

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:
ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАРТРИ-ФОКА

Научный руководитель

д.ф.-м.н, проф.

_____ Хлопов М. Ю.

Научный консультант

_____ Сопин Д. О.

Студент

_____ Мвилима Д.

Москва 2024

СОДЕРЖАНИЕ

1	Введение	3
2	Теоретическая основы	6
3	Численная модель	8
3.1	Точность численных расчётов и оценка погрешностей	11
4	Потенциал взаимодействия альфа частиц	13
4.1	Двух-альфа частичная система (${}^8\text{Be}$)	13
4.2	Трёх-альфа частичная система (${}^{12}\text{C}$)	15
5	Связанные состояния лептона с бозонными альфа-частицами	18
5.1	OHe — атом боровского типа с одной альфа-частицей	18
5.2	Двух-альфа частичная система $(OBe)^{2+}$ — томсоновская система ядра ${}^8\text{Be}$	19
5.3	Трёх-альфа частичная система $(OC)^{4+}$ — томсоновская система ядра ${}^{12}\text{C}$	19
6	Обсуждение	21
7	Заключение	23
	Список литературы	26

1. ВВЕДЕНИЕ

Природа скрытой массы остается одной из центральных нерешенных проблем современной физики. Среди широкого спектра предлагаемых вариантов моделей скрытой массы особое место занимает модели темных атомов в которых стабильные электрически заряженные компоненты связываются в нейтральные составные состояния. В подобных сценариях, часто обозначаемых как *космология тёмных атомов*, тяжёлые стабильные частицы с ненулевым электрическим зарядом не противоречат наблюдениям при условии, что они эффективно рекомбинируют в нейтральные связанные состояния в ранней Вселенной [1–3].

Одной из наиболее развитых реализаций этой идеи является так называемый сценарий $X\text{He}$ (в частности $O\text{He}$), в котором тяжелая стабильная дважды отрицательно заряженная частица X^{-2N} (O^{--} , в случае $N = 1$) связывается с первичными ядрами гелия (${}^4\text{He}$), образовавшимися в ходе первичного нуклеосинтеза (Big Bang Nucleosynthesis, BBN), формируя нейтральные “тёмные атомы” [4–8]. Такие составные объекты ведут себя подобно скрытой массе с ядерными взаимодействиями и представляют собой приемлемую модель для объяснения астрофизических наблюдений, обходя при этом многие ограничения, применимые к стандартным слабо взаимодействующим массивным частицам. Космологическое образование подобных состояний, как ожидается, происходит вскоре после BBN, когда ядра гелия захватывают отрицательно заряженные реликтовые частицы за счёт кулоновского притяжения, что приводит к доминирующему вкладу $O\text{He}$ -подобных атомов в плотность тёмной материи.

Однако состоятельность этих моделей в решающей степени зависит от детального характера взаимодействия тёмных атомов с обычными ядрами. В отличие от стандартных атомных систем с размерами в нанометровом масштабе, атомы $O\text{He}$ имеют оболочку из ядра гелия размером в ядерный мас-

штаб, окружающую компактное отрицательно заряженное ядро, что приводит к качественно новым способам взаимодействия с веществом. В частности, вопрос о возможности образования связанных состояний OHe с ядрами является центральным. Ранние исследования показали, что при эффективном формировании таких состояний возможно накопление аномальных сверхтяжелых изотопов в веществе, которое строго ограничено экспериментально [5, 9, 10]. Эта “проблема ядерного захвата” накладывает строгие ограничения на микроскопическую структуру и свойства взаимодействия тёмных атомов.

Тесно связанный аспект возникает в контексте катализированного первичного нуклеосинтеза (Catalysed Big Bang Nucleosynthesis, CBBN), в рамках которого долгоживущие заряженные частицы могут образовывать связанные состояния с лёгкими ядрами и существенно изменять первичные космологические соотношения элементов. Наличие дважды заряженных частиц усиливает связь и открывает дополнительные каналы реакций, что может приводить к наблюдаемым отклонениям от стандартных предсказаний BBN [11, 12]. Таким образом, совместный анализ процессов формирования в ранней Вселенной, ядерного связывания и устойчивости на поздних стадиях даёт мощные ограничения на модели составной тёмной материи.

Несмотря на значительное число феноменологических исследований, микроскопическое описание многонуклонных связанных состояний с участием тяжёлых заряженных частиц остаётся неполным. В частности, в настоящее время отсутствует полностью согласованная схема, которая одновременно описывала бы (i) хорошо установленные свойства лёгких ядерных кластерных систем, таких как ${}^8\text{Be}$ и ${}^{12}\text{C}$, и (ii) их модификацию в присутствии сильно притягивающего кулоновского центра, создаваемого тяжёлой заряженной частицей. Поскольку лёгкие ядра обладают ярко выраженной α -кластерной структурой [13–16], задача естественным образом формулируется в подходе, где α -частицы рассматриваются как эффективные степени свободы, взаимодействующие через феноменологические потенциалы.

В настоящей работе мы развиваем самосогласованный метод Хартри-Фока для описания много- α систем, связанных с тяжёлой дважды отрицательно заряженной частицей [17, 18]. Здесь α -частицы рассматриваются как тождественные бозоны, а многочастичная волновая функция аппроксимируется анзацем с симметризованным произведением. Взаимодействие между альфа-частицами (α - α взаимодействие) моделируется с использованием феноменологического потенциала Али-Бодмера [19], дополненного регуляризованным кулоновским членом (см. [13]), а взаимодействие между тяжёлым лептоном X^{-2N} и α -частицами определяется свёрткой точечного заряда с распределением заряда конечного размера α -частицы.

Ключевой особенностью настоящего подхода является калибровка эффективного взаимодействия в чисто ядерном пределе, когда внешняя заряженная частица отсутствует. Воспроизводя резонанс состояния ядра ${}^8\text{Be}$, а также свойства основного состояния ядра ${}^{12}\text{C}$, мы обеспечиваем корректное описание ключевой физики α -кластеризации до включения дополнительного кулоновского поля. Далее то же взаимодействие, без дополнительной подгонки параметров, используется для исследования структуры систем, связанных с лептоном. Таким образом, мы предлагаем способ изолировать влияние внешнего заряженного центра и проанализировать стабильность и пространственную структуру возникающих темных атомов.

Представленные результаты непосредственно затрагивают микроскопическую природу ядерного связывания в сценариях составной тёмной материи. В частности, рассчитанные энергии связи и пространственные распределения позволяют определить, остаются ли много- α конфигурации слабо взаимодействующими или переходят в сильно связанные состояния в присутствии тяжёлой заряженной частицы. Это имеет прямые последствия для образования аномальных изотопов, эффективности процессов ядерного захвата и общей состоятельности моделей тёмных атомов.

Отчет организован следующим образом. В разделе 2 выводятся урав-

нения метода Хартри Фока с учетом бозе-эйнштейн статистики альфа-частиц и соответствующего энергетического функционала. В разделе 3 описываются численная реализация и анализ погрешностей. В разделе 4 представлена калибровка в чисто ядерном пределе, тогда как в разделе 5 приведены результаты для систем, связанных с лептоном. Наконец, в разделе 6 обсуждаются следствия полученных результатов для космологии тёмных атомов и намечаются направления дальнейших исследований.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОСНОВЫ

Полный гамильтониан системы из K α -частиц, связанных с тяжёлым лептоном с зарядом $-2N$ (в единицах, где $\hbar = m_e = e = 1$), имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^K \left(-\frac{1}{2m_\alpha} \nabla_i^2 + V_C(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (1)$$

где m_α — масса α -частицы, $V_C(\mathbf{r})$ — свёрнутый кулоновский потенциал взаимодействия лептона с одной α -частицей, а $V_{\alpha\alpha}(r)$ — феноменологический потенциал α - α взаимодействия [13, 19].

Поскольку α -частицы являются тождественными бозонами, многочастичная волновая функция аппроксимируется анзацем с симметризованным произведением

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_K) = \prod_{i=1}^K \phi(\mathbf{r}_i), \quad (2)$$

где одночастичная орбиталь $\phi(\mathbf{r})$ нормирована на единицу:

$$\int |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1.$$

Данный анзац является прямым бозонным аналогом произведения Хартри, используемого в теории электронной структуры, и становится точным в пре-

деле отсутствия взаимодействия или при малости межчастичного взаимодействия [17].

Подстановка произведения волновых функций в матричный элемент $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ и вариационная минимизация по $\phi^*(\mathbf{r})$ (с учётом условия нормировки) приводят к уравнению Хартри Фока для бозонов:

$$\left[-\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 + V_{\text{lepton}}(\mathbf{r}) + (K-1) \int |\phi(\mathbf{r}')|^2 V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) d^3\mathbf{r}' \right] \phi(\mathbf{r}) = \epsilon \phi(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Множитель $(K-1)$ возникает естественным образом, поскольку каждый бозон движется в среднем поле, создаваемом остальными $N-1$ бозонами; самодействие в строгом бозонном выводе отсутствует [17].

Соответствующий функционал полной энергии имеет вид

$$E_{\text{total}} = K \langle T + V_C \rangle + \frac{1}{2} K(K-1) \langle V_{\alpha\alpha} \rangle, \quad (4)$$

где одночастичные средние значения вычисляются по плотности $|\phi(\mathbf{r})|^2$:

$$\langle T \rangle = \int \phi^* \left(-\frac{1}{2m_\alpha} \nabla^2 \right) \phi d^3\mathbf{r},$$

$$\langle V_C \rangle = \int |\phi(\mathbf{r})|^2 V_C(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r},$$

$$\langle V_{\alpha\alpha} \rangle = \iint |\phi(\mathbf{r})|^2 V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) |\phi(\mathbf{r}')|^2 d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'.$$

Множитель $1/2$ устраняет двойной счёт парных взаимодействий. Энергия одночастичной орбитали ϵ и полная энергия E связаны соотношением

$$E_{\text{total}} = K\epsilon - \frac{1}{2} K(K-1) \langle V_{\alpha\alpha} \rangle.$$

Потенциал взаимодействия лептона с α -частицей получается путём свёртки точечного заряда лептона с распределением заряда конечного размера α -

частицы (нормированным на +2):

$$V_{\text{lepton}}(\mathbf{r}) = -2N \int \frac{\rho_{\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{s}|)}{|\mathbf{s}|} d^3\mathbf{s},$$

где $\rho_{\alpha}(r)$ — функция распределения заряда, заимствованная из работы А. С. Ба-
жина и В. В. Самарина [13]:

$$\rho_{\alpha}(r) = \frac{\rho_1}{1 + 2 \exp\left(-\frac{b}{a}\right) \left[\cosh\left(\frac{r}{a}\right) - 1\right]} + \rho_2 \exp\left(-\frac{(r - c)^2}{d^2}\right),$$

где параметры равны $\rho_1 = 0.112 \text{ fm}^{-3}$, $\rho_2 = 0.0073 \text{ fm}^{-3}$, $a = 0.367 \text{ fm}$, $b = 1.32 \text{ fm}$, $c = 0.762 \text{ fm}$, $d = 0.5 \text{ fm}$.

Взаимодействие α - α задаётся потенциалом Али-Бодмера [19], допол-
ненным регуляризованным кулоновским членом [13]:

$$V_{\alpha\alpha}(r) = v_1 \exp\left(-\frac{r^2}{a_1^2}\right) + v_2 \exp\left(-\frac{r^2}{a_2^2}\right) + \frac{4e^2}{r} \text{erf}(\beta r).$$

Параметры v_1 , a_1 , v_2 , a_2 калибруются в чисто ядерном пределе ($N = 0$) таким
образом, чтобы воспроизвести энергию резонанса ${}^8\text{Be}$ и среднеквадратичное
расстояние между α -частицами.

Полученное уравнение Хартри Фока (3) является нелинейным и должно
решаться самосогласованно. Численная процедура, использованная для полу-
чения представленных в работе решений, описана в разделе. 3.

3. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

Уравнение Хартри Фока (3) для бозонной системы решается самосогла-
сованно на равномерной трёхмерной декартовой сетке методом эволюции по
мнимому времени (Imaginary-Time Propagation, ИТР). Подобные подходы с ис-
пользованием быстрого преобразования Фурье (Fast Fourier Transform, FFT)

для вычисления свёрток широко применяются в расчётах в теории ядерного функционала плотности и при моделировании бозе-конденсатов [20]. Реализация выполнена на языке C++ с использованием библиотеки FFTW для быстрого преобразования Фурье и OpenMP для параллелизации в общей памяти [21, 22].

Расчётная область представляет собой куб со стороной $L = 25\text{--}40\text{ fm}$, дискретизованный сеткой с числом узлов $N_x = N_y = N_z = 128\text{--}160$. Для устранения артефактов, связанных с периодическими изображениями при вычислении свёртки, плотность дополняется нулями до удвоенного размера сетки в импульсном пространстве перед применением FFT.

Эволюция по мнимому времени описывается уравнением

$$-\frac{\partial\phi(\mathbf{r}, \tau)}{\partial\tau} = \left[-\frac{1}{2m_\alpha}\nabla^2 + V_{\text{lepton}}(\mathbf{r}) + (N-1)V_{\text{H}}(\mathbf{r}; \tau) \right] \phi(\mathbf{r}, \tau),$$

которое интегрируется с использованием схемы расщепления оператора второго порядка [22]. На каждом шаге по времени $\Delta\tau$ волновая функция последовательно умножается на половину локального потенциала (кулоновский потенциал лептона и текущий член потенциал Хартри Фока), затем применяется полный кинетический пропагатор $\exp(-\Delta\tau \hat{T}/2)$ в пространстве Фурье, после чего выполняется умножение на вторую половину локального потенциала.

Потенциал Хартри

$$V_{\text{H}}(\mathbf{r}; \tau) = \int V_{\alpha\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\phi(\mathbf{r}', \tau)|^2 d^3\mathbf{r}'$$

вычисляется с помощью FFT-свёртки с предварительным дополнением нулями. Полная энергия и её вклады (кинетический, взаимодействие с лептоном и $\alpha\text{--}\alpha$ взаимодействие) регулярно вычисляются в ходе итераций. Все пространственные интегралы рассчитываются по формуле Симпсона.

Существенной технической деталью является итерационная коррекция центра масс. После каждого блока итераций по одночастичной плотности вычисляется среднее значение $\langle \mathbf{r} \rangle$. Начало координат затем переносится в эту точку, после чего потенциал лептона и ядро свёртки Хартри пересчитываются на сдвинутой сетке. Такая процедура устраняет вклад движения центра масс и гарантирует, что кинетическая энергия соответствует исключительно внутреннему движению α -частиц [23].

Среднеквадратичное расстояние между α -частицами определяется через одночастичную плотность:

$$r_{\alpha-\alpha} = \sqrt{2} \times \sqrt{\int r^2 |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}}. \quad (5)$$

Зарядовые радиусы вычисляются по формуле

$$r_{\text{ch}} = \sqrt{r_N^2 + \int r^2 |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}}. \quad (6)$$

где r_N — экспериментальный зарядовый радиус α -частицы, равный 1.67 fm [24].

В чисто ядерном пределе (заряд лептона равен нулю) в кинетическом члене используется приведённая масса двухчастичной системы $\mu = m_\alpha/2$ при $K = 2$ (^8Be), тогда как при $K > 2$ сохраняется масса m_α . В присутствии лептона используется масса m_α , поскольку приведённая масса системы “лептон– α -частица” практически совпадает с m_α .

Калибровка параметров проводится исключительно в чисто ядерном пределе (см. разд. 4) путём варьирования параметров потенциала Али–Бодмера v_1, v_2, a_1, a_2 (в диапазонах, согласующихся с литературными значениями) до воспроизведения энергии резонанса ^8Be с точностью до 0.001 MeV. Полученные параметры затем без изменений используются во всех расчётах систем, связанных с лептоном.

3.1 Точность численных расчётов и оценка погрешностей

Достоверность результатов в рамках приближения среднего поля определяется контролем как численных, так и модельных источников погрешности. В соответствии с принятыми подходами в теории ядерного функционала плотности и методах эволюции по мнимому времени [20, 25, 26] был проведён систематический анализ основных вкладов: дискретизация по пространству, сходимость по мнимому времени, точность численного интегрирования и эффективный характер используемого взаимодействия.

Расчёты выполняются на трёхмерной декартовой сетке с типичным разрешением $N_x = N_y = N_z = 128\text{--}180$ и размерами области $L = 25\text{--}40$ fm. Погрешности дискретизации связаны как с представлением кинетического оператора в импульсном пространстве, так и с вычислением свёртки Хартри. Сходимость по сетке проверялась путём последовательного её уточнения при фиксированном размере области. Для наиболее плотных сеток относительные изменения полной энергии и радиусов не превышают 10^{-5} . Экстраполяция Ричардсона [27], выполненная по результатам на последовательности сеток, даёт оценку погрешности дискретизации $\Delta E_{\text{disc}} \approx 0.001\text{--}0.005$ MeV для энергий связи и $\Delta r \approx 0.01\text{--}0.03$ fm для радиусов.

Сходимость по мнимому времени контролировалась по стабилизации полной энергии. Итерации схемы расщепления оператора [22, 28] продолжались до выполнения условия $|\Delta E|/|E| < 10^{-7}$ на протяжении не менее 200 последовательных шагов после начального переходного режима. Дополнительно проводилась проверка с уменьшением шага по времени с $\Delta\tau = 0.015$ до 0.0075, что приводило к изменениям менее 10^{-6} MeV по энергии и 10^{-5} по норме волновой функции. Таким образом, ошибки, связанные с эволюцией по мнимому времени, существенно меньше дискретизационных и могут считаться пренебрежимо малыми.

Средние значения, входящие в полную энергию и структурные характеристики, вычислялись с использованием составной формулы Симпсона. Для контроля точности результаты сравнивались с вычислениями в импульсном пространстве на той же сетке. Совпадение на уровне 10^{-8} для нормированных величин показывает, что ошибки численного интегрирования не дают заметного вклада в итоговую погрешность.

Отдельный вклад связан с эффективным характером α - α взаимодействия. Потенциал Али-Бодмера с регуляризованным кулоновским членом калибруется в чисто ядерном пределе по энергии резонанса ${}^8\text{Be}$ ($E_R \approx 0.092 \text{ MeV}$) и энергии основного состояния ${}^{12}\text{C}$ относительно порога распада на три α -частицы (-7.275 MeV). Остаточные отклонения после калибровки составляют менее 0.001 MeV для ${}^8\text{Be}$ и 0.002 MeV для ${}^{12}\text{C}$. При переносе этих параметров на системы с лептоном основная погрешность обусловлена ограниченностью анзаца с произведением при описании корреляций более высокого порядка [16, 26]. По результатам анализа чувствительности, при варьировании радиусов гауссовых членов потенциала на $\pm 5\%$, модельная погрешность оценивается как $\Delta E_{\text{model}} \approx 0.01\text{--}0.03 \text{ MeV}$ на одну α -частицу.

Суммарная погрешность, полученная путём сложения отдельных вкладов по квадратичному правилу, составляет $\pm 0.01\text{--}0.04 \text{ MeV}$ для энергий связи и $\pm 0.02\text{--}0.05 \text{ fm}$ для радиусов. Эти значения малы по сравнению с характерными масштабами рассматриваемых систем и не влияют на качественные выводы.

В целом анализ показывает, что численная схема хорошо сходится, а основные ограничения носят физический, а не численный характер. Это позволяет рассматривать полученные результаты как надёжную основу для сопоставления с более точными микроскопическими подходами и для применения в космологических задачах, связанных с дважды заряженной тёмной материей.

4. ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЛЬФА ЧАСТИЦ

Перед переходом к системам с лептоном параметры феноменологического потенциала Али–Бодмера калибруются в чисто ядерном пределе ($N = 0$) по хорошо установленным экспериментальным и теоретическим данным для ядер ${}^8\text{Be}$ и ${}^{12}\text{C}$. Это позволяет проверить, что взаимодействие между альфа-частицами, используемое в сочетании с приближением среднего поля, правильно воспроизводит известные свойства кластера в отсутствие внешнего кулоновского поля лептона. Все расчёты выполняются в рамках единой численной схемы, описанной в разделе 3.

4.1 Двух-альфа частичная система (${}^8\text{Be}$)

При $K = 2$ задача сводится к бозонному описанию ядра ${}^8\text{Be}$. Экспериментальный резонанс 0^+ расположен на энергии $E_R = 0,0918 \pm 0,0005$ МэВ выше порога двух α -частиц [29]. Откалиброванный расчёт воспроизводит этот резонанс с полной энергией

$$E_{\text{total}} = 0,092 \pm 0,001 \text{ МэВ}$$

и межальфовым среднеквадратичным расстоянием

$$r_{\alpha-\alpha} = 3,51 \pm 0,02 \text{ фм},$$

вычисленным по формуле (5).

Указанные значения получены при следующих параметрах потенциала

Али–Бодмера:

$$v_1 = 126,61 \pm 0,08 \text{ МэВ}, \quad a_1^2 = 0,831 \pm 0,012 \text{ фм}^2,$$

$$v_2 = -54,61 \pm 0,06 \text{ МэВ}, \quad a_2^2 = 3,59 \pm 0,04 \text{ фм}^2,$$

а также регуляризованном кулоновском члене $\frac{4e^2}{r} \operatorname{erf}(\beta r)$ с параметром $\beta = 0,601 \text{ фм}^{-1}$.

Полученные параметры заметно отличаются от исходных наборов Али–Бодмера, определённых по фазовым сдвигам или в рамках точных расчётов по уравнениям Фаддеева [19, 30] (см. рис. 1). Такая перепараметризация обусловлена тем, что приближение Хартри Фока не учитывает явно многочастичные корреляции и паулиевское блокирование на уровне нуклонов. В результате прямая свёртка $(K - 1)V_{\alpha\alpha} * \rho$ приводит к избыточному связыванию, если не усилить короткодействующее отталкивание (параметр v_1) и не скорректировать глубину притягательной части (v_2). Подобная эффективная перенормировка, зависящая от используемого приближения, хорошо известна в кластерных моделях при переходе от точных малочастичных методов к описанию среднего поля [13, 31–33]. Это связано с тем, что составная фермионная структура α -частиц порождает эффективное паулиевское отталкивание, которое лишь частично учитывается феноменологическим потенциалом [14]. Следует также отметить, что параметры потенциала, полученные при решении точной двух- или трёхчастичной задачи (например, для ${}^8\text{Be}$ или ${}^{12}\text{C}$), в общем случае не могут быть непосредственно перенесены в среднеполевую схему для той же системы [30].

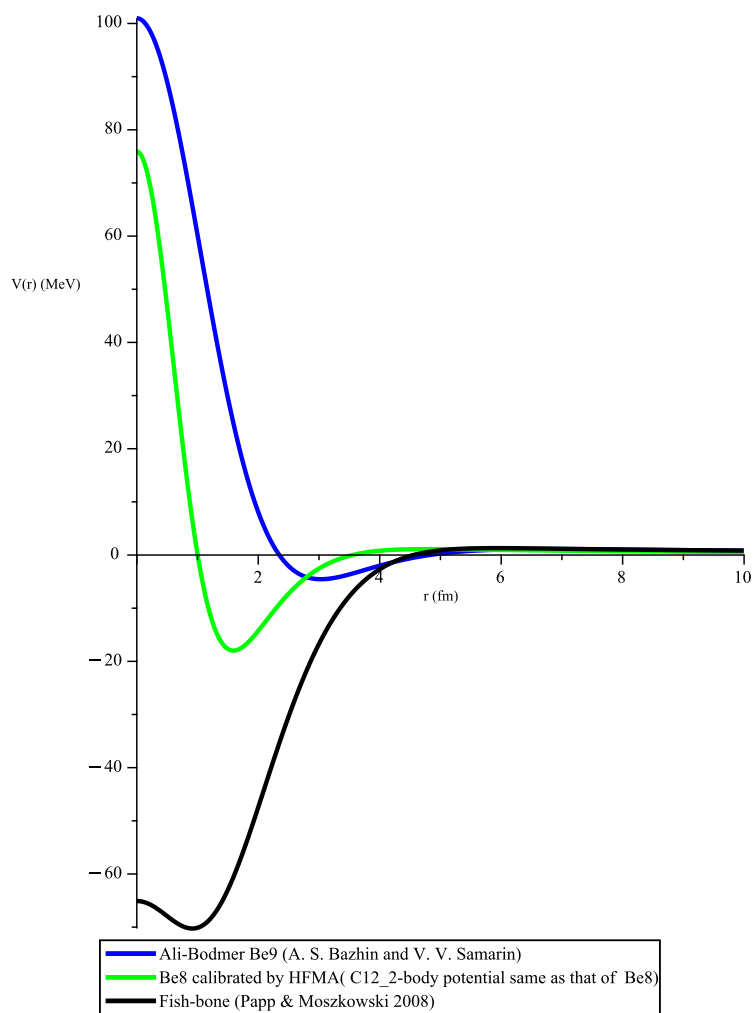


Рисунок 1 — Сравнение потенциала Али–Бодмера: потенциал, подобранный по фазовым сдвигам с использованием уравнений Фаддеева [13] (синий), потенциалы для ${}^8\text{Be}$ и ${}^{12}\text{C}$, полученные в рамках подхода Хартри Фока (красный и зелёный), и потенциал типа “fish-bone”, определённый в точной многочастичной постановке [30] (чёрный).

4.2 Трёх-альфа частичная система (${}^{12}\text{C}$)

При $K = 3$ используется тот же двухчастичный потенциал. Простая замена числа α -частиц в уравнении (3) приводит к следующему значению

энергии связи ядра ^{12}C :

$$E_{12\text{C}} = -7,482 \pm 0,002 \text{ МэВ},$$

что соответствует несколько более сильному связыванию по сравнению с экспериментальным значением (отсчитанным относительно порога трёх α -частиц). Для компенсации этого эффекта в потенциал среднего поля добавляется слабый гауссов трёхчастичный член (рис. 2):

$$V_{3b}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = W_0 \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 + |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|^2 + |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|^2}{B_3^2}\right).$$

Параметры W_0 и B_3 подбираются таким образом, чтобы воспроизвести экспериментальную энергию основного состояния ^{12}C относительно трёх-альфа порога:

$$E_{\text{total}}^{\text{HFMA}} = -7,275 \pm 0,002 \text{ МэВ} \quad (\text{эксперимент: } -7,2747 \text{ МэВ}) [35].$$

Полученные значения параметров:

$$W_0 = 0,282 \pm 0,015 \text{ МэВ}, \quad B_3 = 3,32 \pm 0,08 \text{ фм},$$

что даёт зарядовый радиус

$$r_{\text{ch}} = 2,53 \pm 0,02 \text{ фм},$$

находящийся в хорошем согласии с экспериментальным значением $2,470 \pm 0,022$ фм с учётом конечного размера α -частицы [24].

Таким образом, даже при фиксированных двухчастичных параметрах требуется дополнительная эффективная коррекция. Приближение Хартри Фока недооценивает эффективное короткодействующее отталкивание, а введение трёхчастичного члена компенсирует отсутствие более высоких корреляций. Подобная процедура широко используется в микроскопических кластер-

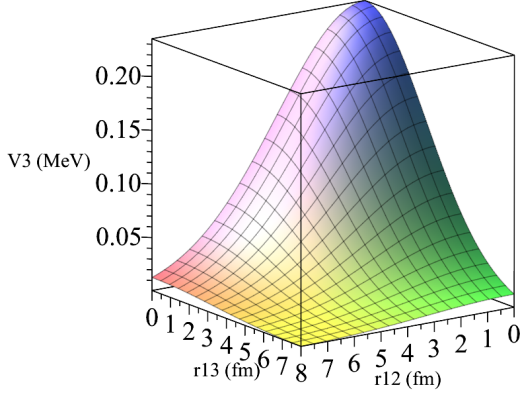
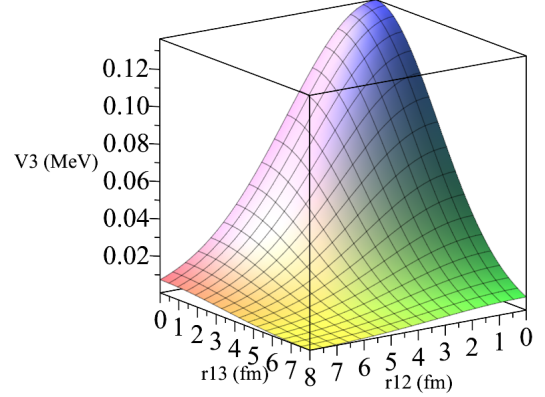
3-body Force Slice at fixed $r_{23} = 2$ fm3-body Force Slice at fixed $r_{23} = 4$ fm

Рисунок 2 — Трёхчастичный потенциал $V_3(r_{12}, r_{13}, r_{23})$ в сечении при фиксированных значениях $r_{23} = 2$ фм и 4 фм. Показана величина трёхчастичного вклада (в МэВ) в зависимости от расстояний между двумя другими парами частиц.

ных моделях ядра ^{12}C [32, 34].

Откалиброванные параметры приведены в таблице 1. Они показывают, что в рамках подхода приближения Хартри Фока возможно построить согласованный набор эффективных взаимодействий, хотя и с перенормировкой, зависящей от используемого приближения, по сравнению с точными расчётами по уравнениям Фаддеева или методом резонирующих групп.

Таблица 1 — Откалиброванные феноменологические параметры в чисто ядерном пределе. Погрешности учитывают вклад дискретизации, сходимости и остаточной ошибки калибровки.

Параметр	^8Be ($N = 2$)	^{12}C ($N = 3$)
v_1 (МэВ)	126.61 ± 0.08	126.61 ± 0.08
a_1^2 (фм ²)	0.831 ± 0.012	0.831 ± 0.012
v_2 (МэВ)	-54.61 ± 0.06	-54.61 ± 0.06
a_2^2 (фм ²)	3.59 ± 0.04	3.59 ± 0.04
W_0 (МэВ)	—	0.28 ± 0.015
B_3 (фм)	—	3.31 ± 0.08

Полученные параметры фиксируются и далее используются без допол-

нительной подгонки при расчётах систем с лептоном.

5. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЛЕПТОНА С БОЗОННЫМИ АЛЬФА-ЧАСТИЦАМИ

После установки параметров $\alpha\alpha$ -взаимодействия в чисто ядерном пределе (раздел 4) полученные параметры применяются ко всем системам, связанным с лептоном. Заряд лептона принимается равным -2 (то есть $N = 1$. В условии нейтрального атома $N = K$), а потенциал взаимодействия лептон $^-$ – α задаётся свернутым кулоновским взаимодействием, описанным в разделе 2. На данном этапе во всех расчётах используется анзац с симметризованным произведением одночастичных функций.

5.1 OHe — атом боровского типа с одной альфа-частицей

При $K = 1$ система сводится к двухчастичной кулоновской задаче для лептона O^{--} и одной α -частицы. Сходящаяся полная энергия равна

$$E_{\text{total}} = -1,17 \pm 0,01 \text{ МэВ},$$

при среднеквадратичном радиусе одночастичной орбитали

$$r_{O-\alpha} = 4,12 \pm 0,04 \text{ фм}.$$

Это значение служит проверкой согласованности расчёта: полученный радиус существенно превышает среднеквадратичный зарядовый радиус α -частицы (1,67 фм [24]), что указывает на атомоподобную (боровскую) структуру системы.

5.2 Двух-альфа частичная система $(OBe)^{2+}$ — томсоновская система ядра ${}^8\text{Be}$

При $K = 2$ ($N = 1$) система представляет собой лептон-связанное ядро ${}^8\text{Be}$. Сходящаяся полная энергия относительно порога $2\alpha + O^{--}$ составляет

$$E_{\text{total}} = -5,66 \pm 0,03 \text{ МэВ.}$$

Облако α -частиц оказывается заметно более сжатым по сравнению с чисто ядерным резонансом ${}^8\text{Be}$:

$$r_{O-\alpha} = 2,40 \pm 0,03 \text{ фм}, \quad r_{\alpha-\alpha} = 3,39 \pm 0,04 \text{ фм.}$$

Внешний кулоновский потенциал, создаваемый лептоном, компенсирует околопороговую несвязанность двухальфовой системы и приводит к образованию глубоко связанного состояния. Разложение полной энергии показывает, что основной отрицательный вклад приходится на притяжение лептон-(альфа), тогда как взаимодействие (как ядерное, так и кулоновское) дает меньший положительный вклад из-за остаточного отталкивания на коротких расстояниях.

5.3 Трёх-альфа частичная система $(OC)^{4+}$ — томсоновская система ядра ${}^{12}\text{C}$

При $K = 3$ ($N = 1$) система соответствует лептон-связанному аналогу ядра ${}^{12}\text{C}$. Сходящаяся полная энергия равна

$$E_{\text{total}} = -16,85 \pm 0,06 \text{ МэВ.}$$

Структурные характеристики системы:

$$r_{O-\alpha} = 1,80 \pm 0,03 \text{ фм}, \quad r_{\text{ch}} = 2,46 \pm 0,03 \text{ фм},$$

где зарядовый радиус вычислен с учётом сворачивания с экспериментальным среднеквадратичным зарядовым радиусом α -частицы (1,68 фм) [24]. По сравнению с предыдущими случаями наблюдается дополнительное сжатие трёх-альфа конфигурации под действием более глубокого удерживающего потенциала.

Результаты для всех рассмотренных систем приведены в таблице 2.

Таблица 2 — Энергии связи и радиусы бозонных альфа-атомов/ионов, связанных с лептоном (приближение Хартри Фока). Погрешности включают численные (дискретизация и сходимость) и модельные вклады.

Система	K	Z_ℓ	E_{total} (МэВ)	$r_{O-\alpha}$ (фм)	$r_{\alpha-\alpha}$ (фм)
OHe	1	-2	-1.17 ± 0.01	4.12 ± 0.04	–
OBe	2	-2	-5.66 ± 0.03	2.40 ± 0.03	3.39 ± 0.04
OC	3	-2	-16.85 ± 0.06	1.80 ± 0.03	–

Сравнение с чисто ядерным пределом (раздел 4) выявляет чёткую тенденцию: внешний потенциал лептона приводит к сжатию облака α -частиц и переводит слабо связанное или резонансное состояние ${}^8\text{Be}$ в устойчивые глубоко связанные конфигурации. Таким образом, подход Хартри Фока, откалиброванный в ядерном пределе, естественным образом предсказывает существование стабильных лептон-связанных α -кластерных систем без дополнительной подстройки параметров.

Численная устойчивость и сходимость расчётов проверялись варьированием размера расчётной сетки (128^3 – 160^3) и шага мнимого времени $\Delta\tau$ (0,005–0,015). Во всех случаях относительное изменение полной энергии после выхода на стационарный режим не превышает 10^{-7} на протяжении 2000–3000 итераций.

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Развитое в данной работе приближение Хартри–Фока обеспечивает единое и внутренне согласованное описание как чисто ядерных α -кластерных систем, так и лептон-связанных бозонных тёмных атомов. После калибровки феноменологического взаимодействия между альфа-частицами в чисто ядерном пределе (раздел 4) тот же набор параметров приводит к образованию устойчивых, глубоко связанных конфигураций при введении центрального заряда лептона $N = 1$. Внешнее кулоновское поле вызывает заметное сжатие распределения плотности α -частиц, превращая слабо связанные или квазисвязанные системы, такие как ${}^8\text{Be}$, в сильно связанные состояния с энергиями связи порядка нескольких МэВ на одну α -частицу.

Ключевым результатом работы является необходимость перенормировки эффективного взаимодействия между альфа-частицами, зависящей от окружения системы. Параметры, требуемые для воспроизведения резонанса ${}^8\text{Be}$ и энергии основного состояния ${}^{12}\text{C}$ в рамках приближения Хартри–Фока, отличаются от параметров, получаемых в точных малочастичных методах, таких как уравнения Фаддеева или метод резонирующих групп [30, 32]. Это расхождение отражает отсутствие явных многочастичных корреляций и эффектов паулиевского блокирования в простом произведенческом анзаце. В частности, член Хартри–Фока $(N - 1)V_{\alpha\alpha} * \rho$ эффективно усиливает короткодействующее отталкивание из-за отсутствия антисимметризации. Компенсирующее увеличение силы отталкивающего ядра v_1 , а также умеренная корректировка притягивающего вклада v_2 , восстанавливают согласие с экспериментальными наблюдаемыми величинами. Такая перенормировка эффективных взаимодействий при переходе от точных малочастичных методов к приближению Хартри–Фока является хорошо известной в ядерной физике [23, 31]. Для трёх-альфа системы добавление слабого гауссового трёхчастичного члена дополнительно компенсирует отсутствующие корреляции более высокого порядка, позволяя воспроизвести энергию основного состояния ${}^{12}\text{C}$ с точностью поряд-

ка 10^{-3} МэВ относительно экспериментального значения [35].

Присутствие центрального лептона приводит к систематическому сжатию α -кластерной конфигурации. Например, в системе $ОВе$ межальфовое среднеквадратичное расстояние уменьшается с 3.51 фм в чисто ядерном пределе до 3.39 фм, тогда как в системе $ОС$ оно дополнительно уменьшается до 2.54 фм. Это сжатие увеличивает перекрытие α -частиц с областью притягивающего ядерного потенциала, что приводит к росту полной энергии связи. Одновременно это подчёркивает ограничение используемого подхода: при увеличении числа α -частиц модель начинает давать чрезмерное связывание из-за отсутствия явных корреляционных эффектов. Это проявляется, в частности, при попытке описания четырёх-альфа систем в чисто ядерном пределе, где приближение Хартри–Фока не воспроизводит известные свойства ядра $^{16}О$.

С энергетической точки зрения основной вклад в связывание лептон-связанных систем даёт кулоновское взаимодействие лептон– α , тогда как взаимодействие между альфа-частицами вносит вторичный, но не пренебрежимо малый вклад. Получающаяся структурная перестройка качественно согласуется с общими принципами квантовой механики: более глубокий центральный потенциал приводит к пространственной локализации, что, в свою очередь, увеличивает кинетическую энергию вследствие соотношения неопределённостей. Баланс этих конкурирующих эффектов определяет равновесную конфигурацию системы.

Сравнение с точными малочастичными методами подчёркивает как достоинства, так и ограничения рассматриваемого подхода. Современные микроскопические кластерные модели акцентируют роль паулиевского отталкивания и средозависимых взаимодействий в лёгких ядрах [15], тогда как расчёты по уравнениям Фаддеева явно учитывают трёхчастичные корреляции и антисимметризацию на уровне нуклонов [30]. Эти эффекты отсутствуют в подходе Хартри–Фока и фактически поглощаются в откалиброванном феноменологическом взаимодействии. Поэтому данная модель должна рассмат-

риваться как эффективное описание, а не как *ab-initio* подход. Её основное преимущество заключается в вычислительной эффективности, позволяющей систематически исследовать более крупные α -системы и вариации параметров лептона — области, остающиеся труднодоступными для точных методов.

С точки зрения катализа в рамках первичного нуклеосинтеза (BBN) полученные результаты особенно существенны. Предсказанные энергии связи (порядка 5.7 МэВ для OBe и 16.9 МэВ для OC) достаточно велики, чтобы обеспечить устойчивость к термическому разрушению при температурах ранней Вселенной. Кроме того, уменьшенные зарядовые радиусы (порядка 2.5 фм) указывают на усиление электромагнитных переходов и изменение сечений захвата, что потенциально может приводить к наблюдаемым отклонениям в первичных распространённостях лёгких элементов. Эти выводы согласуются с ожиданиями сценариев катализа с участием тяжёлых лептонов [12] и предоставляют конкретную микроскопическую основу для ограничения свойств таких экзотических частиц по космологическим данным.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе разработан самосогласованный бозонный формализм в приближении Хартри–Фока для описания тёмноатомных (альфа–лептонных) кластерных систем, в которых α -частицы рассматриваются как идентичные бозоны, связанные с тяжёлым отрицательно заряженным лептоном X^{--} с зарядом $-2N$. В рамках данного подхода получены три основных результата.

Во-первых, построенная схема обеспечивает вычислительно эффективный и физически прозрачный мост между физикой ядерных кластеров и экзотическими атомными системами. Во-вторых, показано, что феноменологический потенциал взаимодействия между альфа-частицами, после последовательной перенормировки в рамках приближения Хартри–Фока, способен описывать как слабо связанные ядерные системы, так и сильно связанные

лептон-стабилизированные много- α конфигурации. В-третьих, получены количественные предсказания для энергий связи и зарядовых радиусов, непосредственно релевантные сценариям первичного нуклеосинтеза (BBN), включающим тяжёлые дважды заряженные лептоны [12].

Следует, однако, подчеркнуть ряд ограничений текущего подхода. Использование простого произведенческого анзаца волновой функции не учитывает явные мало- и многочастичные корреляции, включая трёхчастичные эффекты и структуры типа разреженного α -конденсата, характерные, например, для состояния Хойла в ^{12}C . В результате модель следует рассматривать как эффективную теорию, а не как *ab initio* описание. В частности, используемая параметризация, откалиброванная по системе ^8Be , имеет тенденцию к переоценке связывания в более крупных системах в рамках приближения Хартри–Фока. Естественным улучшением является введение плотностно-зависимого эффективного взаимодействия, способного частично воспроизводить отсутствующие корреляционные эффекты и уменьшить необходимость перенастройки потенциала Али–Бодмера [19].

Из проведённого анализа естественным образом следуют направления дальнейших исследований. В первую очередь, необходимо включение более сложных многочастичных структур, таких как THSR-волновые функции или систематические кластерные разложения, позволяющие учитывать подлинные много- α корреляции за пределами приближения Хартри–Фока. Во-вторых, перспективным направлением является расширение расчётов на большие числа α -частиц K , что позволит исследовать эффекты плотности и дать основу для построения более универсальных эффективных взаимодействий. В-третьих, важным направлением является варьирование заряда лептона, что позволит более полно связать микроскопическую структуру с космологическими ограничениями.

В целом, разработанный в данной работе формализм Хартри–Фока для бозонных альфа-кластеров представляет собой устойчивый и гибкий инстру-

мент для исследования взаимосвязи между ядерной кластерной структурой и физикой тёмных атомов. Сочетая физическую наглядность и вычислительную эффективность, он открывает возможность систематического изучения экзотических связанных состояний, недоступных для полностью микроскопических методов, и формирует основу для установления связей между ядерной физикой и космологическими наблюдениями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M. Yu. Khlopov, “Cosmoparticle physics of dark matter”, arXiv:1910.12910 [astro-ph.CO]. <https://arxiv.org/abs/1910.12910>
2. M. Yu. Khlopov, “Composite dark matter from stable charged constituents”, Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **83**, 3 (2006) [Phys. Atom. Nucl. **69**, 2019 (2006)]. <https://arxiv.org/abs/astro-ph/0511796>
3. C. Kouvaris and M. Yu. Khlopov, “Composite dark matter from a model with composite electroweak symmetry breaking”, Phys. Rev. D **78**, 065040 (2008). <https://arxiv.org/abs/0806.1191>
4. J.-R. Cudell and M. Yu. Khlopov, “Dark atoms and the positron-annihilation-line excess in the galactic bulge”, arXiv:1401.5228 [astro-ph.HE]. <https://arxiv.org/pdf/1401.5228.pdf>
5. J.-R. Cudell, M. Yu. Khlopov, and Q. Wallemacq, “Some potential problems of OHe composite dark matter”, Adv. High Energy Phys. **2015**, 231419 (2015). <https://arxiv.org/abs/1412.6030>
6. T. Bikbaev, M. Yu. Khlopov, and D. Sopin, “Dark atom solution for the puzzles of direct dark matter searches”, Symmetry **13**, 2176 (2021). <https://www.mdpi.com/2073-8994/13/11/2176>
7. V. A. Beylin, T. E. Bikbaev, M. Yu. Khlopov, A. G. Mayorov and D. O. Sopin, “Dark Atoms of Nuclear Interacting Dark Matter”, Universe **10**, 368 (2024). <https://www.mdpi.com/2218-1997/10/9/368/pdf>
8. P. Belli, R. Bernabei, V. Beylin, T. Bikbaev, A. Kharakhashyan, M. Khlopov, V. Korchagin, A. Mayorov and D. Sopin, “A Dark Atom Scenario for Direct Dark Matter Investigation”, Universe **12**, 116 (2026). <https://doi.org/10.3390/universe12040116>

9. M. Yu. Khlopov, “Physics of dark matter in the light of dark atoms”, *Mod. Phys. Lett. A* **26**, 2823 (2011). <https://arxiv.org/abs/1111.2838>
10. M. I. Baliño, J. Mwilima, D. O. Sopin, and M. Yu. Khlopov, “Anomalous Isotopes in Dark Atom Models”, arXiv:2512.09438 [hep-ph] (2025). <https://arxiv.org/pdf/2512.09438.pdf>
11. M. Pospelov, “Particle physics catalysis of thermal big bang nucleosynthesis”, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 231301 (2007). <https://arxiv.org/abs/hep-ph/0605215>
12. E. Akhmedov and M. Pospelov, “BBN catalysis by doubly charged particles”, arXiv:2405.06019 [hep-ph] (2024). <https://arxiv.org/pdf/2405.06019.pdf>
13. A. S. Bazhin and V. V. Samarin, “Study of the Structure of the ^9Be Nucleus in the Alpha-Cluster Model by the Method of Hyperspherical Functions”.
14. M. Freer, H. Horiuchi, Y. Kanada-En’yo, D. Lee, and U.-G. Meißner, “Microscopic clustering in light nuclei”, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 035004 (2018). <https://arxiv.org/pdf/1705.06192.pdf>
15. W. von Oertzen, M. Freer, and Y. Kanada-En’yo, “Nuclear clusters and nuclear molecules”, *Phys. Rep.* **432**, 43 (2006).
16. Kanada-En’yo, Yoshiko and Kimura, Masaaki and Ono, Akira, “Antisymmetrized molecular dynamics and its applications to cluster phenomena”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics* (2012). <https://doi.org/10.1093/ptep/pts001>
17. B. Baumgartner and R. Seiringer “Atoms with bosonic “electrons” in strong magnetic fields” arXiv:math-ph/0007007 (2001) <http://dx.doi.org/10.1007/PL00001032>
18. M. Ya. Amusia1 and L. V. Chernysheva “On the bosonic atoms ”

19. S. Ali and A. R. Bodmer, “Phenomenological α - α potentials”, Nucl. Phys. **80**, 99 (1966).
20. A. Bulgac and Y. Yu, “Imaginary-time propagation in nuclear density functional theory”, Phys. Rev. C **72**, 034327 (2005).
21. M. Frigo and S. G. Johnson, “The design and implementation of FFTW3”, Proc. IEEE **93**, 216 (2005). <https://www.fftw.org/fftw-paper-ieee.pdf>
22. R. Kosloff and D. Kosloff, “A Fourier method solution of the time-dependent Schrödinger equation”, J. Chem. Phys. **79**, 1823 (1983).
23. P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer, 1980).
24. I. Angeli and K. P. Marinova, “Table of experimental nuclear charge radii”, At. Data Nucl. Data Tables **99**, 69 (2013).
25. J. C. Pei et al., “Adaptive pseudospectral method for solving the time-dependent Schrödinger equation”, Phys. Rev. C **90**, 024317 (2014).
26. N. Schunck et al., “Error analysis in nuclear density functional theory”, arXiv:1406.4383 [nucl-th]. <https://arxiv.org/pdf/1406.4383.pdf>
27. P. J. Roache, “Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics”, Annu. Rev. Fluid Mech. **29**, 123 (1997).
28. O. Koch, C. Neuhauser, and M. Thalhammer, “Error analysis of high-order splitting methods for nonlinear Schrödinger equations”, BIT Numer. Math. **53**, 185 (2013).
29. D. R. Tilley et al., “Energy levels of light nuclei $A = 8$ ”, Nucl. Phys. A **745**, 155 (2004).
30. Z. Papp and S. Moszkowski, “Two- and three-alpha systems with nonlocal potential”, arXiv:0803.0184 [nucl-th]. <https://arxiv.org/pdf/0803.0184.pdf>

31. P. Descouvemont and D. Baye, “The R-matrix method”, Rep. Prog. Phys. **73**, 036301 (2010). <https://arxiv.org/pdf/0907.4247.pdf>
32. I. N. Filikhin, V. M. Suslov, and B. Vlahovic, “Effective mass of α -cluster in ^{12}C nucleus”.
33. J. W. Clark and E. Krotscheck, “Alpha Matter Revised”, arXiv:2304.08543 [nucl-th]. <https://arxiv.org/abs/2304.08543>
34. A. Tohsaki, H. Horiuchi, P. Schuck, and G. Röpke, “Alpha-cluster condensation in ^{12}C ”, Phys. Rev. Lett. **87**, 192501 (2001).
35. M. Freer et al., “The Hoyle state in ^{12}C ”, Phys. Rev. C **90**, 054324 (2014).