

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЯДЕРНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»»

УДК 539.165.2

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ
МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СТРУКТУРЫ ТЕМНЫХ
АТОМОВ

Научный руководитель

д.ф.-м.н, проф.

_____ Хлопов М. Ю.

Научный консультант

_____ Сопин Д. О.

Студент

_____ Мвилима Д.

Москва 2024

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--|-----------|
| Введение | 3 |
| 1 Теоретические основы модели | 4 |
| 2 Методы и численная реализация | 5 |
| 2.1 Физическая постановка задачи и гамильтониан | 5 |
| 2.2 Стационарная задача | 5 |
| 2.3 Эволюция воображаемого времени | 6 |
| 2.4 Проекция на основное состояние | 6 |
| 2.5 Метод расщепления операторов | 7 |
| 2.6 Быстрое преобразование Фурье (FFT) и дискретизация | 7 |
| 2.6.1 Обозначения и нормировки | 7 |
| 2.6.2 Сетка в пространстве импульсов | 8 |
| 2.6.3 Кинетический пропагатор | 8 |
| 2.7 Потенциал Гартри через свёртку | 8 |
| 2.8 Пошаговый алгоритм ИТР (реализация в коде) | 9 |
| 2.9 Оценка энергии | 10 |
| 3 Заключение | 12 |
| Список литературы | 13 |

ВВЕДЕНИЕ

Доказательства поведения галактик, гравитационного линзирования и анизотропии космического микроволнового фона указывают на существование небарионной скрытой массы, и хотя такие кандидаты, как WIMPs и SUSY-частицы, еще предстоит обнаружить на Большом адронном коллайдере (БАК), в этой работе рассматривается квантово-механическое описание темных атомов в качестве альтернативной возможности. Темный атом представляет собой связанное состояние нового тяжелого лептона X^{-2n} и n ядрами ${}^4\text{He}$ [1]. Как показано в этой статье, модель может объяснить парадоксы поиска частиц скрытой массы в подземных экспериментах. Свойства темных атомов определяются их структурой, анализ которой и является целью настоящей работы.

Цель: В этой работе мы исследуем многочастичную структуру темных атомов. Мы используем модифицированную версию метода Хартри-Фока [3], исходя из того, что наша модель темного атома представляет собой бозонный атом, поскольку обычные электроны (фермионы) заменены бозонными ядрами гелия. Затем мы переходим к расчету энергии основного состояния этой структуры с учетом статистики Бозе–Эйнштейна, которая показывает, что все ядра гелия будут занимать один и тот же самый низкий энергетический уровень [2].

1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МОДЕЛИ

Темный атом представляет собой связанное состояние нового тяжелого лептона X^{-2n} и n ядрами ${}^4\text{He}$ [1]. Поскольку уравнения Хартри–Фока в настоящее время являются отправной точкой для исследования обычных атомов (электронных атомов), мы начинаем с модифицированных уравнений Хартри–Фока. В нашем численном приближении, при больших значениях n , структура темного атома демонстрирует коллективное поведение, однако в данной работе мы рассматриваем относительно малое число частиц n и учитываем только кулоновские взаимодействия.

Модифицированное уравнение Хартри–Фока [3] (в одноорбитальном приближении, подставляя бозонную статистику) принимается в виде (аналогично формулировке для пионных атомов, с заменой частиц на ${}^4\text{He}$):

$$-\frac{\Delta}{2}\phi_k(\mathbf{r}) - \frac{Z}{r}\phi_k(\mathbf{r}) + 2(N-1) \int \frac{|\phi_k(\mathbf{r}')|^2 d^3\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_k(\mathbf{r}) = E_k \phi_k(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Это уравнение предполагает, что все ядра гелия занимают одинаковый энергетический уровень (бозе-конденсация в одноорбитальное состояние), и служит отправной точкой для численного решения методом эволюции воображаемого времени (ИТР).

2. МЕТОДЫ И ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

2.1 Физическая постановка задачи и гамильтониан

Рассматривается одномодовая орбиталь $\psi(\mathbf{r})$, описывающая поведение бозона в трёхмерном пространстве. Гамильтониан принимается в следующем виде:

$$H = T + V_{\text{ext}} + V_H[\rho], \quad (2)$$

где

$$T = -\frac{1}{2}\nabla^2, \quad (3)$$

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r}, \quad (4)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2. \quad (5)$$

Потенциал Гартри задаётся кулоновской свёрткой плотности:

$$V_H(\mathbf{r}) = 2(N-1) \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'. \quad (6)$$

Вопросы применения среднепольных приближений и их связь с задачами многих частиц обсуждаются в классической литературе [4, 5].

2.2 Стационарная задача

Требуется решить нелинейную задачу собственных значений

$$H\psi = E\psi, \quad (7)$$

где E — энергия основного состояния. Условием самосогласованности является зависимость V_H от ψ через плотность (6). В дальнейшем используются атомные единицы ($\hbar = 1$, $m = 1$).

2.3 Эволюция воображаемого времени

Начнём с уравнения Шрёдингера во времени:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = H\Psi(\mathbf{r}, t).$$

Выполнив Вики-поворот $t = -i\tau$, получим уравнение эволюции воображаемого времени:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\Psi(\mathbf{r}, \tau) = -H\Psi(\mathbf{r}, \tau), \quad (8)$$

с формальным решением $\Psi(\tau) = e^{-\tau H}\Psi(0)$.

2.4 Проекция на основное состояние

Разложим начальную функцию по собственным состояниям стационарной задачи: $\Psi(0) = \sum_n c_n \phi_n$. Тогда

$$\Psi(\tau) = \sum_n c_n e^{-E_n \tau} \phi_n.$$

При $\tau \rightarrow \infty$ вклады с большими E_n экспоненциально подавляются, и остаётся доминирующий вклад основного состояния ϕ_0 . Этот принцип используется в численных алгоритмах ИТР для поиска основного состояния [10, 11].

На практике один шаг итерации включает:

1. применение коротковременного пропагатора;
2. нормировку волновой функции;
3. обновление плотности и потенциала Гартри.

2.5 Метод расщепления операторов

Для численной реализации оператора $e^{-\Delta\tau H}$ удобно разделять $H = T + V$, где $V(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r})$. Симметричное разложение Стрэнга второго порядка:

$$e^{-\Delta\tau(T+V)} \approx e^{-\frac{\Delta\tau}{2}V} e^{-\Delta\tau T} e^{-\frac{\Delta\tau}{2}V} + \mathcal{O}(\Delta\tau^3),$$

дает эффективную схему применения потенциал- и кинетических операторов по отдельности [12,13]. Как следствие, потенциалный множитель применяется в реальном пространстве (поэлементно), а кинетический — в спектральной области как умножение на $e^{-\Delta\tau k^2/2}$.

2.6 Быстрое преобразование Фурье (FFT) и дискретизация

2.6.1 Обозначения и нормировки

На прямоугольной равномерной сетке размера $N_x \times N_y \times N_z$ с объёмом ячейки dV и общим числом точек $N = N_x N_y N_z$ прямое и обратное БПФ могут быть реализованы в разных нормировках; здесь удобна следующая нотация:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ \psi_{\mathbf{r}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\psi}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\end{aligned}$$

что согласуется с реализациями многих библиотек FFT (см. [9, 14]). Важно сохранять единообразие нормировки при вычислении энергии и нормировке волновой функции.

2.6.2 Сетка в пространстве импульсов

Для размеров коробки L_x, L_y, L_z индексы волнового вектора вдоль оси x принимают значения

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad n_x = 0, 1, \dots, \frac{N_x}{2}, -\frac{N_x}{2} + 1, \dots, -1,$$

и аналогично для k_y, k_z . В реализации важно корректно упорядочивать спектральные индексы (FFT-shift при необходимости).

2.6.3 Кинетический пропагатор

В k -пространстве оператор кинетической энергии равен $T \mapsto k^2/2$, соответственно кинетический пропагатор действует как

$$U_T(\mathbf{k}) = \exp(-\Delta\tau k^2/2),$$

и применяется путём поэлементного умножения спектра волновой функции на $U_T(\mathbf{k})$.

2.7 Потенциал Гартри через свёртку

Кулоновское ядро $G(\mathbf{r}) = 1/|\mathbf{r}|$ имеет преобразование Фурье $4\pi/k^2$, поэтому

$$\tilde{V}_H(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{k^2} \tilde{\rho}(\mathbf{k}).$$

Алгоритм:

1. посчитать $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$;
2. $\tilde{\rho}(\mathbf{k}) = \text{FFT}[\rho]$;
3. $\tilde{V}_H(\mathbf{k}) = (4\pi/k^2)\tilde{\rho}(\mathbf{k})$, обрабатывать $k = 0$ отдельно (обычно $\tilde{V}_H(\mathbf{0}) = 0$);

4. $V_H(\mathbf{r}) = \text{IFFT}[\tilde{V}_H]$.

Метод экономично реализует свёртку в спектральной области и часто используется в вычислительной физике [9].

2.8 Пошаговый алгоритм ИТР (реализация в коде)

Ниже приведён пошаговый алгоритм одного шага ИТР, соответствующий тому, как это обычно реализовано в коде на C++.

Пусть на итерации n известна $\psi_n(\mathbf{r})$ на равномерной 3D-сетке. Шаг размера $\Delta\tau$:

1. **Вычислить плотность:** $\rho_n(\mathbf{r}) = |\psi_n(\mathbf{r})|^2$.

2. **Вычислить потенциал Гартри:**

$$V_{H,n}(\mathbf{r}) = \text{IFFT} \left[G(\mathbf{k}) \cdot \text{FFT}[\rho_n] \right],$$

где $G(\mathbf{k}) = 4\pi/k^2$ (с оговоркой в точке $k = 0$).

3. **Суммарный потенциал:** $V_{\text{tot},n}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_{H,n}(\mathbf{r})$.

4. **Применить половину потенциального пропагатора:**

$$\psi(\mathbf{r}) \leftarrow \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2} V_{\text{tot},n}(\mathbf{r})\right) \psi(\mathbf{r}).$$

5. **Переход в k -пространство и применение кинетического пропагатора:**

$$\psi(\mathbf{k}) = \text{FFT}[\psi(\mathbf{r})], \quad \psi(\mathbf{k}) \leftarrow \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2} k^2\right) \psi(\mathbf{k}).$$

6. **Возврат в реальное пространство:** $\psi(\mathbf{r}) = \text{IFFT}[\psi(\mathbf{k})]/N$ (в зависимости от нормировки).

7. Применить вторую половину потенциального пропагатора:

$$\psi(\mathbf{r}) \leftarrow \exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}V_{\text{tot},n}(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}).$$

8. Нормировка: $\psi(\mathbf{r}) \leftarrow \psi(\mathbf{r})/\sqrt{\sum_{\mathbf{r}}|\psi(\mathbf{r})|^2dV}$.

9. Оценка энергии и проверка сходимости: вычислить T , E_{ext} , E_H и E ; проверить изменение энергии ΔE и/или изменение нормы разницы волновых функций.

Описанный цикл повторяется до достижения заданной точности по энергии или по волновой функции. Практические детали (выбор $\Delta\tau$, обработка граничных условий, предобусловливание ядра $G(\mathbf{k})$, удаление алиасинга) существенно влияют на устойчивость и скорость сходимости; см. обсуждение в [9–11].

2.9 Оценка энергии

Кинетическая энергия по Парсевалю:

$$T \approx \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} k^2 \frac{|\tilde{\psi}_{\mathbf{k}}|^2}{N^2} dV_k.$$

Потенциальные энергии:

$$E_{\text{ext}} = \sum_{\mathbf{r}} V_{\text{ext}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) dV, \quad E_H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} V_H(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) dV.$$

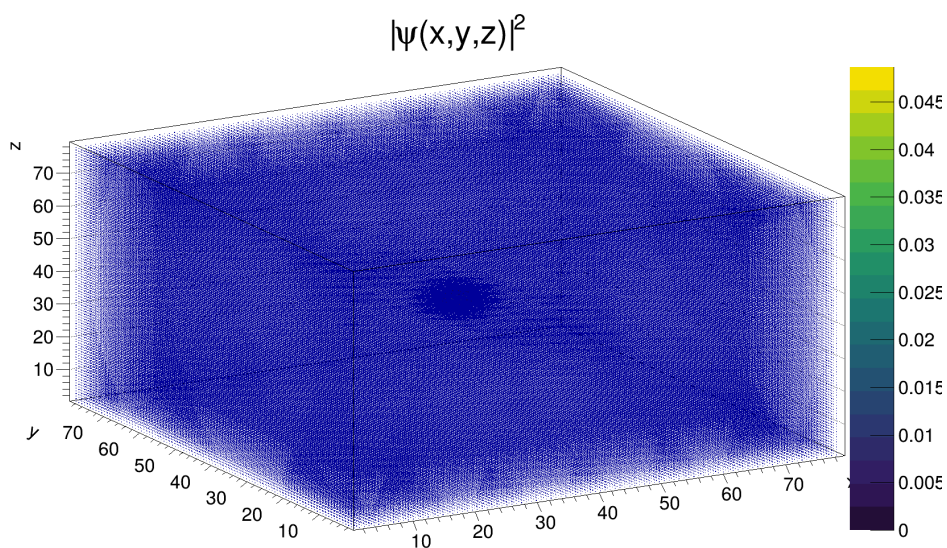


Рисунок 1 — Трехмерный график квадрата волновой функции для пионного атома гелия, полученный в результате моделирования

Таблица 1 — Сравнение справочных данных [3] и результатов моделирования

| Справочные результаты | | Результаты моделирования | |
|-----------------------|-----------|--------------------------|-----------------------------|
| Пионные атомы | $-E_{1s}$ | $-E_{1s}$ | % относительная погрешность |
| He $1s^2$ | 1.8359 | 1.9868 | 7.6 |
| He $1s^3$ | 0.3679 | 0.4320 | 14.8 |
| He $1s^4$ | - | - | |
| Ne $1s^{10}$ | 15.083 | 12.7041 | 18.7 |
| Ne $1s^{11}$ | 9.244 | | |

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлена целостная и практически реализуемая численная схема решения нелинейной стационарной задачи Шрёдингера для системы бозонных ядер в рамках модифицированного уравнения Хартри–Фока. Использован метод эволюции воображаемого времени в сочетании с расщеплением операторов и быстрым преобразованием Фурье.

В ходе исследования установлено, что результаты моделирования обладают высокой чувствительностью к выбору численных параметров, включая размеры и шаги пространственной сетки, величину временного шага, а также к физическим параметрам системы, таким как число бозонов и значение центрального притягивающего заряда Z . Данное обстоятельство требует тщательного контроля параметров расчёта и анализа численных эффектов.

В дальнейшей работе будет проведена оптимизация программной реализации с целью повышения точности и надёжности расчетов. Планируется изучить влияние параметров дискретизации и физических характеристик системы, а также внедрение численных схем более высокого порядка во временные и адаптивные стратегии, что позволит повысить стабильность алгоритма и ускорить его сходимость. Кроме того, мы включим эффекты сильного ядерного взаимодействия ядер гелия в модель темного атома.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. V. A. Beylin, T. E. Bikbaev, M. Y. Khlopov, A. G. Mayorov, D. O. Sopin, “Dark Atoms of Nuclear Interacting Dark Matter”, *Universe* **10**, 368 (2024). <https://doi.org/10.3390/universe10090368>
2. M. Y. Khlopov, “What comes after the Standard Model?”, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **116**, 103824 (2021).
3. M. Y. Amusia and L. V. Chernysheva, “On the Bosonic Atoms”, *JETP Lett.* **107**, 91–95 (2018). <https://doi.org/10.1134/S0021364018020017>
4. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Non-Relativistic Theory)* (Pergamon, 1965).
5. A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, 1971).
6. L. P. Pitaevskii, “Vortex lines in an imperfect Bose gas”, *Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961).
7. E. P. Gross, “Hydrodynamics of a Superfluid Condensate”, *J. Math. Phys.* **4**, 195 (1963).
8. F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, “Theory of Bose–Einstein condensation in trapped gases”, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
9. R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles* (McGraw-Hill, New York, 1981).
10. M. D. Feit, J. A. Fleck Jr., A. Steiger, “Solution of the Schrödinger equation by a spectral method”, *J. Comput. Phys.* **47**, 412 (1982).
11. P. Bader, S. Blanes, F. Casas, “Solving the Schrödinger eigenvalue problem by the imaginary time propagation technique using splitting methods with complex coefficients”, *J. Chem. Phys.* **139**, 124117 (2013).

12. G. Strang, “On the construction and comparison of difference schemes”, *SIAM J. Numer. Anal.* **5**, 506 (1968).
13. S. A. Chin and E. Krotscheck, “Fourth-order algorithms for solving the imaginary-time Gross–Pitaevskii equation in a rotating anisotropic trap”, *Phys. Rev. E* **72**, 036705 (2005).
14. J. W. Cooley and J. W. Tukey, “An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series”, *Math. Comput.* **19**, 297 (1965).