Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 1, с. 6 – 12

Теоретическое исследование реакций в трехчастичной $e^-e^+\bar{p}$ системе и сечения образования антиводорода

В. А. Градусов[1)], *В. А. Руднев*[1)], *Е. А. Яревский*[1)], *С. Л. Яковлев*[1)]

Кафедра вычислительной физики, Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 25 апреля 2021 г.
После переработки 10 июня 2021 г.
Принята к публикации 10 июня 2021 г.

Мы применяем новый высокоэффективный метод решения уравнений Фаддеева–Меркурьева для многоканальных расчетов сечения образования антиводорода при рассеянии антипротонов на основном и возбужденных состояниях позитрония. Наши результаты демонстрируют хорошее согласие с известными данными по полным и парциальным сечениям для всех каналов реакции. Используя умеренные вычислительные ресурсы, мы достигли очень высокого энергетического разрешения.

DOI: 10.31857/S1234567821130036

В ЦЕРН планируются и проводятся несколько экспериментов с антивеществом, использующих установку замедления антипротонов. Два из них, нацеленные на гравитационное поведение антивещества – AEgIS [1] и GBAR [2] – используют, среди прочего, трехтельную реакцию

$$\bar{p} + \mathrm{Ps} \rightarrow \overline{\mathrm{H}} + e^- \qquad (1)$$

образования антиводорода $\overline{\mathrm{H}}$ в процессе рассеяния антипротона $\bar{p}$ на газе ридберговского позитрония (Ps) для получения частиц антивещества. Несмотря на то, что реакции перезарядки имеют долгую историю экспериментального и теоретического изучения, лишь некоторые подходы продемонстрировали определенный успех в изучении $e^-e^+\bar{p}$ рассеяния в многоканальном глубоконеупругом режиме [3–8]. В частности, авторы [7, 8] обсуждали рост сечений образования антиводорода, происходящий прямо над порогами высоковозбужденных состояний позитрония, что представляет особый интерес как механизм увеличения скорости реакции образования антиводорода при производстве атомов антивещества.

Однако, теоретическое и вычислительное исследование этой реакции осложняется наличием множества околопороговых резонансов, дальнодействующих поляризационных взаимодействий во многих каналах, сложных вкладов множественных виртуальных возбуждений различной геометрии. В качестве примера чувствительной природы системы можно упомянуть осцилляции Гайлитиса–Дамбурга [9, 10], которые возникают из-за дальнодействующего дипольного взаимодействия между возбужденным нейтральным атомом (либо $\overline{\mathrm{H}}$, либо Ps) и заряженной частицей (e^- или $\bar{p}$). Все эти особенности системы делают снижение размерности проблематичным и требуют подхода, который учитывал бы динамику системы в полной размерности.

Из-за такой сложной природы системы количество надежных теоретических результатов остается ограниченным: известные результаты имеют недостаточное разрешение либо по энергии, либо по сечению, либо по обеим характеристикам. Имеется определенный недостаток данных о сечениях низкоэнергетического рассеяния $e^-e^+\bar{p}$, полученных независимыми подходами.

Мы предложили и реализовали подход к решению квантовой задачи трех тел, который сочетает в себе как теоретически обоснованную технику, так и вычислительно эффективный алгоритм [11]. Он основан на решении уравнений Фаддеева–Меркурьева (ФМ) [12], которые в представлении полного орбитального момента [13] сводятся к конечной системе трехмерных уравнений в частных производных. Это выгодно отличает наш подход от подхода работ [3–5], где разложение по биполярным гармоникам приводит к бесконечной системе двумерных интегро-дифференциальных уравнений. Наши более ранние расчеты [11] показали, что такой подход позволяет с высокой точностью вычислять энергии связи для состояний с высоким полным орбитальным моментом. Здесь мы применяем его к задачам рассеяния и выполняем серию расчетов сечений образования антиводорода для реакции (1). Мы сравниваем наши

[1)]e-mail: v.gradusov@spbu.ru; v.rudnev@spbu.ru; e.yarevsky@spbu.ru; s.yakovlev@spbu.ru

результаты для сечений, обладающие высоким разрешением, с доступными данными для сечений образования антиводорода из работ [3–5, 14–16] для рассеяния антипротонов на основном и первом возбужденном состояниях позитрония как для полных, так и для парциальных сечений. В обоих случаях наши данные расширяют и подтверждают более ранние результаты.

Рассматривается система трех бесспиновых нерелятивистских заряженных частиц с массами m_α и зарядами Z_α, $\alpha = 1,2,3$. В дальнейшем, множество индексов $\{\alpha,\,\beta,\,\gamma\}$ 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 $(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha)$, которые являются векторами Якоби, масштабируемыми множителями $\sqrt{2\mu_\alpha}$ и $\sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}$ соответственно. Здесь приведенные массы равны

$$\mu_\alpha = \frac{m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma}, \qquad \mu_{\alpha(\beta\gamma)} = \frac{m_\alpha(m_\beta+m_\gamma)}{m_\alpha+m_\beta+m_\gamma}. \tag{2}$$

Для разных значений α приведенные векторы Якоби связаны ортогональным преобразованием $\mathbf{x}_\beta = c_{\beta\alpha}\mathbf{x}_\alpha + s_{\beta\alpha}\mathbf{y}_\alpha$, $\mathbf{y}_\beta = -s_{\beta\alpha}\mathbf{x}_\alpha + c_{\beta\alpha}\mathbf{y}_\alpha$ [12]. В дальнейшем, где необходимо, предполагается, что векторы Якоби β представлены через α.

В приведенных координатах Якоби уравнения ФМ для трех заряженных частиц [12, 17] могут быть записаны как (полужирный шрифт используется для векторов):

$$\begin{gathered}\{T_\alpha + V_\alpha(x_\alpha) + V_\beta^{(\mathrm{l})}(x_\beta,y_\beta) + V_3(x_3,y_3) - E\}\times \\ \times\,\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha) = -V_\alpha^{(\mathrm{s})}(x_\alpha,y_\alpha)\psi_\beta(\mathbf{x}_\beta,\mathbf{y}_\beta), \\ \alpha\neq\beta = 1,2.\end{gathered} \tag{3}$$

Здесь $T_\alpha \equiv -\Delta_{\mathbf{x}_\alpha} - \Delta_{\mathbf{y}_\alpha}$ – операторы кинетической энергии. Потенциалы V_α представляют собой парное кулоновское взаимодействие $V_\alpha(x_\alpha) = \sqrt{2\mu_\alpha}Z_\beta Z_\gamma/x_\alpha$ $(\beta,\gamma\neq\alpha)$. Предполагается, что потенциал V_3 – отталкивающий. Потенциалы V_α расщепляются на внутреннюю (короткодействующую) $V_\alpha^{(\mathrm{s})}$ и хвостовую (дальнодействующую) части $V_\alpha^{(\mathrm{l})}$

$$V_\alpha(x_\alpha) = V_\alpha^{(\mathrm{s})}(x_\alpha,y_\alpha) + V_\alpha^{(\mathrm{l})}(x_\alpha,y_\alpha). \tag{4}$$

Уравнения (3) можно просуммировать, что приводит к уравнению Шредингера для волновой функции $\Psi = \sum_\alpha \psi_\alpha$, где ψ_α – компоненты волновой функции, заданные решением уравнений (3).

Расщепление (4) выполняется согласно $V_\alpha^{(\mathrm{s})}(x_\alpha,y_\alpha) = \chi_\alpha(x_\alpha,y_\alpha)V_\alpha(x_\alpha)$, где функция срезки Меркурьева χ_α ограничивает короткодействующую часть потенциала областями в трехчастичном конфигурационном пространстве, соответствующими точке трехчастичного столкновения и парной конфигурации ($x_\alpha \ll y_\alpha$, когда $y_\alpha \to \infty$) [12]. Следуя [18, 19], мы используем функцию срезки в двухчастичном конфигурационном пространстве пары α:

$$\chi_\alpha(x_\alpha,y_\alpha) = \chi_\alpha(x_\alpha) = 2/\left\{1+\exp[(x_\alpha/x_{0\alpha})^{2.01}]\right\}. \tag{5}$$

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 [20]. Его можно эффективно выбрать с помощью простого практического алгоритма, представленного в [19].

Процедура расщепления делает свойства уравнений ФМ для кулоновских потенциалов так же подходящими для задач рассеяния, как стандартные уравнения Фаддеева в случае короткодействующих потенциалов [21]. Ключевым свойством уравнений ФМ (3) является то, что правая часть каждого уравнения ограничена окрестностью точки тройного столкновения [20]. Это приводит к асимптотическому расщеплению системы уравнений ФМ и, следовательно, асимптота каждой компоненты ψ_α для энергий ниже порога развала содержит только члены, соответствующие бинарным конфигурациям в паре α [20, 21]. Для полной энергии системы E ниже порога трехчастичной ионизации асимптота имеет вид

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha) = \chi_{\mathbb{A}_0}(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha)\delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} + \Xi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha), \tag{6}$$

где рассеянная волна имеет вид

$$\begin{aligned}\Xi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha) = \sum_{n\ell m}\frac{\phi_A(x_\alpha)}{x_\alpha}Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}}\times \\ \times\,\widetilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A},\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha,\mathbf{p}_{n_0})\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_n y_\alpha - \eta_n\log(2p_n y_\alpha))}}{y_\alpha}.\end{aligned} \tag{7}$$

Здесь $Y_{\ell m}$ обозначает стандартную сферическую гармонику. Мультииндекс $\mathbb{A} = \{Am\} = \{\alpha n\ell m\}$ задает каналы рассеяния, т.е. различные связанные кулоновские состояния двух тел в паре α с волновой функцией $\phi_A(x_\alpha)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)/x_\alpha$ и энергией ε_n. Импульс p_n улетающей частицы определяется условием сохранения энергии $E = p_n^2 + \varepsilon_n$, а параметр Зоммерфельда определяется как $\eta_n \equiv Z_\alpha(Z_\beta +$

$+Z_\gamma)\sqrt{2m_{\alpha(\beta\gamma)}}/(2p_n)$. Начальный канал задается падающей волной

$$\chi_{\mathbb{A}_0}(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha)=\frac{\phi_{A_0}(x_\alpha)}{x_\alpha}Y_{\ell_0 m_0}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{p}_{n_0},\mathbf{y}_\alpha)}\mathrm{e}^{-\pi\eta_{n_0}/2}\times \\ \times\,\Gamma(1+\mathrm{i}\eta_{n_0})\,{}_1F_1(-\mathrm{i}\eta_{n_0},1,\mathrm{i}(p_{n_0}y_\alpha-(\mathbf{p}_{n_0},\mathbf{y}_\alpha))),\quad (8)$$

где ${}_1F_1$ – конфлюэнтная гипергеометрическая функция [22]. Амплитуда бинарного рассеяния

$$\mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha,\mathbf{p}_{n_0})=\mathcal{A}_{\mathrm{C}}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha,\mathbf{p}_{n_0})+\widetilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A},\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha,\mathbf{p}_{n_0})\quad (9)$$

соответствует переходу от начального бинарного канала $\mathbb{A}_0$ к бинарному каналу $\mathbb{A}$. Здесь $\mathcal{A}_{\mathrm{C}}$ – стандартная двухчастичная кулоновская амплитуда рассеяния [23]. Сечение рассеяния определяется выражением

$$\sigma_{AA_0}=\frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}(2\ell_0+1)}\times \\ \times\sum_{m=-\ell}^{\ell}\sum_{m_0=-\ell_0}^{\ell_0}\int \mathrm{d}\hat{\mathbf{y}}_\alpha\left|\mathcal{A}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha,\mathbf{p}_{A_0})\right|^2.\quad (10)$$

Добавляя граничные условия (6)–(8) к уравнениям ФМ (3), получаем краевую задачу, которую можно решить численно. Однако каждое уравнение (3) является шестимерным уравнением в частных производных. Чтобы сделать вычисления возможными, уравнения упрощаются путем проецирования (3) на подпространство с заданным полным орбитальным моментом [13], который является интегралом движения для рассматриваемых здесь процессов. Для этого вводятся более подходящие кинематические координаты $(X_\alpha,\ \Omega_\alpha)$ в шестимерном конфигурационном пространстве задачи. Координаты $X_\alpha = \{x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha=\cos\theta_\alpha\equiv(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha)/(x_\alpha y_\alpha)\}$ 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 [24], в которой вектор $\mathbf{x}_\alpha$ расположен вдоль оси z, а вектор $\mathbf{y}_\alpha$ лежит в правой половине плоскости xz. Компоненты ФМ в новых координатах раскладываются как

$$\psi_\alpha(X_\alpha,\Omega_\alpha)=\sum_{L=0}^{+\infty}\sum_{\tau=\pm1}\sum_{M=-L}^{L}\sum_{M'=M_0}^{L}(1-z_\alpha^2)^{M'/2} \\ \frac{\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)}{x_\alpha y_\alpha}F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_\alpha).\quad (11)$$

Здесь $M_0=(1-\tau)/2$, а функции

$$F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_\alpha)=\frac{1}{\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\times \\ \times\left(D_{MM'}^{L}(\Omega_\alpha)+\tau(-1)^{M'}D_{M,-M'}^{L}(\Omega_\alpha)\right)\quad (12)$$

являются линейными комбинациями D-функций Вигнера $D_{MM'}^{L}$ [24, 25]. Функция $F_{MM'}^{L\tau}$ является общей собственной функцией квадрата полного орбитального момента, его проекции и операторов пространственной инверсии [13, 25] с собственными значениями $L(L+1)$, M и τ. Множитель $(1-z_\alpha^2)^{M'/2}$ в (11) вводится, чтобы сделать парциальные компоненты $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}$ и их производные неособыми в $z_\alpha=\pm1$ [11, 26]. Теперь, подставляя ряд (11) в уравнения ФМ (3), 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 $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)$

$$\left[T_{\alpha MM'}^{L\tau}+V_\alpha(x_\alpha)+V_\beta^{(\mathrm{l})}(x_\beta,y_\beta)+ \right.\\ \left.+V_3(x_3,y_3)-E\right]\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)+ \\ +T_{\alpha M,M'-1}^{L\tau-}\psi_{\alpha M,M'-1}^{L\tau}(X_\alpha)+ \\ T_{\alpha M,M'+1}^{L\tau+}\psi_{\alpha M,M'+1}^{L\tau}(X_\alpha)= \\ =-\frac{V_\alpha^{(\mathrm{s})}(x_\alpha,y_\alpha)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}\frac{x_\alpha y_\alpha}{x_\beta y_\beta}\sum_{M''=M_0}^{L}\frac{(-1)^{M''-M'}2}{\sqrt{2+2\delta_{M''0}}}\times \\ \times F_{M''M'}^{L\tau}(0,w_{\beta\alpha},0)(1-z_\beta^2)^{\frac{M''}{2}}\psi_{\beta MM''}^{L\tau}(X_\beta).\quad (13)$$

Операторы кинетической энергии имеют вид

$$T_{\alpha MM'}^{L\tau}=-\frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2}+\frac{1}{y_\alpha^2}\left(L(L+1)-2M'^2\right)-\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2}- \\ -\left(\frac{1}{y_\alpha^2}+\frac{1}{x_\alpha^2}\right)\left((1-z_\alpha^2)\frac{\partial^2}{\partial z_\alpha^2}-2(M'+1)z_\alpha\frac{\partial}{\partial z_\alpha}- \right.\\ \left.-M'(M'+1)\right),\quad (14)$$

$$T_{\alpha M,M'+1}^{L\tau+}=\frac{1}{y_\alpha^2}\lambda^{L,M'}\sqrt{1+\delta_{M'0}}\times \\ \times\left[-(1-z_\alpha^2)\frac{\partial}{\partial z_\alpha}+2(M'+1)z_\alpha\right], \\ T_{\alpha M,M'-1}^{L\tau-}=\frac{1}{y_\alpha^2}\lambda^{L,-M'}\sqrt{1+\delta_{M'1}}\frac{\partial}{\partial z_\alpha}.\quad (15)$$

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

$$w_{\beta\alpha}=\begin{cases}\arccos\frac{-s_{\beta\alpha}y_\alpha z_\alpha+c_{\beta\alpha}x_\alpha}{x_\beta}, \\ \text{если } (\beta-\alpha)\bmod 3=2, \\ 2\pi-\arccos\frac{-s_{\beta\alpha}y_\alpha z_\alpha+c_{\beta\alpha}x_\alpha}{x_\beta},\ \text{иначе,}\end{cases}\quad (16)$$

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 (13) является тот факт, что уравнения на парциальные компоненты $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$ с различающимися индексами L, M и τ образуют независимые системы уравнений. Это непосредственное следствие того, что для рассматриваемых нами трехчастичных систем полный орбитальный момент, его проекция и пространственная четность сохраняются. При данных L, M и τ система (13) состоит из $3(L-M_0+1)$ трехмерных уравнений в частных производных. Парциальные компоненты $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$ должны удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых $x_\alpha=0$, $y_\alpha=0$.

Асимптотические граничные условия на парциальные компоненты $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$ принимают вид суммы

$$\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha)=\chi^{L\tau}_{\mathbb{A}_0 MM'}(X_\alpha)\delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}+\Xi^{L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) \quad (17)$$

парциальных компонент падающей и рассеянной волн, определенных равенствами (6)–(8). Они могут быть получены проецированием (7) и (8) на функции $F^{L\tau}_{MM'}$. Если лабораторная система координат выбрана таким образом, что вектор $\mathbf{p}_{n_0}$ расположен в ней вдоль оси z, парциальная компонента падающей волны дается выражением

$$\chi^{L}_{\mathbb{A}_0 MM'}(X_\alpha)=\delta_{-M,m_0}\frac{(-1)^M\sqrt{(2\ell_0+1)}}{p_{n_0}\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\phi_{A_0}(x_\alpha)\times$$
$$\times\sum_{\lambda=|L-\ell_0|}^{L+\ell_0}\sqrt{2\lambda+1}\,\mathrm{i}^\lambda \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}F_\lambda(\eta_{n_0},p_{n_0}y_\alpha)\times$$
$$\times\frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}C^{L,M}_{\lambda,0,\ell_0,M}C^{L,M'}_{\lambda,M',\ell_0,0}\left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell_0-L}\right), \quad (18)$$

где кулоновский фазовый сдвиг $\sigma_\lambda(\eta_{n_0})=\arg\Gamma(1+\lambda+\mathrm{i}\eta_{n_0})$, F_λ – регулярная кулоновская функция [23], а $C^{j,m}_{j1,m1,j2,m2}$ обозначают коэффициенты Клебша–Гордана. Парциальная компонента рассеянной волны имеет вид

$$\Xi^{L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha)=\delta_{M,-m_0}\frac{(-1)^M}{\sqrt{4\pi(2+2\delta_{M'0})}}\sum_{n\ell}\sqrt{2\ell+1}\times$$
$$\times\phi_A(x_\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_n y_\alpha-\eta_n\log(2p_n y_\alpha))}\sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}\times$$
$$\times\sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}}\widetilde{\mathcal{A}}^{L\lambda}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}C^{L,M'}_{\lambda,M',\ell,0}\left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}\right). \quad (19)$$

Парциальная амплитуда $\widetilde{\mathcal{A}}^{L\lambda}_{A\mathbb{A}_0}$ связана с коэффициентами разложения амплитуды $\widetilde{\mathcal{A}}_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha)$ в ряд по сферическим гармоникам. Можно показать, что сечение рассеяния σ_{AA_0}, определенное равенством (10), может быть выражено формулами

$$\sigma_{AA_0}=\sum_{L=0}^{+\infty}\sigma^L_{AA_0},$$

$$\sigma^L_{AA_0}=\frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}}\frac{1}{2\ell_0+1}\sum_{m_0=-\ell_0}^{\ell_0}\sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\left|\mathcal{A}^{L\lambda}_{A\mathbb{A}_0}\right|^2, \quad (20)$$

где $\sigma^L_{AA_0}$ – парциальные сечения рассеяния, через парциальные компоненты полной амплитуды

$$\mathcal{A}^{L\lambda}_{A\mathbb{A}_0}=\widetilde{\mathcal{A}}^{L\lambda}_{A\mathbb{A}_0}+\delta_{AA_0}\times$$
$$\times\frac{\sqrt{\pi(2\lambda+1)}}{\mathrm{i}p_{n_0}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}-1\right)C^{L,-m_0}_{\lambda,0,\ell_0,-m_0}. \quad (21)$$

Вычитая падающую волну из компонент ФМ, получаем неоднородные уравнения (13). Их решение должно удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых $x_\alpha=0$, $y_\alpha=0$ и быть асимптотически равным расходящейся волне (19). Полученная таким образом граничная задача решается численно методом сплайн-коллокации. Численная схема описана в работе [11], где заинтересованный читатель может найти ее детальное описание. Для постановки граничного условия в виде расходящихся волн мы используем гибридный базис, который получается добавлением расходящихся волн в набор базисных сплайнов по переменной y_α. Каждая дополнительная базисная функция имеет вид нерегулярной кулоновской функции [23] $u^+_\ell(\eta_n,p_n y_\alpha)$ в асимптотической области, а в остальной части интервала решения является полиномом, подобранным таким образом, что он удовлетворяет нулевым граничным условиям типа Дирихле в начале координат и обеспечивает требуемую непрерывность базисной функции. Использование гибридного базиса, с одной стороны, обеспечивает выполнение граничного условия в виде расходящихся волн. С другой стороны, это уменьшает требуемое для получения решения с заданной точностью количество базисных функций, поскольку дополнительные функции достаточно хорошо описывают поведение решения при больших y_α.

Для получения представленных в статье результатов мы вычисляли сечения рассеяния с точностью не хуже 1 %. Бинарные процессы рассеяния обозначаются начальным и конечным состояниями атома. Например, $\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)$ означает процесс образования возбужденного антиводорода с $n=2$ (s и p

состояния) при рассеянии антипротона на основном ($n = 1$) состоянии позитрония. В энергетической области интервала Ope (между порогами состояний Ps(1) и $\overline{\mathrm{H}}(2)$), 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 представлены в табл. 1, на рис. 1 и 2. Значения сравниваются с результатами, полученными другими авторами.

Таблица 1. Полные сечения рассеяния (в единицах πa_0^2), полученные суммированием парциальных сечений до указанного значения полного момента L в энергетической области Ps(1)–$\overline{\mathrm{H}}(2)$ в сравнении с результатами других авторов

E, a.e.	−0.22947	−0.21832	−0.17955	−0.13828
$\sigma^{L\leq 4}_{\mathrm{Ps}(1)\to\mathrm{Ps}(1)}$	22.1	20.6	18.8	17.4
[14]	21.95	20.64	18.88	17.23
[15]	22.00	20.57	19.16	18.20
$\sigma^{L\leq 4}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$		3.31	3.81	4.02
[16]		3.2943	3.7858	4.0551
[15]		3.250	3.779	4.076
$\sigma^{L\leq 9}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$		3.31	3.82	4.07
[16]		3.2949	3.9795	4.1043

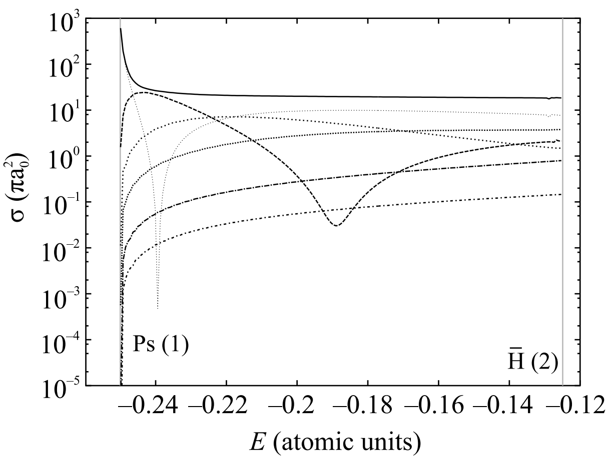

Рис. 1. Парциальные и полное упругие сечения рассеяния (в единицах πa_0^2) антипротона на позитронии в области энергий Ps(1)–$\overline{\mathrm{H}}(2)$. Полное сечение рассеяния получено суммированием парциальных сечений с $L = 0{-}9$. Типы линий и парциальные/полные сечения рассеяния: тонкая пунктирная – $L = 0$; штриховая – $L = 1$; разреженная штриховая – $L = 2$; пунктирная – $L = 3$; штрихпунктирная – $L = 5$; разреженная штрихпунктирная – $L = 7$; сплошная – полное

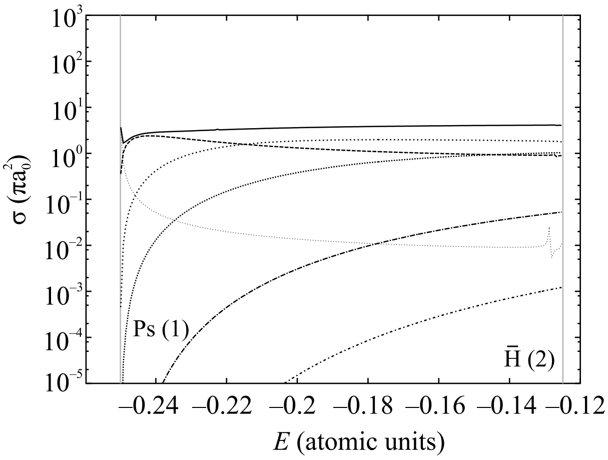

Рис. 2. Парциальные и полное сечения (в единицах πa_0^2) образования антиводорода в энергетической области Ps(1)–$\overline{\mathrm{H}}(2)$. Полное сечение рассеяния получено суммированием парциальных сечений с $L = 0{-}9$. Типы линий и парциальные/полные сечения рассеяния: тонкая пунктирная – $L = 0$; штриховая – $L = 1$; разреженная штриховая – $L = 2$; пунктирная – $L = 3$; штрихпунктирная – $L = 5$; разреженная штрихпунктирная – $L = 7$; сплошная – полное

Сравнение наших результатов с результатами других авторов в области энергий выше порога возбужденного состояния антиводорода $\overline{\mathrm{H}}(2)$ приводится в табл. 2 и 3. Хотя в целом совпадение результатов

Таблица 2. Парциальные сечения расссеяния (в единицах πa_0^2) в области энергий $\overline{\mathrm{H}}(2)$–Ps(2) в сравнении с результатами других авторов

E, a.e.	−0.11473	−0.09973	−0.08473	−0.07973
$\sigma^{0}_{\mathrm{Ps}(1)\to\mathrm{Ps}(1)}$	7.10	6.44	5.82	5.63
[14]	7.09	6.44	5.83	5.63
[27]		6.45		
$\sigma^{1}_{\mathrm{Ps}(1)\to\mathrm{Ps}(1)}$	2.26	2.53	2.79	2.87
[14]	2.28	2.54	2.64	2.87
[27]		2.51		
$\sigma^{2}_{\mathrm{Ps}(1)\to\mathrm{Ps}(1)}$	1.24	1.03	0.862	0.817
[14]	1.16	1.01	0.929	0.790
[27]		1.02		
$\sigma^{0}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	0.00801	0.00758	0.00719	0.00704
[14]	0.00815	0.00780	0.00729	0.00715
$\sigma^{1}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	0.860	0.807	0.757	0.741
[14]	0.858	0.805	0.742	0.739
$\sigma^{2}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	1.76	1.67	1.59	1.56
[14]	1.77	1.69	1.57	1.58
$\sigma^{0}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.0844	0.0952	0.107	0.113
[14]	0.0884	0.0927	0.105	0.114
$\sigma^{1}_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.273	0.630	0.854	0.908
[14]	0.268	0.632	1.05	0.910

хорошее, наблюдаются некоторые достаточно значительные расхождения значений сечений, связанных

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

E, a.e.	−0.06228	−0.06198	−0.06123	−0.05978
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1,2)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	0.169	0.078	0.037	0.022
[3]	0.282	0.097	0.047	0.030
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1,2)\to\overline{\mathrm{H}}(1)}$	3.67	1.98	1.20	0.944
[3]	3.373	1.783	1.130	0.886
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.106	0.105	0.104	0.103
[3]	0.125	0.116	0.112	0.107
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$	0.999	0.995	0.993	0.992
[3]	1.041	1.042	1.015	1.040
$\sigma^0_{\mathrm{Ps}(2)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$	184	79.9	34.0	16.9
[16]	218.84	76.701	32.481	17.201
$\sigma^1_{\mathrm{Ps}(2)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$	479	229	102	50.1
[16]	482.65	226.62	101.91	50.73

с возбужденным позитронием, особенно при энергиях чуть выше порога Ps(2). Можно сделать вывод, что получение с хорошей точностью сечений рассеяния с возбужденным позитронием в начальном или конечном состояниях является достаточно сложной задачей как с теоретической, так и вычислительной точек зрения. Сложность связана с тем обстоятельством, что область взаимодействия позитрония и антипротона в этом случае увеличена как за счет медленно убывающей волновой функции возбужденного позитрония, так и за счет дальнодействующего дипольного взаимодействия между позитронием и антипротоном [14].

На рисунках 3 и 4 представлены некоторые парциальные сечения образования антиводорода. На них в сечении $\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$ можно обнаружить несколько резонансов Фешбаха.

Резюмируя, мы рассчитали сечения рассеяния процесса образования антиводорода посредством реакции (1) в области энергий как ниже, так и выше порога первого возбужденного состояния позитрония. В будущем мы планируем распространить наши вычисления на области энергии, в которых возможны более высокие возбужденные состояния позитрония.

Работа В. А. Градусова поддержана Российским научным фондом (проект номер 19-72-00076).

Исследования были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра "Вычислительный центр СПбГУ" (http://cc.spbu.ru).

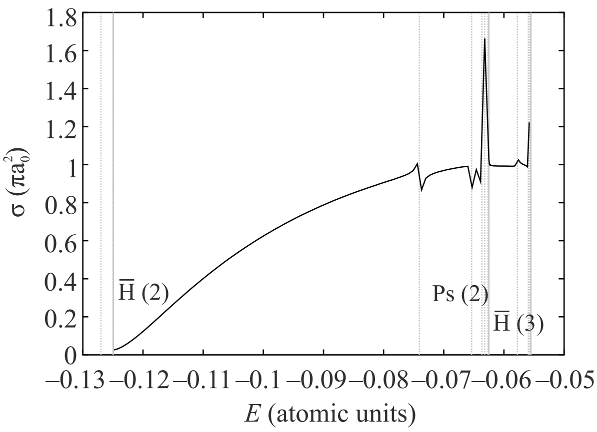

Рис. 3. Сечение образования антиводорода $\sigma^1_{\mathrm{Ps}(1)\to\overline{\mathrm{H}}(2)}$. Вертикальными штриховыми линиями показаны положения резонансов [28–31]

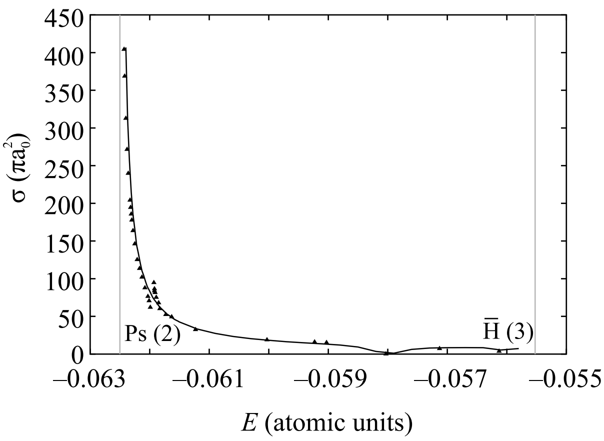

Рис. 4. Сечение образования антиводорода $\sigma^0_{\mathrm{Ps}(2)\to\overline{\mathrm{H}}(1,2)}$. Черными треугольниками отмечены точки, соответствующие работе [5] (получены в частном порядке от доктора Р. Лазаускаса)

1. G. Testera, S. Aghion, C. Amsler, et al. (AEgIS Collaboration), Hyperfine Interactions **233**, 13 (2015).
2. P. Pérez, D. Banerjee, F. Biraben et al. (Collaboration), Hyperfine Interactions **233**, 21 (2015).
3. C.-Y. Hu and D. Caballero, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 3879 (2002).
4. C.-Y. Hu, D. Caballero, and Z. Papp, Phys. Rev. Lett. **88**, 063401 (2002).
5. M. Valdes, M. Dufour, R. Lazauskas, and P.-A. Hervieux, Phys. Rev. A **97**, 012709 (2018).
6. C. M. Rawlins, A. S. Kadyrov, A. T. Stelbovics, I. Bray, and M. Charlton, Phys. Rev. A **93**, 012709 (2016).
7. A. S. Kadyrov, I. Bray, M. Charlton, and I. I. Fabrikant, Nat. Commun. **8**, 1544 (2017).
8. D. Krasnicky, G. Testera, and N. Zurlo, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **52**, 115202 (2019).
9. М. Гайлитис, Р. Дамбург, ЖЭТФ **44**, 1644 (1963).
10. M. Gailitis and R. Damburg, Proc. Phys. Soc. **82**, 192 (1963).

11. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, E. A. Yarevsky, and S. L. Yakovlev, Commun. Comput. Phys. **30**, 255 (2021).
12. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, М. (1985).
13. V. V. Kostrykin, A. A. Kvitsinsky, and S. P. Merkuriev, Few Body Syst. **6**, 97 (1989).
14. C.-Y. Hu, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32**, 3077 (1999).
15. T. T. Gien, Phys. Rev. A **56**, 1332 (1997).
16. C.-Y. Hu, D. Caballero, and Z. Hlousek, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **34**, 331 (2001).
17. S. P. Merkuriev, Ann. Phys. **130**, 395 (1980).
18. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, and S. L. Yakovlev, Atoms **4**, 9 (2016).
19. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, E. A. Yarevsky, and S. L. Yakovlev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **52**, 055202 (2019).
20. С. Л. Яковлев, З. Папп, ТМФ **163**, 314 (2010).
21. Z. Papp, C.-Y. Hu, Z. T. Hlousek, B. Kónya, and S. L. Yakovlev, Phys. Rev. A **63**, 062721 (2001).
22. NIST Digital Library of Mathematical Functions (http://dlmf.nist.gov/, 2019).
23. А. Мессиа, *Квантовая механика*, Наука, М. (1978), т. 1.
24. Д. А. Варшалович, В. К. Херсонский, Е. В. Орленко, А. Н. Москалев, *Квантовая теория углового момента и ее приложения*, Физматлит, М. (2017), т. 1.
25. Л. Биденхарн, Дж. Лаук, *Угловой момент в квантовой физике*, Мир, М. (1984), т. 1.
26. A. Scrinzi, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29**, 6055 (1996).
27. J. Mitroy and K. Ratnavelu, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **28**, 287 (1995).
28. Y. K. Ho and Z.-C. Yan, Phys. Rev. A **70**, 032716 (2004).
29. K. Varga, J. Mitroy, J. Zs. Mezei, and A. T. Kruppa, Phys. Rev. A **77**, 044502 (2008).
30. R.-M. Yu, Y.-J. Cheng, L.-G. Jiao, and Y.-J. Zhou, Chin. Phys. Lett. **29**, 053401 (2012).
31. M. Umair and S. Jonsell, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 225001 (2014).