образования нашей молекулы водорода:



Для образования нашей молекулы OHe :



- Точные формулы для свободного от границ коэффициента непрерывного поглощения иона. Здесь мы используем выражение, данное Охмурай и Охмурай (1960), преимущество которого заключается в подходящей аналитической форме. Эти авторы вычисляют поперечное сечение Фоторасщепления из H^- с помощью теории эффективного радиуса действия и находят

$$\sigma(\nu) = \frac{6.85 \times 10^{-18} \gamma k^3}{(1 - \gamma \varrho) (\gamma^2 + k^2)^3} \text{ cm}^2$$

- Мы будем использовать аналогичный случай образования молекулы водорода для иона $O(He_2)^{+2}$
 где k — волновое число излучаемого гелия, $\gamma \approx 1.54$ МэВ — параметр захват гелия ($\gamma^2/2$) OHe и $\varrho = 2.646 a.u.$ — эффективный диапазон; $k \approx 1,75 \times 10^{11} \text{ см}^{-1}$
 Поставив параметры:

$$\sigma(\nu) = \frac{1.1 \times 10^{-20} \cdot k^3}{(b + k^2)^3} \text{ см}^2$$

Где, $b = 0.00000256$

Коэффициент скорости фоторасщепление (OHe_2^2) в поле излучения температуры T_r определяется формулой.

$$\alpha_9 = \int_{\nu_1}^{\infty} \frac{4F_\nu \sigma(\nu) d\nu}{h\nu}$$

где $F_\nu d\nu$ - интенсивность излучения. С учетом приведенных допущений коэффициент скорости захват гелия α_4 может быть выражен как:

$$\alpha_4 = \int_0^{\infty} \left(\frac{m_{He}}{2\pi k T_k} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{mv^2}{k T_k}\right) \nu \sigma(\nu) 4\pi v^2 dv$$

- Решая эти формулы численными методами, можно найти скорость образования

$$\frac{dn_{OHe_2^{2+}}}{dt} = K_4 n_{OHe} n_{He^{2+}} - K_9 n_{O(He_2)^{2+}}$$

где n_{OHe} , n_{He} и $n_{O(He_2)^{2+}}$ представляют плотность числа OHe, He и $O(He_2)^{2+}$ соответственно. Плотность чисел (n_{OHe}) и n_{He} задается формулой:

Принимая типичные значения для межзвездного пространства $T_r = 10^4$ К и температуру излучения за коэффициент разбавления $W = 10^{-14}$, мы показываем в таблице 1 некоторые значения k_4 и k_9 , где $k_9 = W \cdot \alpha_9$ и $k_4 = W \cdot \alpha_4$.

Таблица 1: Коэффициент скоростизахват гелия и фоторасщепление

Temperature (K)	k_4 (cm ³ s ⁻¹)	k_9 (s ⁻¹)
10	3.872×10^{-211}	0.0
50	3.260×10^{-73}	2.366×10^{-153}
100	2.716×10^{-56}	1.377×10^{-98}
1000	3.700×10^{-42}	2.671×10^{-49}
2000	9.706×10^{-42}	1.468×10^{-46}
3000	1.043×10^{-41}	1.217×10^{-45}
4000	9.863×10^{-42}	3.631×10^{-45}
5000	9.513×10^{-42}	7.527×10^{-45}
6000	9.649×10^{-42}	1.337×10^{-44}
7000	1.041×10^{-41}	2.231×10^{-44}
8000	1.157×10^{-41}	3.534×10^{-44}
9000	1.293×10^{-41}	5.311×10^{-44}
10000	1.440×10^{-41}	7.625×10^{-44}
15000	2.128×10^{-41}	2.758×10^{-43}
20000	2.683×10^{-41}	6.179×10^{-43}
50000	4.808×10^{-41}	5.667×10^{-42}
100000	6.663×10^{-41}	2.421×10^{-41}
200000	8.517×10^{-41}	9.138×10^{-41}
500000	1.073×10^{-40}	4.671×10^{-40}
1000000000	1.628×10^{-40}	6.447×10^{-35}

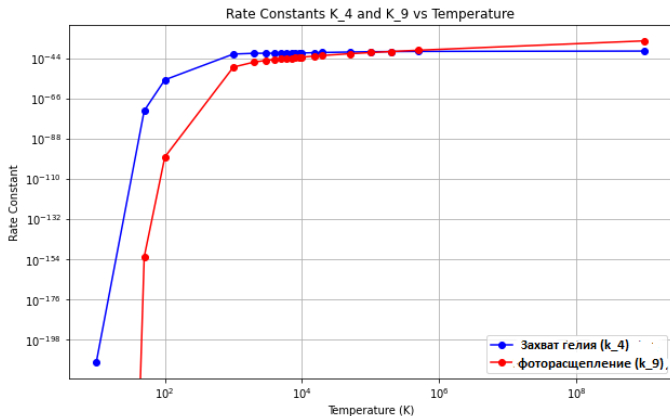


Рис. 3: Логарифмическое сравнение скорости реакции фоторасщепление и захват гелия, которое показывает равновесную реакцию

- Давайте определим скорость реакции образования $O(He_2)^{2+}$ в период космологического нуклеосинтеза при температуре $= 100\text{KeV} \approx 10^9\text{ Kelvin}$
Теперь мы получаем

$$\frac{dn_{OHe_2^{2+}}}{dt} = K_4 n_{OHe} n_{He^{+2}} - K_9 n_{O(He_2)^{2+}} \approx 3 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

Хотя при температуре скорость реакции $O(He_2)^{2+}$ образование молекулы OHe оказалась весьма низкие этот процесс приводит с вероятностью 0.005 к образованию молекул, которые в последствии могут соединяться в более сложные структуры. Однако мы можем применить ту же методологию для исследования образования молекул OHe при разных температурах, используя идентичный процесс. Изменяя температуру, мы можем исследовать температурную зависимость реакции и оценить условия, при которых образование молекулы OHe становится благоприятным.

В работе рассматривается гипотеза о скорости рекомбинации OHe. Мы рассмотрели Темный атом OHe как структуру, подобную атому Бора, состоящую из отрицательно заряженного ядра O и альфа-частицы He, которая действует подобно электрону с положительным зарядом. Ковалентная связь между двумя атомами OHe включает совместное использование электроноподобных частиц He между ядрами O, что приводит к образованию стабильной молекулы. Следует отметить, что вероятность образования молекул OHe составляет 0.005, что позволит оценить впоследствии вероятность образования многоатомных структур OHe и образования первичных специфических форм O-нуклеоритов - нейтральных состояний многозарядных ядер, электрический заряд которых скомпенсирован соответствующим числом O-частиц. В нашей будущей работе мы попытаемся решить эту проблему. Мы также сравним предполагаемое количество атомов OHe с дальнейшими проверками или ограничениями на обилие OHe во Вселенной, чтобы проверить согласованность модели. Кроме того, мы попытаемся усовершенствовать модель, включив дополнительные теоретические ограничения и сравним с более точными оценками. Кроме того, мы изучим, как один атом взаимодействует между собой и с другим атомом, чтобы узнать, как он ведет себя в случае образования структуры.

Спасибо за внимание!

Приложение: Численная вероятность ковалентной связи между двумя атомами ОHe

```
% Define the wave functions for He and X
psi_He = @(r) 2*(1/a0)^(3/2)*exp(-r/a0);
psi_X = @(r) 1/sqrt(pi*(2*a0)^3)*exp(-r/(2*a0));

% Define the integration limits and step size
a = 0;
b = 100*a0;
dx = a0/100;

% Perform the numerical integration
r = a:dx:b;
integrand = psi_He(r).*psi_X(r).*r.^2;
integral_value = trapz(r, integrand);

% Display the result
disp(['Integral value: ' num2str(integral_value)]);
```

```
Integral value: 0.069605
```

Рис. 4: Код

Вычисление длины ковалентной связи и радиальной плотности вероятности I

- Радиальная часть волновой функции для основного состояния системы XHe задается следующим образом:

$$\psi_{nl}(r) = \frac{u_{nl}(r)}{r} = \frac{1}{r} \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^{3/2}}} e^{-Zr/na_0} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)$$
 где a_0 - радиус Бора, n и l - главные квантовые числа и угловой момент импульса, Z - эффективный заряд ядра, а $L_n^m(x)$ - связанный полином Лагерра степени n и порядка m .

- Для системы OHe мы имеем $Z = 2$ (поскольку ядро O имеет заряд -2, а ядро He имеет заряд +2) и $l = 0$ (поскольку основное состояние имеет нулевой угловой момент). Следовательно, радиальная часть волновой функции

сводится к:
$$\psi_{n0}(r) = \frac{u_{n0}(r)}{r} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{8Z^3}{a_0^3 n^3} \right)^{1/2} e^{-Zr/na_0}$$
 где мы использовали $L_0^0(x) = 1$ и условие нормализации $\int_0^\infty |\psi_{n0}(r)|^2 r^2 dr = 1$.

- Длина ковалентной связи - это значение r , которое максимизирует радиальную плотность вероятности $|\psi_{n0}(r)|^2$. Это происходит в $r = r_c = \frac{3}{2} a_0$.

Следовательно, длина ковалентной связи для молекулы OHe равна:

$$r_c = \frac{3}{2} a_0 = 3 \times 10^{-10} \text{ м}$$

- Радиальная плотность вероятности для основного состояния системы OHe определяется следующим образом:
$$|\psi_{n0}(r)|^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{8Z^3}{a_0^3 n^3} \right) e^{-2Zr/na_0}$$

- Подключая $Z = 2$, $a_0 = 2 \times 10^{-10} \text{ м}$ и $n = 1$, мы получаем:

$$|\psi_{10}(r)|^2 = \frac{32}{\pi} \left(\frac{1}{a_0^3} \right) e^{-4r/3a_0}$$


```

1 % Define constants
2 mX = 10.8; % mass of X particle in atomic mass units (amu)
3 mHe = 4.00260; % mass of He particle in amu
4 alpha = 1/137; % fine structure constant
5 hbar = 1.0546e-34; % Planck constant over 2*pi in J*s
6 e = 1.6022e-19; % elementary charge in C
7 k = 8.9876e9; % Coulomb constant in N*m^2/C^2
8 a0 = 2e-11; % Bohr radius in m
9 % Define XHe system parameters
10 r0 = 2*a0; % distance between X nucleus and He particle in m
11 Z = -2; % charge on X nucleus
12 % Define grid for calculating probability density
13 N = 1000;
14 r = linspace(0, 20*r0, N);
15 % Calculate radial probability density
16 psi = exp(-sqrt(k*Z*mX*mHe)/(hbar*alpha)*log(r/r0)).*r;
17 prob_density = 4*pi*r.^2.*abs(psi).^2;
18 % Find covalent bond length
19 [~, ind] = max(prob_density);
20 rc = r(ind);
21 % Plot radial probability density
22 plot(r, prob_density);
23 xlabel('Distance from O nucleus (m)');
24 ylabel('Probability Density');
25 title('Radial Probability Density of OHe System Ground State');
26 hold on;
27 plot([rc rc], [0 max(prob_density)], '--r');
28 text(rc+0.1*r0, max(prob_density)/2, ['r_c = ', num2str(rc), ' m']);
29 hold off;

```

- Энергия сродства к гелия: $= E(O(He_2)^{2+} - E(OHe))$
- Энергия ионизации $E(O(He_2)^{2+}) = \frac{\text{Энергия ионизации одного атома}}{Z_{\text{eff}}^2}$
- $Z_{\text{eff}} = -2 + (2 \times 2) = 2$
- мы можем найти γ из $(\gamma^2/2 = \text{Энергия сродства к гелия})$
- Чтобы найти волновое число полученного иона гелия, мы предполагаем, что волна атома OHe исходит из бесконечности на первую орбиту, тогда значение волнового числа равно:

$$k = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

- Чтобы найти α_9 и α_4 , мы использовали эти форму,

$$\alpha_9 = A' \cdot \beta(T) \cdot \exp^{-\frac{0.861}{T_4}}$$

$$\alpha_4 = 9.09 \times 10^{-16} T_k^{-3/2} \beta(T_k) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

где $A' = \frac{8A(1.6)^3}{c^2 h^3}$ И

$$\beta(T) = \int \frac{k^4 dk}{(k^2 + 0.00000256) \left[\exp\left(\frac{1.6 \times 10^6 k^2}{T_4}\right) - \exp\left(\frac{-0.861}{T_4}\right) \right]}$$

Таблица 2: $E(O(He_2)^{2+})$ коэффициент скорости образования и фоторасщепление в зависимости от температуры

Temperature (K)	Beta (T)	α_4 (cm ³ s ⁻¹)	α_9 (s ⁻¹)
10	4.26×10^{-185}	3.872×10^{-197}	0.0
50	4.01×10^{-46}	3.260×10^{-59}	2.366×10^{-139}
100	9.45×10^{-29}	2.716×10^{-42}	1.377×10^{-84}
1000	4.07×10^{-13}	3.700×10^{-28}	2.671×10^{-35}
2000	3.02×10^{-12}	9.706×10^{-28}	1.468×10^{-32}
3000	5.96×10^{-12}	1.043×10^{-27}	1.217×10^{-31}
4000	8.68×10^{-12}	9.863×10^{-28}	3.631×10^{-31}
5000	1.17×10^{-11}	9.513×10^{-28}	7.527×10^{-31}
6000	1.56×10^{-11}	9.649×10^{-28}	1.337×10^{-30}
7000	2.12×10^{-11}	1.041×10^{-27}	2.231×10^{-30}
8000	2.88×10^{-11}	1.157×10^{-27}	3.534×10^{-30}
9000	3.84×10^{-11}	1.293×10^{-27}	5.311×10^{-30}
10000	5.01×10^{-11}	1.440×10^{-27}	7.625×10^{-30}
15000	1.36×10^{-10}	2.128×10^{-27}	2.758×10^{-29}
20000	2.64×10^{-10}	2.683×10^{-27}	6.179×10^{-29}
50000	1.87×10^{-9}	4.808×10^{-27}	5.667×10^{-28}
100000	7.33×10^{-9}	6.663×10^{-27}	2.421×10^{-27}

- Подставляя значение $\beta(T)$ из таблицы, мы можем найти α_9 и α_4

```
1 import numpy as np
2
3 def calculate_beta(T_4, n):
4     delta_k = 1 / n # Width of each subinterval
5     k_values = np.linspace(delta_k/2, 1-delta_k/2, n) # Midpoints of
6         subintervals
7
8     # Evaluate the integrand at the midpoints and sum the results
9     integral_sum = sum(
10         (k**4) / ((k**2 + 0.00000256) * (np.exp(((1.6*10**6)*k**2/T_4) -
11             np.exp(-0.861/T_4)))
12         for k in k_values
13     )
14
15     beta = integral_sum * delta_k
16     return beta
17
18 T_4 = T/10000 #Put T as needed
19 n = 1000
20 beta = calculate_beta(T_4, n)
21 print(beta)
```

Листинг 2: