

Многочастичные структуры темных атомов

Мвилима Д.

Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. М. Ю. Хлопов

Научный консультант: Сопин Д. О.

НИЯУ «МИФИ»

2025–2026

Введение

- ▶ Астрономические наблюдения указывают на наличие небарионной тёмной материи.
- ▶ Альтернатива WIMP: **тёмные атомы** — связанные состояния тяжёлого лептона X^{-2n} и n ядер ${}^4\text{He}$.
- ▶ Цель: исследовать структуру таких систем методом, модифицированным под бозонную статистику.

Ключевая идея

- ▶ Ядра гелия в модели считаются **бозонами** и занимают одно орбитальное состояние (бозе-конденсация).
- ▶ Используем модифицированные уравнения Хартри–Фока в одноорбитальном приближении.
- ▶ На численном уровне применяем метод эволюции воображаемого времени (ITP) + FFT + расщепление операторов.

Модифицированное уравнение Хартри–Фока

В одноорбитальном приближении (бозонная статистика) получаем:

$$-\frac{\Delta}{2}\phi(r) - \frac{Z}{r}\phi(r) + 2(N-1) \int \frac{|\phi(r')|^2}{|r-r'|} d^3r' \phi(r) = E \phi(r).$$

- ▶ Все ядра ${}^4\text{He}$ занимают одно и то же состояние $\phi(r)$.
- ▶ Задача — найти основное состояние и энергию E самосогласованно.

Гамильтониан и компоненты энергии

Гамильтониан:

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

где

$$T = -\frac{1}{2}\nabla^2, \quad V_{\text{ext}} = -\frac{Z}{r}, \quad \rho = |\psi|^2.$$

Потенциал Хартри:

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

Идея метода ИТР (воображаемое время)

- ▶ Уравнение Шредингера во времени: $i\partial_t\Psi = H\Psi$.
Подстановка $t = -i\tau$ даёт

$$\partial_\tau\Psi(\tau) = -H\Psi(\tau).$$

- ▶ Формально: $\Psi(\tau) = e^{-\tau H}\Psi(0)$.

$$\Psi(0) = \sum_n c_n \phi_n.$$

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

При $\tau \rightarrow \infty$ доминирует ϕ_0 .

- ▶ На практике: итерации, нормировка и обновление потенциала \rightarrow сходимость к основному состоянию.

Расщепление операторов (Strang)

Разделяем $H = T + V$. Симметричное разложение второго порядка:

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

- ▶ Потенциальный множитель — в реальном пространстве (поэлементно).
- ▶ Кинетический — в k -пространстве: умножение на $\exp(-\Delta\tau k^2/2)$.

FFT и свёртка для V_H

- ▶ Функция $G(r) = 1/|r|$ в потенциале Хартри имеет преобразование $4\pi/k^2$.
- ▶ Алгоритм:
 1. $\rho(r) = |\psi(r)|^2$;
 2. $\tilde{\rho}(k) = \text{FFT}[\rho]$;
 3. $\tilde{V}_H(k) = (4\pi/k^2)\tilde{\rho}(k)$;
 4. $V_H(r) = \text{IFFT}[\tilde{V}_H]$.

Пошаговый алгоритм ИТР (одна итерация)

Пусть известна $\psi_n(\mathbf{r})$:

1. Вычислить $\rho_n = |\psi_n|^2$ и $\tilde{\rho}_n = \text{FFT}[\rho_n]$.
2. Построить $V_{H,n}$ через $4\pi/k^2$ и перейти в реальное пространство.
3. $V_{\text{tot}} = V_{\text{ext}} + V_{H,n}$.
4. Применить $\exp(-\frac{\Delta\tau}{2} V_{\text{tot}})$ к ψ .
5. $\text{FFT} \rightarrow$ умножить спектр на $\exp(-\frac{\Delta\tau}{2} k^2) \rightarrow \text{IFFT}$.
6. Применить вторую половину потенциального пропагатора.
7. Нормировка ψ и оценка энергии; проверка критерия сходимости.

Формулы для энергии

- ▶ Кинетическая (Парсеваль, дискретно):

$$T \approx \frac{1}{2} \sum_k k^2 \frac{|\tilde{\psi}_k|^2}{N^2} dV_k.$$

- ▶ Потенциальные:

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

- ▶ Общая энергия: $E = T + E_{\text{ext}} + E_H$.

Сравнение со справочными данными

Table: Сравнение справочных данных и результатов моделирования

| Система | Справочные $-E_{1s}$ | Моделирование $-E_{1s}$ | погрешность, % |
|--------------|----------------------|-------------------------|----------------|
| He $1s^2$ | 1.8359 | 1.9868 | 7.6 |
| He $1s^3$ | 0.3679 | 0.4320 | 14.8 |
| Ne $1s^{10}$ | 15.083 | 12.7041 | 18.7 |

- Ошибки чувствительны к дискретизации, объёму расчётной области и выбору $\Delta\tau$.

Визуализация волновой функции

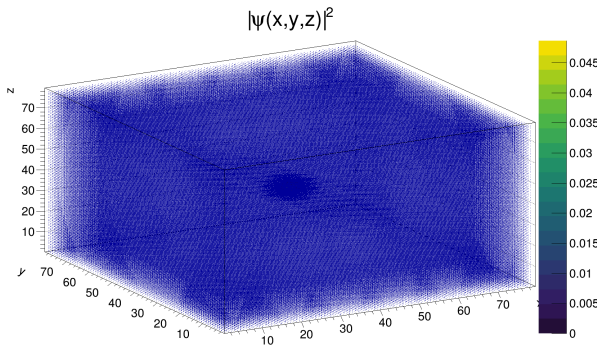


Figure: Квадрат волновой функции (пример: 2 пионный/бозонный атом гелия).

Примечание: визуализация получена на решётке; форма чувствительна к границам и разрешению.

Основные выводы

- ▶ Предложена практическая схема решения нелинейной стационарной задачи для бозонных ядер в модифицированном HF-приближении.
- ▶ ITP + Strang + FFT обеспечивает устойчивый путь к основному состоянию при корректной настройке параметров.
- ▶ Результаты демонстрируют чувствительность к численным параметрам; есть место для улучшения точности.
- ▶ Параметры, влияющие на точность: размер бокса L , число точек N_x, N_y, N_z , шаг $\Delta\tau$.

Дальнейшая работа

- ▶ Оптимизация параметров и адаптивный выбор $\Delta\tau$.
- ▶ Внедрение схем более высокого порядка по времени и предобуславливание.
- ▶ Исследование больших n и коллективных эффектов в многочастичных структурах тёмных атомов.
- ▶ Добавление эффектов ядерного взаимодействия ядер гелия в нашу систему темных атомов.

Спасибо!