

УДК 539.184

А.Н. Шахман, аспирант, Одесский национальный политехнический университет,
Д.Е. Сухарев, к.ф.-м. н., Одесский государственный экологический университет

ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ПЕРЕХОДОВ В КАОННЫХ АТОМНЫХ СИСТЕМАХ

А.М. Шахман, Д.С. Сухарев. Оцінка енергії рентгенівських переходів в каонних атомних системах. Работа посвящена разработке нового ab initio подхода 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.N. Shakhman, D.E. Sukharev. Estimation of energy of X-ray transitions in kaonic atomic systems. The paper is devoted to designing of new ab initio approach to description of energy spectra for kaonic atomic systems with taking into account of the relativistic, radiative, nuclear effects based on the Klein-Gordon-Fock equation and estimation of the strong interaction effects to the transition energies.

Введение. В физике сильных взаимодействий и современной теории ядра в последние годы 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.

В последние годы изучение КА стало особенно актуальным в свете прогресса экспериментальных исследований (на мезонных фабриках в лабораториях LAMPF (США), PSI (Швейцария), TRIUMF (Канада), ИЯФ (г. Троицк, 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 электронной 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)

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

и при переходе к стационарной задаче

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

примет вид

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

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-поляризационного 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-Кутты.

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

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

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

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

Остальные тривиальные аспекты теории изложены в работах [5–7].

Выводы. В таблице 1 представлены рассчитанные (электромагнитные) (E_c) и измеренные (E_m) энергии (кэВ) рентгеновских переходов в ряде КА. Переходы идентифицируются квантовыми числами начального (n_i) и конечного (n_f) состояний каона. Представленные теоретические данные: результаты Batty et al [8] с использованием простейшей каскадной модели Fermi-Teller (так называемый код Leon-Seki [9]), результаты Indelicato et al [1] и результаты, полученные в рамках нашей теории. Экспериментальные данные получены на установке Brookhaven Alternating Gradient Synchrotrone (AGS) (см. детали в [8, 10]).

Следует отметить, что, очевидно, в случае хорошего согласия теоретических результатов с экспериментальными данными по энергиям переходов между определенными уровнями, эти уровни мало чувствительны к эффектам короткодействующего сильного взаимодействия (каон находится на слишком большом расстоянии от ядра). В противоположном случае учет эффектов сильного взаимодействия крайне важен.

Таблиця 1

Рассчитанные электромагнитные (E_c) и измеренные (E_m) энергии (кэВ) рентгеновских переходов в ряде КА: результаты Batty et al теор EM1,2 [8] с использованием простейшей каскадной модели Fermi-Teller (Leon-Seki), результаты Indelicato et al (теор EM3) [1] и результаты нашей теории (теор EM4)

КА	Перех.	E_c , наст. теор EM4	E_c , [8] теор EM1	E_c , [8] теор EM2	E_c , [1] теор EM3	E_m , [8]
Li	3-2	15.335	15.392	15.319	15.330	15.320(24) 15.00(30)
K	5-4	105.962	105.970	–	105.952	105.86 (28)
W	8-7	346.586	346.54	–	346.571	346.624(25)
W	7-6	535.180	535.24	–	535.240	534.886(92)
Pb	8-7	426.1748	426.15	426.201	426.180	426.221(57)
U	8-7	538.520	538.72	538.013	537.44	538.315(100)

Литература

1. Santos J.P. X-ray energies of circular transitions and electron scattering in kaonic atoms [Text] / J.P. Santos, F. Parente, S. Boucard, P. Indelicato, J.P. Desclaux // Phys. Rev. A. – 2005. – Vol. 71. – P. 032501.
2. Grant I.P. Relativistic quantum theory of atoms and molecules [Text] / I.P. Grant. N.-Y.: Springer, 2007. – 286 p.
3. Глушков А.В. Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем [Текст] / А.В. 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] / E.P. Ivanova, L.N. Ivanov, A.V. Glushkov, A.E. Kramida // 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] / A.V. Glushkov, D.E. Sukharev, O.Yu. Khetselius, E.P. Gurnitskaya, A.V. Loboda // 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] / A.V. Tjurin, O.Yu. Khetselius, D.E. Sukharev, T.A. Florco // 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] / C.J. Batty, M. Eckhause, K.P. Gall // Phys. Rev. C. – 1989. – Vol. 40. – P. 2154–2160.
9. Leon M. Cross-sections of atomic capture for negative mesons [Text] / M. Leon, R. Seki // 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] / M.Y. Chen, Y. Asano, S.C. Cheng, G. Dugan, E. Hu, L. Lidofsky, W. Patton, C.S. Wu // Nucl. Phys. A. – 1975. – Vol. 254. – P. 413–421.