ЖЭТФ, 2025, том 167, вып. 5, стр. 611–625

ФОРМАЛИЗМ БЕЗМОДЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ В СИСТЕМЕ ТРЕХ ЧАСТИЦ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ. НАДПОРОГОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ И РЕАКЦИЙ В СИСТЕМЕ $e^-e^+\bar{p}$

В. А. Градусов[*], *С. Л. Яковлев*[**]

Санкт-Петербургский государственный университет
199034, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 октября 2024 г.,
после переработки 27 декабря 2024 г.
Принята к публикации 31 декабря 2024 г.

Представлен безмодельный формализм для решения задачи рассеяния в системе трех частиц с кулоновским взаимодействием для энергий ниже порога развала системы на три частицы на основе уравнений Фаддеева – Меркурьева. Для решения задачи рассеяния используются асимптотические граничные условия, которые наряду с кулоновским взаимодействием между мишенью и спектатором в явном виде учитывают дальнодействующее дипольное взаимодействие, ответственное за аномальное надпороговое поведение сечений рассеяния и реакций (осцилляции Гайлитиса – Дамбурга). На основе эффективного численного метода прямого решения граничной задачи для уравнений Фаддеева – Меркурьева получены высокоточные сечения рассеяния антипротона на позитронии и сечения образования антиводорода в системе $e^-e^+\bar{p}$ для ненулевых значений полного орбитального момента системы, подтверждающие наличие аномального порогового поведения сечений.

DOI: 10.31857/S0044451025050013

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача рассеяния заряженной частицы на связанном кулоновскими силами состоянии пары частиц привлекает к себе внимание исследователей в течение долгих лет. Структура сечений рассеяния и реакций в такой задаче обладает значительным богатством особенностей, таких как подпороговые резонансы Фано – Фешбаха, дифракционные минимумы Рамзауэра – Таунсенда, надпороговые осцилляции Гайлитиса – Дамбурга [1]. При этом в связи со значительными трудностями экспериментального исследования на первый план выходят теоретические методы решения задачи рассеяния, позволяющие получать результаты с гарантированной точностью. Традиционно рассматриваемая задача решается методом сильной связи каналов в сочетании с вычислительным методом R-матрицы [2]. Естественные ограничения, обусловленные бесконечным количеством кулоновских связанных состояний, а также необходимостью учета непрерывного спектра парных подсистем, не позволяют считать данный подход полностью безмодельным. Альтернативным и при этом безмодельным методом решения задачи рассеяния является формализм уравнений Фаддеева – Меркурьева (ФМ), включающий расщепление дальнодействующих потенциалов [3].

Рассматриваемая задача имеет приложения в различных областях атомно-молекулярной физики, среди которых выделим физику антивещества и позитрония [4, 5]. В частности, в ЦЕРН проводятся эксперименты по изучению гравитационного поведения антивещества AEgIS и GBAR [6, 7], использующие установку замедления антипротонов. В них для получения частиц антивещества используется среди прочего трехчастичная реакция

$$\bar{p} + \mathrm{Ps} \to \overline{\mathrm{H}} + e^- \tag{1}$$

образования антиводорода $\overline{\mathrm{H}}$ в процессе рассеяния антипротона $\bar{p}$ на газе ридберговского позитрония (Ps). Экспериментальные данные по рассеянию в системе $e^-e^+\bar{p}$ (и зарядово эквивалентной системе

[*] E-mail: v.gradusov@spbu.ru
[**] E-mail: s.yakovlev@spbu.ru

e^-e^+p) крайне немногочисленны и ограничиваются полными сечениями процессов образования атомов и ионизации, суммированными по начальным и конечным состояниям атомов [8, 9]. В частности, данные по реакции (1), насколько известно авторам настоящей статьи, ограничиваются тремя точками на кривой полного сечения образования водорода при рассеянии протона p на позитронии Ps в основном состоянии при энергиях порядка 10 кэВ [8]. Этот недостаток экспериментальных данных вызвал появление ряда теоретических работ, в которых обсуждался механизм увеличения выхода реакций образования атома антиводорода [10]. Например, авторы [11–13] обсуждали рост сечений образования антиводорода в реакции (1), происходящий над порогами высоковозбужденных состояний позитрония. В работе [14] рассматривались надпороговые осцилляции сечений в системе $e^-e^+\bar{p}$, предсказанные в модельных исследованиях работ [15, 16]. На базе формализма уравнений ФМ также выполнен ряд попыток [1, 17, 18] расчета надпороговых осцилляций. Во всех этих исследованиях ключевым недостатком оказался неполный учет дипольного взаимодействия между связанной парой частиц и третьей частицей, не позволивший получить надежные результаты для сечений в близкой надпороговой области энергий. Лишь в работе авторов [19] удалось получить надежные результаты для осцилляций сечений Гайлитиса – Дамбурга (ГД) в системе $e^-e^+\bar{p}$ при нулевом орбитальном моменте с помощью решения уравнений ФМ с граничными условиями, дополненными явным вкладом дипольного взаимодействия. В настоящей работе мы распространяем формализм уравнений ФМ с граничными условиями, явно учитывающими дипольное взаимодействие, на случай ненулевых орбитальных моментов и применяем его к расчету сечений рассеяния и реакций в системе $e^-e^+\bar{p}$.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 дается весь необходимый теоретический материал формализма уравнений ФМ, включая асимптотические граничные условия, дополненные явным вкладом дипольного взаимодействия. В разд. 2 приводятся результаты расчетов сечений рассеяния и реакций в системе $e^-e^+\bar{p}$ для ненулевых значений полного орбитального момента. В разд. 3 обсуждаются полученные результаты. Заключение подводит итог проделанной работе. В Приложения вынесены некоторые технические детали, не вошедшие в теоретический разд. 2.

На протяжении всей работы мы пользуемся атомной системой единиц. Векторы обозначаются

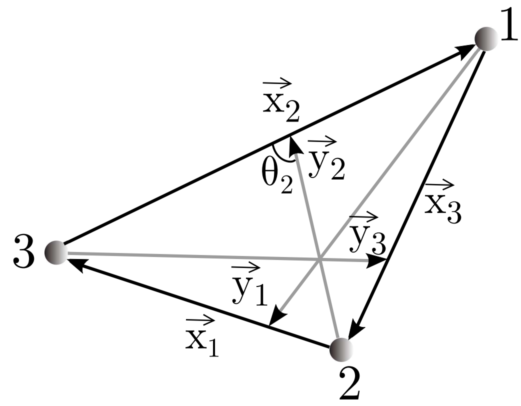


Рис. 1. Координаты Якоби для системы трех частиц

жирным шрифтом, например, $\mathbf{x}$. Через x обозначается модуль вектора $x = |\mathbf{x}|$, а $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/x$ используется для обозначения единичного вектора по направлению $\mathbf{x}$.

2. ТЕОРИЯ

2.1. Уравнения Фаддеева – Меркурьева

Рассматривается система трех бесспиновых нерелятивистских заряженных частиц с массами m_α и зарядами Z_α, $\alpha = 1, 2, 3$. В дальнейшем набор индексов $\{\alpha,\ \beta,\ \gamma\}$ обозначает одну из перестановок множества $\{1, 2, 3\}$, нумерующую частицы. Парой α мы называем пару частиц $\beta\gamma$, дополнительных к частице α. В системе центра масс положения частиц описываются координатами Якоби. Стандартные координаты Якоби (рис. 1) определяются для разбиения $\alpha(\beta\gamma)$ как векторы относительного положения между частицами пары α, и между их центром масс и частицей α. Удобнее 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. Приведенные массы даются выражениями

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

Для разных значений α приведенные векторы Якоби связаны ортогональным преобразованием:

$$\mathbf{x}_\beta = c_{\beta\alpha}\mathbf{x}_\alpha + s_{\beta\alpha}\mathbf{y}_\alpha, \quad \mathbf{y}_\beta = -s_{\beta\alpha}\mathbf{x}_\alpha + c_{\beta\alpha}\mathbf{y}_\alpha, \quad (3)$$

где

$$c_{\beta\alpha} = -\left[\frac{m_\beta m_\alpha}{(M - m_\beta)(M - m_\alpha)}\right]^{1/2},$$

$$s_{\beta\alpha} = (-1)^{\beta-\alpha}\mathrm{sgn}(\beta - \alpha)(1 - c_{\beta\alpha}^2)^{1/2}$$

и $M = \sum_\alpha m_\alpha$. В дальнейшем, где это необходимо, предполагается, что векторы Якоби с индексом β выражены через векторы α посредством (3).

В приведенных координатах Якоби уравнения ФМ для трех заряженных частиц [3] имеют вид

$$\{T_\alpha + V_\alpha(x_\alpha) + \sum_{\beta\neq\alpha} V_\beta^{(l)}(x_\beta, y_\beta) - E\}\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \\ = -V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha)\sum_{\beta\neq\alpha}\psi_\beta(\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta). \tag{4}$$

Здесь $T_\alpha \equiv -\Delta_{\mathbf{x}_\alpha} - \Delta_{\mathbf{y}_\alpha}$ — операторы кинетической энергии. Потенциалы V_α представляют собой парные кулоновские взаимодействия:

$$V_\alpha(x_\alpha) = \sqrt{2\mu_\alpha} Z_\beta Z_\gamma / x_\alpha, \quad \beta, \gamma \neq \alpha.$$

В данной работе мы предполагаем нумерацию частиц такой, что выполняются неравенства $Z_1Z_2 > 0$, $Z_1Z_3 < 0$ и $Z_2Z_3 < 0$, таким образом потенциал V_3 является отталкивательным. Потенциалы V_α расщепляются на короткодействующую $V_\alpha^{(s)}$ и дальнодействующую $V_\alpha^{(l)}$ части:

$$V_\alpha(x_\alpha) = V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) + V_\alpha^{(l)}(x_\alpha, y_\alpha). \tag{5}$$

Уравнения (4) можно просуммировать, что приводит к уравнению Шредингера для волновой функции $\Psi = \sum_\alpha \psi_\alpha$, где ψ_α — компоненты волновой функции, заданные решением уравнений (4).

Расщепление потенциала (5) выполняется при помощи функции χ_α, называемой срезкой Меркурьева [3]:

$$V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) = \chi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) V_\alpha(x_\alpha). \tag{6}$$

Эта функция ограничивает короткодействующую часть потенциала областями в трехчастичном конфигурационном пространстве, соответствующими точке трехчастичного столкновения и парной конфигурации ($x_\alpha \ll y_\alpha$, когда $y_\alpha \to \infty$). Вид функции срезки достаточно произволен и ограничен только некоторыми общими требованиями [20]. В одном из наиболее часто используемых вариантов, предложенном в [21], функция имеет вид

$$\chi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) = \frac{2}{1 + \exp[(x_\alpha/x_{0\alpha})^{\nu_\alpha}/(1 + y_\alpha/y_{0\alpha})]} \tag{7}$$

с $\nu_\alpha > 2$. Параметры $x_{0\alpha}$ и $y_{0\alpha}$ в принципе могут быть выбраны произвольно, но их выбор меняет свойства компонент ψ_α, важные как с теоретической, так и с вычислительной точки зрения [22]. Процедура расщепления (5), (7) выполняется в трехчастичном конфигурационном пространстве и подходит для энергий как ниже, так и выше порога трехчастичного развала. В работах [1, 23] мы предложили использовать упрощенную версию функции (7) в двухчастичном конфигурационном пространстве пары α. Формально она получается переходом к пределу $y_{0\alpha} \to \infty$ и выбором $\nu_\alpha = 2.01$, что приводит к следующему виду функции:

$$\chi_\alpha(x_\alpha) = 2/\left\{1 + \exp[(x_\alpha/x_{0\alpha})^{2.01}]\right\}. \tag{8}$$

При использовании функции (8) короткодействующая и дальнодействующая части потенциала $V_\alpha^{(s,l)}$ также становятся функциями в двухчастичном конфигурационном пространстве: $V_\alpha^{(s,l)} = V_\alpha^{(s,l)}(x_\alpha)$. Единственный оставшийся параметр $x_{0\alpha}$ можно эффективно выбрать с помощью простого практического алгоритма, представленного в [1].

Процедура расщепления делает свойства уравнений ФМ для кулоновских потенциалов так же подходящими для задач рассеяния, как стандартные уравнения Фаддеева в случае короткодействующих потенциалов [24]. Ключевым свойством уравнений ФМ (4) является то, что правая часть каждого уравнения ограничена окрестностью точки тройного столкновения [22]. Это приводит к асимптотическому расщеплению системы уравнений ФМ и, следовательно, асимптотика каждой компоненты ψ_α для энергий ниже порога трехчастичного развала (ионизации) содержит только члены, соответствующие парной конфигурации с парой частиц α [22, 24]. При полной энергии системы E ниже порога развала старшие члены асимптотики компоненты волновой функции, которые и определяют решение задачи рассеяния, записываются как

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \psi_\alpha^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) \sim \\ \sim I^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)\delta_{\alpha\alpha_0} + O_\alpha^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha), \tag{9}$$

где рассеянная волна имеет вид

$$O_\alpha^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \sum_{n\ell m} \frac{\phi_{n\ell}(x_\alpha)}{x_\alpha} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}} \times \\ \times \widetilde{\mathcal{A}}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_{n_0}) \frac{\exp[i(p_n y_\alpha - \eta_n \log(2p_n y_\alpha))]}{y_\alpha}. \tag{10}$$

Здесь $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}})$ обозначает стандартную сферическую гармонику. Мультииндекс $\mathbb{A} = \{Am\} = \{\alpha n\ell m\}$ задает каналы рассеяния, т. е. различные связанные кулоновские состояния двух тел пары α с волновой функцией $\phi_{n\ell}(x_\alpha)Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)/x_\alpha$ и энергией ε_n. Поскольку в теории многие величины имеют вырождение по магнитному квантовому числу m, мы также вводим мультииндекс $A = \{\alpha n\ell\}$. Импульс p_n улетающей частицы определяется условием сохранения энергии $E = p_n^2 + \varepsilon_n$, а параметр Зоммерфельда определяется как

$$\eta_n \equiv Z_\alpha(Z_\beta + Z_\gamma)\sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}/(2p_n).$$

Начальный канал $\mathbb{A}_0 = \{\alpha_0 n_0 \ell_0 m_0\}$ задается падающей волной

$$\begin{aligned} I^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \frac{\phi_{n_0\ell_0}(x_\alpha)}{x_\alpha} Y_{\ell_0 m_0}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\times \\ \times e^{i(\mathbf{p}_{n_0},\mathbf{y}_\alpha)} e^{-\pi\eta_{n_0}/2}\Gamma(1+i\eta_{n_0})\times \\ \times {}_1F_1(-i\eta_{n_0}, 1, i(p_{n_0}y_\alpha - (\mathbf{p}_{n_0}, \mathbf{y}_\alpha))), \end{aligned} \quad (11)$$

где ${}_1F_1$ — конфлюэнтная гипергеометрическая функция [25]. Амплитуда бинарного рассеяния

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_{n_0}) = \mathcal{A}_C(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_{n_0})\delta_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)} + \\ + \widetilde{\mathcal{A}}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_{n_0}) \end{aligned} \quad (12)$$

соответствует переходу от начального бинарного канала $\mathbb{A}_0$ к бинарному каналу $\mathbb{A}$. Здесь $\mathcal{A}_C$ — стандартная двухчастичная кулоновская амплитуда рассеяния [26]. Сечение рассеяния бинарного процесса с начальным $\mathbb{A}_0$ и конечным $\mathbb{A}$ состояниями дается выражением

$$\sigma_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0} = \frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}} \int d\,\hat{\mathbf{y}}_\alpha \left|\mathcal{A}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_{n_0})\right|^2. \quad (13)$$

Чаще, однако же, интересуются сечением рассеяния, усредненным и суммированным по магнитным квантовым числам начальных и конечных состояний:

$$\sigma_{AA_0} = \frac{1}{2\ell_0 + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{m_0=-\ell_0}^{\ell_0} \sigma_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}. \quad (14)$$

2.2. Парциальный анализ

Полный орбитальный момент является интегралом движения для рассматриваемой системы. Это делает возможным провести редукцию уравнений ФМ путем проецирования (4) на подпространство с заданным полным орбитальным моментом и тем самым понизить размерность уравнений с 6 до 3. Так полученные уравнения называются трехмерными (3D) уравнениями ФМ в представлении полного орбитального момента, они были впервые получены в работе [27]. Здесь мы даем краткий вывод 3D-уравнений ФМ, используя при этом подходящие для наших целей обозначения.

Начнем с введения новых кинематических координат $(X_\alpha,\ \Omega_\alpha)$ 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. Они изображены на рис. 1. 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 [28], в которой вектор $\mathbf{x}_\alpha$ расположен вдоль оси z, а вектор $\mathbf{y}_\alpha$ лежит в правой половине плоскости xz. Выполняются три поворота против часовой стрелки: вращение вокруг оси z лабораторной системы координат на угол $\phi_\alpha \in [0, 2\pi)$, за ним следует вращение вокруг новой оси y' на угол $\vartheta_\alpha \in [0, \pi)$, и последнее вращение вокруг новой оси z'' на угол $\varphi_\alpha \in [0, 2\pi)$. Координаты вектора в лабораторной и связанной с частицами системах координат связаны посредством стандартной матрицы вращения $\mathfrak{R}(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha)$ [26, 28]. Связь между наборами координат $(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)$ и $(X_\alpha, \Omega_\alpha)$ легко записывается при помощи этой матрицы [27]. Связь между наборами координат X_α и X_β выводится из (3):

$$\begin{aligned} x_\beta &= \sqrt{c_{\beta\alpha}^2 x_\alpha^2 + 2s_{\beta\alpha}c_{\beta\alpha}x_\alpha y_\alpha z_\alpha + s_{\beta\alpha}^2 y_\alpha^2}, \\ y_\beta &= \sqrt{s_{\beta\alpha}^2 x_\alpha^2 - 2s_{\beta\alpha}c_{\beta\alpha}x_\alpha y_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha}^2 y_\alpha^2}, \\ z_\beta &= \frac{s_{\beta\alpha}c_{\beta\alpha}(y_\alpha^2 - x_\alpha^2) + (c_{\beta\alpha}^2 - s_{\beta\alpha}^2)x_\alpha y_\alpha z_\alpha}{x_\beta y_\beta}. \end{aligned} \quad (15)$$

Связанные с частицами системы координат, определенные относительно различных наборов координат Якоби с индексами α и β, преобразуются друг в друга вращением вокруг оси, перпендикулярной плоскости частиц, на угол

$$w_{\beta\alpha} = \arccos\frac{-s_{\beta\alpha}y_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha}x_\alpha}{x_\beta},$$

если $(\beta - \alpha) \bmod 3 = 2$, и

$$w_{\beta\alpha} = 2\pi - \arccos\frac{-s_{\beta\alpha}y_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha}x_\alpha}{x_\beta}$$

в остальных случаях (значения arccos лежат на интервале $[0, \pi]$). Таким образом, связь между наборами углов Эйлера с различными индексами дается соотношениями

$$\mathfrak{R}(\phi_\beta, \vartheta_\beta, \varphi_\beta) = \mathfrak{R}(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha)\mathfrak{R}(0, w_{\beta\alpha}, 0). \quad (16)$$

Замена переменных в уравнениях (4) приводит их к виду

$$\Big\{T_\alpha + V_\alpha(x_\alpha) + \sum_{\beta\neq\alpha} V_\beta^{(l)}(x_\beta, y_\beta) - E\Big\}\psi_\alpha(X_\alpha,\Omega_\alpha) = \\ = -V_\alpha^{(s)}(x_\alpha,y_\alpha)\sum_{\beta\neq\alpha}\psi_\beta(X_\beta,\Omega_\beta),\ \alpha=1,2,3, \quad (17)$$

где для компонент, выраженных в новых переменных, по-прежнему используется обозначение $\psi_\alpha(X_\alpha,\Omega_\alpha)$. Операторы кинетической энергии в новых переменных имеют вид

$$T_\alpha = -\frac{1}{y_\alpha^2}\frac{\partial}{\partial y_\alpha}y_\alpha^2\frac{\partial}{\partial y_\alpha} - \frac{1}{x_\alpha^2}\frac{\partial}{\partial x_\alpha}x_\alpha^2\frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \\ -\left(\frac{1}{y_\alpha^2}+\frac{1}{x_\alpha^2}\right)\left(\frac{1}{\sin\theta_\alpha}\frac{\partial}{\partial\theta_\alpha}\sin\theta_\alpha\frac{\partial}{\partial\theta_\alpha} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\sin^2\theta_\alpha}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_\alpha^2}\right) + \frac{\mathbf{L}^2-\mathbf{K}_\alpha}{x_\alpha^2}. \quad (18)$$

В выражении (18) первые несколько слагаемых являются операторами, действующими по переменным X_α, в то время как последнее слагаемое действует по всем шести кинематическим координатам (X_α,Ω_α), но при этом имеет ясный физический смысл. В частности, оператор $\mathbf{L}^2$ является оператором квадрата полного орбитального момента количества движения:

$$\mathbf{L}^2 = -\left[\frac{1}{\sin\vartheta_\alpha}\frac{\partial}{\partial\vartheta_\alpha}\sin\vartheta_\alpha\frac{\partial}{\partial\vartheta_\alpha} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\sin^2\vartheta_\alpha}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi_\alpha^2} - 2\cos\vartheta_\alpha\frac{\partial^2}{\partial\phi_\alpha\partial\varphi_\alpha} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi_\alpha^2}\right)\right], \quad (19)$$

а оператор

$$\mathbf{K}_\alpha = \frac{\partial}{\partial\theta_\alpha}\left(\mathbf{L}_\alpha^{(+)} + \mathbf{L}_\alpha^{(-)}\right) + \\ + \operatorname{ctg}\theta_\alpha\left(\mathbf{L}_\alpha^{(+)} - \mathbf{L}_\alpha^{(-)}\right)\mathbf{L}_{z'} + 2\mathbf{L}_{z'}^2, \quad (20)$$

выражается через операторы

$$\mathbf{L}_\alpha^{(\pm)} = \mp e^{\mp i\varphi_\alpha}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta_\alpha} + \frac{i}{\sin\vartheta_\alpha}\frac{\partial}{\partial\phi_\alpha} - i\operatorname{ctg}\vartheta_\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi_\alpha}\right], \\ \mathbf{L}_{z'} = -i\partial/\partial\varphi_\alpha, \quad (21)$$

связанные с проекциями оператора полного орбитального момента на различные оси.

На следующем этапе компоненты ФМ раскладываются как

$$\psi_\alpha(X_\alpha,\Omega_\alpha) = \sum_{L=0}^{+\infty}\sum_{\tau=\pm1}\sum_{M=-L}^{L}\sum_{M'=M_0}^{L}(1-z_\alpha^2)^{M'/2}\times \\ \times\frac{\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)}{x_\alpha y_\alpha}F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_\alpha). \quad (22)$$

Здесь $M_0=(1-\tau)/2$, а функции

$$F_{MM'}^{L\tau}(\Omega_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\times \\ \times\left(D_{MM'}^L(\Omega_\alpha) + \tau(-1)^{M'}D_{M,-M'}^L(\Omega_\alpha)\right) \quad (23)$$

являются линейными комбинациями D-функций Вигнера $D_{MM'}^L$ [28, 29]. Заметим, что определение функций $D_{MM'}^L$ в [28, 29] отличается от того, которое используется в [27]. Функции $F_{MM'}^{L\tau}$ являются общими собственными функциями операторов квадрата полного орбитального момента, его проекции и оператора пространственной инверсии [27, 29] с собственными значениями $L(L+1)$, M и $\sigma=\tau(-1)^L$. Основные свойства этих функций приведены в Приложении А. Множитель $(1-z_\alpha^2)^{M'/2}$ в (22) вводится, чтобы сделать парциальные компоненты $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}$ и их производные неособыми в $z_\alpha=\pm1$ [30, 31].

Теперь, подставляя ряд (22) в уравнения ФМ (17) и проецируя полученные уравнения на функции $F_{MM'}^{L\tau}$, с помощью соотношений Приложения А получаем конечный набор трехмерных уравнений для парциальных компонент $\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha)$:

$$\left[T_{\alpha MM'}^{L\tau} + V_\alpha(x_\alpha) + \sum_{\beta\neq\alpha}V_\beta^{(l)}(x_\beta,y_\beta) - E\right]\psi_{\alpha MM'}^{L\tau}(X_\alpha) + \\ + T_{\alpha M,M'-1}^{L\tau-}\psi_{\alpha M,M'-1}^{L\tau}(X_\alpha) + \\ + T_{\alpha M,M'+1}^{L\tau+}\psi_{\alpha M,M'+1}^{L\tau}(X_\alpha) = \\ = -\frac{V_\alpha^{(s)}(x_\alpha,y_\alpha)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}\sum_{\beta\neq\alpha}\frac{x_\alpha y_\alpha}{x_\beta y_\beta}\sum_{M''=M_0}^{L}\frac{2(-1)^{M''-M'}}{\sqrt{2+2\delta_{M''0}}}\times \\ \times F_{M''M'}^{L\tau}(0,w_{\beta\alpha},0)(1-z_\beta^2)^{\frac{M''}{2}}\psi_{\beta MM''}^{L\tau}(X_\beta). \quad (24)$$

Операторы кинетической энергии имеют вид

$$
\begin{aligned}
T^{L\tau}_{\alpha MM'} &= -\frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} + \frac{1}{x_\alpha^2}\left(L(L+1) - 2M'^2\right) - \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \\
&- \left(\frac{1}{y_\alpha^2} + \frac{1}{x_\alpha^2}\right)\left((1 - z_\alpha^2)\frac{\partial^2}{\partial z_\alpha^2} - \right. \\
&\left. - 2(M'+1)z_\alpha \frac{\partial}{\partial z_\alpha} - M'(M'+1)\right), \\
T^{L\tau+}_{\alpha M,M'+1} &= \frac{1}{x_\alpha^2}\lambda^{L,M'}\sqrt{1+\delta_{M'0}}\,\times \\
&\times \left[-(1-z_\alpha^2)\frac{\partial}{\partial z_\alpha} + 2(M'+1)z_\alpha\right], \\
T^{L\tau-}_{\alpha M,M'-1} &= \frac{1}{x_\alpha^2}\lambda^{L,-M'}\sqrt{1+\delta_{M'1}}\frac{\partial}{\partial z_\alpha}.
\end{aligned} \tag{25}
$$

Здесь

$$
\lambda^{LM'} = \sqrt{L(L+1) - M'(M'+1)}. \tag{26}
$$

Полученные выражения являются 3D-уравнениями ФМ в представлении полного орбитального момента. Вследствие того, что полный орбитальный момент, его проекция и пространственная четность являются интегралами движения для расматриваемых нами трехчастичных систем, полученные уравнения с различающимися индексами L, M и τ образуют независимые системы уравнений. При данных L, M и τ уравнения системы (24) нумеруются индексами $\alpha = 1, 2, 3$ и $M' = M_0, \ldots, L$ и тем самым образуют конечный набор $3n_M = 3(L - M_0 + 1)$ трехмерных уравнений в частных производных. Парциальные компоненты $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$ должны удовлетворять нулевым граничным условиям типа Дирихле на прямых $x_\alpha = 0$, $y_\alpha = 0$.

Теперь перейдем к парциальному анализу асимптотических граничных условий (9) на компоненты волновой функции. Представим асимптотику парциальных компонент в виде

$$
\begin{aligned}
\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) &= \psi^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) \sim \\
&\sim I^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{MM'}(X_{\alpha_0})\delta_{\alpha\alpha_0} + O^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha).
\end{aligned} \tag{27}
$$

Вывод выражений для парциальных компонент падающей $I^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{MM'}$ и рассеянной $O^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{\alpha MM'}$ волн представлен в Приложении В. При выборе лабораторной системы координат, в которой импульс рассеиваемой частицы $\mathbf{p}_{n_0}$ расположен вдоль оси z, парциальная компонента падающей волны дается выражением

$$
\begin{aligned}
I^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{MM'}(X_\alpha) &= \delta_{-M,m_0}\frac{(-1)^M\sqrt{(2\ell_0+1)}}{p_{n_0}\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\phi_{n_0\ell_0}(x_\alpha)\times \\
&\times \sum_{\lambda=|L-\ell_0|}^{L+\ell_0}\sqrt{2\lambda+1}\,i^\lambda e^{i\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}F_\lambda(\eta_{n_0}, p_{n_0}y_\alpha)\times \\
&\times \frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha, 0)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}C^{L,M}_{\lambda,0,\ell_0,M}C^{L,M'}_{\lambda,M',\ell_0,0}\left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell_0-L}\right),
\end{aligned} \tag{28}
$$

где кулоновский фазовый сдвиг

$$
\sigma_\lambda(\eta_{n_0}) = \arg\Gamma(1+\lambda+i\eta_{n_0}),
$$

F_λ — регулярная кулоновская функция [26] и $C^{l,m}_{l1,m1,l2,m2}$ — коэффициенты Клебша–Гордана. Заметим, что решение уравнений ФМ (24) является нетривиальным только при условии ненулевой падающей волны. Из формулы (28) следует, что это имеет место только при проекции полного орбитального момента $M = -m_0$. Пусть теперь парциальное разложение амплитуды рассеяния имеет вид

$$
\widetilde{\mathcal{A}}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha) = \sum_{\lambda=0}^{+\infty}\sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda}\widetilde{\mathcal{A}}_{(\mathbb{A}\lambda m_\lambda)(\mathbb{A}_0)}Y_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha). \tag{29}
$$

Тогда парциальная компонента рассеянной волны дается выражением

$$
\begin{aligned}
O^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) &= \frac{(-1)^M}{\sqrt{4\pi(2+2\delta_{M'0})}}\sum_{n\ell}\sqrt{2\ell+1}\phi_{n\ell}(x_\alpha)\times \\
&\times \sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}\sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}}\widetilde{\mathcal{A}}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}\times \\
&\times C^{L,M'}_{\lambda,M',\ell,0}\left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}\right)\widehat{u}^{+}_\lambda(\eta_n, p_n y_\alpha),
\end{aligned} \tag{30}
$$

где мы определили

$$
\begin{aligned}
\widetilde{\mathcal{A}}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)} &= \frac{1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}}{2}\times \\
&\times \sum_{m=-\ell}^{\ell}C^{L,M}_{\lambda,m+M,\ell,-m}\widetilde{\mathcal{A}}_{(\mathbb{A},\lambda,-M-m)(\mathbb{A}_0)}.
\end{aligned} \tag{31}
$$

Здесь и ниже

$$
\widehat{u}^{\pm}_\lambda = e^{\pm i\pi\lambda/2}u^{\pm}_\lambda(\eta_n, p_n y_\alpha)
$$

— кулоновские сходящаяся и расходящаяся волны [26]. Из приведенного выше обсуждения следует, что единственным ненулевым является коэффициент с $M = -m_0$ и, значит,

$$
\widetilde{\mathcal{A}}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)} \equiv \delta_{M,-m_0}\widetilde{\mathcal{A}}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}. \tag{32}
$$

Отметим также, что из-за задающих условия отбора множителей типа $(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L})$ в (28) и (30) в имеющихся там суммах ненулевыми являются слагаемые только лишь с четными или нечетными значениями λ, в зависимости от значения $\tau=\pm1$ при данных L и $\ell_0(\ell)$.

Пусть коэффициенты парциального разложения $\mathcal{A}_{(\mathbb{A}\lambda m_\lambda)(\mathbb{A}_0)}$ полной амплитуды рассеяния $\mathcal{A}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha)$ определены формулой, аналогичной формуле (29). Тогда, используя парциальное разложение кулоновской амплитуды рассеяния [26]:

$$\mathcal{A}_C(\hat{\mathbf{y}}_\alpha)=\frac{4\pi}{p_{n_0}}\sum_{\lambda=0}^{+\infty}\frac{e^{i2\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}-1}{2i}\times \\ \times\sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda}Y^*_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{p}}_{n_0})Y_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha), \tag{33}$$

непосредственно можно показать, что при расположении вектора $\mathbf{p}_{n_0}$ вдоль оси z лабораторной системы координат имеет место формула

$$\mathcal{A}_{(\mathbb{A}\lambda m_\lambda)(\mathbb{A}_0)}=\widetilde{\mathcal{A}}_{(\mathbb{A}\lambda m_\lambda)(\mathbb{A}_0)}+ \\ +\delta_{\mathbb{A}\mathbb{A}_0}\delta_{m_\lambda 0}\frac{\sqrt{\pi(2\lambda+1)}}{ip_{n_0}}\left(e^{i2\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}-1\right). \tag{34}$$

Подобно (31) и (32) определим парциальную компоненту полной амплитуды:

$$\mathcal{A}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}\equiv\frac{1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}}{2}\times \\ \times\sum_{m=-\ell}^{\ell}C^{L,-m_0}_{\lambda,m-m_0,\ell,-m}\mathcal{A}_{(\mathbb{A},\lambda,m_0-m)(\mathbb{A}_0)}= \\ =\widetilde{\mathcal{A}}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}+\delta_{AA_0}\frac{1+\tau(-1)^{\lambda+\ell_0-L}}{2}\times \\ \times\frac{\sqrt{\pi(2\lambda+1)}}{ip_{n_0}}\left(e^{i2\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}-1\right)C^{L,-m_0}_{\lambda,0,\ell_0,-m_0}. \tag{35}$$

В Приложении C показано, что сечение рассеяния σ_{AA_0}, определенное в (14), выражается через введенные выше компоненты амплитуды $\mathcal{A}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}$ по формулам

$$\sigma_{AA_0}=\sum_{L=0}^{+\infty}\sigma^L_{AA_0}, \\ \sigma^L_{AA_0}=\frac{1}{2m_{\alpha_0(\beta\gamma)}}\frac{1}{2\ell_0+1}\times \\ \times\sum_{m_0=-\ell_0}^{\ell_0}\sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\sum_{\tau=\pm1}\left|\mathcal{A}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}\right|^2, \tag{36}$$

где $\sigma^L_{AA_0}$ — парциальные сечения рассеяния.

Для вычисления парциального сечения рассеяния $\sigma^L_{AA_0}$ требуется решать трехмерные уравнения ФМ (24), дополненные различными асимптотическими граничными условиями (27) с падающими волнами $I^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{MM'}$, которые различаются значениями $m_0=-M=-\ell_0,\ldots,\ell_0$ и $\tau=\pm1$. С вычислительной точки зрения, однако же, более эффективным является использование вместо $I^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{MM'}$ падающих волн вида

$$I^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{MM'}(X_\alpha)=\phi_{n_0\ell_0}(x_\alpha)F_{\lambda_0}(\eta_{n_0},p_{n_0}y_\alpha)\times \\ \times\frac{Y_{\lambda_0M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z^2_\alpha)^{M'/2}}\times \\ \times C^{L,M'}_{\lambda_0,M',\ell_0,0}\left(1+\tau(-1)^{\ell_0+\lambda_0-L}\right)/\sqrt{2+2\delta_{M'0}}. \tag{37}$$

Приведем в завершение этого раздела соответствующие расчетные формулы. Асимптотика парциальной компоненты $\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}$ с падающей волной (37) имеет вид

$$\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha)=\psi^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha)\sim \\ \sim I^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{MM'}(X_\alpha)\delta_{\alpha\alpha_0}+O^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha), \tag{38}$$

где

$$O^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{\alpha MM'}=\frac{1}{\sqrt{4\pi(2+2\delta_{M'0})}}\sum_{n\ell}\sqrt{2\ell+1}\phi_{n\ell}(x_\alpha)\times \\ \times\sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z^2_\alpha)^{M'/2}}\sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_n}}\widetilde{\mathcal{A}}^{L\tau}_{(A\lambda)(A_0\lambda_0)}\times \\ \times C^{LM'}_{\lambda,M',\ell,0}\left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}\right)\widehat{u}^+_\lambda(\eta_n,p_ny_\alpha). \tag{39}$$

Физические решение и амплитуда рассеяния, отвечающие начальному каналу $\mathbb{A}_0$ с $m_0=-M$, могут быть восстановлены по формулам

$$\psi^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha)=\frac{(-1)^M\sqrt{2\ell_0+1}}{p_{n_0}}\times \\ \times\sum_{\lambda_0=|L-\ell_0|}^{L+\ell_0}\sqrt{2\lambda_0+1}\times \\ \times i^{\lambda_0}e^{i\sigma_{\lambda_0}(\eta_{n_0})}C^{L,M}_{\lambda_0,0,\ell_0,M}\psi^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha), \tag{40}$$

$$\widetilde{\mathcal{A}}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}=\frac{\sqrt{2\ell_0+1}}{p_{n_0}}\sum_{\lambda_0=|L-\ell_0|}^{L+\ell_0}\sqrt{2\lambda_0+1}\times \\ \times i^{\lambda_0}e^{i\sigma_{\lambda_0}(\eta_{n_0})}C^{L,M}_{\lambda_0,0,\ell_0,M}\widetilde{\mathcal{A}}^{L\tau}_{(A\lambda)(A_0\lambda_0)}. \tag{41}$$

2.3. Дипольное взаимодействие

Наличие в системе трех заряженных частиц эффективного дипольного потенциала между возбужденным связанным состоянием пары α (атомом) и частицей α приводит к тому, что представление (30) становится недостаточно точным, так как оставляет дипольное взаимодействие нескомпенсированным. Учет дипольного взаимодействия в асимптотике компонент волновых функций удобно провести в так называемом бисферическом базисе. Соответствующая теория дана нами в отдельной публикации [32]. Приведем здесь основной теоретический результат этой работы, который заключается в том, что уточненная асимптотика компоненты ФМ, описывающей процессы с сохраняющимися квантовыми числами L, M и τ, имеет вид

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) \sim \frac{2\pi i}{p_{n_0}} \frac{1}{x_\alpha y_\alpha} \times \\ \times \sum_{L=0}^{+\infty} \sum_{M=-L}^{+L} \sum_{n\ell\lambda} \phi_{n\ell}(x_\alpha) g^{LM\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}(y_\alpha, p_n) \times \\ \times \mathcal{Y}^{LM}_{\ell\lambda}(\widehat{\mathbf{x}}_\alpha, \widehat{\mathbf{y}}_\alpha). \quad (42)$$

Здесь бисферические гармоники [3, 28] даются формулами

$$\mathcal{Y}^{LM}_{\ell_1\ell_2}(\widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{y}}) = \\ = \sum_{m_1=-\ell_1}^{\ell_1} \sum_{m_2=-\ell_2}^{\ell_2} C^{LM}_{\ell_1 m_1 \ell_2 m_2} Y_{\ell_1, m_1}(\widehat{\mathbf{x}}) Y_{\ell_2, m_2}(\widehat{\mathbf{y}}). \quad (43)$$

Функции $g^{LM\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}$ являются решениями уравнений сильной связи каналов,

$$\left[-\frac{d^2}{dy_\alpha^2} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{y_\alpha^2} + \frac{C_\alpha}{y_\alpha} - p_n^2\right] g^{LM\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}(y_\alpha, p_n) + \\ + \sum_{n'\ell'\lambda'} \frac{d^L_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')}}{y_\alpha^2} g^{LM\tau}_{\alpha(n'\ell'\lambda')}(y_\alpha, p_{n'}) = 0, \quad (44)$$

в которых зарядовая константа асимптотического кулоновского взаимодействия между атомом и частицей α определяется формулой

$$C_\alpha = Z_\alpha(Z_\beta + Z_\gamma)\sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}.$$

Задающая асимптотическое дипольное взаимодействие матрица d^L_α определена в [32]. Используя стандартные формулы теории углового момента [28], можно показать, что

$$d^L_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')} = \\ = \frac{(-1)^{L+1}}{3}\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} \times \\ \times C^{10}_{\ell 0 \ell' 0} C^{10}_{\lambda 0 \lambda' 0} \left\{ \begin{array}{ccc} \ell & \lambda & L \\ \lambda' & \ell' & 1 \end{array} \right\} D_\alpha K_{\alpha(n\ell)(n'\ell')}. \quad (45)$$

Здесь фигурные скобки обозначают $6j$-символ Вигнера,

$$K_{\alpha(n\ell)(n'\ell')} = \int_0^{+\infty} dx_\alpha\, x_\alpha \phi_{n'\ell'}(x_\alpha)\phi_{n\ell}(x_\alpha), \quad (46)$$

кинематическая константа

$$D_\alpha = -\sum_{\beta\neq\alpha} \frac{\sqrt{2\mu_\beta} Z_\alpha Z_\gamma c_{\beta\alpha}}{|s_{\beta\alpha}| s_{\beta\alpha}}. \quad (47)$$

Заметим, что задающие ненулевые элементы дипольного потенциала индексы $\ell, \lambda, \ell', \lambda', L$ удовлетворяют различным условиям треугольника из-за имеющихся в формуле (45) объектов, в частности $\ell'(\lambda') = \ell(\lambda) \pm 1$. Заметим дополнительно, что матричный дипольный потенциал не зависит от квантового числа M, поэтому этот индекс опускается в обозначении потенциала и вводимых ниже величин, связанных с решением уравнений (44). Нумерующие уравнения (44) и компоненты их решения индексы $n\ell$ пробегают значения, задающиеся открытыми при данной энергии E полной задачи двухчастичными каналами ($p_n^2 = E - \varepsilon_n \geq 0$), индекс λ принимает значения от $|L-\ell|$ до $L+\ell$. Кроме того, для получения решения (42) с заданной пространственной четностью $\sigma = (-1)^L\tau$ индексы должны удовлетворять условиям отбора

$$1 + \tau(-1)^{\ell+\lambda-L} \neq 0.$$

В [32] получена асимптотическая в пределе $y_\alpha \to +\infty$ система решений уравнений (44), которая задается матрицей с элементами

$$G^{L\tau\pm}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')}(y_\alpha) = \left[W^{L\tau(0)}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')} + \right. \\ \left. + \frac{1}{y_\alpha^2} W^{L\tau(1)}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')}\right] \widehat{u}^{\pm}_{\lambda^{L\tau}_{\alpha(n'\ell'\lambda')}}(\eta_{n'}, p_{n'} y_\alpha). \quad (48)$$

Здесь матрицы имеют вид

$$W^{L\tau(0)}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')} = \delta_{nn'} V^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)(n\ell'\lambda')},$$

$$W^{L\tau(1)}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')} = (1-\delta_{nn'})\times \\ \times \frac{\sum_{\ell''\lambda''} d^L_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell''\lambda'')} V^{L\tau}_{\alpha(n'\ell''\lambda'')(n'\ell'\lambda')}}{p_n^2 - p_{n'}^2}, \tag{49}$$

а новые значения угловых моментов $\lambda^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}$ возникают как решения квадратных уравнений

$$\lambda^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}(\lambda^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}+1) = b^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}. \tag{50}$$

Наконец, матрицы $b^{L\tau}_\alpha$ и $V^{L\tau}_\alpha$ составлены из собственных значений и собственных векторов матрицы

$$\lambda(\lambda+1)\delta_{\ell\lambda,\ell'\lambda'} + d^L_{\alpha(n\ell\lambda)(n\ell'\lambda')}, \tag{51}$$

$$\ell(\ell') = 0,\ldots,n-1,$$

$$\lambda(\lambda') = |L-\ell(\ell')|,\ldots,L+\ell(\ell'),$$

$$1+\tau(-1)^{\ell(\ell')+\lambda(\lambda')-L} \neq 0.$$

Заметим, что именно второй член в квадратных скобках в (48) ответственен за полную компенсацию дипольной части взаимодействия в уравнениях. Он учитывает внедиагональные по главному квантовому числу n элементы матричного дипольного потенциала d^L_α/y^2_α, которые не учитывались в работах других авторов [18, 33, 34]. Асимптотика решения $g^{LM\tau}_\alpha$ уравнений (44) для задачи рассеяния записывается в виде линейной комбинации решений $G^{L\tau\pm}_\alpha(y_\alpha)$:

$$g^{LM\tau}_\alpha(y_\alpha) \sim G^{L\tau-}_\alpha(y_\alpha)\mathbf{o}^- - G^{L\tau+}_\alpha(y_\alpha)\mathbf{o}^+, \tag{52}$$

где $\mathbf{o}^\pm$ — некоторые амплитудные векторы.

Изложенные выше результаты [32] получены в бисферическом базисе. Асимптотика (42), однако же, несложно пересчитывается в используемое в настоящей работе представление в базисе полного орбитального момента. Для этого достаточно воспользоваться связью между базисными функциями, которая по существу дается приведенными в Приложении В формулами (68). Несложный расчет, который мы здесь опускаем, показывает, что асимптотика (42) имеет вид (22) с парциальными компонентами вида

$$\psi^{L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) \sim \frac{i(-1)^{L+M}}{2p_{n_0}\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\frac{1}{(1-z^2_\alpha)^{M'/2}}\times \\ \times \sum_{n\ell}\sqrt{2\ell+1}(-1)^\ell\phi_{n\ell}(x_\alpha)\times \\ \times \sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}(-1)^\lambda C^{LM'}_{\ell 0\lambda M'}(1+\tau(-1)^{\ell+\lambda-L})Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)\times \\ \times \Bigg[\sum_{n'\ell'\lambda'} G^{L\tau-}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')}(y_\alpha)\mathbf{o}^-_{(n'\ell'\lambda')} - \\ - G^{L\tau+}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')}(y_\alpha)\mathbf{o}^+_{(n'\ell'\lambda')}\Bigg]. \tag{53}$$

Для получения решения, соответствующего процессу с падающей волной в канале $\mathbb{A}_0$, коэффициенты векторов $\mathbf{o}^\pm$ следует подобрать такими, чтобы в пределе $y_\alpha\to\infty$ правые части асимптотических выражений (27) и (53) (или (38) и (53)) совпадали друг с другом. В случае сравнения формул (38) и (53), например, несложные расчеты, которые мы также опускаем, приводят к следующему виду парциальных компонент падающей и рассеянной волн:

$$I^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\sum_{n\ell}\sqrt{2\ell+1}\phi_{n\ell}(x_\alpha)\times \\ \times \sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell} C^{LM'}_{\lambda M'\ell 0}(1+\tau(-1)^{\ell+\lambda-L})\frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z^2_\alpha)^{M'/2}}\times \\ \times \sum_{\ell'\lambda'} e^{i\left(\pi\lambda_0/2-\sigma_{\lambda_0}(\eta_{n_0})\right)}\left(V^{L\tau}_{\alpha(n_0\ell_0\lambda_0)(n_0\ell'\lambda')}\right)^*\times \\ \times G^{L\tau-}_{\alpha(n\ell\lambda)(n_0\ell'\lambda')}(y_\alpha), \tag{54}$$

$$O^{(A_0\lambda_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{4\pi(2+2\delta_{M'0})}}\times \\ \times \sum_{n\ell}\sqrt{2\ell+1}\phi_{n\ell}(x_\alpha)\times \\ \times \sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell} C^{LM'}_{\lambda M'\ell 0}(1+\tau(-1)^{\ell+\lambda-L})\frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha,0)}{(1-z^2_\alpha)^{M'/2}}\times \\ \times \sum_{n'\ell'\lambda'}\sqrt{\frac{p_{n_0}}{p_{n'}}}\widetilde{\mathfrak{S}}^{L\tau}_{(\alpha n'\ell'\lambda')(A_0\lambda_0)} G^{L\tau+}_{\alpha(n\ell\lambda)(n'\ell'\lambda')}(y_\alpha). \tag{55}$$

Связь между компонентами «физической» S-матрицы $\widetilde{S}$ и матрицы $\widetilde{\mathfrak{S}}$, определенной решением с рассеянной волной (55), дается равенством

$$\widetilde{S}^{L\tau}_{(A\lambda)(A_0\lambda_0)} = \widetilde{\mathcal{A}}^{L\tau}_{(A\lambda)(A_0\lambda_0)} +$$
$$+ \delta_{\alpha\alpha_0}\delta_{(n\ell\lambda)(n_0\ell_0\lambda_0)} \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell_0+1}} e^{i\left(\sigma_{\lambda_0}(\eta_{n_0}) - \pi\lambda_0/2\right)} =$$
$$= \frac{i}{2\sqrt{2\ell_0+1}} \sum_{\ell'\lambda'} V^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)(n\ell'\lambda')} \widetilde{\mathfrak{S}}^{L\tau}_{(\alpha n\ell'\lambda')(A_0\lambda_0)}. \quad (56)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты данного раздела получены путем прямого численного решения системы трехмерных уравнений ФМ (24) с асимптотическими граничными условиями (27), в которых падающая и рассеянная волны даются формулами (54) и (55) соответственно. Для уменьшения сложности вычислений мы пользуемся тем, что потенциал V_3 является отталкивательным и соответствующий двухчастичный гамильтониан не имеет связанных состояний. Это позволяет включить этот потенциал в левые части уравнений (4), (24), для чего формально можно положить в (8) функцию $\chi_3 = 0$. Количество уравнений при этом уменьшается в полтора раза.

Для получения представленных в статье результатов мы вычисляли сечения рассеяния с точностью не хуже 1% и с достаточно высоким разрешением по энергии: $6\cdot10^{-6}$ при расчете сечений непосредственно над порогами возбужденных состояний атомов и $6\cdot10^{-5}$ в остальных случаях. Все величины приведены в атомных единицах, сечения даются в единицах πa_0^2. Бинарные процессы рассеяния обозначаются начальным и конечным состояниями атома.

Согласно теории ГД [35], околопороговые осцилляции в сечениях возникают при наличии невещественных новых значений угловых моментов $\lambda^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}$. Над порогом возбужденного связанного состояния атома (пары частиц) α с главным квантовым числом n, в случае единственного (среди значений с разными $\ell\lambda$) невещественного значения $\lambda^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)}$, теория предсказывает следующую зависимость от энергии p_n^2 сечений:

$$\sigma = A + B\cos(2\,\mathrm{Im}\,\lambda^{L\tau}_{\alpha(n\ell\lambda)} \ln p_n + \phi). \quad (57)$$

Здесь константы A, B, ϕ, свои для каждой конкретной системы и сечения, можно считать независящими от энергии p_n^2 при малых p_n. Простой расчет показывает, что в системе $e^-e^+\bar{p}$ для первых нескольких каналов рассеяния с возбужденными состояниями $\overline{\mathrm{H}}(2)$, $\mathrm{Ps}(2)$ и $\overline{\mathrm{H}}(3)$ и при небольших значениях полного орбитального момента L имеются одно или два невещественных значения момента.

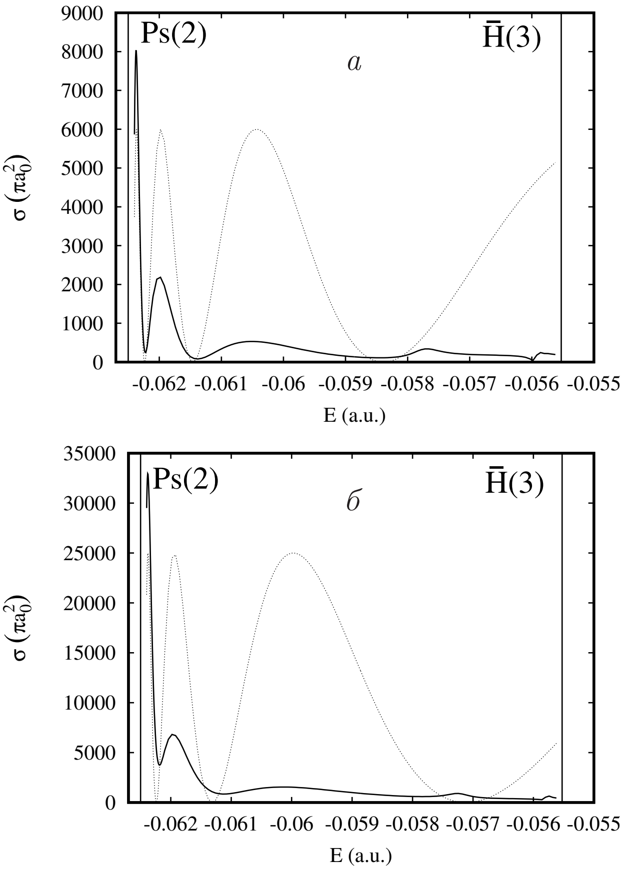
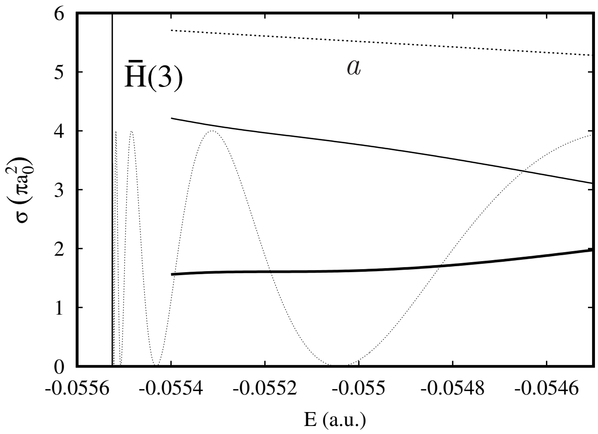


Рис. 2. Сечения упругого рассеяния $\mathrm{Ps}(2s) \to \mathrm{Ps}(2s)$, полный орбитальный момент $L = 1$ (*а*) и $L = 2$ (*б*). Пунктирные кривые — график зависимости (57)

На рис. 2 изображены сечения упругого рассеяния антипротона на позитронии в первом возбужденном состоянии $\mathrm{Ps}(2s)$, расчитанные над порогом $\mathrm{Ps}(2)$, для значений полного орбитального момента $L = 1$, 2. Как и на представленном в нашей недавней работе [19] графике для случая $L = 0$, в сечениях прекрасно видны осцилляции ГД с расположением экстремумов, согласующимся с законом (57). Действительно, для наглядности на рис. 2 и 3 изображены также графики кривых (57) с эмпирически подобранными значениями констант A, B и фазы ϕ. Аналогичная картина наблюдается и в сечениях квазиупругих реакций типа реакции $\mathrm{Ps}(2s) \to \mathrm{Ps}(2p)$. С ростом значений L на одном и том же интервале энергий осцилляции сечений начинают сглаживаться. Действительно, мнимые части новых значений угловых моментов $\mathrm{Im}\,\lambda^{L\tau}_{\alpha=\mathrm{Ps}(n=2,\ell\lambda)}$, которые задают частоту осцилляций в логарифмическом масштабе по энергии согласно закону (57), имеют тенденцию к убыванию с ростом L. Для значений $L = 0-4$ они



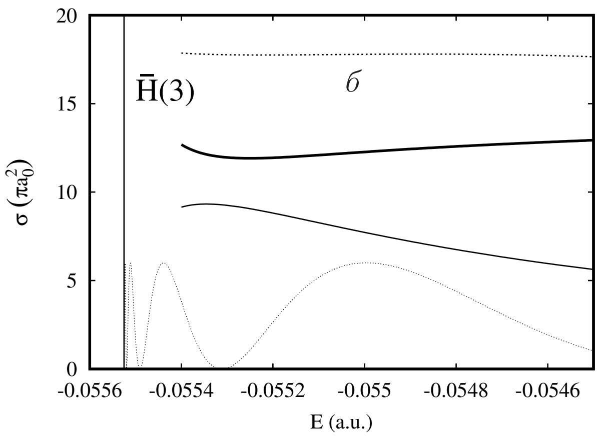


Рис. 3. Сечения образования антиводорода $\mathrm{Ps}(2p)\to\overline{\mathrm{H}}(3s)$ (сплошные кривые), $\mathrm{Ps}(2p) \to \overline{\mathrm{H}}(3p)$ (штриховые), $\mathrm{Ps}(2p) \to \overline{\mathrm{H}}(3d)$ (жирные сплошные), полный орбитальный момент $L = 1$ (*а*) и $L = 2$ (*б*). Пунктирные кривые — график зависимости (57)

равны соответственно: 4.77, 4.58, 4.15, 3.42 и 2.09, при $L \geqslant 5$ значения новых моментов становятся вещественными. Наличие осцилляций ГД в сечениях упругих и квазиупругих реакций $\mathrm{Ps}(2) \to \mathrm{Ps}(2)$ было ранее обнаружено при расчетах в работе [14]. По форме наши сечения вполне согласуются с сечениями этой работы, однако непосредственное численное сравнение затруднено используемым в [14] логарифмическим масштабом по обеим осям.

Обратимся теперь к сечениям реакций образования антиводорода над порогами его возбужденных состояний. В [19] мы привели графики сечений образования антиводорода над порогом первого возбужденного состояния $\overline{\mathrm{H}}(2)$ для случая $L = 0$, которые показали, что осцилляции слабо проявляются в этом случае. Однако над порогом $\overline{\mathrm{H}}(3)$ в сечениях реакций $\mathrm{Ps}(2) \to \overline{\mathrm{H}}(3)$ образования антиводорода во втором возбужденном состоянии при $L=0$ мы обнаружили в [19] осцилляции ГД с большой амплитудой, что подтвердило возможность существования этого явления в сечениях реакций. Поэтому здесь мы исследуем именно сечения над порогом $\overline{\mathrm{H}}(3)$. Как и в рассмотренном выше случае конфигурации $\mathrm{Ps}(2)$, ненулевые мнимые части $\mathrm{Im}\,\lambda^{L\tau}_{\alpha=\overline{\mathrm{H}}(n=3,\ell\lambda)}$ возникают при $L \leqslant 4$, они равны соответственно 3.99 ($L = 0$), 3.83, 2.23 ($L = 1$), 3.46, 1.43 ($L = 2$), 2.81 ($L = 3$), 1.52 ($L = 4$). На рис. 3 приведены сечения реакций $\mathrm{Ps}(2p) \to \overline{\mathrm{H}}(3s(p,d))$ для значений $L = 1$, 2. Осцилляции в сечениях проявляются слабо. С учетом довольно существенного роста значений сечений по сравнению со случаем $L = 0$ это означает, что в полных сечениях рассеяния осцилляции будут сильно сглажены. Для иллюстрации на рис. 4 представлена сумма парциальных сечений с $L = 0 - 2$.

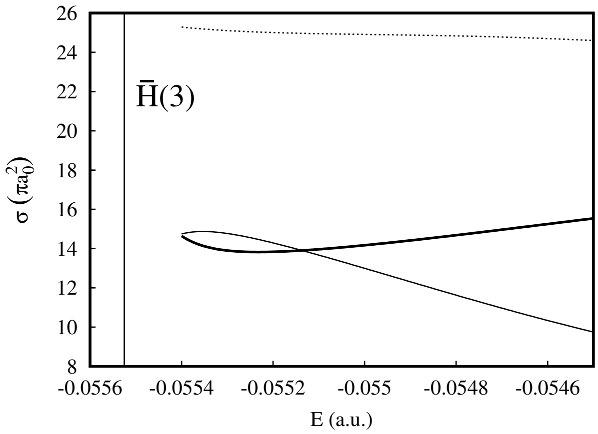


Рис. 4. Суммарные по $L = 0, 1, 2$ сечения образования антиводорода $\mathrm{Ps}(2p) \to \overline{\mathrm{H}}(3s)$ (тонкая сплошная кривая), $\mathrm{Ps}(2p) \to \overline{\mathrm{H}}(3p)$ (пунктирная), $\mathrm{Ps}(2p) \to \overline{\mathrm{H}}(3d)$ (жирная сплошная)

Подводя итог, следует отметить, что в прямых процессах типа $\mathrm{Ps} \to \mathrm{Ps}$ осцилляции сечений отчетливо наблюдаются, хотя с ростом L они сглаживаются, исчезая при больших L. В сечениях же образования антиводорода $\mathrm{Ps} \to \overline{\mathrm{H}}$ при $L > 0$ наблюдается тенденция к подавлению осцилляций, несмотря на то, что среди новых моментов в этих каналах по-прежнему имеются комплексные значения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе разработан и реализован формализм решения задачи бинарного рассеяния в системе трех частиц с кулоновским взаимодействием. Формализм базируется на трехчастичных уравнениях Фаддеева – Меркурьева в представлении полного орбитального момента. Существенным и новым обстоятельством по сравнению с предыдущими формулировками является улучшенное асимптотическое представление для компонент волновой функции, которое в явном виде учитывает вклад дальнодействующего дипольного взаимодействия. Наличие этого взаимодействия являлось главным вычислительным препятствием для получения надежных результатов для сечений рассеяния и реакций в близких околопороговых областях энергии, в которых предсказывались пороговые аномалии в виде осцилляций ГД. В нашей предыдущей работе [19] показано, что явный учет дипольного взаимодействия позволяет получить значения для сечений рассеяния и реакций в системе $e^-e^+\bar{p}$ при $L = 0$, на недостижимо высоком для других подходов уровне точности. В настоящей работе мы обобщили наш подход на случай $L > 0$ и явно учли дальнодействующее дипольное взаимодействие в этом случае. Формализм данной работы позволил провести прецизионные расчеты рассеяния и реакций в системе $e^-e^+\bar{p}$ при $L > 0$ в окрестностях порогов возбужденных состояний с главными квантовыми числами $n = 2, 3$ атомов Ps и $\overline{\mathrm{H}}$, которые технически были невозможны без учета дипольного взаимодействия в других подходах. В сечениях упругих и квазиупругих процессов обнаружены отчетливые надпороговые осцилляции ГД-типа при $L = 1, 2$, имеющие тенденцию сглаживаться с ростом L. Подробно исследованы сечения образования антиводорода в реакции $\mathrm{Ps}(n = 2) + \bar{p} \to \overline{\mathrm{H}}(n = 3) + e^-$ при $L = 1, 2$. В отличие от случая $L = 0$ [19] сечения образования антиводорода при $L > 0$ отчетливых осцилляций не обнаруживают. При этом в полных сечениях данной реакции вклад осцилляций парциального сечения с $L = 0$ оказывается существенно сглаженным.

Результаты данной работы распространяют область применимости разработанного формализма на случай ненулевых орбитальных моментов $L > 0$ и дают возможность проводить более широкие исследования рассеяния и реакций в системе $e^-e^+\bar{p}$ и других атомных системах с гарантированным уровнем точности.

Благодарности. Исследования проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ» (http://cc.spbu.ru). Авторы выражают благодарность В. А. Рудневу и Е. А. Яревскому за плодотворные обсуждения результатов работы.

Финансирование. Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 23-22-00109).

ПРИЛОЖЕНИЕ A. СВОЙСТВА БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ $F^{L\tau}_{MM'}$

Функции $F^{L\tau}_{MM'}$ являются общими собственными функциями операторов квадрата полного орбитального момента $\mathbf{L}^2$, его проекции $\mathbf{L}_z = -i\partial/\partial\phi_\alpha$ и оператора пространственной инверсии $\mathbf{P}$:

$$\begin{gathered}\mathbf{L}^2 F^{L\tau}_{MM'} = L(L+1)F^{L\tau}_{MM'},\\ \mathbf{L}_z F^{L\tau}_{MM'} = -MF^{L\tau}_{MM'},\\ \mathbf{P}F^{L\tau}_{MM'}(\phi_\alpha,\vartheta_\alpha,\varphi_\alpha) =\\ = F^{L\tau}_{MM'}(\phi_\alpha+\pi,\pi-\vartheta_\alpha,\pi-\varphi_\alpha) =\\ = \tau(-1)^L F^{L\tau}_{MM'}(\phi_\alpha,\vartheta_\alpha,\varphi_\alpha).\end{gathered} \tag{58}$$

Последнее равенство выводится непосредственно из соотношения

$$\begin{gathered}D^L_{MM'}(\phi_\alpha+\pi,\pi-\vartheta_\alpha,\pi-\varphi_\alpha) =\\ = (-1)^{L+M'}D^L_{M,-M'}(\phi_\alpha,\vartheta_\alpha,\varphi_\alpha).\end{gathered}$$

Условия ортогональности

$$\begin{gathered}\int\limits_0^{2\pi} d\phi_\alpha \int\limits_0^{2\pi} d\varphi_\alpha \int\limits_0^{\pi} d\vartheta_\alpha\, \sin\vartheta_\alpha \left(F^{L_1\tau_1}_{M_1M_1'}(\Omega_\alpha)\right)^* \times\\ \times F^{L_2\tau_2}_{M_2M_2'}(\Omega_\alpha) = \frac{8\pi^2}{2L_1+1}\delta_{L_1L_2}\delta_{\tau_1\tau_2}\delta_{M_1M_2}\delta_{M_1'M_2'}\end{gathered} \tag{59}$$

несложно выводятся из аналогичных условий для D-функций Вигнера [29]. Поскольку D-функции дают матричное представление группы вращений SO(3), из соотношения для преобразований вращением (16) непосредственно следует

$$D^L_{MM'}(\Omega_\beta) = \sum_{M''=-L}^{L} D^L_{MM''}(\Omega_\alpha)D^L_{M''M'}(0,w_{\beta\alpha},0). \tag{60}$$

Отсюда получаем связь между функциями $F^{L\tau}_{MM'}$ разных аргументов:

$$\begin{gathered}F^{L\tau}_{MM'}(\Omega_\beta) = \sum_{M''=M_0}^{L}(-1)^{M'-M''}\frac{2}{\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\times\\ \times F^{L\tau}_{M'M''}(0,w_{\beta\alpha},0)F^{L\tau}_{MM''}(\Omega_\alpha).\end{gathered} \tag{61}$$

Из свойств D-функций Вигнера

$$\begin{aligned}&\mathbf{L}^{(\pm)}_\alpha D^L_{MM'} = \pm\lambda^{L,\pm M'}D^L_{MM'\pm1},\\ &\mathbf{L}_{z'}D^L_{MM'} = -M'D^L_{MM'},\end{aligned} \tag{62}$$

где $\lambda^{LM'}$ определена в (26), получаем свойства

$$\mathbf{L}_{z'} F^{L\tau}_{MM'} = -M' F^{L,-\tau}_{MM'}, \qquad (63)$$

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{L}^{(+)}_\alpha + \mathbf{L}^{(-)}_\alpha\right) F^{L\tau}_{MM'} = -\lambda^{L,-M'} F^{L\tau}_{M,M'-1} \times \\ \times \sqrt{1+\delta_{M'1}}(1-\delta_{M'0})(1-\delta_{M'1}\delta_{\tau,-1}) + \\ + \lambda^{L,M'} F^{L\tau}_{M,M'+1}\sqrt{1+\delta_{M'0}}(1-\delta_{M'0}\delta_{\tau,-1}),\end{aligned} \qquad (64)$$

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{L}^{(+)}_\alpha - \mathbf{L}^{(-)}_\alpha\right)\mathbf{L}_{z'} F^{L\tau}_{MM'} = -M'\lambda^{L,-M'} F^{L\tau}_{M,M'-1} \times \\ \times \sqrt{1+\delta_{M'1}}(1-\delta_{M'0})(1-\delta_{M'1}\delta_{\tau,-1}) - \\ - M'\lambda^{L,M'} F^{L\tau}_{M,M'+1}\sqrt{1+\delta_{M'0}}(1-\delta_{M'0}\delta_{\tau,-1}),\end{aligned} \qquad (65)$$

полезные при подстановке разложения (22) в уравнения ФМ (17).

ПРИЛОЖЕНИЕ B. ПАРЦИАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЫРАЖЕНИЙ ДЛЯ ПАДАЮЩЕЙ И РАССЕЯННОЙ ВОЛН

Согласно определению (23) парциальная компонента падающей волны дается выражением

$$\begin{aligned}I^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{MM'}(X_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2+2\delta_{M'0}}} \times \\ \times \left(I^{(\mathbb{A}_0)L}_{MM'}(X_\alpha) + \tau(-1)^{M'} I^{(\mathbb{A}_0)L}_{M,-M'}(X_\alpha)\right),\end{aligned} \qquad (66)$$

где, в свою очередь,

$$\begin{aligned}I^{(\mathbb{A}_0)L}_{MM'}(X_\alpha) = \frac{x_\alpha y_\alpha}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}\frac{2L+1}{8\pi^2} \times \\ \times \int d\Omega_\alpha \left(D^L_{MM'}(\Omega_\alpha)\right)^* I^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha).\end{aligned} \qquad (67)$$

Поскольку углы Эйлера ϕ_α, ϑ_α являются одновременно углами сферических координат вектора $\hat{\mathbf{x}}_\alpha$ в лабораторной системе координат, а вектор $\hat{\mathbf{y}}_\alpha$ преобразуется в $\hat{\mathbf{x}}_\alpha$ вращением вокруг оси, перпендикулярной плоскости частиц, на угол θ_α, имеем

$$\begin{aligned}Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha) &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\left(D^\ell_{m0}(\Omega_\alpha)\right)^*, \\ Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha) &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell}\left(D^\ell_{mm'}(\Omega_\alpha)\right)^* Y_{\ell m'}(\theta_\alpha, 0).\end{aligned} \qquad (68)$$

При помощи (68) можно выразить падающую (11) и рассеянную (10) волны в координатах $(X_\alpha, \Omega_\alpha)$. Так, используя парциальное разложение входящей в (11) двухчастичной кулоновской волновой функции [26], переписываем (11) в виде

$$\begin{aligned}I^{(\mathbb{A}_0)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \frac{4\pi}{p_{n_0} x_\alpha y_\alpha}\phi_{n_0\ell_0}(x_\alpha) Y_{\ell_0 m_0}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha) \times \\ \times \sum_{\lambda=0}^{+\infty}\sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} i^\lambda e^{i\sigma_\lambda(\eta_{n_0})} F_\lambda(\eta_{n_0}, p_{n_0} y_\alpha) \times \\ \times Y^*_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{p}}_{n_0}) Y_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha),\end{aligned} \qquad (69)$$

где кулоновский фазовый сдвиг

$$\sigma_\lambda(\eta_{n_0}) = \arg\Gamma(1+\lambda+i\eta_{n_0}),$$

F_λ — регулярная кулоновская функция [26]. Подставляя (69) в (67) и используя тождества (68), получим

$$\begin{aligned}I^{(\mathbb{A}_0)L}_{MM'}(X_\alpha) = \frac{\phi_{n_0\ell_0}(x_\alpha)}{2\pi p_{n_0}}\sqrt{\frac{2\ell_0+1}{4\pi}}\sum_{\lambda=0}^{+\infty}\sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda}\sum_{m'=-\ell}^{\ell} \\ i^\lambda e^{i\sigma_\lambda(\eta_{n_0})} F_\lambda(\eta_{n_0}, p_{n_0} y_\alpha) Y^*_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{p}}_{n_0})\frac{Y_{\lambda m_\lambda}(\theta_\alpha, 0)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}} \times \\ \times \int d\Omega_\alpha \left(D^L_{MM'}(\Omega_\alpha)\right)^*\left(D^\lambda_{m_\lambda m'}(\Omega_\alpha)\right)^*\left(D^{\ell_0}_{m_0 0}(\Omega_\alpha)\right)^*.\end{aligned} \qquad (70)$$

Интеграл от произведения трех D-функций выражается через коэффициенты Клебша–Гордана [29]:

$$\begin{aligned}\int d\Omega_\alpha \left(D^\ell_{mm'}(\Omega_\alpha)\right)^* D^{\ell_2}_{m_2 m_2'}(\Omega_\alpha) D^{\ell_1}_{m_1 m_1'}(\Omega_\alpha) = \\ = \frac{8\pi^2}{2\ell+1} C^{\ell,m'}_{\ell_1,m_1',\ell_2,m_2'} C^{\ell,m}_{\ell_1,m_1,\ell_2,m_2}.\end{aligned} \qquad (71)$$

Комбинируя последнее тождество с соотношением $(D^L_{mm'})^* = (-1)^{m'-m} D^L_{-m,-m'}$ и подставляя в (70), после несложных преобразований приходим к выражению

$$\begin{aligned}I^{(\mathbb{A}_0)L}_{MM'}(X_\alpha) = \frac{(-1)^M\sqrt{4\pi(2\ell_0+1)}}{p_{n_0}\sqrt{2+2\delta_{M'0}}}\phi_{n_0\ell_0}(x_\alpha) \times \\ \times \sum_{\lambda=|L-\ell_0|}^{L+\ell_0} i^\lambda e^{i\sigma_\lambda(\eta_{n_0})} F_\lambda(\eta_{n_0}, p_{n_0} y_\alpha) Y^*_{\lambda,-M-m_0}(\hat{\mathbf{p}}_{n_0}) \times \\ \times \frac{Y_{\lambda M'}(\theta_\alpha, 0)}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}} C^{L,M}_{\lambda,M+m_0,\ell_0,-m_0} C^{L,M'}_{\lambda,M',\ell_0,0} \times \\ \times \left(1+\tau(-1)^{\lambda+\ell_0-L}\right),\end{aligned} \qquad (72)$$

где пределы суммирования по λ происходят от условий треугольника для коэффициентов Клебша–Гордана. Если теперь лабораторную систему координат выбрать так, что вектор $\mathbf{p}_{A_0}$ в ней расположен вдоль оси z, имеем дополнительно $Y^*_{\lambda,-M-m_0}(\hat{\mathbf{p}}_{A_0}) = \sqrt{(2\lambda+1)/(4\pi)}\delta_{-M,m_0}$ и (72) упрощается до (28). Для вычисления парциальной компоненты рассеянной волны

$$O^{(\mathbb{A}_0)L\tau}_{\alpha MM'}(X_\alpha) = \frac{x_\alpha y_\alpha}{(1-z_\alpha^2)^{\frac{M'}{2}}}\frac{2L+1}{8\pi^2}\times \times \int d\Omega_\alpha \left(F^{L\tau}_{MM'}(\Omega_\alpha)\right)^* O^{(\mathbb{A}_0)}_\alpha(\mathbf{x}_\alpha,\mathbf{y}_\alpha) \quad (73)$$

подставляем парциальное разложение амплитуды рассеяния (29) в (10) и выполняем преобразования, совершенно аналогичные выполненным выше для случая падающей волны. Тогда приходим к (30).

ПРИЛОЖЕНИЕ C. СЕЧЕНИЕ σ_{AA_0}

Для получения выражения для сечения рассеяния σ_{AA_0} определим вначале парциальные компоненты полной амплитуды:

$$\mathcal{A}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)} \equiv \frac{1+\tau(-1)^{\lambda+\ell-L}}{2}\times \times\sum_{m=-\ell}^{\ell} C^{L,M}_{\lambda,m+M,\ell,-m}\mathcal{A}_{(\mathbb{A},\lambda,-M-m)(\mathbb{A}_0)} = = \widetilde{\mathcal{A}}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)} + \delta_{AA_0}\delta_{M,-m_0}\frac{1+\tau(-1)^{\lambda+\ell_0-L}}{2}\times \times\frac{\sqrt{\pi(2\lambda+1)}}{ip_{n_0}}\left(e^{i2\sigma_\lambda(\eta_{n_0})}-1\right)C^{L,M}_{\lambda,0,\ell_0,M}. \quad (74)$$

Свойство (32) по-прежнему выполняется для полной амплитуды, т. е.

$$\mathcal{A}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)} = \delta_{M,-m_0}\mathcal{A}^{L\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}. \quad (75)$$

Умножая парциальное разложение полной амплитуды рассеяния на $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)$, получим соотношение

$$Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\mathcal{A}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha) = = \sum_{\lambda=0}^{+\infty}\sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda}\mathcal{A}_{(\mathbb{A}\lambda m_\lambda)(\mathbb{A}_0)}Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)Y_{\lambda m_\lambda}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha) = = \sum_{L=0}^{+\infty}\sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda}\mathcal{A}_{(\mathbb{A}\lambda m_\lambda)(\mathbb{A}_0)}\times \times C^{L,m+m_\lambda}_{\ell,m,\lambda,m_\lambda}\mathcal{Y}^{Lm+m_\lambda}_{\ell\lambda}(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}), \quad (76)$$

где $\mathcal{Y}^{Lm}_{\ell\lambda}$ — биполярные сферические гармоники, определенные в (43). Суммирование последнего тождества по m от $-\ell$ до ℓ приводит к равенству

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{x}}_\alpha)\mathcal{A}_{(\mathbb{A})(\mathbb{A}_0)}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha) = = \sum_{L=0}^{+\infty}\sum_{\lambda=|L-\ell|}^{L+\ell}\sum_{M=-\lambda-\ell}^{\lambda+\ell}\sum_{\tau=\pm1}\mathcal{A}^{LM\tau}_{(A\lambda)(\mathbb{A}_0)}\mathcal{Y}^{L,-M}_{\ell\lambda}(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}),$$

в котором, согласно свойству (75), сумма по M содержит лишь одно ненулевое слагаемое с $M = -m_0$. Теперь, интегрируя квадраты абсолютных величин левой и правой частей последнего равенства по переменным $\hat{\mathbf{x}}_\alpha$, $\hat{\mathbf{y}}_\alpha$ и пользуясь ортогональностью биполярных сферических гармоник по всем индексам, приходим к (36).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, E. A. Yarevsky et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **52**, 055202 (2019).
2. P. G. Burke, *R-Matrix Theory of Atomic Collisions*, Springer, Heidelberg, Dordrecht, London, New York (2011).
3. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, Москва (1985).
4. M. Charlton and J. W. Humberston, *Positron Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2001).
5. S. D. Bass, S. Mariazzi, P. Moskal, and E. Stępień, Rev. Mod. Phys. **95**, 021002 (2023).
6. G. Testera et al., Hyp. Int. **233**, 13 (2015).
7. P. Pérez et al., Hyp. Int. **233**, 21 (2015).
8. J. P. Merrison et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 2728 (1997).
9. K. Ratnavelu, M. J. Brunger, and S. J. Buckman, J. Phys. Chem. Ref. Data **48**, 023102 (2019).
10. P. Comini, *Study of the Antihydrogen Atom and Ion Formation in the Collisions Antiproton-Positronium.* Theses, Université Pierre et Marie Curie — Paris VI (2014).
11. A. S. Kadyrov, I. Bray, M. Charlton, and I. I. Fabrikant, Nat. Commun. **8**, 1544 (2017).
12. D. Krasnicky, G. Testera, and N. Zurlo, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **52**, 115202 (2019).

13. M. Charlton, H. B. Ambalampitiya, I. I. Fabrikant, I. Kalinkin, D. V. Fursa, A. S. Kadyrov, and I. Bray, Phys. Rev. A **107**, 012814 (2023).

14. I. I. Fabrikant, A. W. Bray, A. S. Kadyrov et al., Phys. Rev. A **94**, 012701 (2016).

15. M. Гайлитис, Р. Дамбург, ЖЭТФ **44**, 1644 (1963).

16. M. Gailitis and R. Damburg, Proc. Phys. Soc. **82**, 192 (1963).

17. C.-Y. Hu, D. Caballero, and Z. Papp, Phys. Rev. Lett. **88**, 063401 (2002).

18. M. Valdes, M. Dufour, R. Lazauskas et al., Phys. Rev. A **97**, 012709 (2018).

19. В. А. Градусов, С. Л. Яковлев, Письма в ЖЭТФ **119**, 151 (2024).

20. S. P. Merkuriev, Ann. Phys. **130**, 395 (1980).

21. A. A. Kvitsinsky, J. Carbonell, and C. Gignoux, Phys. Rev. A **46**, 1310 (1992).

22. С. Л. Яковлев, З. Папп, ТМФ **163**, 314 (2010).

23. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, and S. L. Yakovlev, Atoms **4**, 9 (2016).

24. Z. Papp, C.-Y. Hu, Z. T. Hlousek et al., Phys. Rev. A **63**, 062721 (2001).

25. NIST Digital Library of Mathematical Functions, http://dlmf.nist.gov/ (2019).

26. А. Мессиа, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1978).

27. V. V. Kostrykin, A. A. Kvitsinsky, and S. P. Merkuriev, Few Body Syst. **6**, 97 (1989).

28. Д. А. Варшалович, В. К. Херсонский, Е. В. Орленко и др., *Квантовая теория углового момента и ее приложения*, т. 1, Физматлит, Москва (2017).

29. Л. Биденхарн, Дж. Лаук, *Угловой момент в квантовой физике*, т. 1, Мир, Москва (1984).

30. V. A. Gradusov, V. A. Roudnev, E. A. Yarevsky et al., Commun. Comput. Phys. **30**, 255 (2021).

31. A. Scrinzi, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, 6055 (1996).

32. В. А. Градусов, С. Л. Яковлев, ТМФ **221**, 176 (2024).

33. M. Gailitis, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **9**, 843 (1976).

34. C.-Y. Hu, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **32**, 3077 (1999).

35. M. Gailitis, J. Phys. B **15**, 3423 (1982).