Письма в ЖЭТФ, том 107, вып. 2, с. 99 – 103 © 2018 г. 25 января

О бозонных атомах

М. Я. Амусья[+*1)2)], Л. В. Чернышева[*]

[+]Институт физики Рака, Еврейский университет, 91904 Иерусалим, Израиль

[*]Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 194021 Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 9 ноября 2017 г.

После переработки 4 декабря 2017 г.

Исследуются свойства основного состояния атомов, в которых электроны–фермионы заменены на бозоны, а именно на π^--мезоны. Вычисления выполнены в рамках модифицированного приближения Хартри–Фока (ХФ). Модификация учитывает то, что волновые функции пары одинаковых бозонов симметричны, а не антисимметричны относительно перестановок координат пары. Таким образом, модифицированное ХФ-приближение усиливает (удваивает) эффект самодействия для случая бозонов. Поэтому мы соответственно модифицируем уравнения ХФ, удаляя члены, описывающие самодействие, "вручную". Вклад мезон-мезонного и мезон-нуклонного некулоновского взаимодействия несущественен, по крайней мере, для атомов с низким и промежуточным ядерными зарядами, которые являются нашим основным объектом. Обнаружено, что энергия связи отрицательных пионных ионов A_π^-, пионных атомов A_π и число дополнительных связанных пионов ΔN_π в отрицательном ионе увеличивается с ростом заряда ядра Z. Например, для Xe имеем $\Delta N_\pi = 4$. В качестве примера простого процесса с участием пионного атома рассмотрена фотоионизация, которая существенно отличается от таковой для электронных атомов. А именно, ее сечение не убывает монотонно от порога, а имеет вид значительного максимума, расположенного выше порога. Также изучено упругое рассеяние пионов на пионных атомах.

DOI: 10.7868/S0370274X18020042

1. Современные коллайдеры тяжелых ионов способны создавать очень большое число $\pi^\mp$-мезонов (пионов) в каждом акте ионного столкновения. В шкале ядерных столкновений время жизни $\pi^\mp$-мезонов ($2.6 \cdot 10^{-8}$ с) довольно велико, поэтому ионы-снаряды или мишени могут захватывать отрицательные пионы в процессе ядерного взаимодействия и образовывать пионные атомы. Образование этих атомов становится источником излучения фотонов с довольно специфическим спектром, форма которого определяется наименьшей возможной энергией связи пиона в ядерном поле. Каждый ион или атом может захватывать несколько пионов, поэтому взаимодействие между ними может быть существенным, и его нужно учитывать. Структура такого объекта, как пионный атом, интересна сама по себе. Это – первая цель нашего Письма.

В настоящее время отправной точкой при исследовании свойств основного состояния и процессов в обычных (т.е. электронных) атомах являются уравнения Хартри–Фока (ХФ). Поэтому естественно применять к пионным атомам должным образом модифицированные уравнения ХФ.

Однако осуществить подобную модификацию оказывается непросто. Таким образом, вторая цель этого письма – демонстрация неожиданной особенности уравнений ХФ, возникающей при применении их к бозонным системам, и описание способа ее устранения.

2. Уравнение ХФ для многоэлектронных атомов выглядит (см., например, [1]) следующим образом:

$$-\frac{\Delta}{2}\phi_j(x) - \frac{Z}{r}\phi_j(x) + \sum_{k=1}^{N_e}\int \phi_k^*(x')\frac{dx'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \times$$
$$\times \left[\phi_k(x')\phi_j(x) - \phi_j(x')\phi_k(x)\right] = E_j\phi_j(x), \qquad (1)$$

где Z – заряд ядра, $\phi_j(x)$ – одноэлектронная волновая функция, $x \equiv \mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}$ представляют собой комбинацию электронной координаты и спиновых переменных, E_j – одноэлектронная или так называемая ХФ-энергия; суммирование проводится по всем занятым электронным состояниям N_e.

Второй член в квадратных скобках в (1) был введен Фоком, и поэтому носит название фоковского. Знак минус перед ним является следствием ферми-природы электронов. Он автоматически удаляет самодействие, т.е. действие каждого атомного электрона на себя. Действительно, благодаря ему вклад от члена $k = j$ в сумме по k в (1) исчезает.

1)e-mail: amusia@vms.huji.ac.il

2)M.Yu. Amusia.

Уравнение, аналогичное (1) для бозонов, должно было бы иметь вид

$$-\frac{\Delta}{2}\chi_j(x)-\frac{Z}{r}\chi_j(x)+\sum_{k=1}^{N_\pi}\int\chi_k^*(x')\frac{dx'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\times$$

$$\times\left[\chi_k(x')\chi_j(x)+\chi_j(x')\chi_k(x)\right]=E_j\chi_j(x). \quad (2)$$

Здесь знак плюс вместо минуса в квадратной скобке учитывает, что волновая функция бозонов, представленная как симметризованное произведение одночастичных волновых функций бозонов атома, симметрична относительно перестановки спиновых и координатных переменных. В результате это уравнение для бозонов не устраняет самодействия. Напротив, оно только его удваивает. Суммирование в (2) происходит по всем состояниям пиона.

Если межчастичное взаимодействие представляет собой не дальнодействующее кулоновское $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$, а является короткодействующим, например $u_0\delta(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$, и взаимодействие, которое удерживает всю систему в качестве единого целого, не есть ядерный кулоновский потенциал $-Z/r$, но нечто более общее $U(r)$, то уравнение (2) сводится к следующему:

$$-\frac{\Delta}{2}\chi_j(\mathbf{r})+U(r)\chi_j(\mathbf{r})+2u_0\sum_{k=1}^{N_\pi}|\chi_k(\mathbf{r})|^2\chi_j(\mathbf{r})=E_j\chi_j(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Мы видим, что устранение самодействия в ХФ, достигаемое антисимметризацией волновой функции в ферми-системе, приводит для бозе-систем к нефизическому усилению самосогласованного поля в два раза. После удаления этого фактора “вручную” выражение (3) переходит в так называемое уравнение Гросса–Питаевского [2]:

$$-\frac{\Delta}{2}\chi_j(\mathbf{r})+U(r)\chi_j(\mathbf{r})+u_0\sum_{k=1}^{N_\pi}|\chi_k(\mathbf{r})|^2\chi_j(\mathbf{r})=E_j\chi_j(\mathbf{r}), \quad (4)$$

которое включает самодействие, несущественное для большой системы. Однако нас интересуют в основном легкие и средние атомы, поэтому мы должны использовать ту версию уравнения (2), которая получается путем исключения в сумме по k члена $k=j$. Так как все атомные пионы могут находиться в одном низшем состоянии k, мы должны решить уравнение

$$-\frac{\Delta}{2}\chi_j(\mathbf{r})-\frac{Z}{r}\chi_j(\mathbf{r})+(N_\pi-1)\int\chi_k^*(\mathbf{r}')\frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\times$$

$$\times\left[\chi_k(\mathbf{r}')\chi_j(\mathbf{r})+\chi_j(\mathbf{r}')\chi_k(\mathbf{r})\right]=E_j\chi_j(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Предполагая, что все пионы занимают один и тот же уровень, вместо (5) получаем

$$-\frac{\Delta}{2}\chi_k(\mathbf{r})-\frac{Z}{r}\chi_k(\mathbf{r})+2(N_\pi^k-1)\times$$

$$\times\int|\chi_k(\mathbf{r})|^2\frac{dr'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}=E_k\chi_k(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Отношение $\rho_k(\mathbf{r})=N_{\pi,k}|\chi_k(\mathbf{r})|^2$ определяет плотность пионов $\rho_k(r)$ в атоме.

3. Мы численно решили (6) и получили ХФ-энергии 1s-уровня, полные энергии и среднеквадратичные радиусы пионных атомов и отрицательных пионных ионов с $Z=2-80$. В табл. 1 представлены результаты для ряда пионных атомов и отрицательных ионов для He, Ne, Ar, Zn, Kr и Xe и обычных атомов.

Согласно данным, представленным в табл. 1, полная энергия связи пионного атома намного больше, чем у обычного атома, также в несколько раз больше его размер. Размеры и энергии выражаются в пионных и нормальных атомных единицах соответственно. Потенциал ионизации $(-E_{1\mathrm{s}})$ пионного атома намного меньше потенциала ионизации обычного, электронного атома.

Интересной особенностью пионного атома является его способность легко образовывать отрицательные ионы. Для пионного He, Ne и Ar мы предсказываем возможное образование единичных отрицательных ионов пионов He_π^-, Ne_π^-, Ar_π^-. Для Zn становится возможным образование Zn_π^- и Zn_π^{-2}; Kr может образовывать до Kr_π^{-3}, в то время как Xe способен присоединять дополнительно до четырех пионов, что приводит к Xe_π^{-4}. Мы провели вычисления до $Z=137$; при этом значении кулоновская нерелятивистская энергия связи близка к массе покоя пиона, и необходим релятивистский подход наряду с учетом конечных размеров ядра. Поэтому представленные на рис. 1 данные для атомов с большим Z предназначены только для ориентировки.

Заметим, что для пионных атомов такое понятие, как “благородный газ”, не существует, так как пионные оболочки также не существуют. Заметим также, что такие большие значения Z и даже бо́льшие могут быть достигнуты временно, во время быстрых столкновений между тяжелыми ионами.

На рис. 1 представлена зависимость числа дополнительных связанных пионов $\Delta N_\pi=N_z^{-n_{\max}}-N_\pi$ как функции ядерного заряда Z. Наибольшая вариация Z, необходимая для достижения $\Delta N_\pi=1$, равна 2-22 и 57-80. Первая половина последней вариации совпадает с лантанидами, что кажется случайностью.

Таблица 1. Энергии 1s-уровня E_{1s}, полная энергия основного состояния E_{tot}, и среднеквадратичный радиус $\langle r^2_{1s}\rangle$ π-мезонных атомов и отрицательных ионов и обычных атомов

Пионные атомы	$-E_{1s}$	$-E_{\text{tot}}$	$\langle r^2_{1s}\rangle$	Обычные атомы	$-E_{1s}$	$-E_{\text{tot}}$	$\langle r^2_{1s}\rangle$
He $1s^2$	1.8359	5.723	1.1847	He $1s^2$	1.8359	5.723	1.1847
He $1s^3$	0.3679	5.856	2.3036				
He $1s^4$	*no*						
Ne $1s^{10}$	15.083	528.70	0.07912	Ne $1s^2$	65.545	257.09	0.0335
Ne $1s^{11}$	9.244	536.72	0.0941				
Ne $1s^{14}$	*no*						
Ar $1s^{18}$	40.14	2976.96	0.0263	Ar $1s^2$	237.22	1053.64	0.0099
Ar $1s^{19}$	29.95	3003.69	0.0290				
Ar $1s^{20}$	*no*						
Zn $1s^{30}$	99.91	13533.4	0.0098	Zn $1s^2$	706.61	3555.70	0.0035
Zn $1s^{31}$	83.2	13613.3	0.0105				
Zn $1s^{32}$	67.33	13676.7	0.0112				
Zn $1s^{33}$	*no*						
Kr $1s^{36}$	139.78	23281.9	0.00689	Kr $1s^2$	1040.33	5504.11	0.0024
Kr $1s^{37}$	119.81	23397.2	0.00726				
Kr $1s^{38}$	100.67	23493.3	0.00767				
Kr $1s^{39}$	82.40	23570.9	0.00812				
Kr $1s^{40}$	*no*						
Xe $1s^{54}$	299.32	77991.3	0.00312	Xe $1s^2$	2448.80	14464.3	0.00106
Xe $1s^{55}$	269.57	78254.2	0.00323				
Xe $1s^{56}$	240.66	78488.0	0.00335				
Xe $1s^{57}$	212.60	78693.6	0.00347				
Xe $1s^{58}$	185.41	78871.8	0.00361				
Xe $1s^{59}$	*no*						

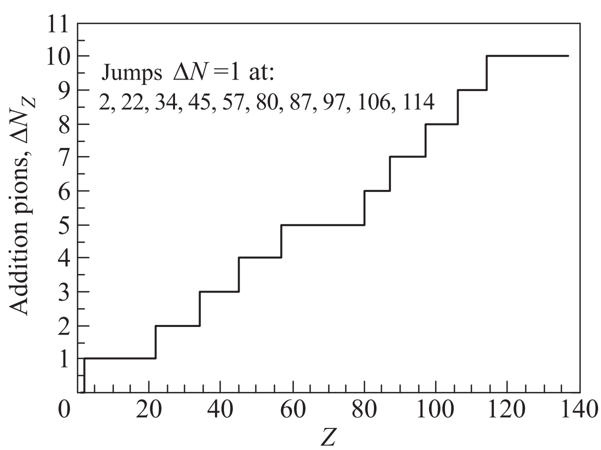

Рис. 1. Число дополнительных пионов $\Delta N_\pi = N_\pi^{-n_{\max}} - N_\pi$

4. Интерес представляют процессы взаимодействия налетающих частиц с пионными атомами. Рассмотрим сначала фотоионизацию. Уравнение (6) для $E \geq 0$ определяет волновые функции непрерывного спектра $\chi_E(\mathbf{r})$, которые автоматически ортогональны к волновой функции занятого уровня, и учитывают, что вылетающий пион движется в поле, образующимся за счет удаления ионизованного пиона. Следующее соотношение определяет сечение фотоионизации (см., например, [3]):

$$\sigma_k(\omega) = \frac{4\pi^2 N_\pi}{\omega c}\left|\langle\chi_{\omega+E_k}|\hat{d}|\chi_k\rangle\right|^2. \qquad (7)$$

Здесь $\hat{d}$ – оператор фотон-пионного взаимодействия; c – скорость света.

На рис. 2 представлены результаты расчетов с использованием комплекса программ ATOM-M [4] для He, Ne, Kr и Ar. Мы сравниваем результаты для пионных атомов с результатами для обычных атомов, представленных в соответствующих атомных единицах a_0.

Для обычных атомов сечение монотонно уменьшается с ростом энергии фотонов от максимального значения на пороге. Для атома пиона сечение, напротив, достигает своего максимального значения выше порога ионизации, тем самым формируя выраженные максимумы, высота которых уменьшается,

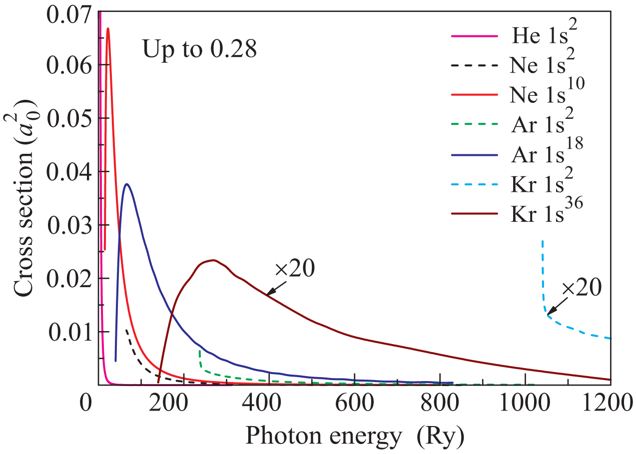

Рис. 2. (Цветной онлайн) Сечение фотоионизации пионных и обычных атомов в относительных атомных единицах как функция энергии фотона в Ry и Ry_π. Заметим, что множитель 20 введен для $\mathrm{Kr}\,1s^{36}$

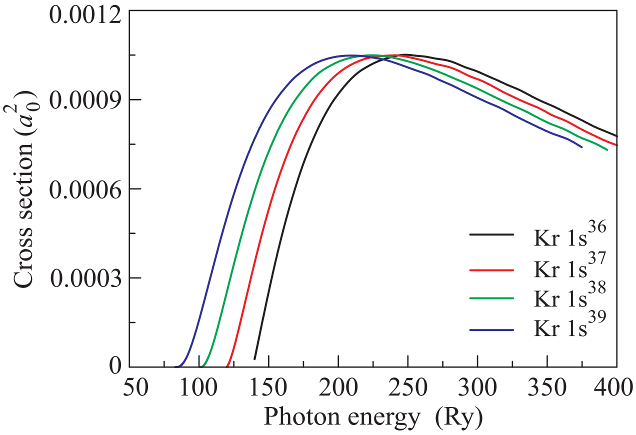

Рис. 3. (Цветной онлайн) Фотоионизация пионного атома Kr и его отрицательных ионов

а ширина увеличивается с ростом Z. Область под кривой фотоионизации удовлетворяет, естественно, дипольному правилу сумм (см., например, [3]). Причина этого различия в сечениях является результатом разных самосогласованных полей в фермионных и бозонных атомах. В первом случае обменный член является притяжением и увеличивает действие ядерного потенциала. Во втором случае обмен увеличивает действие отталкивания между частицами, тем самым увеличивая потенциальный барьер, который должна преодолеть уходящая частица, чтобы покинуть атом. Чем сильнее эффект ядерного заряда, тем больше сечение на пороге. Чем меньше эффект ядерного заряда, тем больше барьер, и, тем самым, тем меньше сечение на пороге и тем быстрее он увеличивается с ростом энергии фотонов.

На рис. 3 представлена зависимость сечения фотоионизации от ΔN для $\Delta N = 0 \div 3$. Мы видим, что с увеличением ΔN порог ионизации уменьшается, а сечение почти как целое перемещается в сторону более низких энергий. Заметим, что для нейтральных пионных атомов на пороге сечения фотоионизации имеется типичный для дальнодействующего кулоновского поля, но малый по сравнению с обычными атомами, скачок. Этот скачок, как известно из исследований обычной фотоионизации атомов (см. [1] и ссылки там), есть следствие дальнодействия кулоновского поля, влияющего на уходящий пион при фотоионизации нейтрального атома. Для отрицательных ионов сечение начинает увеличиваться с нулевого значения на пороге фотоионизации из-за конечного радиуса сил, действующего на уходящий пион. Малое значение сечения на пороге в нейтральном атоме (см. рис. 3) показывает, что интенсивность дискретного p-возбуждения в нейтральных атомах, вопреки случаю обычных атомов, мала.

Заметим, что мы не смогли найти дискретные возбуждения в отрицательных ионах пиона, что отличается от случая нейтрального атома. Мы пришли к заключению, что их не существует.

На рис. 4 представлено сечение и s-фаза упругого рассеяния пионов на $\mathrm{Kr}\,1s^{36}$. В рассматриваемом

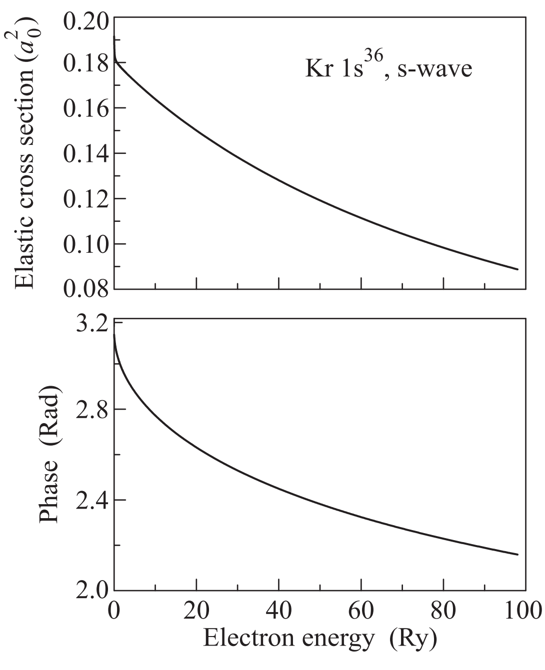

Рис. 4. Сечение упругого рассеяния пиона на $\mathrm{Kr}\,1s^{36}$

диапазоне энергий все $l > 0$ фазы пренебрежимо малы. Это означает, что связанные состояния с $l > 0$ не существуют. В то же время, s-фазы достигают значения π при нулевой энергии, что свидетельствует о наличии однозарядного отрицательного иона Kr $1s^{37}$. Из табл. 1 следует, что на самом деле существует даже трижды заряженный ион Kr $1s^{39}$. Это означает, что образование двух- и трехкратно заряженных отрицательных ионов происходит за счет изменения самосогласованного поля отрицательного иона с ростом N.

Заметим, что при исследовании π^+-рассеяния на пионном атоме, например, Kr $1s^{36}$, взаимодействие π^+ и π^- с образованием связанного атома пиония может быть очень важным. Заметим также, что компактный атом $\pi^+\pi^-$ из-за малого радиуса и нейтральности может проникать глубоко и в обычный – электронный атом.

Сечение рассеяния электронов на атоме пиона, например рассмотренного выше Kr $1s^{36}$, меньше пионного на коэффициент $\beta^2 \equiv (m_e/m_\pi)^2 \simeq 1.34 \cdot 10^{-5}$, чем в [5].

5. Впервые мы рассмотрели чисто многопионные атомы и отрицательные ионы, их свойства и процессы с их участием. Полученные результаты в некоторой степени удивительны и существенно отличаются от результатов для обычных атомов. В проведенном рассмотрении мы пренебрегли ядерными силами между пионами и нуклонами. Они, однако, в основном носят характер притяжения, а поэтому могут привести к прилипанию дополнительных пионов к ядру. Их роль станет решающе важной только при $Z \approx 100$, когда боровский радиус для пи-мезона сравнивается с радиусом действия ядерных сил, равным 10^{-13} см. Эта грубая оценка только усиливается за счет межпионного кулоновского отталкивания, которое, как видно из табл. 1, существенно увеличивает радиус 1s-орбиты.

Было бы интересно получить экспериментальные данные о многопионных атомах, образованных при столкновении тяжелых атомов. В исследованиях бозонных атомов было бы интересно выйти также за пределы приближения самосогласованного поля. Отметим, что С.Т. Беляев и ряд других ученых уже давно вычислили спектр энергии и возбуждения для бесконечного однородного бозе-газа с короткодействующим межбозонным взаимодействием (см., например, [6]).

1. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, *Computation of atomic processes*, Bristol and Philadelphia: Institute of physics Publishing (1997).
2. L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose–Einstein Condensation*, Oxford: Clarendon Press (2002).
3. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. G. Yarzhemsky, *Handbook of Theoretical Atomic Physics*, Springer, Berlin (2012).
4. М. Я. Амусья, С. К. Семенов, Л. В. Чернышева, *АТОМ-М: Алгоритмы и программы для исследования атомных и молекулярных процессов*, Наука, СПб. (2016), 551 с.
5. M. Ya. Amusia, Few Body Systems **58**, 88 (2017).
6. N. M. Hugenholtz and D. Pines, Phys. Rev. **116**(3), 489 (1959).