

УДК 539.184

**А.В. Глушков,**д.ф.-м.н.
Одесский
государственный
экологический
университет
e-mail:
dirac13@mail.ru**О.Ю. Хецелиус,**д.ф.-м.н.
Одесский
государственный
экологический
университет
e-mail:
dirac13@mail.ru**Д.Е. Сухарев,**к.ф.-м.н.,
Одесский
государственный
экологический
университет
e-mail:
dirac13@mail.ru**А.Н. Шахман,**ассистент,
Одесский
национальный
политехнический
университет
e-mail:
anshakhman@mail.ru**ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ПЕРЕХОДОВ В ТЯЖЕЛЫХ
КАОННЫХ АТОМАХ: ЭФФЕКТЫ СИЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ****О.В. Глушков, О.Ю. Хецелиус,
Д.Е. Сухарев, А.Н. Шахман.****Оцінка енергії рентгенівських переходів в каонних атомах: Ефекти сильної взаємодії**

Робота присвячена розробці нового ab initio підходу до опису енергетичних параметрів каонних атомних систем з урахуванням релятивістських, радіаційних, ядерних ефектів на основі рівняння Клейна-Гордона-Фока та оцінки внеску ефектів електромагнітної та сильної взаємодії в енергії переходів.

**A.V. Glushkov, O.Yu. Khetselius,
D.E. Sukharev, A.N. Shakhman.****Estimation of energy of X-ray transitions in kaonic atoms: Strong interaction effects.**

Paper is devoted to carrying out new ab initio approach to description of energy spectra for kaonic atomic systems with account of the relativistic, radiative, nuclear effects within the Klein-Gordon-Fock equation and estimation of the strong interaction effects to the transition energies.

Введение. В последние годы в физике сильных взаимодействий и современной теории ядра активное развитие получили исследования экзотических адронно-атомных систем: каонных (КА), пионных и др. атомов. Понятие экзотического атома было впервые введено в 1947 г. еще Ферми, Теллером и Уилером с целью объяснения экспериментов по поглощению отрицательных мюонов в веществе. На данный момент изучение КА стало особенно актуальным в свете прогресса экспериментальных исследований (на мезонных фабриках в лабораториях LAMPF (США), PSI (Швейцария), TRIUMF (Канада), ИЯФ (г. Гроизк, Россия), RIKEN (КЕК, Япония), RAL (Великобритания) и др.) и дальнейшего существенного развития ядерной теории. Изучение спектров КА дает крайне важную информацию о свойствах ядра и самих адронов, о характере их взаимодействия с нуклонами в результате измерений энергий рентгеновских квантов, испускаемых при переходах адронов между ридберговскими состояниями. В современной математической и теоретической атомной физике имеется широкий круг различных методов расчета электрон-

ной структуры, энергетических и спектроскопических характеристик, в частности, методы самосогласованного поля Хартри-Фока и Дирака-Фока, методы квантового дефекта, модельного потенциала, функционала плотности, различные варианты теории возмущений (ТВ), включая ТВ Релея-Шредингера, Меллера-Плессета и т.д. (см., напр., [1–6]). Тем не менее, большинство из них до сих пор имеют целый ряд принципиальных недостатков (невыполнение принципа калибровочной инвариантности, использование неоптимизированных базисов орбиталей или недостаточно полный и корректный учет обменно-корреляционных поправок, плохая сходимость численных рядов и др.). Настоящая работа посвящена разработке нового подхода к описанию энергетических параметров КА с корректным учетом релятивистских, радиационных, ядерных эффектов на основе уравнения Клейна-Гордона-Фока и оценке вклада эффектов сильного взаимодействия в энергии переходов в спектрах ряда каонных атомов, включая атом водорода.

Материал и результаты исследования. Рассмотрим КА с каоном, находящимся на достаточно высокой орбите, чтобы вклад сильного взаимодействия был заведомо мал, и предположим, что КА пока не содержит электронных оболочек. Уравнение Клейна-Гордона-Фока в отсутствие сильного взаимодействия запишется в стандартном виде (ниже используются атомные единицы)

$$m^2 c^2 \Psi_0(x) = \left\{ \frac{1}{c^2} [i\hbar \partial_t + eV_0(r)]^2 + \hbar^2 \nabla^2 \right\} \Psi_0(x), \quad (1)$$

и при переходе к стационарной задаче

$$\Psi_0(x) = \exp(-iE_0 / \hbar) \varphi_0(r) \quad (2)$$

примет вид

$$\left\{ \alpha^2 [E - V_c(r)]^2 + \vec{\nabla}^2 - \mu^2 c^2 \right\} \psi(r) = 0 \quad (3)$$

где μ – приведенная масса каона, E – энергия каона, c – скорость света, V_c – сумма кулоновского ядерного потенциала, описывающего взаимодействие каона с конечно-размерным распределением заряда в ядре, вакуум-поляризованного потенциала и потенциала, обусловленного электронным зарядом (при наличии электронных оболочек).

Волновая функция связанного состояния представляется в обычной форме с учетом сферической симметрии потенциала в (3)

$$\Psi_{nlm}(r) = Y_{lm}(\theta, \phi) [p_{nl}(r) / r]. \quad (4)$$

Уравнение Клейна-Гордона-Фока является квадратичным по энергии, в отличие от дираковской теории атома. Радиальное уравнение, следующее из (3), представляется в виде системы двух уравнений первого порядка:

$$\frac{d}{dr} p = q, \quad (5a)$$

$$\frac{d}{dr} q = \left[\mu c^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha^2 (V_c - E)^2 \right] p, \quad (5b)$$

где p – радиальная часть волновой функции Клейна-Гордона-Фока.

При вычислении энергии используется условие, что функция q – непрерывна при $r=r_m$ (поворотная точка для потенциала V_c). Для уточнения полученного значения E используется вариация p , q :

$$(q + \delta q)_{r_m^+} = (q + \delta q)_{r_m^-} \quad (6)$$

В уравнении (5b) значения p , q , E заменяются соответственно значениями $p + \delta p$, $q + \delta q$, $E + \delta E$ так что

$$\frac{d}{dr} p + \frac{d}{dr} \delta p = q + \delta q \quad (7)$$

и

$$\frac{d}{dr} \delta q = \left[\mu c^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha^2 (V_c - E)^2 \right] \delta p + 2\alpha^2 (V - E) \delta E p \quad (8)$$

Умножая (7) на q и (8) на p и вычитая одно из другого, получаем

$$\frac{d}{dr} (p \delta q - q \delta p) = 2\alpha^2 (V_c - E) p^2 \delta E \quad (9)$$

Объединяя (7) и (9) и интегрируя, можно получить следующее выражение для поправки к энергии (уравнение Клейна-Гордона-Фока)

$$\delta E = \frac{p(r_m) [q(r_m^+) - q(r_m^-)]}{2\alpha^2 \int_0^{\infty} (V_c - E) p^2 dr} \quad (10)$$

Численное решение системы уравнений Клейна-Гордона-Фока выполняется на основе итерационной процедуры с использованием метода Рунге-

Кутта.

Важнейшим вопросом теории является адекватный выбор составляющих потенциала V_c в уравнениях (5). Ядерный потенциал определяется в модели Ферми, в рамках которой распределение заряда в ядре описывается функцией $\rho(r)$ вида [2, 3]

$$\rho(r) = \rho_0 / \{1 + \exp[(r - c) / a]\}, \quad (12)$$

где параметр $a=0.523$ фм, а параметр c выбирается таким образом, чтобы среднеквадратичный радиус удовлетворял выражению

$$\langle r^2 \rangle^{1/2} = (0.836 \cdot A^{1/3} + 0.5700) \text{ фм}. \quad (13)$$

Вакуум-поляризационный потенциал взят в форме, предложенной в [4] и детально описанной в [3]. Отметим, что для точечного ядра поляризационный потенциал Юлинга-Сербера (первый член разложения ТВ) имеет стандартный вид

$$U(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi r} \int_1^\infty dt \exp(-2rt/\alpha Z) (1 + 1/2t^2) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^2} \equiv -\frac{2\alpha}{3\pi r} C(g), \quad (14)$$

$$g = r / \alpha Z.$$

В основе процедуры [4] лежит аппроксимация с высокой точностью точного потенциала Юлинга-Сербера аналитической функцией (см., напр., [3]).

Далее рассмотрим методику оценки вклада искомого сильного взаимодействия в энергии уровней КА, когда каон находится на нижних ($n \sim 1$) орбитах. Энергия представима в виде суммы

$$E \approx E_{KG} + E_{FS} + E_{VP} + E_N, \quad (15)$$

Здесь E_{KG} – энергия каона в ядре (Z, A) с точечным зарядом,

E_N – сдвиг энергии за счет сильного взаимодействия – V_N ;

E_{FS} – вклад, обусловленный эффектом конечного размера ядра и каона,

E_{VP} – вклад, обусловленный радиационным эффектом поляризации вакуума, куда также добавлены все остальные релятивистские поправки.

Следует отметить, что вклад E_{KG} значительно превосходит по величине все остальные вклады в (15). При этом полезно заметить, что вклады E_{FS} и E_{VP} имеют следующие знаки:

$$E_{FS} < 0, \quad (16a)$$

$$E_{VP} > 0. \quad (16b)$$

Как правило, величина $E_N(Z)$ в КА может быть вычислена в рамках формализма ТВ. Действительно, соответствующий вклад определяется выражением:

$$E_N(n, l) = \int V_N(r) \phi_{n,l}^2(r) dr, \quad (17)$$

В ядерных расчетах широкое распространение для описания каон-нуклонного (в общем случае мезон-нуклонного) взаимодействия получила известная феноменологическая модель оптического потенциала (см., напр., [8]).

Полное уравнение Клейна-Гордона-Фока с учетом потенциала сильного каон-ядерного взаимодействия записывается в следующем виде:

$$\frac{d}{dr} \delta q = \left[\mu c^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \alpha^2 (V_c - E)^2 \right] \delta p + 2\alpha^2 (V - E) \delta E p. \quad (18)$$

В случае каон-нуклонной системы обычно используется потенциал типа Бати:

$$V_N = -\frac{2\pi}{\mu} \left[1 + \frac{M_K}{M_N} \right] [A_{Kp} \rho_p(r) + A_{Kn} \rho_n(r)], \quad (19)$$

где μ – приведенная каон-ядерная масса,

M_K и M_N – массы соответственно каона и нуклона,

$\rho_p(r), \rho_n(r)$ – протонная и нейтронная плотности в ядре,

A_{Kp}, A_{Kn} – комплексные эффективные длины Kp и Kn рассеяния.

Более простая реализация модели оптического потенциала сводится к выражению вида [8]:

$$V_N = -\frac{2\pi}{\mu} \left[1 + \frac{M_K}{M_N} \right] [a\rho(r)], \quad (20)$$

Здесь a – эффективная усредненная длина каон-нуклонного рассеяния.

Детальный анализ данных полученных для легких ядер позволил Бати и др. получить следующую оценку усредненной длины рассеяния a :

$$a = [(0.34 \pm 0.03) + i(0.84 \pm 0.03)] \text{ (фм)}. \quad (21)$$

Следует заметить, что ранее (см., напр., [8-10]) на примере изучения эффектов сильного взаимодействия в КА тяжелых элементов показано, что выражения (19)–(21), откалиброванные на ядрах легких элементов, оказываются, вообще говоря, не достаточно корректными для использования применительно к тяжелым КА.

Висновки. В таблице 1 представлены рассчитанные (С) и измеренные (М) обусловленные сильным взаимодействием энергетические сдвиги ΔE (в кэВ) для рентгеновских переходов для ряда тяжелых КА (из работ [6-10]). Рассчитанные (С) и измеренные (М) сдвиги ΔE (в кэВ), обусловленные сильным К-ядерным взаимодействием: а-оценка ΔE Миллера et al; б-оценка ΔE Cheng et al; с – теория Batty et al; d – наша теория (данные взяты из [6-10]).

Таблица 1

КА	ΔE_C^d	ΔE_C^c	ΔE_M
W, 8-7	0.038	-0.003	0.079 ^c 0.052 ^d
W, 7-6	-0.294	-0.967	-0.353 ^c -0.250 ^d
Pb, 8-7	0.046	-0.023	0.072 ^c 0.047 ^d
U, 8-7	-0.205	-0.189	0.12 ^a 0.032 ^b -0.405 ^c -0.213 ^d

Сдвиг ΔE определен как разность измеренного E_M значения энергии перехода и рассчитанного «электромагнитного» E_{EM} значения энергии перехода. Теоретические данные Batty et al [8] получены прямым решением уравнения Клейна-Гордона-Фока с каон-ядерным оптическим потенциалом (параметризация по легким ядрам Batty et al [8]). Кроме того, в таблице 1 приведены также данные измерений Miller et al и Cheng et al (из работ [10]). Дадим также краткий комментарий касательно данных Cheng et al, которые не проводили калибровку энергии выше энергии the 511 электрон-позитронной аннигиляции, однако, как указано Batty et al [8] соответствующая энергетическая разница не является существенной. Анализ представленных теоретических и экспериментальных данных показывает, что рассчитанные в рамках изложенной теории энергетические параметры сдвиги (ширины) за счет сильного взаимодействия, например, для КА W (7-6, 8-7 переходы), Pb (8-7 переход), приемлемо согласуются с данными измерений; согласие с предска-

занием феноменологической модели оптического потенциала Batty et al имеется только в случае $KA W$ (7-6 переход) и U (8-7 переход), в то время как в остальных случаях имеют место значительные отличия, что, по-видимому, связано с некорректностью модели оптического потенциала, откалиброванной по параметрам легких ядер и неучетом разницы в протонном и нейтронном распределениях. Очевидно, что для тяжелых KA параметры оптического потенциала должны быть уточнены. С другой стороны, общеизвестно, протонные и нейтронные плотности, на самом деле, существенно отличаются. Плотность протонов спадает на периферии ядра в “ядерной стратосфере” быстрее, чем плотность нейтронов (нейтронное гало). В случае хорошего согласия теоретических результатов с экспериментальными данными по энергиям переходов между определенными уровнями, очевидно, роль эффектов короткодействующего сильного взаимодействия (каон находится на слишком большом расстоянии от ядра) достаточно мала. В противоположном случае учет эффектов сильного взаимодействия оказывается принципиально важен.

Література

1. Santos, J. P. X-ray energies of circular transitions and electron scattering in kaonic atoms [Text] / Santos J.P., Parente F., Boucard S., Indelicato P., Desclaux J.P. // Phys.Rev.A. – 2005. – Vol.71. – P. 032501.
2. Grant, I. P. Relativistic quantum theory of atoms and molecules [Text] / N.-Y.: Springer, 2007. – 286 p.
3. Глушков, А. В. Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем [Текст] / Александр Васильевич Глушков. – Одесса: Астропринт, 2008. – 900 с.
4. Ivanova, E. P. High order corrections in the relativistic perturbation theory with the model zeroth Approximation, Mg-like and Ne-like ions [Text] / Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. // Phys. Scripta. – 1985. – Vol.32. – P. 512–524.
5. Glushkov, A. V. Relativistic quantum chemistry of heavy ions and hadronic atomic systems: Spectra and energy shifts [Text] / Glushkov A.V., Sukharev D.E., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P. // Theory and Applications of Computational Chem. – 2009. – Vol. 1102. – P. 168–171.
6. Tjurin, A. V. Estimating of X-ray spectra for kaonic atoms as tool for sensing the nuclear structure [Text] / Tjurin A.V., Khetselius O.Yu., Sukharev D.E., Florko T.A. // Sensor Electr. and Microsyst. Techn. – 2009. – Vol. 1(7). – P. 30–35.
7. Сухарев, Д. Е. Эффекты сильного взаимодействия в теории каонных систем [Текст] / Д.Е. Сухарев, И.Н. Серга, А.Н. Шахман // Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту. – 2011. – № 12. – С. 229–233.
8. Batty, C. J., Strong interaction effects in high $Z-K^-$ atoms [Text] / Batty C.J., Eckhause M., Gall K.P., et al // Phys. Rev. C. – 1989. – Vol. 40. – P. 2154–2160.
9. Leon, M., Cross-sections of atomic capture for negative mesons [Text] / Leon M., Seki R., // Phys. Rev. Lett. – 1974. – Vol. 32. – P. 132–136.
10. Chen, M. Y., E2 dynamic mixing in p and K^- atoms of ^{207}Pb , ^{238}U [Text] / Chen M.Y., Asano Y., Cheng S.C., Dugan G., Hu E., Lidofsky L., Patton W., Wu C.S. // Nucl. Phys. A. – 1975. – Vol. 254. – P. 413–421.