

УДК 539.182:539.188

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ОБРАЗОВАНИЯ АНТИВОДОРОДА В ТРЕХЧАСТИЧНОЙ СИСТЕМЕ $e^+e^-\bar{p}$ С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА–МЕРКУРЬЕВА В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ПОЛНОГО ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА

© 2023 г. В. А. Градусов¹ *, В. А. Руднев¹, Е. А. Яревский¹, С. Л. Яковлев¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
“Санкт-Петербургский государственный университет”, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: v.gradusov@spbu.ru

Поступила в редакцию 28.02.2023 г.

После доработки 24.03.2023 г.

Принята к публикации 28.04.2023 г.

Представлены результаты расчетов низкоэнергетических реакций в трехчастичной системе $e^+e^-\bar{p}$. Особое внимание уделено процессу образования антиводорода при рассеянии на основном и возбужденных состояниях позитрония. Эта реакция важна для некоторых проходящих сейчас экспериментов. Расчеты многоканального рассеяния проведены с помощью предложенного нами эффективного подхода к решению уравнений Фаддеева–Меркурьева в представлении полного орбитального момента. Обсуждаются эффекты, вызванные наличием дальнедействующего дипольного взаимодействия между возбужденным атомом и третьей частицей.

DOI: 10.31857/S0367676523702137, EDN: ZDIOXK

ВВЕДЕНИЕ

Точное теоретическое описание нерелятивистского рассеяния в системах квантовых частиц затруднено высокой размерностью получающихся уравнений и сложностью учета в волновой функции различных процессов многоканального рассеяния. При описании в координатном представлении последнее проявляется в нетривиальном асимптотическом поведении волновой функции на бесконечности, т.е. при стремящихся к бесконечности расстояниях между составляющими систему кластерами частиц. Вид асимптотик еще более усложняется в случае наличия в системе дальнедействующих кулоновского и дипольного взаимодействий. В общем случае N частиц задача определения асимптотик волновой функции чрезвычайно сложна [1].

В случае трехчастичных кулоновских систем асимптотика волновой функции, однако же, в целом достаточно полно изучена [2, 3]. Во многом этого удалось добиться благодаря применению формализма уравнений Фаддеева–Меркурьева, математически эквивалентных уравнению Шрёдингера. Основным преимуществом использования этих уравнений является то, что в их решениях асимптотические области, соответствующие различным конфигурациям (кластеризациям) частиц, разделены. Это также делает уравнения

Фаддеева–Меркурьева удобными для проведения на их основе практических расчетов.

Уравнения для трехчастичных систем представляют собой шестимерные уравнения в частных производных. Их непосредственное решение, даже на современных компьютерах, представляется крайне затруднительным. Поэтому предварительно совершается разложение решения по тем или иным базисам. При решении уравнений типа Фаддеева исторически первым и распространенным подходом является использование бисферического базиса [4]. В работе [5], однако же, было предложено использовать для решения уравнений Фаддеева–Меркурьева (ФМ) другое разложение, которое приводит к уравнениям в представлении полного орбитального момента. Важным преимуществом последнего подхода является то, что получающаяся система уравнений является конечной.

Авторы настоящей работы предложили теоретический и алгоритмический подходы к решению квантовой задачи трех тел, основанный на решении уравнений ФМ в представлении полного орбитального момента [6]. Он был реализован в виде программы, которая позволяет в настоящее время проводить высокоточные расчеты сечения процессов рассеяния в системах трех заряженных частиц при энергиях ниже энергии порога разва-

ла (ионизации) системы, при которых возможны процессы с перестройкой и возбуждением двух-частичных кластеров.

Здесь мы кратко представляем наш подход и полученные с его помощью результаты расчетов низкоэнергетического рассеяния в системе электрон–позитрон–антипротон. Эта система интересна с практической точки зрения тем, что реакция



образования антиводорода $\bar{\text{H}}$ в процессе рассеяния антипротона $\bar{p}$ на газе ридберговского позитрония (Ps) является основной в процессе получения частиц антивещества в некоторых современных экспериментах [7, 8]. В ряде теоретических работ в связи с этим были представлены предложения по увеличению выхода реакции (I), основанные на использовании законов роста сечений над порогами высоковозбужденных состояний позитрония [9, 10], а также такой интересной особенностью сечений, как осцилляции Гайлитиса–Дамбурга [11]. Последние возникают из-за дальнегодействующего дипольного взаимодействия между возбужденным нейтральным атомом ($\bar{\text{H}}$ или Ps) и заряженной частицей.

УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА–МЕРКУРЬЕВА

Рассматривается система трех бесспиновых нерелятивистских заряженных частиц с массами m_α и зарядами Z_α , $\alpha = 1, 2, 3$. В дальнейшем, множество индексов α, β, γ пробегает множество $\{1, 2, 3\}$, нумерующее частицы. Парой α называется пара частиц $\beta\gamma$, дополнительная к частице α . Положение частиц описывается набором координат. В системе координат центра масс стандартным выбором является набор координат Якоби. Для разбиения $\alpha(\beta\gamma)$, они определены как векторы относительного положения между частицами пары α и между их центром масс и частицей α . Удобно использовать приведенные координаты Якоби $\{\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha\}$, которые являются векторами Якоби, масштабируемыми множителями $\sqrt{2\mu_\alpha}$ и $\sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}$ соответственно. Фигурирующие здесь массы являются приведенными массами системы частиц пары α и системы частица α -кластер частиц $\beta\gamma$. Для разных значений α приведенные векторы Якоби связаны ортогональным преобразованием $\vec{x}_\beta = c_{\beta\alpha}\vec{x}_\alpha + s_{\beta\alpha}\vec{y}_\alpha$, $\vec{y}_\beta = -s_{\beta\alpha}\vec{x}_\alpha + c_{\beta\alpha}\vec{y}_\alpha$ [2]. В дальнейшем, где необходимо, предполагается, что векторы Якоби β представлены через α .

В приведенных координатах Якоби уравнения ФМ для трех заряженных частиц [2, 12] имеют вид:

$$\left\{ T_\alpha + V_\alpha(x_\alpha) + V_\beta^{(1)}(x_\beta, y_\beta) + V_3(x_3, y_3) - E \right\} \times \\ \times \psi_\alpha(\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha) = -V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) \psi_\beta(\vec{x}_\beta, \vec{y}_\beta), \quad (\text{1}) \\ \alpha \neq \beta = 1, 2.$$

Здесь $T_\alpha \equiv -\Delta_{\vec{x}_\alpha} - \Delta_{\vec{y}_\alpha}$ – операторы кинетической энергии. Потенциалы V_α представляют собой парное кулоновское взаимодействие $V_\alpha(x_\alpha) = \sqrt{2\mu_\alpha} Z_\beta Z_\gamma / x_\alpha$ ($\beta, \gamma \neq \alpha$) (хотя без каких-либо существенных изменений изложенная ниже теория может быть применена также и в случае суммы кулоновского потенциала и короткодействующей, убывающей не медленнее $O(1/x_\alpha^3)$, добавки). Предполагается, что потенциал V_3 – отталкивающий. Уравнения (1) можно просуммировать, что приводит к уравнению Шрёдингера для волновой функции $\Psi = \sum_\alpha \psi_\alpha$, где ψ_α – компоненты волновой функции, заданные решением уравнений (1).

В уравнениях потенциалы V_α расщепляются на внутреннюю (короткодействующую) $V_\alpha^{(s)}$ и хвостовую (дальнодействующую) части $V_\alpha^{(l)}$

$$V_\alpha(x_\alpha) = V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) + V_\alpha^{(l)}(x_\alpha, y_\alpha). \quad (\text{2})$$

Это расщепление выполняется по формуле $V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) = \chi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) V_\alpha(x_\alpha)$ при помощи функции срезки Меркурьева χ_α , которая ограничивает короткодействующую часть потенциала областями в трехчастичном конфигурационном пространстве, соответствующими точке трехчастичного столкновения и парной конфигурации ($x_\alpha \ll y_\alpha$, когда $y_\alpha \rightarrow \infty$) [2]. В наших работах [13] мы используем функцию срезки в двухчастичном конфигурационном пространстве пары α :

$$\chi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) = \chi_\alpha(x_\alpha) = \frac{2}{1 + \exp\left[\left(x_\alpha/x_{0\alpha}\right)^{2.01}\right]}. \quad (\text{3})$$

Это позволяет снизить количество подбираемых в расчетах параметров функции срезки. В частности, параметр $x_{0\alpha}$ в принципе может быть выбран произвольно, но его выбор изменяет свойства компонент ψ_α , которые важны как с теоретической, так и с вычислительной точек зрения [14]. В [13] мы предложили простой практический алгоритм, который позволяет эффективно его выбрать.

Опишем теперь переход к уравнениям в представлении полного орбитального момента. Для этого введем более подходящие кинематические координаты $(X_\alpha, \Omega_\alpha)$ в шестимерном кон-

фигурационном пространстве задачи. Координаты $X_\alpha = \{x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha = \cos \theta_\alpha \equiv (\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha) / (x_\alpha y_\alpha)\}$ определяют положение частиц в содержащей их плоскости. Три остальные координаты $\Omega_\alpha = \{\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha\}$ определяют положение плоскости в пространстве. Это стандартные углы Эйлера поворота некоторой лабораторной системы координат в связанную с частицами систему координат [15], в которой вектор $\vec{x}_\alpha$ расположен вдоль оси z , а вектор $\vec{y}_\alpha$ лежит в правой половине плоскости xz . Компоненты ФМ в новых координатах раскладываются как

$$\psi_\alpha(X_\alpha, \Omega_\alpha) = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{\tau=\pm 1} \sum_{M=-L}^L \sum_{M'=M_0}^L (1-z_\alpha^2)^{M'/2} \times \times \frac{\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)}{x_\alpha y_\alpha} F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_\alpha). \quad (4)$$

Здесь $M_0 = (1-\tau)/2$, а функции

$$F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2+2\delta_{M'0}}} (D_{MM'}^L(\Omega_\alpha) + \tau(-1)^{M'} D_{M,-M'}^L(\Omega_\alpha)) \quad (5)$$

являются линейными комбинациями D -функций Вигнера $D_{MM'}^L$ [15, 16]. Функция $F_{MM'}^{L\tau}$ является общей собственной функцией квадрата полного орбитального момента, его проекции и операторов пространственной инверсии [5, 16] с собственными значениями L , M и τ . Множитель $(1-z_\alpha^2)^{M'/2}$ в (5) вводится, чтобы сделать парциальные компоненты $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}$ и их производные неособыми при $z_\alpha = \pm 1$ [6, 17].

Теперь, подставляя ряд (4) в уравнения ФМ (1), записанные в новых координатах $(X_\alpha, \Omega_\alpha)$, и проецируя полученные уравнения на функции $F_{MM'}^{L\tau}$, получаем конечный набор трехмерных уравнений для парциальных компонент $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)$

$$\begin{aligned} & \left[T_{\alpha MM'}^{L\tau} + V_\alpha(x_\alpha) + V_\beta^{(1)}(x_\beta, y_\beta) + V_3(x_3, y_3) - E \right] \times \\ & \times \psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha) + T_{\alpha M, M'-1}^{L\tau-} \psi_{\alpha M, M'-1}^{L\tau}(X_\alpha) + \\ & + T_{\alpha M, M'+1}^{L\tau+} \psi_{\alpha M, M'+1}^{L\tau}(X_\alpha) = - \frac{V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) x_\alpha y_\alpha}{(1-z_\alpha^2)^{M'/2} x_\beta y_\beta} \times \quad (6) \\ & \times \sum_{M''=M_0}^L \frac{(-1)^{M''-M'}}{\sqrt{2+2\delta_{M''0}}} 2 F_{M'' M'}^{L\tau}(0, w_{\beta\alpha}, 0) \times \\ & \times (1-z_\beta^2)^{M''/2} \psi_{\beta MM'}^{L\tau}(X_\beta). \end{aligned}$$

Операторы кинетической энергии имеют вид

$$\begin{aligned} T_{\alpha MM'}^{L\tau} = & -\frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} + \frac{1}{x_\alpha^2} (L(L+1) - 2M'^2) - \\ & - \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \left(\frac{1}{y_\alpha^2} + \frac{1}{x_\alpha^2} \right) \left((1-z_\alpha^2) \frac{\partial^2}{\partial z_\alpha^2} - \right. \\ & \left. - 2(M'+1) z_\alpha \frac{\partial}{\partial z_\alpha} - M'(M'+1) \right), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} T_{\alpha M, M'+1}^{L\tau+} = & \frac{1}{x_\alpha^2} \lambda^{L, M'} \sqrt{1+\delta_{M'0}} \times \\ & \times \left[- (1-z_\alpha^2) \frac{\partial}{\partial z_\alpha} + 2(M'+1) z_\alpha \right], \\ T_{\alpha M, M'-1}^{L\tau-} = & \frac{1}{x_\alpha^2} \lambda^{L, -M'} \sqrt{1+\delta_{M'1}} \frac{\partial}{\partial z_\alpha}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $\lambda^{L, M'} = \sqrt{L(L+1) - M'(M'+1)}$. Кинематический угол $w_{\beta\alpha}$ связан с преобразованием координат $(X_\alpha, \Omega_\alpha)$ с разными α . Он дается выражением

$$w_{\beta\alpha} = \begin{cases} \arccos \frac{-s_{\beta\alpha} y_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha} x_\alpha}{x_\beta}, \\ \text{если } (\beta - \alpha) \bmod 3 = 2, \\ 2\pi - \arccos \frac{-s_{\beta\alpha} y_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha} x_\alpha}{x_\beta}, \text{ иначе,} \end{cases} \quad (9)$$

в котором подразумевается, что областью значений $\arccos$ является интервал $[0, \pi]$. Полученные уравнения называются (3D) уравнениями ФМ в представлении полного орбитального момента. Важнейшим свойством системы (6) является тот факт, что уравнения на парциальные компоненты $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}$ с различающимися индексами L , M и τ образуют независимые системы $3(L-M_0+1)$ уравнений. Это непосредственное следствие того, что для рассматриваемых нами трехчастичных систем полный орбитальный момент, его проекция и пространственная четность сохраняются.

Парциальные компоненты $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}$ должны удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых $x_\alpha = 0$, $y_\alpha = 0$.

Перейдем теперь к описанию асимптотических граничных условий, которым должны удовлетворять компоненты ФМ, описывающие состояние рассеяния. Как известно [2], для полной энергии системы E ниже порога трехчастичного развала (ионизации) эти условия имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha}(\vec{x}_{\alpha}, \vec{y}_{\alpha}) = & \sum_{nlm} \frac{\phi_{nl}(x_{\alpha})}{x_{\alpha}} Y_{lm}(\hat{x}_{\alpha}) \times \\ & \times \left[\delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} e^{i(\vec{p}_{n_0}, \vec{y}_{\alpha})} e^{-\pi\eta_{n_0}/2} \Gamma(1+i\eta_{n_0}) {}_1F_1 \times \right. \\ & \times (-i\eta_{n_0}, 1, i(\vec{p}_{n_0}, \vec{y}_{\alpha} - (\vec{p}_{n_0}, \vec{y}_{\alpha}))) + \\ & \left. + \sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}} \tilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\vec{y}_{\alpha}, \vec{p}_{n_0}) \frac{e^{i(p_n y_{\alpha} - \eta_n \log(2p_n y_{\alpha}))}}{y_{\alpha}} \right] \end{aligned} \quad (10)$$

суммы падающей и рассеянной волн. Здесь Y_{lm} обозначает стандартную сферическую гармонику, ${}_1F_1$ — конфлюэнтную гипергеометрическую функцию [18]. Мультииндекс $\mathbb{A} = \{\alpha nlm\} = \{\alpha nlm\}$ задает каналы рассеяния, т.е. различные связанные кулоновские состояния двух тел в паре α с волновой функцией $\phi_{nl}(x_{\alpha}) Y_{lm}(\hat{x}_{\alpha})/x_{\alpha}$ и энергией ε_n . Импульс p_n улетающей частицы определяется условием сохранения энергии $E = p_n^2 + \varepsilon_n$, а параметр Зоммерфельда определяется как $\eta_n \equiv \equiv Z_{\alpha}(Z_{\beta} + Z_{\gamma}) \sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}/(2p_n)$. Амплитуда бинарного рассеяния

$$\mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\vec{y}_{\alpha}, \vec{p}_{n_0}) = \mathcal{A}_C(\vec{y}_{\alpha}, \vec{p}_{n_0}) + \tilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\vec{y}_{\alpha}, \vec{p}_{n_0}) \quad (11)$$

соответствует переходу от начального бинарного канала $\mathbb{A}_0$ к бинарному каналу $\mathbb{A}$. Здесь $\mathcal{A}_C$ — стандартная двухчастичная кулоновская амплитуда рассеяния [19]. Асимптотические граничные условия на парциальные компоненты $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}$ принимают вид суммы $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_{\alpha}) = \chi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_{\alpha}) \delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} + \Xi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_{\alpha})$ парциальных компонент падающей и рассеянной волн, определенных равенством (10). Они могут быть получены проецированием (10) на функции $F_{MM'}^{L\tau}$. Если лабораторная система координат выбрана таким образом, что вектор $\vec{p}_{n_0}$ расположен в ней вдоль оси z , парциальная компонента падающей волны дается выражением

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbb{A}_0 MM'}^{L\tau}(X_{\alpha}) = & \delta_{-M, m_0} \frac{(-1)^M \sqrt{(2l_0+1)}}{p_{n_0} \sqrt{2+2\delta_{M'0}}} \phi_{n_0 l_0}(x_{\alpha}) \times \\ & \times \sum_{\lambda=L-l_0}^{L+l_0} \sqrt{2\lambda+1} i^{\lambda} e^{i\sigma_{\lambda}(\eta_{n_0})} F_{\lambda}(\eta_{n_0}, p_{n_0} y_{\alpha}) \times \\ & \times \frac{Y_{\lambda M'}(\theta_{\alpha}, 0)}{(1-z_{\alpha}^2)^{M'/2}} C_{\lambda, 0, l_0, M}^{L, M'} C_{\lambda, M', l_0, 0}^{L, M'} (1+\tau(-1)^{\lambda+l_0-L}), \end{aligned} \quad (12)$$

где кулоновский фазовый сдвиг $\sigma_{\lambda}(\eta_{n_0}) = \arg \Gamma(1+\lambda+i\eta_{n_0})$, F_{λ} — регулярная кулоновская функция [19], а $C_{j_1, m_1, j_2, m_2}^{j, m}$ обозначают коэффици-

енты Клебша—Гордана. Парциальная компонента рассеянной волны имеет вид

$$\begin{aligned} \Xi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_{\alpha}) = & \delta_{-M, m_0} \frac{(-1)^M}{\sqrt{4\pi(2+2\delta_{M'0})}} \times \\ & \times \sum_{nl} \sqrt{2l+1} \phi_{nl}(x_{\alpha}) \times \\ & \times \sum_{\lambda=L-l}^{L+l} i^{\lambda} C_{\lambda, M', l, 0}^{L, M'} (1+\tau(-1)^{\lambda+l-L}) \times \\ & \times \frac{Y_{\lambda M'}(\theta_{\alpha}, 0)}{(1-z_{\alpha}^2)^{M'/2}} \sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}} \tilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}^{L\lambda} u_{\lambda}^{+}(\eta_n, p_n y_{\alpha}), \end{aligned} \quad (13)$$

где $u_{\lambda}^{+}(\eta_n, p_n y_{\alpha})$ — нерегулярная кулоновская функция [19]. Тогда, как можно показать, сечение рассеяния, определенное по формуле

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} = & \frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}(2l_0+1)} \times \\ & \times \sum_{m=-l}^l \sum_{m_0=-l_0}^{l_0} \int d\vec{y}_{\alpha} \left| \mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\vec{y}_{\alpha}, \vec{p}_{n_0}) \right|^2, \end{aligned} \quad (14)$$

представляется в виде суммы парциальных сечений рассеяния $\sigma_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} = \sum_{L=0}^{+\infty} \sigma_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}^L$ которые могут быть выражены формулой

$$\sigma_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}^L = \frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}(2l_0+1)} \sum_{m_0=-l_0}^{l_0} \sum_{\lambda=L-l}^{L+l} \left| \mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}^{L\lambda} \right|^2. \quad (15)$$

Здесь парциальные компоненты полной амплитуды

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}^{L\lambda} = & \tilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}^{L\lambda} + \\ & + \delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} \frac{\sqrt{\pi(2\lambda+1)}}{ip_{n_0}} \left(e^{i2\sigma_{\lambda}(\eta_{n_0})} - 1 \right) C_{\lambda, 0, l_0, -m_0}^{L, -m_0}. \end{aligned} \quad (16)$$

Вычитая падающую волну (12) из компонент ФМ, получаем неоднородные уравнения (6). Их решение должно удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых $x_{\alpha} = 0$, $y_{\alpha} = 0$ и быть асимптотически равным расходящейся волне (13). Полученная таким образом граничная задача решается численно методом сплайн-коллокации в гауссовых точках. Численная схема [6] подразумевает использование стандартного базиса финитных эрмитовых $\mathcal{S}_5^3$ сплайнов, что приводит к разреженности матриц дискретизованной задачи. Получающаяся система линейных алгебраических уравнений решается итерационным алгоритмом GMRES с предобуславливанием. Для предобуславливания матрица, получающаяся в результате дискретизации оператора левой части (3D) уравнений ФМ (6), обращается при помощи приема, известного как “тензорный трюк” или алгоритм матричной декомпозиции [20, 21]. Наконец, для постановки

Таблица 1. Полные сечения рассеяния (в единицах πa_0^2), полученные суммированием парциальных сечений до указанного значения полного момента L в энергетической области интервала O_{re} в сравнении с результатами других авторов

E , а.е.	−0.22947	−0.21832	−0.17955	−0.13828
$\sigma_{Ps(1) \rightarrow Ps(1)}^{L \leq 4}$	22.1	20.6	18.8	17.4
[22]	21.95	20.64	18.88	17.23
[23]	22.00	20.57	19.16	18.20
$\sigma_{Ps(1) \rightarrow \bar{H}(1)}^{L \leq 4}$		3.31	3.81	4.02
[24]		3.2943	3.7858	4.0551
[23]		3.250	3.779	4.076
$\sigma_{Ps(1) \rightarrow \bar{H}(1)}^{L \leq 9}$		3.31	3.82	4.07
[24]		3.2949	3.9795	4.1043

граничного условия в виде расходящихся волн используется гибридный базис, который получается модификацией вычислительного базиса сплайнов по переменной y_α заменой части сплайнов на дополнительные базисные функции. Эти последние имеют вид расходящейся волны $u_\lambda^+(\eta_n, p_n y_\alpha)$ в асимптотической области больших y_α и обеспечивают выполнение граничного условия в виде расходящихся волн. Поскольку такие дополнительные базисные функции достаточно хорошо описывают поведение решения в асимптотической области, это уменьшает также и размер базиса, требуемого для получения решения с заданной точностью.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Мы рассчитали сечения различных процессов рассеяния в системе $e^+e^-\bar{p}$ в диапазоне полных энергий системы $-0.4997 \dots -0.0555$ а.е. ($-13.6 \dots -1.51$ эВ), включающем энергии порогов образования $\bar{H}$ и Ps в основном (-0.4997 и -0.250 а.е.) и первом возбужденном (-0.1249 и -0.0625 а.е.) состояниях. Для получения представленных результатов мы вычисляли сечения рассеяния с точностью не хуже 1%. Бинарные процессы рассеяния обозначаются начальным и конечным состояниями атома. Например, $Ps(1) \rightarrow \bar{H}(2)$ обозначает процесс образования возбужденного антиводорода с $n = 2$ (s и p состояния) при рассеянии антипротона на основном ($n = 1$) состоянии позитрония.

В энергетической области интервала O_{re} (между порогами состояний $Ps(1)$ и $\bar{H}(2)$), в которой возможны прямой процесс и перестройка с атомами антиводорода и позитрония в начальном и конечном состояниях, мы рассчитали парциальные сечения рассеяния с $L = 0-9$. Парциальные и суммарное сечения рассеяния представле-

ны в табл. 1 и на рис. 1. Представленное в табл. 1 сравнение наших значений с результатами, полученными другими авторами, в большинстве случаев показывает совпадение в пределах точности наших расчетов.

Табл. 2 и рис. 2 содержат парциальные сечения рассеяния в области энергий выше порогов первых возбужденных состояний антиводорода $\bar{H}(2)$ и позитрония $Ps(2)$. О высокой надежности полученных результатов свидетельствует наличие в сечениях резонансов Фешбаха, положение которых вычислено достаточно точно специальными методами расчета резонансов [26–29]. Это иллюстрируется рис. 2. В табл. 2 значения также сравниваются с немногочисленными результатами,

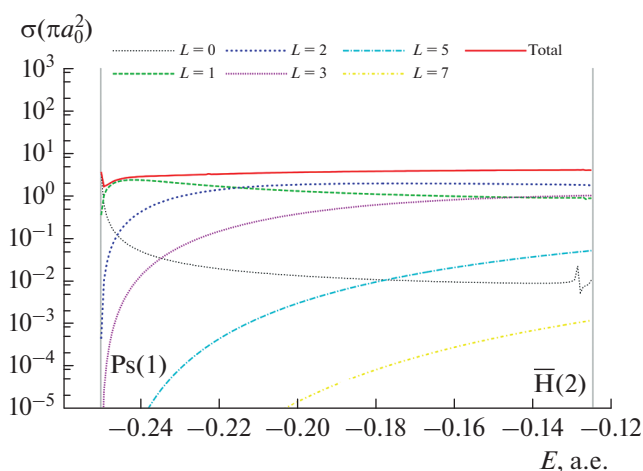


Рис. 1. Парциальные и полное сечения (в единицах πa_0^2) образования антиводорода в энергетической области интервала O_{re} . Полное сечение рассеяния получено суммированием парциальных сечений с $L = 0-9$.

Таблица 2. Парциальные сечения рассеяния (в единицах πa_0^2) в области энергий $\text{Ps}(2)-\bar{\text{H}}(3)$ в сравнении с результатами других авторов

E , а.е.	−0.06228	−0.06198	−0.06123	−0.05978
$\sigma_{\text{Ps}(1,2) \rightarrow \bar{\text{H}}(1)}^0$ [25]	0.169 0.282	0.078 0.097	0.037 0.047	0.022 0.030
$\sigma_{\text{Ps}(1,2) \rightarrow \bar{\text{H}}(1)}^1$ [25]	3.67 3.373	1.98 1.783	1.20 1.130	0.944 0.886
$\sigma_{\text{Ps}(1) \rightarrow \bar{\text{H}}(2)}^0$ [25]	0.106 0.125	0.105 0.116	0.104 0.112	0.103 0.107
$\sigma_{\text{Ps}(1) \rightarrow \bar{\text{H}}(2)}^1$ [25]	0.999 1.041	0.995 1.042	0.993 1.015	0.992 1.040
$\sigma_{\text{Ps}(2) \rightarrow \bar{\text{H}}(2)}^0$ [24]	184 218.84	79.9 76.701	34.0 32.481	16.9 17.201
$\sigma_{\text{Ps}(2) \rightarrow \bar{\text{H}}(2)}^1$ [24]	479 482.65	229 226.62	102 101.91	50.1 50.73

полученными другими авторами. Хотя в целом совпадение результатов хорошее, наблюдаются некоторые достаточно значительные расхождения значений сечений, связанных с каналами возбужденных атомов $\text{Ps}(2)$ и $\bar{\text{H}}(2)$, особенно при энергиях чуть выше порога $\text{Ps}(2)$. Мы связываем сложность вычисления этих величин с эффектами наличия в системе дальнедействующего дипольного взаимодействия $D_\alpha x_\alpha z_\alpha / y_\alpha^2$ между кластером частиц пары α и улетающей частицей.

Действительно, наличие этого взаимодействия искажает асимптотику (13) рассеянной волны уже в первом порядке ее разложения по степеням $1/y_\alpha$ [30]. В расчетах с асимптотикой (13) это проявляется в крайне медленной сходимости сечений, связанных с возбужденными состояниями атомов, по отношению к размеру счетной области по переменной y_α . Это проиллюстрировано на рис. 3. Заметим, что дипольное взаимодействие также является причиной возникновения такой пороговой аномалии сечений, как осцилляции Гайлитиса–Дамбурга [11].

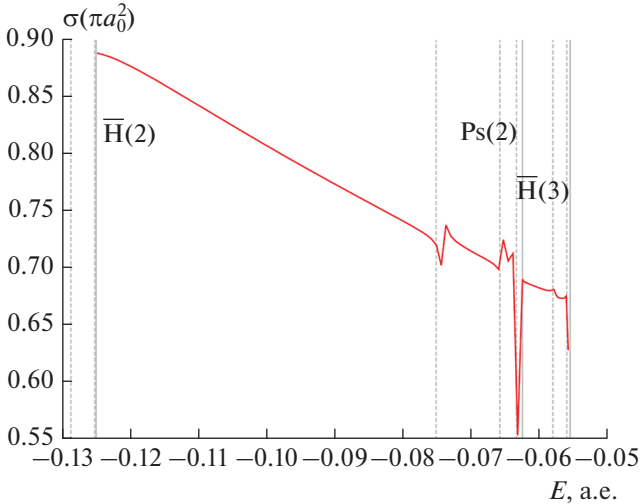


Рис. 2. Сечение образования антиводорода $\sigma_{\text{Ps}(1) \rightarrow \bar{\text{H}}(1)}^1$. Вертикальными штриховыми линиями показаны положения резонансов [26–29].

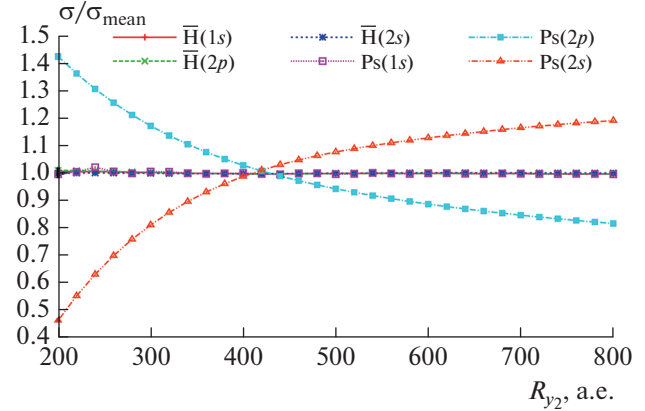


Рис. 3. Зависимость нормализованных на среднее значений сечений при энергии $E = -0.057$ а.е. от размера R_{y_2} счетной области по переменной y_2 . Начальный канал $\text{Ps}(2p)$, конечные каналы указаны в подписях к рисунку.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, развит подход к расчетам сечений многоканального рассеяния в системе трех заряженных частиц, основанный на решении уравнений ФМ в представлении полного орбитального момента. Этот подход был апробирован нами и показал хорошие результаты в расчетах реакций в системе $e^+e^-\bar{p}$. Исследование этой системы представляет и самостоятельный интерес. В настоящий момент мы работаем над проблемой правильного учета дипольного взаимодействия в асимптотике компонент ФМ, что, как мы надеемся, позволит получать надежные результаты в более широком диапазоне энергий, включающем пороги более высоких возбужденных состояний атомов.

Исследования выполнены с использованием Ресурсного центра “Вычислительный центр СПбГУ” (<http://cc.spbu.ru>).

Работа В.А. Градусова и С.Л. Яковлева выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-22-00109).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Меркурьев С.П., Яковлев С.Л. // ТМФ. 1983. Т. 56. № 1. С. 60.
2. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
3. Яковлев С.Л. // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 116. № 4. С. 260; Yakovlev S.L. // JETP Lett. 2022. V. 116. No. 4. P. 268.
4. Merkuriev S.P., Gignoux C., Laverne A. // Ann. Phys. 1976. V. 99. P. 30.
5. Kostrykin V.V., Kvitsinsky A.A., Merkuriev S.P. // Few-Body Syst. 1989. V. 6. P. 97.
6. Gradusov V.A., Roudnev V.A., Yarevsky E.A. et al. // Commun. Comput. Phys. 2021. V. 30. P. 255.
7. Testera G., Aghion S., Amsler C. et al. (AEGIS Collaboration) // Hyperfine Interact. 2015. V. 233. P. 13.
8. Perez P., Banerjee D., Biraben F. et al. // Hyperfine Interact. 2015. V. 233. P. 21.
9. Kadyrov A.S., Bray I., Charlton M. et al. // Nature Commun. 2017. V. 8. P. 1544.
10. Krasnicky D., Testera G., Zurlo N. // J. Physics B. 2019. V. 52. Art. No. 115202.
11. Гайлитис М., Дамбург Р. // ЖЭТФ. 1963. Т. 44. С. 1644; Gailitis M., Damburg R. // Sov. Phys. JETP. 1963. V. 17. P. 1107.
12. Merkuriev S.P. // Ann. Phys. 1980. V. 130. P. 395.
13. Gradusov V.A., Roudnev V.A., Yarevsky E.A. et al. // J. Physics B. 2019. V. 52. Art. No. 055202.
14. Яковлев С.Л., Панн З. // ТМФ. 2010. Т. 163. С. 314; Yakovlev S.L., Papp Z. // Theor. Math. Phys. 2010. V. 163. P. 666.
15. Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
16. Биденхарн Л., Лаук Дж. Угловой момент в квантовой физике. Т. 1. М.: Мир, 1984.
17. Scrinzi A. // J. Physics B. 1996. V. 29. P. 6055.
18. <http://dlmf.nist.gov>.
19. Мессиа А. Квантовая механика. Т. 1. М.: Наука, 1978.
20. Schellingerhout N.W., Kok L.P., Bosveld G.D. // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 5568.
21. Bialecki B., Fairweather G., Karageorghis A. // Numer. Algor. 2011. V. 56. P. 253.
22. Hu C.-Y. // J. Physics B. 1999. V. 32. P. 3077.
23. Gien T.T. // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. P. 1332.
24. Hu C.-Y., Caballero D., Hlousek Z. // J. Physics B. 2001. V. 34. P. 331.
25. Hu C.-Y., Caballero D. // J. Physics B. 2002. V. 35. P. 3879.
26. Ho Y.K., Yan Z.-C. // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. Art. No. 032716.
27. Varga K., Mitroy J., Mezei J. Zs. et al. // Phys. Rev. A. 2008. V. 77. Art. No. 044502.
28. Yu R.-M., Cheng Y.-J., Jiao L.-G. et al. // Chin. Phys. Lett. 2012. V. 29. Art. No. 053401.
29. Umair M., Jonsell S. // J. Physics B. 2014. V. 47. Art. No. 225001.
30. Gailitis M. // J. Physics B. 1976. V. 9. P. 843.

Theoretical study of antihydrogen formation reactions in the three body $e^+e^-\bar{p}$ system via Faddeev–Merkuriev equations in total orbital momentum representation

V. A. Gradusov^{a,*}, V. A. Roudnev^a, E. A. Yarevsky^a, S. L. Yakovlev^a

^a St. Petersburg State University, Department of Computational Physics, St Petersburg, 199034 Russia

*e-mail: v.gradusov@spbu.ru

The results of calculations of low-energy reaction in the three body $e^+e^-\bar{p}$ system with the emphasis on the process of the antihydrogen formation from the ground and excited states of the positronium are presented. This reaction is important for some of the current antimatter experiments. The multi-channel scattering calculations are based on a new highly efficient method of solving the Faddeev–Merkuriev equations in total orbital momentum representation. We discuss the effects that originate from the long-range dipole interaction between the excited atom and the spectator particle.