

УДК 539.18:539.184



А.М. Шахман

асистент,
Одеський національний
політехнічний
університет
e-mail: anshakhman@mail.ru

МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПІОННИХ АТОМІВ І АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ТЕОРІЇ

А.М. Шахман. Математичні методи розрахунку спектроскопічних параметрів піонних атомів і актуальні проблеми теорії. Проведено аналіз теоретичних методів дослідження піонних атомів з метою виявлення недоліків наявних методів при розрахунку спектроскопічних параметрів піонних атомів та дослідженні ефектів сильної піон-нуклонної взаємодії.

A.M. Shakhman. *Mathematical methods for calculating spectroscopic parameters of pion atoms and current issues of the theory.* Analyzed of theoretical research methods of pion atoms in order to identify the shortcomings of existing methods for calculating spectroscopic parameters of pion atoms and research the effects of strong pion-nucleon interaction.

Вступ. Фундаментальною теорією опису піонного атому згідно, загальноприйнятим уявленням виступає Стандартна модель, точніше квантова хромодинаміка (КХД), оскільки піонний атом представляє собою, в принципі, приклад сильно взаємодіючої (піон-нуклонна взаємодія) системи. Однак, оскільки у випадку піонних атомів йдеться про низькоенергетичну фізику, слушним представляється використання більш простих теоретичних побудов. В останні роки стосовно задач адронних, зокрема, піонних атомів серед теоретичних методів активно починає застосовуватися апарат кіральної теорії збурень. Хоча дана теорія має вражаючі перспективи застосування, для масових прецизійних розрахунків параметрів піонних атомів вона поки не застосовувалась.

Найбільш інтенсивні теоретичні дослідження енергетичних і спектроскопічних характеристик піонних атомів проводились рядом груп на основі відомих в квантовій механіці і теорії поля методів опису фермі- та бозе- систем.

Математичні методи в механіці, економіці, екології

Матеріал і результати дослідження. Аналізуючи бібліографію робіт по спектроскопії піонних атомів, слід виділити два напрямки теоретичних робіт, які ґрунтуються на прямому аналітичному або чисельному розв'язуванні рівняння Клейна-Гордона-Фока (КГФ), що відносяться або до електромагнітного (атомно-оптичного) сектору, або суто ядерного без прецизійного вивчення квантовоелектродинамічних (КЕД) внесків в енергію рівнів.

До першого напрямку в даний час слід віднести роботи груп Anagnostopoulos, Glushkov et al, Indelicato, Trassinelli, Mitroy, до другого – роботи груп Anagnostopoulos, Backenstos, Batty, Nose-Togawa, de Laat. У першому випадку практично відсутнім є явне врахування ефектів піон-нуклонної взаємодії, і розроблені теорії повною мірою застосовні до так званих рідбергівських атомів, для яких ефекти сильної взаємодії несуттєві. В другому випадку мова йде про теорії, які враховують піон-ядерну взаємодію, як правило, в рамках методу оптичного потенціалу, в той час як чисто електромагнітні ефекти, крім кулонівського поля ядра, в досить повній мірі не розглядаються.

Оскільки піон є бозе-частинкою з нульовим спіном, то, природно його релятивістська динаміка повинна описуватися рівнянням КГФ. У класичному вигляді, спочатку записаному Клейном-Гордоном і незалежно Шредингером і Фоком, рівняння виглядає як:

$$\partial_x^2 \psi + \partial_y^2 \psi + \partial_z^2 \psi - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \psi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (1)$$

або скорочено (в релятивістських одиницях $\hbar = c = 1$):

$$(\square - m^2)\psi = 0,$$

де \square – оператор Д'Аламбера.

У разі наближення точкового ядра розв'язання рівняння КГФ дає наступну формулу (справедливу для випадку $Z < 1/2\alpha = 68$) для енергетичного спектра E_n [1–4]:

$$E_{n,l} = -(\mu c^2 / 2)(\alpha Z / n)^2 \left\{ 1 + (\alpha Z / n)^2 [n(l+1/2)^{-1} - (3/4)] - \dots \right\}, \quad (2)$$

де α – постійна тонкої структури, n , l – головне та орбітальне квантові числа, μ – зведена маса рухомої частинки $\mu = m/(1 + mA^{-1})$, де m – маса піона.

В початкових найпростіших оцінках енергії рівнів піонного атома застосовувалася формула борівської теорії:

$$E_n = -(\mu c^2 / 2)(Z\alpha / n)^2, \quad r_n = -(\hbar^2 / \mu e^2)n^2 / Z \quad (3)$$

де r_n – радіус відповідної борівської орбіти.

Фактично, у використанні формул типу (2) і (3), а також формули відомого в теорії звичайного багатоелектронного атома методу квантового дефекту покладені моделі квантового дефекту Мітроу для піонного атома [5]. Простота такого підходу вражає, проте цей метод навряд чи може бути застосований для отримання високої точності обчислення параметрів останніх.

У разі теорії багатоелектронного піонного атома для врахування ефектів екранування електромагнітної піон-ядерної взаємодії слід попередньо обчислювати щільність електронної хмари в послідовній теорії в рамках релятивістського рівняння Дірака. Однак, для переважної кількості, зрозуміло, важких піонних атомів задача оцінки внеску в енергію за рахунок екранування електронними оболонками досі детально не розглянута.

В теорії звичайного багатоелектронного атома є цілий ряд методів їх опису, що включають врахування в тій чи іншій мірі релятивістських, електрон-кореляційних і ядерних ефектів. Зазвичай в першу чергу вказуються такі відомі методи як релятивістський метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока (ХФ), метод Дірака-Фока в одно- і багато-конфігураційному наближенні, метод самоузгодженого поля ХФ з залежними від щільності силами (метод функціонала щільності), методи теорії збурень (ТЗ), включаючи КЕД ТЗ та інші, фактично всі, що базуються на наближенні самоузгодженого поля і моделі незалежних квазічастинок.

У теорії піонних атомів особливої актуальності набуває послідовне врахування геометрії атомного ядра, тобто використання не тільки формул сферично симетричного розподілу заряду в ядрі, але і явного врахування

несферичності. До цих пір ця задача, крім кількох спроб наближених оцінок [6, 7], далека від послідовного вирішення. Крім того, величезна актуальність вивчення надтонкої структури обумовлює необхідність в тому числі побудови послідовної релятивістської теорії, а також знання похідних по радіусу ядра і його масі різноманітних спектральних характеристик.

Практично у всіх роботах по спектроскопії піонних атомів для врахування поправки на кінцевий розмір ядра (ефект Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow), що досягає значень порядку одиниць кеВ, в гамільтоніан задачі вводився кінцево-розмірний потенціал, записаний в рамках моделей однорідно зарядженої кулі, моделі Гауса, спрощеної моделі Фермі.

Наступний принципово важливий аспект при побудові прецизійної теорії спектрів піонних атомів пов'язаний з урахуванням радіаційних, КЕД поправок до енергії атома (енергії переходів тощо) [1–4, 8, 9]. Для піонних атомів до їх числа відноситься, по-перше, ефект поляризації вакууму, і по-друге, менш істотний ефект, зумовлений власне-енергетичною частиною лембівського зміщення. У теорії звичайного багатоелектронного релятивістського атома аналогічні проблеми дуже добре відомі і розроблені численні підходи до прецизійного виселення, що, як правило, базуються на теорії збурень по $Z\alpha$ (Z – заряд ядра; α – постійна тонкої структури).

У більшості робіт зі спектроскопії піонних атомів адекватно врахований тільки основний перший член розкладання – потенціал Юлінга-Сербера. У серії робіт Мора, Вічмана-Кролла, Калена-Сабрі [9] були запропоновані пертурбативні схеми, що дозволяють обчислювати вакуумну поляризацію у всіх порядках по $\alpha^k(Z\alpha)^n$. Зручні методики із застосуванням до опису спектрів важких звичайних атомів і багатозарядних іонів запропоновані й реалізовані в роботах Деклокса-Інделікато, Мора, Саперштейна, Джонсона, Лабзовського, Шабаєва, Глушкова та інших. Однак слід зазначити, що основні методики, засновані на розкладанні внеску радіаційних поправок по $Z\alpha$ працюють тільки для систем з малим Z , тобто легких атомів. У разі важких піонних атомів, очевидно, пертурбативні методи в принципі не можуть забезпечити високу точність. Підходи, викладені в роботах [10–12], є досить послідовними, проте в практичній реалізації стикаються з серйозними

обчислювальними та іншими труднощами. Відома ефективна альтернативна методика запропонована в роботах під керівництвом Іванова-Іванової, в рамках якої вдосконалений потенціал типу Юлінга-Сербера вводиться безпосередньо в гамільтоніан задачі в нульовому наближенні ТЗ. Похибка обчислення поправки за рахунок поляризації вакууму з 10% в стандартному наближенні Юлінга-Сербера зменшується до десятих долей відсотка. Зауважимо, що для π -атомів зазначені методи повною мірою або не реалізовані або взагалі не застосовувалися. Відзначимо, що в згаданих вище «атомно-оптичних» теоріях π -атомів, як правило, розгляд обмежувався максимально можливим кількісно точним урахуванням суто електромагнітних ефектів і взаємодій.

Оскільки розміри піонних орбіт великі в порівнянні з радіусом ядра, для піона, який знаходиться в s -стані по відношенню до ядра, домінуючим є s -хвильова взаємодія між піоном і нуклоном. Аналогічним чином p -хвильова πN -взаємодія домінує, якщо піон знаходиться в p -стані відносно ядра, за умови, що ядро є досить малим.

Потенціал

$$V_N(r) = -2\pi\hbar^2 \mu_\pi^{-1} [ZA^{-1}a_p + (A-Z)A^{-1}a_n] \rho(r) \quad (4)$$

де $\rho(r) = \rho_n(r) + \rho_p(r)$ – сума щільностей нейтронів ρ_n і протонів ρ_p , приводить до зміщення енергії в $1s$ -стані. Сюди входять s -хвильові довжини $\pi^{-1}p$ -розсіювання $a_p = (2\alpha_1 + \alpha_3)/3$ і $\pi^{-1}n$ -розсіювання $a_n = \alpha_3$; $\rho(r)$ – розподілення щільності нуклонів. У випадку багатократного розсіювання при низьких енергіях є можливість розсіятися більше одного разу на одній і тій же частинці. З урахуванням цього ефекту потенціал модифікується до вигляду:

$$V_N(r) = -2\pi\hbar^2 \mu_\pi^{-1} \{ b_0 \rho(r) + b_1 [\rho_n(r) - \rho_p(r)] + \nabla f^{-1} (c_0 \rho(r) + c_1 [\rho_n(r) - \rho_p(r)]) \nabla \} \quad (5)$$

Тут ефективні параметри b_0 , b_1 і c_0 , c_1 тісно пов'язані з довжинами розсіяння b'_0 , b'_1 і c'_0 , c'_1 . Врахування кореляції на малих відстанях

приводить ще до ефекту Лорентц-Лоренца в p -хвильовій взаємодії, що приводить до множника f :

$$f = 1 + \xi(4\pi/3) \{c_0\rho(r) + c_1[\rho_n(r) - \rho_p(r)]\}. \quad (6)$$

$\xi = 0$ відповідає відсутності кореляцій, а $\xi = 1$ – випадку антикореляцій між нуклонами з дуже малою характерною відстанню.

Як показує аналіз отриманих результатів, точність енергетичних параметрів істотно коливається при переході від легких систем до важких, крім того, має місце суттєва різниця між розрахованими величинами енергій залежно від використаної параметризації. Крім того, в перелічених роботах упор зроблений на розгляд ефектів сильної взаємодії, в той час як інші електромагнітні ефекти враховані лише оціночно.

Висновки. В результаті, виконаний детальний огляд сучасних теоретичних «ядерно-електромагнітних» моделей методів розрахунку енергетичних і спектроскопічних характеристик піонних атомів показує, що сучасна теорія спектрів далека від кількісно прецизійного рівня опису цих систем, при чому для переважної кількості піонних атомів наявні або уривчасті, або взагалі відсутні дані по спектроскопічним параметрам.

Очевидно, що розвиток прецизійної теорії розрахунку енергетичних характеристик піонних атомів (як легких, так і багатоелектронних важких) повинен бути виконаний з одночасним коректним урахуванням як електромагнітної, так і сильної піон-нуклонної взаємодій, включаючи адекватне врахування релятивістських, електрон-кореляційних, радіаційних, ядерних ефектів, що є, безсумнівно, актуальним та фундаментальним завданням сучасної фізики піонних атомів (як і в цілому, адронних систем).

Отже, необхідно є розробка нового, прецизійного підходу до обчислення спектрів і спектроскопічних параметрів як легких, так і важких піонних атомів, заснованого на використанні релятивістського рівняння КГФ, вдосконаленої моделі оптичного потенціалу, КЕД теорії збурень з одночасним коректним урахуванням релятивістських, електрон-кореляційних, КЕД-радіаційних і ядерних ефектів.

Література

1. Yang F., Fundamentals of nuclear models [Text] / Yang F., Hamilton J.H., eds. // Singapore: World Scientific. – 2010. – 740 P.
2. Marciano W., Electromagnetic Probes of Fundamental Physics [Text] / Marciano W., White S., eds.-Singapore: World Scient. – 2003. – 560 P.
3. Deloff A., Fundamentals in Hadronic Atom Theory [Text] / Deloff A. – Singapore: World Sci., 2003. – 352 P.
4. Scherer S., Introduction to Chiral Perturbation Theory [Text] / Scherer S. // Advances in Nuclear Physics, Eds. J.W. Negele and E.W. Vogt (Berlin, Springer). – 2003. – Vol. 27. – P. 5–50.
5. Backenstoss G., Pionic atoms [Text] / Backenstoss G. // Ann. Rev. Nucl. Sci. – 1970. – Vol. 20. – P. 467–510.
6. Umemoto Y., Deeply bound pionic atoms on beta-unstable nuclei [Text] / Umemoto Y., Hirenzaki S., Kume K., Toki H., Tahihata I.// Nuclear Physics. – 2001. – Vol. A 679. – P. 549–562.
7. Ninomiya K., Initial angular momentum distribution of atomic pions in the formation process of pionic atoms [Text] / Ninomiya K., Nakagaki R., Nakatsuka T., Sugiura H., Itsuki Y., et al//Radiochem. Acta. – 2004. – Vol. 93. – P.513–520.
8. Ахиезер А.И. Квантовая электродинамика [Текст] / Ахиезер Александр Ильич, Берестецкий Владимир Борисович. – М.: Физматгиз, 1981. – 452 С.
9. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П., Квантовая электродинамика [Текст] / Берестецкий Владимир Борисович, Лифшиц Евгений Михайлович, Питаевский Лев Петрович. – М.: Наука, 1989. – 720 С.
10. Glushkov A.V., QED calculation of heavy multicharged ions with account for the correlation, radiative and nuclear effects [Text] / Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P.// Recent Advances in Theory of Physical and Chemical Systems (Springer). – 2006. – Vol.15. – P. 285–300.
11. Glushkov A.V., Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas [Text] / Glushkov A.V., Florko T.A., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Mischenko E.V., Svinarenko A.A. // Internat. Journal of Quantum Chemistry. – 2009. – Vol. 109. – P. 3325–3329.
12. Glushkov A.V., New laser-electron nuclear effects in the nuclear γ transition spectra in atomic and molecular systems [Text] / Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. // Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer). – 2008. – Vol. 18. – P. 523–540.

Надійшла до редакції 24.12.2014