

ივ. ჯავახიშვილის სახელობის  
თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

გრიგოლ ელდარის ძე სხირტლაძე

ელექტრონებით ატომთა ერთჯერადი იონიზაციის  
ბამოკვლევა სამნაწილაკობრივი მიდგომით

სპეციალობა 01 - 04 - 16 – ატომის, ატომური ბირთვის და  
ელემენტარული ნაწილაკების ფიზიკა

დისერტაცია ფიზიკა-მათემატიკურ მეცნიერებათა  
კანდიდატის სამეცნიერო ხარისხის მოსაპოვებლად

სამეცნიერო ხელმძღვანელი

ფიზიკა-მათემატიკურ მეცნიერებათა დოქტორი  
პროფ. ჯ. მებონია

## ს ა რ ჩ ე ვ ი

შ ე ს ა ვ ა ლ ი . . . . . 3

### თავი 1. ლიტერატურის მიმოხილვა.

§ 1.1 გაფანტვის თეორიის კლასიკური მიახლოებები . . . . . 7

§ 1.2 გაფანტვის თეორიის თანამედროვე მიახლოებები . . . . . 14

### თავი 2. სამი ნაწილაკის ამოცანა.

§ 2.1 იმპულსური მიახლოება . . . . . 18

§ 2.2 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება . . . . . 25

§ 2.3 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ჩამოჭრით . . . . . 30

§ 2.4 ერთჯერადი იონიზაციის სრული დიფერენციალური განიკვეთი 35

### თავი 3. ასიმპტოტური ტალღური ფუნქციები.

§ 3.1 საწყისი და საბოლოო მდგომარეობების ტალღური ფუნქციები 38

§ 3.2 ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციები. . . . . 41

### თავი 4. მცირეელექტრონიანი ატომების იონიზაციის სრული დიფერენციალური განიკვეთები.

§ 4.1 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ბრტყელი ტალღების გამოყენებით . . . . . 48

§ 4.2 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება კულონური ფუნქციების გამოყენებით . . . . . 57

§ 4.3 რიცხვითი გამოთვლების შედეგები და მათი ანალიზი . . . . . 60

დამატება . . . . . 72

დ ა ს კ ვ ნ ა . . . . . 74

წ ი ტ ე რ ა ტ უ რ ა . . . . . 76

## შესავალი

გასული საუკუნის მეორე ნახევარში ბირთვული და ელემენტარული ნაწილაკების ფიზიკის ინტენსიურმა განვითარებამ ფიზიკოსების ყურადღება გარკვეულწილად მოაღუნა ატომური მოვლენების მიმართ. მაგრამ სიტუაცია მკვეთრად შეიცვალა ბოლო ორი ათწლეულის განმავლობაში. კერძოდ, განსკუთრებული ყურადღება დაეთმო მაღალი ენერჯიის ელექტრონებით ატომების, იონების და მოლეკულების იონიზაციისა და დისოციაციის პროცესების შესწავლას. ასეთი ტიპის მოვლენებს ადგილი აქვს ატმოსფეროში, მყარ სხეულებში, პლაზმაში და ა.შ. კერძოდ პლაზმის ბევრი თვისება (მაგალითად, გამოსხივების უნარი) დამოკიდებულია მისი შემადგენელი ატომებისა და იონების იონიზაციის ხარისხზე. მას შემდეგ, რაც დაიწყო მართვადი თერმობირთვული სინთეზის ენერჯიის წყაროდ გამოყენების შესაძლებლობების კვლევა, ამ სფეროში საიმედო მონაცემების არსებობა განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი გახდა. ელექტრონების მიერ მინარეული ატომები (რომლებიც დანადგარის კედლებიდან აღწევენ თერმობირთვულ პლაზმაში) სწრაფად იონიზდებიან მრავალმუხტიან მდგომარეობამდე. ამ იონების გამოსხივებას მიუყავართ ენერჯიის დიდი რაოდენობით კარგვამდე. ასე რომ, გარკვეულ დაშვებულ დონეზე ზევით მინარეების კონცენტრაციას შეუძლია ხელიც კი შეუშალოს დადებითი ენერგობალანსის მიღწევას.

ელექტრონული დარტყმით ატომებისა და იონების იონიზაციის თეორიული შესწავლა დაკვირვებულია მრავალი სხეულის პრობლემის გადაჭრასთან და ამიტომ წარმოადგენს რთულ მათემატიკურ ამოცანას. პრობლემას ართულებს ისიც, რომ არსებობს იონიზაციის სხვადასხვა

მექანიზმი, რომლებსაც წვლილი შეაქვთ პროცესში. იონიზაციის ძირითადი მექანიზმებია:

$$e + A^{n+} \rightarrow A^{(n+m)+} + (m+1)e, \quad (1)$$

$$e + A^{n+} \rightarrow A^{*(n+1)+} + 2e \rightarrow A^{(n+m)+} + (m+1)e, \quad (2)$$

(1) და (2) ფორმულებში A-ს ინდექსი n ნიშნავს რომ გვაქვს n-ჯერ იონიზებული ატომი. თუ n=0 ატომი ნეიტრალურია. შესაბამისად  $A^{(n+m)+}$  აღნიშნავს (n+m)-ჯერ იონიზებულ ატომს, ხოლო  $A^{*(n+1)+}$  – ალგზნე-ბულ იონს (n+1) მუხტით. (1) გამოსახულება აღწერს პირდაპირ დარტყმით იონიზაციას, რომლის დროსაც სამიზნედან ამოიგლიჯება შესაბამისად m=(1,2,...) ელექტრონი. ხოლო გამოსახულება (2) აღწერს არაპირდაპირი იონიზაციის პროცესებს. კერძოდ ოჟე გადასვლებს, რომლებიც თან სდევნ შიგა გარსის ელექტრონის იონიზაციას. ამ დროს თავდაპირველად იონიზდება შიგა გარსის ელექტრონი, ხოლო შემდეგ ხდება კიდევ რამდენიმე ოჟე-ელექტრონის წარმოქმნა.

დისერტაციაში შეისწავლება ელექტრონული დარტყმებით მსუბუქი ატომების ერთჯერადი იონიზაციები (e, 2e) რომლის მექანიზმი შემდეგია:

$$e + A^{n+} \rightarrow A^{(n+1)+} + 2e, \quad (3)$$

ეს მექანიზმი (1) –ის კერძო შემთხვევას წარმოადგენს და არის ერთერთი ძირითადი ზემოხსენებული მექანიზმებიდან.

თემის აქტუალობა. ატომებთან და იონებთან ელექტრონების დაჯახებისას მიმდინარე იონიზაციურ პროცესებში ძირითადი წვლილი შეაქვთ ერთჯერადი და ორჯერადი იონიზაციის პროცესებს. ამ მოვლენების შესწავლისადმი დაინტერესება განსაკუთრებით ბოლო ორი ათწლეულის განმავლობაში გაიზარდა. ამის ერთ-ერთი ძირითადი

მიზეზი იყო ის, რომ იმდროინდელი ტექნიკის დონე არ იძლეოდა რთული ექსპერიმენტების ჩატარების შესაძლებლობას. ბოლო ორი ათწლეულის განმავლობაში სიტუაცია საგრძნობლად შეიცვალა. ექსპერიმენტული ტექნიკის სწრაფმა განვითარებამ შესაძლებელი გახადა, ჩატარებულიყო იონიზაციის კვებების პრეცეზიული გაზომვები. გაიზომა როგორც სრული ინტეგრალური, ისე დიფერენციალური განიკვებები. ამან თავის მხრივ სტიმული მისცა თეორიული კვებების განვითარებას. ამჟამად ერთჯერადი იონიზაციის პროცესების კვლევა განიცდის ინტენსიურ აღმავლობას, რაზეც მიუთითებს სერთაშორისო ჟურნალებში ამ პრობლემისადმი მიძღვნილი სტატიების რიცხვის ზრდა.

ნაშრომის მიზანია თეორიულად შევისწავლოთ მსუბუქ ატომებთან სწრაფი ელექტრონების დაჯახებით მიმდინარე იონიზაციის პროცესები; განვაზოგადოთ ბირთვული ნაწილაკების დაჯახებებში კარგად აპრობირებული “სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ჩამოჭრით” (სიმჩ) მეთოდი, ატომური ნაწილაკების დაჯახებით მიმდინარე პროცესებში.

მეცნიერული სიახლე: ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ქვევიდან ჩამოჭრა კოორდინატულ სივრცეში, რაც ჩადებულია სიმჩ–ში, ეფექტურად აღადგენს იმპულსურ მიახლოებაში ჩაწერილი სამნაწილაკობრივი გაფანტვების ამპლიტუდის უნიტარულ თვისებას. ბირთვულ რეაქციებში აპრობირებული ეს მეთოდი სიცოცხლისუნარიანი არმოჩნდა ატომურ პროცესებშიც, სადაც შორსმოქმედი კულონური პოტენციალი დამატებით პრობლემებს ქმნის.

ნაშრომის მეცნიერული და პრაქტიკული ღირებულება. დისერტაციაში მიღებული შედეგების საიმედოობა იმის საწინდარია, რომ ჩვენ შეგვიძლია არა მხოლოდ გავერკვეთ ატომთა ერთჯერადი იონიზაციის მექანიზმში, არამედ გამოვიყენოთ სიმჩ უფრო რთული

პროცესების შესასწავლად და, რაც არანაკლებ მნიშვნელოვანია, წინასწარ შევაფასოთ ის კინემატიკური არეები (სივრცული და ენერგეტიკული), სადაც ექსპერიმენტების ჩატარება უფრო ოპტიმალურია.

პუბლიკაციები. დისერტაციაში მიღებული შედეგები გამოქვეყნებულია ოთხი სამეცნიერო სტატიის სახით.

დისერტაციის სტრუქტურა და მოცულობა. დისერტაცია შედგება შესავალისაგან, ოთხი თავისაგან, დამატებისაგან და შეიცავს 80 ნაბეჭდ გვერდს. დისერტაციაში წარმოდგენილია 6 ნახაზი და ციტირებული ლიტერატურის ნუსხა, რომელიც შეიცავს 98 დასახელებას.

დისერტაციაში გამოყენებულია ატომურ ერთეულთა სისტემა: ელექტრონის მუხტი  $e$ , მასა  $m$  და პლანკის მუდმივა  $\hbar$  ჩათვლილია ერთის ტოლად. მაშინ სიგრძის, სიჩქარის, დროის და ენერჯიის ერთეულები იქნება შესაბამისად  $a_0$ ,  $v_0$ ,  $a_0/v_0$  და  $e^2/a_0$ , სადაც

$$a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ სმ.}$$

$$v_0 = e^2 / \hbar^2 = 2,188 \cdot 10^8 \text{ სმ/წმ}$$

$$a_0 / v_0 = \hbar^3 / me^4 = 2,419 \cdot 10^{-17} \text{ წმ.}$$

$$e^2 / a_0 = me^4 / \hbar^2 = 27,21 \text{ ევ.}$$

ატომურ ერთეულთა სისტემა მოსახერხებელია იმით, რომ უფრო კომპაქტურად შეიძლება ჩავწეროთ ფიზიკურ სიდიდეთა შორის თანაფარდობები და, განსაკუთრებით, დაჯახებათა თეორიისთვის საჭირო ფორმულები.

## თავი I. ლიტერატურის მიმოხილვა

### § 1.1 გაფანტვის თეორიის კლასიკური მიახლოებები

ელექტრონული დარტყმით ატომების (იონების) ერთჯერადი იონიზაციის პროცესი საკმაოდ კარგად არის შესწავლილი როგორც ექსპერიმენტულად, ასევე თეორიულად [1-7]. ამ პროცესის თეორიული კვლევა აქტიურად დაიწყო გასული საუკუნის 60-70 წლებიდან და მნიშვნელოვანი წარმატებებიც იქნა მიღწეული.

90-იანი წლების დასაწყისში ექსპერიმენტული ტექნიკის განვითარებამ ახალი სტიმული მისცა  $(e, 2e)$  და  $(e, \gamma 2e)$  პროცესების საფუძვლიანად შესწავლას. კერძოდ შეიქმნა დეტექტორთა ახალი კლასი რომელმაც შესაძლებელი გახადა  $(e, 2e)$  ექსპერიმენტის ჩატარება თანხვედრის სქემით (ამ საკითხზე იხილეთ მიმოხილვა [8]).

თანხვედრის სქემით ჩატარებულ ექსპერიმენტებში ხდება საბოლოო მდგომარეობაში მყოფი ორივე ელექტრონის ერთდროულად დეტექტირება (ნარჩენი იონის კინემატიკური მახასიათებლები განისაზღვრება ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონებით).

როგორც წესი  $(e, 2e)$  ექსპერიმენტები ტარდება ე. წ. კომპლანარულ გეომეტრიაში, რაც იმას ნიშნავს, რომ იონიზაციის შედეგად წარმოქმნილი ელექტრონი და გაფანტული ელექტრონი დეტექტირდება ერთ სიბრტყეში [8, 9]. ასეთ სიბრტყედ იღებენ დამჯახებელი და გაფანტული ელექტრონების ტალღურ ვექტორებზე გამავალ სიბრტყეს. კომპლანარულ გეომეტრიაში პროცესის აღმწერი სრული დიფერენციალური განიკვეთი (საზოგადოდ ხუთჯერადი) დაიყვანება სამჯერად დიფერენციალურ განიკვეთზე.

კომპლანარულ გეომეტრიაში შეიძლება გამოვყოთ ორი ტიპის ექსპერიმენტები. პირველ ტიპს მიეკუთვნება ისეთი ექსპერიმენტები

სადაც დამჯახებელი ელექტრონი გაიფანტება მცირე კუთხეებზე და ამიტომ კვლავ სწრაფი რჩება, ხოლო ამოტყორცნილ ელექტრონს მცირე იმპულსი მიაქვს. ამ შემთხვევაში გადაცემული იმპულსი მცირეა და შედეგად ასეთი პროცესების სრული დიფერენციალური განიკვეთი შედარებით დიდია [10-12].

მეორე ტიპის ექსპერიმენტები ტარდება ე.წ. სიმეტრიულ კინემატიკაში. ასეთ ექსპერიმენტებში გაფანტული და ამოტყორცნილი ელექტრონები გაიფანტებიან დაცემული ელექტრონის მიმართულებისადმი სიმეტრიულად და მიაქვთ ტოლი ენერგიები [13].

გარდა კომპლანარული კინემატიკისა, ექსპერიმენტები ტარდება აგრეთვე ე.წ. მართობულ კინემატიკაში [14]. ამ შემთხვევაში ამოტყორცნილი ელექტრონი გაიფანტება იმ სიბრტყის მართობულად, რომელშიც მდებარეობს დამჯახებელი და გაფანტული ელექტრონების ტალღური ვექტორები.

იონიზაციის პროცესების თეორიული შესწავლისას, გარდა იმისა, რომ საქმე გვაქვს მრავალი სხეულის პრობლემასთან, აუცილებელია, გავითვალისწინოთ რეაქციის ყველა შესაძლო მექანიზმი. დამჯახებელი ელექტრონის ენერგიისა და სამიზნე ატომის (იონის) სტრუქტურის მიხედვით იონიზაციის განსხვავებულ მექანიზმებს სხვადასხვა წვლილი შეიძლება ჰქონდეთ. ერთ და ორელექტრონიანი ატომური ნაწილაკების მარტივი სტრუქტურის გამო მათი იონიზაცია ძირითადად ხორციელდება პირდაპირი დარტყმის მექანიზმით. ეს ნიშნავს, რომ იონიზაციის გამომწვევი ელექტრონ-ელექტრონული ურთიერთქმედებაა.

ელექტრონული დარტყმით ატომის იონიზაციის თეორიული აღწერის პირველი ცდა განხორციელებული იყო 1912 წ. ჯ.ჯ. ტომსონის მიერ [15]. ტომსონის მოდელში ატომი ჩაითვლება იონიზებულად, თუ კი მისი ელექტრონი დამჯახებელი ელექტრონისგან მიიღებს ენერგიას, რომელიც აღემატება ამ ელექტრონის ბმის ენერგიას ატომში.

ჯ.ჯ. ტომსონის მიერ შემოთავაზებული მოდელი ფაქტიურად არის კლასიკური იმპულსური მიახლოების ერთ-ერთი ვარიანტი, რომლის საფუძველს წარმოადგენს დაშვება, რომ დამჯახებელი და ამოტყორცნილი ელექტრონების ურთიერთქმედება განვიხილოთ როგორც თავისუფალი ნაწილაკების წყვილური დაჯახება [16]. ამის გარდა, ტომსონის მოდელში ატომში მყოფი ელექტრონი, რომელზედაც გაიფანტება დაცემული ელექტრონი მიჩნეულია უძრავად. ეს დაშვება სამართლიანია მაშინ, როდესაც დამჯახებელი ელექტრონის ენერგია გაცილებით აღემატება ატომში მყოფი ელექტრონის ბმის ენერგიას, ანუ როდესაც დამჯახებელი ელექტრონი არის სწრაფი.

განხილული მოდელის გამოყენებით ტომსონმა იონიზაციის სრული განიკვეთისთვის მიიღო:

$$\sigma(E) = \frac{n\pi}{EI} \left(1 - \frac{I}{E}\right), \quad (4)$$

სადაც  $E$  დამჯახებელი ელექტრონის ენერგიაა,  $n$  ატომის გარე შრეზე ექვივალენტურ ელექტრონთა რიცხვია, ხოლო  $I$  მათი ბმის ენერგიაა.

ჯ.ჯ. ტომსონის თეორიის ყველაზე დიდ ნაკლად ითვლება ის რომ (4) ფორმულა არასწორად აღწერს სრული განიკვეთის ყოფაქცევას მაღალი ენერგიების არეშიც კი. მიუხედავად ამისა, ტომსონის თეორია სიმარტივის გამო მრავალი ავტორის მიერ იქნა გამოყენებული. წყვილური დაჯახებების მიახლოების ჩარჩოებში კლასიკური გამოთვლების შედეგების გასაუმჯობესებლად მოიხსნა დაშვება, რომლის თანახმადაც სამიზნის ელექტრონი დაჯახებამდე განიხილებოდა უძრავად. მხედველობაში იყო მიღებული ამ ელექტრონის სიჩქარეთა გარკვეული განაწილება [17-26].

კლასიკური თეორიის შემდგომ მოდიფიკაციებში გარკვეული დოზით მოხდა დამჯახებელ ნაწილაკთა კვანტური თვისების (გაცვლითი

ეფექტები, ინტერფერენცია) ემპირიულად გათვალისწინება [27, 28]. გარდა ამისა, მხედველობაში იყო მიღებული დამჯახებელი ელექტრონის მოძრაობის დამახინჯება კულონუსრ ველში, რამაც კორექტივები შეიტანა ტომსონის თეორიაში [29]. ამან გააფართოვა აღნიშნული თეორიის გამოყენების არე, კერძოდ, შესაძლებელი გახდა დადებითი იონების იონიზაციის პროცესების ანალიზი.

იონიზაციის პროცესის პირველი კვანტური განხილვა ჩატარებული იყო ბორნის მიერ [30, 31]. იონიზაციის ამოცანაში ბორნის მიახლოების ფიზიკური შინაარსი მდგომარეობს იმაში, რომ დამჯახებელი და გაფანტული ელექტრონების მდგომარეობები ბრტყელი ტალღებით აღიწერებიან. ეს მაშინ მოხდება, თუ დამჯახებელი ელექტრონის ენერგია გაცილებით აღემატება ატომში ელექტრონთა ბმის საშუალო ენერგიას. ანუ დიდ ენერგიებზე ბორნის მიახლოება სამართლიანია მაშინ, როდესაც ელექტრონი ისე სწრაფად ჩაუვლის სამიზნე ატომს, რომ “პოტენციური ენერგია ვერ მოასწრებს ურთიერთქმედებას” და ბრტყელი ტალღის შესამჩნევად შეშფოთებას. აქედან გამომდინარე, ბუნებრივია, რომ დაცემულ და ამოგდებულ ელექტრონებს შორის გაცვლითი ეფექტი შეიძლება უგულვებელყოთ. წყალბადისებრი იონის ელექტრონული დარტყმით იონიზაციის შემთხვევაში მოსახერხებელია ე.წ. კულონ-ბორნის მიახლოება, რომელიც გულისხმობს დაცემულ და გაფანტულ ელექტრონების კულონური ფუნქციებით აღწერას. ეს მეთოდი არადაამაკმაყოფილებელ შედეგებს იძლევა დაბალ და შუალედურ ენერგეტიკულ არეში და მისი გამოყენება ეფექტურია დამჯახებელი ელექტრონის მაღალ ენერგიებზე.

ბორნის მიახლოების მარტივ კერძო შემთხვევას წარმოადგენს ბეტეს მიახლოება (1930 წ.) [32]. მაღალი ენერგიების არეში ბეტემ იონიზაციის სრული განიკვეთისათვის მიიღო:

$$\sigma(E) = A \frac{\ln x}{x} + \frac{B}{x}, \quad (5)$$

სადაც  $x = E/I$ .

ბეტეს მიერ (5) ფორმულის მიღების შემდეგ დამუშავდა სხვადასხვა მიახლოებითი კვანტური მეთოდი რომელთა უმრავლესობა შეეხება ნეიტრალური ატომების იონიზაციას [33, 34]. ეს მეთოდები შეიძლება განზოგადდეს ისე, რომ მათი გამოყენება შესაძლებელი გახდება დადებითი იონების იონიზაციის შემთხვევაშიც. თუმცა, ასეთი განზოგადოებების ჩატარება რთული და შრომატევადია. სიძნელეები ძირითადად დაკავშირებულია კულონური პოტენციალის შორსქმედებასთან, რაც მოითხოვს სამი სხეულის პრობლემის გადაჭრას ასიმპტოტიკურ არეში.

იონიზაციის პროცესის კვანტური აღწერის ერთერთი უმარტივესი მიახლოებაა ე.წ. ბრტყელი ტალღების მიახლოება [35,36]. ამ მიახლოებაში უწყვეტი სპექტრის ყველა ელექტრონი ბრტყელი ტალღით აღიწერება. ამასთანავე ორთოგონალობა მოთხოვნილია ატომის ძირითადი მდგომარეობისა და ერთერთი ელექტრონის ტალღურ ფუნქციებს შორის. აღნიშნული მიახლოება გამოყენებული იქნა [35] შრომაში, სადაც განხილული იქნა წყალბადის ატომისა და ცეზიუმის იონიზაციის პროცესები. მიღებულმა შედეგებმა აჩვენა, რომ ეს მიახლოება საკმაოდ სუსტი მიახლოებაა. იგი არადაამაკმაყოფილებლად აღწერს პროცესის სრული ინტეგრალური განიკვეთის ყოფაქცევას. კერძოდ ამ მიახლოებით მიღებული განიკვეთი ცუდ რაოდენობრივ და თვისობრივ თანხვედრაშია შესაბამის ექსპერიმენტულ მონაცემებთან [36].

იონიზაციის და აგზნების პროცესების აღმწერ ერთერთ ეფექტურ მიახლოებას წარმოადგენს ე.წ. იმპულსური მიახლოება, რომელიც ასევე ფართოდ გამოიყენება ბირთვული ნაწილაკების დაჯახებებში [37-39]. ამ მიახლოებაში დამჯახებელი ელექტრონი ურთიერთქმედებს სამიზნე ატომის მხოლოდ ერთ ელექტრონთან. გამოთვლები

ჩატარებული იქნა წყალბადის ატომის (როგორც ძირითად ისე აგზნებული მდგომარეობებისთვის) იონიზაციის პროცესისათვის სხვადასხვა დამჯახებელი ნაწილაკების შემთხვევაში [40-42]. გამოთვლილი ინტეგრალური განივკვეთები კარგ რაოდენობრივ და თვისობრივ თანხვედრაშია ექსპერიმენტულ მონაცემებთან [42]. აღსანიშნავია, რომ მეთოდის სიმარტივის გამო იგი ადვილად შეიძლება განზოგადდეს მრავალელექტრონიანი ატომების იონიზაციისთვისაც.

ყველა ზემოთ განხილულ მიახლოებებში საწყისი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია წარმოიდგინება, როგორც დამჯახებელი ელექტრონის აღმწერი შეუშფოთებელი ბრტყელი ტალღისა და სამიზნე ატომის ტალღური ფუნქციის ნამრავლი. 1965 წელს შემოთავაზებული იქნა მეთოდი, რომლის თანახმადაც დამჯახებელი ელექტრონის მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია აიგებოდა ჰარტრი-ფოკის მეთოდის გამოყენებით [30], რომელშიც დამჯახებელი ელექტრონის ტალღური ფუნქცია წარმოადგენს საცდელ ტალღურ ფუნქციას [43]. შედეგებიდან ჩანს, რომ მიუხედავად მეთოდის კომპლექსურობის და სირთულისა თეორიის ექსპერიმენტთან თანხვედრის მხოლოდ მცირეოდენ გაუმჯობესებას აქვს ადგილი, რაც მიუთითებს იმაზე, რომ არა ნაკლებ მნიშვნელოვანია საბოლოო მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის უკეთესად აღწერა. მიუხედავად ამისა, აღნიშნული მეთოდის ეფექტურობა მნიშვნელოვანწილად იზრდება ატომის 2S მდგომარეობიდან იონიზაციის შემთხვევაში [43]. ზემოთ განხილული მეთოდი ლიტერატურაში დამახინჯებულ ტალღათა მეთოდით მოიხსენიება.

გაფანტვის ამოცანებში (როგორც ატომზე, ასევე ბირთვზე) ფართოდ გამოიყენება აგრეთვე ე.წ. გლაუბერის მიახლოება, რომლის იდეაც მდგომარეობს იმაში, რომ მაღალ ენერგიებზე დამჯახებლის ურთიერთქმედება სამიზნის ნაწილაკებთან განიხილება როგორც

გაფანტვა “გაყინულ” გამფანტავ ცენტრებზე [30]. ეს მიახლოება გამოიყენება როდესაც დამჯახებელი ნაწილაკის კინეტიკური ენერგია  $E$  გაცილებით აღემატება სამიზნის ნაწილაკებთან ურთიერთქმედების  $U$  პოტენციურ ენერგას  $E \gg |U|$  ანუ  $ka \gg 1$ , სადაც  $k$  დამჯახებლის ტალღური ვექტორის მოდულია, ხოლო  $a$  ურთიერთქმედების რადიუსი. გაფანტვა განიხილება ისეთ კინემატიკაში, როდესაც გადაცემული იმპულსი შედარებით მცირეა, ანუ როდესაც დამჯახებელი ნაწილაკის იმპულსის ცვლილება გაცილებით ნაკლებია მის საწყის იმპულსთან შედარებით  $q \ll k$ : აქედან გამომდინარე, ნაწილაკები გაიფანტებიან მცირე კუთხეებზე და ამასთან მცირეა დამჯახებლის მიერ სამიზნეზე გადაცემული ენერგიაც. აღნიშნული მეთოდი წარმატებით იქნა გამოყენებული ატომურ დაჯახებათა ფართო სპექტრისათვის [44-49] განსაკუთრებით კი არადრეკადი პროცესებისათვის [50-54].

სამნაწილკობრივი გაფანტვის ამოცანის კლასიკური ამოხსნის შედარებით მარტივი მიდგომა განხორციელებული იყო ტიომკინ-პოეტის მოდელში [55,56]. ავტორები ამ ამოცანის გადასაჭრელად გამოთვლებში ისაზღვრენიან მხოლოდ ნულოვანი ორბიტალური მომენტების გათვალისწინებით. აღნიშნული მეთოდი საკმაოდ ეფექტური აღმოჩნდა იონიზაციის ინტეგრალური განიკვეთების გამოსათვლელად და იგი კარგ თანხვედრაშია სხვა რიცხვით მეთოდებით მიღებულ შედეგებთან.

## § 1.2 გაფანტვის თეორიის თანამედროვე მიახლოებები.

ზემოთ აღნიშნული თეორიული მიახლოებები წარმოდგენენ კლასიკურ მიახლოებებს. კვლევის ერთ-ერთი თანამედროვე მიახლოებითი მეთოდი რომელიც კარგი თეორიული შედეგებით გამოირჩევა და ამიტომ ფართოდ გამოიყენება როგორც აგზნების, ასევე იონიზაციის პროცესებში, ლიტერატურაში CCC (Convergent close-coupling) მეთოდის სახელითაა ცნობილი. პირველი შრომა რომელშიც ეს მეთოდი იყო გამოყენებული, ეკუთვნით ი. ბრეის და ა. სტელბოვიჩს [57]. ამ შრომაში ელექტრონ-წყალბადის ურთიერთქმედების დიფერენციალური განიკვეთი მიღებულია სამიზნის ტალღური ფუნქციის საკმარისად დიდი,  $N$  რაოდენობის, კვადრატულად ინტეგრებად ორთოგონალურ ფუნქციათა სრული კრებულის (ლაგერის ფუნქციები) ბაზისში გაშლით. მიღებული სამჯერადი დიფერენციალური განიკვეთი აღწერს როგორც იონიზაციის, ასევე აგზნების პროცესებს დამჯახებელი ელექტრონების სხვადასხვა ენერგიის მნიშვნელობებისთვის. შემდგომ შრომებში CCC მეთოდის გამოყენებით დათვლილი იქნა ელექტრონის წყალბადთან ურთიერთქმედების სრული ინტეგრალური განიკვეთები და თეორიის ექსპერიმენტთან საკმაოდ კარგი თანხვედრა იყო მიღწეული [58, 59-64]. ასევე კარგი შედეგები მიიღეს ელექტრონების დართყმით ნატრიუმის [65] და ჰელიუმის [66] სამიზნე ატომების აღგზნების პროცესებისთვის. სრული დიფერენციალური კვეთები დათვლილი იქნა ასევე დამჯახებელი ელექტრონის სხვადასხვა ენერგიის და სხვადასხვა სამიზნე ატომის იონიზაციის პროცესებისთვის. კერძოდ, წყალბადის ატომისთვის – ფართო ენერგეტიკულ არეში [67], ასევე ზღურბლური ენერგიის მახლობლობაში [68], ჰელიუმის იონისთვის  $\text{He}^+$  [69],

ჰელიუმისთვის He [66] და ნატრიუმისთვის Na [70, 71]. სრული დიფერენციალური განიკვეთისთვის მიღებულმა კარგმა შედეგებმა სტიმული მისცა თეორიის განვითარებას და მის გამოყენებას ერთჯერადი (SDCS), ოჯერადი (DDCS) და სამჯერადი (TDCS) დიფერენციალური კვეთების დასათვლელად [72].

ბრაუნერის ბრიჯის და კლარის [2] მიერ 1989 წელს შემოთავაზებულ იყო სამი კულონურად ურთიერთქმედი ნაწილაკისაგან შემდგარი სისტემის შესაბამისი შრედინგერის განტოლების მიახლოებითი ამოხსნის მეთოდი. ამ ავტორების მიერ მიღებული ტალღური ფუნქცია აკმაყოფილებს რეალისტურად შერჩეულ სასაზღვრო პირობას და დღეისათვის ცნობილ ფუნქციებს შორის ყველაზე ეფექტურად აღწერს დადებითი ენერგეტიკული სპექტრის მქონე სამი დამუხტული ნაწილაკის ურთიერთქმედებას. ბრაუნერის, ბრიჯისა და კლარის მიერ მიღებული ტალღური ფუნქცია ფართოდ გამოიყენება ატომური ნაწილაკების, როგორც ერთჯერადი, ისე ორჯერადი იონიზაციის პროცესების თეორიულ გამოთვლებში. კვლევის ეს მეთოდი დღეს ცნობილია BBK მეთოდის სახელწოდებით.

სამნაწილაკობრივი ამოცანის გადაჭრის ეფექტური მეთოდი ბირთვული ნაწილაკების გაფანტვებისთვის ე.წ. სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ჩამოჭრით (სიმჩ) შემოთავაზებული იქნა 1974 წელს ჯ. მებონიას მიერ [73]. სიმჩ-ში მტკიცდება, რომ ცალკეულ შემთხვევაში ერთი ნაწილაკის გაფანტვისას ორნაწილაკიან ბმულ სისტემაზე ძირითადი წვლილი შეიძლება შეიტანოს ერთჯერადი დაჯახების მექანიზმმა. მაგრამ ამისთვის აუცილებელია, რომ მესამე ნაწილაკი იმყოფებოდეს საკმაოდ შორს ამ „მოვლენიდან“. ამას მიუყავართ ბმული მდგომარეობის რადიალური ტალღური ფუნქციის ფურიე-სახის ჩამოჭრამდე  $X$  სივრცეში. ჩამოჭრის პროცედურა უნდა გავიგოთ, როგორც სამნაწილაკობრივი გაფანტვის ამპლიტუდისთვის

უნიტარობის თვისების მიახლოებით აღდგენის ფენომენოლოგიური ხერხი, რომელიც უფრო ინტუიციური მიგნების შედეგია.

მოგვიანებით ჯ. მებონიასა და თ. კვარაცხელიას მიერ შემოთავაზებულ იქნა უნიტარობის აღდგენის მეორე გზა სამნაწილაკობრივი უნიტარული იმპულსური მიახლოება (სუიმ) [74]. უკანასკნელი წარმოადგენს გაფანტვის ამპლიტუდის უნიტარულ მწკრივად გაშლის შედეგს, რომელიც შესაძლებელი გახდა ფადეევის განტოლებების [31] მიახლოებითი ამოხსნით K-მატრიცულ ფორმალიზმში. სუიმ არ შეიცავს დამატებით პარამეტრებს, გარდა სიმცირის პარამეტრისა, რომლის სიზუსტით, მიახლოებითი T-მატრიცა აკმაყოფილებს სამნაწილაკობრივი უნიტარობის პირობას. ამ ორი, გარეგნულად განსხვავებული მეთოდის ექვივალენტურობა შემდგომ ნაჩვენები იყო [75] შრომაში.

აღნიშნული მიახლოებების გამოყენებით მიღებულმა კარგმა შედეგებმა მცირენუკლონიან ბირთვთა სისტემების კვლევებში [73-77] სტიმული მოგვცა ეს მიდგომა გამოგვეყენებინა ელექტრონების დარტყმით ატომების იონიზაციის შესასწავლად. ამ მეთოდების გამოყენებით დათვლილი იყო  $H(e,2e)H^+$ ,  $He(e,2e)He^+$  [78, 79] და  $Li^+(e,2e)Li^{++}$  -ის [80] იონიზაციის სამჯერადი დიფერენციალური განიკვეთები დამჯახებელი ელექტრონის ენერგიების ფართო სპექტრისთვის და თეორის ექსპერიმენტთან საკმაოდ კარგი თანხვედრა იყო მიღწეული. წარმოდგენილი დისერტაცია ეძღვნება სიმჩ-ს მეთოდის განზოგადობას ატომურ დაჯახებში. აქ საქმეს გვირთულებს კულონური ურთიერთქმედების შორსქმედი ხასიათი. ამ მიზეზით გამოწვეული პრობლემები და მისი გადაჭრის ხერხები დაწვრილებით აღწერილია შემდგომ თავებში. აღნიშნული მიდგომა გამოირჩევა შედარებითი სიმარტივით და ეფექტურობით, რაც საშუალებას

გვაძლევს შემდგომ მისი გამოყენებით შევისწავლოთ მრავალელექტრო  
ნიანი სისტემების იონიზაციისა და, ასევე, აგზნების პროცესები.

026678

## თავი II. სამი ნაწილაკის ამოცანა.

სამი ნაწილაკის ამოცანა, გარდა კინემატიკურისა, შეიცავს პრინციპულ სიძნელეს, რომელიც დაკავშირებულია ლიპმან-შვინგერის განტოლების ამოხსნის არაცალსახობასთან (გამონაკლისია სამი ბმული ნაწილაკის სისტემა). მდგომარეობიდან გამოსავალი ნაპოვნი იქნა ფადეევის [81] მიერ, რომელმაც ჩამოაყალიბა სამი ნაწილაკის კორექტული თეორია. დღეისთვის არსებობს ფადეევის განტოლებების სხვადასხვა ვარიანტი. თითოეულ მათგანს გააჩნია გარკვეული უპირატესობა იმის მიხედვით, თუ რომელ კონკრეტულ ამოცანასთან გვაქვს საქმე.

უნდა ითქვას, რომ ფადეევის განტოლებათა სისტემის ამოხსნა ზოგად შემთხვევაში წარმოადგენს საკმაოდ რთულ ტექნიკურ ამოცანას, მიუხედავად თანამედროვე მძლავრი გამოთვლელი საშუალებებისა. მართალია, ფადეევის განტოლებები უშვებენ ამონახსნის იტერაციულ მწკრივად გაშლას, მაგრამ კვლევის ასეთი მეთოდი აღმოჩნდა არაეფექტური იტერაციული მწკრივის ცუდი კრებადობის გამო საკმაოდ მაღალ ენერგიებზეც კი. ამიტომ შემოთავაზებულ იქნა სხვადასხვა მიახლოებითი მეთოდი.

### §2.1 იმპულსური მიახლოება

გაფანტვის ამოცანების შესწავლისას ყველაზე ფართოდ გამოყენებულ თეორიულ მეთოდს წარმოადგენს იმპულსური მიახლოება (იმ), რომელიც საფუძვლიანად იქნა ფორმულირებული ჩუს შრომაში [82]. იგი ეფუძნება იმ მოსაზრებას, რომ თუ დამჯახებელი ნაწილაკის კინეტიკური ენერგია ბევრად დიდია სამიზნის ბმის ენერგიაზე, მაშინ

ბმული ნაწილაკი შეიძლება წარმოვიდგინოთ გარკვეული იმპულსური განაწილების მქონე თავისუფალ ნაწილაკად. ამ მიახლოებაში თავისუფალი ნაწილაკის ბმულზე გაფანტვის ოპერატორი შეიძლება შევცვალოთ თავისუფალ ნაწილაკთა გაფანტვის ოპერატორით. უნდა ვიფიქროთ, რომ ასეთი მიახლოება სამართლიანი იქნება შედარებით მაღალი ენერგიების დროს.

იგივე შეიძლება ვთქვათ სხვანაირადაც. თუ ურთიერთქმედების დროის განმავლობაში ბმული ნაწილაკის ტალღის სიგრძე ან იმპულსი იცვლება უმნიშვნელოდ, მაშინ ეს ნაწილაკი შეიძლება განვიხილოთ როგორც თავისუფალი და ჩავთვალოთ რომ მას გააჩნია განსაზღვრული იმპულსი. მაშინ დამჯახებელ ნაწილაკთა სრული ტალღური ფუნქცია ჩაიწერება გაფანტული ტალღების ისეთი სუპერპოზიციით, რომელშიც ცალკეული კომპონენტის წონა განისაზღვრება ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ფურიე-კომპონენტის მოდულის კვადრატით.

ნათქვამის სადემონსტრაციოდ ხელსაყრელია განვიხილოთ კვაზიდრეკადი გაფანტვის რეაქცია (კგრ) არარელატივისტური სამნაწილაკობრივი მიდგომის მაგალითზე. მივაკუთვნოთ ცალკეულ ნაწილაკს განსაზღვრული ნომერი. დამჯახებელი ნაწილაკის ნომერი იყოს 1, ბმულ მდგომარეობაში მყოფების – 2 და 3. აღვნიშნოთ  $V_{ij}$ -ით ურთიერთქმედების ოპერატორი  $i$  და  $j$  ნაწილაკებს შორის, მაშინ სისტემის სრული ჰამილტონიანი მიიღებს სახეს:

$$H = H_0 + V_{12} + V_{23} + V_{31}, \quad (2.1)$$

სადაც  $H_0$ -სისტემის შეუშფოთებელი ჰამილტონიანია და შეიცავს ყველა ნაწილაკის კინეტიკურ ენერგიებს. თუ ცალკეული ნაწილაკი რთული ფრაგმენტია, მაშინ  $H_0$  შეიცავს აგრეთვე ურთიერთქმედებებს ფრაგმენტის ნაწილაკებს შორის.

შემოვიტანოთ საწყისი ( $V_i$ ) და საბოლოო ( $V_f$ ) მდგომარეობათა არხების ოპერატორების განმარტებები:

$$V_i = V_{12} + V_{31} \quad (2.2)$$

$$V_f = V_{12} + V_{23} + V_{31} \quad (2.3)$$

მაშინ გაფანტვის ზოგადი თეორიის თანახმად მატრიცული ელემენტისთვის შეიძლება დავწეროთ ორი ექვივალენტური გამოსახულება:

$$M_{fi} = \langle \Psi_{of} | V_f | \Psi_i^{(+)} \rangle = \langle \Psi_f^{(-)} | V_i | \Psi_{oi} \rangle, \quad (2.4)$$

სადაც  $\Psi_{oi}, \Psi_{of}$ -შეუშფოთებელი ტალღური ფუნქციებია შესაბამისად საწყის და საბოლოო მდგომარეობებში, ხოლო  $\Psi_i^{(+)}$  და  $\Psi_f^{(-)}$ -გაფანტვის სრული ტალღური ფუნქციებია შესაბამისად განშლადი და კრებადი ასიმპტოტიკით; ისინი განისაზღვრებიან შემდეგი განტოლებებიდან:

$$\begin{aligned} \Psi_i^{(+)} &= \Psi_{oi} - (H_0 - E - i\eta)^{-1} V_i \Psi_i^{(+)} \\ \Psi_f^{(-)} &= \Psi_{of} - (H_0 - E + i\eta)^{-1} V_f \Psi_f^{(-)}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

სადაც  $E$ -სისტემის სრული ენერგიაა.

მიახლოების ფიზიკური არსის გასაგებად გადმოცემისთვის ხელსაყრელია შემოვისაზღვროთ მხოლოდ  $V_{12}$  ურთიერთქმედებით, ე.ი. ჩავთვალოთ, რომ  $V = V_{12}$ . იონიზაციის ამოცანებში, ბირთვის დიდი მასის გამო, ცხადია, რომ ელექტრონის ბირთვთან ურთიერთქმედება არ შეიძლება იყოს იონიზაციის გამომწვევი მიზეზი.

განვსაზღვროთ ახლა ახალი ფუნქცია  $\chi$  შემდეგი სახით:

$$(H_0 + V)\chi = E\chi \quad (2.6)$$

შემდგომი მიზნისთვის ჩვენ დაგვჭირდება ეს ტალღური ფუნქცია განსაზღვრული ასიმპტოტიკით:  $\chi_i^{(+)}$ ,  $\chi_f^{(-)}$ . ამიტომ (2.6)-დან გამომდინარე ჩავწეროთ მათთვის ინტეგრალური განტოლებები სათანადო

სასაზღვრო პირობებით:

$$\begin{aligned}\chi_i^{(+)} &= \Psi_{0i} - (H_0 - E - i\eta)^{-1} V \chi_i^{(+)} \\ \chi_f^{(-)} &= \Psi_{0f} - (H_0 - E + i\eta)^{-1} V \chi_f^{(-)}\end{aligned}\quad (2.7)$$

მაშინ გადასვლის მატრიცული ელემენტისთვის მივიღებთ:

$$M_{fi} = \langle \Psi_{0f} | V | \chi_i^{(+)} \rangle \quad (2.8)$$

$$M_{fi} = \langle \chi_f^{(-)} | V | \Psi_{0i} \rangle \quad (2.9)$$

ახლა აღვნიშნოთ  $\Phi_{0i}, \Phi_{0f}$ -ით რეაქციაში მონაწილე ნაწილაკების (ფრაგმენტების) შინაგანი ტალღური ფუნქციები;  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$  იყოს ნაწილაკთა (ფრაგმენტთა) კოორდინატები,  $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3$  და  $\vec{k}'_1, \vec{k}'_2, \vec{k}'_3$ -მათი იმპულსები შესაბამისად საწყის და საბოლოო მდგომარეობებში (ჩვენ ვირჩევთ ერთეულთა ისეთ სისტემას, რომელშიც  $\hbar = c = m_e = 1$ ). მაშინ  $\Psi_{0f}, \chi_i^{(+)}$  შეიძლება ასე ჩავწეროთ:

$$\Psi_{0f} = (2\pi)^{-\frac{9}{2}} \Phi_{0f} \exp(i[\vec{k}'_1 \vec{r}_1 + \vec{k}'_2 \vec{r}_2 + \vec{k}'_3 \vec{r}_3]) \quad (2.10)$$

$$\chi_i^{(+)} = \Phi_{0i} \chi^{(+)}(\vec{k}_1, \vec{K}_{23}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3), \quad (2.11)$$

სადაც  $\chi^{(+)}(\vec{k}_1, \vec{K}_{23}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$  აღწერს  $\vec{k}_1$  იმპულსის მქონე 1 ნაწილაკის გაფანტვას  $\vec{K}_{23} = \vec{k}_2 + \vec{k}_3$  იმპულსის მქონე (2,3) ბმულ სისტემაზე.

ტალღურ ფუნქციას, რომელიც აღწერს 1 ნაწილაკის გაფანტვას (2,3) ბმულ სისტემაზე აქვს სახე:

$$\chi^{(+)}(\vec{k}_1, \vec{K}_{23}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d\vec{k}_2 f(\vec{k}_2) \Psi(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2) \exp(i(\vec{K}_{23} - \vec{k}_2) \vec{r}_3), \quad (2.12)$$

სადაც

$$f(\vec{k}_2) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int \exp(-i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}) \phi(\vec{x}) d\vec{x} \quad (2.13)$$

$\phi(\vec{x})$ -ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა,  $f(\vec{k}_2)$ - მისი ფურიე კომპონენტი, ანუ იმპულსური განაწილების ფუნქციის ამპლიტუდაა.  $\Psi(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2)$ - 1 და 2 ნაწილაკის თავისუფალი გაფანტვის აღმწერი ტალ-

ღური ფუნქციაა. ცხადია, რომ იმპულსური განაწილების ამპლიტუდა გამოისახება 2 ნაწილაკის ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციით.

ვივარაუდოთ, რომ  $V$  ოპერატორი არის ლოკალური:  $V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  და გადავიდეთ 1-2 სისტემის ფარდობით და მასათა ცენტრის კოორდინატებზე:

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R}_{12} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (2.14)$$

მათი შესაბამისი იმპულსები გამოისახებიან შემდეგნაირად:

$$\vec{k}_{12} = \frac{m_2 \vec{k}_1 - m_1 \vec{k}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{K}_{12} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 \quad (2.15)$$

მაშინ 1 და 2 ნაწილაკთა თავისუფალი გაფანტვის აღმწერ ტალღურ ფუნქციას ექნება სახე:

$$\Psi^{(+)}(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i \vec{K}_{12} \vec{R}_{12}) \Psi^{(+)}(\vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \quad (2.16)$$

თუ (2.10)-ს და (2.11)-ს ჩავსვამთ (2.8)-ში, გავითვალისწინებთ (2.12)-ს და (2.16)-ს, ვაინტეგრებთ  $\mathbf{R}_{12}$  და  $\mathbf{r}_3$  ცვლადებით, მაშინ კგრ-ის მატრიცული ელემენტისთვის მივიღებთ გამოსახულებას:

$$M_{fi} = \int d\vec{k}_2 f(\vec{k}_2) \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}'_1 - \vec{k}'_2) \delta(\vec{K}_{23} - \vec{k}_2 - \vec{k}'_3) \mathfrak{I}(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \times \quad (2.17)$$

$$\times \int d\vec{r}_{12} \exp(-i \vec{k}'_{12} \vec{r}_{12}) \times V(\vec{r}_{12}) \Psi^{(+)}(\vec{k}_{12}, \vec{r}_{12})$$

$\mathfrak{I}$ -შინაგანი ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ინტეგრალია. მეორე ინტეგრალი (2.17)-ში არის ორნაწილაკობრივი T-მატრიცული ელემენტი არაენერგეტიკულ ზედაპირზე ( $|\vec{k}_{12}| \neq |\vec{k}'_{12}|$ ), რომელიც აგებულია ფარდობითი მოძრაობის ენერგიით საწყის მდგომარეობაში:

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d\vec{r}_{12} \exp(-i \vec{k}'_{12} \vec{r}_{12}) \times V(\vec{r}_{12}) \Psi^{(+)}(\vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) = t(\vec{k}'_{12}, \vec{k}_{12}; \varepsilon_{12}(k_{12})) \quad (2.18)$$

$\vec{k}'_{12}$  წარმოადგენს დამჯახებელი ნაწილაკების ფარდობითი მოძრაობის იმპულსს საბოლოო მდგომარეობაში. ის განისაზღვრება შემდეგი სახით:

$$\bar{k}'_{12} = \frac{m_2 \bar{k}'_1 - m_1 \bar{k}'_2}{m_1 + m_2} \quad (2.19)$$

თუ ახლა მოვახდინოთ ინტეგრებას  $\bar{k}_2$ -ით, მაშინ (2.17) მიიღებს სახეს:

$$M_{fi} = \delta(\bar{k}_1 + \bar{K}_{23} - \bar{k}'_1 - \bar{k}'_2 - \bar{k}'_3) \mathfrak{F}f(\bar{K}_{23} - \bar{k}'_3) t(\bar{k}_{12}, \bar{k}'_{12}; \varepsilon_{12}(\bar{k}_{12})) \quad (2.17')$$

აქ  $\delta$ -ფუნქცია გამოხატავს იმპულსის შენახვის კანონს. აღვნიშნოთ, რომ მატრიცული ელემენტი (2.17') ჩაწერილია ნებისმიერ კოორდინატთა სისტემაში. ლაბორატორიულ სისტემაში  $\bar{K}_{23} = 0$ , მაშინ კვრ მატრიცული ელემენტისთვის მივიღებთ:

$$M_{fi} = \delta(\bar{k}_1 - \bar{k}'_1 - \bar{k}'_2 - \bar{k}'_3) \mathfrak{F}f(-\bar{k}'_3) t(\bar{k}_{12}, \bar{k}'_{12}; \varepsilon_{12}(\bar{k}_{12})) \quad (2.20)$$

ამრიგად იმ გეგმლევს საშუალებას მოვახდინოთ მატრიცული ელემენტის ფაქტორიზება ორ თანამარავლად: ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ფურიე-კომპონენტი  $f(-\bar{k}'_3)$  და ორნაწილაკობრივი T-მატრიცული ელემენტი არაენერგეტიკულზედაპირზე  $t(\bar{k}_{12}, \bar{k}'_{12}; \varepsilon_{12}(\bar{k}_{12}))$ . თუ ახლა ჩავატარებთ სრულიად ანალოგიურ გარდაქმნებს (2.9) მატრიცული ელემენტისთვის მივიღებთ:

$$M_{fi} = \delta(\bar{k}_1 - \bar{k}'_1 - \bar{k}'_2 - \bar{k}'_3) \mathfrak{F}f(-\bar{k}'_3) t(\bar{k}_{12}, \bar{k}'_{12}; \varepsilon_{12}(\bar{k}'_{12})) \quad (2.21)$$

ისევ მივიღეთ ფაქტორიზებული მატრიცული ელემენტი, მაგრამ ამ შემთხვევაში T-მატრიცა განსაზღვრულია საბოლოო მდგომარეობის ფარდობითი ენერგიით. ამ ფორმალიზმის ფარგლებში ეს ორი ვარიანტი, (2.20) და (2.21), თეორიულად თანასწორნი არიან, თუმცა პრინციპში მათ შეუძლიათ მოგვცენ განსხვავებული კონკრეტული შედეგები. უნდა ითქვას, რომ მაღალი ენერგიების არეში ეს სხვაობა უმნიშვნელოა, ამიტომ არაენერგეტიკული T-მატრიცული ელემენტი შეიძლება შევცვალოთ ფიზიკური T-მატრიცული ელემენტით ენერგეტიკულზედაპირზე. ეს უკანასკნელი განისაზღვრება საწყისი ან საბოლოო მდგომარეობის ფარდობითი ენერგიით ორნაწილაკობრივი გაფანტვების ექსპერიმენტებიდან:

$$t(\bar{k}_{12}, \bar{k}'_{12}; \varepsilon(\bar{k}_{12})) \approx t(\bar{k}_{12}, \theta) \quad (2.22)$$

$$t(\bar{k}_{12}, \bar{k}'_{12}; \varepsilon(\bar{k}'_{12})) \approx t(\bar{k}'_{12}, \theta), \quad (2.23)$$

სადაც  $\theta$ -კუთხეა  $\bar{k}_{12}$  და  $\bar{k}'_{12}$  ვექტორებს შორის.

დამჯახებელი ნაწილაკის ენერჯიის შემცირებისას (2.22) და (2.23) გამოსახულებებმა შეიძლება მოგვცენ არსებითად განსხვავებული შედეგები. ამიტომ აქტუალური გახდა მატრიცული ელემენტის არაცალსახობის საკითხი [83, 84]. ასეთმა სიტუაციამ, ერთის მხრივ, გაართულა ამ განზოგადოების შესაძლებლობა, მეორე მხრივ, მან სათავე დაუდო გარკვეულ თავისუფლებას ორნაწილაკობრივი მატრიცული ელემენტის არჩევაში. თუ იმპულსურ მიახლოებას განვიხილავთ სამნაწილაკობრივ ასპექტში შესაძლებელია დაბალ ენერჯიებზე მისთვის დამახასიათებელი არაცალსახობის მოხსნა [85]. მისი კონკრეტული მტკიცება მოყვანილია შემდეგ პარაგრაფში.

## §2.2 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება

განვიხილოთ  $T$ -მატრიცისთვის ფადეევის განტოლებათა სისტემის პირველი იტერაციული ამონახსნი, რომელსაც უსაბამებენ ერთჯერადი დაჯახების პროცესს:

$$T^{(1)}(z) = \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta}(z), \quad (2.24)$$

სადაც ორნაწილაკობრივი  $T$ -მატრიცა სამი ნაწილაკის სისტემაში განისაზღვრება შემდეგი სახით:

$$T_{\alpha\beta}(z) = V_{\alpha\beta} (1 - G_0(z) T_{\alpha\beta}(z)), \quad (2.25)$$

სადაც  $G_0(z) = (H_0 - z)^{-1}$  ( $z = E + i\eta$ )-სამი ნაწილაკის თავისუფალი მოძრაობის გრინის ფუნქციაა,  $E$ -სისტემის სრული ენერგიაა.

განვსაზღვროთ სამნაწილაკობრივი იაკობის კოორდინატები იმპულსურ სივრცეში და შესაბამისი დაყვანილი მასები შემდეგი სახით:

$$\bar{k}_{\alpha\beta} = \frac{m_\beta \bar{k}_\alpha - m_\alpha \bar{k}_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad (2.26)$$

$$\bar{p}_\gamma = \frac{1}{M} [m_\gamma (\bar{k}_\alpha + \bar{k}_\beta) - (m_\alpha + m_\beta) \bar{k}_\gamma] \quad (2.27)$$

$$\bar{K} = \bar{k}_\alpha + \bar{k}_\beta + \bar{k}_\gamma \quad (\alpha \beta \gamma = 123, 231, 312) \quad (2.28)$$

$$\mu_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}, \quad \mu_\gamma = \frac{(m_\alpha + m_\beta) m_\gamma}{M}, \quad (2.29)$$

სადაც  $m_\alpha$  და  $\bar{k}_\alpha$  -ნაწილაკის მასა და იმპულსია.

(2.25) ფორმულის თანახმად  $T_{\alpha\beta}(z)$  ოპერატორის მატრიცულ ელემენტს იმპულსურ სივრცეში აქვს სახე:

$$\begin{aligned} \langle \bar{k}'_{\alpha\beta}, \bar{p}'_\gamma, \bar{K}' | T_{\alpha\beta}(z) | \bar{k}_{\alpha\beta}, \bar{p}_\gamma, \bar{K} \rangle = & \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \delta(\bar{p}'_\gamma - \bar{p}_\gamma) \langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | V_{\alpha\beta} | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle - \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | V_{\alpha\beta} | \bar{k}''_{\alpha\beta} \rangle \langle \bar{k}''_{\alpha\beta}, \bar{p}'_\gamma, \bar{K}' | T_{\alpha\beta}(z) | \bar{k}_{\alpha\beta}, \bar{p}_\gamma, \bar{K} \rangle}{H_0(k''_{\alpha\beta}, p_\gamma, K) - z} d\bar{k}''_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (2.30)$$

აღვნიშნოთ  $t_{\alpha\beta}(z)$ -თ გაფანტვის სუფთა ორნაწილაკობრივი T-მატრიცა, რომელიც აკმაყოფილებს ინტეგრალურ განტოლებას:

$$t_{\alpha\beta}(z) = V_{\alpha\beta} [1 - g_0(z) t_{\alpha\beta}(z)], \quad (2.31)$$

სადაც  $g_0$ -გრინის ფუნქციაა ორი ნაწილაკის თავისუფალი მოძრაობისთვის.

ჩავწეროთ (2.31) განტოლება ცხადი სახით:

$$\langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | t_{\alpha\beta}(z) | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle = \langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | V_{\alpha\beta} | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | V_{\alpha\beta} | \bar{k}''_{\alpha\beta} \rangle \langle \bar{k}''_{\alpha\beta} | t_{\alpha\beta}(z) | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle}{h_0(k''_{\alpha\beta}, k_{\alpha\beta}) - z} d\bar{k}''_{\alpha\beta}, \quad (2.32)$$

სადაც  $h_0$ -კინეტიკური ენერჯის ორნაწილაკობრივი ოპერატორია.

თუ შევადარებთ (2.30) და (2.32) ინტეგრაციულ მწკრივებს, მივიღებთ:

$$\langle \bar{k}'_{\alpha\beta}, \bar{p}'_{\gamma}, \bar{K}' | T_{\alpha\beta}(z) | \bar{k}_{\alpha\beta}, \bar{p}_{\gamma}, \bar{K} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \delta(\bar{p}'_{\gamma} - \bar{p}_{\gamma}) \langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | t_{\alpha\beta}(z - \frac{p_{\gamma}^2}{2\mu} - \frac{K^2}{2M}) | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle \quad (2.33)$$

ამრიგად, ორნაწილაკობრივი T-მატრიცული ელემენტი სამი ნაწილაკის ამოცანაში გამოისახება სუფთა ორნაწილაკობრივი T-მატრიცული ელემენტით არაენერგეტიკულ ზედაპირზე.

განვსაზღვროთ ახალა  $T^{(1)}(z)$  მატრიცული ელემენტი იმპულსურ სივრცეში:

$$\langle \bar{k}'_1, \bar{k}'_2, \bar{k}'_3 | T^{(1)}(z) | \bar{k}_1, \bar{k}_2, \bar{k}_3 \rangle = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \sum_{\alpha\beta\gamma} \delta(\bar{p}'_{\gamma} - \bar{p}_{\gamma}) \langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | t_{\alpha\beta}(z - \frac{p_{\gamma}^2}{2\mu_{\gamma}} - \frac{K^2}{2M}) | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle \quad (2.34)$$

ერთჯერადი დაჯახების მიახლოებაში ნებისმიერი სამნაწილაკობრივი პროცესის მატრიცული ელემენტი მიიღება (2.34) გამოსახულების გასაშუალების საფუძველზე საწყისი და საბოლოო არხების ტალღური ფუნქციებით ( $\Psi_{oi}$  და  $\Psi_{of}$ ). ვივარაუდოთ, რომ საწყისი არხი შეიცავს ბმულ სისტემას (2,3) ნაწილაკით და თავისუფალ 1 ნაწილაკს. მაშინ კერ-ის საბოლოო არხში მიიღება სამი თავისუფალი ნაწილაკი. შესაბამისი  $\Psi_{oi}$  და  $\Psi_{of}$  ფუნქციებს იმპულსურ სივრცეში აქვს სახე:

$$\Psi_{0i} = \delta(\bar{k}_1 - \bar{k}'_1) \delta(\bar{K}_{23} - \bar{K}'_{23}) f(\bar{k}_{23}) \Phi_{0i} \quad (2.35)$$

$$\Psi_{0f} = \delta(\bar{k}'_1 - \bar{k}_1) \delta(\bar{k}'_2 - \bar{k}_2) \delta(\bar{k}'_3 - \bar{k}_3) \Phi_{0f}, \quad (2.36)$$

სადაც ხაზი (-) ვექტორებზე გასმულია იმისთვის, რომ განვასხვაოთ ფიზიკური იმპულსი იმპულსური სივრცის ცვლადისგან.

დრეკადი გაფანტვის არხისთვის საწყისი მდგომარეობის ფუნქცია  $\Psi_{0i}$  ისევ (2.35)-ით გამოისახება, მაგრამ  $\Psi_{0f}$  ფუნქციას ექნება სხვა სახე:

$$\Psi_{0f} = \delta(\bar{k}'_1 - \bar{k}_1) \delta(\bar{K}'_{23} - \bar{K}_{23}) f(\bar{k}'_{23}) \Phi_{0f} \quad (2.37)$$

გადასვლის მატრიცული ელემენტი  $M_{fi}$  ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$M_{fi} = \langle \Psi_{0i} | \bar{k}'_1 \bar{k}'_2 \bar{k}'_3 \rangle \langle \bar{k}_1 \bar{k}_2 \bar{k}_3 | T^{(1)}(z) | \bar{k}_1 \bar{k}_2 \bar{k}_3 \rangle \langle \bar{k}_1 \bar{k}_2 \bar{k}_3 | \Psi_{0f} \rangle \quad (2.38)$$

თუ (1.34), (1.35), (1.36) ჩავსვამთ (1.38)-ში, მაშინ კგრ-ის მატრიცული ელემენტისთვის გვექნება:

$$M_{fi} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \sum_{\alpha\beta\gamma} \delta(\bar{P}'_\gamma - \bar{P}_\gamma) f\{(-1)^\gamma \bar{k}'_\gamma\} (1 - \delta_{\gamma 1}) \langle \bar{k}'_{\alpha\beta} | t_{\alpha\beta} \left( E - \frac{P_\gamma^2}{2\mu_\gamma} - \frac{K^2}{2M} \right) | \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle \quad (2.39)$$

სადაც  $\sum$  არის  $\Phi_{0i}$  და  $\Phi_{0f}$  შინაგანი ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ინტეგრალი,  $E$ -სისტემის სრული ენერგიაა. ეს უკანასკნელი შეიძლება გამოვსახოთ როგორც საწყისი მდგომარეობის კინემატიკური პარამეტრებით:

$$E = E_i = \frac{K^2}{2M} + \frac{P_\gamma^2}{2\mu_\gamma} + \frac{K_{\alpha\beta}^2}{2\mu_{\alpha\beta}} - Q, \quad (2.40)$$

ასევე საბოლოო მდგომარეობის კინემატიკური პარამეტრებით:

$$E = E_f = \frac{K'^2}{2M} + \frac{P_\gamma'^2}{2\mu_\gamma} + \frac{K_{\alpha\beta}'^2}{2\mu_{\alpha\beta}}, \quad (2.41)$$

სადაც  $Q$ - (2,3) სისტემის ბმის ენერგიაა.

კგრ-ის შემთხვევაში საბოლოო მდგომარეობაში გვაქვს სამი თავისუფალი ნაწილაკი, ე.ი. საბოლოო მდგომარეობა დევს ენერგეტიკულ ზედაპირზე. ამიტომ, თუ (2.39)-ში სრული ენერგიის

ნაცვლად ჩავსვავთ (2.41) გამოსახულებას, მაშინ მატრიცული ელემენტისთვის მივიღებთ:

$$M_{fi} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \mathfrak{F} \sum_{\alpha\beta\gamma} \delta(\bar{P}'_{\gamma} - \bar{P}_{\gamma}) f\{(-1)^{\gamma} \bar{k}'_{\gamma}\} \langle \bar{k}'_{\alpha\beta} \left| t_{\alpha\beta} \left( \frac{k_{\alpha\beta}^{/2}}{2\mu_{\alpha\beta}} \right) \right| \bar{k}_{\alpha\beta} \rangle (1 - \delta_{\gamma 1}) \quad (2.42)$$

ლაბორატორიულ ათვლის სისტემაში (2.42)-ს ექნება სახე:

$$M_{fi} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \mathfrak{F} \left\{ f(-\bar{k}'_3) \langle \bar{k}'_{12} \left| t_{12} \left( \frac{k_{12}^{/2}}{2\mu_{12}} \right) \right| \bar{k}_{12} \rangle + f(\bar{k}'_2) \langle \bar{k}'_{31} \left| t_{31} \left( \frac{k_{31}^{/2}}{2\mu_{31}} \right) \right| \bar{k}_{31} \rangle \right\} \quad (2.43)$$

(2.43)-ში პირველი წევრი ზუსტად ემთხვევა (2.21) გამოსახულებას, მაგრამ არ გვექნება (2.20)-ის მსგავსი ალტერნატიული ვარიანტი, რომელიც იმ-ის საზღვრებში სრულიად თანასწორია (2.22) გამოსახულებისა.

(2.43) ფორმულა მიღებულია სამნაწილაკობრივი თეორიის საფუძველზე ერთმნიშვნელოვნად. მასში შემავალი გაფანტვის ორნაწილაკობრივი T-მატრიცები გამოხატავენ იმ-ის ძირითად იდეას, ხოლო მათი მატრიცული ელემენტების ენერგეტიკული ზედაპირიდან გასვლა ხაზს უსვამს განხილული ამოცანის სამნაწილაკობრივ ხასიათს. ამიტომ, (2.22) და (2.23)-სგან განსხვავებით, რომლებიც წარმოადგენენ ფაქტიურად ორნაწილაკობრივ მატრიცულ ელემენტებს, (2.43) ფორმულას ეწოდება სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება (სიმ) [85].

ამრიგად, ფადეევის თეორია საშუალებას გვაძლევს ფორმულირება გავუკეთოთ იმ-ის ახალ, უფრო თანმიმდევრულ სამნაწილაკობრივ ვარიანტს და ცალსახად განვსაზღვროთ შესაბამისი არაენერგეტიკული მატრიცული ელემენტი.

დასასრულს აღვნიშნოთ, რომ სიმ გვაძლევს რეალურ შესაძლებლობას განვაზოგადოთ იმპულსური მიახლოება დაბალი და

საშუალო ენერჯიების არეში, როდესაც პროცესებში მონაწილეობენ რთული ფრაგმენტები.

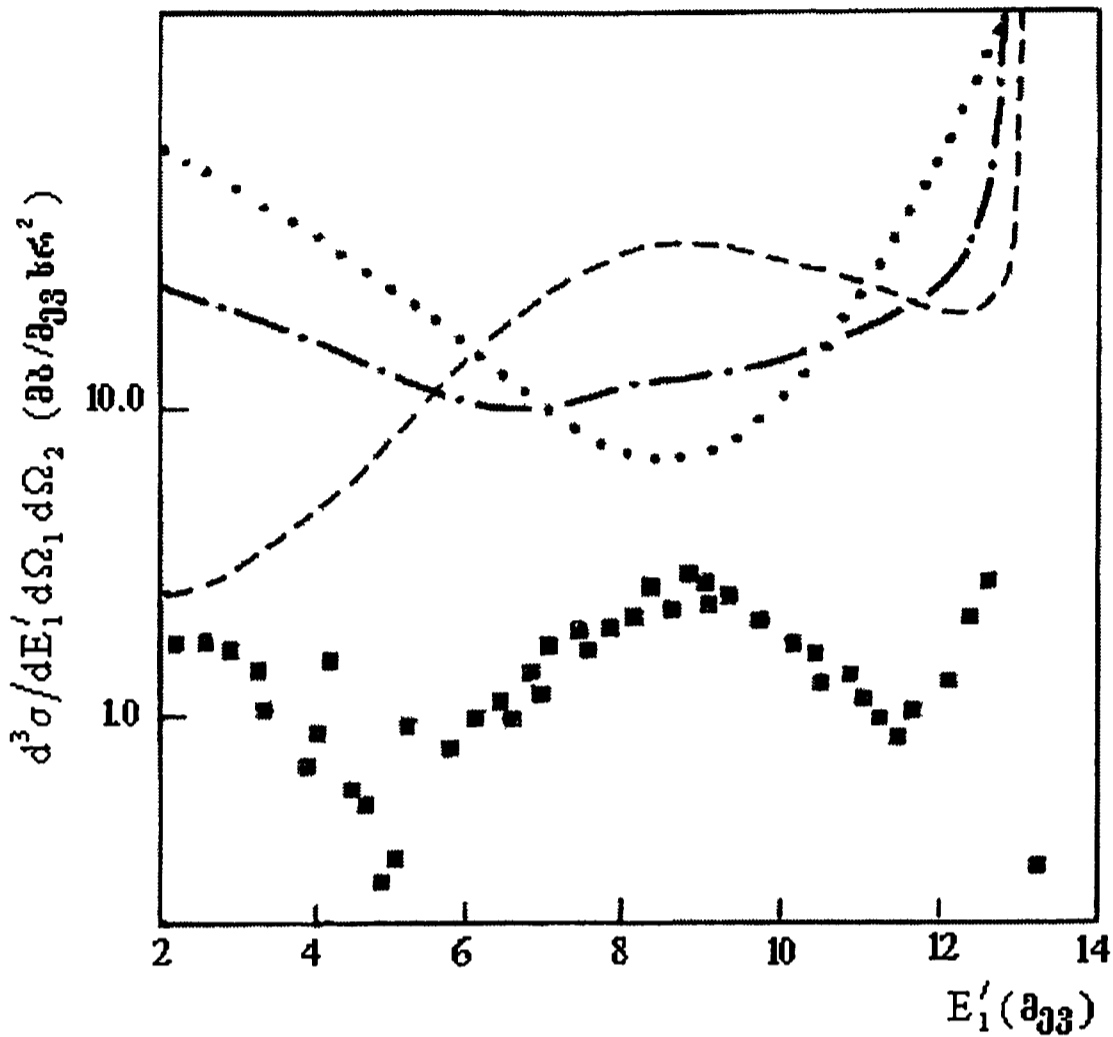
### §2.3 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ჩამოჭრით

მიუხედავად იმისა, რომ სიმ ერთმნიშვნელოვნად გვაძლევს ერთჯერადი დაჯახებების ფორმულირების საშუალებას, კგრ-ისთვის მან ვერ მიგვიყვანა სასურველ შედეგებამდე. ბირთვული ნაწილაკების გაფანტვებისთვის თეორია გვაძლევდა ძალიან დიდ მნიშვნელობას დიფერენციალური კვეთის სიდიდისთვის, ხოლო ელექტრონებით ატომის იონიზაციის დიფერენციალური კვეთები განსხვავდებოდა როგორც სიდიდით, ასევე ფორმითაც.

შესაძლო იყო გვეფიქრა, რომ აუცილებელი იყო გაგვეთვალისწინებინა ნაწილაკთა მრავალჯერადი გაფანტვები, მაგრამ გამოკვლევებმა უჩვენა, რომ მაღალი რიგის გადაფანტვების გათვალისწინება პირიქით აუარესებს თანხმობას თეორიასა და ექსპერიმენტს შორის. ამ მტკიცების საილუსტრაციოდ ნახ.2.1-ზე ნაჩვენებია  $d(p,2p)_n$  რეაქციის სამჯერადი დიფერენციალური კვეთის დამოკიდებულება  $E_1$ -ზე, როცა  $\theta_1 = -\theta_2 = 43^\circ$  და  $E_1 = 20$  მევ. წყვეტილი მრუდი შეესაბამება ფადეევის მწკრივის პირველ იტერაციას, წერტილოვანი მრუდი – მეორე რიგს, წყვეტილი ხაზი წერტილებით – მესამე რიგს. მუქი კვადრატებით აღნიშნულია ექსპერიმენტული მონაცემები.

როგორც ჩანს უნდა არსებობდეს რაღაც საერთო მიზეზი, რომლის აღმოფხვრა მიგვიყვანს კარგ თანხვედრასთან ექსპერიმენტულ და თეორიულ შედეგებს შორის. ასეთ მიზეზად შეიძლება ჩავთვალოთ ის წინააღმდეგობა, რომელსაც შეიცავს ერთჯერადი დაჯახების ყველა სახის ფორმულირება. მართლაც (2.43) მატრიცული ელემენტი შეიცავს (2,3) ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ფურიე-სახეს, რომელიც განსაზღვრული არის ისე, რომ 2 და 3 ნაწილაკი შეიძლება იმყოფებოდეს ერთმანეთთან ნებისმიერ მანძილზე, როცა მათ ეჯახებათ

1 ნაწილაკი. მაგრამ მცირე მანძილებზე ირღვევა ნაწილაკების ერთჯერადი დაჯახების პირობა. ამიტომ უნდა მოვითხოვოთ, რომ



ნახ.2.1

რომელიმე წყვილის დაჯახების მომენტში მესამე ნაწილაკი იმყოფებოდეს „მოვლენიდან“ შორს, წინააღმდეგ შემთხვევაში მცირე მანძილებზე დამჯახებელი ნაწილაკის დე-ბროილის ტალღა გადაფარავს ერთდროულად 2-საც და 3-საც რაც ეწინააღმდეგება ერთჯერადი გაფანტვის მექანიზმს.

ასეთი მოთხოვნის რეალიზება შესაძლებელია ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ჩამოჭრით  $x$ -სივრცეში, ე.ი. ტალღური ფუნქციის  $f(\mathbf{q})$  ფურიე-სახე, რომელიც განსაზღვრულია (2.13) ფორმულით, უნდა შეიცვალოს ჩამოჭრილი  $f(\mathbf{q}, R)$  ფურიე-სახით:  $f(\mathbf{q}) \rightarrow f(\mathbf{q}, R)$ , სადაც

$$f(\mathbf{q}, R) = (2\pi)^{-3/2} \int_R^\infty d\mathbf{r} \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (2.44)$$

მაშინ (2.43) ფორმულა მიიღებს სახეს:

$$M_{f,i} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \mathfrak{F} \left\{ f(-\bar{k}'_3, R_3) < \bar{k}'_{12} \left| t_{12} \left( \frac{k_{12}^2}{2\mu_{12}} \right) \right| \bar{k}_{12} > + f(\bar{k}'_2, R_2) < \bar{k}'_{31} \left| t_{31} \left( \frac{k_{31}^2}{2\mu_{31}} \right) \right| \bar{k}_{31} > \right\} \quad (2.45)$$

(2.45) ფორმულა წარმოადგენს სიმ-ის უფრო თანმიმდევრულ ფორმულირებას და მას ეწოდება სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ჩამოჭრით (სიმჩ). ზღვრულ შემთხვევაში, როდესაც  $R_2$  და  $R_3$  მივასწრაფებთ ნულისკენ, (2.45) ფორმულა გადადის (2.43) ფორმულაში. კოორდინატულ წარმოდგენაში (2.45) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$M_{f,i} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \mathfrak{F} \left\{ \langle \varphi_f | t_{12} | \varphi_{iR} \rangle + \langle \varphi_f | t_{31} | \varphi_{iR} \rangle \right\} \quad (2.45')$$

სადაც  $\varphi_{iR}$  ჩამოჭრილი ტალღური ფუნქციაა კოორდინატულ წარმოდგენაში.

ცნობილია რომ ატომურ დაჯახებებში წარმატებით გამოიყენება ბორნის მიახლოება, როდესაც დამჯახებელი ნაწილაკის ენერგია  $E > 100 \text{ eV}$ , სრულდება ბორნის პირობა, რაც უფლებას გვაძლევს მოვახდინოთ შეცვლა ნიშნავს  $\hat{t} \rightarrow V$ . ამ მიახლოების გათვალისწინებით (2.45') ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$M_{f,i} = \delta(\bar{K}' - \bar{K}) \mathfrak{F} \left\{ \langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle + \langle \varphi_f | V_{31} | \varphi_{iR} \rangle \right\} \quad (2.46)$$

ბირთვის მასასთან შედარებით ელექტონის მასის სიმცირის გამო ცხადია, რომ ატომის იონიზაცია არ შეიძლება იყოს გამოწვეული ელექტრონ-ბირთვის ურთიერთქმედებით. ამიტომ, (2.46) ფორმულაში მეორე წევრი ნულის ტოლი უნდა იყოს. ამის დამტკიცება ადვილად შეიძლება. მართლაც, კარგი სიზუსტით შეიძლება ჩავთვალოთ, რომ ურთიერთქმედების შემდეგ ბირთვი უძრავი რჩება. ამიტომ  $V_{31} = 1/r_1$ , რის გამოც  $\langle \varphi_f | V_{31} | \varphi_{iR} \rangle$  ინტეგრალში ცვლადები განცალკევდება და მივიღებთ ორი ინტეგრალის ნამრავს, რომელთაგან ერთ-ერთი წარმოადგენს საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ინტეგრალს. ტალღური ფუნქციების ორთოგონალობის

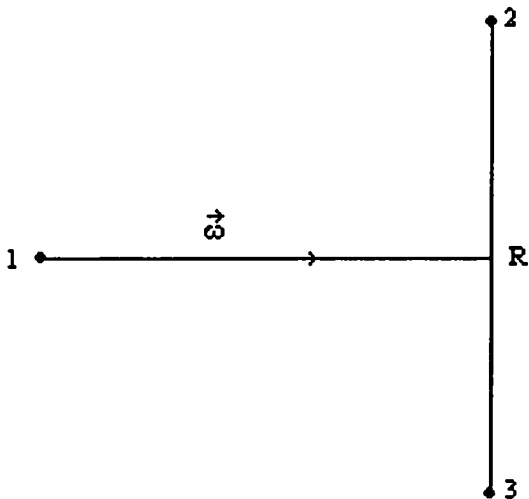
გამო ეს ინტეგრალი ნულის ტოლია. ამის გათვალისწინებით (2.46) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$M_{fi} = \delta(\vec{K}' - \vec{K}) \mathfrak{F} \langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle \quad (2.46')$$

წარმოიშევა კითხვა: როგორ განვსაზღვროთ ჩამოჭრის რადიუსი  $R$ ? ვ.ბალაშოვის და ჯ.მებონიას [86] ნაშრომში  $R$  ჩამოჭრის რადიუსი პირველად იქნა დაკავშირებული სამიზნე ბირთვის რადიუსთან. შემდგომში ანალოგიური პროცედურა ჩატარებულ იქნა სხვა ავტორების მიერ. ყველა ამ შრომაში ჩამოჭრა განიხილებოდა, როგორც დამახინჯების ფაქტორის გათვალისწინების რაღაც ეფექტური საშუალება. მაგრამ მოგვიანებით ჯ.მებონიას შრომებში [73, 87] ჩამოჭრის პროცედურას მიეცა უფრო ცხადი შინაარსი: ის ჩაითვალა როგორც ერთ-ერთი საშუალება, თანმიმდევრულად შეგვესწავლა ერთჯერადი დაჯახებების მექანიზმი. საერთო მოსაზრებიდან გამომდინარეობს, რომ  $R$  დამოკიდებული უნდა იყოს დაჯახების ენერგიაზე. მართლაც, ენერგიის შემცირებით იზრდება დამჯახებელი ნაწილაკის დებროილის ტალღის  $\lambda$  სიგრძე და თუ  $R$  მეტი არ იქნება  $\lambda$ -ზე, ის შეიძლება ერთდროულად „წამოედოს“ ორივე სამიზნე ნაწილაკს. თუ გავითვალისწინებთ  $\lambda$ -ს დამოკიდებულებას ენერგიაზე ( $\lambda \sim E^{-\frac{1}{2}}$ ), ჩამოჭრის რადიუსი უნდა განვსაზღვროთ შემდეგი სახით:

$$R = \frac{C}{|\omega|}, \quad (2.47)$$

სადაც  $C$ -რაღაც მუდმივაა, რომელიც უზრუნველყოფს უტოლობის შესრულებას:  $\lambda \leq R$ ;  $\lambda-1$  და (2,3) ნაწილაკების ფარდობითი მოძრაობის დებროილის ტალღის სიგრძეა.  $\omega$ -ფარდობითი მოძრაობის იმპულსია 1 დამჯახებელი ნაწილაკისა (2,3) სისტემის მასათა ცენტრის მიმართ (ნახ.2.2).



6.2.2

## §2.4 ერთჯერადი იონიზაციის სრული დიფერენციალური განივკვეთი

გაფანტვის ამოცანის თანახმად, ელექტრონებით ატომების ერთჯერადი იონიზაციის სრული დიფერენციალური განივკვეთი მოიცემა ფორმულით

$$d\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_1} |M_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \delta(\vec{K}_f - \vec{K}_i) dk'_1 dk'_2 dk'_3 \quad (2.48)$$

სადაც  $\vec{k}_1, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2$  შესაბამისად დაცემული, გაფანტული და ამოტყორცნილი ელექტრონების ტალღური ვექტორებია,  $\vec{k}'_3$  – იონიზაციის შედეგად წარმოქმნილი, ანუ ე.წ. ნარჩენი იონის ტალღური ვექტორია,  $E_i, \vec{K}_i$  და  $E_f, \vec{K}_f$  დამჯახებელი სისტემის ენერგია და იმპულსია შესაბამისად საწყის და საბოლოო მდგომარეობაში, ხოლო  $M_{fi}$  გადასვლის მატრიცული ელემენტია, რომელიც შემდეგნაირად გამოისახება :

$$M_{fi} = \int \Psi_f^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{12} \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.49)$$

აქ  $\Psi_i$  და  $\Psi_f$  სისტემის ასიმპტოტური ტალღური ფუნქციებია საწყის და საბოლოო მდგომარეობაში, ხოლო  $V_{12}$  აღწერს ურთიერთქმედებას დამჯახებელ ელექტრონსა და სამიზნეს შორის:

$$V = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (2.50)$$

$\vec{r}_1, \vec{r}_2$  – შესაბამისად დაცემული და ბმული ელექტრონების რადიუს-ვექტორებია.

ერთჯერადი იონიზაციის ექსპერიმენტებში, როგორც წესი ახდენენ გაბნეული და სამიზნიდან ამოტყორცნილი ელექტრონების დეტექტირებას (იონიზაციის შედეგად წარმოქმნილი იონის ენერგია და იმპულსი განისაზღვრება შენახვის კანონებიდან). თეორიული შედე-

გების ექსპერიმენტულ მონაცემებთან თანხვედრის მიზნით (2.48)-ში ჩავატაროთ ინტეგრება  $\bar{k}'_3$ -ით. ინტეგრების შედეგად მივიღებთ

$$d\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_1} |M_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) k_1^2 k_1'^2 k_2'^2 dk_1' dk_2' d\Omega_1 d\Omega_2, \quad (2.51)$$

აქ  $k_1', k_2'$  გაფნტული და სამიზნიდან ამოტყორცნილი ელექტრონების ტალღური ვექტორების მოდულებია, ხოლო  $\Omega_1, \Omega_2$  ამ ტალღური ვექტორების შესაბამისი სხეულოვანი კუთხეებია.

დიფერენციალური განიკვეთის (2.51) ფორმულაში დირაკის დელტა ფუნქცია უზრუნველყოფს დამჯახებელი სისტემის სრული ენერგიის შენახვას, რომლის თანახმადაც

$$\frac{k_1^2}{2} - Q = \frac{k_1'^2}{2} + \frac{k_2'^2}{2} + \frac{k_3'^2}{2m_3}, \quad (2.52)$$

აქ  $Q$  – ელექტრონების ბმის ენერგიაა სამიზნეში, ხოლო  $m_3$  – ნარჩენი იონის მასაა.

ვინაიდან იონის მასა მნიშვნელოვნად აღემატება ელექტრონის მასას, (2.52) ფორმულაში ბოლო წევრი დანარჩენ წევრებზე გაცილებით მცირეა. ამიტომ, კარგ მიახლოებაში, იგი შეიძლება უგულებელვყოთ. ამრიგად, თუ არ გავითვალისწინებთ ნარჩენი იონის უკუცემის ენერგიას, ენერგიის შენახვის კანონი მიიღებს სახეს:

$$\frac{k_1^2}{2} - Q = \frac{k_1'^2}{2} + \frac{k_2'^2}{2}, \quad (2.53)$$

თუ ახლა გამოვიყენებთ თანაფარდობას  $k^2 dk = kd(k^2/2)$  და (2.51) ფორმულაში ჩავატარებთ ინტეგრებას  $k_1'$ -ით ორჯერადი იონიზაციის სრული დიფერენციალური განიკვეთისათვის საბოლოოდ შეიძლება დავწეროთ

$$\frac{d\sigma}{dE_2' d\Omega_1 d\Omega_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1' k_2'}{k_1} |M_{fi}|^2, \quad (2.54)$$

მიღებულ გამოსახულებაში  $k_1'$  განისაზღვრება ენერგიის შენახვის (2.53)

ფორმულით.

როგორც (2.54) ფორმულიდან ჩანს მიღებული გამოსახულება წარმოადგენს ხუთჯერად დიფერენციალურ განიკვეთს. იგი საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ მეორადი ელექტრონების როგორც ენერგეტიკული, ისე სივრცული განაწილება. მეორეს მხრივ, ერთჯერადი იონიზაციის აღმწერი თანამედროვე ექსპერიმენტები ტარდება კომპლანარულ კინემატიკაში, რაც ნიშნავს, რომ ყველა მეორადი ელექტრონის დეტექტირება ხდება ერთ სიბრტყეში (როგორც წესი ასეთ სიბრტყედ იღებენ  $\bar{k}'_1$  და  $\bar{k}'_0$  ვექტორებზე გამავალ სიბრტყეს).

კომპლანარულ კინემატიკაში (2.54) წარმოადგენს სამჯერად დიფერენციალურ განიკვეთს, ვინაიდან ამ შემთხვევაში ფიქსირებულია გაფანტული და ამოტყორცნილი ელექტრონების აზიმუტალური კუთხეები  $\varphi_1$  და  $\varphi_2$ , ქვემოთ ჩვენ სრული დიფერენციალური განიკვეთისათვის მივიღებთ ზოგად ფორმულებს, ხოლო რიცხვით გამოთვლებს ჩავატარებთ კომპლანარულ კინემატიკაში.

### თავი III. ასიმპტოტური ტალღური ფუნქციები.

#### § 3.1 საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ტალღური ფუნქციები.

(e, 2e) პროცესების აღწერისას მნიშვნელოვანია საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ტალღური ფუნქციების სწორად ჩაწერა, რადგანაც აღმოჩნდა, რომ მეტწილად მათზეა დამოკიდებული რამდენად ზუსტი იქნება მიღებული დიფერენციალური განიკვეთი. მათი სწორი სახით პოვნა კი სიძნელეს წარმოადგენს კულონური ძალის შორსქმედი ხასიათის გამო, რაც პრობლემას არ წარმოადგენს ბირთვული ურთიერთქმედების შემთხვევაში. ბირთვული ურთიერთქმედების ახლოქმედების გამო ასიმპტოტური ტალღური ფუნქციები კონტინუუმში საკმაოდ კარგი სიზუსტით აღიწერებოდა ბრტყელი ტალღებით.

როდესაც დამჯახებელი ელექტრონების სიჩქარე დიდია, სამიზნე ატომის ველში მისი ასიმპტოტური ფუნქციის დამახინჯების ეფექტი უმნიშვნელოდ შეიძლება ჩავთვალოთ და კარგ მიახლოებაში უგულვებელვყოთ. მათემატიკურად ეს ნიშნავს სამიზნეზე დაცემული ელექტრონები აღვწეროთ ბრტყელი ტალღით.

აღნიშნულ მიახლოებაში დირაკის დელტა ფუნქციაზე ნორმირებული საწყისი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია მძიმე იონის მიახლოებაში ჩაიწერება ასე:

$$\psi_i = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_1\vec{r}_1) \varphi_i(\vec{r}_2) \sqrt{n} \phi_i(\vec{r}_3), \quad (3.1)$$

$\vec{k}_1$  და  $\vec{r}_1$  - დამჯახებელი ელექტრონის ტალღური ვექტორი და რადიუსვექტორია,  $\varphi_i(\vec{r}_2)$  - ატომში ბმული სამიზნე ელექტრონის ტალღური ფუნქციაა;  $\phi_i(\vec{r}_3)$  - ნარჩენი იონის შინაგანი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა,  $n$  - იმ ქვეგარსის ელექტრონთა რაოდენობაა, საიდანაც ხდება ერთ-ერთი მათგანის ამოგდება, ანუ საწყისი ატომის ელექტრონ-ნარჩენ იონად წარმოდგენის შესაძლო რაოდენობაა.

თუ კი დამჯახებელი ელექტრონი თავისი ენერჯის მცირე ნაწილს გადასცემს სამიზნიდან ამოტყორცნილ ელექტრონს, მაშინ იგი დაჯახების შემდეგაც შეიძლება ჩაითვალოს სწრაფ ნაწილაკად. ამ შემთხვევაში, ისევე როგორც საწყის მდგომარეობაში, გაბნეული ელექტრონი შეიძლება აღიწეროს ბრტყელი ტალღით.

აღნიშნულ მიახლოებაში დირაკის დელტა ფუნქციაზე ნორმირებული და საწყისი მდგომარეობის  $\phi_i(\vec{r}_2)$  ფუნქციის მიმართ ორთოგონალური საბოლოო მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია ჩაიწერება ასე:

$$\psi_f = \hat{A}(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}'_1 \vec{r}_1) \phi_f(\vec{r}_2) \phi_f(\vec{r}_3) \quad (3.2)$$

აქ  $\vec{k}'_1$  – გაბნეული ელექტრონის ტალღური ვექტორია,  $\phi_f(\vec{r}_2)$  სამიზნიდან ამოტყორცნილი ელექტრონის მდგომარეობის აღმწერი ტალღური ფუნქციაა;  $\phi_f(\vec{r}_3)$  – ნარჩენი იონის შინაგანი მდგომარეობის ფუნქციაა საბოლოო მდგომარეობაში;  $\hat{A}$  იგივეურ ნაწილაკთა გადასმის ანუ ანტისიმეტრიზაციის ოპერატორია. ზემოხსენებულ კინემატიკაში  $\phi_f(\vec{r}_2)$  ფუნქციად კარგ მიახლოებაში შეიძლება განვიხილოთ უწყვეტი სპექტრის კულონური ფუნქცია (ელექტრონი ნარჩენი იონის ველში) [30]. მათი გამოყენება ართულებს მატრიცული ელემენტის გამოთვლას, ამიტომ ჩვენ პირველ შრომებში [77] სიმჩ მეთოდის ეფექტურობის შესაფასებლად აქაც ბრტყელი ტალღა ავიღეთ. შემდგომ გამოთვლებში კი იგი კულონური ფუნქციებით შევცვალებთ (შედგები და შედარებები მოყვანილია §4.3-ში). კულონური ფუნქციების გამოყენების შეთხვევაში  $\phi_f(\vec{r}_2)$  და  $\phi_i(\vec{r}_2)$  ორთოგონალური ფუნქციებია და მათ ხელოვნურად ორთოგონალიზაცია არ სჭირდებათ, რადგანაც ისინი სამიზნის ჰამილტონიანის საკუთარ ფუნქციებს წარმოადგენენ.

ბრტყელი ტალღის გამოყენების შემთხვევაში  $\phi_f(r_2)$  ხელოვნურ ორთოგონალიზაციას საჭიროებს:

$$\varphi_f(r_2) = \chi_f(\vec{r}_2) - \langle \varphi_i | \chi_f \rangle \varphi_i(\vec{r}_2) \quad (3.3)$$

აქ  $\langle \varphi_i | \chi_f \rangle$  სამიზნის და ამოგდებული ელექტრონის ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ინტეგრალია. ორთოგონალიზაციის ეს მეთოდი შმიდტის სახელით არის ცნობილი. იგი არ გამოდგება ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ჩამოჭრის შემთხვევაში და ამიტომ საჭიროა მისი შემდგენიანი მოდიფიკაცია:

$$\varphi_{fR}(r_2) = \chi_f(\vec{r}_2) - \frac{\langle \varphi_{iR} | \chi_f \rangle}{\langle \varphi_{iR} | \varphi_i \rangle} \varphi_i(\vec{r}_2) \quad (3.4)$$

ასეთი ორთოგონალიზაციით მივიღებთ საძიებელ  $\varphi_{fR}(\vec{r}_2)$  ფუნქციას, რომელიც ნებისმიერი  $R$  პარამეტრისთვის იქნება  $\varphi_i(\vec{r}_2)$  ორთოგონალური. (3.4)-დან ჩანს თუ  $R \rightarrow 0$  მივიღებთ შმიდტის ორთოგონალიზაციის მეთოდით მიღებულ (3.3) ფორმულას. (3.4)-ის გასამარტივებლად შემოვიტანოთ აღნიშვნა:

$$\frac{\langle \varphi_{iR} | \chi_f \rangle}{\langle \varphi_{iR} | \varphi_i \rangle} \equiv J \quad (3.4')$$

მაშინ (3.4) შემდგენიარად ჩაიწერება:

$$\varphi_{fR}(r_2) = \chi_f(\vec{r}_2) - J\varphi_i(\vec{r}_2) \quad (3.4'')$$

### § 3.2 ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციები.

რამდენიმე ელექტრონიანი ატომური სისტემების ტალღური ფუნქციების მიღების ყველაზე ეფექტურ და გავრცელებულ მეთოდს წარმოადგენს ვარიაციული მეთოდი. ჩვენ აქ გამოვიყენებთ ჰილერაასის მიერ ჰელიუმის ატომისათვის დამუშავებულ მეთოდს [88-92], რომელიც წარმოადგენს რიტცის ვარიაციული მეთოდისა [30] და კოორდინატთა მასშტაბირების მეთოდის [91] კომბინაციას. მოკლედ განვიხილოთ ჰილერაასის მეთოდის ძირითადი მომენტები.

ვარიაციული მეთოდის გამოყენება იწყება საცდელი ტალღური ფუნქციის ანალიზური სახის შერჩევით. შერჩეული ტალღური ფუნქცია უნდა პასუხობდეს გამოსაკვლევი სისტემის ფიზიკურ რაობას და შეიცავდეს გარკვეული რაოდენობის პარამეტრებს  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  რომლებიც თავდაპირველად უცნობია და შემდგომ გამოითვლება ენერგიის ფუნქციონალის მნიშვნელობებში

$$E(\alpha, \beta, \gamma, \dots) = \frac{\int \Psi^*(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \hat{H} \Psi(\alpha, \beta, \gamma, \dots) d\tau}{\int \Psi^*(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \Psi(\alpha, \beta, \gamma, \dots) d\tau} \quad (3.5)$$

$\alpha, \beta, \gamma, \dots$  პარამეტრების ოპტიმალური კრებულისთვის განისაზღვრება  $E(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$ -ს მინიმალური მნიშვნელობა.

ფორმულა (3.5)-ში  $\hat{H}$  გამოსაკვლევი სისტემის ჰამილტონიანია, რომელსაც ჰელიუმის ატომისა და ჰელიუმისმაგვარი იონებისათვის აქვს სახე:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 + V \quad (3.6)$$

სადაც

$$V = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (3.7)$$

ელექტრონების  $Z=2,3,4,\dots$  მუხტის მქონე ბირთვთან და ერთმანეთთან ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერჯიის ოპერატორია.

ნაწილობითი ინტეგრაციის გამოყენებით ადვილად შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ ადგილი აქვს შემდეგ დამოკიდებულებას

$$\int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau = \int L d\tau, \quad (3.8)$$

სადაც

$$L = \frac{1}{2} [(\nabla_1 \Psi^*)(\nabla_1 \Psi) + (\nabla_2 \Psi^*)(\nabla_2 \Psi)] + V \Psi^* \Psi. \quad (3.9)$$

მიღებული ფორმულის გათვალისწინებით ენერჯიის ფუნქციონალის (3.5) გამოსახულება შეიძლება ასე გადაიწეროს

$$E(\alpha, \beta, \gamma, \dots) = \frac{\int L(\alpha, \beta, \gamma, \dots) d\tau}{\int \Psi^*(\alpha, \beta, \gamma, \dots) \Psi(\alpha, \beta, \gamma, \dots) d\tau}. \quad (3.10)$$

შემოვიტანოთ კოორდინატები:

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_2 - r_1, \quad u = r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|, \quad (3.11)$$

რომელთაც ხშირად ჰილერაასის კოორდინატებსაც უწოდებენ.

ახალი კოორდინატების შემოტანის შემდეგ  $L$  უნდა ჩაიწეროს ამ კოორდინატებში. პოტენციალური ენერჯიის ოპერატორს  $s, t, u$  ცვლადებში აქვს სახე:

$$V = -4Z \frac{s}{s^2 - t^2} + \frac{1}{u} \quad (3.12)$$

ენერჯიის კინეტიკური მდგენელის გარდასაქმნელად  $L$ -ში, გამოვსახოთ იგი თავდაპირველად  $r_1, r_2, r_{12}$  ცვლადების საშუალებით. ამისათვის საჭიროა განვსაზღვროთ  $\nabla_1 \Psi$ -ის კომპონენტები. მივიღებთ

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_1} = \frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \frac{\partial r_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} \frac{\partial r_{12}}{\partial x_1} = \frac{x_1}{r_1} \frac{\partial \Psi}{\partial r_1} + \frac{x_1 - x_2}{r_{12}} \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} \quad (3.13)$$

და კიდევ ორ მსგავს გამოსახულებას  $\partial \Psi / \partial y_1$ -სა და  $\partial \Psi / \partial z_1$ -თვის. ამრიგად, გვექნება

$$(\nabla_1 \Psi)^2 = \left( \frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} \right)^2 + \frac{r_{12}^2 + r_1^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}}. \quad (3.14)$$

სრულიად ანალოგიურად მივიღებთ:

$$(\nabla_2 \Psi)^2 = \left( \frac{\partial \Psi}{\partial r_2} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} \right)^2 + \frac{r_{12}^2 + r_2^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial \Psi}{\partial r_2} \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}}. \quad (3.15)$$

ვინაიდან ძირითადი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია  $\Psi$  ნამდვილია,  $L$ -ის კინეტიკური მდგენელისათვის გვექნება:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\nabla_1 \Psi)^2 + \frac{1}{2}(\nabla_2 \Psi)^2 &= \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{r_{12}^2 + r_1^2 - r_2^2}{r_1 r_{12}} \frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} + \frac{1}{2} \frac{r_{12}^2 + r_2^2 - r_1^2}{r_2 r_{12}} \frac{\partial \Psi}{\partial r_2} \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

თუ მხედველობაში მივიღებთ ჰილერაასის კოორდინატების (3.11) განსაზღვრას მივიღებთ, რომ

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r_1} = \frac{\partial \Psi}{\partial s} - \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial r_2} = \frac{\partial \Psi}{\partial s} - \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} = \frac{\partial \Psi}{\partial u}. \quad (3.17)$$

ამ თანაფარდობების გამოყენებით (3.16) შეიძლება ასე გადაიწეროს:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\nabla_1 \Psi)^2 + \frac{1}{2}(\nabla_2 \Psi)^2 &= \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 + \\ &+ \frac{2}{u(s^2 - t^2)} \frac{\partial \Psi}{\partial u} \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right]. \end{aligned} \quad (3.18)$$

საბოლოოდ,  $L$ -ი  $s, t, u$  ცვლადებში მიიღებს სახეს:

$$\begin{aligned} L &= \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 + \frac{2}{u(s^2 - t^2)} \frac{\partial \Psi}{\partial u} \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + \right. \\ &\left. + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - \left( 4Z \frac{s}{s^2 - t^2} + \frac{1}{u} \right) \Psi^2. \end{aligned} \quad (3.19)$$

ამრიგად, ჩვენ  $L$  ჩავწერეთ ჰილერაასის კოორდინატებში. ახლა საჭიროა, მოცულობის ელემენტი  $d\tau$  წარმოვადგინოთ იმავე კოორდინატებში. თუ სათავედ ავიღებთ ბირთვის და ორივე ელექტრონისათვის

შემოვიტანო სფერულ კოორდინატებს  $r_1, \theta_1, \varphi_1$  და შესაბამისად  $r_2, \theta_2, \varphi_2$  მოცულობის ელემენტისათვის შეიძლება დავწეროთ:

$$d\tau = r_1^2 dr_1 \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 r_2^2 dr_2 \sin \theta_2 d\theta_2 d\varphi_2 . \quad (3.20)$$

აქ კუთხეები განსაზღვრულია შემდეგნაირად:  $\theta_1, \varphi_1$  – უძრავი ღერძის მიმართ, ხოლო  $\theta_2, \varphi_2$  – პირველი ელექტრონის მოძრავი რადიუსვექტორის  $\vec{r}_1$ -ის მიმართ.

კუთხე  $\vec{r}_1$  და  $\vec{r}_2$  რადიუსვექტორებს შორის არის  $\theta_2$  ამიტომ შეიძლება, დავწეროთ:

$$r_1 r_2 \cos \theta_2 = \frac{1}{2}(r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2). \quad (3.21)$$

ახლა, თუ  $\vec{r}_1$  და  $\vec{r}_2$ -ს ჩავთვლით მუდმივებად და მიღებულ გამოსახულებებს გავადიფერენციალებთ  $\theta_2$  კუთხით, ვიპოვით, რომ

$$r_1 r_2 \sin \theta_2 = r_{12} dr_{12}. \quad (3.22)$$

ამ უკანასკნელის ჩასმით (3.20) ფორმულაში მოცულობის ელემენტისათვის მივიღებთ:

$$d\tau = r_1 r_2 r_{12} dr_1 dr_2 dr_{12} \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1 d\varphi_2 . \quad (3.23)$$

აქ  $r_1, r_2$  და  $r_{12}$  განსაზღვრავენ სამკუთხედის ფორმას, რომლის გვერდებია  $r_1, r_2, r_{12}$ , ხოლო კუთხეები  $\theta_1, \varphi_1$  და  $\varphi_2$  განსაზღვრავენ ამ სამკუთხედის მდებარეობას სივრცეში.

ძირითადი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია  $\Psi$  დამოკიდებული არ არის კუთხეებზე. ეს ფაქტი საშუალებას გვაძლევს ჩავატაროთ ინტეგრება კუთხეების მიხედვით (3.23)-ში, რის შედეგადაც მივიღებთ:

$$d\tau = 8\pi^2 r_1 r_2 r_{12} dr_1 dr_2 dr_{12} \quad (3.24)$$

აქედან (3.11) თანაფარდობის გათვალისწინებით მოცულობის ელემენტისათვის  $s, t, u$  კოორდინატთა სისტემაში საბოლოოდ მივიღებთ:

$$d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u \begin{vmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial s} & \frac{\partial r_2}{\partial s} \\ \frac{\partial r_1}{\partial t} & \frac{\partial r_2}{\partial t} \end{vmatrix} ds dt du = \pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du. \quad (3.25)$$

ინტეგრალი  $f(s, t, u)$  ფუნქციიდან კონფიგურაციულ სივრცეში ჩაიწერება ასე:

$$\int f(s, t, u) d\tau = \pi^2 \int_0^\infty ds \int_0^s u du \int_{-u}^u f(s, t, u) (s^2 - t^2) dt. \quad (3.26)$$

ახლა ჩვენს ხელთ არის ყველა ფორმულა, რომელიც აუცილებელია ჰილერაასის კოორდინატთა სისტემაში ინტეგრების ჩასატარებლად.

ჩავთვალოთ, რომ  $\Psi$  ტალღური ფუნქცია არ არის ნორმირებული. მაშინ ენერჯიის ფუნქციონალისათვის (3.10) გამოსახულების გათვალისწინებით, მივიღებთ

$$E = \frac{1}{W} \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u \left\{ s(u^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + 2 \frac{\partial \Psi}{\partial u} \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - [4Zsu - s^2 + t^2] \Psi^2 \right\} dt, \quad (3.27)$$

$$W = \int_0^\infty ds \int_0^s u du \int_0^u (s^2 - t^2) \Psi^2 dt \quad (3.28)$$

შევნიშნოთ, რომ (3.27) და (3.28)-ში ინტეგრება  $t$ -თი ტარდება 0-დან  $u$ -მდე. ეს განპირობებულია იმით, რომ როგორც  $L$ , ისე  $\Psi$   $t$ -ს მიმართ სიმეტრიული ფუნქციებია ( $L$ -ის სიმეტრია ჩანს (3.19) ფორმულიდან,  $\Psi$ -ს სიმეტრია გამომდინარეობს იმ ფაქტიდან, რომ ძირითადი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია სიმეტრიულია ელექტრონების ურთიერთგადასმის მიმართ.)

ჰელიუმის ატომისა და ჰელიუმისმაგვარი იონების ძირითადი მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციას ჰილერაასი ეძებს შემდეგი სახით:

$$\Psi(s, t, u) = e^{-\alpha s} F(s, t, u) \quad (3.29)$$

აქ  $F(s, t, u)$  პოლინომია, რომელიც შეიძლება შეიცავდეს  $s$  და  $u$  ცვლა-

დების ნებისმიერ, ხოლო  $t$ -ს მხოლოდ ლუწ ხარისხებს (ზემოთ აღნიშნული სიმეტრიის გამო).

ჰილერაასის მიხედვით  $F(s,t,u)$  პოლინომისათვის მიზანშეწონილია ავიღოთ შემდეგი გამოსახულება:

$$F(s,t,u) = \sum_{n,l,m=0}^{\infty} C_{n,2l,m} (r_1 + r_2)^n (r_2 - r_1)^{2l} r_{12}^m = \quad (3.30)$$

$$= 1 + c_1 u + c_2 t^2 + c_3 s + c_4 s^2 + c_5 u^2 + c_6 s u + c_7 t^2 u + \dots$$

წევრების თანმიმდევრობა (16)-ში შეესაბამება მათი მნიშვნელობის ხარისხს, ვარიაციული პარამეტრები  $c_1, c_2, c_3, \dots$  რომლებიც თავდაპირველად უცნობია, განისაზღვრება ენერჯის მინიმუმის პირობიდან.

ამ მეთოდის საშუალებით ჰილერაასმა განსაზღვრა ჰელიუმის ატომის ძირითადი მდგომარეობის ტალღური ფუნქცია და ენერჯია. უკვე რვა ვარიაციულ პარამეტრიანი საცდელი ტალღური ფუნქციის გამოყენებით მან მიიღო ენერჯის მნიშვნელობა, რომელიც სრულ თანხვედრაშია სპექტროსკოპული გაზომვების მონაცემებთან [93].

გამოვიყენოთ ჰილერაასის მეთოდი და გავაანალიზოთ (3.29) ტიპის საცდელი ფუნქციების გამოყენების შესაძლებლობა ჰელიუმისმაგვარი იონების ( $Li^+, Be^{2+}, B^{3+}, \dots, Ne^{8+}$ ) ძირითადი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციების მისაღებად. უფრო კონკრეტულად, (3.29) ტიპის ტალღური ფუნქციებიდან შევარჩიოთ შედარებით მარტივი სახის ტალღური ფუნქციები (დამოკიდებული მხოლოდ ერთ ვარიაციულ პარამეტრზე), რომლებიც მიუხედავად სიმარტივისა კარგად აღწერენ ელექტრონების მოძრაობის ძირითად კანონზომიერებებს ჰელიუმისმაგვარ იონებში.

აქვე აღვნიშნოთ, რომ ჩვენ ენერჯის  $E(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$  ფუნქციონალის მინიმიზაციას ჩავატარებთ “გადარჩევის” მეთოდით. ამ მეთოდის არსი მდგომარეობს შემდეგში: (3.5) ფორმულით ჯერ განისაზღვრება  $E(\alpha, \beta, \gamma, \dots)$  ფუნქციონალის ანალიზური სახე, შემდეგ თანმიმდევრულად რიცხვობრივად გამოითვლება ფუნქციონალის სიდიდეები

$\alpha, \beta, \gamma$  პარამეტრების სხვადასხვა მნიშვნელობისათვის და შეიძლება პარამეტრების ის მნიშვნელობა, რომლისთვისაც ფუნქციონალი მინიმალურია.

უმარტივეს ერთპარამეტრიან საცდელ ტალღურ ფუნქციას, რომელიც აიგება წყალბადისმაგვარი ტალღური ფუნქციების გამოყენებით, აქვს სახე

$$\Psi_1 = Ce^{-\alpha(r_1+r_2)}. \quad (3.31)$$

აქ  $C$  – მუდმივაა, რომელიც განისაზღვრება ნორმირების პირობიდან და ტოლია  $\alpha^3/\pi$ . ნორმირებული ტალღური ფუნქცია ჩაიწერება შემდეგნაირად:

$$\Psi_1 = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad (3.32)$$

$\Psi_1$  ტალღურ ფუნქციას შეესაბამება (3.30) მწკრივში მხოლოდ პირველი წევრის არსებობა.

ენერგიის მინიმუმის პირობიდან ვპოულობთ, რომ

$$\alpha = Z - 5/16 \quad (3.33)$$

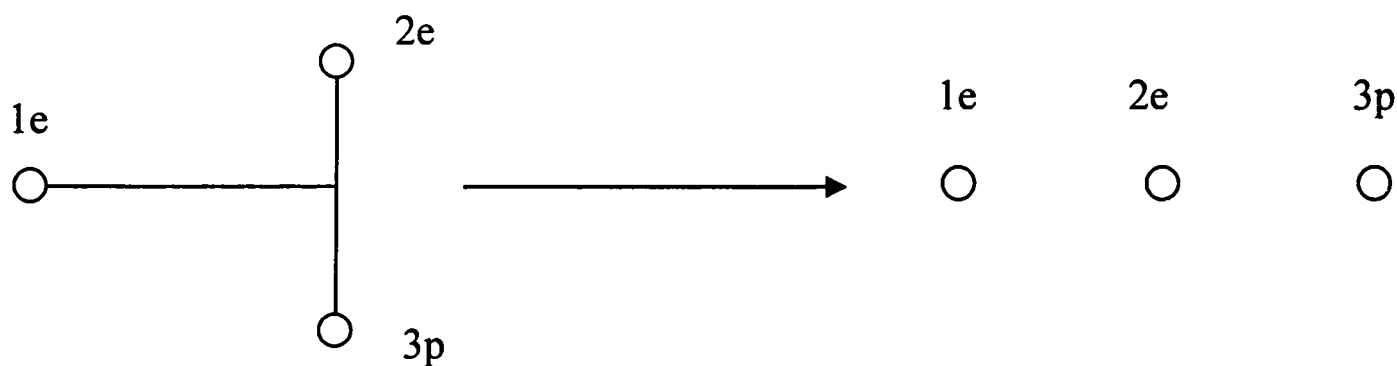
და  $E = -(Z - 5/16)^2$  (ავლნიშნოთ, რომ მხოლოდ (3.31) ტალღური ფუნქციის შემთხვევაშია შესაძლებელი ვარიაციული პარამეტრებისა და ენერგიისათვის ზოგადი სახის ანალიზური გამოსახულების მიღება). ამრიგად, წყალბადისმაგვარი საცდელი ტალღური ფუნქციები იძლევიან ენერგიის საუკეთესო მნიშვნელობას, როდესაც  $Z$  იცვლება  $Z - 5/16$ -ით, რაც იმას ნიშნავს, რომ ყოველი ელექტრონი მოძრაობს მეორე ელექტრონის მიერ ეკრანირებულ ბირთვის ველში.

## თავი IV. მცირეელექტრონიანი ატომების იონიზაციის სრული დიფერენციალური განიკვეთები.

### § 4.1 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ბრტყელი ტალღების გამოყენებით.

წინა თავებში აღწერილი იყო ზოგადად ის თეორია, რომელიც გამოვიყენეთ მცირეელექტრონიანი ატომური სისტემების იონიზაციის პროცესის შესასწავლად. ამ თავში ჩვენ მოვიყვანთ დეტალურ თეორიულ გამოთვლებს და გავანალიზებთ მიღებულ შედეგებს. როგორც ავღნიშნეთ ჩვენი მიზანი იყო დაგვედგინა, თუ რამდენად ეფექტურია სიმჩ მეთოდის გამოყენება ატომური დაჯახებების კვლევისას. პირველ შრომებში [78, 94] ამ მეთოდის გამოყენებით დათვლილი იყო  $H(e,2e)H^+$  და  $He(e,2e)He^+$  რეაქციების დიფერენციალური განიკვეთები, სადაც გამოთვლების გასამარტივებლედ ასიმპტოტურ ტალღურ ფუნქციებად გამოყენებული იყო ბრტყელი ტალღები.

ჯერ განვიხილოთ  $H(e,2e)H^+$  რეაქცია და შემდეგ განვაზოგადოთ იგი He-ისთვის. ელექტრონებისთვის შემოვიტანოთ აღნიშვნები 1 და 2 ხოლო წყალბადის ბირთვი ავღნიშნოთ 3-ით (ნახ4 .1).



ნახ 4.1

ექსპერიმენტებში, რომლებსაც შევადარეთ მიღებული შედეგები, გამოთვლილია სამჯერადი დიფერენციალური განიკვეთები კომპლანარულ გეომეტრიაში, დაფიქსირებულია დამჯახებლის და

ამოტყორცნილი ელექტრონის ენერგიები  $E_1$  და  $E_2$ , გაფანტული ელექტრონის კუთხე  $\theta_1$  და აგებულია ამოტყორცნილი ელექტრონის კუთხური განაწილების მრუდები. დარჩენილი კინემატიკური სიდიდეების მისაღებად საჭიროა გამოვიყენოთ ენერგია-იმპულსის შენახვის კანონები:

$$E_1 + Q = E'_1 + E'_2 + E'_3 \quad (4.1)$$

$$\vec{k}_1 = \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 + \vec{k}'_3 \quad (4.2)$$

აქ  $E_0(\vec{k}_0)$  შესაბამისად დამჯახებელი ელექტრონის ენერგია და იმპულსია,  $E'_1(\vec{k}'_1)$  – გაფანტული ელექტრონის,  $E'_2(\vec{k}'_2)$  ამოტყორცნილი ელექტრონის, ხოლო  $E'_3(\vec{k}'_3)$  კი დარჩენილი იონის ( იმ შემთხვევაში  $H^+$ ). ელექტრონის და პროტონის მასების შეფარდების სიზუსტით ენერგია  $E'_3$  შეიგვიძლია უგულვებელყოთ. ამიტომ ენერგიას  $E'_1$  და შესაბამისად მის იმპულსის მოდულს მარტივად ვპოულობთ:

$$E'_1 = E'_2 - E_1 - Q \quad (4.2')$$

$$k'_1 = \sqrt{2(E'_2 - E_1 - Q)} \quad (4.2'')$$

ნარჩენი იონის იმპულსის მოდული კი შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$k'_3 = \sqrt{k_1'^2 + k_2'^2 + k_1^2 + 2k_1'k_2' \cos(\theta_1 - \theta_2) - 2k_1k_1' \cos(\theta_1) - 2k_1k_2' \cos(\theta_2)} \quad (4.3)$$

ხოლო კუთხე რომელსაც იგი ადგენს დამჯახებელი ელექტრონის მოძრაობის მიმართულებასთან:

$$\theta_3 = \arccos\left(\frac{k_1^2 - k_1k_1' \cos(\theta_1) - k_1k_2' \cos(\theta_2)}{k_1k_3}\right) \quad (4.4)$$

ამ შემთხვევაში შეიძლება ჩაითვალოს, რომ ლაბორატორიული და მასათა ცენტრის სისტემები ფაქტიურად ერთმანეთს ემთხვევა. ექსპერიმენტებში არ ხდება რეაქციაში მონაწილე ნაწილაკთა

სპინების მიმართულებების რეგისტრირება, ამიტომ (2.54) სამჯერადი დიფერენციალური განიკვეთი მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\frac{d\sigma}{dE'_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = (2\pi)^4 \frac{k'_1 k'_2}{k_1} \overline{|M_{fi}|^2} \quad (4.5)$$

სადაც  $\overline{|M_{fi}|^2}$  მატრიცული ელემენტის მოდულის კვადრატი გასაშუალებულია საწყისი და აჯამულია საბოლოო მდგომარეობის სპინების პროექციათა მიხედვით. თუ გავითვალისწინებთ იმას, რომ კულონური ურთიერთქმედება არ მოქმედებს ნაწილაკების სპინურ ტალღურ ფუნქციებზე,  $\overline{|M_{fi}|^2}$  შემდეგი ფორმულით გამოისახება:

$$\overline{|M_{fi}|^2} = \frac{1}{4} |M_{fi} + \tilde{M}_{fi}|^2 + \frac{3}{4} |M_{fi} - \tilde{M}_{fi}|^2 \quad (4.6)$$

ხოლო თუ  $M_{fi}$  და  $\tilde{M}_{fi}$  ნამდვილია (4.6) მარტივდება და მივიღებთ:

$$\overline{|M_{fi}|^2} = M_{fi}^2 + \tilde{M}_{fi}^2 - M_{fi} \tilde{M}_{fi} \quad (4.6')$$

სადაც  $M_{fi}$  განისაზღვრება (2.46') ფორმულიდან ხოლო  $\tilde{M}_{fi}$  მიიღება საბოლოო მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციაში ელექტრონების კოორდინატების გადასმით. შევიტანოთ (3.4) ტალღური ფუნქცია (2.46')-ში და თუ გავითვალისწინებთ იმას, რომ  $\vec{\alpha}$  გადაფარვის ინტეგრალი წყალბადის შემთხვევაში ერთის ტოლია მივიღებთ:

$$M_{fi} = \langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle - J \langle \varphi_i | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle \quad (4.7)$$

ჩავწეროთ (4.7) გამოსახულებაში შემავალი თითოეული წევრი ცხადი სახით.

$$\langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \int_R (2\pi)^{\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}'_1 \vec{r}_1} (2\pi)^{\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}'_2 \vec{r}_2} \frac{1}{|r_1 - r_2|} (2\pi)^{\frac{3}{2}} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1} \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_2} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (4.8)$$

სადაც  $\vec{k}_1, \vec{r}_1$  შესაბამისად დამჯახებელი ელექტრონის ტალღური ვექტორი და რადიუსვექტორებია,  $\vec{k}'_1, \vec{r}'_1$  - გაფანტული ელექტრონის,

ხოლო  $\vec{k}'_2, \vec{r}_2$  – იონიზებული ელექტრონის. ინტეგრალის საზღვარი  $R - \vec{r}_2$ -ის რადიალური ნაწლის ქვედა საზღვარია (ჩამოჭრის რადიუსი),  $\alpha$  ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის პარამეტრია და წყალბადისთვის ერთის ტოლია. თუ შემოვიტანთ აღნიშვნებს:

$$\vec{r}_1 - \vec{r}_2 \equiv \vec{r}, \quad \vec{r}_2 \equiv \vec{\rho} \quad (4.9)$$

(4.8) ინტეგრალში ახალი ცვლადები განცალდება და მივიღებთ შემდეგ გამოსახულებას:

$$\langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \frac{1}{16\sqrt{2}\pi^5} \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{r} d\vec{r} \int_R e^{i(\vec{q}+\vec{k}'_2)\vec{\rho}} e^{-\alpha\rho} d\vec{\rho} \quad (4.10)$$

აქ  $\vec{q} = \vec{k}'_1 - \vec{k}_1$  გადაცემული იმპულსია. ორივე ინტეგრალს გააჩნია ანალიზური ამონახსენი. პირველი ინტეგრალის პასუხია:

$$\int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{r} d\vec{r} = \frac{4\pi}{q^2} \quad (4.11)$$

ხოლო მეორეში კუთხური ცვლადებით ინტეგრების შემდეგ მივიღებთ:

$$\int_R e^{i(\vec{q}+\vec{k}'_2)\vec{\rho}} e^{-\alpha\rho} d\vec{\rho} = \frac{4\pi}{|\vec{q} + \vec{k}'_2|} \int_R e^{-\alpha\rho} \sin(|\vec{q} + \vec{k}'_2|\rho) \rho d\rho \quad (4.12)$$

გამარტივების მიზნით ჩავწეროთ  $\vec{q}$  ცხადი სახით:

$$|\vec{q} + \vec{k}'_2| = |\vec{k}'_1 + \vec{k}'_2 - \vec{k}_1| = |-\vec{k}'_3| = |\vec{k}'_3|, \quad (4.13)$$

(4.12)-ის ინტეგრების შედეგად მივიღებთ:

$$\int_R e^{-i\vec{k}'_3\vec{\rho}} e^{-\alpha\rho} d\vec{\rho} = \frac{4\pi e^{-R}}{k'_3(1+k'^3_3)} \left\{ \cos(k'_3\rho) \left( \frac{2k'_3}{k'^2_3+1} - q'R \right) - \sin(k'_3\rho) \left( \frac{k'^2_3-1}{k'^2_3+1} - R \right) \right\}, \quad (4.14)$$

ამ პარაგრაფში გამოყენებული ინტეგრალების კონკრეტული გამოთვლები იხილეთ დამატებაში. (4.8) საბოლოოდ ჩაიწერება შემდეგნაირად:

$$\langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \frac{e^{-R}}{\sqrt{2}\pi^3 q^2 k'_3 (1+k'^2_3)} \left\{ \cos(k'_3\rho) \left( \frac{2k'_3}{k'^2_3+1} - k'_3 R \right) - \sin(k'_3\rho) \left( \frac{k'^2_3-1}{k'^2_3+1} - R \right) \right\} \quad (4.14)$$

შემდეგი წევრი  $J$  წარმოადგენს წილადს (3.4'). ჩავწეროთ ამ წილადის მრიცხველი ცხადი სახით:

$$\langle \varphi_{iR} | \phi_f \rangle = \int_R (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ik_2' \bar{r}_2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_2} d\bar{r}_2 \quad (4.15)$$

კუთხეებით ინტეგრების შედეგად მივიღებთ:

$$\langle \varphi_{iR} | \phi_f \rangle = \frac{\sqrt{2}}{\pi k_2'} \int_R^\infty e^{-r_2} \sin(k_2' r_2) r_2 dr_2 \quad (4.16)$$

ეს ინტეგრალი აიღება მსგავსად (4.12)-სა და მივიღებთ:

$$\langle \varphi_{iR} | \phi_f \rangle = \frac{\sqrt{2} e^{-R}}{\pi k_2'} \left\{ \cos(k_2' \rho) \left( \frac{2k_2'^2}{k_2'^2 + 1} - k_2'^2 R \right) - \sin(k_2' \rho) \left( \frac{k_2'^2 - 1}{k_2'^2 + 1} - R \right) \right\}. \quad (4.17)$$

ახლა ჩავწეროთ  $J$ -ის მნიშვნელი:

$$\langle \varphi_{iR} | \varphi_i \rangle = \int_R \frac{1}{\pi} e^{-2r_2} d\bar{r}_2 \quad (4.18)$$

მისი პასუხია:

$$\langle \varphi_{iR} | \varphi_i \rangle = e^{-2R} (2R^2 + 2R + 1) \quad (4.19)$$

ჩავწეროთ (4.7)-ის ბოლო გამოსახულება:

$$\langle \varphi_i | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \int_R (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{ik_1' \bar{r}_1} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_2} \frac{1}{|r_1 - r_2|} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{-ik_0' \bar{r}_1} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_2} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (4.20)$$

შემოვიღოთ (4.9) აღნიშვნები და გადავწეროთ (4.20)

$$\langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \frac{1}{16\sqrt{2}\pi^5} \int \frac{e^{iq\bar{r}}}{r} d\bar{r} \int_R e^{iq\bar{\rho}} e^{-2\rho} d\bar{\rho} \quad (4.21)$$

ანალოგიურად (4.9)-ისა, (4.21)-ში ინტეგრალების აღების შედეგად მივიღებთ:

$$\langle \varphi_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \frac{e^{-R}}{\sqrt{2}\pi^3 q^3 (4 + q^2)} \left\{ \cos(q\rho) \left( \frac{4q}{q^2 + 4} - qR \right) - \sin(q\rho) \left( \frac{q^2 - 4}{q^2 + 4} - R \right) \right\} \quad (4.22)$$

$M_{fi}$  საბოლოო ფორმულის მოკლედ ჩასაწერად შემოვიტანოთ შემდეგი ფუნქცია:

$$G_{iR}(k) = \frac{\sqrt{2}e^{-R}}{\pi k(1+k^2)} \left\{ \cos(kR) \left( kR + \frac{2k}{1+k^2} \right) - \sin(kR) \left( \frac{1-k^2}{1+k^2} - R \right) \right\} \quad (4.23)$$

შევიტანოთ (4.14), (4.17), (4.19) და (4.22) (4.7)-ში, მივიღებთ

$$M_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 q^2} \left\{ G_{iR}(k_3) - \frac{4G_{iR}(k_2)}{q(4+q^2)(1+2R+2R^2)} \times \right. \\ \left. \times \left[ \cos(qR) \left( qR + \frac{4q}{4+q^2} \right) - \sin(qR) \left( \frac{4-q^2}{4+q^2} - 2R \right) \right] \right\} , \quad (4.24)$$

ჩავწეროთ  $\tilde{M}_{fi}$ -ის პირველი წევრი ცხადი სახით (როგორც ავლნიშნეთ იგი მიიღება საბოლოო მდგომარეობის ტალღურ ფუნქციაში ელექტრონების რადიუსექტორების გადასმით):

$$\langle \tilde{\varphi}_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \int_R (2\pi)^{\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}'_2 \vec{r}_2} (2\pi)^{\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}'_1 \vec{r}_1} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (2\pi)^{\frac{3}{2}} e^{-i\vec{k}'_1 \vec{r}_1} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_2} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (4.26)$$

(4.9) აღნიშვნების შემოტანის შემდეგ (4.26) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\langle \tilde{\varphi}_f | V_{12} | \varphi_{iR} \rangle = \frac{1}{16\sqrt{2}\pi^5} \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{r} d\vec{r} \int_R e^{i(\vec{q}+\vec{k}'_1)\vec{\rho}} e^{-\rho} d\vec{\rho} \quad (4.27)$$

სადაც  $\vec{q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_0$ . დანარჩენი გადსმული წევრები მიიღება პირდაპირი წევრებიდან, მსგავსად (4.26) ფორმულისა. ჩავწეროთ  $\tilde{M}_{fi}$  საბოლოო სახით:

$$\tilde{M}_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 \tilde{q}^2} \left\{ G_{iR}(k_3) - \frac{4G_{iR}(k_1)}{\tilde{q}(4+\tilde{q}^2)(1+2R+2R^2)} \times \right. \\ \left. \times \left[ \cos(\tilde{q}R) \left( \tilde{q}R + \frac{4\tilde{q}}{4+\tilde{q}^2} \right) - \sin(\tilde{q}R) \left( \frac{4-\tilde{q}^2}{4+\tilde{q}^2} - 2R \right) \right] \right\} , \quad (4.28)$$

$H(e,2e)H^+$  რეაქციის დიფერენციალური განიკვეთის რიცხვითი შედეგები შეიძლება მიღებულ იქნას (4.5), (4.6), (4.24) და (4.28) ფორმულების გამოყენებით.

$H(e,2e)H^+$  რეაქციისგან განსხვავებით  $He(e,2e)He^+$  რეაქცია წარმოადგენს ოთხნაწილაკობრივ ამოცანას. იმისთვის რომ ის დაეიყვანოს სამნაწილაკობრივ ამოცანაზე დაეუშვათ, რომ თითოეული ელექტრონი მოძრაობს მეორის მიერ ეკრანირებულ ბირთვის კულონურ ველში. ჰელიუმის ტალღური ფუნქცია ჩავწეროთ ერთპარამეტრიანი ჰილერაასის ფუნქციებით (3.32), ხოლო იონიზაციის შემდეგ ნარჩენი იონის ტალღური ფუნქცია იქნება წყალბადისებრი ატომის ტალღური ფუნქცია მუხტით  $Z=2$ . აქვე ავღნიშნოთ, რომ ასეთი მიდგომა ცხადად არ შეიცავს ელექტრონ-ელექტრონულ კორელაციებს. ჰელიუმის ატომში შემავალი მეორე ელექტრონის კოორდინატი აღვნიშვნოთ  $\vec{r}_3$ , მაშინ საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ტალღური ფუნქციები ჩაიწერება შემდეგნაირად:

$$\psi_i = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_1\vec{r}_1) \varphi_{iR}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \quad (4.29)$$

$$\psi_f = \hat{A}(2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}'_1\vec{r}_1) \varphi_{fR}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \quad (4.30)$$

სადაც

$$\Phi_{iR}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \sqrt{n} \varphi_{iR}(\vec{r}_2) \varphi_i(\vec{r}_3). \quad (4.31)$$

$\varphi_i(\vec{r}_3)$  სამიზნის მეორე ელექტრონის მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა; ეს იგივე  $\phi_i(\vec{r}_3)$  – იონის შინაგანი მდგომარეობის ტალღური ფუნქციაა საწყის მდგომარეობაში (იხ. ფორმულა (3.1)):

$$\varphi_i(\vec{r}_3) = (\alpha_s^3/\pi)^{1/2} e^{-\alpha_s r_3}, \quad (4.32)$$

$\alpha_s$  იონისეფექტური, ანუ ეკრანირებული ბირთვის მუხტია, რომელიც (3.33) ფორმულით გამოითვლება.  $\varphi_{iR}(\vec{r}_2)$  – სამიზნე ელექტრონის ფუნქციაა ჩამოჭრის გათვალისწინებით.

$$\varphi_{fR}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \chi_f(\vec{r}_2) \varphi_i(\vec{r}_3) - \mathfrak{I}J \varphi_i(\vec{r}_2) \varphi_i(\vec{r}_3) \quad (4.32)$$

საბოლოო მდგომარეობის ორთოგონალიზებული ტალღური ფუნქციაა.

$$\mathfrak{S} = \langle \phi_i | \phi_f \rangle = \int \frac{\alpha_s^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha_s r} \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r} d\vec{r} = \frac{8(\alpha_s \alpha)^{\frac{3}{2}}}{(\alpha_s + \alpha)^3} \quad (4.33)$$

არის ჰელიუმის იონის ტალღურ ფუნქციათა გადაფარვის ინტეგრალი, სადაც

$$\phi_f = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_3} \quad (4.33')$$

ჰელიუმის წყალბადისებრი იონის ტალღური ფუნქციაა.  $\alpha$  ნარჩენი წყალბადისებური იონის ტალღური ფუნქციის პარამეტრია.

$\text{He}(e,2e)\text{He}^+$  რეაქციის სამჯერადი დიფერენციალური განიკვთის გამოსათვლელი ფორმულა  $\text{H}(e,2e)\text{H}^+$ -ის გამოსათვლელი ფორმულის ანალოგიურად ჩაიწერება (იხილეთ (4.5)). მატრიცულ ელემენტს  $M_{fi}$ -ის ექნება შემდეგი სახე:

$$M_{fi} = \langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle - \mathfrak{S} J \langle \phi_i | V_{12} | \phi_{iR} \rangle \quad (4.34)$$

ჩავწეროთ ცხადი სახით პირველი ელემენტი:

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle &= \int_R (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}'_1 \vec{r}_1} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}'_2 \vec{r}_2} \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_3} \times \\ &\times \frac{1}{|r_1 - r_2|} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1} \sqrt{n} \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_2} \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_3} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \end{aligned} \quad (4.35)$$

ურთიერთქმედების ოპერატორი არ მოქმედებს  $\vec{r}_3$  ცვლადზე, ამიტომ ამ ცვლადით ინტეგრალი წარმოადგენს გადაფარვის ინტეგრალს  $\mathfrak{S}$ -ს (4.33). დარჩენილი ინტეგრალი აგამოითვლება მსგავსად (4.8)-ისა, ამიტომ ჩავწეროთ ის საბოლოო სახით:

$$\langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle = \mathfrak{S} \frac{\sqrt{n} \alpha_s^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha_s R}}{\sqrt{2\pi^3} q^2 k'_3 (\alpha_s^2 + k'_3{}^2)} \left\{ \cos(k'_3 \rho) \left( \frac{2k'_3}{k'_3{}^2 + \alpha_s^2} - k'_3 R \right) - \sin(k'_3 \rho) \left( \frac{k'_3{}^2 - \alpha_s^2}{k'_3{}^2 + \alpha_s^2} - \alpha_s R \right) \right\} \quad (4.36)$$

სადაც  $\bar{q} = \bar{k}' - \bar{k}_1$  გადაცემული იმპულსია. დანარჩენი წევრები გამოითვლება ანალოგიურად. ჩავწეროთ  $M_{fi}$  და  $\tilde{M}_{fi}$  საბოლოო გამოსახულებები.

$$M_{fi} = \Im \frac{\sqrt{n}}{2\pi^2 q^2} \left\{ G_{iR}(k'_3) - \frac{4\alpha_s^3 G_{iR}(k'_2)}{q(4\alpha_s^2 + q^2)(1 + 2R\alpha_s + 2\alpha_s^2 R^2)} \times \right. \\ \left. \times \left[ \cos(qR) \left( qR + \frac{4q\alpha_s}{4\alpha_s^2 + q^2} \right) - \sin(qR) \left( \frac{4\alpha_s^2 - q^2}{4\alpha_s^2 + q^2} - 2\alpha_s R \right) \right] \right\}, \quad (4.37)$$

$$\tilde{M}_{fi} = \Im \frac{\sqrt{n}}{2\pi^2 \tilde{q}^2} \left\{ G_{iR}(k'_3) - \frac{4\alpha_s^3 G_{iR}(k'_1)}{\tilde{q}(4\alpha_s^2 + \tilde{q}^2)(1 + 2R\alpha_s + 2\alpha_s^2 R^2)} \times \right. \\ \left. \times \left[ \cos(\tilde{q}R) \left( \tilde{q}R + \frac{4\tilde{q}\alpha_s}{4\alpha_s^2 + \tilde{q}^2} \right) - \sin(\tilde{q}R) \left( \frac{4\alpha_s^2 - \tilde{q}^2}{4\alpha_s^2 + \tilde{q}^2} - 2\alpha_s R \right) \right] \right\}, \quad (4.38)$$

სადაც

$$G_{iR}(k) = \frac{\sqrt{2}\alpha_s^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha_s R}}{\pi k(\alpha_s^2 + k^2)} \left\{ \cos(kR) \left( kR + \frac{2k\alpha_s}{\alpha_s^2 + k^2} \right) - \sin(kR) \left( \frac{\alpha_s^2 - k^2}{\alpha_s^2 + k^2} - \alpha_s R \right) \right\} \quad (4.39)$$

(4.5), (4.6), (4.37) და (4.38)  $\text{He}(e,2e)\text{He}^+$  რეაქციის დიფერენციალური განიკვეთის რიცხვითი მნიშვნელობების გამოსათვლელ ფორმულებს წარმოადგენენ.

## § 4.2 სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება კულონური ფუნქციების გამოყენებით.

ბრტყელი ტალღების გამოყენება მატრიცული ელემენტის გამოსათვლელად დამაკმყოფილებელია, როდესაც გვაქვს გაფანტვა სწრაფი ელექტრონებით, მაგრამ ენერჯის შემცირებისა და სამიზნე ატომების (იონების) მუხტის გაზრდისას სწორი ასიმპტოტიკის გათვალისწინება აუცილებელი ხდება. ამიტომ სიმჩ მეთოდის განსაზოგადებლად საბოლოო მდგომარეობის ასიმპტოტურ ტალღურ ფუნქციებად გამოვიყენეთ კულონური ფუნქციები. ჩავწეროთ ზოგადად ორელექტრონ-იონის ბმული უწყვეტი სპექტრის ტალღური ფუნქცია საბოლოო მდგომარეობაში:

$$\varphi_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = F_{\vec{k}_2}^{(-)}(\vec{r}_2) \varphi_f(\vec{r}_3) \quad (4.40)$$

დამჯახებელი ელექტრონი გაფანტვის შემდეგ კვლევ სწრაფი რჩება, ამიტომ მისი ტალღური ფუნქცია კვლავ ბრტყელი ტალღით შეგვიძლია აღვწეროთ, ხოლო  $F_{\vec{k}_2}^{(-)}(\vec{r}_2)$  უწყვეტი სპექტრის კულონური ფუნქციაა.  $\varphi_f(\vec{r}_3)$  კი წყალბადისებრი ატომის ტალღური ფუნქციაა. რადგანაც ბმული მდგომარეობისა და ამოტყორცნილი ელექტრონის ტალღური ფუნქციები ერთი და იგივე ჰამილტონიანის ამონახსნებია მათი ხელოვნური ორთოგონალიზაცია აღარაა საჭირო, ამიტომ მატრიცული ელემენტის ფორმულაში (4.7) მხოლოდ პირველი წევრი დაგვრჩება:

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle &= \int_R (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} F_{\vec{k}_2}^{(-)}(\vec{r}_2) \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_3} \times \\ &\times \frac{1}{|r_1 - r_2|} (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \sqrt{n} \frac{\alpha_s^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_2} \frac{\alpha_s^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r_3} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \end{aligned} \quad (4.42)$$

ურთიერთქმედების ოპერატორი არ მოქმედებს  $\vec{r}_3$  ცვლადზე, ამიტომ ამ ცვლადით ინტეგრალი წარმოადგენს გადაფარვის ინტეგრალს  $\mathfrak{N}$ -ს

(4.33). ჩავწეროთ დარჩენილი გამოსახულება (4.9) ცვლადების გამოყენებით:

$$\langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle = \mathfrak{I} \frac{\sqrt{n\alpha_s} \frac{3}{2} \pi^{-\frac{7}{2}}}{8} \int \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{r} d\vec{r} \int_R F_{\vec{k}_2}^{(-)}(\vec{r}_2) e^{i\vec{q}\vec{\rho}} e^{-\alpha\rho} d\vec{\rho} \quad (4.43)$$

$\vec{r}$ -ით ინტეგრალის აღების შედეგად მივიღებთ:

$$\langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle = \mathfrak{I} \frac{\sqrt{n\alpha_s} \frac{3}{2} \pi^{-\frac{5}{2}}}{2q^2} \int_R F_{\vec{k}_2}^{(-)}(\vec{\rho}) e^{i\vec{q}\vec{\rho}} e^{-\alpha\rho} d\vec{\rho} \quad (4.44)$$

ამ ინტეგრალის ამოსახსნელად საჭიროა მასში შემავალი ფუნქციები გაგშალოთ პარციალურ ტალღებად:

$$e^{i\vec{q}\vec{\rho}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(q\rho) \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{q}) Y_{lm}^*(\hat{\rho}) \quad (4.45)$$

$$F_{\vec{k}_2}^{(-)}(\vec{\rho}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-1)^l e^{-i\delta_l} R_l^-(k_2\rho) Y_{lm}(\hat{k}_2) Y_{lm}^*(\hat{\rho}) \quad (4.46)$$

სადაც  $j_l(x)$  ბესელის სფერული ფუნქციაა,  $Y_{lm}(\vartheta)$  ლაპლასის სფერული ფუნქცია,  $e^{-i\delta_l}$  - კულონური ფაზაა რომელიც შემდეგი ფორმულით გამოითვლება:

$$e^{-i\delta_l} = \sqrt{\frac{\Gamma(l+1+i\eta)}{\Gamma(l+1-i\eta)}} \quad (4.47)$$

აქ  $\eta = \frac{Z}{k}$  კულონური პარამეტრია, სადაც  $Z$  იონის მუხტია, ხოლო  $k$  ელექტრონის ტალღური ვექტორი.  $\Gamma(x)$  ეილერის ფუნქციაა.  $R_l^-(k_2\rho)$  რადიალური კულონური ფუნქციაა, რომელიც შემდეგი ფორმულით გამოითვლება [30, 31]:

$$R_l^-(k, r) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \frac{|\Gamma(l+1+i\eta)|}{(2l+1)!} (2kr)^l e^{ikr} F(l+1+i\eta, 2l+2, -2ikr) \quad (4.48)$$

$F(l+1+i\eta, 2l+2, -2ikr)$  - გადაგვარებული ჰიპერგეომეტრიული ფუნქციაა. შევიტანოთ (4.45) და (4.46) გაშლები (4.44) -ში, მივიღებთ:

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle = & \Im \frac{\sqrt{n\alpha_s} \frac{3}{2} \pi^{-\frac{5}{2}}}{2q^2} \int_R \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-1)^l e^{-i\delta_l} R_l^-(k'_2 \rho) Y_{lm}(\hat{k}'_2) Y_{lm}^*(\hat{\rho}) \times \\ & \times 4\pi \sum_{l'=0}^{\infty} i^{l'} j_{l'}(q\rho) \sum_{m'=-l'}^{l'} Y_{l'm'}(\hat{\rho}) Y_{l'm'}^*(\hat{q}) e^{-\alpha\rho} \rho^2 d\rho d\Omega \end{aligned} \quad (4.49)$$

კუთხეებით ინტეგრაციის შემდეგ მივიღებთ:

$$\langle \psi_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle = \Im \frac{\sqrt{n\alpha_s} \frac{3}{2} \pi^{-\frac{5}{2}}}{2q^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos(\bar{k}'_2 \wedge \bar{q})) e^{-i\delta_l} \int_R R_l^-(k'_2 \rho) j_l(q\rho) e^{-\alpha\rho} \rho^2 d\rho \quad (4.50)$$

ანალოგიურად მიიღება  $\tilde{M}_f$ . ჩავწეროთ მისი საბოლოო გამოსახულება:

$$\langle \tilde{\psi}_f | V_{12} | \psi_{iR} \rangle = \Im \frac{\sqrt{n\alpha_s} \frac{3}{2} \pi^{-\frac{5}{2}}}{2\tilde{q}^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos(\bar{k}'_1 \wedge \tilde{q})) e^{-i\delta_l} \int_R R_l^-(k'_1 \rho) j_l(\tilde{q}\rho) e^{-\alpha\rho} \rho^2 d\rho \quad (4.51)$$

(4.50) და (4.51) მატრიცული ელემენტების ფორმულები მიღებულია ზოგადად ორელექტრონიანი სისტემებისთვის. კონკრეტული რეაქციის სათვლელი ფორმულები მიიღება შესაბამისი პარამეტრების ჩასმით.  $\text{He}(e,2e)\text{He}^+$  სრული დიფერენციალური კვეთის რიცხვითი მნიშვნელობების დასათვლელად (4.50) და (4.51) ფორმულებში უნდა შევიტანოთ შემდეგი პარამეტრები ( $n=2, \alpha=2, \alpha_s=1.69$ ),  $\text{Li}^+(e,2e)\text{Li}^{++}$  რეაქციისთვის – ( $n=2, \alpha=3, \alpha_s=2.69$ ). როცა  $n=1$  და  $\alpha=\alpha_s$ , აღნიშნული ფორმულები სამართლიანი იქნება წყალბადის ატომისა და წყალბადისებრი იონების იონიზაციისთვის.

### § 4.3 რიცხვითი გამოთვლების შედეგები და მათი ანალიზი

კონკრეტული გამოთვლები ჩატარებულ იქნა ასიმეტრიულ-კომპლანარულ კინემატიკაში  $H(e,2e)H^+$ ,  $He(e,2e)He^+$  და  $Li^+(e,2e)Li^{++}$  რეაქციებისთვის. თავდაპირველად მოვიყვანთ შედეგებს, რომლებიც მიღებული იყო ბრტყელი ტალღების გამოყენებით. ამ მეთოდით მიღებული თეორიული მრუდები შედარებულია  $H(e,2e)H^+$  რეაქციების ექსპერიმენტულ მონაცემებს [95, 96].

ნახ.4.1(a,b,c)-ზე აგებულია  $H(e,2e)H^+$  რეაქციის სრული დიფერენციალური განიკვეთის დამოკიდებულების გრაფიკები ამოტყორცნილი ელექტრონის კუთხეზე (ე.წ. ამოტყორცნილი ელექტრონის კუთხური განაწილება). გამოთვლები ჩატარებული იქნა სხვადასხვა კინემატიკური პარამეტრებისთვის ( $E_1$  – დამჯახებელი ელექტრონის ენერგიაა,  $E_2'$  – ამოტყორცნილი ელექტრონის,  $\theta_1$  – გაბნეული ელექტრონის კუთხეა). უწყვეტი მრუდი წარმოადგენს სიმჩ მეთოდით მიღებულ შედეგებს, ხოლო წერტილები – ექსპერიმენტულ მონაცემებს. თავიდანვე ავლნიშნოთ, რომ განიკვეთის სიდიდე საგრძნობადაა დამოკიდებული  $\vec{q}$  გადაცემული იმპულსის სიდიდეზე.  $q$ -ს გაზრდა იწვევს კვეთის შემცირებას. ასეთი დამოკიდებულება ცხდად ჩანს პოტენციალის  $q$ -ზე დამოკიდებულებიდან ( $q^2$ -ის უკუპროპორციულია). ასევე ადვილი ასახსნელია პირველი მაქსიმუმის არსებობა გადაცემული იმპულსის მიმართულების მახლობლობაში  $\theta \approx 70^\circ$ . ის შეესაბამება  $G_R(k_3')$  ბმული მდგომარეობის ტალღური ფუნქციის ფურიე კომპონენტის მაქსიმუმს, იქ სადაც  $k_3'$  მინიმალურია. უფრო საინტერესოა მეორე მაქსიმუმის არსებობა გადაცემული იმპულსის საწინააღმდეგო მიმართულებით  $\theta \approx -110^\circ$  მახლობლობაში (ე.წ. უკუცემის პიკი). ამ კუთხეზე ნარჩენი იონი მაქსიმალურ იმპულსს იძენს, რაც ურთიერთქმედების მომენტში ელექტრონის ბირთვთან მცირე მანძილზე ყოფნაზე მიუთითებს. მცირე მანძილებზე კი ირღვევა ერთჯერადი

დაჯახების მექანიზმი. ჩამოჭრის გარეშე დათვლილ განიკვეთს ამ არეში ექსპერიმენტზე უფრო მაღალი პიკი გააჩნია. შედარებისათვის ნახ.4.1(a,b,c)-ზე აგებულია  $H(e,2e)H^+$  რეაქციის სრული დიფერენციალური განიკვეთის კუთხური განაწილების მრუდები ჩამოჭრილი და ჩამოუჭრელი ტალღური ფუნქციებით. წყვეტილი მრუდი შეესაბამება სიმ-ით მიღებულ შედეგებს, უწყვეტი მრუდი კი – ჩამოჭრილი ტალღური ფუნქციით. ექსპერიმენტული მონაცემები აღნიშნულია წერტილებით. ნახაზებიდან ჩანს, რომ ჩამოჭრის გამოყენება იწვევს მეორე პიკის ჩამოწევას და გვაძლევს კარგ თანხვედრას ექსპერიმენტულ მონაცემებთან, როგორც ფორმით ასევე სიდიდით. ჩამოჭრის პარამეტრი ვარირებს ფიზიკურად სწორ  $R \approx 2$  არეში, მისი ამოჭრა ტოლფასია მატრიცული ელემენტის ინტეგრალიდან იმ არის ამოღების, რომელიც შეესაბამება მრავალჯერად გადაფანტვებს, რომელთა წვლილი განხილულ კინემატიკაში მცირეა. მეორეს მხრივ, ანალოგიურ შედეგებს სხვა ავტორები ღებულობენ გაფანტვის ამოცანის ამონახსნის სხვადასხვა მიახლოებითი ტალღური ფუნქციებით შეცვლით [97, 98].

შედეგებზე ასევე დიდ გავლენას ახდენს ტალღური ფუნქციების ორთოგონალიზაციის გათვალისწინება. ამის საილუსტრაციოდ ნახ.4.1(d)-ზე შედარებულია ორთოგონალიზაციით და ორთოგონალიზაციის გარეშე მიღებული შედეგები. წყვეტილ-წერტილიანი მრუდი შეესაბამება არაორთოგონალური ტალღური ფუნქციით მიღებულ შედეგებს, წყვეტილი მრუდი კი – ორთოგონალური ტალღური ფუნქციით (ჩამოჭრის გარეშე), ექსპერიმენტული მონაცემები აღნიშნულია წერტილებით. ნახაზიდან ჩანს, რომ ორთოგონალიზაციის გათვალისწინება აუცილებელია, რადგანაც მის გარეშე არ მიიღება უკუცემის პიკი.

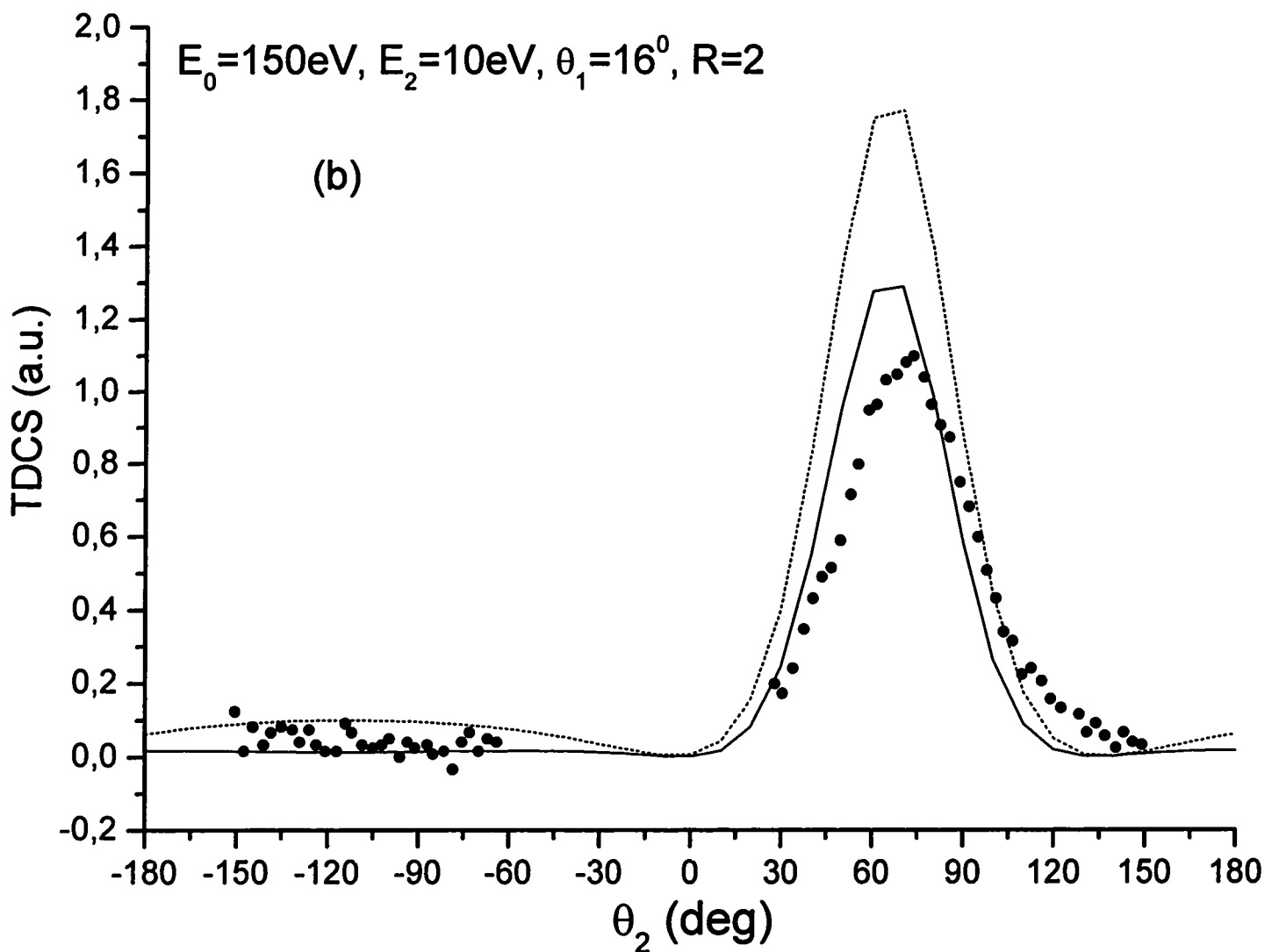
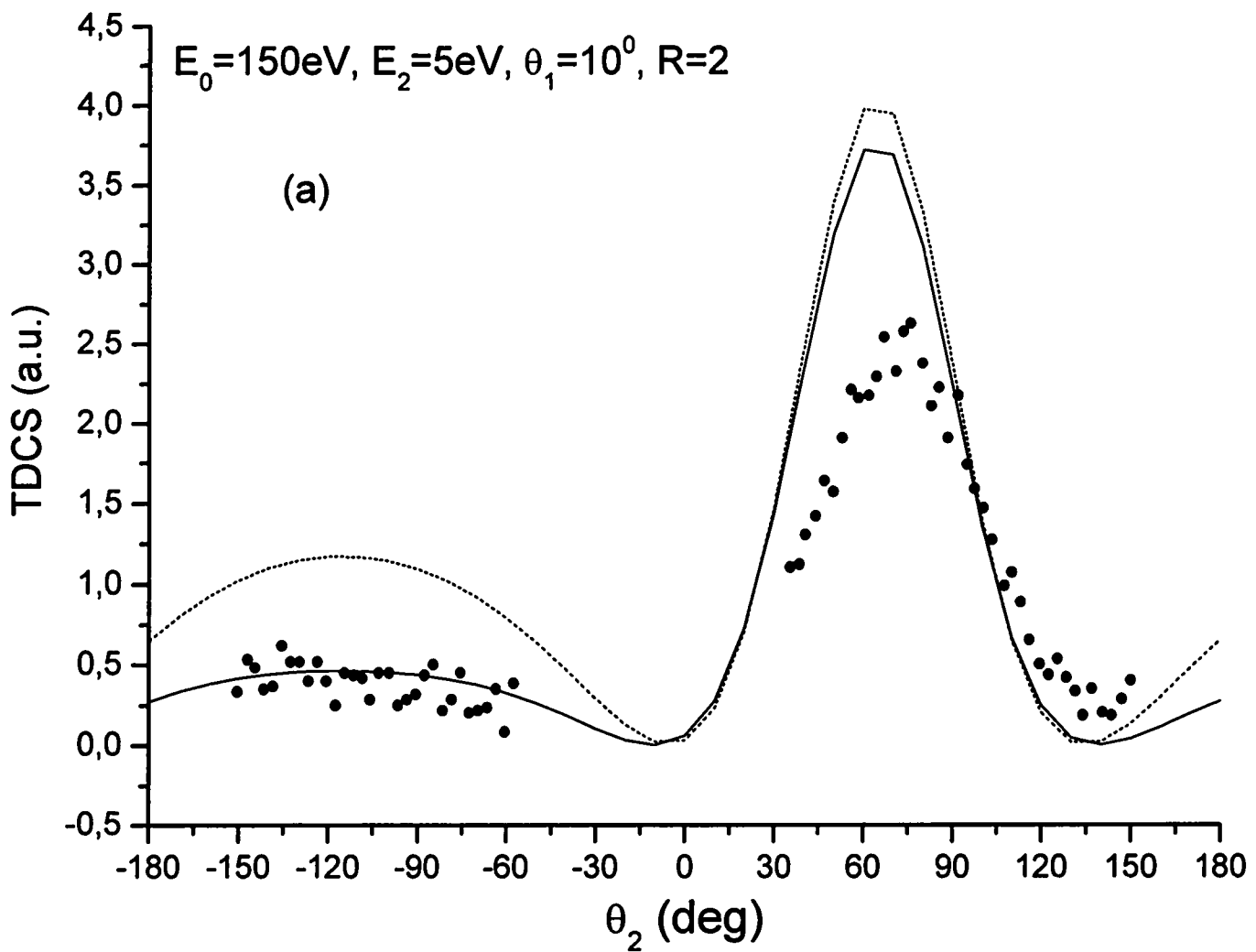
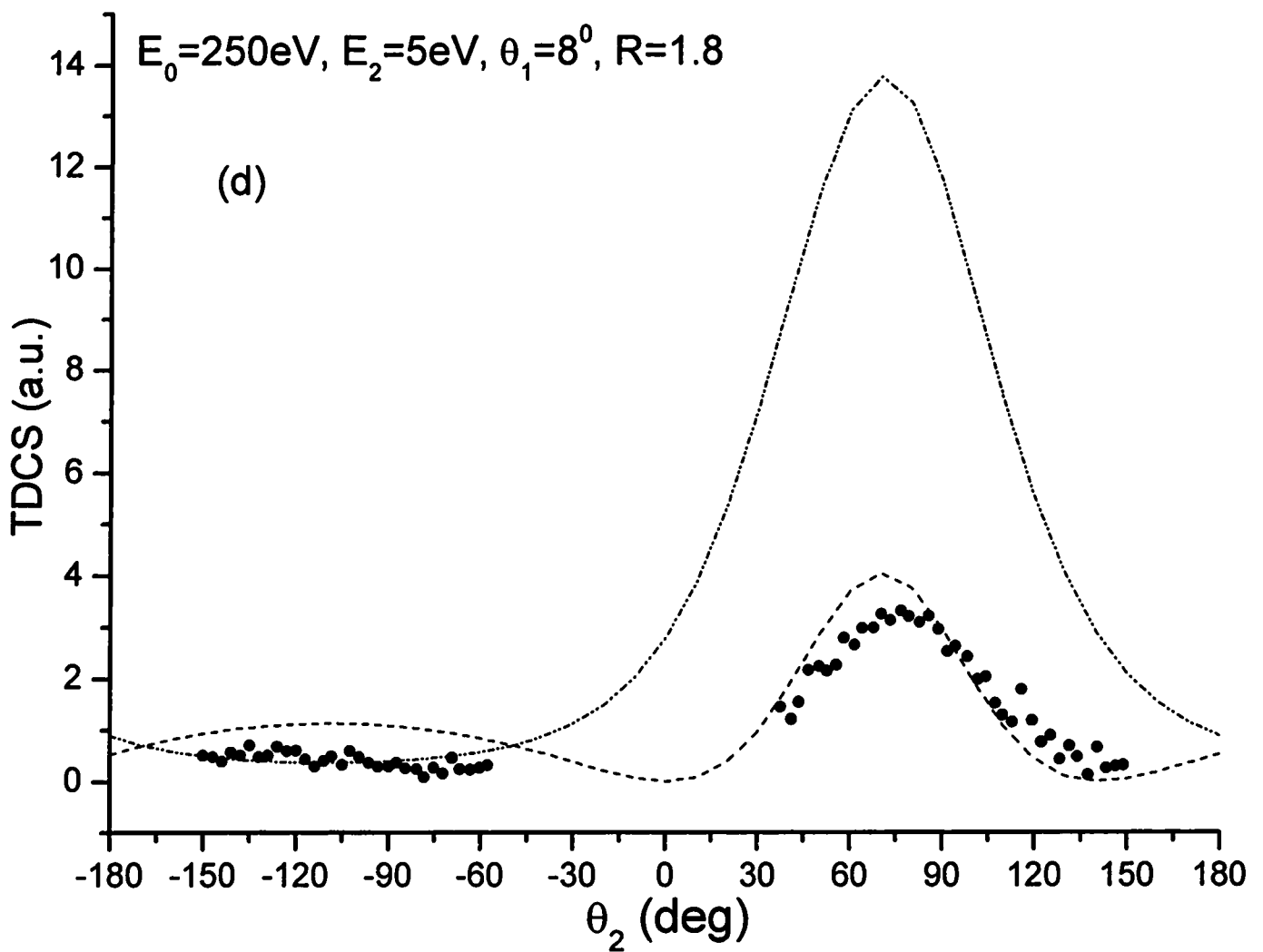
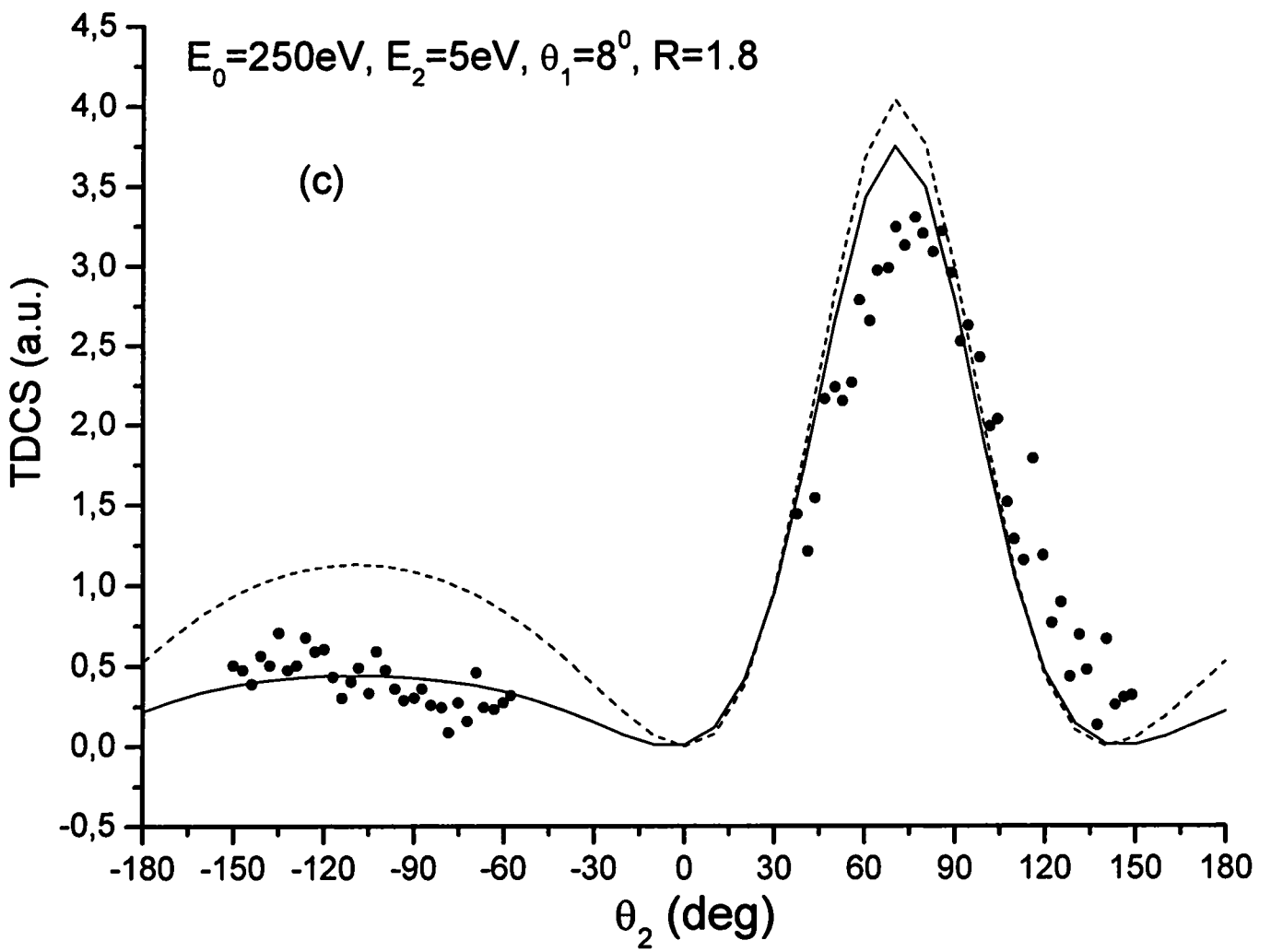


Fig. 4.1(a,b)



b.4.1(c,d)

სამიზნე ატომის (იონის) მუხტის ზრდასთან ერთად იზრდება კულონური ველის გავლენა უწყვეტ სპექტრში აღმოჩენილ ელექტრონებზე. განხილულ კინემატიკაში ამოტყორცნილი ენერგიის სიმცირის გამო ძლიერდება ასიმპტოტიკაში ბრტყელი ტალღის კულონური დამახინჯების ეფექტი. ამიტომ ბუნებრივია მუხტის ზრდასთან ერთად ბრტყელი ტალღების მიახლოება არაკორექტული ხდება და საჭიროებს სწორი ასიმპტოტიკის გათვალისწინებას, კერძოდ ამოტყორცნილი ელექტრონის მოძრაობის აღსაწერად (ბრტყელი ტალღის) ნაცვლად ვიყენებთ კულონურ ფუნქციას. აღნიშნული მეთოდით ნახ.4.2-4.4 აგებულია  $H(e,2e)H^+$ ,  $He(e,2e)He^+$  და  $Li^+(e,2e)Li^{++}$  რეაქციების კუთხური განაწილების მრუდები. უწყვეტი მრუდი შეესაბამება კულონური ფუნქციით მიღებულ შედეგებს. ექპერიმენტული მონაცემები კი აღნიშნულია წერტილებით[10-12]. თუ შევადარებთ ბრტყელი ტალღების მიახლოებაში დათვლილ შედეგებს კულონური ფუნქციით გამოთვლილს  $H(e,2e)H^+$  (იხილეთ ნახ.4.1 და ნახ.4.2) რეაქციებისთვის ისინი ფაქტიურად იდენტურ შედეგებს იძლევიან, მაგრამ  $He(e,2e)He^+$  და  $Li^+(e,2e)Li^{++}$  რეაქციისთვის დათვლილი კვეთი ბრტყელი ტალღების მიახლოებაში აღარ იძლევა კარგ რაოდენობრივ შედეგს, რაც კულონური ძალის შორსქმედი ხასიათით არის გამოწვეული და მისი წვლილი მუხტის ზრდასთან ერთად საგრძნობლად იზრდება, კერძოდ მუხტის ზრდა იწვევს განიკვეთის შემცირებას. ამის საილუსტრაციოთ ნახ.4.3(d) და ნახ.4.4.(d)-ზე აგებულია ბრტყელტალღოვანი მიახლოებით და კულონური ფუნქციით მიღებული შედეგები. წყვეტილ-წერტილიანი მრუდები შეესაბამება ბრტყელი ტალღის გამოყენებით მიღებულ შედეგებს, ხოლო უწყვეტი მრუდი – კულონური ფუნქციით. ანალოგიურად  $H(e,2e)H^+$  რეაქციისა,  $He(e,2e)He^+$  და  $Li^+(e,2e)Li^{++}$  რეაქციების განიკვეთებს ორი პიკი გააჩნიათ, რომელთა წარმოშობაც  $H(e,2e)H^+$  რეაქციის მსგავსად აიხსნება.

როგორც ბრტყელტალღოვანი მიახლოებისთვის ასევე კულონური ფუნქციების გამოყენებით ჩამოჭრის გარეშე მიღებული შედეგები ცუდ თანხვედრაშია ექსპერიმენტთან. ნახ.4.2(a,b,c) , ნახ.4.3(a,b) და ნახ.4.4(a,b,c) –ზე წყვეტილი მრუდი შეესაბამება ჩამოჭრის გარეშე მიღებულ შედეგებს, უწყვეტი მრუდი წარმოადგენს სიმჩ მეთოდით მიღებულ შედეგებს, ხოლო წერტილები – ექსპერიმენტულ მონაცემებს.. აქაც უკუცემის პიკი, რომელიც ბირთვის მიერ მიღებულ მაქსიმალურ იმპულსს შეესაბამება, არაა თავის ადგილზე. ჩამოჭრის შემდეგ კი ვიღებთ კარგ თანხვედრას ექსპერიმენტთან, როგორც ფორმით ასევე სიდიდით. აღსანიშნავია ის ფაქტი, რომ  $\text{Li}^+(e,2e)\text{Li}^{++}$  რეაქციისთვის უკუცემის პიკი დაბალი მიიღება, ჩამოჭრა კი აბრუნებს პიკს სწორ სიდიდემდე, ანუ ამ შემთხვევაში პირიქით ზრდის განიკვეთის მნიშვნელობას. მიღებული შედეგების საიმედოობა იმის საწინდარია, რომ ჩვენ შეგვიძლია არა მხოლოდ გავერკვეთ ატომთა ერთჯერადი იონიზაციის მექანიზმში, არამედ გამოვიყენოთ სიმჩ უფრო რთული პროცესების შესასწავლად და, რაც არანაკლებ მნიშვნელოვანია, წინასწარ შევაფასოთ ის კინემატიკური არეები (სივრცული და ენერგეტიკული), სადაც ექსპერიმენტების ჩატარება უფრო ოპტიმალურია.

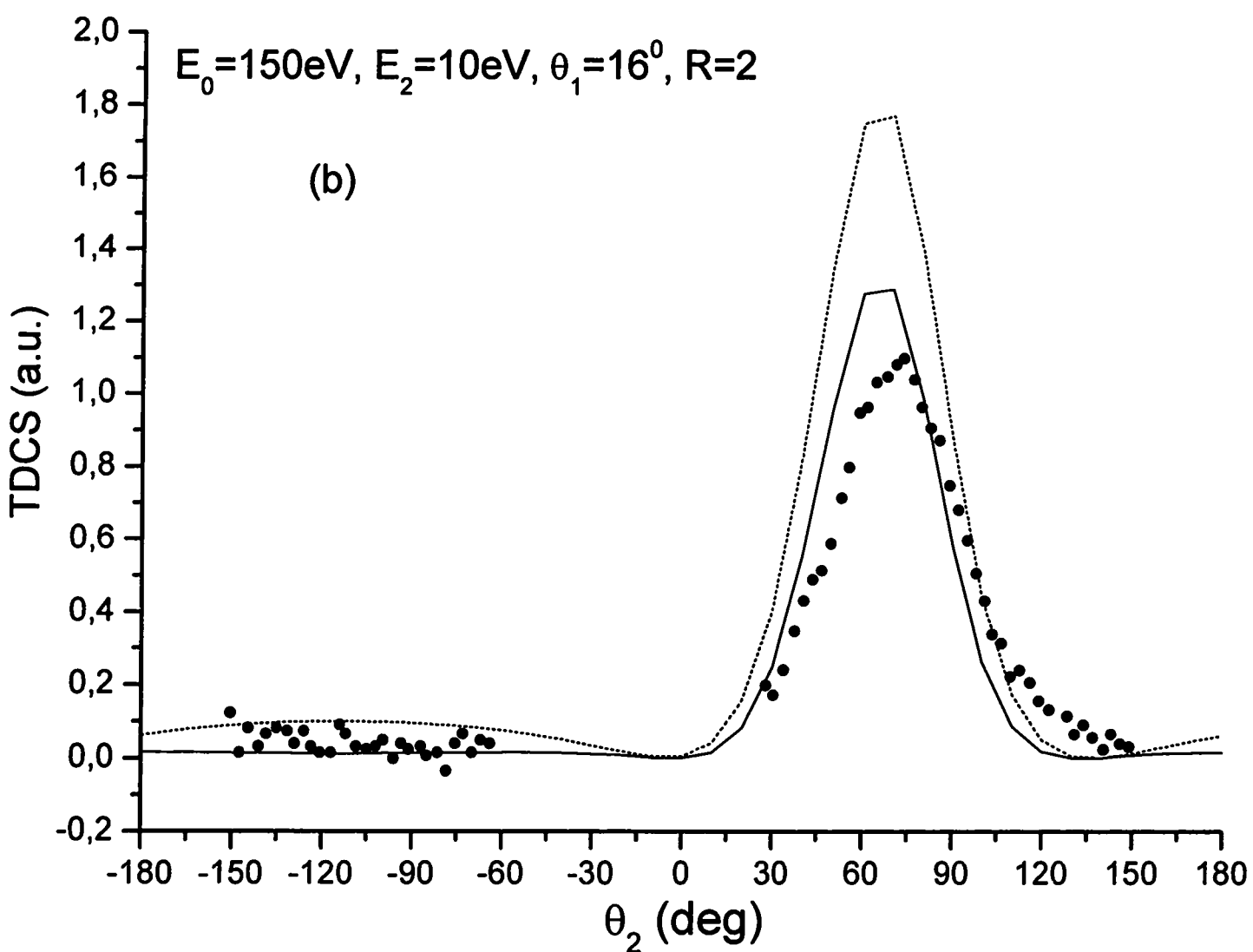
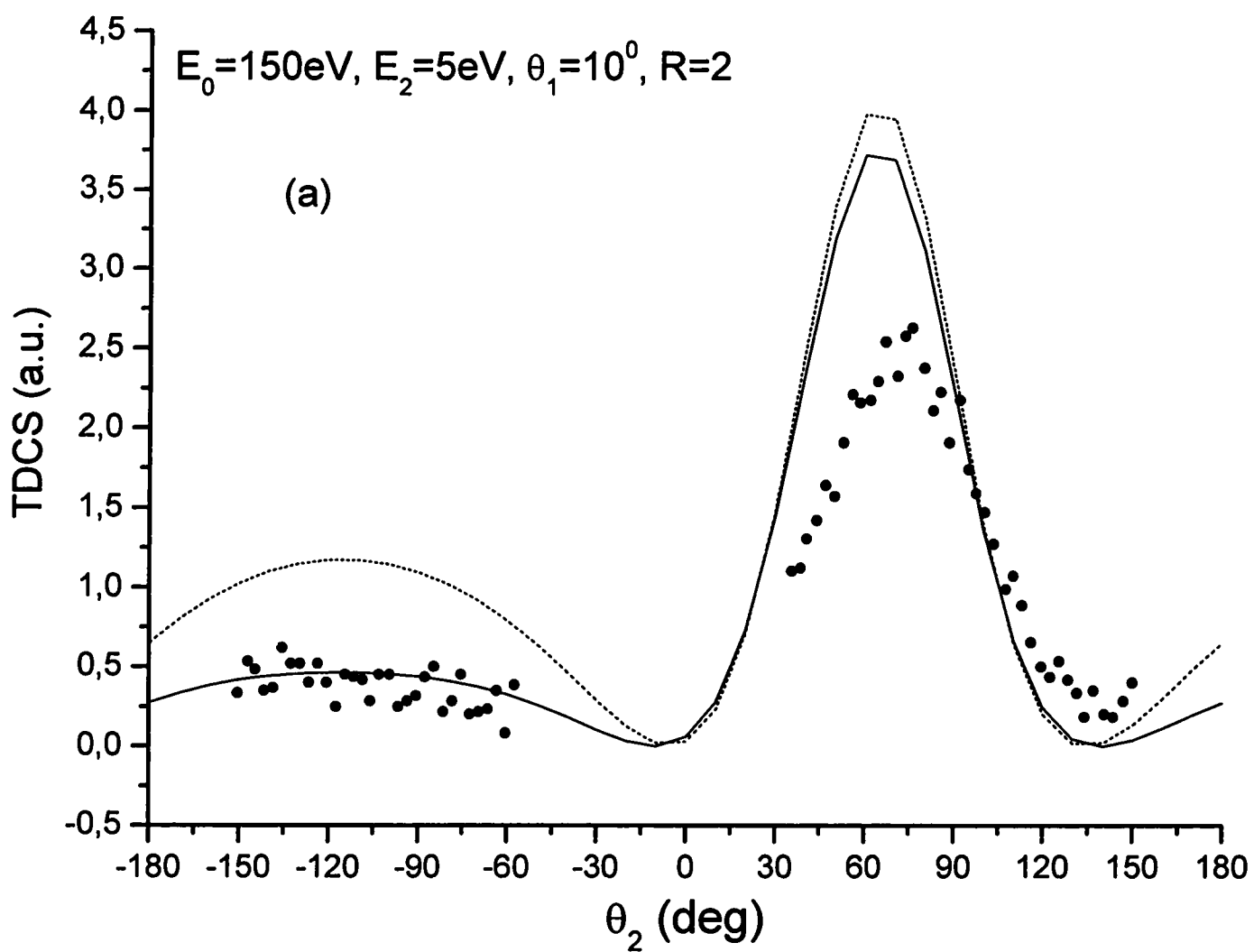
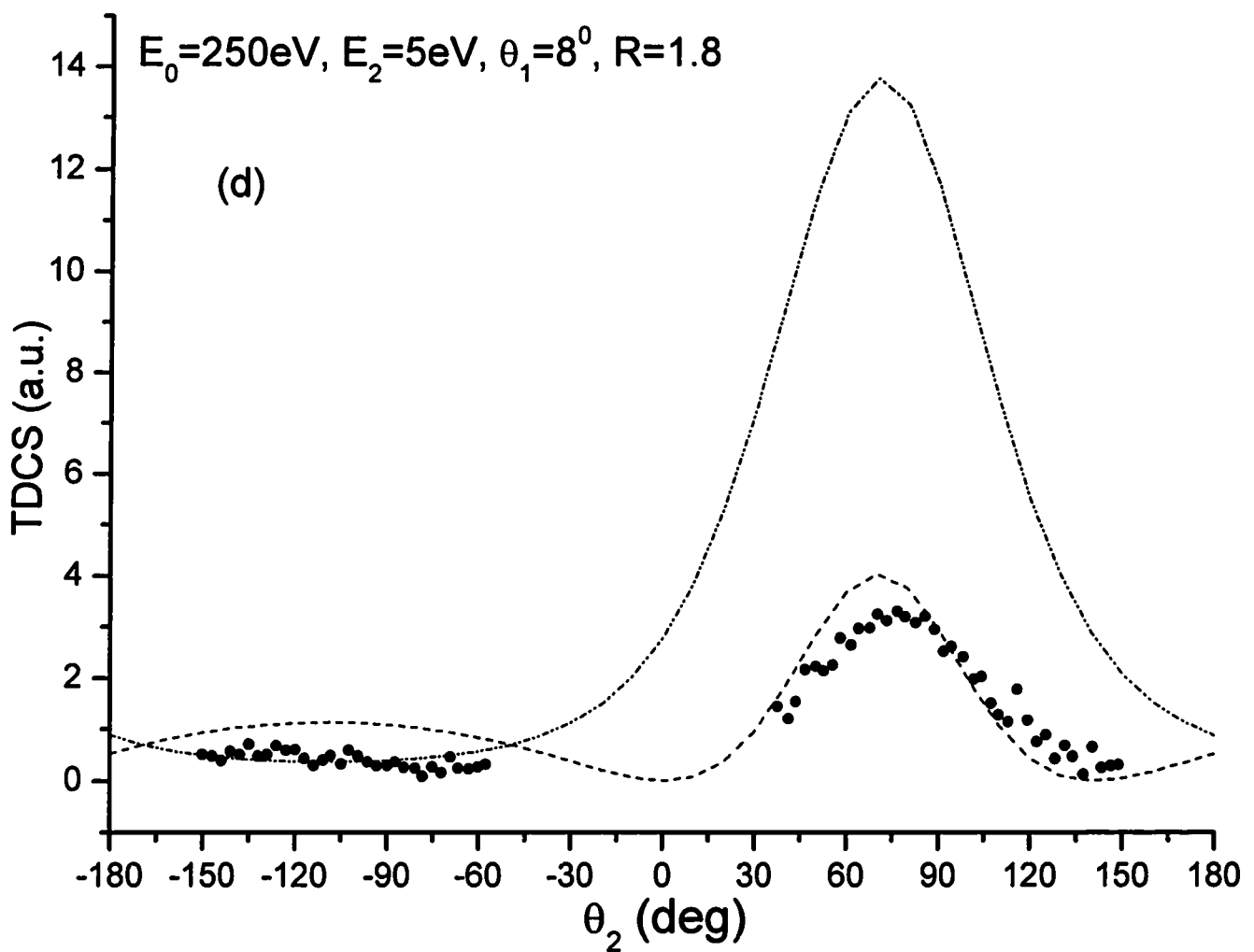
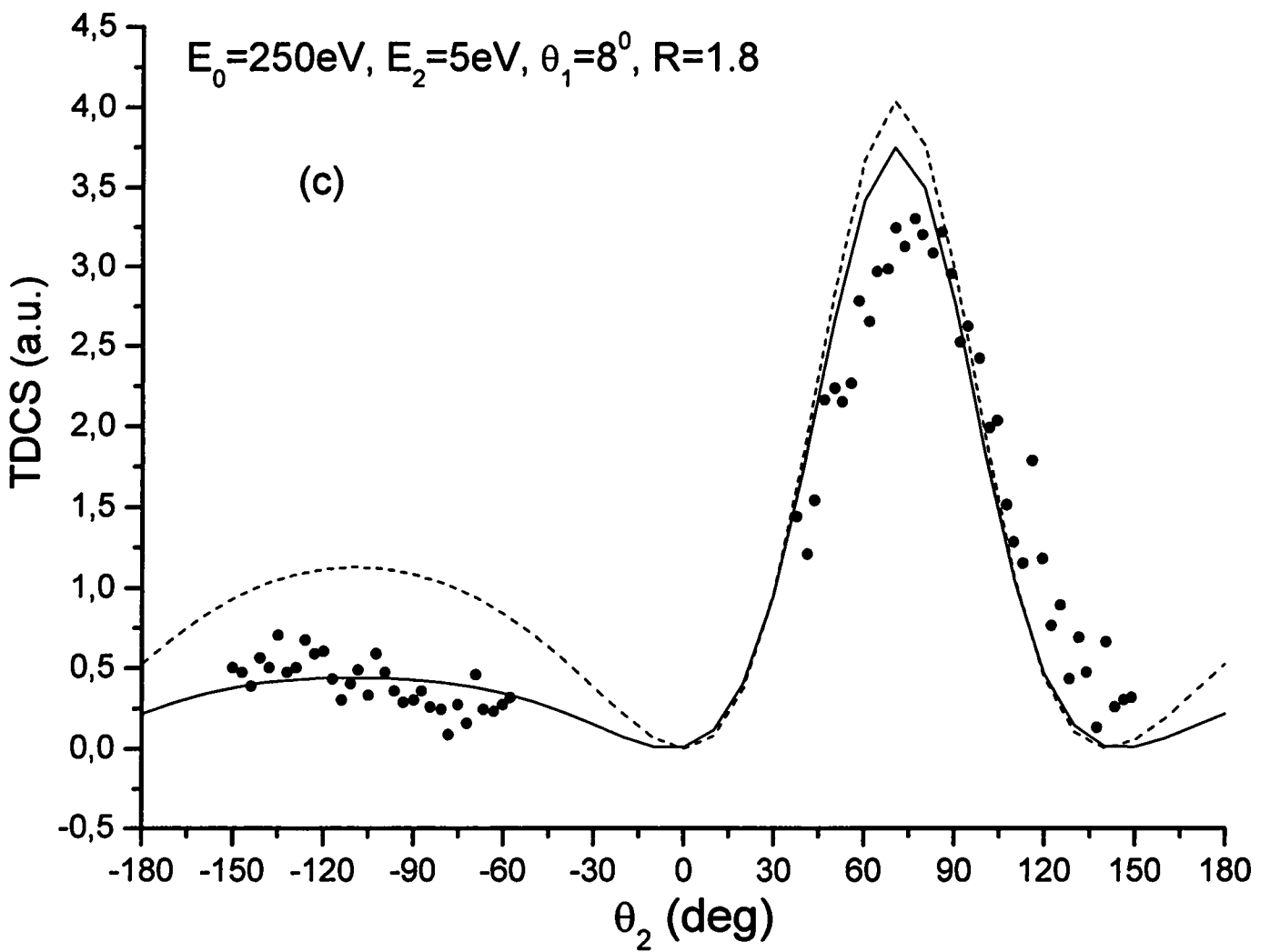


Fig. 4.2(a,b)



б.4.2(c,d)

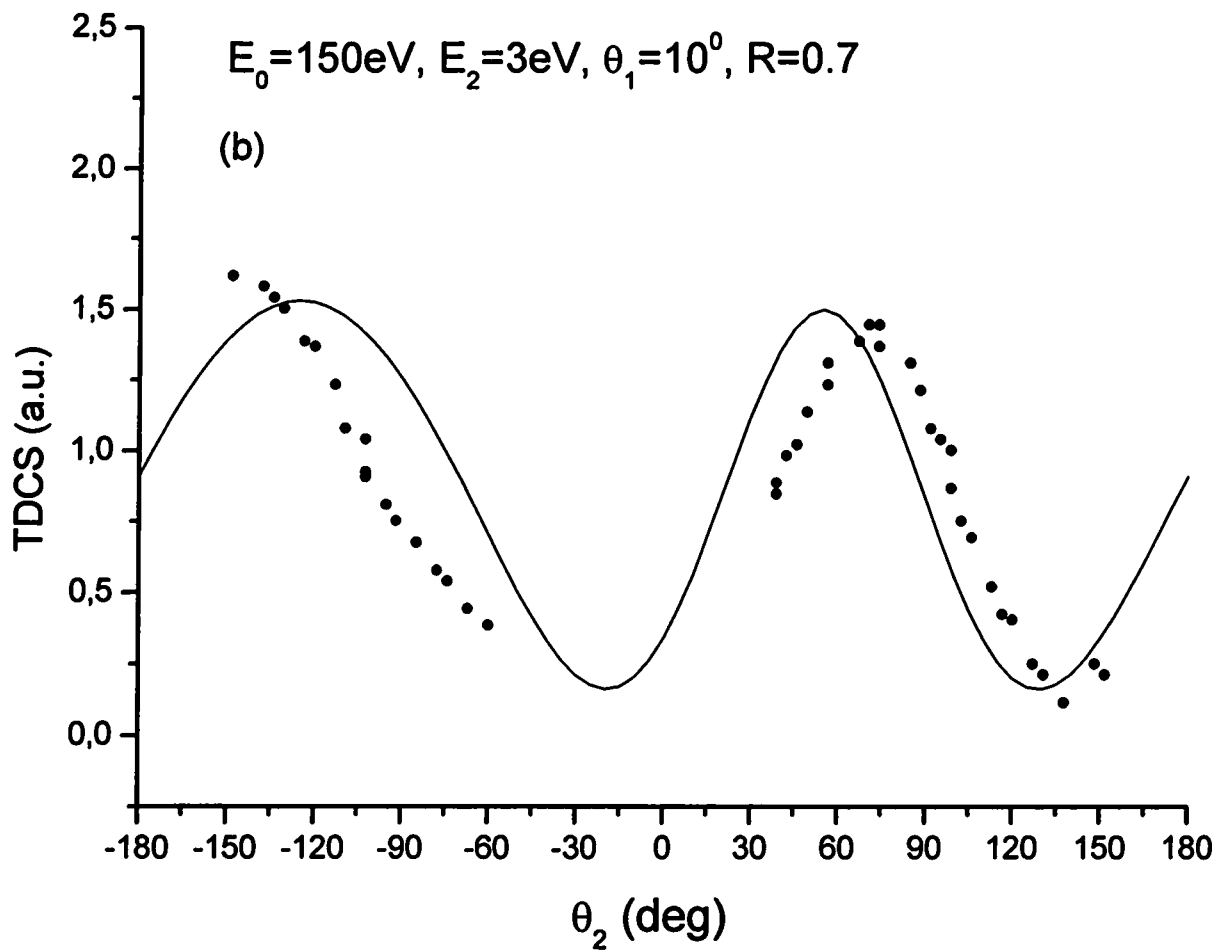
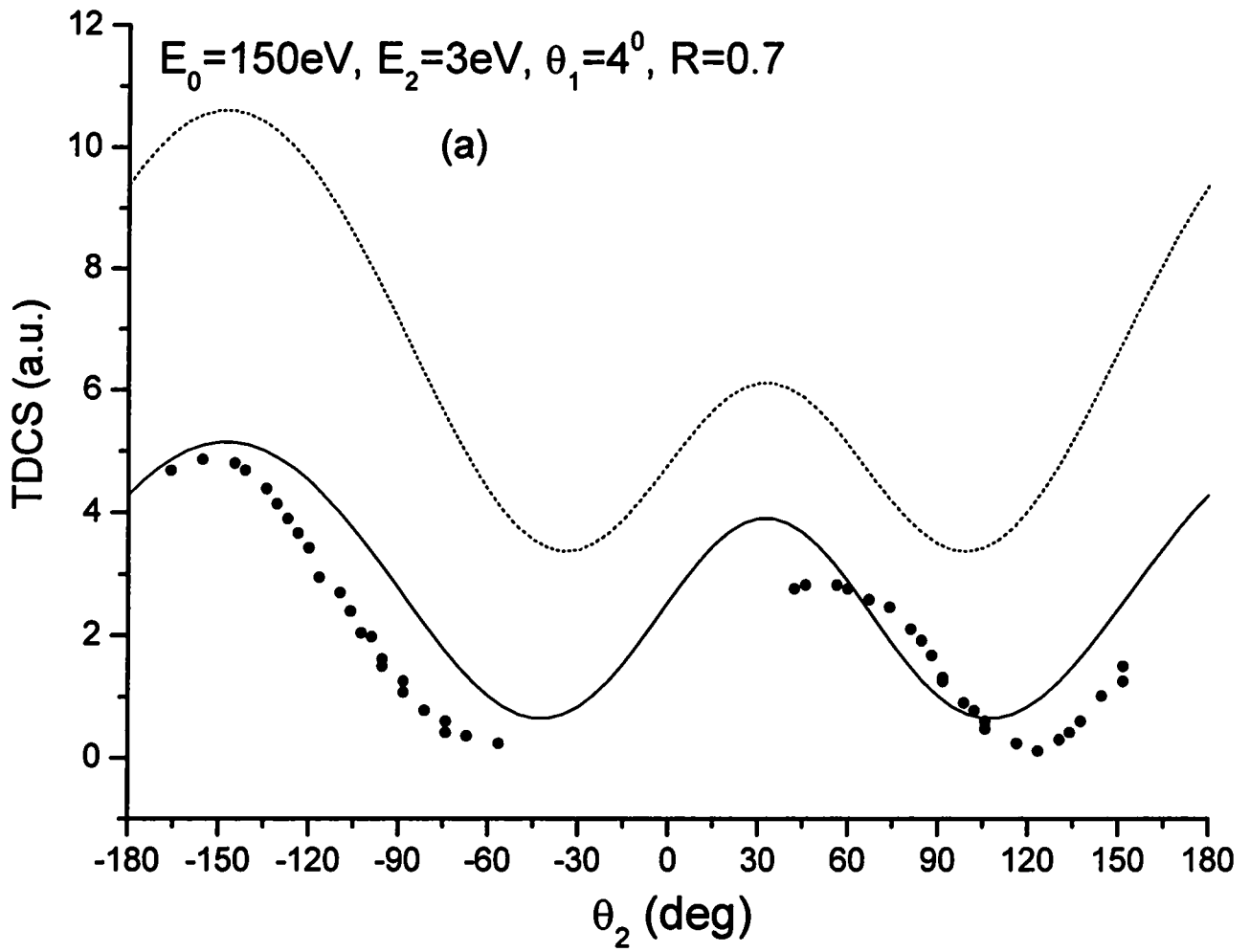
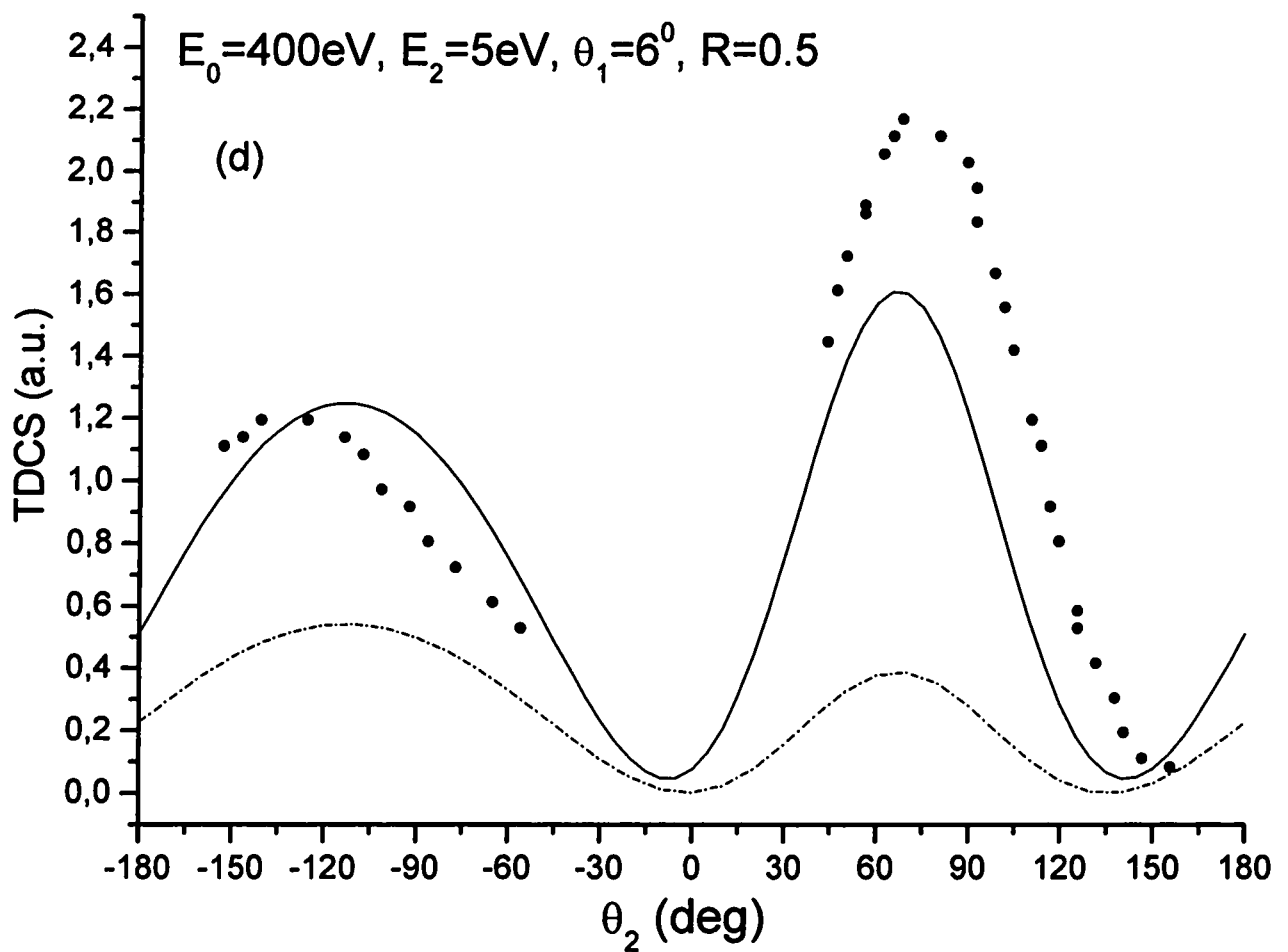
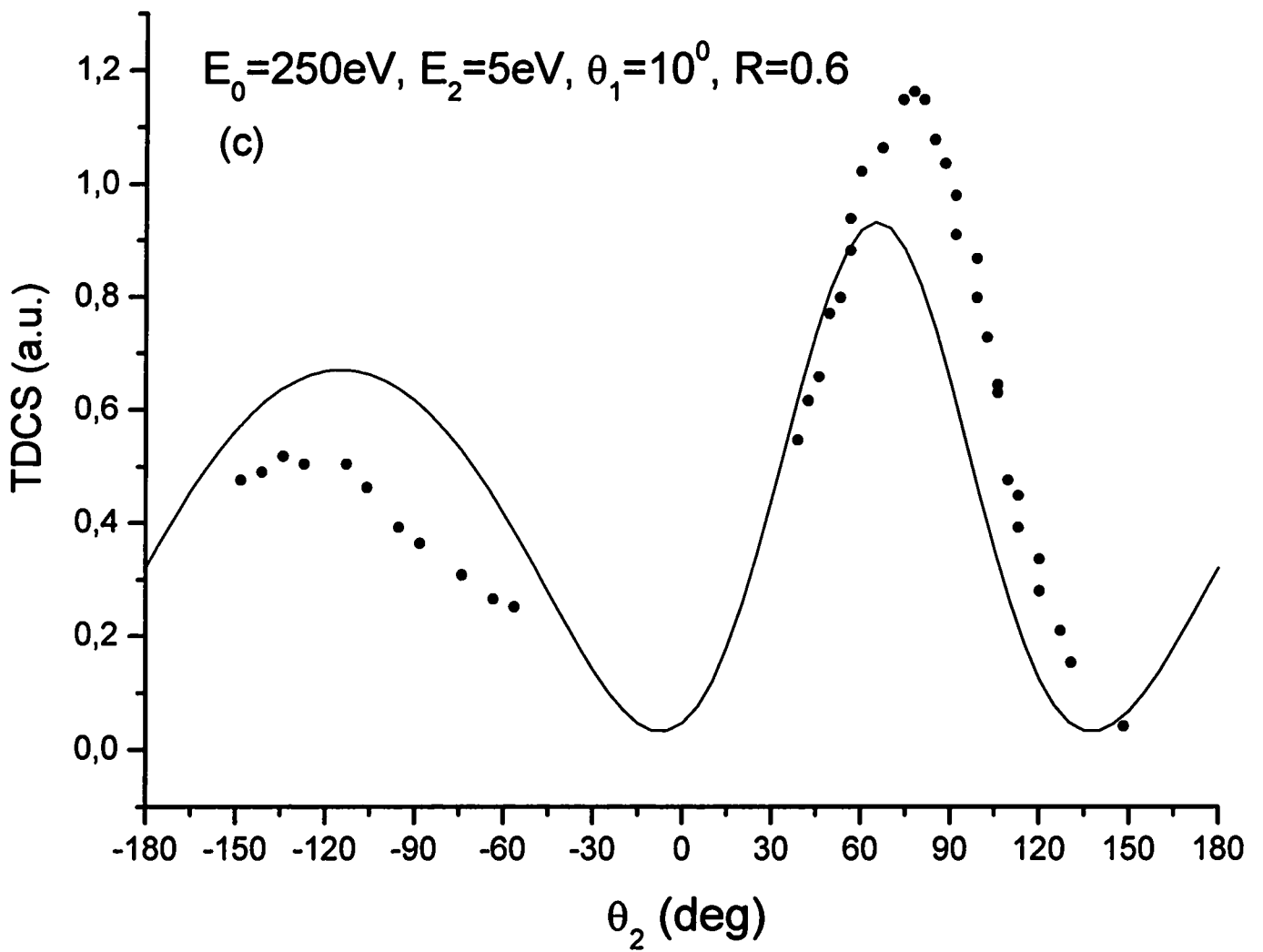


Fig. 4.3(a,b)



b.4.3(c,d)

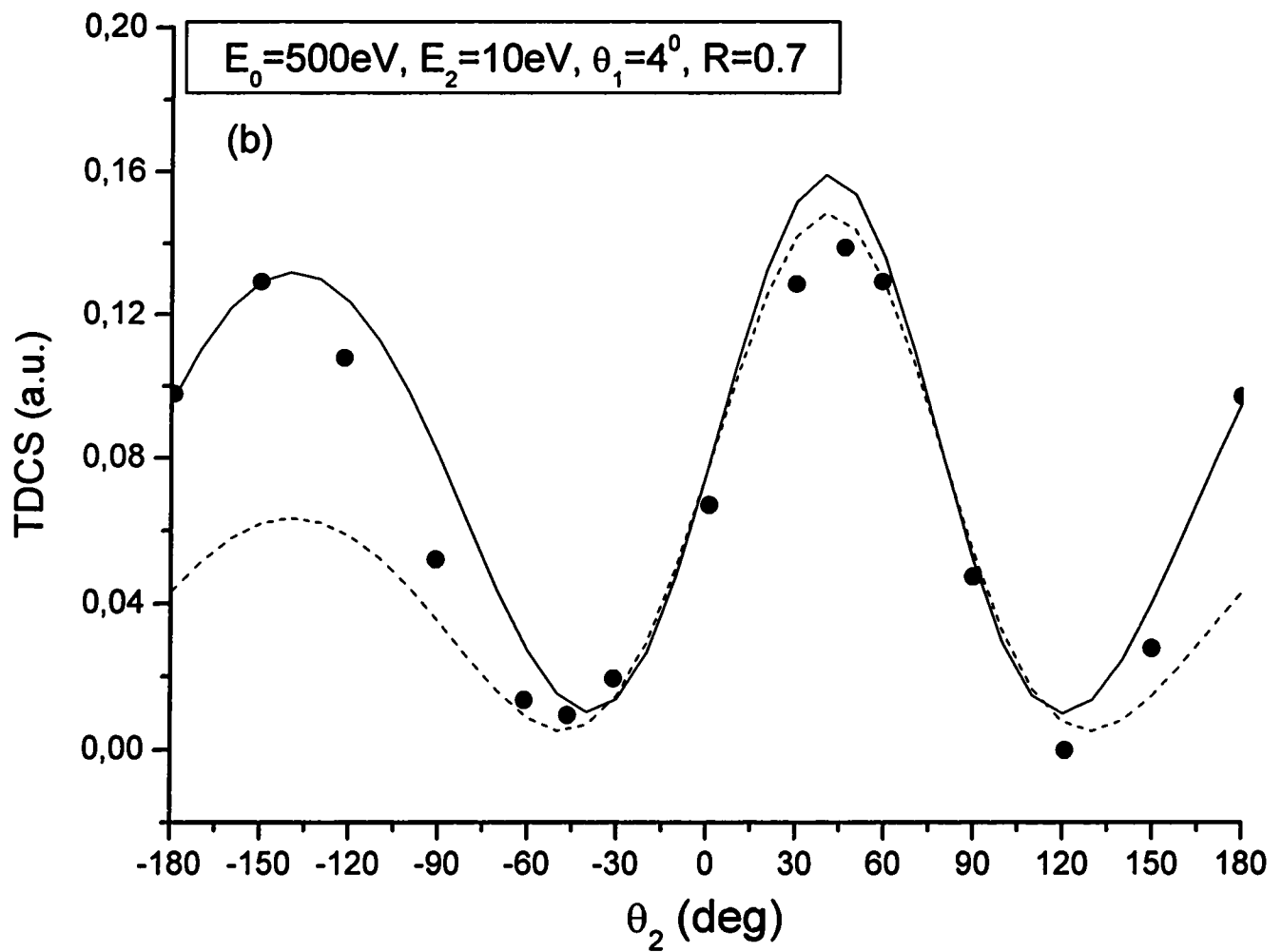
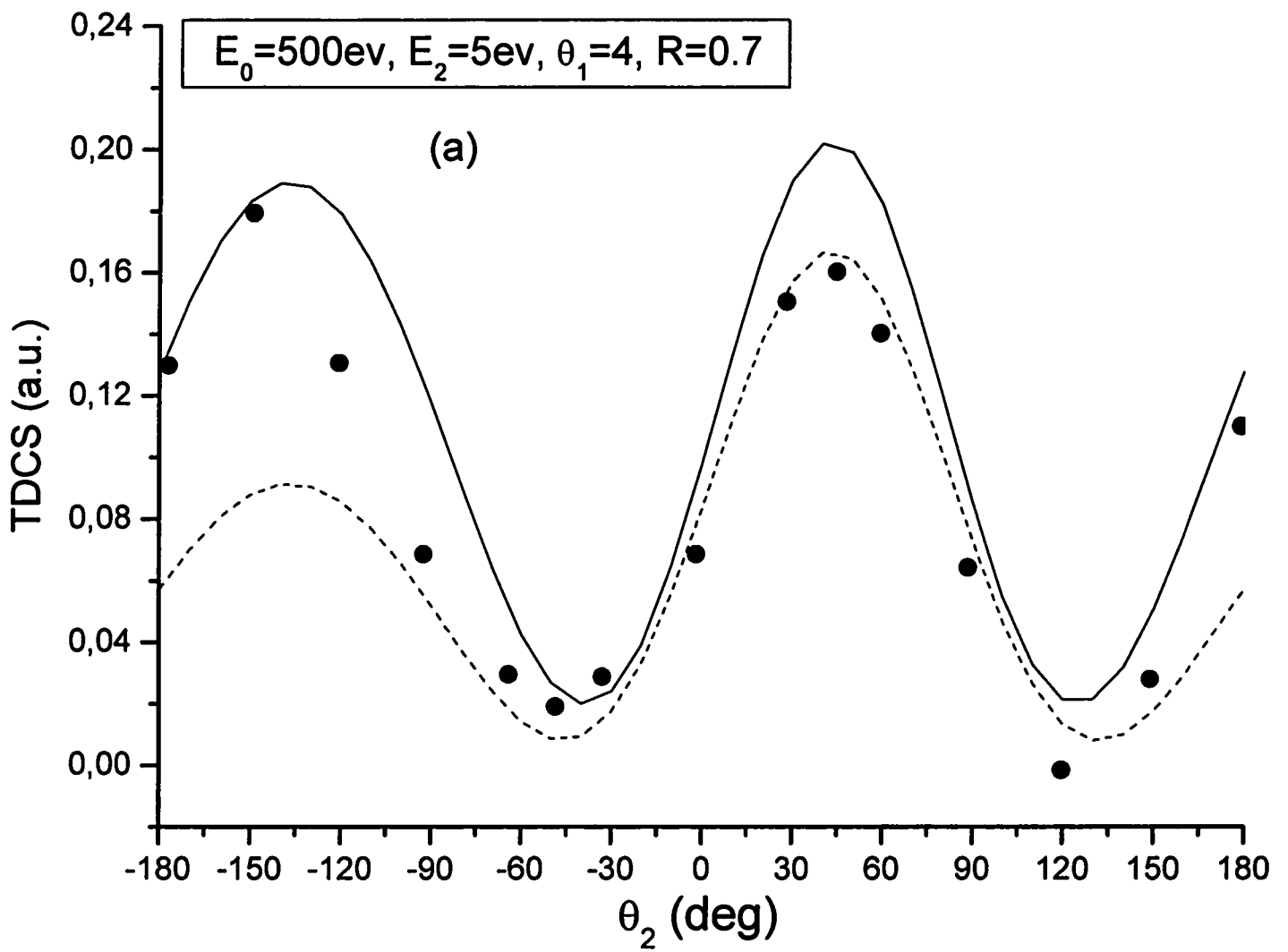
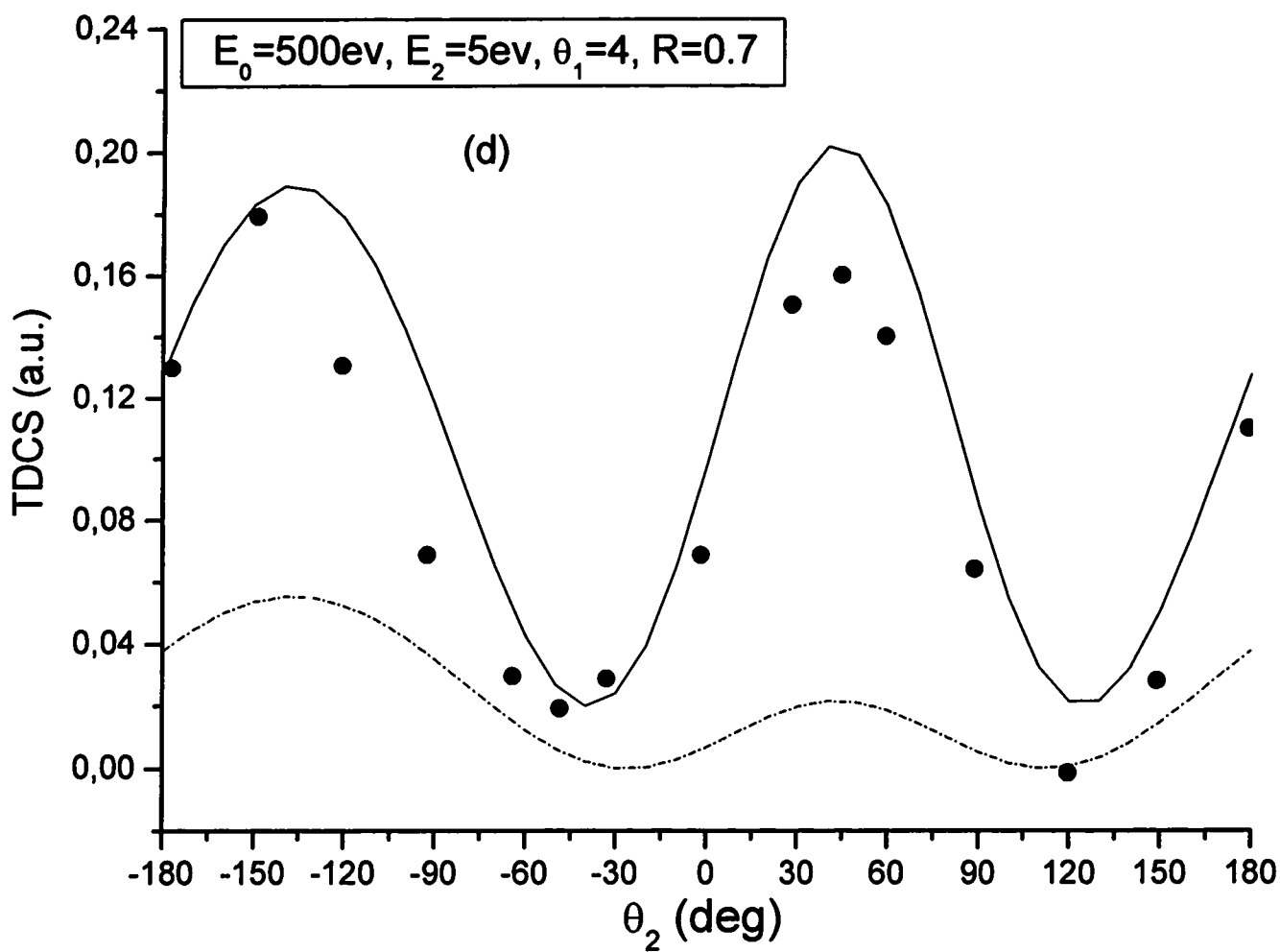
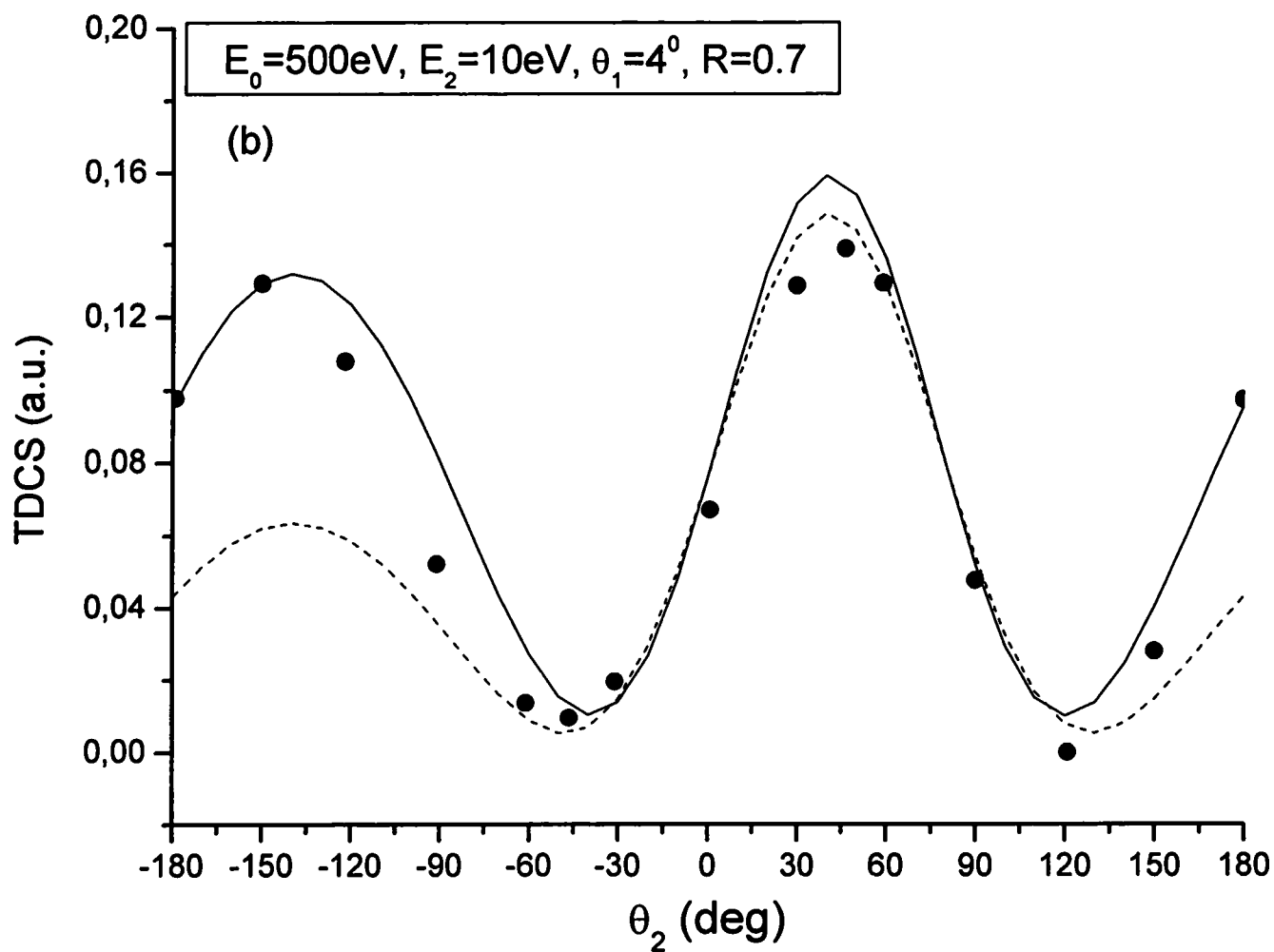


Fig. 4.4(a,b)



b.4.4(c,d)

## დამატება

ჩვენს მიერ მიღებული იქნება ინტეგრალები, რომლებიც გამოყენებული იყო მეოთხე თავში სათვლელი ფორმულების მისაღებად.

$$I = \int_R^{\infty} e^{-\alpha r} \sin(kr) r dr \quad (5.1)$$

ინტეგრალი აიღება ნაწილობითი ინტეგრების გამოყენებით. ვაინტეგრით ორჯერ ნაწილობითი ინტეგრებით:

$$\begin{aligned} I &= \int e^{-\alpha r} \sin(kr) r dr = -\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha} r \sin(kr) + \\ &\int \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha} (\sin(kr) + kr \cos(kr)) dr = -\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha} r \sin(kr) - \\ &-\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha^2} (\sin(kr) + kr \cos(kr)) + \int \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha^2} (2k \cos(kr) - k^2 r \sin(kr)) dr \end{aligned} \quad (5.2)$$

შემოვიტანოთ აღნიშვნა:

$$A = \int e^{-\alpha r} \cos(kr) dr \quad (5.3)$$

და თუ გავითვალისწინებთ იმას, რომ ბოლო წევრი საძიებელი ინტეგრალია, მივიღებთ:

$$I = -\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha} r \sin(kr) - \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha^2} (\sin(kr) + kr \cos(kr)) + \frac{2k}{\alpha^2} A - \frac{k^2}{\alpha^2} I, \quad (5.4)$$

მაშინ საძიებელი ინტეგრალი ტოლია:

$$I = \frac{\alpha^2}{k^2 + \alpha^2} \left( -\frac{e^{-\alpha r}}{\alpha} r \sin(kr) - \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha^2} (\sin(kr) + kr \cos(kr)) + \frac{2k}{\alpha^2} A \right) \quad (5.5)$$

A-ს ცხადი სახე მიიღება ასევე ორჯერ ნაწილობითი ინტეგრებით:

$$A = \frac{e^{-\alpha r}}{k^2 + \alpha^2} (k \sin(kr) - \alpha \cos(kr)) \quad (5.6)$$

შევიტანოთ (5.6) (5.5). გამარტივების შემდეგ მივიღებთ:

$$I = \frac{e^{-\alpha r}}{k^2 + \alpha^2} \left( \left( \frac{2k\alpha}{k^2 + \alpha^2} + kr \right) \cos(kr) - \left( \frac{k^2 - \alpha^2}{k^2 + \alpha^2} + \alpha r \right) \sin(kr) \right) \quad (5.7)$$

ინტეგრალი

$$I = \int \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} d\vec{r} \quad (5.8)$$

გამოითვლება შემდეგნაირად:

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r} d\vec{r} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikr \cos \theta}}{r} r^2 dr \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = \\ &= -2\pi \int_0^\pi \int_0^\pi e^{ikr \cos \theta} r dr d \cos(\vartheta) = 4\pi \int_0^\infty \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{2ikr} r dr = 4\pi \int_0^\infty \sin(kr) r dr \end{aligned} \quad (5.9)$$

(5.9) ინტეგრალის კრებადობისათვის იგი გადავწეროთ შემდეგნაირად

$$I = 4\pi \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \sin(kr) r dr = 4\pi \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2k\alpha}{(k^2 + \alpha^2)^2} = \frac{4\pi}{k^2} \quad (5.10)$$

ინტეგრალი

$$I = \int_R e^{-2\alpha r} d\vec{r} \quad (5.11)$$

გამოითვლება შემდეგნაირად:

$$\begin{aligned} I &= \int_R e^{-2\alpha r} d\vec{r} = \int_R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-2\alpha r} r^2 dr \sin(\vartheta) d\vartheta d\varphi = 4\pi \int_R e^{-2\alpha r} r^2 dr = \\ &= 4\pi \left( -\frac{e^{-2\alpha r}}{2\alpha} r^2 + \int \frac{e^{-2\alpha r}}{\alpha} r dr \right) \Bigg|_R^\infty = 4\pi \left( -\frac{e^{-2\alpha r}}{2\alpha} r^2 - \frac{e^{-2\alpha r}}{2\alpha^2} r + \int \frac{e^{-2\alpha r}}{2\alpha^2} dr \right) \Bigg|_R^\infty = \\ &= 4\pi \left( -\frac{e^{-2\alpha r}}{2\alpha} r^2 - \frac{e^{-2\alpha r}}{2\alpha^2} r - \frac{e^{-2\alpha r}}{4\alpha^3} \right) \Bigg|_R^\infty = \frac{e^{-2\alpha R}}{\alpha^3} (2\alpha^2 R^2 + 2\alpha R + 1) \end{aligned}$$

## დასკვნა

დისერტაცია ეძღვნება მცირეელექტრონიანი ატომების ერთჯერადი იონიზაციის ერთიან თეორიულ შესწავლას სამნაწილაკობრივი მიდგომის საფუძველზე. მიღებულია შემდეგი ძირითადი შედეგები:

- 1) სამი ნაწილაკის გაფანტვის აღსაწერად ბირთვული რეაქციებისთვის შემუშავებული მიახლოებითი მეთოდი, სამნაწილაკობრივი იმპულსური მიახლოება ჩამოჭრით (სიმჩ), განზოგადოებულია ატომური სისტემების იონიზაციის შესასწავლად.
- 2) კვლევის სხვა მიახლოებითი მეთოდებისგან განსხვავებით, შემოთავაზებული მეთოდით აგებული გაფანტვის ამპლიტუდა ეფექტურად უზრუნველყოფს სამნაწილაკობრივი უნიტარობის პირობას.
- 3) სიმჩ-ის ფარგლებში მიღებულია მცირეელექტრონიანი ატომების ერთჯერადი იონიზაციის სრული დიფერენციალური კვეთების ზოგადი გამოსახულებები.
- 4) კონკრეტული გამოთვლები ჩატარებულია  $H(e,2e)H^+$ ,  $He(e,2e)He^+$  და  $Li^+(e,2e)Li^{++}$  იონიზაციის რეაქციებისთვის.
- 5) ნაჩვენებია, რომ ჩამოჭრის პროცედურა, რომელიც ეფექტურად აღადგენს ამპლიტუდის უნიტარობის თვისებას, მნიშვნელოვნად ცვლის დიფერენციალური კვეთის როგორც სიდიდეს, ასევე ფორმას და აუმჯობესებს თანხმობას ექსპერიმენტულ მონაცემებთან.

ავტორი დიდ მადლობას უხდის მეცნიერ ხელმძღვანელს, პროფ. ჯემალ მებონიას სადისერტაციო თემის შემოთავაზებისა და მასზე მუშაობის დროს გა-წეული დახმარებისთვის.

დიდი სითბოთი მინდა მადლობა გადავუხადო ჩემს თანაავტორებს ზოგადი ფიზიკის კათედრის თანამშრომლებს პ. სარალიძეს, ვ. ჯიქიას, ფიზ.-მათ. მეც. კანდიდატს კ. სულაკაძეს წლების განმავლობაში თანამშრომლობისთვის.

მადლობას ვუხდი ზოგადი ფიზიკის კათედრის უფრ. მეც. თანამშრომელს ფიზ.-მათ. მეც. კანდიდატს ზ. მაჭავარიანს, აზრთა გაზიარებისთვის და სასარგებლო რჩევებისთვის.

მადლობას ვუხდი აგრეთვე ფიზიკის ფაკულტეტის თანამშრომლებს ფიზ. მათ. მეც. დოქტორს ლ. ჭოტორლიშვილს და ბირთვული ფიზიკის კათედრის თანამშრომელს ვ. ბოჭორიშვილს გაწეული თანადგომისა და ტექნიკური დახმარებისთვის.

## ლიტერატურა

1. P.Defrance, F.Brouillard, W. Claeys, G.Van Wassenhove, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **14** (1981) p.103.
2. M.Brauner, J.S. Briggs and H. Klar, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **22** (1989) p.2265.
3. Y.Attaourti, P.Defrance, A.Makhoute, C.J. Joachain, Physica Scripta **43** (1991) p.578.
4. J.Röder, H. Ehrhardt, Bray Igor, V. Fursa Dmitry, McCarthy Ian E, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29** (1996) p.67.
5. O. Rath Spivack, J.Raseh, T. Colm Whelam, R. J Allan., H.R.J.Walters, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31** (1998) p.845.
6. "Физика ион-ионных и электрон-ионных столкновений", под редакцией Бруйта Ф. и Мак-Гоуена Дж., Москва изд. "Мир", (1986)
7. Друкарев Г. Ф., "Столкновения электронов с атомами и молекулами" Москва, Изд. "Наука" (1978).
8. A. Lahmam-Bennani, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **24** (1991) p.2401.
9. A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, Photonic, Electronic and Atomic Collisions. Invited Papers of the Twentieth International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions. Viena, Austria 23-29 July 1997. Editor Fridrich Aumayr Hannspeter Winter. Word scientific Singapore. New Jersey. London. Hong Kong.
- 10.P. Schlemmer, M. K. Srivastava, T. Rösel, and H. Ehrhardt, J. Phys. B **24**, (1991) p.2719.
- 11.R. Müller-Fiedler, P. Schlemmer, K. Jung, and H. Ehrhardt, Z. Phys. A **320**, (1985) p.89.
- 12.Y. Khajuria, D.N. Tripathi, Phys. Rev. A **59** (1999) p.1197
- 13.T. Rösel, C. Dupré, J. Röder, ADuguet, K. Jung, A. Lahmam-Bennani and H. Ehrhardt, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **24** (1991) p.59.

- 14.S. Datz, G. W. F. Drake, T. F. Gallagher, H. Kleinpoppen, G. zu Putlitz, Rev. Mod. Phys. **71** (1999) S223
- 15.J.J. Thomas, Phil. Mag. **23** (1912) p.449.
- 16.Квливидзе В. А., Красильников С. С. Введение в Физику Атомных Столкновений. Москва, Из-во МГУ.
- 17.M.Gryzinski, Phys. Rev. **115** (1959) p. 374.
- 18.M.Gryzinski, Phys. Rev. **A138** (1965) p.305.
- 19.M.Gryzinski, Phys. Rev. Lett. **14** (1965) p.1059.
- 20.A. E. Kingston Phys. Rev. **A135** (1964) p.1537.
- 21.A. E.Kingston J. Phys. B: At. Mol. Phys. **1** (1968) p.559.
- 22.M. R. C.McDowell, Proc. Phys. Soc. **89** (1966) p.23.
- 23.R.Abrines, I. C.Percival, Proc. Phys. Soc. **88** (1966) p.861.
- 24.R.Abrines, I. C.Percival, N.A.Valentin, Proc. Phys. Soc. **89** (1966) p515.
- 25.L.Friens, T. F. M.Bonson, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **1** (1968) p.1123.
- 26.R. L. Bell, H. W.Freeston, A. E.Kingston, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **3** (1970) p.959.
- 27.A.Burgess, Proc. of the 3rd ICPEAC, London 1963 (ed. M.R.C. McDowell), North-Holland Publ. Comp. (1964) p.237.
- 28.A. Kumar, B. N.Roy, Phys. Lett. A **66** (1978) p.362.
- 29.B. K.Thomas, D. J.Garcia, Phys. Rev. **179** (1969) p.94.
- 30.Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц “Квантовая механика” Том 3 Москва изд. “Наука” 1989 г.
31. გ. ა. ჭილაშვილი, ორი და სამი სხეულის კვანტური მექანიკა (1973).
- 32.H.bethe, Ann. d. Phys. **5** (1930) p.325.
- 33.M. R. H. Rudge Rev. Mod. Phys. **40** (1968) p.564.
- 34.R. K.Peterkop, Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact, Colorado Associated University Press: Colorado, USA, (1977)
- 35.J.A. Michael, thesis, Case Institute of Thechnology (unpublished), 1963.
- 36.M.R.H. Rudge, Rev. Mod. Phys. **40** (1968) p. 564.

- 37.L. Klieb, H. P. C. Rood, Phys. Rev. C **29** (1984) p. 215.
- 38.M. B. Epstein, Phys. Rev. Letters **44** (1980) p.20.
- 39.F.Takeutchi, *at al* , Nuc. Phys. A **152** (1970) p. 434.
- 40.Robert C. Stabler, Phys. Rev. A **133**, (1964) p. 1268.
- 41.J. E. Miraglia, J. Macek, Phys. Rev. A **43** (1991) p.5919.
- 42.R. Akerib, S. Borowitz, Phys. Rev. **122**, (1961) p.1177.
- 43.P. G. Burke and A. J. Taylor, Proc. Roy. Soc. (London) A **287** (1965) p.105.
- 44.E. Gerjuoy and B.K. Thomas, Rep.Prog. Phys. **37** (1974) p.1345.
45. B.K. Thomas, Bull. Am. Phys. Soc. **19**, (1974) p.1191.
46. M.B.Hidalgo, J.H. McGuire, and G.D. Doolen, J. Phys. B **5** (1972) L70.
47. J.H. McGuire, M.B. Hidalgo, G.D.Doolen, and J.Nuttall, Phys. Rev. A **7** (1973) p.973.
48. J.E. Golden and J.H. McGuire, Phys. Rev. Lett. **32** (1974) p.1218.
49. J.E. Golden and J.H. McGuire, Phys. Rev. A **12** (1975) p.80.
- 50.J.E. Golden and J.H. McGuire, Phys. Rev. J. Phys. B **9** (1976) L11.
51. J.E. Golden and J.H. McGuire, Phys. Rev. A **13** (1976) p.1012.
52. J.E. Golden and J.H. McGuire, Phys. Rev. A **15** (1977) p.499.
53. A. Tsuji, A. Miyamoto, and H. Narumi, Prog. Theor. Phys. **50** (1973) p.338.
54. H. Narumi, A. Tsuji, and A. Miayamoto, Prog. Theor. Phys. **54** (1975) p.740.
- 55.A. Temkin, Phys. Rev. **126** (1962) p.130.
56. R. Poet, J. Phys. B **11** (1978) p.3081.
- 57.I. Bray and A. T. Stelbovics, Phys. Rev. Lett. **69**, (1992) p.53.
- 58.I. Bray and A. T. Stelbovics, Phys. Rev. A **46** (1992) p.6995.
59. J. Callaway and D. H. Oza, Phys. Rev. A **29**, (1984) p.2416.
60. D. Kato and S. Watanabe, Phys. Rev. Lett. **74**, (1995) p.2443.
61. K. W. Meyer, C. H. Greene, and I. Bray, Phys. Rev. A **52**, (1995) p.1334.
62. W. Ihra, M. Draeger, G. Handke, and H. Friedrich, Phys. Rev. A **52**, (1995) p.3752.
63. M. S. Pindzola and D. R. Schultz, Phys. Rev. A **53**, (1996) p.1525.

- 64.K. Bartschat and I. Bray, Phys. Rev. A **54** (1996) p.1002.
- 65.I. Bray, Phys. Rev. A **49**, (1994) p.1066.
66. D. V. Fursa and I. Bray, Phys. Rev. A **52**, (1995) p.1279.
- 67.I. Bray and A. T. Stelbovics, Phys. Rev. Lett. **70**, (1993) p.746.
- 68.K. Bartschat and I. Bray, J. Phys. B **29**, (1996) L577.
- 69.I. Bray, I. E. McCarthy, J. Wigley, and A. T. Stelbovics, J. Phys. B **26**, (1993) L831.
- 70.I. Bray, Phys. Rev. Lett. **73**, (1994) p.1088.
- 71.A. R. Johnston and P. D. Burrow, Phys. Rev. A **51**, (1995) R1735.
- 72.I. Bray and D. V. Fursa, Phys. Rev. Lett. **76**, (1996) p.2674.
- 73.J.V. Mebonia, Phys.Lett. B **48**, (1974) p.196.
- 74.J.V. Mebonia, Т.И. Кваракелиа Phys.Lett. B **90**, (1980) p.17.
- 75.Дж. Мебониа, Т. Кварацхелиа Сообщения АНГССР Т **136** (1989) с.53.
- 76.Дж. Мебониа, Т. Кварасхелиа, В. Джикиа, ЯФ. Т.**58** (1995) с. 30.
- 77.Дж. Мебониа, К.Сулакадзе, П. Саралидзе, Г. Схиртладзе, ЯФ. Т. **133** (2003) с. 987.
- 78.J. Mebonia, V. Jikia, G. Skhirtladze, Bull. Georg. Acad. Sc. V **165**, N 2, (2002) p.271.
- 79.J. Mebonia, G. Skhirtladze, Bull. Georg. Acad. Sc. V **170**, N 2, (2004) p.266.
- 80.J. Mebonia, G. Skhirtladze, Bull. Georg. Acad. Sc. V **171**, N 2, (2005) p.226.
- 81.Фаддеев Л.Д., Теория рассеяния для системы из трех частиц. ЖЭТФ, Т **39** (1960) с.1459.
- 82.G.F. Chew the impulse approximation. Phys.Rev. V **85** (1952) p.636.
- 83.K.L.Lim, I.E. McCarthy, Nucl.Phys. V **88** (1966) p.433.
84. Г.В.Аваков, Э.И.Долинский, В.В. Туровцев, ЯФ. Т **37**, (1983) с.322.
- 85.J. mebonia, Phys. Lett. B **30** (1969) p. 153.
- 86.V.V. Balashov, J.V. Mebonia, Nucl.Phys. V. **A107** (1968) p.369.
- 87.J.V.Mebonia, Т.И. Кваракелиа, Phys.Lett. V. **B138** (1984) p.257.
- 88.E. A.Hylleraas, Z. Phys. **48** (1928) p.469.

89. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **54** (1929) p.347.
90. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **60** (1930) p.624.
91. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **63** (1930) p.291.
92. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **65** (1930) p.209.
93. Стригалов А. Р., Свентицкий И. С., Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизованных атомов. Москва, Атомиздат (1966) ю
94. J. Mebonia, V. Jikia, G. Skhirtladze, Bull. Georg. Acad. Sc. V **165**, N 1, (2002) p.40.
95. H. Ehrhardt, M. Fischer, K. Jung, F. W. Byron, C. J. Joachain and B. Piraus Phys. Rev. Lett. **48** (1982) p. 1807.
96. H. Ehrhardt, K. Jung, G. Knoth and P. Schlemmer, Z. Phys. **D 1** (1986) p.3
97. Y. Khajuria, D. N. Tripathi, Phys. Rev. A **59** (1999) p.1197.
98. H. Klar, A.C. Roy, P. Schlemmer, K. Jung and H. Ehrhart J. Phys. B: At. Mol. Phys. **20** (1987) p.821.