

## MŰSZAKI SZEMLE

41. szám, 2008.

**Szerkesztőbizottság elnöke /  
President of Editing Committee**

Dr. Köllő Gábor

**Szerkesztőbizottság tagjai /  
Editing Committee**

Dr. Balázs L. György – HU,  
Dr. Biró Károly Ágoston – RO,  
Dr. Csibi Vencel-József – RO,  
Dr. Fedák László – UA,  
Dr. Kása Zoltán – RO,  
Dr. Kászonyi Gábor – HU,  
Dr. Majdik Kornélia – RO,  
Dr. Maros Dezső – RO,  
Dr. Nagy László – RO,  
Dr. Pécs Hajnalka – YU,  
Dr. Puskás Ferenc – RO,  
Dr. Szalay György – SK,  
Dr. Turchany Guy – CH

**Kiadja / Editor**

Erdélyi Magyar Műszaki  
Tudományos Társaság – EMT  
Societatea Maghiară Tehnico-Științifică  
din Transilvania  
Ungarische Technisch-Wissenschaftliche  
Gesellschaft in Siebenbürgen  
Hungarian Technical Scientific Society  
of Transylvania

**Felelős kiadó / Managing Editor**

Dr. Köllő Gábor

**A szerkesztőség címe / Address**

Romania  
400604 Cluj, Kolozsvár  
B-dul 21. Decembrie 1989., nr. 116.  
Tel/fax: 40-264-590825, 594042  
Levélcím: RO – 400750 Cluj, C.P. 1-140.

**Nyomda / Printing**

Incitato Kft.

**ISSN 1454-0746**

**CNCSIS által elismert folyóirat  
Revistă acreditată de CNCSIS**

[www.emt.ro](http://www.emt.ro)

[emt@emt.ro](mailto:emt@emt.ro)

## Tartalomjegyzék – Content– Cuprins

Részecskeszimulációs módszerek alkalmazása az alacsony hőmérsékletű plazmafizikában Application of Particle Simulation Methods in Low-temperature Plasma Physics Aplicația simulării de particule în fizica plasmei de temperatură joasă	<b>3</b>
<b>DONKÓ Zoltán</b>	
Az általánosított Berggren-reprezentáció használata magszerkezet számolásban The application of the generalized Breggen-representation in the Calculation of Nuclear Structure Aplicația reprezentăției generalizate Breggen în calculul structurii nucleare	<b>9</b>
<b>T. VERTSE, R. I. BETAN, R. J. LIOTTA, N. SANDULESCU, R. WYSS</b>	
Atomi ütközési folyamatok tanulmányozása klasszikus pályájú Monte Carlo módszerrel Investigation of Atomic Collisions within the Framework of the Classical Trajectory Monte Carlo Method Studiul ciocnirilor atomice prin metoda Monte Carlo cu traiectorie clasice	<b>13</b>
<b>TŐKÉSI Károly</b>	
Teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítása félklasszikus, impakt-paraméter közelítésben Calculation of Fully Differential Cross Sections with Semi-classical, Impact Parameter Method Calcularea secțiunilor eficiente totale diferențiale prin metoda semiclassicală parametru de impact	<b>18</b>
<b>JÁRAI-SZABÓ Ferenc, NAGY László</b>	
Az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet tanulmányozása H <sub>2</sub> molekula esetében Study of Ionization Differential Cross Section in Case of H <sub>2</sub> Molecule Studiul secțiunii eficiente de ionizare în cazul moleculei H <sub>2</sub>	<b>24</b>
<b>PÓRA Katalin, NAGY László</b>	
Molekulák pozitronnal történő ionizációja Ionization of Molecules by Positron Impact Ionizarea moleculelor prin impact pozitronic	<b>29</b>
<b>TÓTH István, Radu I. CAMPEANU, Vasile CHIȘ, NAGY László</b>	
Atomok (molekulák) fotoionizációja során jelentkező rezonanciahatások Resonance Effects in the Photoionization of Atoms (molecules) Efecte de Rezonanță în Fotoionizarea Atomilor (moleculelor)	<b>35</b>
<b>BORBÉLY Sándor, NAGY László</b>	

A kiadvány megjelenését támogatta



COMMUNITAS  
ALAPÍTVÁNY

Communitas Alapítvány – Kolozsvár



Eurotrans Alapítvány – Kolozsvár

# Részecskeszimulációs módszerek alkalmazása az alacsonyhőmérsékletű plazmafizikában

## Application of Particle Simulation Methods in Low-temperature Plasma Physics

DONKÓ Zoltán, DSc

Magyar Tudományos Akadémia Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézete (MTA-SZFKI)  
H-1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.  
email: donko@sunserv.kfki.hu, <http://plasma.szfki.kfki.hu/~zoli>

### ABSTRACT

*The application of particle simulation techniques in low-temperature plasma physics is reviewed and illustrated with examples: (i) Monte Carlo simulations used for description of nonequilibrium charged particle transport in low-pressure gas discharges, and (ii) Molecular Dynamics simulations of strongly-coupled many-particle systems formed in dusty plasma liquids.*

### ÖSSZEFOGLALÓ

*A cikk részecskeszimulációra alapuló számítógépes modellezési módszerek egyes alkalmazásait mutatja be az alacsonyhőmérsékletű plazmafizika területén. Példákkal illusztrálja (i) a töltött részecskék mozgásának Monte Carlo típusú leírását elektromos térben, valamint (ii) komplex plazmákban létrehozott plazmafolyadékok, mint erősen kölcsönható sokrészecske-rendszerek molekuladinamikai szimulációját.*

**Kulcsszavak:** nemegyensúlyi transzport, Monte Carlo szimuláció, komplex plazmák, molekuladinamikai szimuláció, kollektív jelenségek

### 1. BEVEZETÉS

Az Univerzum látható anyagának túlnyomó része plazma állapotban található. A természetben és laboratóriumi körülmények között előállított plazmákra jellemző részecskesűrűség és részecskeenergia rendkívül tág határok között változik. A plazmák egyes típusainak leírásához természetesen különböző matematikai megközelítés használható. Egyes esetekben a részecske típusú leírás előnyösen alkalmazható, az ehhez a körhöz tartozó módszerek alkalmazhatósági lehetőségei, a számítástechnikai eszközök fejlődésének köszönhetően egyre bővülnek.

A mesterségesen előállított plazmák egyes típusai gyakorlati szempontból is igen jelentősek. Ilyenek például a kis ionizáltsági fokú ködfénykisülések, amelyek széleskörűen alkalmazhatók fényforrásokban, integrált áramkörök gyártásának technológiai lépéseiben, gázlézerekben. Ezen gázkisülések elemi folyamatok szintjén való megértése a tudományos ismeretek megszerzésén kívül az alkalmazások szempontjából is rendkívül fontos. Az alacsony nyomású ködfénykisülések esetében e célra hatékonyan alkalmazható a töltött részecskék mozgásának *Monte Carlo* típusú leírása, amellyel egyes részecskék pályája és ütközési folyamatai követhetők.

A plazmák legtöbb típusában a részecskék kölcsönhatásából származó (potenciális) energia általában több nagyságrenddel kisebb a hőmozgásból adódó kinetikus energiánál, a plazmák egyes típusaiban azonban fordított helyzet is előállhat. Ilyen, ún. *erősen csatolt* (potenciális energia által dominált, nemideális) plazmákra példa a neutroncsillagok köpenyében, fehér törpe csillagokban, óriásbolygók belsejében található anyagállapot. Mesterségesen létrehozott erősen csatolt plazmákra példaként említhetők a csapdában tárolt ionok. További fontos rendszerek a komplex (poros) plazmák, amelyekben az elektronok, ionok és semleges gázatomok (molekulák) mellett nanométer – mikrométer méretű részecskék is jelen vannak. Ilyen rendszerekre aszt-

rofizikai példaként a csillagközi por, az üstökösök csóvjaja, egyes bolygók gyűrűi említhetők. A porrészecskék elektromosan töltötté válhatnak, így a plazma többi összetevőjével kölcsönhatásba kerülnek és azokhoz hasonlóan reagálnak a külső elektromos és mágneses térre. Mivel a (viszonylag) nagy méretű porrészecskék nagy töltést vehetnek fel, így a porrészecskék gyakran erősen csatolt rendszert alkotnak, plazmakristályok keletkezhetnek. Az erősen csatolt plazmák termodinamikai jellemzői, transzportjelenségei és kollektív gerjesztései hatékonyan tanulmányozhatók *molekuladinamikai szimuláció* alkalmazásával.

## 2. ELEKTRONOK MOZGÁSÁNAK LEÍRÁSA GYENGÉN IONIZÁLT PLAZMÁKBAN

A töltéshordozók mozgásának leírása a gázkisülési modellek alapja. A következőkben először olyan alacsony ionizációs fokú plazmák esetét vizsgáljuk, amelyekben elhanyagolható a töltött részecskék közötti direkt kölcsönhatás (pl. elektron-elektron ütközések) és ennek köszönhetően csak a töltött részecskék (elektronok vagy ionok) transzportját kell leírni a semleges gázban. A legegyszerűbb esetet a homogén és stacionárius  $E$  elektromos térerősséggel jellemzett, végtelen kiterjedésű tér esete jelenti. Ilyen körülmények között a részecskék mozgása jól jellemezhető a transzportegyütthatókkal: a mozgékonyssággal, valamint a diffúziós együtthatókkal. A homogén és stacionárius elektromos tér, valamint a végtelen kiterjedésű vizsgált tartomány feltételezésének köszönhetően a részecskék mozgása az elektromos térrel egyensúlyban van, a transzportegyütthatók az  $E/n$  redukált elektromos térerősség függvényei [1]. Ezt az *egyensúlyi*, vagy *hidrodinamikai transzport* esetének nevezzük, amelynek matematikailag megfogalmazott feltétele, hogy az egyes ütközések között az elektromos térerősség térben ne változzon lényegesen:  $\lambda (dE/dx) \ll E$ , illetve időben:  $v^{-1}(dE/dt) \ll E$ , ahol  $\lambda$  az ütközési szabad úthossz,  $v$  pedig az ütközési frekvencia. Laboratóriumi gázkisülések esetében – az előbbi feltételezésekkel ellentétben – a vizsgált térrész mindig véges: fém és/vagy dielektrikum falak határolják, továbbá sok esetben a térerősség térben és időben változik.

Townsend kisülésekben (ahol ugyan homogén és stacionárius elektromos tér van jelen) a katódból kilépő elektronoknak bizonyos út megtételére szükségük van ahhoz, hogy felvegyék az adott  $E/n$  redukált elektromos térerősségnek megfelelő sebességet [2]. Ezután transzportjuk egyensúlyi jellegűvé válik, egészen addig, amíg az anód közelébe jutnak, az ugyanis az elektronokat abszorbeálja és emiatt az anód környezetében a sebességeloszlás függvényük alakja torzul az egyensúlyihoz képest. A helyzet tovább bonyolódik a hidegkatódú ködfénykisülések katódja közelében, ahol a számottevő töltéssűrűség hatására térben gyorsan változó elektromos térerősség van jelen,  $(dE/dx)\lambda \sim E$ , így nem teljesül a hidrodinamikai transzport feltétele. Ködfénykisülésekben a hidrodinamikai közelítés a negatív fény létét sem tudja magyarázni, ez ugyanis egy olyan tartomány, ahol az elektromos térerősség közel nulla, az ionizáció és a gerjesztés foka viszont jelentős, a katód sötétteréből beinjektált gyors elektronoknak köszönhetően. Megállapíthatjuk tehát, hogy a nagy elektromos térerősség-gradiens és az elektródák jelenléte a töltéshordozók mozgásában külön-külön is nemegyensúlyi (nemhidrodinamikai) effektusokat eredményeznek. Hasonló viselkedéshez vezethet az elektromos térerősség időbeli gyors változása. A nemegyensúlyi transzport leírására lényegében két alternatíva kínálkozik: a *Boltzmann egyenlet* megoldása, illetve a *Monte-Carlo típusú részecskeszimulációs* módszerek alkalmazása.

A Boltzmann-egyenlet – mely általános alakjában egy, a 6-dimenziós fázistérben felírt folytonossági egyenlet – megoldása általános esetben (3-dimenziós, időfüggő probléma) igen nehéz (gyakran reménytelen) feladat. Stacionárius megoldást keresve, illetve a térbeli dimenziószámot csökkentve (pl. 1-dimenziós, vagy hengerszimmetrikus rendszert feltételezve) az egyenlet egyszerűbb alakra hozható. Megoldására azonban ezekben az esetekben is igen bonyolult numerikus módszereket használnak [3]. Míg a Boltzmann-egyenlet a részecskék eloszlásfüggvényével manipulál, addig az alternatívát jelentő Monte-Carlo (MC) szimuláció egyes részecskék követésén alapul, és a sokaságra jellemző paramétereket az egyes részecskék jellemzőinek átlagolásával adja meg. Ily módon a szimuláció alkalmazásával valós képet kaphatunk a lejátszódó folyamatokról, egyszerűen vizsgálható az események statisztikája. A vizsgált részecske követéséhez a Monte-Carlo szimulációban egyidejűleg kell integrálni a részecske  $\mathbf{r}(t)$  trajektóriáját megadó mozgásegyenletet két ütközés között:

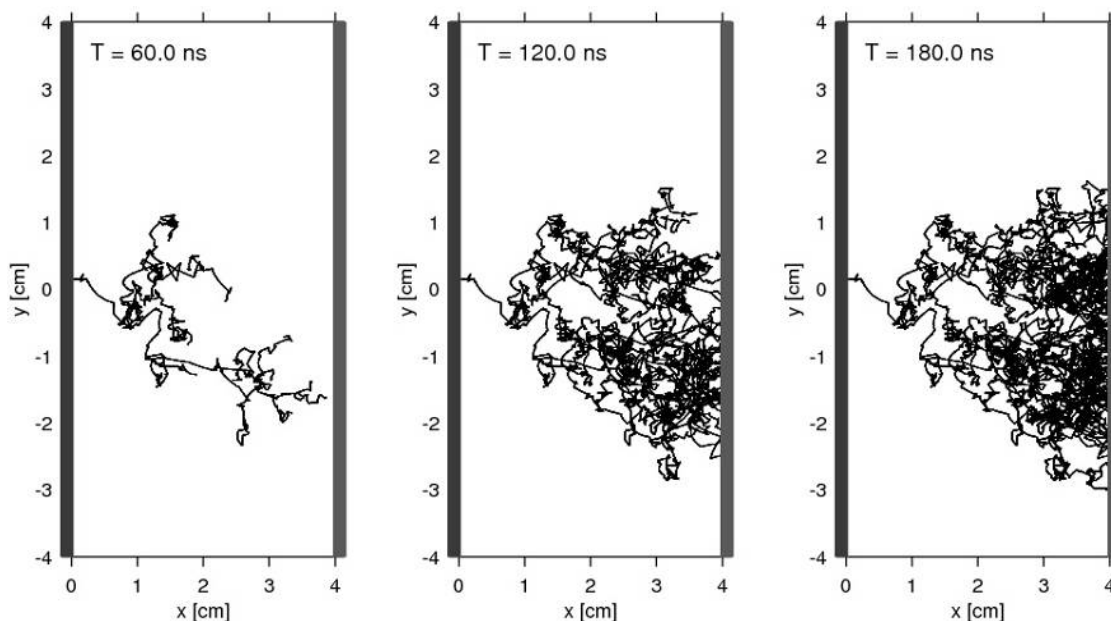
$$m \frac{d^2 \mathbf{r}(t)}{dt^2} = q \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

és a következő ütközés helyének meghatározására szolgáló egyenletet:

$$\int_{s_0}^{s_1} n \sigma[\varepsilon(s)] ds = -\ln(1 - R_{01}), \quad (2)$$

ahol  $q$  és  $m$  a részecske töltése és tömege,  $s_0$  és  $s_1$  az előző és a következő ütközés pozíciója a részecske pályája mentén,  $\sigma$  az ütközési folyamatok hatáskeresztmetszeteinek összege, amely az  $\epsilon$  részecskeenergia függvénye, és  $R_{01}$  a  $[0,1)$  intervallumon egyenletes eloszlású véletlenszámot jelöl. Az utóbbi egyenletet  $s_1$ -re kell megoldani, a trajektóriaszakasz elején generált  $R_{01}$  véletlenszámmal. A szabad úthossz befutása után a részecske különböző ütközési folyamatokban vehet részt. Az egyes folyamatok bekövetkezésének valószínűsége arányos az ütközési energiánál vett megfelelő hatáskeresztmetszet-értékekkel. (Elektronok esetében a figyelembe vett ütközési folyamatok általában a rugalmas szórás, az atomok gerjesztése és ionizációja.)

A Monte Carlo szimuláció működésének illusztrálására az 1. ábra egy elektronlavina (ionizációkkal történő elektronsokszorozódás) időbeli fejlődését mutatja. A szimuláció paraméterei: argon gáz 41.1 Pa nyomáson, 4 cm elektródátávolság, 200 V feszültség. A lavina egy, a katódból (ábrán bal oldali elektródából) kilépő elektron hatására indul meg.



1. ábra

*Egy elektronlavina növekedése az idő függvényében:  
pillanatképek az elektronok trajektóriáinak Monte Carlo szimulációjából.*

*A katód minden esetben a bal oldali ( $x = 0$  cm),  
az anód a jobb oldali ( $x = 4$  cm) elektróda. A vonalak az egyes elektronok pályáit mutatják, a törések ütközési folyamatokat jelölnek, az elágazások ionizációs folyamatoknak felelnek meg*

Az elektronlavinák pontos leírása alapvető fontosságú a gázkisülésfizika egyik legalapvetőbb jelenségének, a gáz átütésének, elektromos vezető állapotba kerülésének tanulmányozásánál. Az átütési folyamat lényege (első közelítésben) ugyanis az, hogy az elektronlavinákban keletkezett pozitív ionok a katód felületére érve onnan újabb elektronokat válthatnak ki, és így az idő függvényében, makroszkopikus szinten is egy önfenntartó töltéssokszorozódási folyamat alakul ki. A Monte Carlo szimuláció a gázok átütésének vizsgálatában mára elterjedt módszerré vált. Emellett az eljárás fontos szerepet kap kifejtett ködfénykisülések szimulációjánál is, ahol többnyire egy folyadékmodellel együtt alkalmazzák. Az ilyen, ún. *hibrid* modellekben [4-6] a Monte Carlo szimulációt a gyors, az elektromos téreloszlással nem egyensúlyban lévő elektronok mozgásának és ütközési folyamatainak leírására és így a pontos ionizációs forrásfüggvény meghatározására használják, mely aztán bemenő adatként szolgál a lassú elektronokat és az ionokat leíró folyadékmodell számára. A Monte Carlo szimuláció ugyancsak fontos szerepet kap az ún. Particle-in-Cell (PIC) szimulációs módszerben [7], amely többek között gázkisülések önkonzisztens leírására alkalmazható. Ütközéses plazmák szimulációja esetében a PIC módszerben a Monte Carlo módszer alapján határozható meg az egyes részecskék ütközésének pozíciója és az ütközések típusa.

### 3. ERŐSEN CSATOLT PLAZMAFOLYADÉKOK SZIMULÁCIÓJA

Erősen csatolt plazmák alatt olyan tulajdonságokkal bíró rendszereket értünk, ahol az elektromosan töltött részecskék kölcsönhatásából származó potenciális energia (lényegesen) felülmúlja a kinetikus energiát. Coulomb-kölcsönhatást feltételezve és a potenciális energiát egy karakterisztikus  $a$  távolság mellett számítva, a potenciális és kinetikus energia  $E_{\text{kin}} \sim kT$  hányadosaként definiálható *csatolási paraméter*:

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{akT}, \quad (3)$$

ahol  $q$  a részecskék töltése,  $a$  pedig a *Wigner-Seitz sugár* (amely 3 dimenzióban az egy részecskére eső térfogatnak megfelelő gömb sugara, kétdimenziós rendszerek esetében pedig az egy részecskéhez tartozó kör alakú tartomány sugara). Erősen csatolt plazmákról  $\Gamma \gg 1$  esetében beszélünk [8]. Az erősen csatolt plazmák különböző számú komponensből állhatnak, amelyek jellemzői több paraméter tekintetében eltérhetnek. A legegyszerűbb esetet az *egykomponensű plazmák* jelentik, amelyekben csak egyféle töltött részecskét kell explicit módon figyelembe venni a modellben, ezen komponens töltését rendszerint egy ellentétes töltésű részecskéből álló, elkent háttér semlegesíti. Amennyiben ez a háttér nem polarizálható (sűrűségeloszlása egyenletes), a plazma részecskéi között Coulomb-kölcsönhatás érvényesül. Polarizálható háttér esetében a részecskék töltését a háttér leárnyékolja, így kölcsönhatásukat a Yukawa-potenciál írja le. A Yukawa-kölcsönhatással jellemezhető rendszerek közé tartoznak a *poros plazmák*, amelyekben az atomi méretekhez képest makroszkópikus részecskék számottevő töltést vehetnek fel, és a háttérplazmán belül egy erősen csatolt rendszert hozhatnak létre. A töltött porrészecskék közötti taszítást a plazma mikroszkópikus összetevői leárnyékolják és így a részecskék kölcsönhatásából származó potenciális energia:

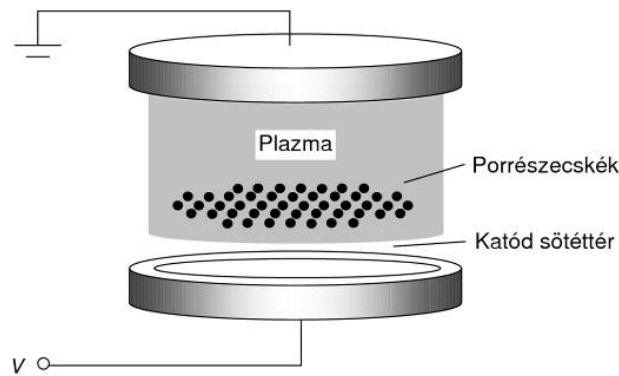
$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2 \exp(-r/\lambda_D)}{r}, \quad (4)$$

ahol  $\lambda_D$  a Debye-hossz. A Wigner-Seitz sugár és a Debye-hossz hányadosaként határozható meg a dimenziótlan árnyékolási paraméter:  $\kappa = a / \lambda_D$ . Poros plazmák laboratóriumi körülmények között is előállíthatók gázki-sülésekben (2. ábra). A rádiófrekvenciásan táplált elektróda (illetve egyenfeszültségű táplálás esetén a katód) a kisülés alján helyezkedik el. A kisülésbe egy speciális adagoló segítségével mikrométer mérettartományba eső részecskéket juttatnak. A porrészecskéket a vertikálisan rájuk ható két legfontosabb erő, a gravitáció és a katód sötéttérben lévő potenciáeloszlásból és por negatív töltéséből adódó, „felfelé” irányuló elektrosztatikus erő tartja egyensúlyban. Az utóbbi években behatóan tanulmányozták a rendszer statikus és dinamikus tulajdonságait a kristályos- és folyadékállapotban [9-10].

A következőkben vázoljuk az erősen csatolt sokrészecske-rendszerek molekuladinamikai leírásának lényegét. Molekuladinamikai szimuláció során nagy számú ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) részecske mozgását vizsgáljuk, ami a részecskék egymás közötti kölcsönhatásának és külső hatásokból származó erőknek a következménye. A  $j$ -edik részecske mozgásegyenlete:

$$m_j \frac{d^2 \mathbf{r}_j}{dt^2} = \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, t) + \mathbf{F}_{\text{ext},j}(\mathbf{r}_j, t), \quad (5)$$

ahol  $m_j$  a részecske tömege,  $F_{ij}$  a  $j$ -edik részecskére a  $i$ -edik részecske által gyakorolt erő, továbbá  $F_{\text{ext}}$  az esetleges külső hatás(ok)ból származó erő. A szimulációkban a részecskék sebességét és pozícióját diszkrét időpillanatokban ismerjük, amelyeket a szimuláció  $\Delta t$  időlépése választ el egymástól. A szimuláció időlépéseiben meg kell keresni az összes lehetséges részecskepárt, minden részecskére meg kell határozni a rá ható eredő erőt, majd kiszámítani a sebesség és a pozíció megváltozását a  $\Delta t$  időlépés alatt. Viszonylag kis számú részecskéből álló, véges rendszer esetén a szimuláció a vázolt algoritmus szerint egyszerűen megvalósítható. A *periodikus határfeltétellel leírt, végtelen kiterjedésű rendszerek* ugyancsak egyszerű esetet jelentenek abban az esetben, ha a kölcsönhatási potenciál rövid hatótávolságú és így egy bizonyos  $R$  távolságon kívül elhanyagolható. *Hosszú hatótávolságú* (pl. a Coulomb-kölcsönhatásból származó) erőknél véges kölcsönhatási tartomány nem adható meg, a részecskékre ható erő kiszámításához a részecskék összes periodikus képét figyelembe kell venni. A példaként bemutatott esetben kihasználjuk a Yukawa-potenciál exponenciális levágását.



2. ábra

*Kétdimenziós poros plazma előállítása alacsony nyomású gázkisülésben. A vertikális összetartás (ami a gravitációból származó erő mellett a kisülés paramétereitől függ) beállításával elérhető, hogy a töltött porrészecskék egy síkban helyezkedjenek el.*

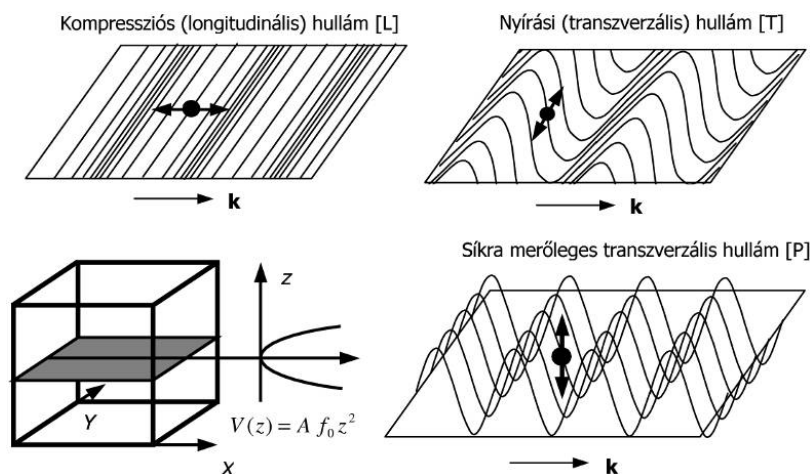
A molekuladinamikai szimuláció módszere lehetőséget ad az erősen csatolt plazmák strukturális és termodinamikai jellemzőinek kiszámítására, valamint dinamikus (kollektív) jelenségeinek vizsgálatára. Itt a továbbiakban egy kvázi-2-dimenziós (egy külső, 1-dimenziós parabolikus potenciál által összetartott) töltésréteg kollektív gerjesztéseire kapott eredményeket [11] mutatjuk be. A 3. ábra a vizsgált rendszerben kialakuló lehetséges hullámokat szemlélteti. A termikusan gerjesztett kollektív módusok spektrumait a longitudinális  $\lambda(k,t)$ , valamint a transzverzális síkbeli  $\tau(k,t)$  és síkra merőleges  $\pi(k,t)$  áramfluktuációk,

$$\lambda(k,t) = k \sum_{j=1}^N v_{jx} \exp(ikx_j), \quad \tau(k,t) = k \sum_{j=1}^N v_{jy} \exp(ikx_j), \quad \pi(k,t) = k \sum_{j=1}^N v_{jz} \exp(ikx_j) \quad (6)$$

Fourier transzformációjával kapjuk meg (példaként az L módot véve):

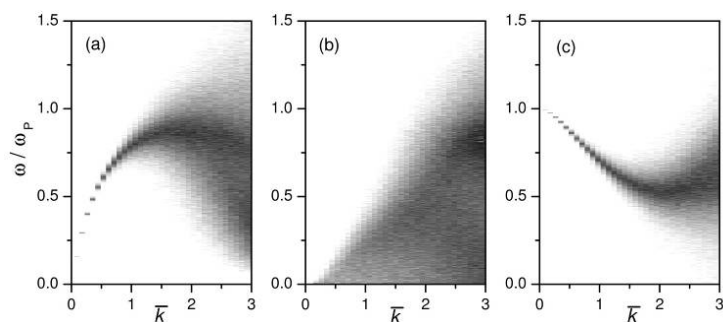
$$L(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |F\{\lambda(k,t)\}|^2, \quad (7)$$

ahol  $k$  a hullámszám,  $T$  pedig a jelregisztrátum ideje.



3. ábra

*Kvázi-2-dimenziós töltésrétegben kialakuló hullámok (kollektív gerjesztések) típusai. A modellben a rendszer összetartását a Z irányban ható parabolikus potenciál biztosítja.*



4. ábra

*Kvazi-2- dimenziós töltésrétegben fellépő kollektív gerjesztések energiataralma a frekvencia – hullámszám síkon,  $\Gamma = 100$ ,  $\kappa = 0.27$  mellett.*

*$\omega_p$  a névleges 2 dimenziós plazmafrekvencia,  $\bar{k} = (ka)$  a normalizált hullámszám [11].*

*(a) L módus, (b) T módus, (c) P módus.*

*A gerjesztéseket a sötét tartományok jelzik, amelyek egyben a diszperziós relációkat is kijelölik.*

*A színskála logaritmikus, csak kvalitatív információt kíván közölni.*

A 4. ábra a három (L, T és P) kollektív módushoz tartozó áramfluktuáció spektrumokat mutatja az  $(\omega, k)$  síkon,  $\Gamma = 100$  és  $\kappa = 0.27$  mellett (mely paramétereknél a rendszer folyadékállapotban van). A sötét szín azt a tartományt jelzi, ahová a módusok energiája koncentrálódik. Ezen tartományok elhelyezkedése jelöli ki a diszperziós relációkat. A longitudinális L módus  $\omega \propto k^{1/2}$  kváziakusztikus viselkedést mutat, kis hullámszámok melletti lineáris szakasszal (amelynek szélessége  $\kappa$  növelésével növekszik). A P módus optikai diszperziót mutat:  $k \rightarrow 0$  esetén véges frekvenciát kapunk, amelynek értékét a parabolikus potenciál amplitúdója szabja meg ( $k = 0$  esetén a teljes réteg együtt rezeg a külső potenciálvölgyben). A hullámszám növekedésével  $\omega$  csökken, majd  $\bar{k} \approx 2.1$  fölött enyhén növekszik. A síkbeli transzverzális T módus spektrumában a gerjesztések csak egy bizonyos  $k_{\min}$  hullámszám fölött jelennek meg, ami a folyadékállapotú rendszerekre jellemző tulajdonság. Az L és P módusokhoz képest az energia eloszlása a T módusban sokkal kevésbé koncentrált, ami a gerjesztések rövid élettartamára utal. A T módus akusztikus jellegű diszperziót mutat [11].

Az ismertetett kutatásokat az OTKA és az MTA támogatja (OTKA-T-48389 and MTA/OTKA-90/46140).

## HIVATKOZÁSOK

- [1] L. C. Pitchford, J. P. Boeuf, P. Segur, and E. Marode, "Non-Equilibrium Electron Transport: A Brief Overview", Proceedings of the Sixth International Swarm Seminar" (1990)
- [2] G. Malović, A. Strinić, S. Živanov, D. Marić, and Z. Lj. Petrović, "Measurements and analysis of excitation coefficients and secondary electron yields in Townsend dark discharges", Plasma Sources Science and Technology 12, S1-S7 (2003)
- [3] D. Loffhagen and R. Winkler, "Spatiotemporal relaxation of electrons in non-isothermal plasmas", J. Phys. D: Appl. Phys. 34, 1355-1366 (2001)
- [4] A. Bogaerts, R. Gijbels, and W. J. C. Goedheer, "Hybrid Monte Carlo-fluid model of a direct current glow discharge", J. Appl. Phys. 78, 2233-2241 (1995);
- [5] A. Fiala, L. C. Pitchford, and J.-P. Boeuf, "Two-dimensional, hybrid model of low-pressure glow discharges", Phys. Rev. E 49, 5607-5622 (1994)
- [6] Z. Donkó, "Hybrid model of a rectangular hollow cathode discharge", Phys. Rev. E 57, 7126-7137 (1998)
- [7] C. K. Birdsall, "Particle-in Cell Charged-Particle Simulations, Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC", IEEE Trans. Plasma Science 19, 65-85 (1991)
- [8] G. J. Kalman, K. B. Blagoev, and M. Rommel (editors), "Strongly Coupled Coulomb Systems", (Plenum Press:NY) 1998
- [9] H. Thomas, G. E. Morfill, and V. G. E. Demmel, "Plasma Crystal: Coulomb Crystallization in a Dusty Plasma", Phys. Rev. Lett. 73, 652-655 (1994)
- [10] S. Nunomura, D. Samsonov, and J. Goree, "Transverse waves in a two-dimensional screened-Coulomb crystal (dusty plasma)", Phys. Rev. Lett. 84, 5141-5144 (2000)
- [11] Z. Donkó, P. Hartmann, and G. J. Kalman, "Collective modes of quasi-two-dimensional Yukawa liquids", Phys. Rev. E 69, 065401 (2004)

# Az általánosított Berggren-reprezentáció használata magszerkezet számolásban

## The Application of the Generalized Berggren-representation in the Calculation of Nuclear Structure

T. VERTSE<sup>1</sup>, R. Id BETAN<sup>2</sup>, R. J. LIOTTA<sup>3</sup>, N. SANDULESCU<sup>4</sup>, R. WYSS<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences  
H-4001 Debrecen, Pf. 51,  
and University of Debrecen, Faculty of Informatics,  
H-4010 Debrecen, Pf. 12, Hungary.

<sup>2</sup>University of Rosario,  
Avenida Pellegrini 250.2000 - Rosario. Santa Fe. Argentina.

<sup>3</sup>Royal Institute of Technology, Alba Nova University Center,  
SE-10691, Stockholm, Sweden.

<sup>4</sup>Institute of Physics and Nuclear Engineering,  
P.O.Box MG-6, Bucharest-Magurele, Romania.

<sup>5</sup>Royal Institute of Technology, Alba Nova University Center,  
SE-10691, Stockholm, Sweden.

### ABSTRACT

*A new unified shell model scheme is introduced in which the single particle basis is a generalization of the Berggren representation. This representation includes antibound states as well. We apply the new scheme to the calculation of the ground state of the exotic <sup>11</sup>Li nucleus. Both the contributions of the antibound state and the complex continuum are important and none of them can be neglected.*

*Egy olyan új egységes héjmodell sémát adunk, amelyben az egyrészecke-bázis a Berggren-reprezentáció általánosítása, amiben virtuális vagy másnéven antikötött bázisállapot is szerepel. Az új sémát a <sup>11</sup>Li egzotikus atommag alapállapotának kiszámítására használjuk. Ebben az esetben a virtuális állapotnak és a komplex kontinuumnak is nagy járuléka van, és ezek egyike sem hanyagolható el.*

### 1. BEVEZETÉS

A kontinuumot is tartalmazó Hamilton-operátor „standard” egyrészecke reprezentációja a következő:

$$\delta(r-r') = \sum_{n=b} u_{nlj}(r, k_n) u_{nlj}(r', k_n) + \int_0^{\infty} dk u_{lj}(r, k) u_{lj}(r', k)^* . \quad (1)$$

Berggren[1] a valós energiájú kontinuumot egy  $L^+$  komplex pályamenti kontinuumra cserélve kapta a Berggren-reprezentációt:

$$\delta(r-r') = \sum_{n=b,d} u_{nlj}(r, k_n) u_{nlj}(r', k_n) + \int_{L^+} dk u_{lj}(r, k) u_{lj}(r', k) . \quad (2)$$

Ebben az összegben az  $L^+$  pálya feletti bomló rezonanciák (d) is szerepelnek.

Az első munka[2] amiben az (a) antikötött állapottal is kiegészítették a Berggren-reprezentációt (ez az általánosított Berggren-reprezentáció), nem adott kielégítő eredményt, mert a számolásban elhanyagolták a komplex kontinuumot. Az általánosított Berggren-reprezentáció:

$$\delta(r-r') = \sum_{n=b,d,a} u_{nlj}(r, k_n) u_{nlj}(r', k_n) + \int_{L_g^+} dk u_{lj}(r, k) u_{lj}(r', k) \quad (3)$$

a következő bázisállapotokat tartalmazza: negatív energiájú kötött és antikötött állapotokat, komplex energiájú bomló rezonanciákat, valamint egy  $L_g^+$  kontúr menti komplex kontinuumot. Jelen szerzők használták



először[3][4][5] az általánosított Berggren-reprezentációt csonkítatlan formában. Ennek a közelítésnek az egyedülálló tulajdonsága, hogy segítségével az antikötött pólus és az azt körülvevő komplex kontinuum hatása külön-külön vizsgálható. Módszerünk segítségével az egyrészesecske bázis a kontúr változtatásával rugalmasan változtatható.

## 2. NEM-KÖTÖTT ÁLLAPOTOKAT TARTALMAZÓ KÉTRÉSZECSKÉS HÉJMODELL

Modellünket a  $^{11}\text{Li}$  és a  $^{72}\text{Ca}$  glóriás atommagok szerkezetének számolásán próbáltuk ki. Itt csak a  $^{11}\text{Li}$  esetét tárgyaljuk. Két valencia-neutron mozgását írtuk le a  $^9\text{Li}$  magtörzs terében. A magtörzs hatását egy olyan fenomenologikus Woods-Saxon potenciállal szimuláltuk, amiben egy gyengén kötött virtuális (antikötött) állapot volt az  $l=0$  parciális hullámban. A diszkrét egyrészesecskeállapotokat (b,d,a) a radiális Schrödinger-egyenlet kifutó hullámú sajátfüggvényei adják. A radiális egyenlet megoldását numerikusan a darabonkénti perturbációs módszerrel végeztük[6].

A neutronok közötti maradékkölcsönhatást szeparálható alakúnak vettük:

$$\langle k\tilde{l}; \alpha | V | ij; \alpha \rangle = -G_\alpha f_\alpha(kl) f_\alpha(ij), \quad (4)$$

ahol  $G_\alpha$  a kölcsönhatás erőssége.

A szeparálható kölcsönhatás használata lehetővé tette, hogy a kétrészesecske rendszer komplex energiáit és hullámfüggvényét a kétrészesecske Hamilton-operátor mátrixának diagonalizálása helyett egyszerűen az alábbi diszperziós reláció segítségével számoljuk:

$$-\frac{1}{G_\alpha} = \sum_{i \leq j} \frac{f_\alpha(ij)^2}{\omega_\alpha - \varepsilon_i - \varepsilon_j}, \quad (5)$$

ahol  $\omega_\alpha$  a komplex kétrészesecske energia. Az  $E = \omega_\alpha$  energájú állapot hullámfüggvényének komplex

amplitúdói pedig a következők:  $X_{ik}^\alpha = N \frac{f_\alpha(ik)}{\omega_\alpha - \varepsilon_i - \varepsilon_k}$ , ahol az  $N$  együttható értékét a:  $\sum_{i \leq k} (X_{ik}^\alpha)^2 = 1$

normálási feltétel adja meg. A monopólus kölcsönhatással csak a  $0^+$  két-neutron állapotokat számoltuk. Az  $\alpha$  két-neutron állapot  $lj$  parciális hullám tartalma:

$$A_{lj}^\alpha = \sum_{i(lj), k(lj)} (X_{ik}^\alpha)^2 \quad (6)$$

csak annak  $\omega_\alpha$  energiájától függ, és független a komplex pálya alakjától. Az  $A_{lj}^\alpha$  mennyiségnek pólus-pólus (p-p), pólus-kontinuum (p-c) és kontinuum-kontinuum (c-c) konfigurációkra való fragmentációja természetesen függ a kontúr választott alakjától

## 3. A MÓDSZER ALKALMAZÁSA A $^{11}\text{Li}$ MAG ESETÉRE

A  $^{11}\text{Li}$  atommagot sokat tanulmányozták. Nekünk az a célunk, hogy bemutassuk az új módszerünk alkalmazását erre a magra egy nagyon egyszerű modell keretében. A  $^{11}\text{Li}$  magot egy a  $^9\text{Li}$  mag, mint passzív törzs körül nem-kötött pályákon mozgó két valencia neutronból álló rendszernek tekintjük, ugyanis a  $^{10}\text{Li}$  mag nem kötött.

A  $^{11}\text{Li}$  alapállapota egy kötött  $3/2^-$  állapot  $E_{gs} = -0.295$  MeV energiával a  $[\psi_{gs}(^9\text{Li})^{3/2^-} \otimes \psi_{2\nu}^{0+}]^{3/2^-}$  konfigurációban. Egyszerű modellünkben a maradékkölcsönhatás  $E_{gs}$  energián kötött alapállapotot hoz létre  $\psi_{2\nu}^{0+}$  a nem-kötött bázisállapotokból.

A Woods-Saxon potenciál mélysége paritásfüggő volt. Az általánosított Berggren-bázis diszkrét energia-sajátértékeit az 1. táblázat tartalmazza, a komplex szórési állapotokat a választott kontúrok mentén  $E_{max} = 10$  MeV energiáig vettük figyelembe. A  $G$  erősséget úgy állítottuk be, hogy reprodukáljuk az  $E_{gs} = -0.295$  MeV alapállapoti energiát, ami  $G = G_0 = 0.00194$  MeV erősségnél következett be.

### 1. táblázat.

Diszkrét neutron egyrészecske-energiák a  $^{11}\text{Li}$  MeV egységben. A magtörzsben betöltött kötött állapotok (b) és a nem-kötött diszkrét antibound (a) és rezonancia (r) állapotok komplex energiáit adjuk.

$nl_j$	állapot típus	$E_{nlj}$ [MeV]
$0s_{1/2}$	B	(-23.278, 0.0)
$0p_{3/2}$	b	(-2.589, 0.0)
$1s_{1/2}$	a	(-0.050, 0.0)
$0p_{1/2}$	r	(0.195, -0.047)
$0d_{5/2}$	r	(2.731, -0.545)
$0d_{3/2}$	r	(6.458, -5.003)

Az  $A_j$  mennyiségek a bázistól függetlenül:  $A_{s_{1/2}}^{0^+} = 0.49$ ,  $A_{p_{1/2}}^{0^+} = 0.42$  és  $A_{d_{5/2}}^{0^+} = 0.09$  értékek voltak. A „standard” bázissal (diszkrét tagok nélkül) a hullámfüggvény sok c-c komponensre fragmentálódik. Az általánosított Berggren-kontúrral is ugyanezeket az  $A_j^\alpha$  értékeket kapjuk. Az értékek fragmentálódását a 2. táblázat mutatja.

### 2. táblázat

A  $^{11}\text{Li}$  alapállapotú hullámfüggvényé  $A(lj)$  parciális hullám tartalmának fragmentációja pólus-pólus p-p, pólus-kontinuum p-c és kontinuum-kontinuum c-c tagokba az általánosított Berggren-reprezentáció használatkor. A  $\sum X_{ik}^2$  mennyiségeknek csak a valós részét adjuk meg.

$(lj)^2$	$(s_{1/2})^2$	$(p_{1/2})^2$	$(d_{5/2})^2$
p-p	12.94	0.64	0.13
p-c	-29.36	-0.28	-0.03
c-c	16.92	0.02	-0.00
$A_{lj}^\alpha$	0.49	0.39	0.09

A  $(p_{1/2})^2$  és  $(d_{5/2})^2$  parciális hullám tartalmakban a pólus-pólus tagok a  $(0p_{1/2})^2$  és a  $(0d_{5/2})^2$  rezonanciák konfigurációi és ezek képezik az illető parciális hullámuk domináns tagjait. A  $p_{1/2}$  és a  $d_{5/2}$  kontúrok elhagyása csak kicsi változást okoz az eredményben. Az  $(s_{1/2})^2$  tartalom estében azonban a pólus-pólus tag a legkisebb a három óriási fragmentum közül, amelyek csaknem teljesen kioltják egymást. Mindhárom járulék egyformán fontos, és egyiküket sem lehet elhanyagolni. A 3. táblázatban azonban, láthatjuk, hogy mi történik, ha mégis elhanyagoljuk valamelyiket.

### 3. táblázat

A  $^{11}\text{Li}$  alapállapotának számolt energiája és az alapállapotú hullámfüggvény  $l = 0$  komponense különböző  $l = 0$  kontúrok és különböző  $G$  kölcsönhatási erősségek mellett.

$G$	anti-kötött	kontúr	$\omega_{0_1^+}$ [MeV]	$A_{s_{1/2}}$
$G_0$	nincs	valós	-0.295	0.49
$G_0$	van	$L_g^+$	-0.295	0.49
$G_0$	nincs	$L_g^+$	-2.691	0.77
$G_0$	van	nincs	-1.567	0.77
újra illesztve	van	nincs	-0.295	0.98
újra illesztve	nincs	$L_g^+$	-0.295	0.98

Az antikötött pólus vagy a pólust körbevevő kontúr elhanyagolásával nagyon rossz eredményt kapunk. Vagy az  $\omega_{0_1^+}$  eltolódása lesz nagy, vagy, ha a  $G$  erősséget az  $E_{gs}$  értékhez újra adjusztáljuk, akkor az állapot  $l = 0$  tartalma lesz túlságosan nagy a hullámfüggvényben.

#### 4. KÖVETKEZTETÉSEK

Az általunk bevezetett új formalizmus, ami az általánosított Berggren-reprezentációt használja az egyrészecke bázis számára, az egyetlen olyan módszer, amellyel az antikötött pólus és a komplex kontinuum hatása külön-külön vizsgálható. A formalizmusnak a  $^{11}\text{Li}$  atommag alapállapotának számolására való alkalmazása azt mutatta, hogy bár az antikötött állapot járuléka fontos, azonban ennek a jelentős járuléknak nagy részét a komplex kontinuum járuléka kioltja. Ezért nem hanyagolható el sem a kontúr, sem a pólus járuléka.

A kétrészecke bázis méretében a új formalizmus nem hoz nyereséget a „standard” bázis használatához képest. Az új bázis használata azonban segít megérteni, hogy mi történik, ha a  $^{10}\text{Li}$  nem-kötött maghoz egy további neutron hozzáadva kötött  $^{11}\text{Li}$  állapotot kapunk. Az új bázis ugyanis egyszerre írja le mindkét Li izotóp szerkezetét.

#### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezt a munkát a magyar OTKA (T46791) és a magyar-argentin Tét alap Arg-6/2005 számú projektje támogatta.

#### HIVATKOZÁSOK

- [1] T. Berggren, Nucl. Phys. A **109**, 265 (1968).
- [2] T. Vertse, P. Curutchet, R. J. Liotta, and J. Bang, *Acta Phys. Hung.* **65**, 305 (1989).
- [3] R. G. Lovas, J. Zs. Mezei, T. Vertse, Resonating clusters Int. Symp., Kurokawa Village, Niigata, Japan, 19-22 Nov., 2003.
- [4] R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, and T. Vertse, *Physics Letters* **B584**, 48 (2004).
- [5] R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu, T. Vertse, R. Wyss, *Phys. Rev.* **C72**, 054322 (2005).
- [6] L. gr. Ixaru, M. Rizea, T. Vertse, *Comput. Phys. Commun.* **85**, 217 (1995).

# Atomi ütközési folyamatok tanulmányozása klasszikus pályájú Monte Carlo módszerrel

## Investigation of Atomic Collisions within the Framework of the Classical Trajectory Monte Carlo Method

TÖKÉSI Károly

Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, (ATOMKI)  
H-4001 Debrecen, P.O.Box 51, Hungary

### ABSTRACT

*Interpretation of the cross sections in multi-electron ion-atom collisions is a challenging task for theories. The main difficulty is caused by the many-body feature of the collision, involving the projectile, projectile electron(s), target nucleus, and target electron(s). The classical trajectory Monte Carlo (CTMC) method has been quite successful in dealing with the atomic processes in ion-atom collisions. One of the advantages of the CTMC method is that many-body interactions are exactly taken into account during the collisions on a classical level and in a nonperturbative manner. In this work CTMC simulations for a various collision systems are presented. Our results are compared with other calculations and experimental results.*

### KIVONAT

*A többelektronos atomi rendszerek ütközésekor lejátszódó folyamatok hatáskeresztmetszeteinek a meghatározása jelentős kihívást jelent az elméleti modellek számára. A klasszikus pályájú Monte Carlo módszer (CTMC, classical trajectory Monte Carlo) erénye abban nyilvánul meg, hogy egy olyan nemperturbatív modell, ahol az ütközések soktest karaktere a klasszikus keretek között kezelhető. Ebben a munkában néhány ütközési rendszer esetében a CTMC szimuláció által szolgáltatott eredményeimet fogom bemutatni és összehasonlítani kísérleti és más elméleti adatokkal.*

### 1. BEVEZETÉS

Az ion-atom és ion-szilárdtest ütközések megértésében az utóbbi évtizedekben nagyot léptünk előre. Először a legegyszerűbb rendszerek egyelektronos folyamatait vizsgálták (gerjesztés, ionizáció, elektronbefogás). A kísérleti és a számítástechnikai feltételek fejlődésével az érdeklődés a bonyolultabb rendszerek és a többelektronos folyamatok tanulmányozása felé fordult. Ha a lövedék sebessége kicsi és töltése nagy, akkor a részecskék között fellépő kölcsönhatások felerősödnek, többféle folyamat többszörösen is lejátszódhat, ami az ütköző rendszerek kismértékű perturbációja helyett sokszor annak drasztikus megváltoztatását eredményezi. Példa erre az ionok semlegesítődése többszörös elektronbefogással. Ilyen folyamatok leírása igen nagy kihívás az elméletek számára. A klasszikus modellek az összetett rendszerek időfejlődésének leírására a kezdetektől napjainkig igen hatékonyan bizonyultak. A jelenlegi munkában a klasszikus pályájú Monte Carlo (Classical Trajectory Monte Carlo, CTMC) módszert fogom alkalmazni néhány ütközési rendszer hatás keresztmetszeteinek bemutatására.

### 2. ELMÉLETI ALAPOK

Tegyük fel, hogy olyan atomi ütközés leírását próbáljuk meg, amikor mind a célatom, mind a lövedék-atom rendelkezik egy vagy több elektronnal. Ekkor minden részecske minden részecskével kölcsönhathat, ami szinte megoldhatatlan akadályt jelenthet az elmélet számára. Az utóbbi évtizedekben a CTMC módszer bebizonyította, hogy ilyen helyzetekben is megállja a helyét. Legfőbb erénye, hogy nemperturbatív módszer, és az atomi ütközések soktest karakterét figyelembe tudja venni. A gyakorlatban a CTMC számításokat kezelhetjük úgy is, mint *elméleti kísérletet*, ahol a mérési körülményeket a lehető legpontosabban igyekszünk figyelembe venni a számításokban. A CTMC módszer az ütközésben résztvevő részecskékre vonatkozó klasszikus mozgásegyenletek numerikus megoldásán alapszik [1-4]. Az atomi rendszereket, mint parányi naprendszereket kezeljük, azaz az elektronok megfelelően kiválasztott Kepler-pályákon mozognak az atom magja körül. A több-

elektronos atomok leírásakor különböző közelítéseket alkalmazhatunk. A nehézséget az jelenti, hogy már a klasszikus kételektronos atom is instabil, azaz az elektron-elektron kölcsönhatás miatt néhány pályafordulaton belül bekövetkezik az autoionizáció. Leggyakrabban ezért a CTMC módszer keretein belül is a független részecske közelítést használjuk.

Szemben a kvantummechanikai soktest problémával, numerikusan a klasszikus egyenletek tetszőleges számú részecskére kívánt pontossággal megoldhatók. A részecskeszámnak csak a számítógép nagysága, sebessége szab határt. Természetesen ilyen módon az ütközés kvantumos (hullám) jellege csak nagyon korlátozottan, bizonyos modellfeltevésekkel vehető figyelembe. Ugyanakkor a CTMC nagyon alkalmas arra, hogy egy adott ütközés legfőbb jellegzetességeit megértsük. A kvantummechanikai leírasmódokkal összehasonlítva fontos megjegyezni, hogy a CTMC jelenleg az egyetlen használható elméleti módszer azokban az esetekben, amikor a többrészecske probléma perturbatív módon nem kezelhető, természetesen szem előtt tartva annak korlátait.

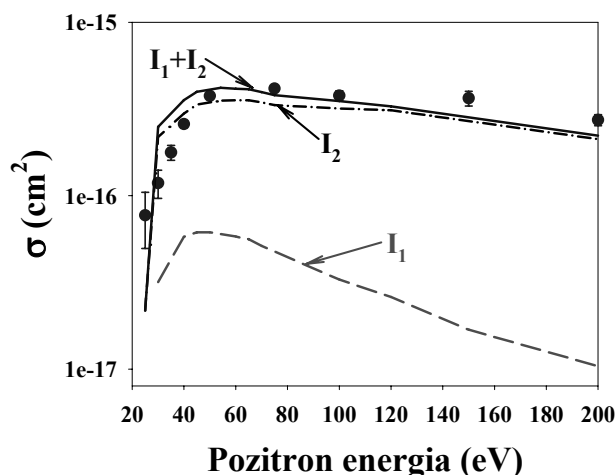
### 3. EREDMÉNYEK

#### 3.1. Elektronbefogás a lövedék folytonos állapotaiba

Ebben az alfejezetben a célatom ionizációjának egy olyan speciális esetét fogom tárgyalni, amikor a szabaddá vált elektron közel olyan sebességgel és irányban mozog, mint a lövedék. Így az elektron mozgását nemcsak a lövedékkel, hanem a visszamaradó célatommal való kölcsönhatás is befolyásolja. Nehéz lövedékek esetében, a lövedék irányában felvett elektronspektrumban egy csúcyszerű szerkezet, az úgynevezett „cusp” jelenik meg. A cusp-ot 1970-ben fedezték fel [5]. A cusp keletkezésének magyarázatára sokan analógiát vonnak a kötött állapotba történő elektronbefogással. Ezek alapján ezt a folyamatot úgy képzelhetjük el, hogy a lövedék Coulomb-tere mintegy magával sodorja a célatomból kiszabadított elektront, és az elektron nem a lövedék kötött, hanem egy pozitív energiájú, folytonos állapotába fogódik be. Ezen kép alapján a célatom ionizációjának ezt a speciális esetét a lövedék folytonos állapotaiba történő elektronbefogásnak (Electron Capture to the Continuum, ECC) nevezzük. A cusp felfedezése óta mind kísérletileg, mind elméletileg az érdeklődés középpontjában áll. Az elmélet számára a nehézséget az jelenti, hogy legalább három részecske együttes hatását kell figyelembe venni az ütközések leírásakor. A legpontosabb leírásokat azok a modellek adják, amelyek reálisan próbálják meghatározni a három szabaddá vált részecske állapotát. A CTMC módszer egyik nagy előnye az, hogy az ütközés során, az ütközésben résztvevő minden részecske között figyelembe tudja venni a kölcsönhatásokat. Ez a tulajdonsága teszi ideális eszközzé olyan két- és többcentrumú folyamatok tanulmányozására, mint amilyen a cusp folyamat is.

A lövedék és a szabad elektron között lévő vonzó kölcsönhatás miatt az elektron a lövedék környezetében marad. A cusp kialakulásában fontos körülmény, hogy a Coulomb-erő hosszúhatótávolságú. Ezért a számításokban a klasszikus mozgásegyenleteket igen nagy lövedék – célatommag távolságig kell integrálni az aszimptotikus állapot eléréséig.

Ha az ECC csúcs megjelenéséért valóban a pozitív lövedék Coulomb-terének fókuszáló hatása a felelős, akkor semmi valódi fizikai ok nem zárja ki annak megfigyelését könnyű lövedékek, mint például pozitron, esetében is. Mivel a pozitron és az elektron tömege egyenlő, így az ECC folyamat után a lövedék energiája egyenlően oszlik szét az ionizált elektron és a szórt pozitron között. Könnyű lövedékeknél a differenciális hatáskeresztmetszetek meghatározását az nehezíti, hogy a lövedék pályáját, eltekintve a nagyon nagy energiáktól, nem közelíthetjük egyenes vonalú pályával. Azok valódi pályái a háromdimenziós térben szóródnak. Az első elméleti munkák, melyek kvantummechanikai alapokon kezelték az ütközési problémát, azt jósolták, hogy az ECC csúcs a szög és energia szerinti kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetekben (double differential cross section, DDCS), pozitron lövedék esetében is megjelenik. Ezzel szemben a klasszikus elméletek azt mutatták [6], hogy a DDCS spektrumokban nem lehet megfigyelni az ECC csúcsot. Ez utóbbi megfigyeléssel vannak összhangban a kísérleti eredmények [7], melyek szerint a DDCS szerkezetében nem lehet felfedezni a cusp-ra jellemző éles csúcsot, csak egy elkenet struktúrát. A háromszorosan differenciális hatáskeresztmetszetekben (triple differential cross section, TDDCS) viszont akár elsőrendű Born-közelítésben [8], akár CTMC modellben [9] az ECC csúcs jelen van. Ebben az esetben a hatáskeresztmetszetek differenciálisak az elektron (pozitron) energiájában, az ionizált elektron és a szórt pozitron szórési szögeiben. Kísérletileg 1998-ban sikerült először kimutatni az ECC csúcs létezését a TDDCS-ben, 100 eV-os pozitronok és hidrogén molekula ütközésekor [10]. A következőkben saját CTMC számításaim eredményeit mutatom be pozitron és Ar atom ütközésére.



1. ábra

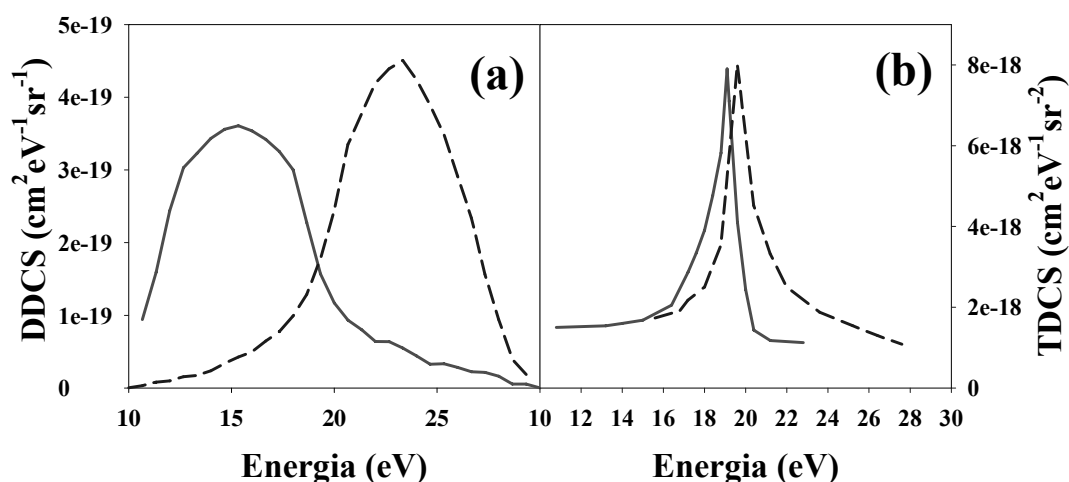
*Ar ionizációs hatáskeresztmetszete pozitron bombázás esetében.*

*Kísérleti adatok [11],  $I_1$  és  $I_2$  saját CTMC eredményeim,*

*$I_1$ , az ionizált elektron aszimptotikusan közelebb van a lövedékhez, mint a céltárgy magjához,*

*$I_2$ , az ionizált elektron aszimptotikusan a céltárgy magjához van közelebb.*

Az 1. ábrán a számolt teljes ionizációs hatáskeresztmetszeteket hasonlítom össze Knudsen és munkatársai által mért adatokkal. A CTMC eredmények igen jó egyezést mutatnak a kísérleti értékekkel. Az ábrán a számolt ionizációs hatáskeresztmetszeteket két összetevőre bontottam fel. Az  $I_1$  görbével jelölt esetben az ionizált elektron aszimptotikusan közelebb van a lövedékhez, mint a céltárgy magjához. Az  $I_2$  görbével jelölt esetben ez éppen fordítva van, azaz az ionizált elektron aszimptotikusan a céltárgy magjához van közelebb. Ezt a felosztást azért tettem meg, mert egy korábbi munkámban megmutattam [12], hogy az ECC csúcst csak az  $I_1$  típusú elektronok alkotják. Az  $I_1$  görbe maximuma 50 eV környékén van. A további számításaimat ezért 54.4 eV bombázó pozitron energiánál mutatom be. A 2. ábra az  $I_1$  ionizációs folyamatban keletkezett elektronok és pozitronok kétszeresen (2a. ábra) és háromszorosan (2b. ábra) differenciális hatáskeresztmetszeteit mutatja 54.4 eV pozitron és Ar ütközésben,  $\theta=0^\circ$  megfigyelési irányban.



2. ábra

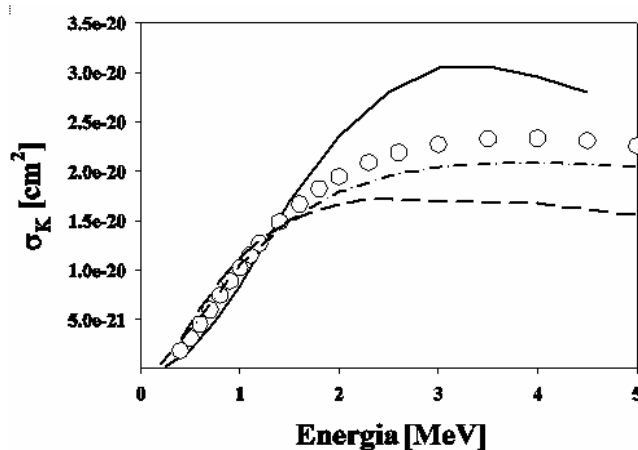
*Az  $I_1$  ionizációs folyamatban keletkezett elektronok és pozitronok differenciális hatáskeresztmetszetei 54.4 eV pozitron és Ar ütközésben,  $\theta=0^\circ$  megfigyelési irányban.*

*Folytonos vonal: elektron, szaggatott vonal: pozitron. a) DDCS b) TDCS.*

Az energiamérleg alapján az ECC csúcs megjelenését 19.35 eV-nél várhatjuk. Ezzel szemben, mind az elektron, mind a pozitron DDSC szélesen elkent szerkezetet mutat. Elektron esetében a DDSC maximuma 4 eV-tal a várt érték alatt, pozitron esetében 4 eV-tal a várt érték felett van. Ezzel szemben a háromszorosan differenciális hatáskeresztmetszetekben, mind az elektron, mind a pozitron spektrum esetében éles csúcs figyelhető meg, közel a cusp energiánál. A várt értéktől való eltérést okozhatja az, hogy széles energia és szögablakokat használtam az adatok kiértékelésénél, valamint figyelmen kívül hagytam az energiamérleg számításánál a meglökött mag energiáját. A nehéz lövedékekhez hasonlóan az ECC csúcs aszimmetrikus. Az elektronspektrum esetében a többlet hozam a kisebb energiáknál jelentkezik, pozitron esetében pedig a nagyobb energiáknál.

### 3.2 Si K-héjának ionizációja

A következőkben a Si belső héjának ionizációs hatáskeresztmetszeteire vonatkozó CTMC számításaimat mutatom be. A számításokat négy-részecske CTMC közelítésben végeztem el. A négy részecske a következő volt: a lövedék, a Si atommagja, valamint a Si két elektrona, amelyek a K-héjon helyezkedtek el az ütközés előtt. A számításokat 0.25 MeV és 4.5 MeV bombázó proton energiánál végeztem el. Minden egyes energiapont esetében 2 000 000 egyedi ütközést követtem végig. Ez a nagyszámú pályaszámítás azért volt szükséges, mert a mélyen kötött elektronok ionizációs hatáskeresztmetszetei igen kicsik. Különösen igaz ez a magállapítás amikor a Si K-héjának kétszeres ionizációs hatáskeresztmetszeteit határoztuk meg. A 3. ábra a Si K-héjának egyszeres ionizációs hatáskeresztmetszeteit mutatja proton bombázás esetében. Az 1.5 MeV-nál kisebb lövedék-energiák esetében a CTMC számítások igen közel állnak Paul és Sacher adataihoz [13], valamint a féllklasszikus számítások eredményeihez.



3. ábra

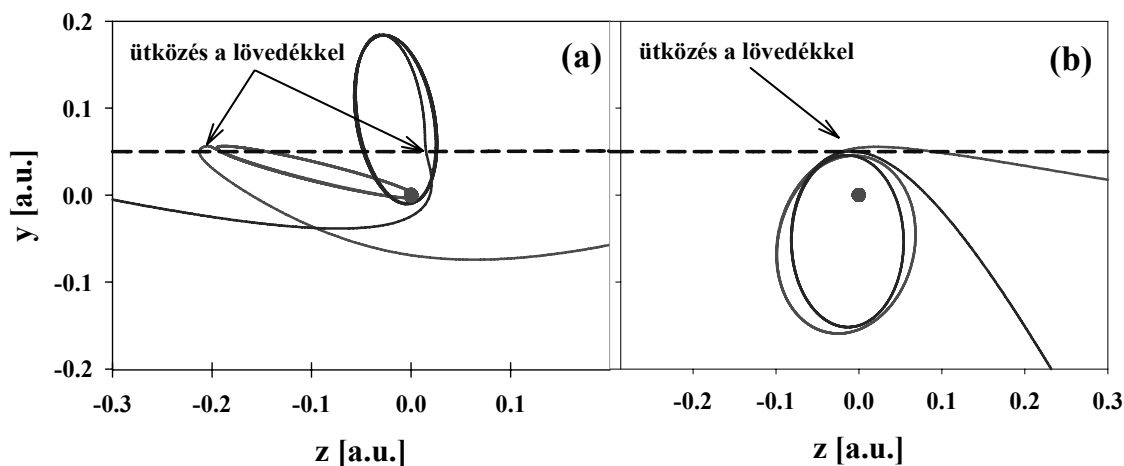
*Si K-héjának egyszeres ionizációs hatáskeresztmetszete proton bombázás esetében.*

*Körök: Kísérleti eredmények [13], folytonos vonal: saját CTMC számítások,*

*szaggatott vonal: Trautmann és Rösel, féllklasszikus közelítés [14],*

*pontozott-szagatott vonal: Smit, féllklasszikus közelítés [15].*

A következőkben figyelmünket fordítsuk a Si K-héja kétszeres ionizációjának a vizsgálatára. Használjuk ki a CTMC módszer azon előnyös tulajdonságát, hogy az egyedi pályák elemzésével az ütközés dinamikájára vonatkozóan is értékes információkat kaphatunk. A 4. ábrán tipikus részecskepályákat mutatok be, akkor amikor a Si mindkét elektrona szabaddá válik a protonnal történő ütközése után. A 4a. ábrán a lövedék energiája 3 MeV, a lövedék sebessége összemérhető a K-héjon keringő elektron sebességével. A kétszeres ionizáció jól elkülönülő két lépésben zajlik le. A lövedék először az egyik, majd a másik elektront ionizálja. Ez a kétlépcsős mechanizmus minden lassú ütközés esetében megfigyelhető. Sokkal nagyobb energiánál, ahogyan azt a 4b. ábrán láthatjuk 30 MeV lövedékenergia esetében, a kettős ionizáció hirtelen, szinte ugyanabban az időpillanatban következik be.



4. ábra

Tipikus részecskepályák Si K-héjának kétszeres ionizációjakor proton bombázás esetében. A nyilak az elektron pillanatnyi helyzetét mutatják amikor az ionizáció bekövetkezett. a) a lövedék energiája 3 MeV, b) a lövedék energiája 30 MeV.

## ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban a CTMC módszer hatékonyságát és eredményességét mutattam be ion-atom ütközések tanulmányozása esetében két jellemző példán keresztül.

54.4 eV pozitron+Ar ütközési rendszer esetén vizsgáltam a szórt pozitron folytonos elektron-állapotaiban történő elektronbefogási folyamatot. A kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet számítások jó egyezést mutatnak a korábban mások által végzett CTMC számítások eredményeivel [6]. A háromszorosan differenciális hatáskeresztmetszetekben pozitron lövedék esetében is kimutattam az ECC csúcs létezését. Az ECC csúcsot mind az elektron, mind a pozitron spektrumában megjelenik.

Modellszámításokat végeztem a Si K-héjának ionizációs hatáskeresztmetszeteinek a meghatározására. Megmutattam, hogy amíg kis lövedék sebességek esetében a kétszeres ionizáció két lépésben, addig nagyobb lövedéksebességek esetében egy lépésben játszódik le.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A bemutatott eredmények megszületését támogatták és ezért köszönetemet fejezem ki az Országos Tudományos Alapprogramoknak (OTKA, T046454), az MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíjnak, valamint a TÉT Alapítványnak (SLO-15/05).

## IRODALMI HIVATKOZÁSOK

- [1] Abrines R and Percival I C 1966 *Proc Phys Soc (London)* **88** 861.
- [2] Olson R E and Salop A 1977 *Phys. Rev.* **A16** 531.
- [3] K. Tökési, G. Hock, *Nucl. Instrum Meth. in Phys. Res.* **B86** (1994) 201.
- [4] K. Tökési, G. Hock, *J. Physics B* **29** (1996) 119.
- [5] G. B. Crooks and M. E. Rudd, *Phys. Rev. Lett.* **25** (1970) 1599.
- [6] R.A. Sparrow, and R.E. Olson, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994) 2647.
- [7] Á. Kövér, G. Laricchia, M. Charlton, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** (1993) L575.
- [8] M. Brauner and J.S. Briggs, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** (1993) 2451.
- [9] K. Tökési, Á. Kövér, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Articles* **211** (1996) 261.
- [10] Á. Kövér, and G. Laricchia, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 5309.
- [11] H. Knudsen, L. Brun-Nielsen, M. Charlton, M.R. Poulsen, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23** (1990) 3955.
- [12] K. Tökési and T. Mukoyama, *Bull. Ins. Chem. Res. Kyoto Univ.* **72** (1994) 62.
- [13] H. Paul, J. Sacher, *At. Data Nucl. Data Tab* **42** (1989) 105.
- [14] D. Trautmann, F. Rösel, *J. Phys. B* **33** (1980) 3067.
- [15] Z. Smit, *Phys. Rev. A* **53** (1996) 4145.



# Teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítása félklasszikus, impakt-paraméter közelítésben

## Calculation of Fully Differential Cross Sections with Semi-classical, Impact Parameter Method

JÁRAI-SZABÓ Ferenc<sup>1</sup>, NAGY László<sup>2</sup>

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika kar, 400084 – Kolozsvár, Kogălniceanu u. 1, Románia

<sup>1</sup> jferenc@phys.ubbcluj.ro, <http://atom.ubbcluj.ro/~jferenc>

<sup>2</sup> lnagy@phys.ubbcluj.ro, <http://www.phys.ubbcluj.ro/~lnagy>

### ABSTRACT

*The semiclassical impact parameter method is used to calculate fully differential cross sections. Single ionization of helium produced by fast charged  $C^{6+}$  projectile impact is studied through this model. 3D image of electron-emission pattern is generated and the results are qualitatively compared with the available experimental data.*

### ÖSSZEFOGLALÓ

*A félklasszikus, impakt paraméter módszer alapján kidolgozunk egy modellt a teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek kiszámítására. A modell alapján tanulmányozzuk a héliumatom egyszerűs ionizációját gyors  $C^{6+}$  ion lövedékkel történő ütközés esetében. Az eredmények alapján elkészítjük az elektron-kibocsátási mintázat 3D képét, és az eredményeket kvalitatív módon összehasonlítjuk kísérleti eredményekkel.*

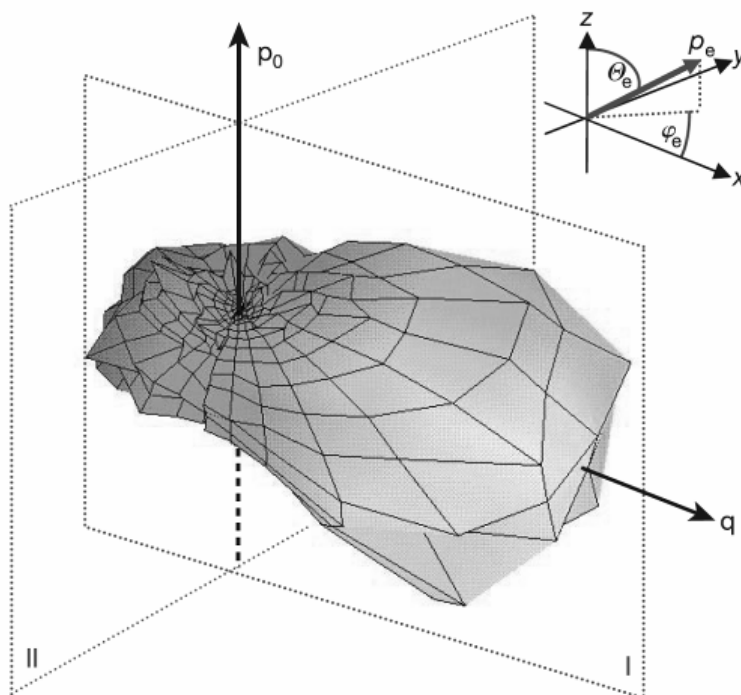
**Kulcsszavak:** atomi ütközések, ionizáció, hatáskeresztmetszet, impakt paraméter, héliumatom.

Az atomok ütközéses ionizációja fontos szerepet játszik sok tudományterületen. Például, a kibocsátott elektronok szög és energia szerinti eloszlása fontos a sugárfizikában, hiszen a töltött részecskék nyomában keletkező másodlagos elektronok a felelősek a sugárzás káros hatásáért. A teljes ionizációs hatáskeresztmetszeteknek direkt alkalmazásuk van napjaink fúzióenergia kutatásában. Annak érdekében, hogy megérthessük a fúziós plazma széleiben lejátszódó radiatív és ütközési folyamatok hatásait a plazma tulajdonságaira és dinamikájára vonatkozóan, fontos, hogy kvalitatív ismereteink legyenek az ott lezajló elemi (ütközési) folyamatokról. Mindezekén túl, az ionizációs hatáskeresztmetszetek fontos szerepet játszanak az asztrofizikában is, mivel a kozmikus plazmák nagy része ún. ütközési egyensúlyban található.

Elméleti szempontból, az ütközési folyamatokban résztvevő részecskék közötti kölcsönhatások megértése szempontjából lényeges az ilyen rendszerek tanulmányozása. Az elmúlt évek folyamán nagyon sok teljes és differenciális ütközési hatáskeresztmetszet-mérést végeztek a kísérleti szakemberek és ez erősen stimulálta az elméleti fizikusokat az ütközési mechanizmusok megmagyarázására. Nagyon sok elmélet született az egyszerűbb és bonyolultabb ütközési rendszerek leírására, melyek helyességét a kísérletekkel történő összehasonlítással lehetett igazolni. A félklasszikus, impakt paraméter közelítés [1] is ezek csoportjába tartozik, jellegzetessége, hogy a lövedéket klasszikusan írja le, míg a célatom kezelésére kvantummechanikai formalizmust alkalmaz. A közelítés nagy előnye az egyszerűség és átláthatóság. Mivel lényeges eleme a perturbációszámítás, az elmélet csak a gyors lövedékkel történő ütközések esetében alkalmazható.

Az ütközési folyamatokról a legtöbb információt a teljesen differenciális ütközési hatáskeresztmetszetek révén nyerhetjük. Kísérletileg ez kinematikailag teljes mérésekkel határozható meg, melynek során detektálni lehet a lövedék, a kilökött elektron és a visszamaradt ionizált atom impulzusait. Nemrégiben M. Schulz és csoportja háromdimenziós képeket készítettek a hélium atom ionizációja során bekövetkező elektron-kibocsátási mintákról (lásd. 1. ábra) [2]. A kísérlet során gyors  $C^{6+}$  lövedéket használtak és detektálták a kilökött elektront, az ionizált atomot valamint a szóródott lövedéket is. Jelenleg létezik néhány elmélet, amely megmagyarázza a kapott teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek értékeit [3, 4], de ezek az elméletek

elégge bonyolult közelítéseket alkalmaznak és nagy részük csak a szórási síkban ad helyes eredményeket, és nem magyarázza meg az észlelt mintázatokat a lövedéknyalábra merőleges síkban.



1. ábra

*M. Schulz és csoportjának háromdimenziós ábrája a héliumatom ionizációja során bekövetkező elektron-kibocsátási mintákról [2].*

Egy egyszerű, a félklasszikus impakt paraméter módszerre alapuló [1] elméleti leírást dolgozunk ki a fenti kísérleti helyzet tanulmányozására. A módszert az előző években sikeresen alkalmaztuk teljes hatáskeresztmetszetek kiszámítására a héliumatom egyszeres és kétszeres ionizációjakor [5, 6], a korrelációs hatások vizsgálatára a még komplexebb lítiumatom egyszeres és kétszeres ionizációja esetében [7, 8].

Ezt az elsőrendű perturbációszámításon alapuló módszert első alkalommal alkalmazzuk teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek kiszámítására. A számításokban a lövedék mozgását klasszikusan írjuk le, míg a célatom leírására kvantummechanikai formalizmust használunk. Ennek értelmében a héliumatom kezdeti állapotát Hartree-Fock típusú hullámfüggvénnyel közelítjük [9], míg a végállapotot az ionizált hélium hidrogénszerű hullámfüggvényének, valamint a kilökött elektron folytonos hullámfüggvényének szimmetrikus kombinációjával írjuk le. A számítások egyszerűsítése érdekében a folytonos hullámfüggvény esetében parciális hullámok szerinti sorfejtést végzünk.

Elsőrendű perturbációszámítás alapján kiszámíthatjuk az ionizációs átmeneti amplitúdót, melynek kifejezése

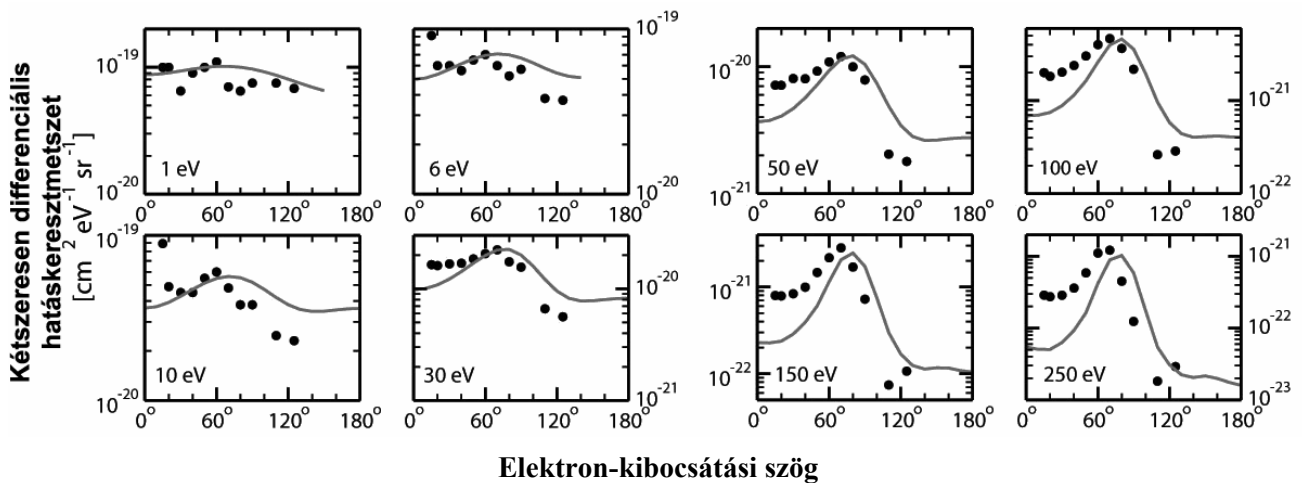
$$a^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E_f - E_i)t} \langle f | V(t) | i \rangle$$

alakú [6], ahol  $|i\rangle$  és  $|f\rangle$  a kezdeti- illetve végállapotot leíró hullámfüggvények,  $E_i$  illetve  $E_f$  a különböző állapotoknak megfelelő energiák és  $V(t)$  a Coulomb-típusú kölcsönhatást leíró perturbációs potenciál. Anélkül, hogy a részletekbe belemennénk, jelezzük, hogy a használt hullámfüggvények illetve a perturbációs potenciál függvényében a fenti kifejezés bonyolult matematikai alakot vehet fel [10], melynek kiszámítására számítógépes módszerek szükségesek. Az átmeneti amplitúdó segítségével az átmeneti valószínűség kiszámítható, mint

$$w(B, \mathbf{p}) = \left| \sum_{l_f m_f} a_{l_f m_f}^{(i)} \right|^2,$$

ahol összegzést végzünk a különböző  $l_f, m_f$  kvantumszámokkal jellemzett parciális hullámok átmeneti amplitúdóira. A kapott valószínűség függ a lövedék  $B$  impakt paraméter nagyságától (a lövedék aszimptotikus pályájának távolsága a szórócentrumtól), valamint az ionizált elektron  $\mathbf{p}$  impulzusának nagyságától és irányától.

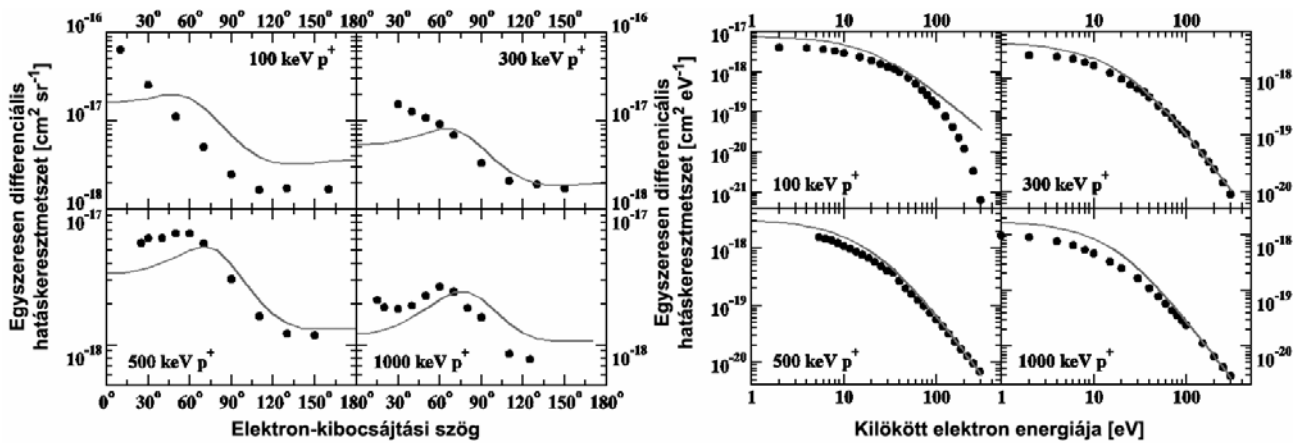
Ha az átmeneti valószínűséget kiintegráljuk az összes lehetséges impakt paraméter értékre, vagyis átlagolunk az összes lehetséges lövedékpályára, kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket kapunk. Ezek a hatáskeresztmetszetek függenek a kilökött elektron energiájának nagyságától, valamint impulzusának irányától, és azt mutatják, hogy egy adott irányban mekkora valószínűséggel detektálhatunk adott energiájú ionizált elektront. A 2. ábrán ilyen hatáskeresztmetszet értékeket láthatunk a héliumatom protonnal történő egyszeres ionizációja esetén. Az ábrán folytonos vonallal húztuk meg a fenti módszerrel kapott elméleti értékeket, míg a pontok kísérleti eredményeket jelölnek [11]. A különböző grafikonok különböző elektron-kibocsátási energiákat ábrázolnak. Az energiák értékét a grafikonokon tüntettük fel.



2. ábra

*Kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek a héliumatom protonnal történő egyszeres ionizációja esetén. Az egyes grafikonok különböző elektron-kibocsátási energiákat ábrázolnak. A folytonos vonal az elméleti eredményeket, míg a pontok a kísérleti adatokat [11] ábrázolják.*

Ha az így kapott eredményeket az ionizált elektron energiája szerint integráljuk, egyszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket kapunk az elektron-kilökődés szögének függvényében. Ez annak valószínűségét jellemzi, hogy egy adott irányban bármilyen energiájú ionizált elektront detektáljunk. Ha a kilökött elektron szöge szerint integrálunk, akkor is elsőrendű differenciális hatáskeresztmetszeteket kapunk, de akkor viszont a kilökött elektron energiája függvényében. Ez azt mutatja meg nekünk, hogy milyen valószínűséggel detektálunk egy adott energiájú ionizált elektront. A 3. ábrán egyszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket ábrázoltunk a héliumatom protonnal történő egyszeres ionizációja esetére. Az előző ábrához hasonlóan, a folytonos vonalak az elméleti eredményeket, míg a pontok a kísérleti eredményeket [11] jelölik. A különböző grafikonokon különböző lövedékenergiákat ábrázoltunk, melyeknek értékeit a grafikonokon tüntettük fel.



3. ábra

*Egyszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek a héliumatom protonnal történő egyszeres ionizációja esetén. A baloldali ábracsoport a kibocsátási szög szerinti, míg a jobboldali ábracsoport a kibocsátási energia szerinti differenciális hatáskeresztmetszeteket mutatja be. Az egyes grafikonok különböző lövedékenergiáknak felelnek meg. A folytonos vonal az elméleti eredményeket, míg a pontok a kísérleti adatokat [11] ábrázolják.*

Az előzőekben két példát láthattunk arra, hogy hogyan is működik modellünk abban az esetben, ha a lövedék pályáját nem detektáljuk, vagyis a lehetséges lövedékpályákra kiátlagolunk. A továbbiakban tekintsük meg azt az esetet, amikor minden információt megtartunk, semmire nem átlagolunk, vagyis teljesen differenciális hatáskeresztmetszeteket számolunk.

A modell szempontjából nagy jelentőséggel bír a lövedék mozgásának leírása. Modellünk félklasszikus jellegéből eredően a lövedék mozgását klasszikusan tárgyaljuk. Első közelítésben a lövedékrészecske szóródását egyszerű Rutherford-szórásnak tekintjük. Ez azt jelenti, hogy lövedékünk a célatom elektromos terében szóródik, az általa érzékelt potenciál egyszerű Coulomb-típusú potenciál. Innen származik modellünk egyik paramétere, ami nem lesz más, mint az a  $Z_{eff}$  effektív töltésmennyiség, amin a lövedék szóródik. Ennek értéke 1 és 2 között változhat az impakt paraméter nagyságának függvényében. A Rutherford-szórás alapján az impakt paraméter és a szórási szög közötti összefüggés – atomi egységeket használva – a következőképpen írható fel [12]:

$$B = \frac{Z_{löv} Z_{eff}}{E_{löv} \tan^2 \frac{\theta}{2}}$$

ahol  $Z_{löv}$  a lövedék töltését és  $E_{löv}$  ennek energiáját jelöli. A szórási szög helyett a folyamat jellemzésére vezessük be a célatomnak átadott impulzust. Ez azért célszerűbb választás, mert a kísérletekben ez a mennyiség mérhető. Ha feltételezzük, hogy a kölcsönhatás során a lövedék impulzusának csak az iránya változik meg, az impulzusátadás és a szórási szög között felírható a

$$q^2 = 2p_0^2(1 + \cos \theta)$$

összefüggés, ahol  $q$ -val jelöltük az impulzusátadás nagyságát, míg  $p_0$ -al a lövedék impulzusának nagyságát. A (3) és (4) összefüggésekből kis szórási szögek esetében, a kis mennyiségek elhanyagolásával felírható, hogy

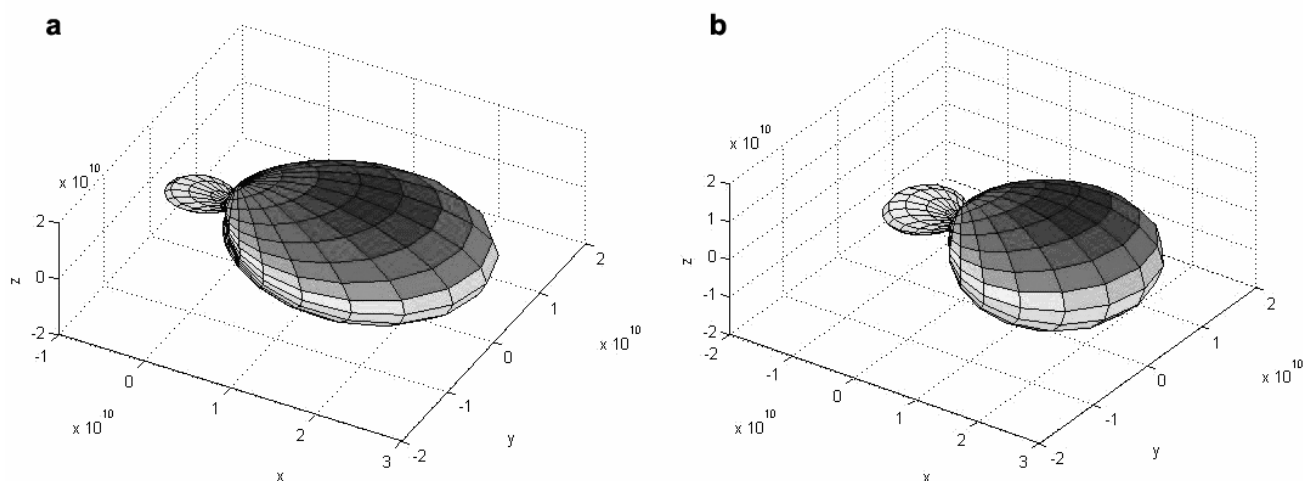
$$B = \frac{4Z_{löv} Z_{eff}}{v_0 q},$$

ahol  $v_0$ -al a lövedék sebességét jelöljük.

Mivel a modellünkben a lövedék jellemzésére az impakt paramétert használjuk, a továbbiakban a fenti összefüggés segítségével az impulzusátadás mértékéből kiszámoljuk a megfelelő impakt paraméter értéket és ennek segítségével a (2) összefüggés alapján kiszámítjuk a  $w(B, \mathbf{p})$  ionizációs valószínűséget. Ennek ismeretében a teljesen differenciális hatáskeresztmetszet felírható, mint

$$\frac{d^5\sigma}{dE d\theta_e d\phi_e dq d\phi_q} = \left( \frac{4Z_{löv}Z_{eff}}{v_0q} \right) \frac{w(q, \mathbf{p})}{q}.$$

A 4. ábrán láthatók a (6) kifejezéssel elméletileg számított elektron-kibocsátási mintázatok háromdimenziós képei a hélium atom egyszeres ionizációjára gyors  $C^{6+}$  lövedékekkel történő ütközés esetén. Egy ilyen ábrán a teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek értékeit ábrázoljuk gömbi koordinátarendszerben. A két ábra két különböző impulzusátadásnak felel meg, nevezetesen a 4.a ábra esetében  $q = 0.95$ , míg a 4.b ábra esetében  $q = 0.75$  atomi egységekben kifejezve. Mindkét esetben a lövedékenergia 100 MeV/u. Ezeket az ábrákat összevetve a 2. ábrán látható kísérleti ábrával, azt a következtetést vonhatjuk le, hogy az elméletünk kvalitatív módon visszaadja az elektron-kibocsátási mintázatok háromdimenziós „dupla lebeny”-szerű szerkezetét egy kisebb illetve egy nagyobb elektron-kibocsátási valószínűségi iránnyal. A kvantitatív egyezés tanulmányozása további vizsgálatot igényel, többek között a  $Z_{eff}$  effektív töltés megfelelő beállítását, vagy a lövedék szóródásának pontosabb leírását a hélium atom terében.



4. ábra

*Elméletileg számított elektron-kibocsátási mintázatok háromdimenziós képei különböző impulzusátadások esetén.*

Ebben a munkában egy modellt dolgoztunk ki a kinematikailag teljes kísérletek elméleti tanulmányozására. A modell az elsőrendű, félklasszikus impakt paraméter módszerre alapszik. Bemutattuk a modell sikeres eredményeit különböző rendű differenciális hatáskeresztmetszetek kiszámításával a hélium atom egyszeres ionizációja esetében, majd egy egyszerű lehetőséget mutattunk be a teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítására is. A lövedék leírására a legegyszerűbb Rutherford-szórást tekintettük a hélium atom effektív töltésének terében. Teljesen differenciális hatáskeresztmetszeteket számoltunk a hélium atom ionizációjára 100 MeV/u energiájú  $C^{6+}$  lövedék esetében, majd az eredmények alapján elkészítettük az elektron-kibocsátási mintázat háromdimenziós képét. A kapott eredmények minőségileg helyesen leírják a tanulmányozott jelenséget, a mennyiségi összehasonlítás a kutatás jelenlegi fázisában még nem lehetséges. A modell előnye annak egyszerűségében rejlik és félklasszikus jellege folytán lehetőséget ad akár a különböző ütközési mechanizmusok egyedi tanulmányozására is.

Az egyik szerző, Járai-Szabó Ferenc munkáját a Sapientia Alapítvány - Kutatási Programok Intézete támogatta.

## IRODALOM

- [1] Nagy L., Two-electron processes in fast collisions with charged particles, Nucl. Instr. Meth. B 124 (1997), 271-280.
- [2] Schulz M. et al., Three-dimensional imaging of atomic four-body processes, Nature 422 (2003), 48-50.
- [3] Madison D.H. et al., Probing Scattering Wave Functions Close to the Nucleus, Phys. Rev. Lett. 91 (2003), 253201.
- [4] Foster M. et al., Fully differential cross sections for  $C^{6+}$  single ionization of helium, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 37 (2004), 1565.
- [5] Nagy L. et al., Time ordering in atomic collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (1997), 1239-1954.
- [6] Nagy L. and Benedek A., Improved calculation for the ionization-excitation of the helium, J. Phys B 35 (2002), 491-499.
- [7] Nagy L. and Fritzsche S., Inner-shell excitation of lithium by fast charged projectiles, J. Phys B 33 (2000), L495-L503.
- [8] Járai-Szabó F., Nagy L. and Fritzsche S., Correlation effects for double K-shell vacancy production in lithium by fast charged projectile impact, Nucl. Instr. Meth. B 233 (2005), 276-279.
- [9] Clementi E., Roetti C., Roothaan-Hartree-Fock atomic wavefunctions, At. Data Nucl. Data Tables 14 (1974), 177-478.
- [10] Nagy László, Numerikus és közelítő módszerek az atomfizikában, Scientia Kiadó, Kolozsvár, 2002.
- [11] Rudd M. E., Toburen L. H., Stolterfoht N., At. Data Nucl. Data Tables 18 (1976), 413.
- [12] Nagy László, Atomfizika, Erdélyi Tankönyvtanács, Kolozsvár, 1999.

# Az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet tanulmányozása H<sub>2</sub> molekula esetében

## Study of Ionization Differential Cross Section in Case of H<sub>2</sub> Molecule

PÓRA Katalin, NAGY László

Fizika Kar, Babeş–Bolyai Tudományegyetem,  
400084 Kolozsvár, Kogălniceanu 1, Románia  
tel. +40-264-405300, fax. +40-264-591906,  
kpora@phys.ubbcluj.ro, lnagy@phys.ubbcluj.ro

### ABSTRACT

*Ionization differential cross section is investigated in case of ionization of hydrogen molecule by fast charged ion impact. There are several experimental results for Kr<sup>34+</sup>, Kr<sup>33+</sup> ions [1, 2] and proton projectile [3, 4]. This phenomena was investigated theoretically too by several studies [5, 6, 7, 8, 9, 10]. The present paper gives a theoretical model for calculation of differential cross section using numerical methods. Performing the calculations the results are compared with the experimental ones.*

### ÖSSZEFOGLALÓ

*A hidrogénmolekula ionizációs differenciális hatáskeresztmetszetét tanulmányozzuk gyors töltött lövedék esetében. Több kísérleti eredmény is van Kr<sup>34+</sup>, Kr<sup>33+</sup> ionlövedékre [1, 2] illetve proton lövedékre [3, 4]. Elméleti tanulmányok is születtek a jelenség megmagyarázására és leírására [5, 6, 7, 8, 9, 10]. A jelenlegi dolgozat egy elméleti modellt dolgoz ki a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet kiszámolására. Az így kapott eredményeket összehasonlítjuk a kísérleti-ekkel.*

**Kulcsszavak:** ionizáció, hatáskeresztmetszet, hidrogénmolekula, interferencia

### BEVEZETŐ

Az utóbbi pár évben számos kísérleti eredmény és elméleti tanulmány jelent meg a hidrogénmolekula ionizációjára és a fellépő interferenciahatásra vonatkozóan. A hidrogénmolekula és két hidrogénatom hatáske-  
resztmetszeteinek aránya a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében oszcillációt mutat. Ezek az oszcillációk hasonlóak a fényre vonatkozó Young-féle interferencia kísérletben tapasztalttal. Ebben az esetben a koherens emisszió forrása a hidrogénmolekula két magja. Az egy centrumra számolt átmeneti amplitúdók összegződnek, ami interferenciahatáshoz vezet a differenciális hatáskeresztmetszetben. Kimutatták, hogy az interferenciajelleg megmarad akkor is, ha átlagolunk minden lehetséges molekulatengely-irány szerint.

A hidrogénmolekula gyors, töltött részecskével történő ionizációja során fellépő interferenciahatás kapcsán több kísérleti eredmény született. Lövedéknek használtak Kr<sup>34+</sup>-t [1], Kr<sup>33+</sup>-t [2] és protont [3, 4]. Elméleti eredmények is vannak e téren [5, 6, 7, 8, 9, 10].

Az általunk kidolgozott analitikus számolások [7] jól igazolták az interferenciahatást, és viszonylag jó egyezést eredményeztek a kísérletileg kapott hatáskeresztmetszettel. A jelenlegi munkánkban megpróbáljuk egy más módszerrel kiszámolni a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetet annak érdekében, hogy a kísérletihez közelebbi eredményt kapjunk. Mivel magas lövedékenergiákkal számolunk, a lövedék pályáját egyenes vonalúnak feltételeztük, míg a célmolekulában levő részecskék leírására kvantummechanikai formalizmust használtunk, vagyis félklasszikus (impakt paraméter) közelítést alkalmazunk. A lövedék kölcsönhatását ezekkel a részecskékkel perturbációnak vesszük, melynek hatására a célmolekula kvantumállapota megváltozik. A H<sub>2</sub> kezdeti állapotának leírására Heitler–London típusú molekula-hullámfüggvényt alkalmaztunk. A kilökött elektron végállapotát a molekula középpontjára centrált Coulomb-hullámfüggvény adja meg.

A dolgozatban kiszámítottuk különböző lövedékek esetében az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszetet és összehasonlítottuk a kísérleti eredményekkel, illetve vizsgáltuk az interferenciahatás jelenlétét a hidrogénmolekula és két hidrogén atom hatáskeresztmetszeteinek arányában.

## ELMÉLET

A hidrogénmolekula a legegyszerűbb felépítésű molekula amellyel kísérleteket végeznek, illetve könnyebb a molekulával kapcsolatos jelenségek elméleti tanulmányozása és leírása is.

Félklasszikus közelítést alkalmazva a lövedék pályája mindvégig egyenes marad a helyzetvektora:

$$\mathbf{R} = \mathbf{z} + \mathbf{v}t \quad (1)$$

A H<sub>2</sub> molekula alapállapotát kétcentrumú, atomi hullámfüggvényekből felírt Heitler–London típusú molekuláris hullámfüggvénnyel írjuk le.  $D$ -vel jelölve a molekulában a két mag közti távolságot és  $\alpha$ -val az effektív töltést, a hullámfüggvény a következőképpen írható:

$$\Psi_g = N_g(D, \alpha) \left[ \exp(-\alpha r_{a1} - \alpha r_{b2}) + \exp(-\alpha r_{a2} - \alpha r_{b1}) \right] \quad (2)$$

$$\mathbf{r}_{ai} = \mathbf{r}_i - \frac{\mathbf{D}}{2}, \quad \mathbf{r}_{bi} = \mathbf{r}_i + \frac{\mathbf{D}}{2} \quad (3)$$

ahol  $N$  a normálási tényező, míg  $r_{ai}$  és  $r_{bi}$  az  $i$ -dik elektron távolsága az  $a$  illetve  $b$  magtól,  $\mathbf{r}_i$  az elektronoknak a középponthez viszonyított helyzetvektora.

A rendszer végső állapota a maradék molekulaion alapállapoti hullámfüggvényének és a kilökött elektron folytonos Coulomb-hullámfüggvényének szorzataként írható

$$\Psi_f = N_f(D, \alpha) \left( e^{-\alpha r_{a2}} + e^{-\alpha r_{b2}} \right) \Phi_k(\mathbf{r}_1) \quad (4)$$

ahol  $\mathbf{k}$  a kilökött elektron impulzusa.

Elsőrendű perturbációs számításokat végzünk. Perturbációnak tekintjük az elektron és a lövedék kölcsönhatását, ami egy Coulomb-kölcsönhatás. Ez esetben az átmeneti amplitúdót a következő képlettel írjuk le:

$$a^{(1)} = -\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iqz} \langle \Psi_f | V(z) | \Psi_g \rangle dz \quad (5)$$

ahol  $q = \Delta E/v$  az impulzusátadás minimális értéke.

Behelyettesítjük a hullámfüggvényeket a mátrixelembe, továbbá ennek meghatározásához több sorfejtést végzünk, a kilökött elektron hullámfüggvényét a parciális hullámok szerint, a Coulomb-kölcsönhatást és a kezdeti állapot hullámfüggvényét a Legendre-polinomok szerint, míg a Legendre-polinomokat felírjuk gömbfüggvények szorzata segítségével. A számítások elvégzése után a következő képletet kapjuk az átmeneti amplitúdóra:

$$\begin{aligned} a^{(1)} &= (4\pi)^{3/2} \frac{iZ_p N_g}{2vN_f} \sum_{l_f l_c l_g} \frac{i^{-l_f} e^{-i\sigma_{l_f}}}{\sqrt{(2l_f+1)(2l_c+1)(2l_g+1)}} \left( l_c 0 l_g 0 | l_f 0 \right) \times \\ &\times \sum_{m_f m_c m_g} \left( l_c m_c l_g m_g | l_f m_f \right) Y_{l_g m_g}(\hat{\mathbf{D}}) Y_{l_f m_f}^*(\hat{\mathbf{k}}) e^{im_c \varphi_b} G_{l_f l_c l_g}^{m_c}(k, b, D) \\ G_{l_f l_c l_g}^{m_c}(k, b, D) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{iqz} Y_{l_c m_c}(\hat{\mathbf{R}}) e^{-im_c \varphi_b} \Gamma_{l_f l_c l_g}(k, R, D) dz \\ \Gamma_{l_f l_c l_g}(k, R, D) &= \int_0^{\infty} r_1^2 R_{l_f}(kr_1) \frac{r_1^{l_c}}{r_1^{l_c+1}} c_{l_g}(r_1, D) dr_1 \end{aligned} \quad (6)$$

ahol  $Z_p$  a lövedék töltése,  $\sigma_{l_f}$  a fáziseltolás,  $c_{l_g}(r_1, D)$  a kezdeti állapot hullámfüggvényének a Legendre-polinomok szerinti sorfejtés együtthatója,  $l$  és  $m$  az orbitális- illetve mágneses kvantumszám,  $Y_{lm}$  gömbfügg-



vényeket jelöl, az  $f$ ,  $c$ ,  $g$  indexek a végső, közbenső és kezdeti állapotokat jelölik,  $R_{lj}(kr_l)$  pedig a radiális hullámfüggvény.

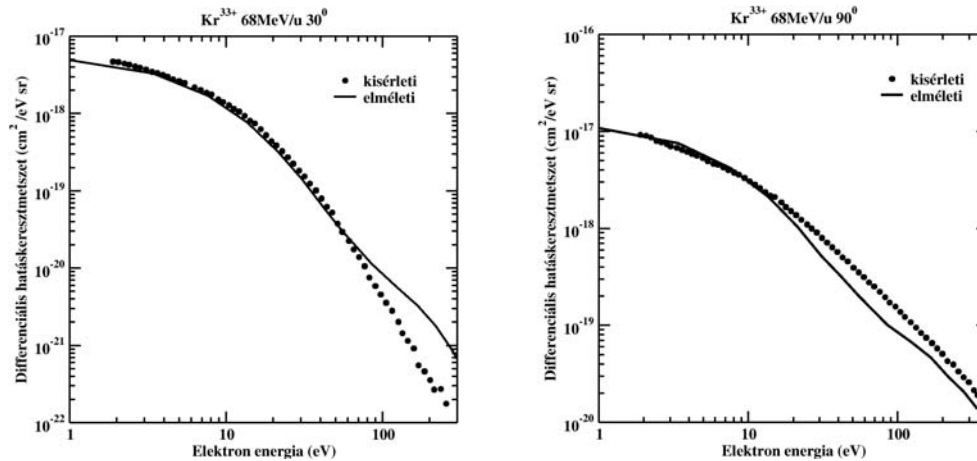
Az átmeneti amplitúdó modulusának négyzetét integrálva a  $D$  szögei, a  $b$  impact paraméter  $\varphi_b$  azimutális szöge szerint megkapjuk a kilökött elektron impulzusa és szóródási szöge szerinti differenciális hatáskeresztmetszetet:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dkd\theta} = & 8\pi^3 \left( \frac{Z_p N_g}{v N_f} \right)^2 \sum_{l_f l_c l_g} \sum_{l'_f l'_c} \frac{i^{l'_f - l_f} e^{i\sigma_{l'_f} - i\sigma_{l_f}}}{(2l_g + 1) \sqrt{(2l'_f + 1)(2l'_c + 1)(2l_c + 1)(2l'_c + 1)}} \times \\ & \times (l_c 0 l_g 0 | l_f 0) (l'_c 0 l'_g 0 | l'_f 0) \sum_{m_f m_c m_g} (l_c m_c l_g m_g | l_f m_f) (l'_c m'_c l'_g m'_g | l'_f m'_f) \times \\ & \times Y_{l_f m_f}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{l'_f m'_f}(\hat{\mathbf{k}}) \int_0^\infty G_{l_f l_c l_g}^{m_c}(k, b, D) G_{l'_f l'_c l'_g}^{m'_c*}(k, b, D) b db \end{aligned} \quad (7)$$

## EREDMÉNYEK

A számításokban a hidrogénmolekula két magja közti távolságára  $D=1.42$ , az effektív töltésére  $\alpha=1.165$  értékeket használtuk. A számolt differenciális hatáskeresztmetszeteket összehasonlítottuk a kísérleti eredményekkel. Annak érdekében, hogy ellenőrizzük az interferenciahatás jelenlétét a hidrogénmolekula és két hidrogénatom hatáskeresztmetszeteinek arányában, ábrázoljuk az arányt a kilökött elektron sebességének függvényében.

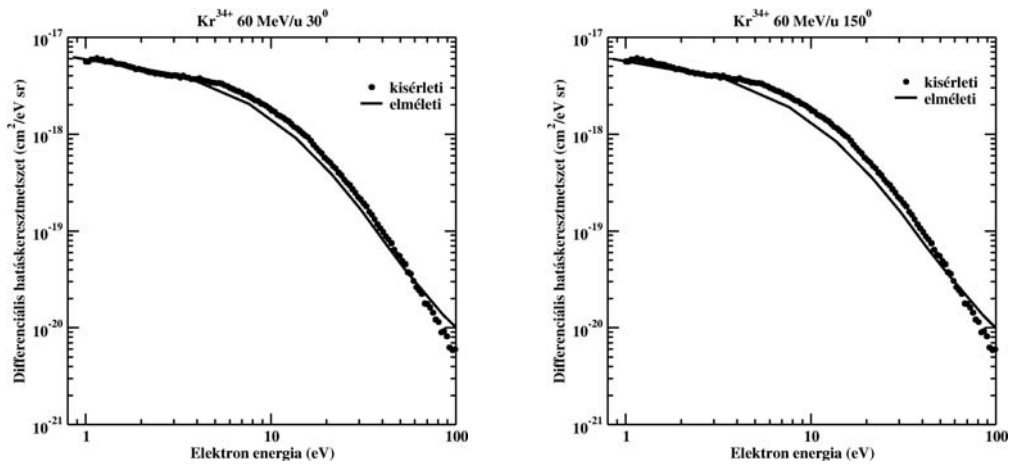
A 1. ábrán látható a differenciális hatáskeresztmetszet a kilökött elektron energiájának függvényében. Lövedéknek a 68 MeV/u energiájú  $\text{Kr}^{33+}$  iont vettük, míg a kilökött elektron szóródási szöge  $30^\circ$  és  $90^\circ$ . A pontok jelképezik a kísérleti eredményeket [2], míg a csillag az általunk számolt eredményeket. Látható, hogy az általunk számolt hatáskeresztmetszet jól megközelíti a kísérleti adatokat, főleg az elektron alacsony energiái esetében.



1. ábra

*A hidrogénmolekula ionizációs differenciális hatáskeresztmetszete 68 MeV/u  $\text{Kr}^{33+}$  ion lövedék esetén, az elektron  $30^\circ$  és  $90^\circ$  szóródási szögeire. A pont jelöli a kísérleti eredményt, míg a csillag az általunk számolt elméleti értékeket*

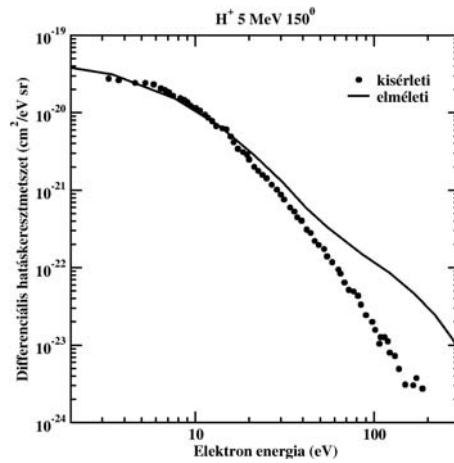
A 2. ábrán ugyancsak az általunk számolt differenciális hatáskeresztmetszet van feltüntetve a kísérleti eredmény [1] mellett. A lövedék ebben az esetben 60 MeV/u energiájú  $\text{Kr}^{34+}$  ion, a kilökött elektron szóródási szöge  $30^\circ$  és  $150^\circ$ . Ebben az esetben is a mi eredményeink jól visszaadják a kísérletileg kapott értékeket.



2. ábra

Ugyanaz, mint az 1. ábra, itt a lövedék 60 MeV/u  $Kr^{34+}$  ion, míg a kilökött elektron szóródási szöge  $30^\circ$  illetve  $150^\circ$

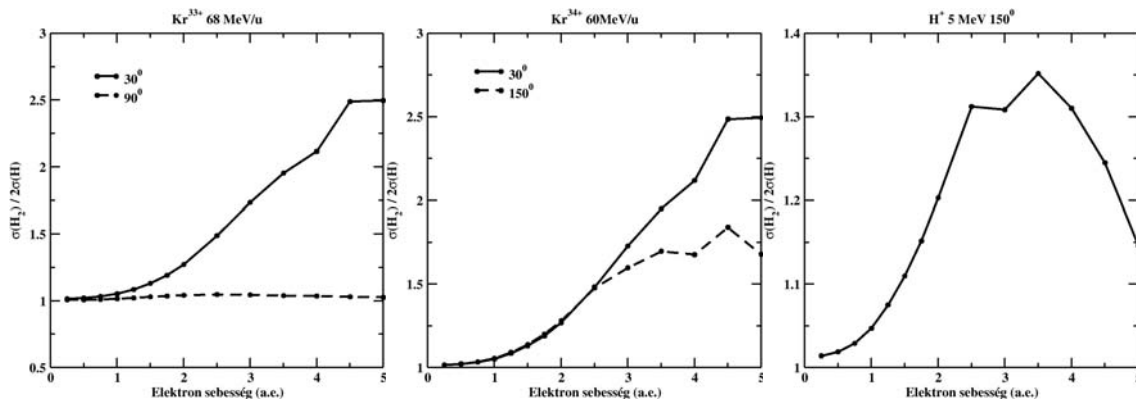
A 3. ábrán a differenciális hatáskeresztmetszetet 5 MeV energiájú  $H^+$  lövedék esetén ábrázoltuk, a kilökött elektron szóródási szöge pedig  $150^\circ$ . Látható, hogy ebben az esetben is alacsony elektronenergián jó az egyezés a kísérleti [3] értékekkel.



3. ábra

Ugyanaz, mint az 1. ábra, itt a lövedék 5 MeV  $H^+$ , míg a kilökött elektron szóródási szöge  $150^\circ$

Ahhoz, hogy az interferenciahatást vizsgáljuk, a 4. ábrán feltüntettük a hidrogénmolekula és két hidrogénatom differenciális hatáskeresztmetszeteinek arányát a kilökött elektron sebességének függvényében. Amint látható, a hatáskeresztmetszetek arányában oszcilláció észlelhető, ami az interferenciahatás jelenlétére utal.



4. ábra

A hidrogénmolekula és két hidrogénatom differenciális hatáskeresztmetszeteinek aránya a kilökött elektron sebességének függvényében különböző lövedékek és szóródási szögek esetében.

## KÖVETKEZTETÉSEK

A munkánk során tanulmányoztuk a hidrogénmolekula kriptonionnal illetve protonnal való ionizációja esetén a differenciális hatáskeresztmetszetet. Megállapíthatjuk, hogy a számolt értékek jó egyezést mutatnak a kísérleti eredményekkel, főleg nagy energiájú nehéz lövedék esetében, de protonlövedék esetében is viszonylag jó az egyezés. Az eltérés a kísérleti értékektől adódhat abból is, hogy a visszamaradt hidrogénmolekula ion töltését 1-nek vettük, illetve a molekulaion leírására használt hullámfüggvényt egy centrumúnak tekintettük.

Vizsgáltuk az interferenciahatás jelenlétét a hidrogénmolekula és két hidrogénatom hatáskeresztmetszetének arányában. Ebben az esetben is észlelünk oszcillációt a kilökött elektron sebességének függvényében, tehát elmondható, hogy modellünk kimutatja az interferencia jelenséget.

Póra Katalin munkáját a Sapientia Alapítvány Kutatási Programok Intézete támogatja.

## HIVATKOZÁSOK

- [1]. Stolterfoht N. et al, Evidence for Interference Effects in Electron Emission from  $H_2$  Colliding with 60 MeV/u  $Kr^{34+}$  Ions, Phys. Rev. Lett 2001/87, 023201
- [2]. Stolterfoht N. et al, Interference effects in electron emission from  $H_2$  by 68 MeV/u  $Kr^{33+}$  impact: Dependence on the emission angle, Phys. Rev. A 2003/67, 030702
- [3]. Hossain S. et al, Interference effects in electron emission from  $H_2$  by 3 and 5 MeV  $H^+$  impact, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B, 2003/205, 484-487
- [4]. Hossain S. et al, Interference phenomena associated with electron-emission from  $H_2$  by (1–5) MeV  $H^+$  impact, Phys. Rev. A, 2005/72, 010701
- [5]. Galassi M. E. et al, Young-type interference patterns in electron emission spectra produced by impact of swift ions on  $H_2$  molecules, Phys. Rev. A, 2002/66, 052705
- [6]. Laurent G. et al, Orientation and interference effects in single ionization of  $H_2$  by fast ions, J. Phys. B, 2002/35, L495-L501
- [7]. Nagy L. et al, Interference effects in the ionization of  $H_2$  by fast charged particles, J. Phys. B. 2002/35, L453-L459
- [8]. Póra K., L. Nagy, Intereference effects in the differential ionization cross-section of  $H_2$  by  $H^+$  impact, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 2005/233, 293-297
- [9]. Sarkadi L., Interference effects in electron emission from  $H_2$  by particle impact, J. Phys. B 2003/36, 2153-2163
- [10]. Stia C. R. et al, Interference effects in single ionization of molecular hydrogen by electron impact, J. Phys. B 2003/36, L257-L264

# Molekulák pozitronnal történő ionizációja

## Ionization of Molecules by Positron Impact

TÓTH István<sup>1</sup>, Radu I. CAMPEANU<sup>2</sup>, Vasile CHIȘ<sup>1</sup>, NAGY László<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,  
Kolozsvár 400084, Kogălniceanu 1, Románia, <sup>\*</sup>nagy@phys.ubbcluj.ro

<sup>2</sup> Department of Physics and Astronomy, York University,  
4700 Toronto, Keele Street, ON Canada

### ABSTRACT

*We have refined previously performed calculations for the positron impact ionization of the N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> molecules. In the framework of the DWBA method we have calculated the wavefunctions of the incoming and outgoing particles numerically in the spherically averaged, screened field of the molecule. Present results are in very good agreement with experiment for the N<sub>2</sub> and CO molecules, while the results for the CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> molecules need more improvements.*

### ÖSSZEFOGLALÓ

*A torzított hullámú Born közelítést (DWBA) alkalmaztuk az N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák pozitron lövedékkel történő ionizációs folyamatának leírására. A módszer keretében valószerűbb hullámfüggvényekkel írtuk le a lövedéket, a szórt pozitront illetve a kilökött elektront. Az így kapott ionizációs hatáskeresztmetszetek nagyon jó egyezést mutatnak a kísérletileg mért hatáskeresztmetszetekkel az N<sub>2</sub> és a CO molekulák esetén, míg a CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák eredményei további javításokat igényelnek.*

**Kulcsszavak:** Pozitron; Ionizáció; Torzított hullámú Born közelítés; Több-centrumú hullámfüggvény

### 1. BEVEZETŐ

A molekulák pozitronnal történő ionizációja viszonylag új kutatási terület. Az utóbbi évtizedek során több ilyen jellegű kísérletet végeztek [1-5], vizsgálva a H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, és O<sub>2</sub> molekulák pozitron lövedékkel való ionizációját. Elméleti szempontból a pozitronnal történő ionizáció tanulmányozása egyszerűbb mint az elektronok előidézte ionizáció, ugyanis ebben az esetben nem lép fel a szórt pozitron és a kilökött elektron között a kicserélődési kölcsönhatás. Az utóbbi évek során több olyan tanulmány született, amely az említett molekulák pozitron általi ionizációját vizsgálta. Ezek a tanulmányok [6-9] a CPE (Coulomb plus plane waves with full energy range) modellt alkalmazták az ionizációs folyamat leírására. A CPE modell keretében a kilökött elektront Coulomb-típusú hullámfüggvénnyel írták le, míg a szórt pozitron leírására síkhullámot vagy Coulomb-típusú hullámfüggvényt alkalmaztak. Továbbá, az aktív elektron kezdeti állapotának a jellemzésére többcentrumú, Gauss-típusú hullámfüggvényeket alkalmaztak. A számítások egyszerűsítése végett, a többcentrumú hullámfüggvényeket sorba fejtették a Legendre-polinomok, vagy a gömbfüggvények szerint (a nem lineáris molekulák esetén). A CPE modell szolgáltatja elméleti hatáskeresztmetszetek jó egyezést mutattak a H<sub>2</sub> [6] és CO [7] molekulák esetében a kísérleti hatáskeresztmetszetekkel, azonban a CO<sub>2</sub> [7], N<sub>2</sub> [8] és CH<sub>4</sub> [9] molekulákra számolt elméleti eredmények nagyobbak voltak a kísérleti értékeknél.

A kísérlettel való jobb egyezés elérésének érdekében, jelen tanulmány során az N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák pozitronnal történő ionizációja esetén, alkalmaztuk a DWBA (Distorted Wave Born Approximation) módszert. A módszer keretében valószerűbb hullámfüggvényekkel írtuk le a lövedéket, a szórt pozitront illetve a kilökött elektront. Ezt úgy valósítottuk meg, hogy az atommagok illetve az elektronok keltette valódi potenciált szférikusan átlagoltuk, és a szabad részecskék kezdeti valamint végállapotú hullámfüggvényeit ebben az árnyékolt térben, numerikusan határoztuk meg. Ezen átlagolt tér hatását külön vizsgáltuk a kilökött elektron illetve a szórt pozitron esetén. Az így kapott eredmények nagyon jó egyezést mutatnak

a kísérleti adatokkal az N<sub>2</sub> és CO molekulák esetén, míg a CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák eredményei további javításokat igényelnek. Az itt közölt eredmények, a [10]-es tanulmányban mutattuk be.

## 2. ELMÉLET

Valamely molekula pozitronnal való ionizációjának részletes elméleti leírása a már említett [6-9] tanulmányokban található meg. Itt röviden felvázoljuk az ionizációs hatáskeresztmetszetek kiszámításának főbb lépéseit, kiemelve a jelenleg bevezetett elméleti modell sajátosságait.

A teljes ionizációs hatáskeresztmetszet kiszámítása érdekében a háromszorosan differenciális hatáskeresztmetszet képletéből indultak ki

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_f d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} = \sum_r \frac{(2\pi)^4}{E_i} |f_r|^2 \quad (1)$$

Itt  $E_i$  a lövedék energiáját jelöli,  $E_e$  pedig a kilökött elektronét.  $\hat{\mathbf{k}}_e$  illetve  $\hat{\mathbf{k}}_f$ -el jelöltük a kilökött elektron illetve a szórt pozitron hullámvektorainak a lövedék irányegyenesével bezárt szögeit. Az  $r$  szerinti összegzést a betöltött molekula-orbitálokra végezzük. A szórás amplitúdó felírható mint

$$f_r = \langle \phi_f(\mathbf{r}_1) \phi_e(\mathbf{r}_2) | V(r_{12}) | \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (2)$$

ahol  $\phi_i$  és  $\phi_f$  a pozitron kezdeti illetve végállapotának hullámfüggvényei, míg  $\phi_e$  jelöli a kilökött elektron állapotát.  $\phi_r$  az aktív elektron kezdeti állapotát jelenti. A pozitron helyzetvektorát  $\mathbf{r}_1$ -el míg a kilökött elektronét  $\mathbf{r}_2$ -vel jelöltük. Az aktív elektron kezdeti állapotát többcentrumú, Gauss-típusú hullámfüggvények írják le. A számítások egyszerűsítése végett, a többcentrumú hullámfüggvényeket sorba fejtettük a Legendre-polinomok (a lineáris molekulák esetén), vagy a gömbfüggvények szerint (a nem lineáris molekulák esetén)

$$\phi_r(\mathbf{r}_2) = \sum_{l_b} c_{l_b}(r_2, R_0) P_{l_b}(\cos \omega_2) \quad (3)$$

$$\phi_r(\mathbf{r}_2) = \sum_{l_b \mu} c_{l_b \mu}(r_2) Y_{l_b \mu}(\hat{r}_2) \quad (4)$$

Itt  $R_0$  az atommagok közötti távolság,  $\omega_2$  az  $\mathbf{r}_2$  és  $\mathbf{R}_0$  közötti szög.  $c$ -vel a kifejtési együtthatókat jelöltük. Továbbá, a teljes ionizációs hatáskeresztmetszet kiszámításához, az (1) képlettel megadott differenciális hatáskeresztmetszetet kell integrálni a szórt pozitron és a kilökött elektron hullámvektorainak irányai szerint, valamint a kilökött elektron energiája szerint.

Az eddigi tanulmányok a CPE modellt alkalmazták az ionizációs folyamat leírására. A CPE modell feltételezi, hogy a lövedék a semleges molekula terében mozog. Továbbá, ha a szórt pozitron gyorsabb mint a kilökött elektron, akkor az előbbi ugyancsak a semleges molekula terében mozog, míg az utóbbi a molekulaion egységnyi töltésének a terében. Ha a kilökött elektron energiája nagyobb mint a szórt pozitroné, akkor az elektron két töltés terében mozog (a molekulaion illetve a pozitron töltésének a terében), míg a szórt pozitron a molekulaion keltette potenciál terében fog mozogni.

A jelen tanulmány során a DWBA módszert alkalmaztuk az ionizációs folyamat jellemzésére. A módszer keretében szférikusan átlagoltuk az atommagok és az elektronok keltette valódi potenciált. A lövedék, a szórt pozitron és a kilökött elektron hullámfüggvényeit úgy határoztuk meg, hogy numerikusan oldottuk meg a radiális Schrödinger-egyenletet ebben az árnyékolt potenciálban.

A továbbiakban két modell segítségével, fokozatosan vezettük be a szférikusan átlagolt potenciálnak a bejövő illetve a szórt és kilökött részecskék hullámfüggvényeire gyakorolt hatását.

Az első modell úgy tekinti a kilökött elektront, hogy az a magok és a maradék elektronok szférikusan átlagolt terében mozog, ha a szórt pozitron gyorsabb mint az elektron. Ekkor a pozitron a semleges molekula terében mozog. Ha a kilökött elektron a gyorsabb, akkor ez a magok és a pozitron töltése illetve a maradék elektronok által keltett potenciálban mozog, míg a szórt pozitron csak a molekulaion hatását érzékeli. Végül, a lövedék a semleges molekula terében mozog. Mivel ez a modell csak a kilökött elektron hullámfüggvénye esetén alkalmazza az árnyékolt potenciál hatását, elektron-árnyékoló (ES – Electron Screening) modellnek neveztük el. Matematikailag az ES modellt a következőképpen lehet megfogalmazni

$$V_i = 0,$$

$$\begin{cases} V_f = 0 \\ V_e = V_{magok} + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_f > E_e$$

$$\begin{cases} V_f = \frac{1}{r'} \\ V_e = V_{magok} (+) + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_e > E_f,$$

ahol az  $f$  index a szórt pozitronra, az  $e$  a kilökött elektronra és az  $i$  index a lövedékre vonatkozik.  $V_{elektronok} (-)$  a maradék elektronrendszer keltette átlagolt potenciált,  $V_{magok} (+)$  az atommagok és a pozitron által keltett potenciált jelöli.  $E_e, E_f$  a kilökött elektron illetve a szórt pozitron energiája.

A második modell keretében a kilökött elektron az atommagok és a maradék elektronok terében mozog, ha a szórt pozitronnak nagyobb az energiája. Ekkor a szórt pozitron a magok és az összes elektron átlagolt terében mozog. Ha a kilökött elektron energiája a nagyobb, akkor ez a magok és a pozitron illetve a maradék elektronok árnyékolt terében mozog, míg a szórt pozitron a magok és a maradék elektronok keltette átlagolt potenciál hatását érzékeli. Végül, a lövedék a magok és a teljes elektronrendszer átlagolt terében fog mozogni. Ebben az esetben az árnyékolt potenciált mindegyik szabad részecske hullámfüggvényének a kiszámításánál alkalmaztuk, ezért ennek a modellnek a teljesen-árnyékoló modell (TS – Total Screening) elnevezést adtuk. Ennek matematikai megfogalmazása.

$$V_i = V_{magok} + V_{elektronok}$$

$$\begin{cases} V_f = V_{magok} + V_{elektronok} \\ V_e = V_{magok} + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_f > E_e$$

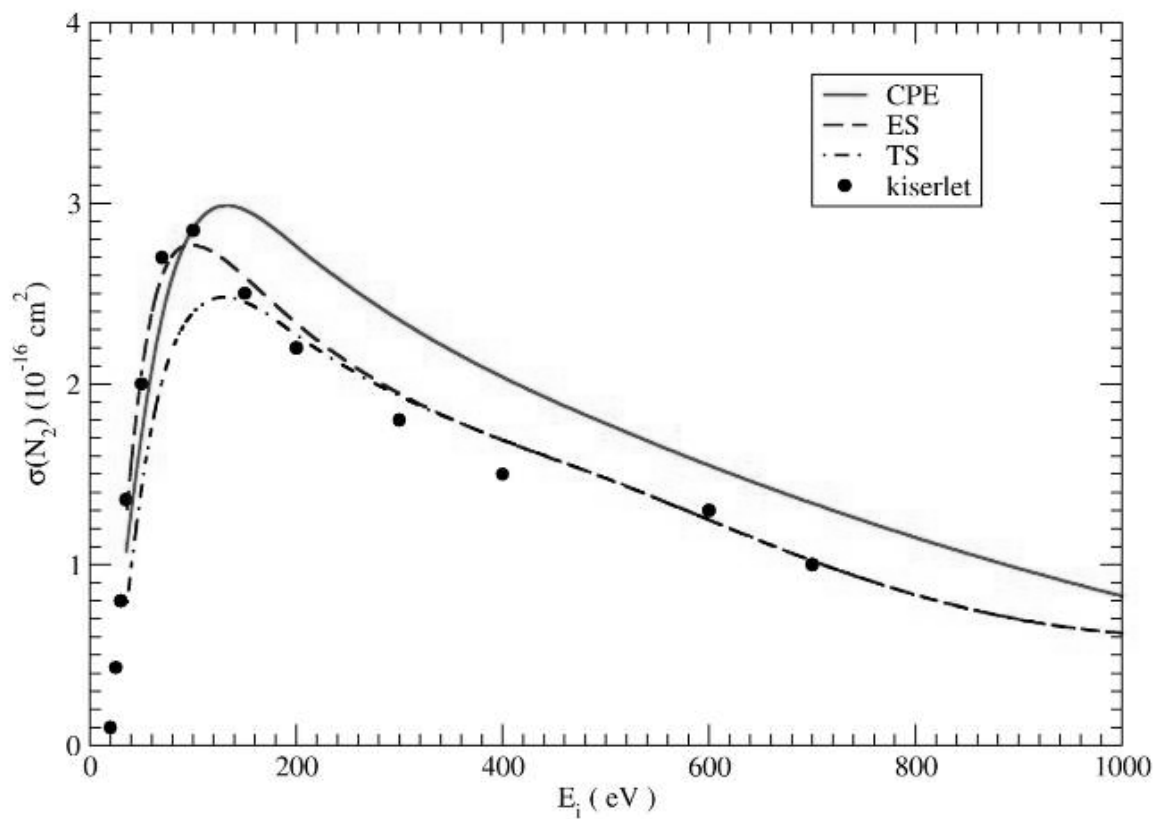
$$\begin{cases} V_f = V_{magok} + V_{elektronok} (-) \\ V_e = V_{magok} (+) + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_e > E_f$$

A jelölések ugyanazok mint az (5) képletek esetén.

### 3. EREDMÉNYEK

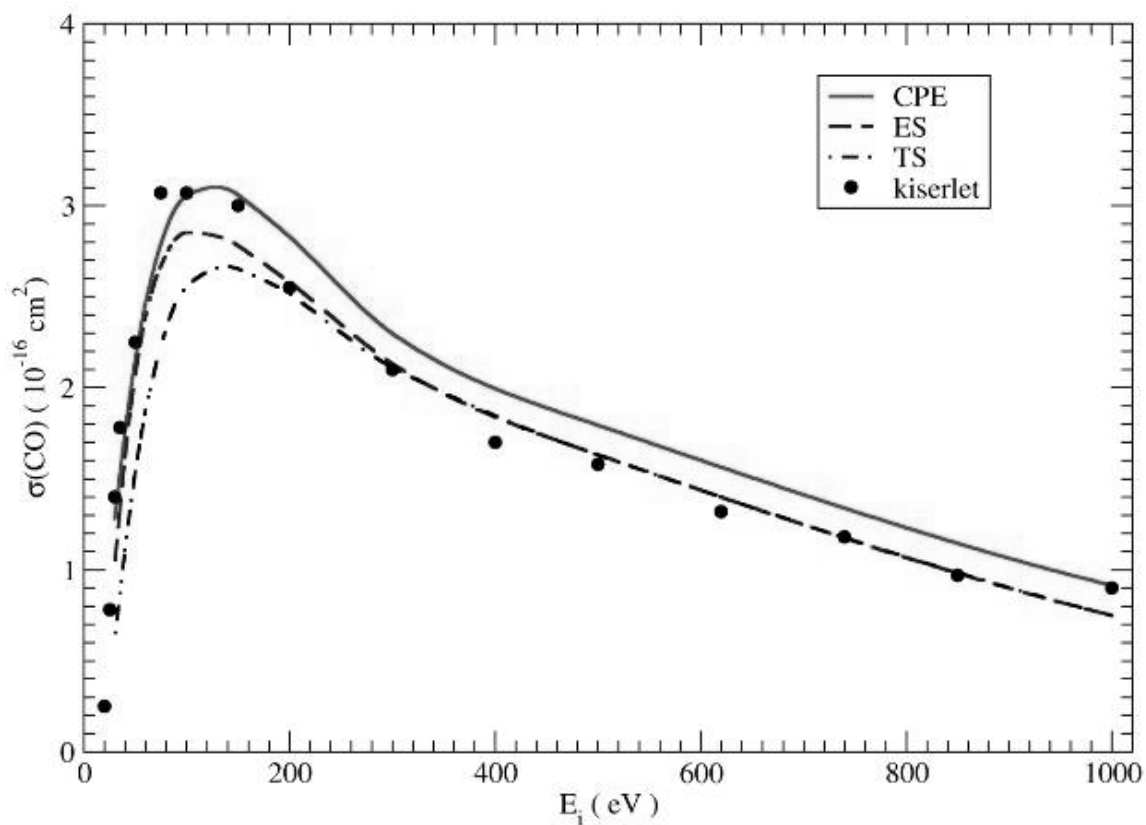
Az 1, 2, 3 és 4 ábrákon a teljes ionizációs hatáskeresztmetszeteket ábrázoltuk a lövedék energiájának a függvényében a tanulmányozott molekulák esetén. Az ábrák a CPE, ES illetve a TS modelleknek megfelelő hatáskeresztmetszeteket valamint Bluhme et al. [1] kísérleti adatait mutatják.

Az 1. ábra az  $N_2$  molekulára kapott eredményeket rögzíti. Ebben az esetben az ES modell alkalmazása a kísérleti adatokkal nagyon jól egyező eredményekhez vezet. A CPE modell 100 eV-nál kisebb energiákon vezet a kísérlettel való egyezéshez. Végül a TS modell csak a hatáskeresztmetszet maximumának környékén és alacsony energiákon tér el az ES modell eredményeitől.



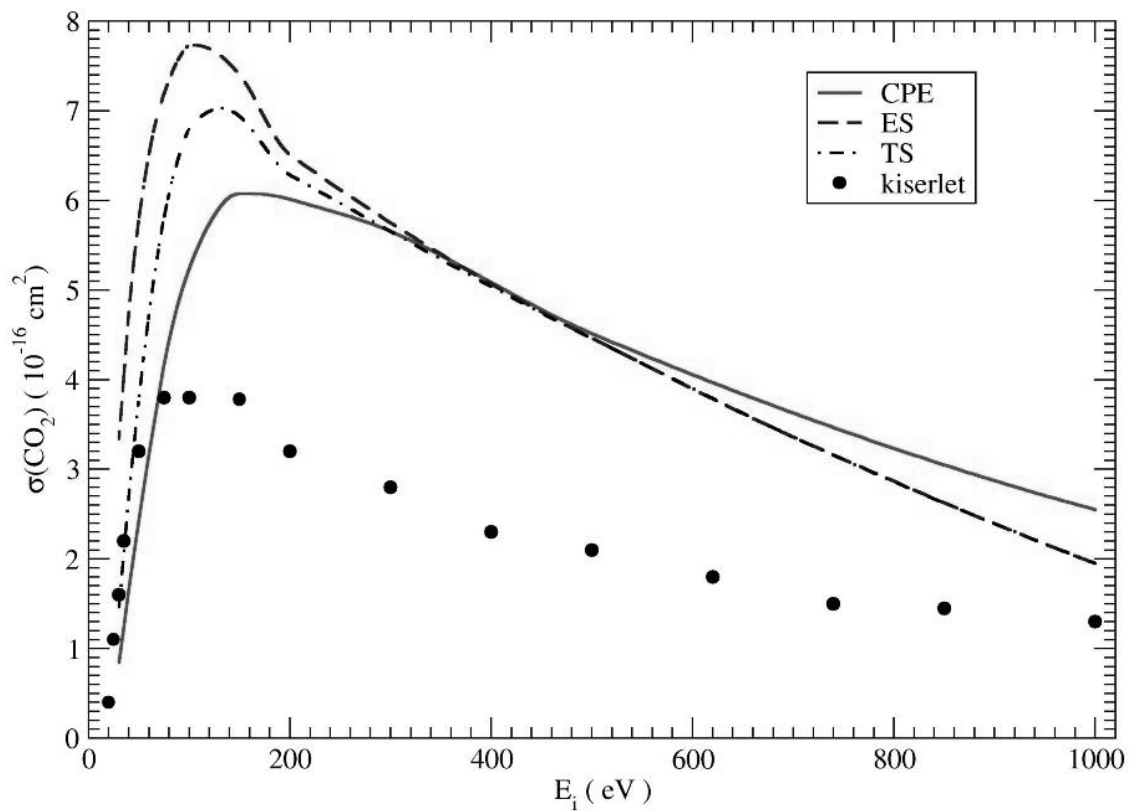
1. ábra

Az  $N_2$  molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(N_2)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1]-től származnak



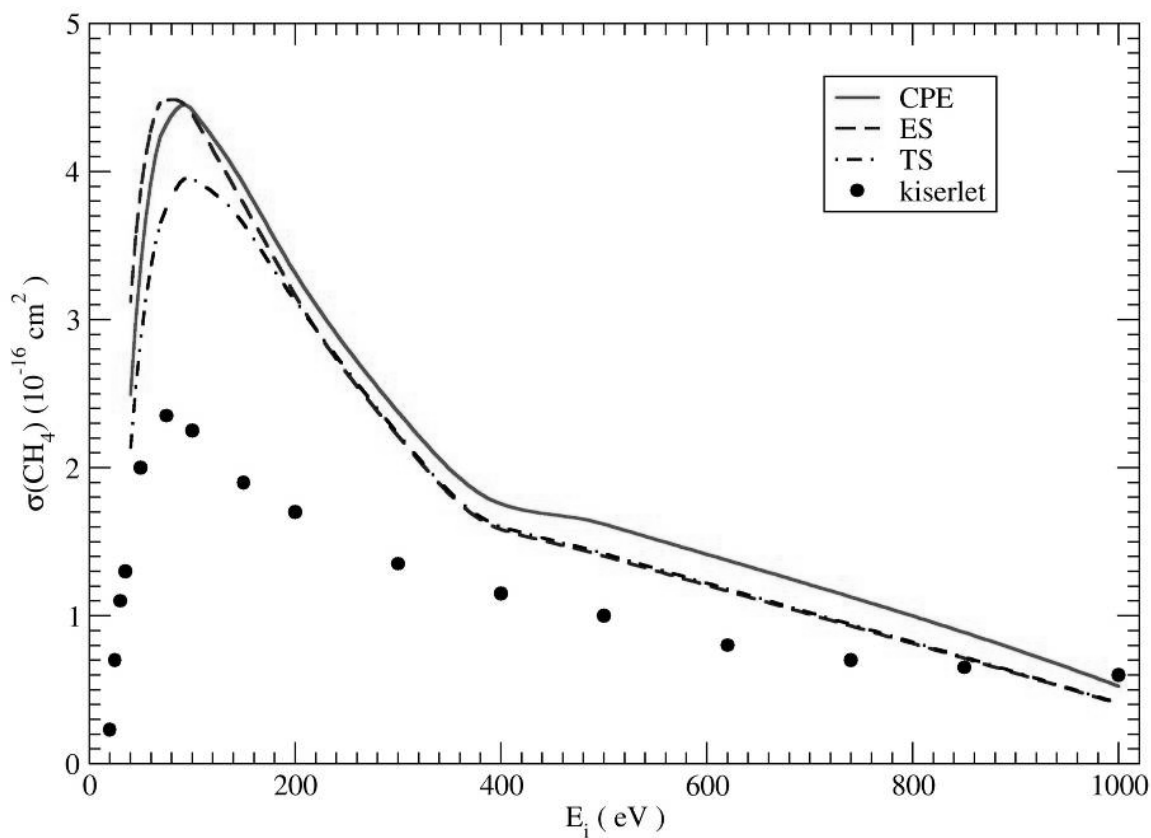
2. ábra

A CO molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(CO)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1]-től származnak



3. ábra

*A CO<sub>2</sub> molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(\text{CO}_2)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1] -től származnak*



4. ábra

*A CH<sub>4</sub> molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(\text{CH}_4)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1] -től származnak*



A 2. ábra a CO molekula esetén kapott eredményeket mutatja. 200 eV-nál nagyobb energiákon az ES és TS modellek eredményei jobb egyezést mutatnak a kísérleti értékekkel mint a CPE eredmények. A maximum környékén illetve kis energiákon a CPE modell egyezik jobban a kísérlettel.

A CO<sub>2</sub> molekula ionizációs hatáskeresztmetszeteit a 3. ábrán rögzítettük. Ezen molekula esetében a torzított hullámokat alkalmazó modelljeink a kísérleti eredményektől jelentős mértékben eltérő eredményekhez vezetnek. A CPE modell alacsonyabb hatáskeresztmetszet-értékeket szolgáltat, azonban a kísérlettől való eltérés ebben az esetben is jelentős. A kísérlet és elmélet közti nagy eltérés oka a CO<sub>2</sub> molekula nagy méretében rejlik illetve abban, hogy a kilökött elektron hullámfüggvényét egy-centrumú, szférikus potenciálban határoztuk meg. Egy lehetséges megoldás lehet a kilökött elektron több-centrumú hullámfüggvényekkel való leírása.

Végül, a 4. ábrán a CH<sub>4</sub> molekulára kapott eredmények láthatók. 800 eV alatti energiákon az ES és TS modellek jelentős eltérést mutatnak a kísérletileg mért hatáskeresztmetszetektől. A maximum környékén a TS modell alacsonyabb értékeket szolgáltat mint a CPE és ES modell.

#### 4. KÖVETKEZTETÉSEK

A jelen tanulmány során a DWBA módszert alkalmaztuk az N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák pozitronokkal való ionizációjának a tanulmányozására. A módszer keretében a lövedék, a szórt pozitron illetve a kilökött elektron hullámfüggvényeit egy szférikusan átlagolt, árnyékolt térben határoztuk meg. A tanulmányozott molekulák esetén javított eredményeket kaptunk az előzőleg alkalmazott CPE modell eredményeihez képest, ahol a szabad részecskék leírására Coulomb-típusú hullámfüggvényeket vagy síkhullámokat alkalmaztak. Ezek a javítások főleg a nagyobb impakt-energiák tartományában egyértelműek. Az eredmények azt sugallják, hogy a torzított hullámokat alkalmazó modelljeink főleg a kétatomos molekulák esetén működőképesek. Az N<sub>2</sub> és CO molekulára kapott eredmények nagyon jó egyezést mutatnak a kísérleti adatokkal, azonban a CH<sub>4</sub> molekula esetén is tapasztaltunk javulást. Továbbra is fennmaradt a kísérleti és elméleti eredmények közti jelentős eltérés a CO<sub>2</sub> molekula esetében. Úgy találtuk, hogy az eltérés oka a molekula nagy méretében rejlik. Egy lehetséges megoldást jelenthet ebben az esetben a kilökött elektron állapotának a jellemzése több-centrumú hullámfüggvényekkel.

#### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Tóth István munkáját a Sapientia Alapítvány Kutatási Programok Intézete támogatta.

#### HIVATKOZÁSOK

- [1] H. Bluhme, N. P. Frandsen, F. M. Jacobsen, H. Knudsen, J. Merrison, R. Mitchell, K., Paludan, M. R. Poulsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32** (1999) 5825.
- [2] H. Knudsen, L. Brun-Nielsen, M. Charlton, M. R. Poulsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt., Phys. **23** (1990) 3955.
- [3] J. Moxom, P. Ashley, G. Laricchia, Can. J. Phys. **74** (1996) 367.
- [4] F. M. Jacobsen, N. P. Frandsen, H. Knudsen, U. Mikkelsen, D. M. Schrader, J. Phys., B: At. Mol. Opt. Phys **28** (1995) 4675.
- [5] G. Laricchia, J. Moxom, M. Charlton, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 3229.
- [6] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Phys. Lett. A **310** (2003) 445.
- [7] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Phys. Lett. A **344** (2005) 247.
- [8] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Nucl. Instr. Meth. B **221** (2004) 21.
- [9] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Nucl. Instr. Meth. B **247** (2006) 58.
- [10] I. Tóth, R. I. Campeanu, V. Chiş and L. Nagy, Phys. Lett. A, **360** (2006) 131.

# Atomok (molekulák) fotoionizációja során jelentkező rezonanciahatások

## Resonance Effects in the Photoionization of Atoms (Molecules)

BORBÉLY Sándor, NAGY László

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika kar,  
400084 Kolozsvár (Cluj), Kogălniceanu u. 1, Románia, email: lnagy@phys.ubbcluj.ro

### ABSTRACT

*In the recent years much theoretical and experimental work about the ultrashort laser field – quantum system interaction was published (for reviews see [1, 2]). In these theoretical works the consecutive laser pulses are discussed separately or only one pulse is considered [3]. In the present work we show that in the case of moderately intense pulses with high repetition rate the spectral interference between different pulses have an important role, which in the case of photoionization of atoms (molecules) leads to resonance - like effects*

### ÖSSZEFOGLALÓ

*Az elmúlt években számos elméleti és kísérleti munka tárgya volt az intenzív lézerimpulzusok és különböző kvantummechanikai rendszerek közötti kölcsönhatás [1,2]. Ezen munkákban az egymás után következő lézerimpulzusokat külön tárgyalták, vagy csak egy impulzus hatását vették figyelembe [3]. Jelen tanulmányban közepesen intenzív nagy ismétlődési rátával rendelkező lézerimpulzusok esetén rámutatunk a spektrális interferencia fontosságára, amely fotoionizáció esetén a kilépő elektron spektrumában rezonanciahatások megjelenéséhez vezet.*

**Kulcsszavak:** rezonanciahatások, spektrális interferencia, fotoionizáció, intenzív lézerimpulzusok

### BEVEZETŐ

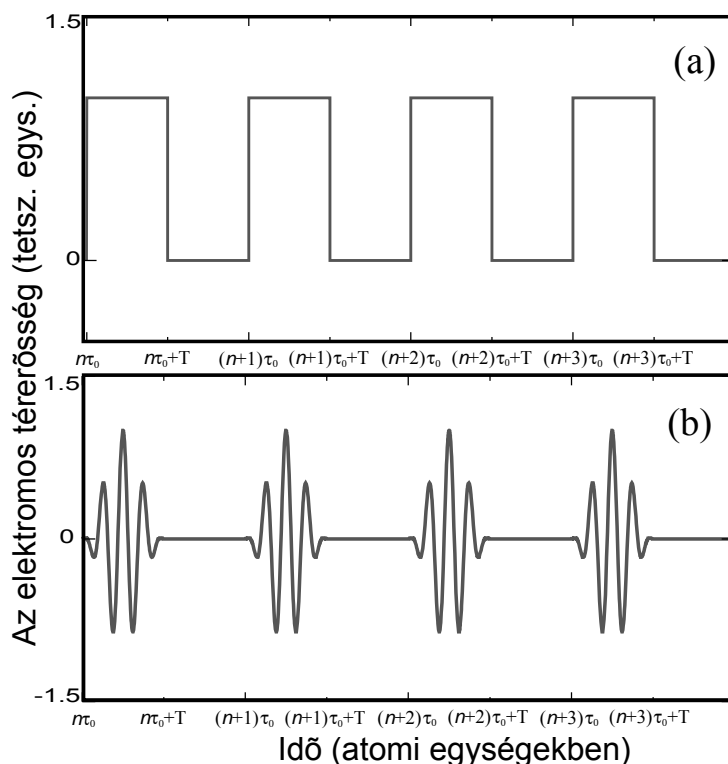
A lézerfizika elmúlt években tapasztalható rendkívüli fejlődésének köszönhetően számos kísérletet végeztek különböző intenzitású és időtartamú lézerimpulzusok és atomok, molekulák, valamint klasszterek közötti kölcsönhatás tanulmányozása végett [1, 2, 4, 5]. A kísérleti eredmények értelmezéséhez szükség van könnyen kezelhető elméleti modellekre.

A relativisztikus hatások elhanyagolásával a külső lézerterek és kvantummechanikai rendszerek közötti kölcsönhatás leírható az időtől függő Schrödinger-egyenlet (IFSE) segítségével. Az IFSE csak a legegyszerűbb esetben (szabad, töltött részecske külső lézertérben) oldható meg analitikusan, ezért a kísérletek szempontjából fontos esetekben a IFSE-et numerikusan [6-8] vagy közelítések alkalmazásával analitikusan kell megoldani.

A numerikus megoldás hátránya, hogy nagy rendszerek (kettőnél több aktív részecske) esetén a jelenlegi személyi számítógépeken kivitelezhetetlen illetve kis rendszereknél nagy intenzitású külső lézertér esetén nagyon lassan konvergál [6].

A legegyszerűbb IFSE közelítő megoldásán alapuló, a legtöbb esetben analitikusan végigszámolható modell az időtől függő perturbációs módszer (IFPM). Az IFPM a perturbációs tartományban helyes megoldásokat ad, miközben a perturbációs tartományon kívüli folyamatokról is szerezhetünk minőségi információt.

Jelen tanulmány az IFPM-t használja, mivel fő célunk a kvantumátmenetek során jelentkező rezonanciahatások minőségi leírása. Az eddigi tanulmányokkal ellentétben az egymásután következő lézerimpulzusok hatását együtt tárgyaljuk. A tanulmány során az atomi egységeket használjuk.



1. ábra  
A lézerpulzusok: (a) téglalap, (b) szinusz-négyzetes

## ELMÉLET

A külső lézertérrel lineárisan polarizáltak tekintjük  $\hat{\varepsilon}$  polarizációs vektor mentén. Az egyes impulzusok alakját egyszerű analitikus függvények segítségével írjuk le. Téglalap impulzusok esetén

$$f(t) = \begin{cases} 1 & \text{ha } t \in (0, T) \\ 0 & \text{máshol} \end{cases}, \quad (8)$$

valamint szinusz-négyzetes impulzusok esetén

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin(\omega t + \phi_0) & \text{ha } t \in (0, T) \\ 0 & \text{máshol} \end{cases}, \quad (9)$$

ahol  $T$  az impulzusok hossza,  $\omega$  a hordozóhullám frekvenciája és  $\phi_0$  a hordozóhullám kezdőfázisa.

Az impulzusvonal felépíthető az egyedi impulzusok összegzésével (lásd 1. ábrát) és a külső elektromos tér erőssége a rendszer középpontjában

$$\vec{E} = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\varepsilon} E_0 f(t - n\tau_0), \quad (10)$$

ahol  $\tau_0$  az időtartam két egymás utáni lézerpulzus között. A dipól közelítés és a (10) egyenlet felhasználásával a perturbációs potenciál hosszúságmértékben megadható mint:

$$U(t) = \hat{\varepsilon} \vec{r} E_0 \sum_{n=0}^{\infty} f(t - n\tau_0). \quad (11)$$

Az első  $n$  lézerimpulzus hatására az  $i$  kezdeti- és  $f$  végállapot közötti átmeneti valószínűségi amplitúdó a IFPM elsőrendű közelítésében a következőképpen írható fel

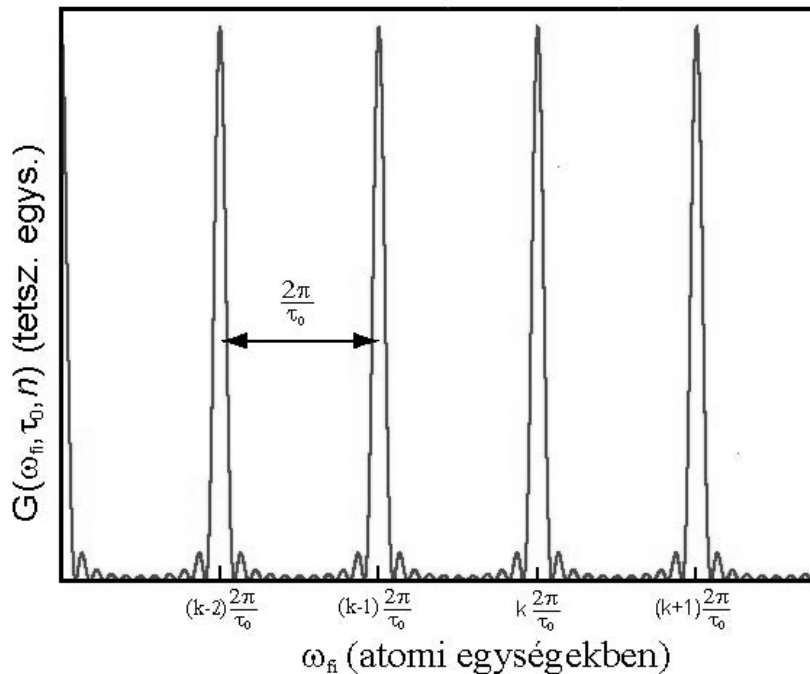
$$a^{(1)} = -i \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \langle \Psi_f | U(t') | \Psi_i \rangle, \quad (12)$$

ahol  $\omega_{fi} = E_f - E_i$  a kezdeti és végállapot közötti energiakülönbség. A fenti kifejezés egyszerű számítások segítségével a következő alakra hozható:

$$a^{(1)}(n) = -iE_0 \langle \Psi_f | \hat{\epsilon}\vec{r} | \Psi_i \rangle F(T, \omega, \omega_{fi}) \left[ \frac{1 - e^{i\omega_{fi}n\tau_0}}{1 - e^{i\omega_{fi}\tau_0}} \right], \quad (13)$$

ahol

$$F(T, \omega, \omega_{fi}) = \int_0^T e^{i\omega_{fi}t} f(t) dt. \quad (14)$$



2. ábra

$G(\omega_{fi}, \tau_0, n)$  az  $\omega_{fi}$  függvényében ha  $\tau_0 = 25 a.u.$  és  $n = 10$

Az átmeneti valószínűség megadható mint az átmeneti valószínűségi amplitúdó modulusz-négyzete

$$P_{fi}(n) = E_0^2 \left| \langle \Psi_f | \hat{\epsilon}\vec{r} | \Psi_i \rangle \right|^2 \left[ \frac{\sin\left(\frac{\omega_{fi}n\tau_0}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\omega_{fi}\tau_0}{2}\right)} \right]^2 |F(T, \omega, \omega_{fi})|^2. \quad (15)$$

## EREDMÉNYEK

A fent megadott átmeneti valószínűség három tagból tevődik össze.

Az első az dipól átmeneti mátrixelem segítségével fejezhető ki és a kezdeti valamint a végállapot hullámfüggvényétől függ.

A második tag foglalja magába a spektrális interferencia hatását, amely az egymás utáni lézerpulzusok spektrális összetevői közötti interferencia következtében jelenik meg

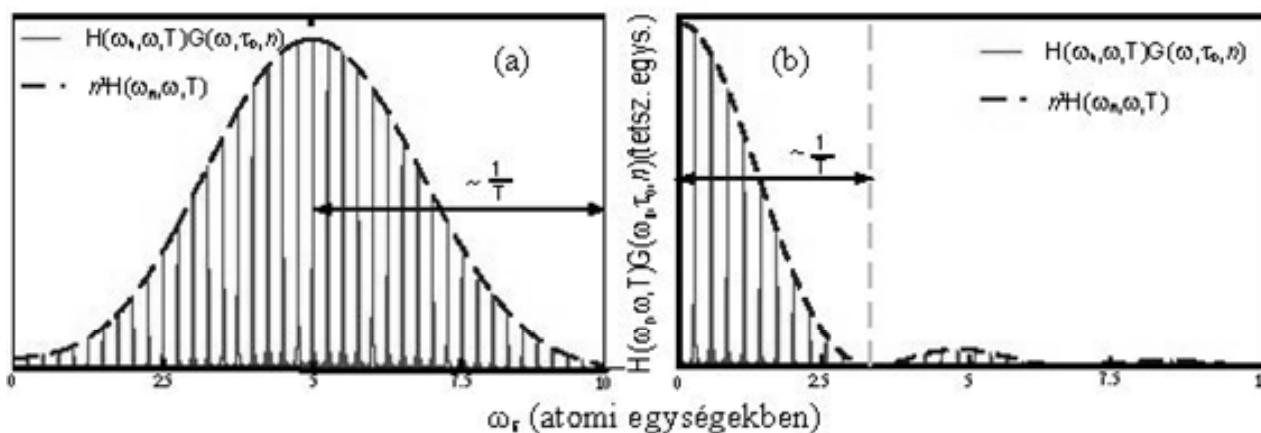
$$G(\omega_f, \tau_0, n) = \left[ \frac{\sin\left(\frac{\omega_f n \tau_0}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\omega_f \tau_0}{2}\right)} \right]^2. \quad (16)$$

A 2. ábrán látható nagy  $n$  értékekre  $G(\omega_f, \tau_0, n)$ -nek éles maximumai vannak minden  $\omega_f = \frac{2k\pi}{\tau_0}$  értékre, ahol  $k$  tetszőleges egész szám.

A harmadik tag értékét a lézerpulzusok alakja határozza meg

$$H(\omega_f, \omega, T) = \left| F(T, \omega, \omega_f) \right|^2 \quad (17)$$

és nyilvánvaló kapcsolatban van a burkológörbe Fourier transzformáltjával.



3. ábra

$G(\omega_f, \tau_0, n)H(\omega_f, \omega, T)$  az  $\omega_f$  függvényében (a) szinusz-négyzetes burkolójú impulzusok esetén ha  $\tau_0 = 25$  a.e.,  $\omega = 5$  a.e.,  $T = 2.1$  a.e. és  $n = 10$ , valamint (b) téglalap burkolójú impulzusok esetén ha  $\tau_0 = 25$  a.e.,  $\omega = 0.5$  a.e.,  $T = 2.1$  a.e. és  $n = 10$ .

Jelen tanulmányban téglalap és szinusz-négyzetes burkolójú lézerpulzusokra végeztük el a számításokat. Mindkét esetben  $H(\omega_f, \omega, T)$  egy globális maximummal rendelkezik, amelyet számos lokális maximum követ. Szinusz-négyzetes impulzusok esetén a globális maximum  $\omega_f = \omega$ -nál (3. a. ábra), míg téglalap impulzusok esetén  $\omega_f = 0$ -nál (3.b. ábra) helyezkedik el és mindkét esetben a maximumok közötti távolság  $\frac{2\pi}{T}$ .

Fotoionizáció esetén a kísérletileg kimérhető átmeneti valószínűség nem egyezik meg az elméletileg számolt egzakt értékkel. Ez az elektron-spektrométerek véges energiafelbontásának következménye, azaz a kísérletileg mért átmeneti valószínűség az elméleti valószínűségnek az elektron-spektrométer által meghatározott energiaintervallumra vett átlaga:

$$\bar{P}_{fi}(n) = \frac{1}{2\eta} \int_{E_f - \eta}^{E_f + \eta} P_{fi}(n) dE_f', \quad (18)$$

ahol  $\eta$  a spektrométer felbontása.

Könnyen igazolható, hogy ha a spektrométer felbontása eleget tesz a következő feltételnek:

$$\eta \geq \frac{2\pi}{\tau_0}, \quad (19)$$

akkor a  $\bar{P}_{fi}(n) = nP_{fi}(1)$ , azaz az elektron-spektrométer kiátlagolja a spektrális interferencia miatt megjelenő rezonanciahatásokat. Ha a (19) feltétel teljesül, akkor a lézerpulzusok hatása külön tanulmányozható, ha nem, akkor a lézerpulzusok együttes hatásának tanulmányozása szükséges.

Jelen pillanatban az elektron-spektrométerek felbontása eléri a 70 meV-ot. Ebben az esetben a rezonanciahatások csak akkor figyelhetők meg, ha a lézerpulzusok ismétlődési rátája meghaladja a 40 THz-et.

Femtosekundumos lézerpulzusok esetén az ismétlődési ráta a kHz-MHz tartományban mozog, amely a fent megállapított frekvenciahatár alatt van, így femtosekundumos lézerpulzusoknál a rezonanciahatások kiátlagolódnak.

A újonnan előállított attosekundumos lézerpulzusok ismétlődési rátája a fent megállapított határ fölött található [9, 10], így az attosekundumos lézerpulzusok esetén a rezonanciahatások jelentős szerepre tehetnek szert.

## KÖVETKEZTETÉSEK

Egyszerű perturbációs megközelítés segítségével sikerült meghatározni az átmeneti valószínűséget és egy, a lézerpulzusok alakjától független, az ismétlődési ráta által meghatározott rezonanciahatást kimutatni.

Bebizonyítottuk, hogy ezen rezonanciahatásokat kísérletileg csak akkor lehet kimutatni, ha a (19) feltétel nem teljesül. Femtosekundumos lézerpulzusok esetén az ismétlődési ráta jóval a (19) feltétel által meghatározott küszöb alatt van, így elmondhatjuk, hogy femtosekundumos lézerpulzusok esetén a rezonanciahatások elhanyagolhatóak.

A lézertechnológia utóbbi időben elért fejlődése révén már attosekundumos lézerpulzusok előállítása lehetséges. Ezen impulzusok esetén az ismétlődési ráta jóval a megállapított küszöb fölött található, így az attosekundumos lézerpulzusok által generált folyamatok esetén az itt bemutatott rezonanciahatások nagy jelentőséggel bírnak.

## BIBLIOGRÁFIA

- [1] M. Protopapas, C. H. Keitel, P. L. Knight, Rep. Prog. Phys. 60 (1997) 389 – 489.
- [2] A. Pukhov, Rep. Prog. Phys. 66 (2003) 47 – 101.
- [3] G. Duchateau et. al., J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys., 33 (2000) L571-L576.
- [4] U. Saalman et. al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39 (2006) R39.
- [5] J. H. Posthumus, Rep. Prog. Phys. 67 (2004) 623.
- [6] M. Pont et. al., Phys. Rev. A 44 (1991) 4486.
- [7] E. Cormier and P. Lambrapoulos, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (1997) 77.
- [8] C. E. Dateo and M. Metiu, J. Chem. Phys. 95 (1991) 7392.
- [9] P. A. Paul et. al., Science 192 (2001) 1689.
- [10] Y. Nabekawa et. al., Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 083901.

