

жены колебания ядер большой амплитуды (порядка длины хим. связи) для валентносвязанных атомов. В таких молекулах нарушается традиц. деление взаимодействий на валентные и невалентные, и их невозможно описать в рамках классич. представлений. На основе неэмпирич. расчётов было также идентифицировано большое число молекул в межзвёздном пространстве. На теоретически рассчитанных значениях атом-атомных потенциалов основаны современные исследования структуры и термодинамики жидкостей, расплавов и растворов.

В рамках К. х., наряду с традиц. расчётами геом. и электронной структуры молекул, развиваются квантовая теория полимерных молекул, движения ядер в ходе хим. реакции, теория фотовозбуждения и т. п. Успешное развитие методов К. х. во многом зависит от развития методов квантовой механики, квантовой теории поля и статистич. физики, методов вычислит. математики.

*Лит.:* Фок В. А., Начала квантовой механики, 2 изд., М., 1976; Слэтер Дж., Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел, пер. с англ., М., 1978; Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М., Теория строения молекул, М., 1979; Фудзитага С., Метод молекулярных орбиталей, пер. с япон., М., 1983.

А. И. Болдырев, А. А. Овчинников.

**КВАНТОВАЯ ХРОМОДИНАМИКА (КХД)** — квантовая теория сильного взаимодействия цветных глюонных и кварковых полей. Построена на основе принципа локальной калибровочной инвариантности относительно преобразований в трёхцветном комплексном пространстве *внутренних симметрий*. По совр. представлениям, КХД составляет основу описания сильного взаимодействия между адронами и ответственна за силы, связывающие *кварки* в адроны.

КХД возникла в нач. 70-х гг. в результате синтеза представления о *цвете* кварков, партоновой картины глубоко неупругого взаимодействия (см. *Партоны*) и аппарата неабелевых калибровочных полей.

Кварковая модель, согласно к-рой все адроны являются связанными состояниями либо пары кварк-антикварк (мезоны), либо трёх кварков (барионы), хорошо объясняла систематику адронов, т. е. их группировку по свойствам в унитарные и изотопич. мультиплеты, расщепление по массам внутри этих мультиплетов, а также нек-рые статич. свойства адронов (напр., отношения величин магн. моментов). Важным составным элементом этой картины было предположение о *парастатистике*, либо о существовании дополнит. характеристики кварков — цвета, введение к-рого диктовалось необходимостью утроения числа кварков каждого типа (аромата) для того, чтобы, не входя в противоречие с принципом Паули, можно было построить нек-рые барионы (напр.,  $\Delta^{++}$ , состоящий из трёх *u*-кварков с одинаковым направлением спина). При этом необходимо накладывать дополнит. условие «бесцветности» реально наблюдаемых адронов. Отсутствие в природе дикварковых мезонов, а также велич. вероятности распада  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$  и сечения аннигиляции  $e^+e^-$  в адроны однозначно указывали на симметрию относительно преобразований в цветовом пространстве, соответствующую группе  $SU(3)$  [эта группа часто маркируется ниж. индексом «с» — от англ. colour — цвет,  $SU(3)_c$ ].

Представление о партонах возникло из обнаруженно-го экспериментально различия в поведении *структурных функций* глубоко неупругих процессов и *формфакторов* упругого рассеяния лептонов на адронах, к-рые оказалось возможным совместить только на основе предположения о существовании точечных (слабо взаимодействующих) составляющих адронов — партонов. Дальнейшее эксперим. изучение *жёстких процессов*, в к-рых исследовалась структура адрона на малых расстояниях, показало, что заряд партоны тождественны кваркам и антикваркам. Т. о., получалось, что, с одной стороны, на расстоянии порядка радиуса ад-

рона ( $\sim 10^{-13}$  см) кварки должны достаточно сильно взаимодействовать, чтобы образовывать такие прочные системы, как адроны, а с другой стороны, эффективная константа этого взаимодействия должна ослабевать на расстояниях порядка 0,1 радиуса адрона. Ослабление эфф. константы взаимодействия кварков с уменьшением расстояния было позднее названо *асимптотической свободой*. Возрастающие константы взаимодействия с ростом расстояния давало надежду на объяснение явления «невыветания кварков» (т. е. конфайнмента), проявляющегося в отсутствии свободных кварков (см. *Удержание цвета*). Напр., интенсиный рост взаимодействия между разлетающимися кварком ( $q$ ) и антикварком ( $\bar{q}$ ), образовавшимися в процессе аннигиляции  $e^+$  и  $e^-$  (рис. 1), приводит к рождению из вакуума кварк-антикварковых пар и обесцвечиванию ими как разлетающихся кварка и антикварка, так и друг друга. В результате вместо  $q$  и  $\bar{q}$  наблюдаются две адронные струи, летящие в системе центра инерции в противоположные стороны.

Решающим шагом к созданию КХД было установление свойств ослабления взаимодействия с уменьшением расстояния для класса калибровочных квантовых теорий поля (КТП), основанных на неабелевых группах симметрии. К их числу относятся и группа  $SU(3)$  преобразований в цветовом пространстве.

Основу КХД образуют три цветных состояния кварко-

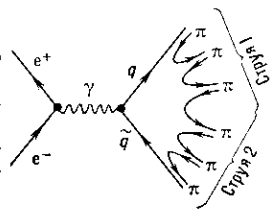


Рис. 1. Аннигиляции электрон-позитронной пары в две адронные струи в кварковой модели адронов.

вого Дирака поля  $q^a(x)$  каждого аромата ( $u, d, s, c, b, \dots$ ) ( $x$  — точка пространства-времени,  $\alpha=1, 2, 3$  — цветовой индекс), преобразующихся друг через друга при преобразованиях в цветовом пространстве. Кванты полей являются цветные кварки. По своей структуре КХД напоминает *квантовую электродинамику* (КЭД), но имеет существен. отличия. Аналогично тому, как в КЭД электрич. заряд вследствие калибровочной симметрии порождает эл.-магн. поле, цветные кварки в КХД порождают восемь разновидностей цветовых глюонных полей — векторных калибровочных полей Янга — Миллса (см. *Янга — Миллса поля*). Поскольку глюонные поля, в отличие от эл.-магнитного, несут цветовой заряд, они сами порождают глюонные поля и взаимодействуют друг с другом. Вследствие этого уравнения для глюонных полей (в отличие от *Максвелла уравнений* в вакууме) нелинейны. Квантами глюонного поля являются восемь *глюонов* (аналого фотона в КЭД), имеющих нулевую массу покоя и спин 1. При испускании и поглощении глюонов кварки (и глюоны) могут менять свой цвет, но не меняют аромата. Указанные характерные особенности КХД находят эксперим. подтверждения в многочисл. измерениях жёстких процессов, а также в свойствах *кваркониев* — связанных состояниях тяжёлых кварков  $c, b, \dots$  со своими антикварками ( $c\bar{c}, b\bar{b}, \dots$ ).

**Классическая хромодинамика.** Кварковые поля  $q^a(x)$  реализуют фундам. представление группы  $SU(3)_c$ . Ур-ние движения для кварковых полей, инвариантное относительно калибровочных преобразований, получается (как и в электродинамике) путём замены производной  $\partial_\mu \equiv \partial/\partial x_\mu$  ( $\mu=0, 1, 2, 3$ ) в Дирака уравнении для свободного поля на т. н. *ковариантную производную*

$$D_\mu = i\partial_\mu + igB_\mu(x), \quad (1)$$

где  $g$  — константа цветового взаимодействия (используется система единиц  $\hbar=c=1$ ),  $B_\mu(x)$  — четырёхмерный векторный потенциал глюонного поля в точке  $x$ , каждая компонента к-рого представляет собой бессле-