



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY

FACULTATEA DE FIZICĂ

Str. Mihail Kogălniceanu nr.1
Cluj-Napoca, RO-400084
Tel: +4(0)264-405300 | FAX: +4(0)264-591906
secretariat.phys@ubbcluj.ro
www.phys.ubbcluj.ro



LUCRARE DE LICENȚĂ

Coordonator științific
prof. dr. Ladislau Nagy

Absolvent
Elekes Kriszta-Adrienn

2024



UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI
BABEȘ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEȘ-BOLYAI UNIVERSITY

FACULTATEA DE FIZICĂ
Str. Mihail Kogălniceanu nr.1
Cluj-Napoca, RO-400084
Tel: +4(0)264-405300 | FAX: +4(0)264-591906
secretariat.phys@ubbcluj.ro
www.phys.ubbcluj.ro



UNIVERSITATEA "BABEȘ-BOLYAI", CLUJ-NAPOCA

FACULTATEA DE FIZICĂ

SPECIALIZAREA FIZICĂ INFORMATICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

EFECTE DE INTERFERENȚĂ ÎN IONIZAREA
MOLECULEI DE HIDROGEN

Coordonator științific
prof. dr. Ladislau Nagy

Absolvent
Elekes Kriszta-Adrienn

2024



UNIVERSITATEA BABEŞ-BOLYAI
BABEŞ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM
BABEŞ-BOLYAI UNIVERSITÄT
BABEŞ-BOLYAI UNIVERSITY

FACULTATEA DE FIZICĂ
Str. Mihail Kogălniceanu nr.1
Cluj-Napoca, RO-400084
Tel: +4(0)264-405300 | FAX: +4(0)264-591906
secretariat.phys@ubbcluj.ro
www.phys.ubbcluj.ro



BABEŞ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM, KOLOZSVÁR

FIZIKA KAR

FIZIKA-INFORMATIKA SZAK

LICENSZ DOLGOZAT

INTERFERENCIA JELENSÉGEK A HIDROGÉNMOLEKULA
IONIZÁCIÓJA ESETÉN

Témavezető

dr. Nagy Ladislau, professzor

Szerző

Elekes Kriszta-Adrienn

2024

Kivonat

1924-ben Louis de Broglie doktori dolgozatában jelent meg az a hipotézis, amely szerint a részecskéknek kettős természetük van: részecske és hullám. A feltételezés helyességét olyan kísérletekkel lehet alátámasztani, melyek során a részecske hullámtermészete nyilvánul meg – interferencia vagy diffrakció esetén. N. Stolterfohtnak és társainak [1] sikerült kísérleti úton interferencia jelenségeket észlelni a hidrogénmolekula ionizációjakor a kilökött elektron energiaspektrumában.

Jelen dolgozatban a kísérletileg kapott eredményeket vizsgáljuk elméleti és numerikus számítások révén. Szimuláció segítségével többféle nagyenergiájú ion H_2 -val való ütközések differenciális ionizációs hatáskeresztmetszeteket számolunk a kilökött elektronok sebességének vagy energiájának függvényében. A megjelenő interferencia-mintázatot a molekula véletlenszerű térbeli elhelyezkedésére, de különböző rögzített molekulatengely-irányokra is elemezzük.

Abstract

In 1924, Louis de Broglie proposed in his doctoral thesis the hypothesis that particles have a dual nature: particle and wave. The validity of this assumption can be supported by experiments where the wave nature of the particle manifests itself, such as in interference or diffraction. N. Stolterfoht and colleagues [1] succeeded in experimentally observing interference patterns during the ionization of the hydrogen molecule, in the energy spectrum of the ejected electron.

In this paper, we examine the experimentally obtained results through theoretical and numerical calculations. Using simulations, we compute differential ionization cross-sections as a function of the velocity or energy of the ejected electrons during collisions of various high-energy ions with H_2 . The observed interference pattern is analyzed for random spatial orientation of the molecule as well as for different fixed molecular axis orientations.

Tartalomjegyzék

Bevezető	1
1. Az elektron hullámtermészete	4
1.1. A Davisson–Germer-kísérlet	5
1.2. George Paget Thomson kísérlete	7
1.3. Young kétrés kísérlete – elektronokkal	8
2. Ionizációs hatáskeresztmetszet számítása elsőrendű perturbációs közelítésben	11
2.1. Az időtől függő perturbációs módszer alapjai	11
2.2. A hatáskeresztmetszet klasszikus értelmezése	15
2.3. A hatáskeresztmetszet kvantummechanikai értelmezése	17
2.4. Elektronátmenetek töltött részecskével való ütközés hatására	18
3. Interferencia észlelése a hidrogénmolekula ionizációjakor	21
4. A két-centrum hatás közelítő számítása a H₂-ből kilökött elektronok spektrumában	23
4.1. Analitikus számolások	23
4.2. Kapott eredmények és tárgyalásuk	28
4.2.1. Kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet	29
4.2.2. Interferencia jelenségek	29
5. Az interferencia-mintázat vizsgálata a molekulatengely iránya szerint	34
5.1. Kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet	34
5.2. Interferencia jelenségek	34
Következtetések	45
Hivatkozások	47

Bevezető

A szórás jelenség nagy jelentőséggel bír a klasszikus rendszerek tanulmányozásában. Sok olyan információ van az atomokról, atommagokról vagy elemi részecskékről, melyeket ütközési kísérletek révén ismertünk meg. A kísérleti eredmények megértéséhez fontos a megfigyelt jelenség elméleti leírása is. Szórások esetén hatáskeresztmetszeteket lehet számolni. Legtöbbször ez nem a legkönnyebb feladat, ezért arra kényszerülünk, hogy közelítéseket alkalmazzunk.

Az elektronok hullámtermészete már 1924-ben, Louis de Broglie doktori értekezésében megfogalmazódott, később kísérletek is alátámasztották ezt. Ennek ellenére a hullámtermészet megnyilvánulását kétatomos molekulák nagyenergiájú ionokkal való ütközés hatására történő ionizáció során sokáig nem tudták kimutatni. Az első kísérleti eredmény 2001-ben született meg [1], N. Stolterfoht és társai sikeresen észleltek interferencia jelenségeket a legegyszerűbb kétatomos molekula, a hidrogénmolekula ionizációjakor a kilökött elektron spektrumában. Kísérletük során kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetet mértek a kilökött elektron sebessége és szöge szerint. Ez nem elegendő az interferencia megfigyelésére, ezért azt az újítást vezették be, hogy a mért hatáskeresztmetszetet osszák el a hidrogénatom hatáskeresztmetszetének kétszeresével. A kilökött elektron sebességének függvényében ábrázolt hatáskeresztmetszet-arányban fellépő oszcilláció bizonyítékul szolgált az interferenciára.

A hidrogénmolekula két atomja között lévő távolság \AA nagyságrendű, ami összemérhető az elektronok hullámhosszával. Ez a két atom tekinthető két szórócentrumnak. A molekula atommagjainak közeléből kibocsátódó koherens hullámok interferálnak a kilökött elektron spektrumában. Az interferencia-mintázatot véletlenszerű molekulatengely-irány esetén figyelték meg.

Stolterfoht és társai felállítottak egy elméleti modellt is, viszont a modell nem magyarázta az oszcillációk függését a kilökött elektron szögétől. Nem sokkal a kísérlet után Nagy és társai kidolgoztak egy elméleti leírást a jelenség magyarázatára [2]. Sikerült kimutatni, hogy a hatáskeresztmetszet-arányban fellépő oszcilláció milyen módon függ a kilökött elektron szögétől, illetve azt is, hogy merőleges irányba kilökött elektronok esetén az oszcilláció nem észlelhető. Ezen eredmények egy későbbi kísérletben igazolódtak [3].

Jelen dolgozat célja, hogy a Nagy és társai által ismertett elméleti leírást követve [2], többféle nagyenergiájú ion hidrogénmolekulával való ütközésekor differenciális ionizációs

hatáskeresztmetszeteket számoljunk, a kilökött elektronok sebességének vagy energiájának függvényében. Emellett a megjelenő interferencia-mintázatot tanulmányozzuk két esetben – a molekulatengely véletlenszerű elhelyezkedésére a térben, illetve különböző rögzített molekulatengely-irányokra.

A dolgozat szám szerint öt fejezetből épül fel. Az első fejezetben azon jelentős kísérletek kerülnek bemutatásra, amelyek alátámasztják az elektron hullámtermészetét: Davisson és Germer kísérlete, G. P. Thomson kísérlete, illetve a Young-féle kétrés kísérlet elektronokkal Tonomura és társai által megvalósítva.

A második fejezetben az elsőrendű perturbációs közelítésben vett ionizációs hatáskeresztmetszet számításának elméletét ismerteti – leírja az időtől függő perturbációs módszer alapjait, ismerteti a hatáskeresztmetszet klasszikus és kvantummechanikai értelmezését, illetve egyelektron átmenetek esetén az elsőrendű átmeneti amplitúdó számolása követhető nyomon.

A harmadik fejezetben részletezzük azt a kísérletet, amely során sikerült először interferenciát észlelni a legegyszerűbb kétatomos molekula, a hidrogénmolekula ionizációjakor. Ez adta az alapot a részletesebb tanulmányozásra és elméleti leírás kidolgozására, illetve annak további fejlesztésére és javítására.

A negyedik fejezetben a két-centrum hatás közelítő számolása a hidrogénmolekulából kilökött elektronok spektrumában kerül ismertetésre és részletezésre. Bemutatjuk a félklasszikus impakt paraméter közelítést, az elméleti számolásokat. A fejezetben belül olyan kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek számolását végeztük el, amikor 60 MeV/u Kr^{34+} és 68 MeV/u Kr^{33+} ionok ütköztek H_2 -val, ezeket az eredményeket össze is hasonlítjuk a kísérleti eredményekkel. Továbbá az interferencia-mintázat elemzésére is sor kerül a molekulatengely véletlenszerű térbeli elhelyezkedése esetén. Ezt a molekula kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetének és két hidrogénatom hatáskeresztmetszetének arányával tudjuk a legjobban leírni és megfigyelni. Ezeket az arányokat nemcsak a kilökött elektron sebessége, hanem a szöge szerint is megvizsgáljuk. Az interferencia-mintázatot olyan lövedék ionok esetén nézzük meg, mint 60 MeV/u Kr^{34+} , 68 MeV/u Kr^{33+} , 13.7 MeV/u C^{6+} és 3 MeV/u H^+ .

Az ötödik és utolsó fejezetben reprodukálásra kerülnek Póra doktori dolgozatában ismertetett differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetek [4] 13.7 MeV/u C^{6+} lövedék esetén. Az eredmények rögzített molekulatengely-irányokra vonatkoznak – a lövedék

trajektóriájához viszonyítva azzal párhuzamos, arra merőleges és vele 45° -ot bezáró molekulatengely-állásokra. A dolgozat újítása, hogy az interferencia-mintázatot vizsgálja rögzített molekulatengely-irányokra, a kilökött elektronok szöge és sebessége szerint. Ezen eredmények kísérleti alátámasztásra várnak.

1. Az elektron hullámtermészete

A tudomány fejlődése során több elképzelés is született arról, hogy milyen természete van a fénynek. Isaac Newton volt az, aki *Hypothesis of Light* írásában kijelentette, hogy a fény részecskékből áll. Christiaan Huygens ezzel szemben a fényt hullámként tekintette. Az optika terén több felfedezés is alátámasztotta az utóbbi hipotézist, így rövid időre elvetették a részecske elméletet. A XIX. században Michael Faraday azt feltételezte, hogy a fény egy elektromágneses rezgés, amely a Maxwell-egyenletek szerint terjed.

Ez az elmélet 1900-ban megkérdőjeleződött, amikor Max Planck empirikus úton összefüggést írt fel a feketetest hőmérsékleti sugárzására. Ehhez azzal a feltételezéssel kellett élnie, hogy az elektromágneses állóhullámok csak olyan energiaállapotban lehetnek, melyek egy ϵ_0 legkisebb energia egész számú többszöröseként adhatók meg [5]. Hogy eleget tegyen a Wien-törvénynek, az ϵ_0 energiát a frekvenciával arányosnak kell tekinteni

$$\epsilon_0 = h\nu, \quad (1.1)$$

ahol h egy univerzális állandó, Planck-állandónak hívjuk és értéke $6.626 \cdot 10^{-34}$ Js.

Planck arra a következtetésre jutott, hogy az elektromágneses sugárzás kibocsátása és elnyelése csak $h\nu$ energiaadagokban lehetséges – ennek a mennyiségnek a kvantum nevet adta.

Így a fény és általában az elektromágneses sugárzás kettős természettel rendelkezik. A kísérleti és megfigyelési feltételektől dől el, hogy melyik természet nyilvánul meg. Ennek a viselkedésnek értelmezésére és leírására Niels Bohr bevezette a komplementaritás elvét: eszerint a sugárzás részecske- és hullámtermészete nem figyelhető meg egyidőben, de kölcsönösen kiegészítik egymást [6]. Olyan jelenségek során, mint az interferencia, diffrakció vagy polarizáció, a sugárzás hullámtermészete nyilvánul meg, ezzel szemben fényelektromos hatás vagy Compton-szórás esetén a részecsketermészet kerül előtérbe.

1924-ben Louis de Broglie doktori értekezésében felvetett egy elméletet: ha az elektromágneses sugárzásnak kettős természete van, akkor a részecskék is hasonlóak kell legyenek. Ha általánosítjuk a fényre levezetett összefüggéseket, akkor minden mozgó részecskéhez hozzá lehet rendelni egy hullámhosszt. A fotonokra fel lehet írni, hogy

$$\begin{aligned} E &= mc^2 = h\nu \\ p &= \frac{1}{c} \sqrt{m^2 c^4} = \frac{mc^2}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

ahol m a foton mozgási tömegét jelöli és p a foton impulzusa. Ebből pedig az következik, hogy

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1.3)$$

Ezt nevezzük a de Broglie-féle hullámhossznak.

Ha bevezetjük a hullámvektort, melynek iránya és irányítása azonos a mozgó részecske irányával és irányításával, akkor a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \vec{k} &= \frac{\vec{p}}{\hbar} \\ k &= \frac{2\pi}{\lambda} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Ezen összefüggések általánosíthatók bármely p impulzusú részecskére. Tehát minden részecskéhez hozzá lehet rendelni egy λ de Broglie-hullámhosszú hullámot [7]. Később, 1929-ben Nobel-díjat kapott munkásságáért.

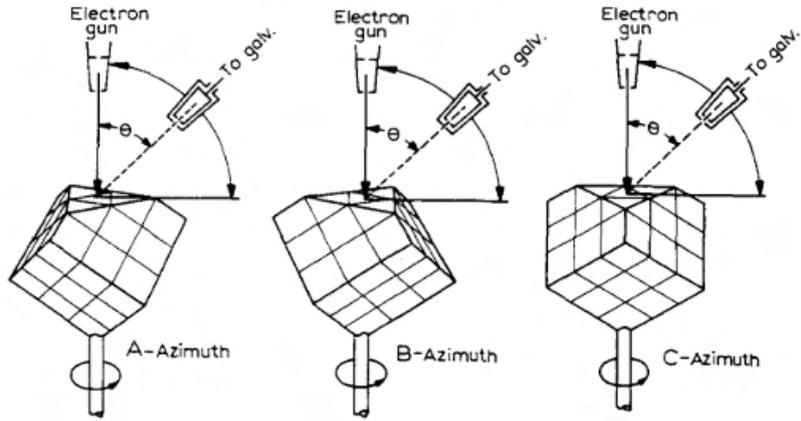
Ahhoz, hogy a hipotézis helytálló legyen, kísérleti bizonyításra volt szükség – tehát szükség van egy olyan kísérletre, amiben az elektron vagy más részecske hullámtermészete nyilvánul meg. Ehhez valamilyen interferencia vagy fényelhajlásos kísérletet kell elvégezni. Több ilyen kísérlet is született, ezek közül néhány a következő alfejezetekben lesz részletezve.

1.1. A Davisson–Germer-kísérlet

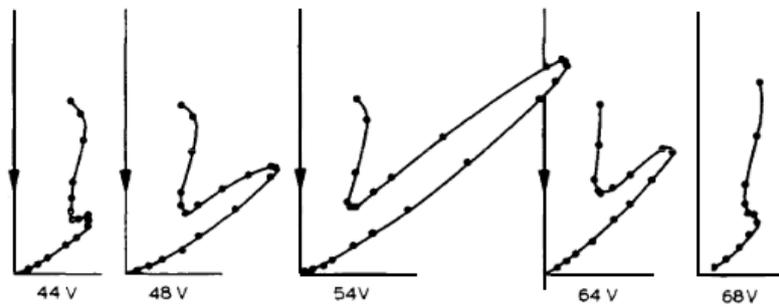
A mérföldkövet jelentő kísérletet Clinton Davisson és Lester Germer végezte el a Wester Electric, később Bell Labs laboratóriumában. Bár a kísérlet eredeti célja a nikkelfelületének tanulmányozása volt, Walter M. Elsasser javaslatára átalakult a de Broglie-hipotézist alátámasztó kísérletté.

Davisson és Germer 1927-ben a következő berendezést állították össze: vákuumkamrában egy elektronágyú nyalábot lőtt ki, amely merőlegesen esett a nikkeltől készült kristályra, és egy mozgatható elektrondetektor érzékelt a szórt nyalábot. Az elektronágyú tulajdonképpen egy melegített wolfram izzószál volt, feszültség alá helyezve a kibocsátott elektronokat gyorsította. Az elektronok más atomokkal való ütközésének elkerülése végett szükséges a vákuumkamra. Detektorként egy Faraday-poharat alkalmaztak. A kísérleti berendezés váza a 1.1 ábrán látható.

Az eredmények azt mutatták, hogy bizonyos szórési szögek esetén a szórt elektronnyalábnak éles maximuma volt. Ezeket a maximumokat a Bragg-összefüggéssel lehet magyarázni. Nikkel esetén például 54 V gyorsító feszültségnél észlelhető egy éles maximum [8], mert egy adott



1.1. ábra. Davisson–Germer-kísérlet során használt berendezés váza [8].



1.2. ábra. A szórt elektronnyaláb intenzitása a szóródási szög függvényében, polár koordinátákban. 54 V gyorsító feszültségnél éles maximum figyelhető meg [8].

Bragg-síkcsaládról szóródott elektronok dominálnak.

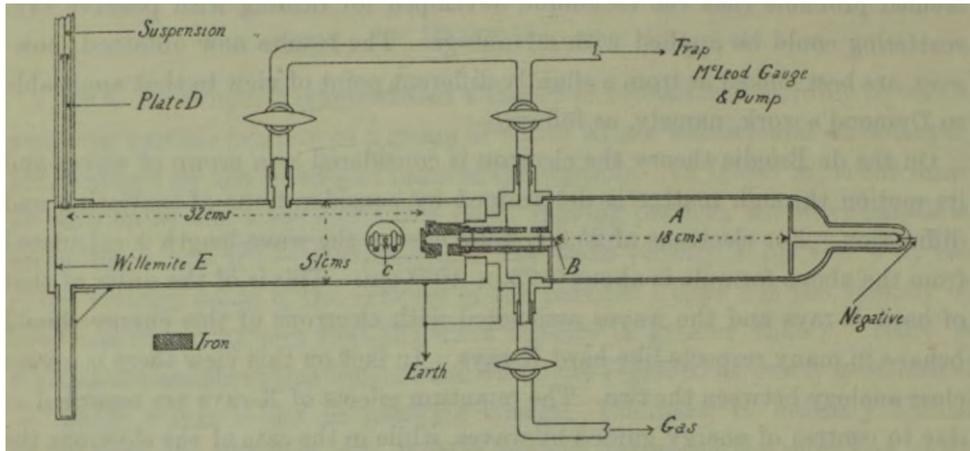
A hullámhossz meghatározására ugyanaz a Bragg-összefüggés alkalmazható, mint a röntgensugarak szóródása esetén. Az említett példával élve továbbra is, $U = 54 \text{ V}$ gyorsító feszültségnél az éles maximum $\phi = 50^\circ$ -nál adódik [9]. A beeső és visszavert nyaláb a Bragg-síkkal $\theta = (180^\circ - \phi)/2$ szöget alkot, ennek alapján

$$\lambda = 2d\sin\theta \quad (1.5)$$

lesz $n = 1$ -re, d jelöli a kristálysíkok közötti távolságot, ami röntgendiffrakciós módszerrel meghatározható. Jelen esetben ez $d = 0.91 \text{ \AA}$. Innen számolva az elektronhoz hozzárendelt hullám hullámhossza $\lambda = 1.65 \text{ \AA}$ [5]. Ha összevetjük a de Broglie-összefüggés szerinti hullámhosszal

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}}, \quad (1.6)$$

a két érték jó egyezést mutat. Ezáltal az elektron hullámtermészete kísérleti alátámasztást nyert.



1.3. ábra. G. J. Thomson kísérlete során használt berendezés [10].

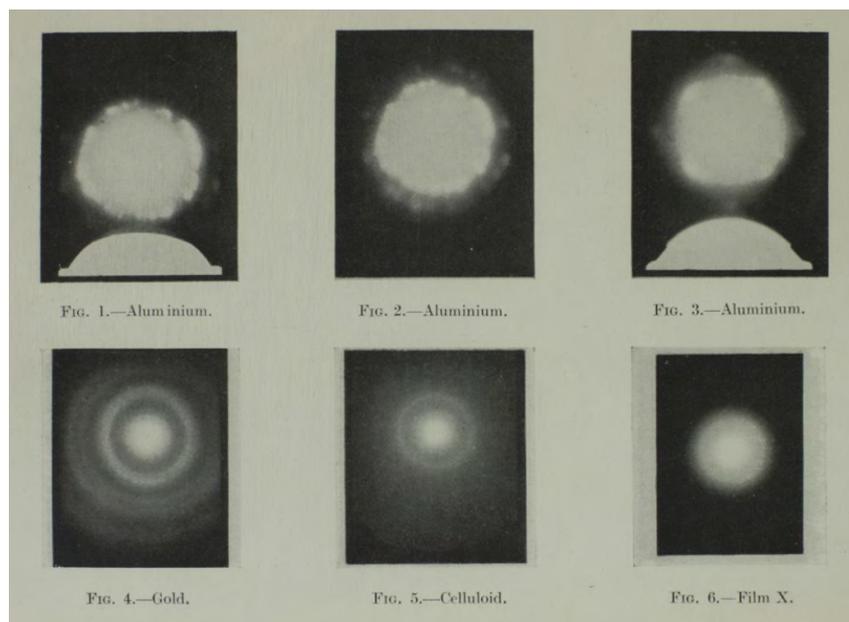
1.2. George Paget Thomson kísérlete

A Davisson–Germer-kísérlettől függetlenül George Paget Thomson angol fizikusnak is sikerült bizonyítania az elektron hullámtermészetét elektrondiffrakción keresztül. Munkásságáért Davissonnal együtt Nobel-díjat kapott 1937-ben.

Jelen kísérletben indukciós tekercs által előállított katódsugarak egy 18 cm-es csövön, majd egy lyukon haladnak át, ami egy lemezre irányítja a sugarakat, ezután pedig egy fényérzékeny lemezre esnek. A lyuk, amin áthalad a sugár, el van szigetelve a mágneses hatásoktól. A fényérzékeny lemez két szintre állítható, ebből adódóan két expozíció készíthető. A berendezés tartalmaz egy ernyőt is, amelyen megfigyelhetők a sugarak, amikor a fényérzékeny lemez még a kamera felső felében található. A kísérleti berendezés összetétele a 1.3 ábrán látható.

A kísérletek során olyan vékony polikristály réteget használt, mint alumínium, arany, celluloid és egy platinumnak hitt réteg, ami mérés során "sérült", ismeretlen anyaggá vált [10]. Az eredmények minden esetben azt mutatták, hogy koncentrikus körök sorozata jelent meg az eltérítetlen nyaláb becsapódási helye körül. A körök az eltérített nyalábok hatására jelentkeztek, sötét és világos körök váltakoztak, ez látható a 1.4 ábrán is. Ezeket a diffrakciós képeket csakis az elektron hullámtermészete magyarázza, és nagy hasonlóságot mutatnak a röntgensugarak diffrakciójakor keletkező képekkel. Ez azt sugallja, hogy a polikristály szerkezete diffrakciós rácsként működik, és az ezen elhajló elektronok egyben interferálnak is.

Jelen esetben Thomson is azt a kifejezést kapta az elektronhoz rendelt hullámhosszra, mint azt a 1.6 összefüggés is mutatja. Ez alapján le lehet vonni a következtetést, hogy minél nagyobb a gyorsító feszültség, annál kisebb lesz a hullámhossz. A hullámhossz változásával a Thomson által megfigyelt körök sugara is változik.



1.4. ábra. Thomson által megfigyelt körök a használt rétegek esetén [10].

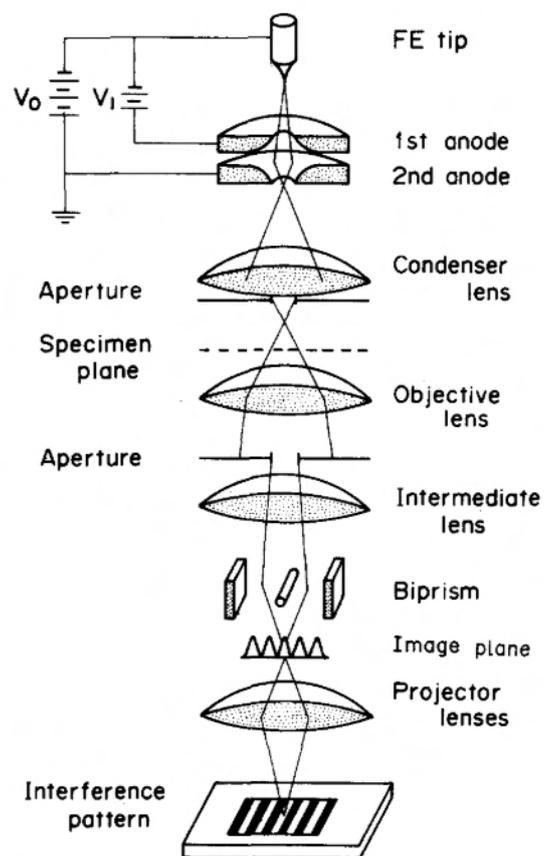
1.3. Young kétrés kísérlete – elektronokkal

Thomas Young 1801-ben végzett el egy olyan kísérletet, ami bizonyítékul szolgált a fény hullámtermészetére. A kísérlet menete viszonylag egyszerű: monokromatikus fényforrást használva, az ebből érkező fénynyaláb egy két rést tartalmazó lemezre esik, a résen áthaladó fénysugarak pedig egy ernyőnek csapódnak. Ezáltal egy kép jelenik meg az ernyőn: sötét és világos sávok észlelhetők.

Ez a kísérlet nemcsak az optikában, hanem a kvantummechanikában is releváns. Ahogy Richard Feynman egy híres előadása keretében mondta, az elektron interferencia a kvantummechanika egyetlen rejtelve [11]. Akira Tonomura a cikkében is említi, hogy Feynman szerint nem lehet ezt a kísérletet kivitelezni, mert egy lehetetlenül kis méretű berendezésre volna szükség [12]. Ezzel szemben A. Tonomura sikeresen megvalósította a kétrés gondolatkísérletet elektronokkal biprizma interferencia formájában.

A kísérlet során Tonomura elektronmikroszkópot használt, ami egy biprizmát és egy pozícióra érzékeny elektronszámlálót is tartalmazott. Koherens elektronhullámok bocsátódnak ki, amelyek kollimáció után a biprizmára esnek. A megjelenő interferencia-mintázatot egy lencse nagyítja fel, és az egyenként becsapódó elektronokból összeálló interferencia-mintázat egy elektronszámláló képernyőjén lesz látható. Ennek a berendezésnek a vázát a 1.5 kép mutatja be.

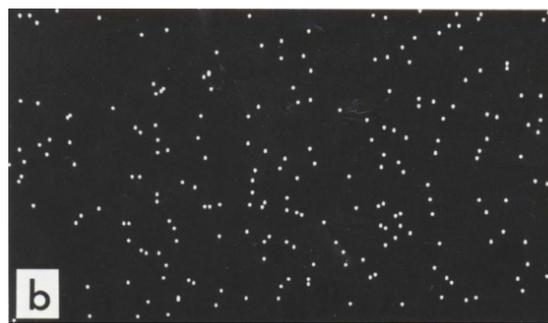
Egy példa az interferencia-mintázat kialakulásának folyamatára fényképsorozat



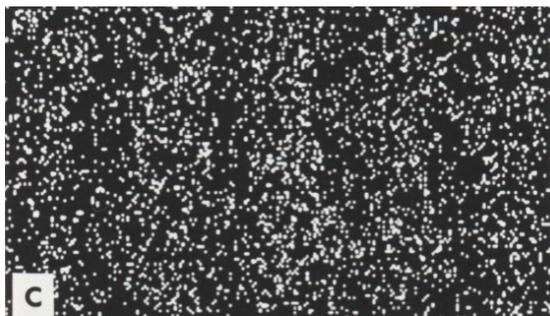
1.5. ábra. Tonomura interferencia kísérlete során alkalmazott berendezés váza [12].



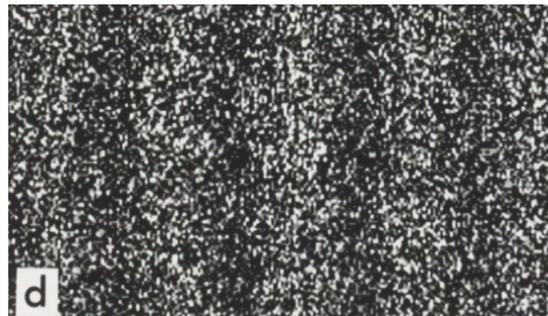
a) Elektronok száma: 10.



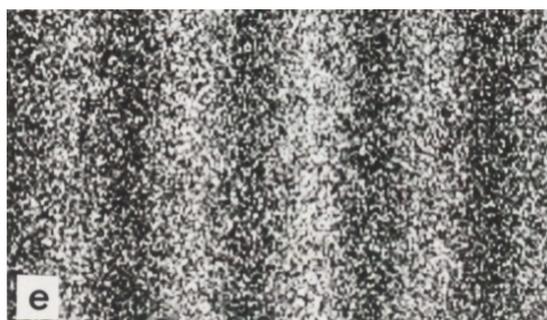
b) Elektronok száma: 100.



c) Elektronok száma: 3000.



d) Elektronok száma: 20000.



e) elektronok száma: 70000.

1.6. ábra. Tonomura kísérlete során az interferencia-mintázat kialakulásának folyamata fényképsorozat által szemléltetve [12].

formájában figyelhető meg a 1.6 ábrán. Az elektronokat egyesével detektálják, és időben növekszik a felhalmozódott elektronok száma. Kezdetben úgy tűnik, hogy az elektronok eloszlása véletlenszerű, de a képsor 1.6c) fotóján már kezdenek kialakulni a biprizma interferenciacsíkjai. Az utolsó fényképen (1.6e)) már jól látható a mintázat, az elektronok száma megközelítőleg 70000, sávonként 14000.

2. Ionizációs hatáskeresztmetszet számítása elsőrendű perturbációs közelítésben

2.1. Az időtől függő perturbációs módszer alapjai

Olyan kölcsönhatások által keltett elektronátmenetek esetén, amikor a kölcsönhatási potenciál nem túl erős, a probléma perturbatív módon kezelhető [13].

Vegyünk egy olyan kvantummechanikai rendszert, melynek a Hamilton-operátora függ az időtől, és két tagból áll

$$H(t) = H^0 + V(t). \quad (2.1)$$

H^0 jelöli a stacionárius és perturbálatlan Hamilton-operátort, sajátállapotait és sajátértékeit ismertnek tekintjük. $V(t)$ egy olyan perturbációs potenciál, amely függ az időtől, és $t_0 \rightarrow t$ időpillanatok között hat.

A rendszer a t_0 időpillanat előtt H^0 valamelyik ismert sajátállapotában található, jelöljük ezt az állapotot a továbbiakban k -val. A rendszer átmehet egy másik sajátállapotba a $V(t)$ perturbáció hatására, a továbbiakban legyen ez v . A rendszer $t_0 \rightarrow t$ fejlődését az $U(t, t_0)$ evolúciós operátor írja le, tehát t időpillanatra felírva a rendszer hullámfüggvényét

$$|\psi\rangle = U(t, t_0)|k\rangle. \quad (2.2)$$

Az evolúciós operátor eleget kell tegyen az

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (2.3)$$

differentiálegyenletnek. Származtatni lehet az időtől függő Schrödinger-egyenletből, és ekvivalens vele.

A perturbáció megszűnik, miután a rendszer a $\psi(t)$ állapotba fejlődik, és a H^0 operátor valamelyik sajátállapotába kell visszatérnie. A rendszer egy adott v állapotba kerülésének valószínűsége a $\langle v|\psi\rangle$ átfedési integráltól függ, ezt átmeneti valószínűségi amplitúdónak nevezzük [13]. Ebből adódóan az átmeneti valószínűség az amplitúdó modulusának négyzete

$$w_{k \rightarrow v} = |\langle v|\psi\rangle|^2 = |\langle v|U(t, t_0)|k\rangle|^2. \quad (2.4)$$

A továbbiakban használjuk a Dirac-képet a Schrödinger-kép helyett. Ebben az esetben az $U_I(t, t_0)$ evolúciós operátor időtől való függése csak a perturbációs potenciál hatását tartalmazza, a stacionárius H^0 operátor által keltett periodikus függés leválasztódik [13]

$$U_I(t, t_0) = U^{0\dagger}(t, t_0)U(t, t_0), \quad (2.5)$$

ahol $U^0(t, t_0)$ a rendszer evolúcióját leíró operátor, amikor a perturbáló operátor nincs jelen, illetve \dagger az adjungálást jelöli. Az $U^0(t, t_0)$ operátor eleget tesz az

$$i\frac{\partial}{\partial t}U^0(t, t_0) = H^0U^0(t, t_0) \quad (2.6)$$

differenciálegyenletnek, és mivel a H^0 operátor nem függ explicit módon az időtől, az egyenlet megoldható

$$U^0(t, t_0) = e^{-iH^0(t-t_0)}. \quad (2.7)$$

Ezek alapján igazolható, hogy a kölcsönhatási képből felírt evolúciós operátor megoldása az

$$i\frac{\partial}{\partial t}U_I(t, t_0) = V_I(t)U_I(t, t_0) \quad (2.8)$$

differenciálegyenletnek. A $V_I(t)$ perturbációs potenciál alakja a Dirac-képből

$$V_I(t) = U^{0\dagger}(t, t_0)V(t)U^0(t, t_0). \quad (2.9)$$

A Dirac-féle kölcsönhatási képből a H^0 operátor sajátfüggvényei és a stacionárius hullámfüggvények megegyeznek.

A 2.8 differenciálegyenletet t_0 és t határok között integráljuk

$$U_I(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1)U_I(t_1, t_0). \quad (2.10)$$

Az eredményben szereplő 1-es integrálási állandót a kezdeti feltételből határoztuk meg

$$U_I(t_0, t_0) = 1. \quad (2.11)$$

A 2.10 integrálegyenlet megoldására iterációs módszert alkalmazunk. Legyen kezdetben a

becslésünk az $U_I(t_1, t_0)$ evolúciós operátorra 1. Ebben a nulladrendű közelítésben a lövedék hatását a céltárgyra teljes mértékben elhanyagoljuk, ebből adódóan a kölcsönhatási képen a rendszer állapota nem változik meg. Elsőrendű közelítésben

$$U_I^1(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) \quad (2.12)$$

alakú lesz az evolúciós operátor. Ha az operátor elsőrendű közelítésben kapott alakját behelyettesítjük a 2.10 egyenlet jobb oldalába, megkapjuk a másodrendű közelítést

$$U_I^2(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 V_I(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_2 V_I(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V_I(t_1), \quad (2.13)$$

és így tovább megkapnánk a magasabb rendű közelítéseket. A módszer tulajdonképpen az evolúciós operátor egy sorfejtését adja meg

$$U_I(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0), \quad (2.14)$$

ahol $U_I^{(n)}$ az evolúciós operátor n . rendű korrekcióját jelöli. A $V_I(t)$ potenciálok 2.13-hoz hasonló idő szerinti integráljaként kapjuk meg a korrekciókat

$$U_I^{(n)} = (-i)^n \int_{t_0}^t dt_n V_I(t_n) \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} V_I(t_{n-1}) \cdots \int_{t_0}^{t_3} dt_2 V_I(t_2) \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V_I(t_1). \quad (2.15)$$

Mivel a megszokás szerint a Schrödinger-képet használjuk, érdemes visszaírni a perturbációs

potenciálokat ilyen alakba a 2.9 szerint

$$\begin{aligned}
U_I^{(n)} &= (-i)^n \int_{t_0}^t dt_n U^{0\dagger}(t_n, t_0) V(t_n) U^0(t_n, t_0) \\
&\quad \times \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} U^{0\dagger}(t_{n-1}, t_0) V(t_{n-1}) U^0(t_{n-1}, t_0) \cdots \\
&\quad \cdots \times \int_{t_0}^{t_3} dt_2 U^{0\dagger}(t_2, t_0) V(t_2) U^0(t_2, t_0) \\
&\quad \times \int_{t_0}^{t_2} dt_1 U^{0\dagger}(t_1, t_0) V(t_1) U^0(t_1, t_0).
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Vegyük észre, hogy az U^0 operátor 2.7-beli alakját behelyettesítve, a t_0 időpillanatok egyszerűsödni fognak

$$\begin{aligned}
U_I^{(n)} &= (-i)^n \int_{t_0}^t dt_n e^{iH^0 t_n} V(t_n) e^{-iH^0 t_n} \\
&\quad \times \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} e^{iH^0 t_{n-1}} V(t_{n-1}) e^{-iH^0 t_{n-1}} \cdots \\
&\quad \cdots \times \int_{t_0}^{t_3} dt_2 e^{iH^0 t_2} V(t_2) e^{-iH^0 t_2} \int_{t_0}^{t_2} dt_1 e^{iH^0 t_1} V(t_1) e^{-iH^0 t_1}.
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Az evolúciós operátor így leírt sorfejtésében az $U_I^{(n)}$ tagban n -szer szerepel a potenciál. Le lehet vonni a következtetést, miszerint ha a perturbációs potenciál elég kicsi, elhanyagolhatóvá válnak a magasabb rendű tagok. Ez a sorfejtés a szóráselméletben használt Born-sornak felel meg [13].

Következő lépésben vizsgáljuk meg az átmeneti amplitúdó kifejezését. A vizsgálat az elsőrendű közelítésig fog terjedni abból az okból kifolyólag, hogy a későbbi fejezetben bemutatott modell ezt használja fel.

Tehát a teljes amplitúdó kifejezése a 2.4 összefüggésből

$$a = \langle v | U_I(t, t_0) | k \rangle. \tag{2.18}$$

Az n . rendű amplitúdó alakja

$$a^{(n)} = \langle v | U_I^{(n)}(t, t_0) | k \rangle. \quad (2.19)$$

A nulladrendű amplitúdó

$$a^{(0)} = \langle v | k \rangle = \delta_{kv}. \quad (2.20)$$

Ennek oka, hogy k és v a H^0 operátor sajátállapotai, így ortogonálisak egymásra, ha különböző sajátértékhez tartoznak. Ez azt jelenti, hogy nulladrendben elhanyagolva a perturbációt, nem kapunk átmenetet.

Amikor felírjuk az elsőrendű amplitúdót, figyelembe kell vennünk, hogy k és v a H^0 sajátállapotai, a hozzájuk tartozó sajátértékek rendre E_k és E_v . Az elsőrendű amplitúdó

$$\begin{aligned} a^{(1)} &= -i \int_{t_0}^t dt_1 \langle v | e^{iH^0 t_1} V(t_1) e^{-iH^0 t_1} | k \rangle \\ &= -i \int_{t_0}^t dt_1 e^{i(E_v - E_k)t_1} \langle v | V(t_1) | k \rangle. \end{aligned} \quad (2.21)$$

A $V(t_1)$ mátrixelemét kell integrálni az idő szerint, egy periodikus faktoriall megszorozva. Fizikailag ennek a jelentése a következő: a perturbációs kölcsönhatás t_1 időpillanatban egy lépésben átviszi a rendszert a kezdeti állapotból a végső állapotba.

2.2. A hatáskeresztmetszet klasszikus értelmezése

Szórási jelenségek során általában két részecske ütközéséről beszélünk. Annak a valószínűsége, hogy három vagy több részecske ütközzön, elég kicsi. Általánosan a következő módon írható fel egy szórási folyamat:

$$X + Y \rightarrow X' + Y' + Z' + \dots \quad (2.22)$$

baloldalon az ütköző részecskék, jobboldalon pedig a szórt részecskék találhatók.

A továbbiakban legyen szó egy olyan kísérletről, ahol egy céltárgyat bombázunk egy részecskenyalábbal, álljon az előbbi X , az utóbbi pedig Y részecskékből. Legyen a nyaláb monoenergetikus. Jelölje J_Y a lövedékrészecskék fluxusát, ami azon beeső Y részecskék számát jelenti, melyek a terjedés irányára merőleges egységnyi felületen egységnyi idő alatt haladnak keresztül. Tegyük fel, hogy a fluxus elegendően kicsi ahhoz, hogy a szórás csak a céltárgyon

történjen, lövedékrészecskék között elhanyagolhatóvá váljon.

Tekintsünk egyelőre csak rugalmas szórást:

$$X + Y \rightarrow X + Y, \quad (2.23)$$

azaz a lövedéket és a céltárgyat alkotó részecskék változatlanok maradnak az ütközés után. Jelölje dN_Y azon részecskék számát, melyek egységnyi idő alatt Ω irányba, $d\Omega$ térszögbe szóródtak. Kis fluxusok esetén egyenes arányosság áll fent ezen mennyiség és a beérkező lövedékek fluxusa, illetve a térszög között

$$dN_Y(\Omega) = J_Y \Sigma(\Omega) d\Omega. \quad (2.24)$$

Ebben az összefüggésben a $\Sigma(\Omega)$ egy olyan terület dimenziójú mennyiség, ami a céltárgyat jellemzi. Ha a céltárgy N_X azonos szórócentrumból áll, és úgy tekintjük, hogy megfelelően nagy a távolság köztük ahhoz, hogy a szóródó részecskékhez rendelt hullámok közötti koherencia ne lépjen fel, illetve a céltárgy kellően vékony ahhoz, hogy csak egyetlen szóródás történjen, akkor a szóródott részecskék száma és a szórócentrumok száma között egyenes arányosság van. Ennek alapján

$$\Sigma(\Omega) = N_X \sigma_d(\Omega). \quad (2.25)$$

Beírva ezt a 2.24 számú egyenletbe

$$dN_Y(\Omega) = J_Y N_X \sigma_d(\Omega) d\Omega, \quad (2.26)$$

ahol $\sigma_d(\Omega)$ egy olyan terület jellegű fizikai mennyiség, ami a szórócentrumot írja le. Ezt a szóródás irányától függő mennyiséget differenciális rugalmas hatáskeresztmetszetnek nevezzük. Jelölve σ_r -rel a teljes rugalmas hatáskeresztmetszetet, felírható, hogy

$$\sigma_d \equiv \frac{d\sigma_r}{d\Omega} = \frac{dN_Y(\Omega)}{J_Y N_X d\Omega}. \quad (2.27)$$

Ebből a teljes rugalmas hatáskeresztmetszetet megkapjuk, ha a differenciális rugalmas hatáskeresztmetszetet a teljes térszög szerint integráljuk

$$\sigma_r = \int \sigma_d(\Omega) d\Omega. \quad (2.28)$$

A teljes hatáskeresztmetszet az egy szórócentrum által időegység által szórt részecskék számának és a beérkező fluxusnak hányadosát adja meg. A 2.28-ben leírt integrál tart a végtelenhez, ha végtelen hatótávolságú potenciálról van szó (minden részecske szóródik ebben az esetben). Ellenkező esetben a teljes hatáskeresztmetszet megközelítőleg a hatósugár által meghatározott kör területével lesz egyenlő (rövid hatótávolságú és gömbszimmetrikus potenciál esetén).

Vegyük most azt az esetet, amikor a szórás rugalmatlan. Ez azt jelenti, hogy az ütközés során a céltárgy vagy a lövedék kvantumállapota megváltozik. A rendszer kezdeti állapotából (ezután jelölje ezt k) a végső állapotba (ezentúl ν) való átmenetre jellemző teljes hatáskeresztmetszetet az időegység alatti $k \rightarrow \nu$ átmenetek számának, a beérkező részecskék fluxusának, illetve a szórócentrumok számának hányadosa adja meg:

$$\sigma_{k \rightarrow \nu} = \frac{N_{k \rightarrow \nu}}{J_Y N_X}. \quad (2.29)$$

A kimenő részecskék energiája és szöge szerint különböző differenciális hatáskeresztmetszetek értelmezhetők. Például ha a kimenő részecskék száma n , a legcélszerűbb a

$$\frac{d^{2n-1} \sigma_{k \rightarrow \nu}}{d\Omega_1 \cdots d\Omega_n dE_1 \cdots dE_{n-1}} \quad (2.30)$$

hatáskeresztmetszet. Az energiamegmaradásból adódóan azon részecskék száma, melyek energiája változhat, $n-1$ lesz.

A dolgozat keretében egyszeres ionizációt vizsgálunk, egy pozitív töltésű ion és egy hidrogénmolekula ütközését. Ebben az esetben a kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet alakja

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega_e dE_e}, \quad (2.31)$$

ahol az e alsó index elektront jelöl.

2.3. A hatáskeresztmetszet kvantummechanikai értelmezése

Legyen $N_X=1$, vagyis egy szórócentrumot tekintünk. Ezt egy párhuzamos és monoenergetikus nyalábbal bombázzuk. Ebben az esetben az egyes beérkező részecskék $|\psi_b\rangle$ kvantumállapotai megegyeznek, de az impakt vagy ütközési paraméter nagysága és iránya szerint különbözni fognak. Az impakt vagy ütközési paraméter adja meg a lövedék

aszimptotikus pályáját jelentő egyenes és a szórócentrum között lévő távolságot.

Legyen $w(k, \Phi_{\vec{b}} \rightarrow v)$ a $k \rightarrow v$ átmenet valószínűsége, ami függ a \vec{b} ütközési paramétertől. Jelölve az időegység alatt szóródó részecskék számát N_Y -nal, a $k \rightarrow v$ átmenetek száma felírható, mint

$$N_{k \rightarrow v} = \sum_{i=1}^{N_Y} w(k, \Phi_{\vec{b}_i} \rightarrow v). \quad (2.32)$$

Amennyiben N_Y tart a végtelenhez, a szórt részecskék száma szerinti összegzés helyettesíthető a fluxus ütközési paraméter szerinti területi integráljával:

$$N_{k \rightarrow v} = \int J_Y w(k, \Phi_{\vec{b}} \rightarrow v) d^2\vec{b}. \quad (2.33)$$

J_Y kiemelhető az integrál elé, ha azt feltételezzük, hogy a fluxus egyenletes:

$$N_{k \rightarrow v} = J_Y \int w(k, \Phi_{\vec{b}} \rightarrow v) d^2\vec{b}. \quad (2.34)$$

Most vessük össze ezt a 2.29 számú egyenlettel. Tekintettel lévén az elején rögzített feltételre, miszerint egy szórócentrumunk van ($N_X=1$), a teljes hatáskeresztmetszetre azt kapjuk, hogy

$$\sigma_{k \rightarrow v} = \int w(k, \Phi_{\vec{b}} \rightarrow v) d^2\vec{b}. \quad (2.35)$$

Ez utóbbi képlet szerint meghatározhatjuk a hatáskeresztmetszetet, a továbbiakban ez használatos. A 2.30 differenciális hatáskeresztmetszet hasonlóan adható meg

$$\frac{d^{2n-1}\sigma_{k \rightarrow v}}{d\Omega_1 \cdots d\Omega_n dE_1 \cdots dE_{n-1}} = \int d\vec{b} w(k, \Phi_{\vec{b}} \rightarrow v, \Phi'), \quad (2.36)$$

ahol $|\Phi'\rangle$ a megfelelő energiájú és szögeloszlású végállapot [13].

2.4. Elektronátmenetek töltött részecskével való ütközés hatására

Amennyiben az elektronátmenetet okozó lövedék megfelelően nagy energiával rendelkezik, akkor azt klasszikusan le lehet írni. Ennek az a feltétele, hogy a lövedékhez rendelt de Broglie hullámhossz az atomi méretektől jóval kisebb legyen. Ha ehhez hozzátesszük azt is, hogy az energiaátadás (impulzusátadás) elhanyagolható legyen a lövedék energiájához (impulzusához) képest

$$p_k \approx p_v \gg \sqrt{2M\Delta E}, \quad (2.37)$$

akkor a lövedék mozgása egyenes vonalúnak és állandó sebességűnek mondható. A feltételben p_k és p_v a lövedék kezdeti és végső impulzusát, M a lövedék tömegét, ΔE pedig az energiaátadást jelöli. Nagyon kis impakt paraméterű ütközések esetén nem teljesülhet ez a feltétel, viszont ezek járuléka a hatáskeresztmetszethez nagyon kis mértékű. Ezen a feltételeken alapuló közelítést félklasszikus vagy ütközési paraméter közelítésnek nevezzük.

A $k \rightarrow v$ átmenet hatáskeresztmetszetét a 2.4 és 2.34 egyenletek segítségével tudjuk megadni

$$\begin{aligned}\sigma_{k \rightarrow v} &= \int d^2\vec{b} |a_{k \rightarrow v}(b)|^2 \\ &= \int d^2\vec{b} |\langle v | U_{\vec{b}}(\infty, -\infty) | k \rangle|^2.\end{aligned}\tag{2.38}$$

A k és v kvantumállapotok csak a céltárgy elektronrendszerére vonatkoznak, külső perturbációként kezeljük a lövedék–céltárgy kölcsönhatást. Hasonló módon az $U_{\vec{b}}(\infty, -\infty)$ evolúciós operátor az elektronrendszerre vonatkozik, leírja a fejlődését az időben. A perturbációs potenciál hatása a $-\infty$ -ben kezdődik, és ∞ -ben szűnik meg a hatása. Amennyiben a lövedék–céltárgy kölcsönhatás mértéke nem túl nagy, az evolúciós operátor 2.14 sorfejtése gyorsan konvergál, és érdemes alkalmazni az időtől függő perturbációs módszert [13].

Ha a lövedék hatására az atomnak csak egy külső elektronja szenved átmenetet (gerjesztődik, vagy ionizáció során elhagyja az atomot), akkor a független elektron közelítés nagyon jó eredménnyel alkalmazható. Úgy vesszük, hogy a lövedék csak egyetlen elektron kvantumállapotát módosítja – egy aktív elektron lesz, a többi elektron passzív marad, kvantumállapotuk nem változik meg. A 2.38 összefüggés szerinti hatáskeresztmetszetben a közelítés szerint k és v az aktív elektron kezdeti és végső állapota lesz, erre vonatkozó az evolúciós operátor is. Ebben az esetben az átmeneti amplitúdót egyelektron amplitúdónak nevezzük.

Ha a kölcsönhatási potenciálhoz viszonyítva elég nagy energiával rendelkezik a lövedék, alkalmazni lehet az elsőrendű perturbációs közelítést. A gyakorlatban ez olyan lövedékre érvényes, melynek energiája $100 \text{ keV}/u \times Z_l^2$ fölött van, itt u az atomtömeg egység, Z_l a lövedék töltése.

A továbbiakban vegyünk egy olyan gerjesztési folyamatot, amelynek hatáskeresztmetszetét elsőrendben, az elsőrendű amplitúdó 2.21 képlete alapján lehet kiszámolni. A perturbációs

potenciál az aktív elektron és a lövedék között fellépő Coulomb-kölcsönhatás

$$V(t) = -\frac{Z_l}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|}, \quad (2.39)$$

ahol \vec{R} és \vec{r} sorra a lövedék és az elektron helyzetvektora, általában a célatom atommagjához viszonyítva. A lövedék helyzetében tűnik fel a potenciál időfüggése. Tekintsük a lövedék pályájával párhuzamos tengelynek az Oz tengelyt, és legyen a célatom atommagja az origó. Ekkor a \vec{b} impakt paraméter és a \vec{z} által meghatározott derékszögű háromszög átfogója lesz az \vec{R} helyzetvektor

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \vec{b} + \vec{z} \\ R &= \sqrt{b^2 + z^2} \end{aligned} \quad (2.40)$$

Érdeemes a 2.21 összefüggésben z koordináta szerinti integrálra áttérni idő szerinti integrál helyett. Tekintsük nulla időpillanatnak azt az esetet, amikor a lövedék a legközelebb található a célatomhoz, és élve a feltételezéssel, miszerint egyenes vonalú egyenletes mozgást végez a lövedék, az kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} z &= vt \\ dz &= v dt. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Ezekkel a cserékkel élve, az elsőrendű amplitúdó kifejezése

$$a^{(1)} = i \frac{Z_l}{v_l} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i \frac{E_v - E_k}{v_l} z} \left\langle v \left| \frac{1}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} \right| k \right\rangle. \quad (2.42)$$

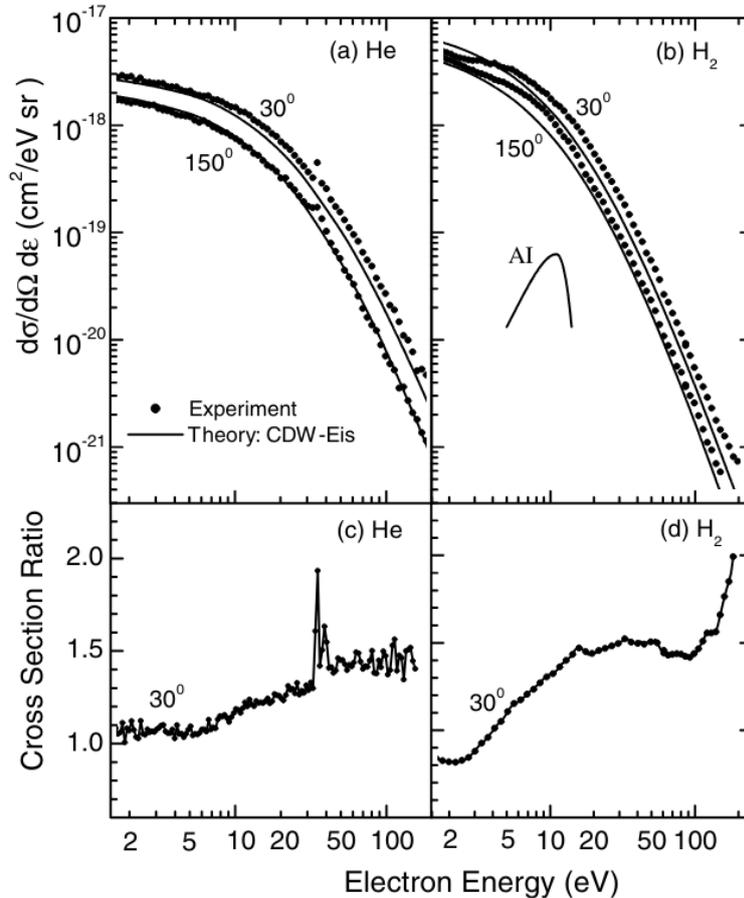
3. Interferencia észlelése a hidrogénmolekula ionizációjakor

Már több évtizede egy érdekes kutatási terület egy célatom ionizációja egy nehéz ionnal való ütközés révén. Részecske által indukált ionizáció területén különös figyelmet kapott a legegyszerűbb kétatomos molekula, a hidrogénmolekula (továbbiakban H_2) mint célmolekula. Mivel a molekula két atomja egymástól megkülönböztethetetlen, a molekula ionizációja során koherens hullámok jelennek meg, és ebből következően interferencia is. Az ily módon történő elektron emisszió nagy hasonlóságot mutat a Young-féle kétrés kísérlettel. Viszont egészen 2001-ig nem figyeltek meg interferencia jelenséget a kibocsátott elektronok spektrumában.

2001-ben Stolterfoht és társai egy érdekes kísérletet valósítottak meg [1]. Kísérletük sikere abban áll, hogy 60 MeV/u energiájú Kr^{34+} ionokból álló sugárral bombázva H_2 -ből álló gázt, az elektron emissziós spektrumában ki lehetett mutatni az interferenciát. Első lépésben elméleti számolások alapján meghatározták a spektrum szélességét, amiben várható az interferencia. Igazolták, hogy nagy sebességű lövedék esetén (50 a.u. körüli [1]) nagyobb mértékben kihangsúlyozódik az interferencia-minta.

Ahhoz, hogy a kísérlethez releváns kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetet meg lehessen határozni, elengedhetetlen az impulzusátadás szerinti átlagolás. Bethe munkája alapján [14], a hatáskeresztmetszet egy dipól és egy bináris tagra osztható. A dipól tag a gyenge ütközéseket írja le, míg a bináris tag az erős ütközéseket jellemzi. A dipól tagnak éles maximuma van a legkisebb impulzusátadás értékben. Gyors lövedékek esetén ez az érték kicsi, ezért alkalmazható egy közelítés, ami szerint az interferenciatabból elhagyható az impulzusátadás. Hasonló közelítést lehet használni a bináris tag esetén is. Megjegyzendő, hogy ebben az esetben csak a dipól tag miatt alakul ki oszcilláció a hatáskeresztmetszetben, ezért fontos a nagy lövedéksebesség.

A fentebb említett kísérletben tehát egy 60 MeV/u energiájú Kr^{34+} ion sugarat irányítottak egy H_2 -ből álló gázra. Egy elektronspektrométerrel a kilökött elektronok energiáit és szórási szögeit mérték. Ezek alapján kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket számoltak. Ez nem feltétlenül elegendő az interferencia észlelésére, ezért kísérletük során egy fontos újítást vezettek be: legyen egy olyan arány, ami az addig számolt, molekulára vonatkozó hatáskeresztmetszet és a hidrogénatomra vonatkozó hatáskeresztmetszet – ha független részecskeként lenne jelen – kétszeresének az hányadosa. Azt állapították meg, hogy ez a hatáskeresztmetszet-arány oszcillál a kilökött elektron sebessége szerint, és ez bizonyítékul szolgál az interferencia-minta megjelenésére. Érdekes megjegyezni, hogy a molekulatengely



3.1. ábra. Az ábra felső része kilökött elektron energiája szerinti hatáskeresztmetszetet mutat (a) He és (b) H₂ céltárgyak esetén. Az ábra alsó részén hatáskeresztmetszet-arányok láthatók a kilökött elektron energiája függvényében, (c) He és (d) H₂ céltárgy esetén.

szerinti átlagolás után az interferencia lényeges vonásai ugyanúgy megfigyelhetők.

Végeztek olyan mérést is, amelyben a céltárgy He volt – korábbi eredmények alapján a mérés és az elmélet jó egyezést adott. Ezt használták arra, hogy a H₂-ra kapott eredmények helyességét ellenőrizzék. A 3.1 ábra szemlélteti He és H₂ céltárgyakra 30° és 150° szórási szögek esetén a hatáskeresztmetszetet a kilökött elektron energiája szerint, összehasonlítva a felállított modellt a méréssel. Ez alapján megállapítható, hogy nem lehet észlelni az interferenciát. A hatáskeresztmetszet-arányok a 3.1 ábra alsó részén láthatók. A (c) algrafikonon megjelenő éles csúcs autoionizáció miatt adódik. Stolterfoht és társai cikkében bizonyítják, hogy az autoionizáció hozzájárulása a hatáskeresztmetszethez 2%-tól is kisebb, a hatása elhanyagolható. Tehát ettől eltekintve, a hatáskeresztmetszet monoton növekedést mutat az elektron energia növekedésével. H₂ esetén az oszcillációs növekedés a hatáskeresztmetszet-arányban jelenti az alátámasztást az interferencia jelenlétére a molekula ionizációja során.

4. A két-centrum hatás közelítő számítása a H₂-ból kilökött elektronok spektrumában

Jelen fejezet azt a modellt mutatja be, ami a hidrogénmolekulára mint céltárgy lett kifejlesztve. A sajátossága az, hogy a molekula két identikus atomja két szórócentrumként fogható fel. A lövedék és a molekula közötti kölcsönhatás egy $V(t)$ időtől függő perturbációként tekinthető. A $|k\rangle$ kezdeti állapotból a $|v\rangle$ végső állapotba való átmenetet jellemző elsőrendű amplitúdó [13] alakja

$$a^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\Delta Et} \langle v|V(t)|k\rangle, \quad (4.1)$$

ahol $\Delta E = E_v - E_k$ a végső és a kezdeti állapot közötti energiakülönbség. Esetünkben a perturbáció

$$V(t) = -\frac{Z_l}{|\vec{r} - \vec{R}|}, \quad (4.2)$$

ahol Z_l a lövedékrészecske rendszáma, illetve az \vec{R} és \vec{r} sorra a beeső ion és az aktív célelektron helyzetvektorai. Ezt a 4.1 ábra is illusztrálja.

A félklasszikus közelítésben a lövedék mozgását klasszikus módon kezeljük, a trajektóriája egy egyenes vonal. Ha a két proton tömegközéppontját vesszük a koordináta-rendszer origójaként és a z koordinátatengely a lövedéksugár irányába mutat, akkor a lövedék \vec{R} helyzetvektora

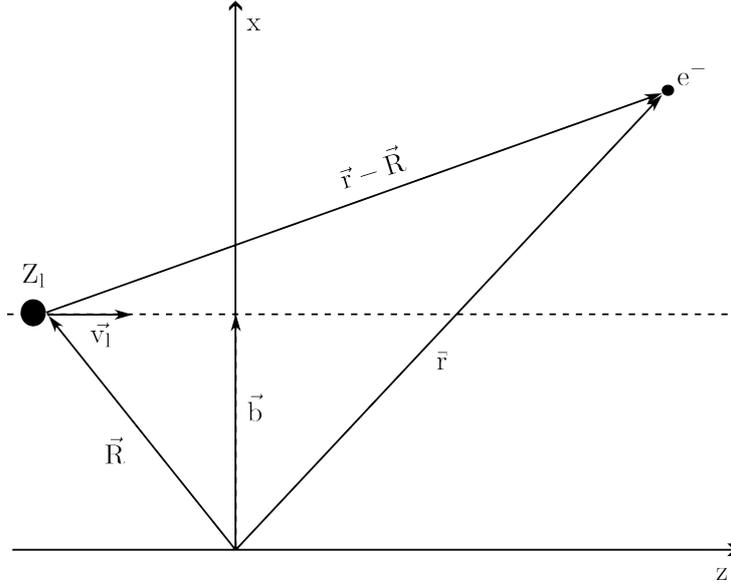
$$\vec{R} = \vec{b} + \vec{v}_l t = b\vec{e}_x + z\vec{e}_z. \quad (4.3)$$

Ebben a felírásban \vec{v}_l a lövedék sebessége és $t=0$ az az időpillanat, amikor a lövedék a legközelebb van a céltárgyhoz.

4.1. Analitikus számolások

Bár egy kvalitatív elméleti modell a megfigyelt interferencia leírására megjelent már Stolterfoht és társai eredeti cikkében [1], az oszcillációk magyarázatában nem szerepel a kilökött elektron szöge szerinti függés. Jelen számolások egy részletesebb képet hivatottak adni az interferencia-mintázatról. Azt vetíti előre, hogy a hatáskeresztmetszet arányok oszcillációi mégis függenek a kilökött elektron szögétől [2].

Ugyanazt a 60 MeV/u Kr³⁴⁺ lövedéket tekintve, mint Stolterfoht kísérletében [1], a lövedék rendszámának és sebességének hányadosa $\frac{Z_l}{v_l} \approx 0.7 < 1$, ami szerint elegendő elsőrendű



4.1. ábra. Egyenes pályán mozgó, v_l sebességű lövedék. \vec{b} az impakt paraméter, \vec{R} és \vec{r} pedig a beeső ion és az aktív célelektron helyzetvektorai.

közelítést alkalmazni a modell keretében.

Az elméleti leírás követi a Hansen és Kocbach által felállított atomi céltárgy modellt [15], módosítva molekula céltárgyra. Egy b ütközési paraméterű, v_l sebességű és \vec{D} molekulatengely irányú lövedék elsőrendű átmeneti amplitúdója felírható, mint

$$a(b, \vec{D}) = \frac{iZ_l}{v_l} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iqz} \left\langle \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \left| \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \right| \psi_i(\vec{r}, \vec{D}) \right\rangle, \quad (4.4)$$

ahol \vec{r} az aktív elektron helyzetvektora, $\psi_i(\vec{r}, \vec{D})$ és $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ pedig a kezdeti és végső állapotai, \vec{k} jelölve a kilökött elektron impulzusát. A lövedék helyzetvektora a 4.4 egyenlet szerinti, melyben $z = v_l t$. A minimum impulzusátadás $q = \frac{\Delta E}{v_l}$, ahol $\Delta E = E_i + \frac{k^2}{2}$ az elektronnak átadott energia.

Feltételezzük, hogy a hidrogénmolekulabeli elektron kezdeti állapota két $1s$ atomi orbitál lineáris kombinációjaként írható fel

$$\psi_i(\vec{r}, \vec{D}) = N \left(e^{-\alpha|\vec{r} - \frac{\vec{D}}{2}|} + e^{-\alpha|\vec{r} + \frac{\vec{D}}{2}|} \right) \quad (4.5)$$

ahol N a normálási tényezőt és α az effektív töltést jelöli. A \vec{k} impulzusú elektronok végső

állapotát leíró hullámfüggvényt síkhullámokként közelítjük meg

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (4.6)$$

Az elsőrendű amplitúdó 4.4 egyenletbeli alakját a Bethe-integrál segítségével lehet kiértékelni

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3\vec{s} \frac{e^{-i\vec{s}\cdot\vec{R}} \cdot e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}}}{s^2}. \quad (4.7)$$

Következő lépésben behelyettesítjük a potenciált (4.7) és a végső állapot alakját (4.6) az amplitúdó egyenletébe (4.4). Áttérünk impulzus szerinti integrálra az $\vec{s} = \vec{p} + \vec{k}$ változócseré által, amit követően az amplitúdó

$$a(b, \hat{D}) = \frac{iZ_l}{v_l} \cdot \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iqz} \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \int d^3\vec{p} \frac{e^{-i(\vec{p}+\vec{k})\cdot\vec{R}} \cdot e^{i(\vec{p}+\vec{k})\cdot\vec{r}}}{|\vec{p} + \vec{k}|^2} \cdot \psi_i(\vec{r}, \vec{D}) \quad (4.8)$$

alakú lesz.

Belátható, hogy az egyszerűsített végső állapot miatt (4.6), az \vec{r} helyzetvektor szerinti integrál tulajdonképpen a kezdeti állapotot leíró impulzustérbeli hullámfüggvény

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\vec{r} \psi_i(\vec{r}, \vec{D}) \cdot e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} = \Phi_i(\vec{p}, \vec{D}), \quad (4.9)$$

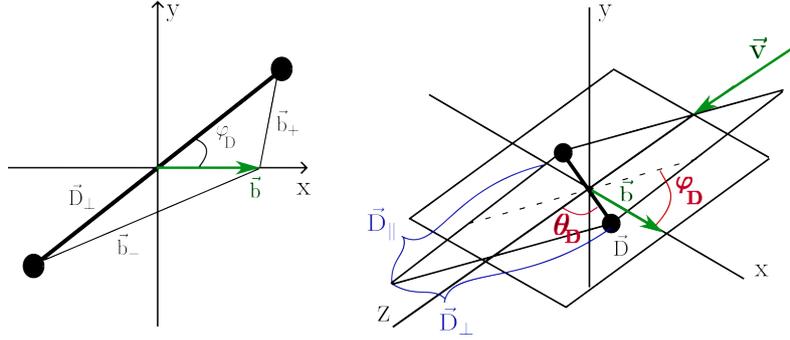
így az átmeneti amplitúdó

$$a(b, \hat{D}) = \frac{iZ_l}{v_l} \cdot \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iqz} \cdot e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \int d^3\vec{p} \frac{\Phi_i(\vec{p}, \vec{D}) \cdot e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R}}}{|\vec{p} + \vec{k}|^2}. \quad (4.10)$$

Hogy tovább lehessen haladni az analitikus számolással, egy újabb közelítéssel kell élnünk. Amennyiben csak nagy sebességű kilökött elektronokat veszünk figyelembe a \vec{p} térben, az impulzusuk $k \gg p$, így mondhatjuk azt, hogy

$$|\vec{p} + \vec{k}| \approx k, \quad (4.11)$$

ezáltal kiemelhető lesz az impulzus szerinti integrál elé. Az integrál megmaradó része tulajdonképpen egy inverz Fourier-transzformáció lesz, ami visszaadja a koordinátatérbeli



4.2. ábra. Különböző mennyiségek, távolságok, szögek definíciói.

hullámfüggvényt

$$\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3\vec{p} \Phi_i(\vec{p}, \vec{D}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R}} = \psi_i(\vec{R}, \vec{D}). \quad (4.12)$$

Bontsuk az elektron \vec{k} impulzusát merőleges és párhuzamos komponensekre

$$\vec{k} = \vec{k}_{\perp} + \vec{k}_{\parallel}, \quad (4.13)$$

így a $\vec{k} \cdot \vec{R}$ skalári szorzat

$$\vec{k} \cdot \vec{R} = \vec{k}_{\perp} \cdot \vec{b} + \vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{z} \quad (4.14)$$

alakú, a \vec{k} impulzus merőleges és párhuzamos komponensek irányai a z koordinátatengelyhez vannak viszonyítva. Ennek ismeretében tovább lehet számolni az amplitúdó 4.10 egyenletbeli alakját, és azt kapjuk, hogy

$$a(b, \vec{D}) = \frac{iZ_l}{v_l k^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-i\vec{b}\cdot\vec{k}_{\perp}} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i(q-k_{\parallel})z} \psi_i(\vec{R}, \vec{D}). \quad (4.15)$$

Használva az \vec{R} helyzetvektor 4.3 egyenletbeli alakját, a kezdeti állapotra jellemző hullámfüggvény

$$\psi_i(\vec{R}, \vec{D}) = N \left(e^{-\alpha \sqrt{\left(z + \frac{D_{\parallel}}{2}\right)^2 + b_+^2}} + e^{-\alpha \sqrt{\left(z - \frac{D_{\parallel}}{2}\right)^2 + b_-^2}} \right), \quad (4.16)$$

ahol b_+ és b_- az impakt paraméter hosszai a két atommaghoz viszonyítva

$$b_{\pm} = \sqrt{b^2 + \frac{D_{\perp}^2}{4} \pm b D_{\perp} \cos \varphi_D}, \quad (4.17)$$

a \vec{D} molekulatengely merőleges és párhuzamos komponensei, illetve a φ_D azimut szöge a 4.2 illusztráció szerint értelmezendők.

A már hivatkozott cikk [15] alapján, a z szerinti integrál elvégezhető analitikus módon:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iQz} e^{-\alpha\sqrt{(z\pm L)^2+b_{\pm}^2}} = e^{\mp iQL} \frac{2\alpha b_{\pm}}{\sqrt{\alpha^2+Q^2}} K_1\left(b_{\pm}\sqrt{\alpha^2+Q^2}\right). \quad (4.18)$$

Itt $K_1(x)$ a módosított Bessel-függvényt jelöli, továbbá $Q = q - k_{\parallel}$ és $L = \frac{1}{2}D_{\parallel}$ változókat vezettük be. Amennyiben jelöljük γ -val a következő gyököt

$$\gamma = \sqrt{\alpha^2+Q^2} \quad (4.19)$$

az átmenet valószínűségét megadó egyenlet adott impakt paraméterre és molekulatengely-irányra

$$w(b, \hat{D}) = |a(b, \hat{D})|^2 = \frac{Z_l^2}{v_l^2 k^4} \frac{2}{\pi} N^2 \frac{4\alpha^2}{\gamma^2} \left[(b_+ K_1(b_+\gamma))^2 + (b_- K_1(b_-\gamma))^2 + b_+ K_1(b_+\gamma) b_- K_1(b_-\gamma) (e^{-i(k_{\parallel}-q)D_{\parallel}} + e^{i(k_{\parallel}-q)D_{\parallel}}) \right]. \quad (4.20)$$

Ahhoz, hogy összehasonlítható legyen Stolterfoht és társai méréseivel [1], a valószínűségeket átlagolnunk kell a molekulatengely iránya szerint:

$$w(b) = \frac{1}{4\pi} \int d\varphi_D \int \sin\theta_D d\theta_D w(b, \hat{D}). \quad (4.21)$$

Az átlagolt valószínűségeket az impakt paraméter szerint integrálva, megkapjuk a differenciális hatáskeresztmetszetet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_k dk} = 2\pi \int b \cdot w(b) db. \quad (4.22)$$

A 4.21 és 4.22 egyenletekben szereplő integrálásokat numerikus módszerrel kell kiértékelni. A kapott eredmények alább kerülnek tárgyalásra.

Azonban az interferencia-mintázatot közelítést alkalmazva lehet elemezni, és pedig fel kell ismerni, hogy a legjelentősebb szög szerinti változás a 4.20 számú egyenletben az interferenciatag gyorsan oszcilláló tényezőjében szerepel [2]

$$\frac{1}{2} (e^{-i(k_{\parallel}-q)D_{\parallel}} + e^{i(k_{\parallel}-q)D_{\parallel}}) = \cos[(k_{\parallel}-q)D \cos\theta_D], \quad (4.23)$$

ahol a 4.2 ábra szerint is értelmezve $D_{\parallel} = D \cos \theta_D$. Feltételezve, hogy a többi változás elhanyagolható, csak ezt a tagot átlagoljuk a molekulatengely állása szerint. Tehát

$$\frac{1}{2} \int_0^{\pi} \cos[(q - k_{\parallel})D \cos \theta_D] \sin \theta_D d\theta_D = \frac{\sin[(k_{\parallel} - q)D]}{(k_{\parallel} - q)D} \quad (4.24)$$

Következésképpen, a fentebbi közelítéssel élve az átmenet valószínűségét leíró egyenlet alakja

$$w(b) = c(b) + g(b) \frac{\sin[(k_{\parallel} - q)D]}{(k_{\parallel} - q)D} \quad (4.25)$$

lesz, és az ennek megfelelő hatáskeresztmetszetet megadó kifejezés

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_k dk} = C + G \frac{\sin[(k_{\parallel} - q)D]}{(k_{\parallel} - q)D}. \quad (4.26)$$

Ezt a Nagy és társai által ismertetett eredményt [2] össze lehet vetni a Stolterfoht és társai által kapott összefüggéssel [1]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_k dk} = C + G \frac{\sin kD}{kD}. \quad (4.27)$$

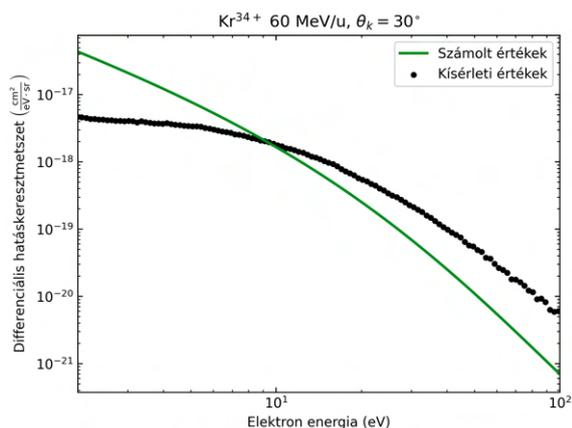
Általában elmondható, hogy $q \ll k$, ezért a 4.26 képletet további közelítéssel át lehet írni

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_k dk} = C + G \frac{\sin k_{\parallel} D}{k_{\parallel} D}. \quad (4.28)$$

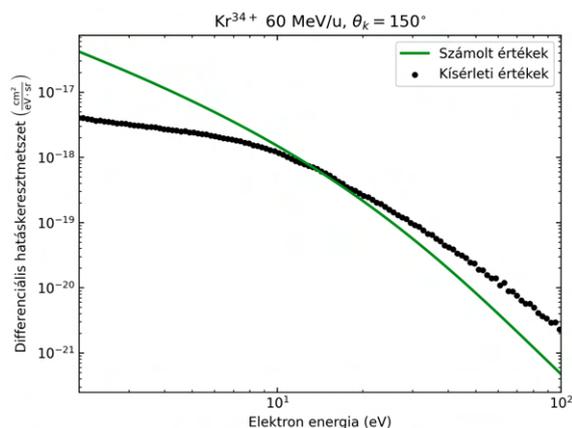
4.2. Kapott eredmények és tárgyalásuk

A számolások elvégzése numerikus módon történt, az implementáció a C++ programozási nyelvben valósult meg. A kapott eredmények ábrázolására a Python 3.0 programozási nyelv, illetve az OriginLab számítógépes program szolgált.

A dolgozat keretében a H_2 ionizációját tárgyaljuk. A számolásokban az effektív töltés $\alpha=1.165$, az atomok közötti távolság $D=1.42$ atomi egységekben kifejezve, illetve az ionizációs energia értéke 0.567 hartree. A következőkben az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet eredményeit mutatjuk be a kísérleti eredményekkel összehasonlítva, különböző lövedékeket alkalmazva és különböző szórási szögeket vizsgálva. Emellett az interferencia jelenségeket is tanulmányoztuk. Annak érdekében, hogy az eredmény szembetűnőbb legyen, a hatáskeresztmetszet-arányokat a kilökött elektron sebessége szerint, különböző szórási szögekre ábrázoltuk.



a) $\theta_k = 30^\circ$



b) $\theta_k = 150^\circ$

4.3. ábra. Kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet a H_2 60 MeV/u Kr^{34+} ionnal való ütközés révén történő ionizációja esetén, 30° (a) és 150° (b) kilökési szögekre a kilökött elektron energiájának függvényében. A fekete körökkel ábrázolt kísérleti értékek Stolterfoht mérési adatai [1].

4.2.1. Kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet

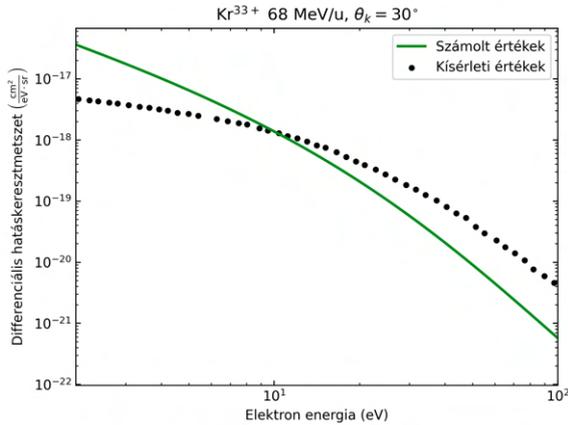
Első lépésben a hidrogénmolekula ionizációjára vonatkozó számolásokban nagyenergiájú Kr^{34+} és Kr^{33+} lövedékeket választottunk. Ezekre létezik kísérleti eredmény is.

A H_2 60 MeV/u Kr^{34+} ionnal való ütközése esetén a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet 30° és 150° -os elektron kilökési szögek esetén, a kilökött elektron energiája függvényében, a 4.20-4.22 összefüggések alapján kapott értékei a 4.3 ábrán láthatók, a kísérleti adatokkal együtt ábrázolva. Mivel létezik kísérleti adat 68 MeV/u Kr^{33+} lövedékre is [3], erre az esetre is teszteltük a felállított elméletet. Az erre vonatkozó eredmények a 4.4 ábrán láthatók, 30° és 90° kilökési szögek esetén.

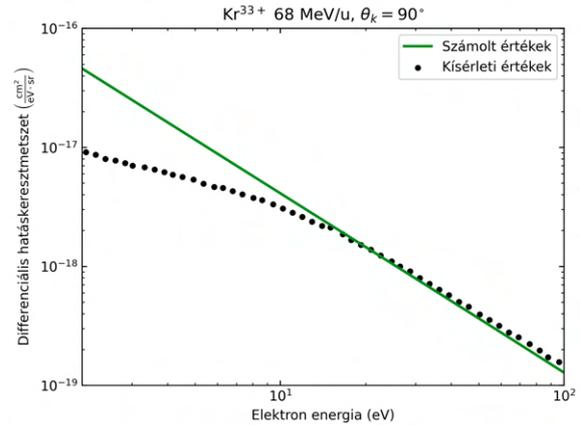
A 4.6 egyenletben szereplő egyszerűsített hullámfüggvénnyel leírt végső állapot és a 4.11 egyenletbeli közelítés miatt, ami nagy k impulzusok esetén érvényes, kis energiájú elektronok esetén nem várható a számolt hatáskeresztmetszetek egyezése a kísérleti eredményekkel. Kis eltérés még nagy energiák esetén is látható. Ettől függetlenül a modell alkalmas a fellépő interferencia-mintázat megértésére.

4.2.2. Interferencia jelenségek

Követve a [1] cikkben leírt javaslatot, az interferencia jelenségek kiemelése végett, kiszámoltuk a hidrogénmolekula hatáskeresztmetszetéből és a kétszer vett hidrogénatom elméleti hatáskeresztmetszetéből adódó arányt. A bemenő paraméterek – ionizációs energia és



a) $\theta_k = 30^\circ$



b) $\theta_k = 90^\circ$

4.4. ábra. Kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet a H_2 68 MeV/u Kr^{33+} ionnal való ütközés révén történő ionizációja esetén, 30° (a) és 90° (b) szórási szögekre a kilökött elektron energiájának függvényében. A fekete körökkel ábrázolt adatsor jelöli a kísérleti eredményeket [3].

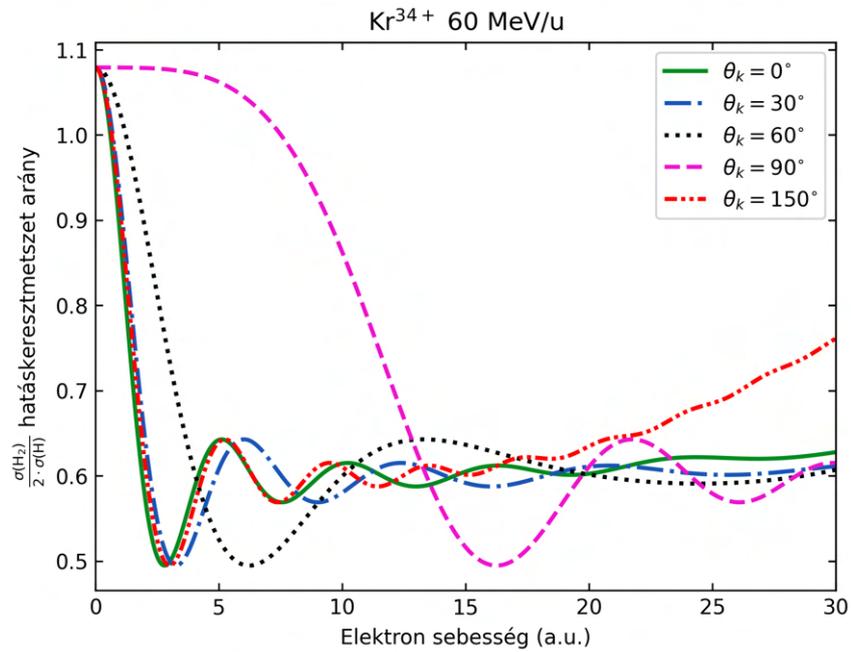
effektív töltés – az atomi céltárgy esetén ugyanazok, mint molekula céltárgynál.

Annak érdekében, hogy meg lehessen vizsgálni a kilökött elektron szórási szögeinek hatását az interferencia-mintázat periódusán és fázisán, a számolások nagy sebességértékekig terjednek. Különböző kilökési szögekre számolt hatáskeresztmetszet-arányok a 4.5 ábrán láthatók, 60 MeV/u Kr^{34+} lövedék esetén.

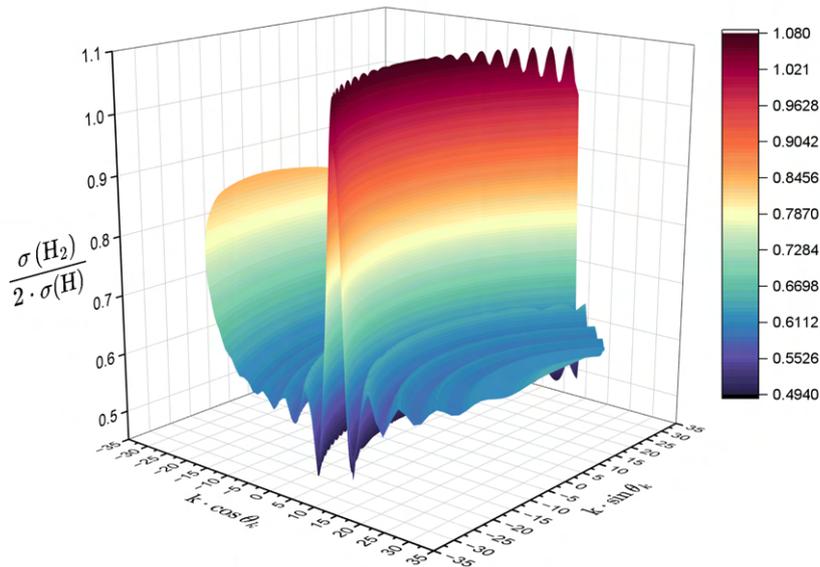
Nagy sebességek esetén az arány változó periódussal oszcillál, ami abból adódik, hogy a $q = \frac{1}{v_l} \left(E_i + \frac{k^2}{2} \right)$ impulzusátadás összemérhető lesz k -val, ahogy annak az értéke növekszik. Megjegyzendő, hogy $k = 5$ a.u. alatt, 0° és 30° esetén kapott görbék közötti eltérés elhanyagolható. Ebben a tartományban 90° esetén nem is észlelhető oszcilláció.

Hogy jobb képet kapjunk az interferencia-mintázat periódusának és fázisának a kilökött elektron szögétől és sebességétől való függéséről, minden szögre elvégeztük a számolásokat egészen 35 a.u. elektron sebességig. A kapott eredmény a 4.6 ábrán látható. Ahogy a 4.26 összefüggés előrejelzi, kisebb k értékek esetén 90° -nál az oszcilláció nem észlelhető, és periódusa a szög függvényében változik. A 3 dimenziós ábrán látható "hullámok" közel állandó "hullámhosszal" rendelkeznek, de csak a z irányban.

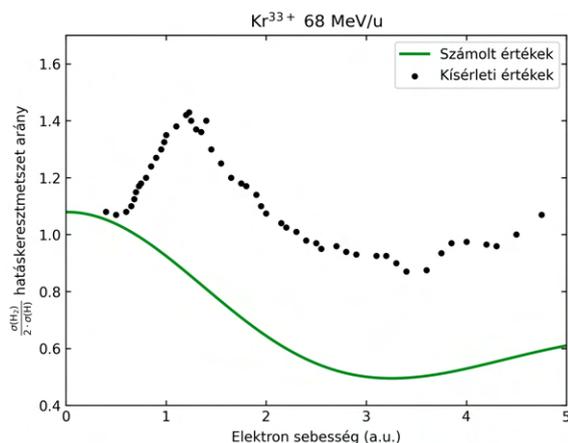
Interferencia jelenségeket tanulmányoztak kísérletileg abban az esetben is, amikor a H_2 ionizációját 68 MeV/u Kr^{33+} ionnal való ütközés okozta [3]. Figyelve arra, hogy a kísérletben alkalmazott paramétereket használjuk, elvégeztük a számolásokat. A kapott eredmények – 30° és 90° kilökési szögek esetén – a 4.7 ábrán láthatók. 90° esetén alátámasztódik, hogy kis sebesség intervallumban (5 a.u.-ig) nem észlelhető oszcilláció (4.7b).



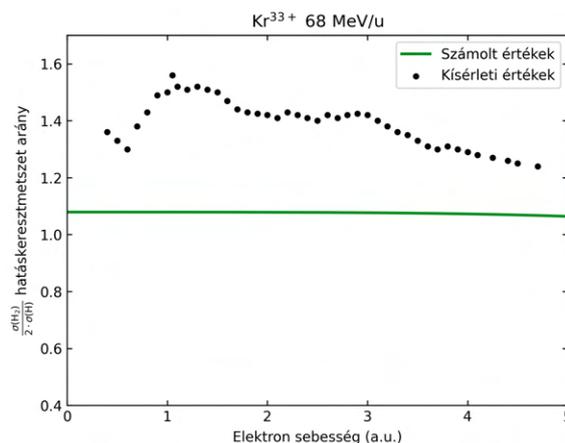
4.5. ábra. H_2 és $2H$ ionizációja 60 MeV/u Kr^{34+} ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége függvényében, különböző szögekre.



4.6. ábra. H_2 és $2H$ ionizációja 60 MeV/u Kr^{34+} ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.



a) $\theta_k = 30^\circ$

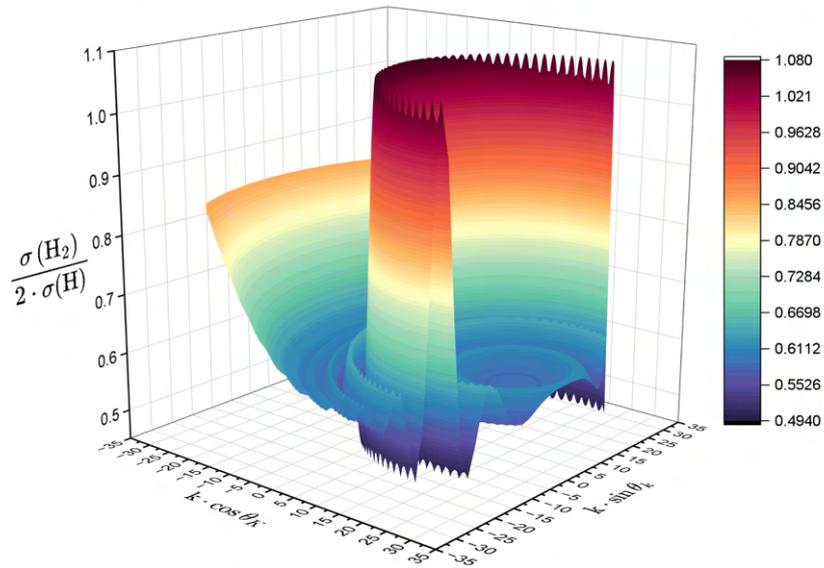


b) $\theta_k = 90^\circ$

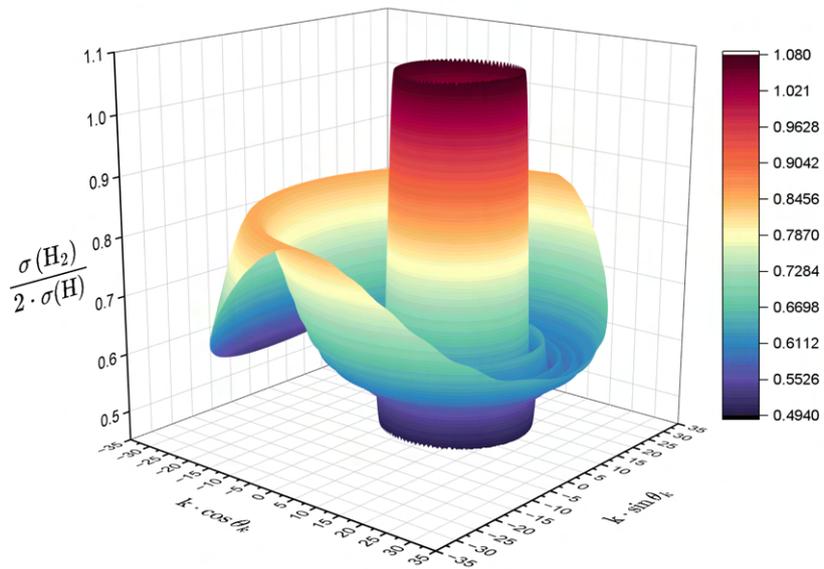
4.7. ábra. H_2 és $2H$ ionizációja 68 MeV/u Kr^{33+} ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége függvényében, 30° (a) és 90° (b) kilökési szögekre. Összehasonlítás céljából a kísérleti eredmények fekete körökkel vannak ábrázolva [3].

A fentebb bemutatott lövedékekkel igazolva, hogy a modell jó eredményeket ad, más ionok esetén is számoltunk hatáskeresztmetszet-arányokat. Az egyik ilyen lövedék 13.7 MeV/u C^{6+} . Ebben az esetben is hasonlóan jártunk el: az interferencia-mintázat látványosságának fokozása érdekében minden kilökési szögre, 35 a.u. sebességig terjedve végeztünk számolásokat, majd 3 dimenziós ábrán tüntettük fel az eredményeket. Ez a 4.8 ábrán látható.

Egy másik érdekes ion, melyet lövedékként használtunk számolásainkban, 3 MeV/u H^+ . Az eljárás ugyanaz, mint fentebb említve volt, a hatáskeresztmetszetek arányát vizsgáltuk a kilökött elektron sebessége és szöge szerint. Ami viszont szembetűnő az ábrán, hogy megjelenik egy kétrészecske-ütközési csúcs (angolul binary peak). A főmaximum helye egy körön rajzolódik ki az impulzustérben. Ha ennek a helyét szeretnénk meghatározni, vissza kell tekintenünk a 4.26 számú egyenletre, $k_{\parallel} = q$ esetben kapunk ilyen csúcst (k_{\parallel} a kilökött elektron impulzusának párhuzamos komponense, a lövedék trajektóriájához viszonyítva). 3 MeV energiájú lövedék esetén, amikor az elektron kilökése előre mutat, ez a kétrészecske-ütközés csúcs $2k \approx 21.9 \text{ a.u.}$ -nál észlelhető. Ez a csúcs nem figyelhető meg a 4.6 és 4.8 ábrákon, mert a Kr^{34+} lövedék 60 MeV energiájából $2k \approx 98 \text{ a.u.}$, illetve a C^{6+} ion esetén 13.7 MeV energiából pedig $2k \approx 46.8 \text{ a.u.}$ értékre adódik, de ezek nem esnek bele abba az intervallumba, amiben a számolásokat végeztük ($0-35 \text{ a.u.}$).



4.8. ábra. H_2 és $2H$ ionizációja $13.7 \text{ MeV/u } C^{6+}$ ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.



4.9. ábra. H_2 és $2H$ ionizációja $3 \text{ MeV/u } H^+$ ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.

5. Az interferencia-mintázat vizsgálata a molekulatengely iránya szerint

Laurent és társai egy 2002-ben megjelent cikkükben [16] nagyenergiájú ion H_2 -val való ütközésekor interferencia jelenségeket vizsgálnak különböző molekulatengely-irányok szerint. Tanulmányukban CDW-EIS (continuum distorted wave eikonal initial state) elméleti számolásokat mutatnak be. A modell keretében az egyszeres ionizáció vizsgálatára 13.7 MeV/u C^{6+} iont választottak lövedékként.

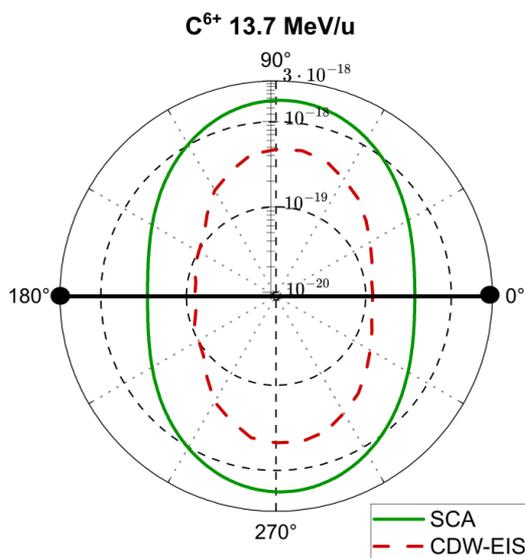
5.1. Kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet

Dolgozatunkban a már bemutatott félklasszikus modell (SCA) használatával vizsgáljuk a hatáskeresztmetszet és interferencia-mintázat molekulatengely-iránytól való függését. Az alfejezet keretében 13.7 MeV/u C^{6+} lövedéket alkalmazunk. Az említett függéseket 10 eV , 61.3 eV és 100 eV kilökési energiákra számoljuk. A molekulatengely a lövedék haladási irányával párhuzamos, illetve arra merőleges helyzetű. Azért választottuk ezeket az irányokat, mert lehetőséget ad összehasonlítani a CDW-EIS elmélet eredményeivel [16, 4]. Emellett azt az esetet is megnéztük, amikor a molekulatengely és a lövedék trajektóriája 45° -os szöget zár be. Erre vonatkozóan csak a modellünk eredményeit ismertetjük.

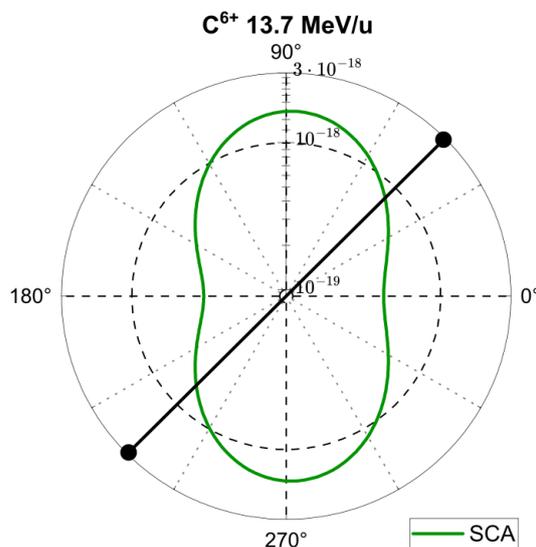
Ebben az esetben tehát az átmenet valószínűségét nem átlagoljuk a molekulatengely szerint, azaz a 4.21 egyenletben leírt lépést részben kihagyjuk, mert a φ_D szög szerinti integrálást megtartottuk. Az így számolt hatáskeresztmetszetek különböző θ_D szögek esetén – a molekulatengely-irányt határozva így meg – az 5.1-5.3 polár ábrákon láthatók. Megfigyelhető az ábrákon, hogy a molekulatengely állása befolyásolja a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetet. Összevetve a Laurent-féle CDW-EIS elméleti számolással [16] és sikeresen reprodukálva Póra doktori dolgozatában megjelenő polár ábrákat [4], jelen eredmények jó egyezést mutatnak.

5.2. Interferencia jelenségek

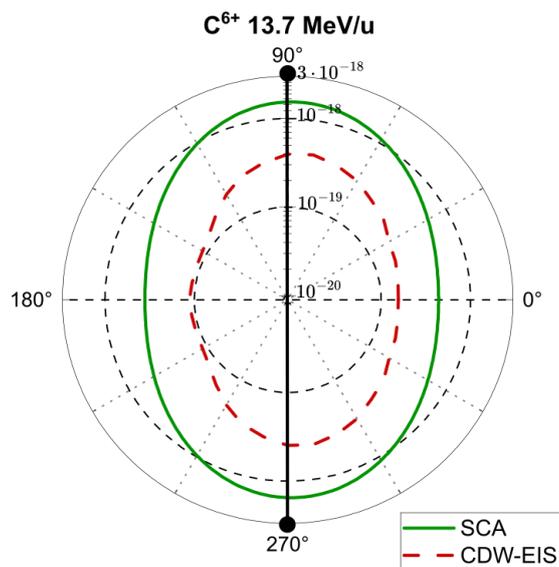
A differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetek esetén kapott eredmények azt mutatják, hogy a félklasszikus modell a molekulatengely-iránytól való függésre jó leírást ad. Ennélfogva, a következő lépés az interferencia-mintázat vizsgálata a molekulatengely állása függvényében



a) $\theta_D = 0^\circ$, $E_e = 10$ eV

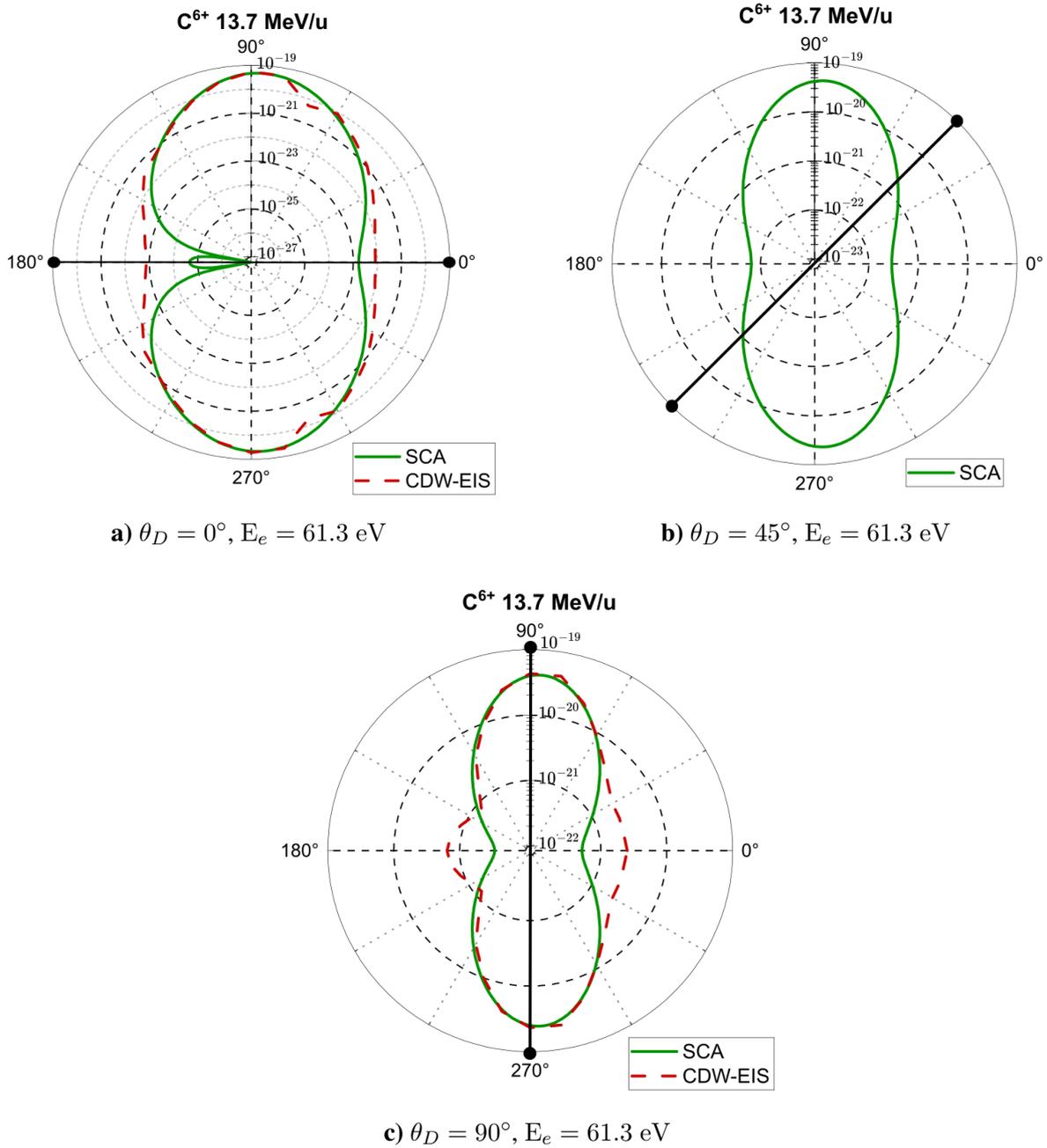


b) $\theta_D = 45^\circ$, $E_e = 10$ eV

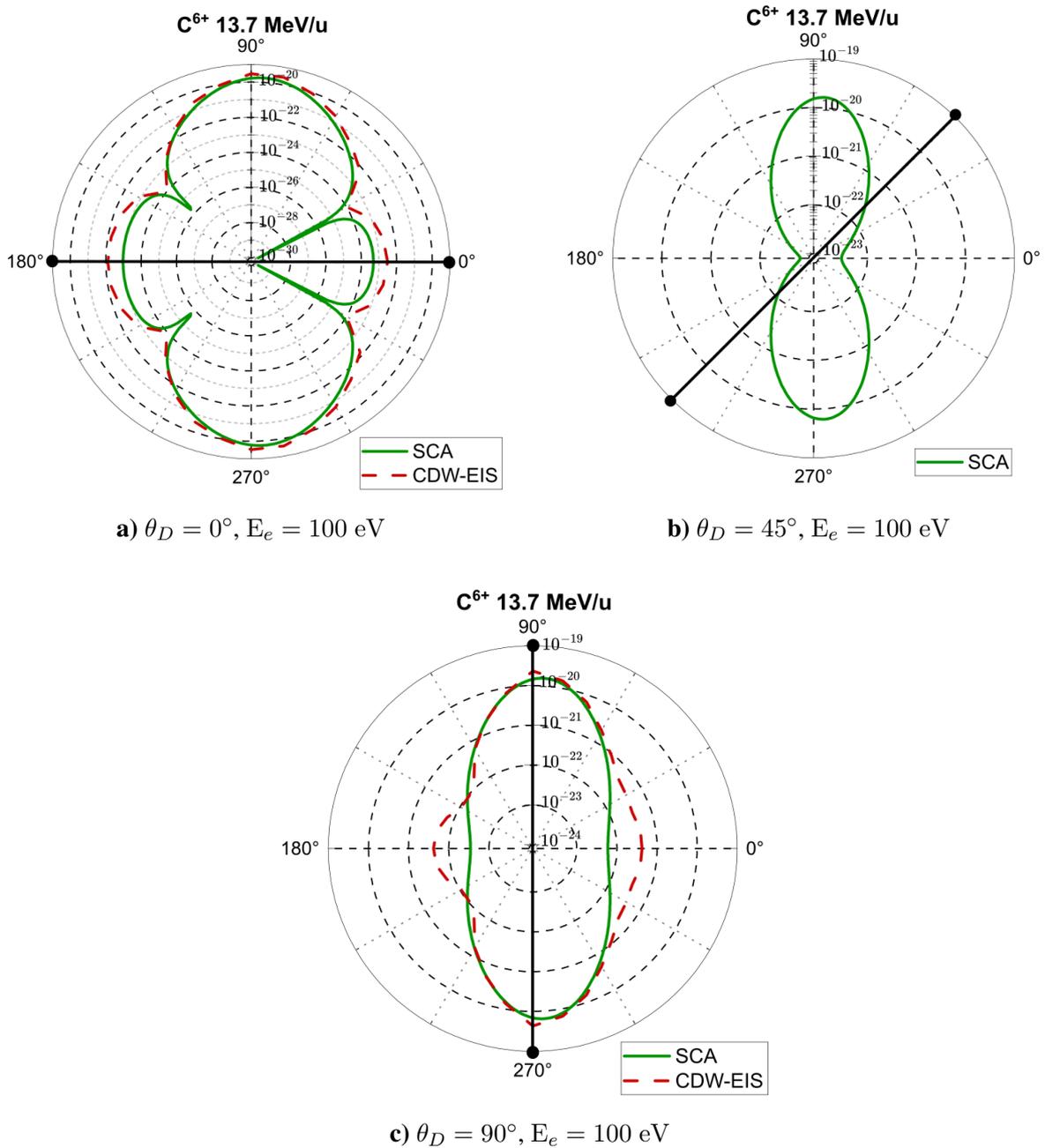


c) $\theta_D = 90^\circ$, $E_e = 10$ eV

5.1. ábra. 13.7 MeV/u C^{6+} ionnal való ütközés következtében H_2 ionizációja, ebben az esetben számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet a kilökött elektron szöge függvényében. A molekulatengely párhuzamos (a), 45° -os szöget zár be (b) vagy merőleges (c) a lövedék pályájára. A kilökött elektron energiája 10 eV. Piros szaggatott vonallal a CDW-EIS eredmények vannak feltüntetve [16].



5.2. ábra. 13.7 MeV/u C^{6+} ionnal való ütközés következtében H_2 ionizációja, ebben az esetben számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet a kilökött elektron szöge függvényében. A molekulatengely párhuzamos (a), 45° -os szöget zár be (b) vagy merőleges (c) a lövedék pályájára. A kilökött elektron energiája 61.3 eV. Piros szaggatott vonallal a CDW-EIS eredmények vannak feltüntetve [16].



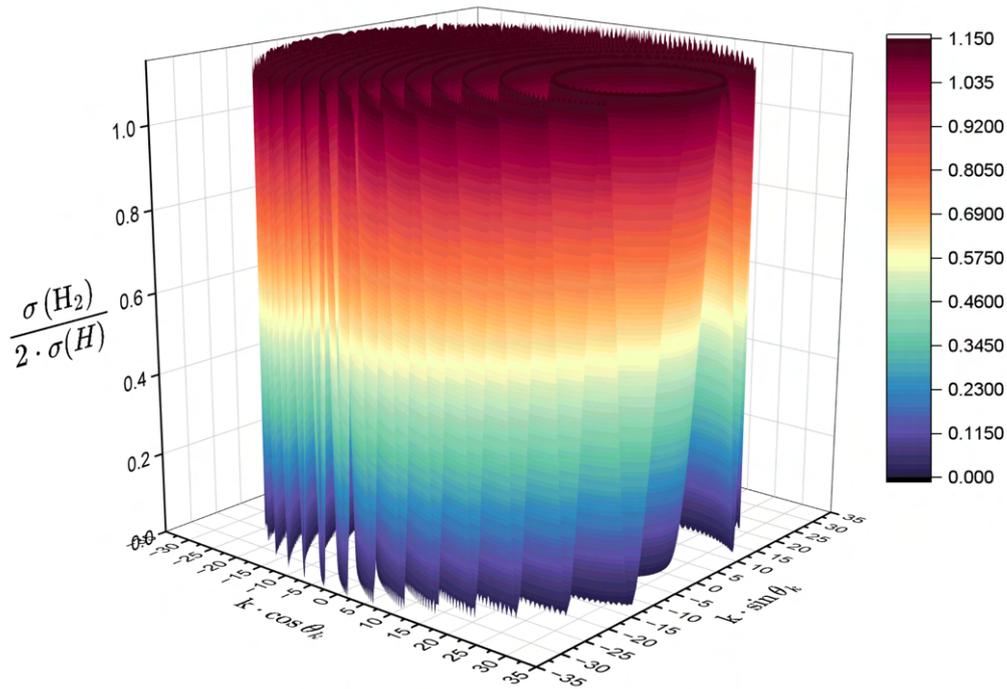
5.3. ábra. 13.7 MeV/u C^{6+} ionnal való ütközés következtében H_2 ionizációja, ebben az esetben számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet a kilökött elektron szöge függvényében. A molekulatengely párhuzamos (a), 45°-os szöget zár be (b) vagy merőleges (c) a lövedék pályájára. A kilökött elektron energiája 100 eV. Piros szaggatott vonallal a CDW-EIS eredmények vannak feltüntetve [16].

– továbbra is követve azt az elemzési módot, hogy a hidrogénmolekula differenciális hatáskeresztmetszetének és két hidrogénatom elméleti ionizációs hatáskeresztmetszetének arányát számoljuk. Eljárásunkban az az egyedi, hogy ezeket az arányokat nemcsak a kilökött elektron sebessége szerint, hanem a kilökési szögek szerint is megvizsgáljuk, 3 dimenzióban ábrázolva az eredményeket.

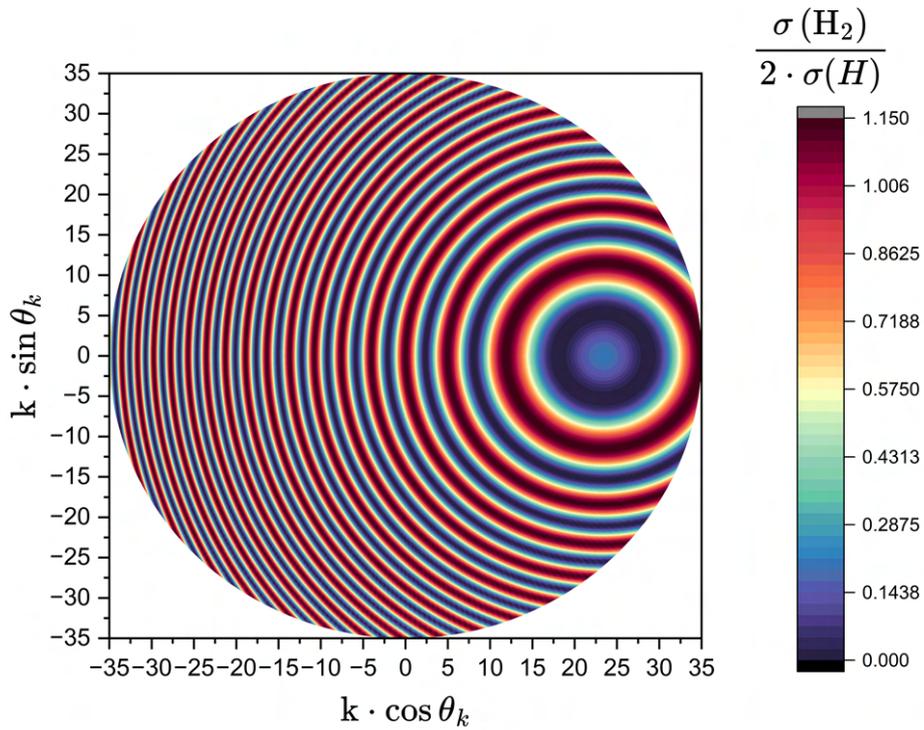
Ugyanannál a 13.7 MeV/u C^{6+} lövedéknél maradunk, amely esetén az előző alfejezetben differenciális ionizációs hatáskeresztmetszeteket számoltunk. Első esetben a molekulatengely oly módon rögzített, hogy a lövedék által leírt pályával párhuzamos irányú legyen, ez látható az 5.4a) ábrán. Éles minimum és maximum váltakozást észlelve, az eredmény láthatóbbá tételének érdekében, csatoltunk egy kontúrbrát (5.4b)). Ebben az esetben a körvonalábra teszi láthatóvá, hogy jellegzetes interferencia-mintázat lép fel az ionizáció során. A 4.23 számú egyenlet támasztja alá, hogy $\theta_D = 0^\circ$ esetén az oszcilláció erőteljes lesz. Az 5.6 ábra mutatja be azt az esetet, amikor a molekulatengely iránya merőleges a lövedék haladási irányára. Az figyelhető meg, hogy az oszcilláció teljes mértékben eltűnik. A kettő közötti átmenet látható például, ha a molekulatengely és a lövedék pályája $\theta_D = 45^\circ$ -os szöget zár be. Észlelhető egy másodrendű maximum, az erre vonatkozó eredmények az 5.5 ábrán láthatók.

A C^{6+} ion mellett 3 MeV/u H^+ lövedékre is végeztünk számolásokat. A vizsgált molekulatengely-irányok ugyanazok az esetek, mint az előző ütközésnél, tehát a lövedék trajektóriával párhuzamos (5.7 ábra), azzal 45° -os szöget zár be (5.8) vagy merőleges rá (5.9). Megfigyelhető, hogy a főmaximum a $2k$ átmérőjű kör helyén rajzolódik ki, $2k \approx 21.9$ a.u. értékre. Minden ábra esetén (5.4-5.9) a kilökött elektron sebessége maximum 35 a.u.-ig terjed, ezért jelenik meg a kétrészecske-ütközés csúcs H^+ lövedékre, de C^{6+} ionra már nem ($2k \approx 46.8$).

A 3 dimenziós ábrák és kontúrbrák együttesén (5.4-5.9) jól látható az interferencia-mintázat molekulatengely-irány szerinti függése, az általunk követett félklasszikus modell jól írja le ezeket az érdekes interferencia-mintázatokat. Ezeknek a rögzített molekulatengely-irányra kapott eredményeknek kísérleti igazolása még várat magára.

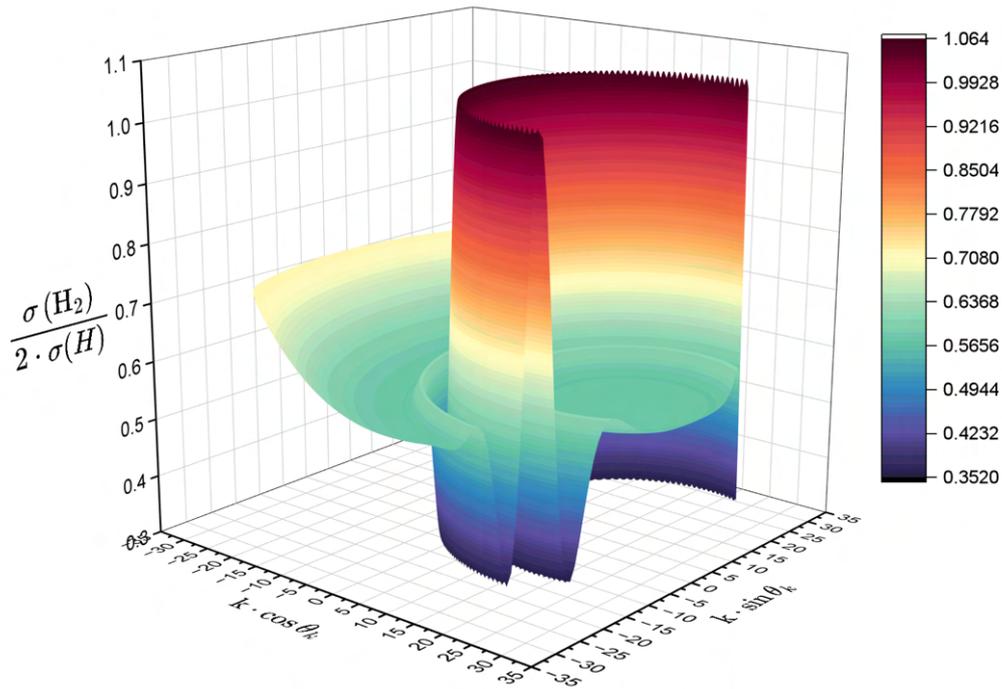


a) $\theta_D = 0^\circ$

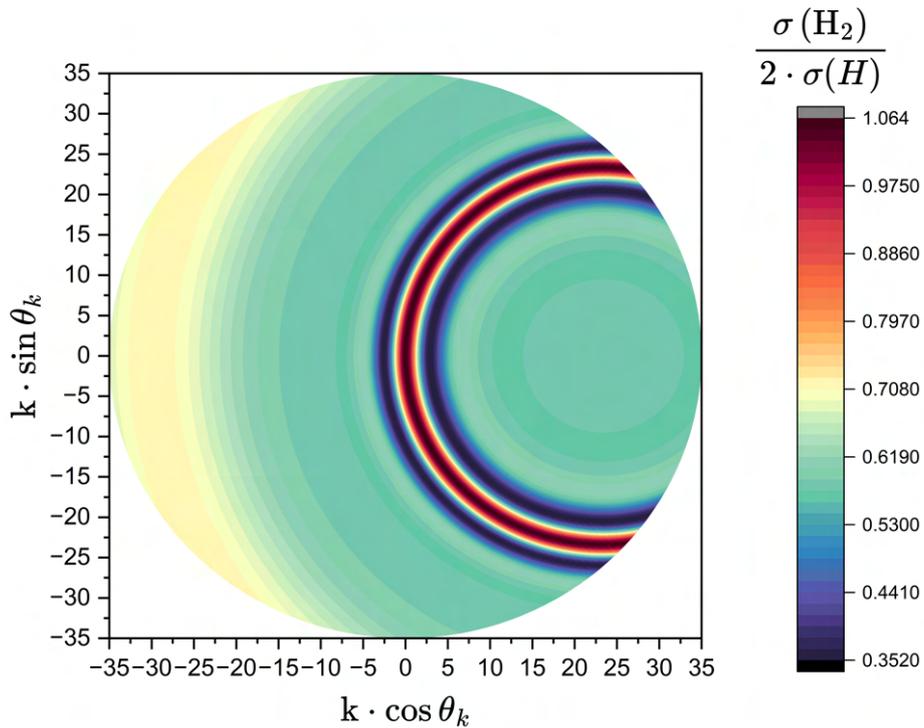


b) $\theta_D = 0^\circ$

5.4. ábra. H_2 és 2H ionizációja 13.7 MeV/u C^{6+} ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A molekulatengely párhuzamos a lövedék trajektóriájával. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.

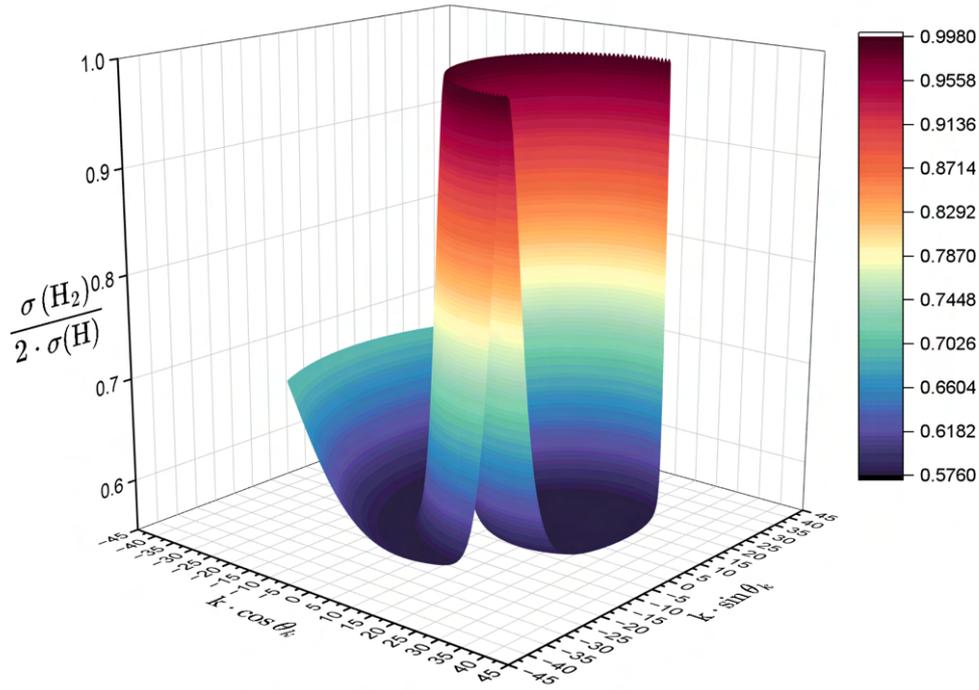


a) $\theta_D = 45^\circ$

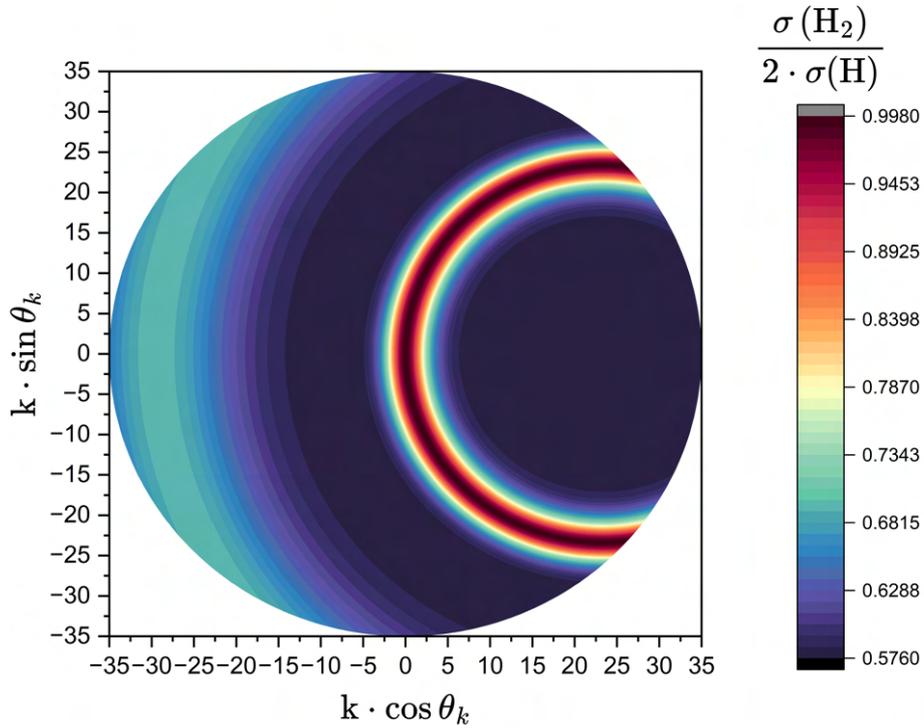


b) $\theta_D = 45^\circ$

5.5. ábra. H_2 és $2H$ ionizációja $13.7 \text{ MeV/u } C^{6+}$ ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A molekulatengely 45° -os szöget zár be a lövedék trajektóriájával. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.

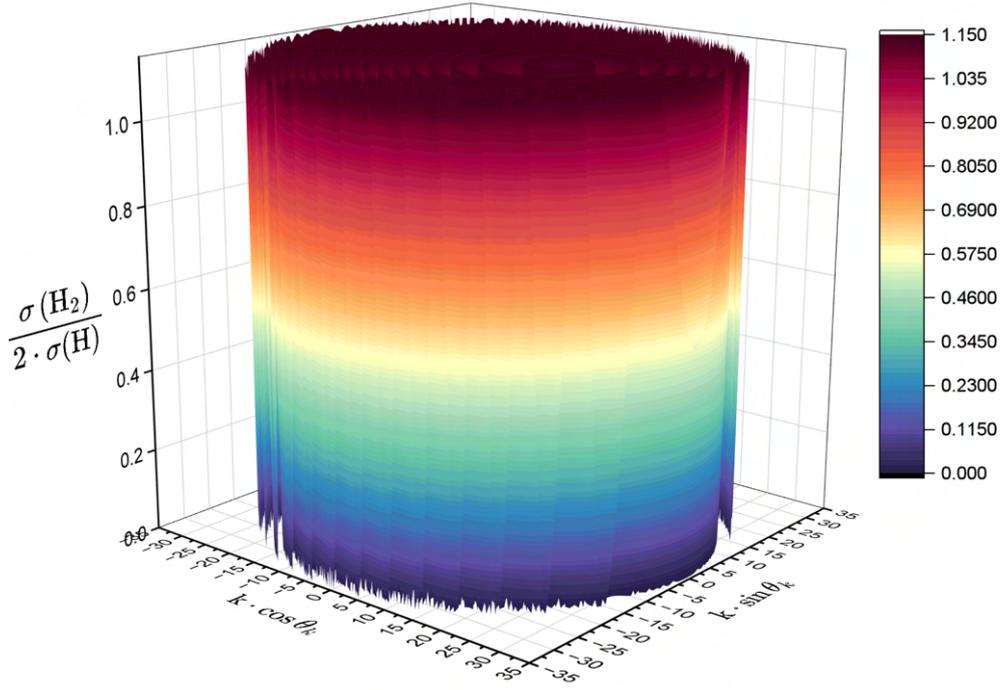


a) $\theta_D = 90^\circ$

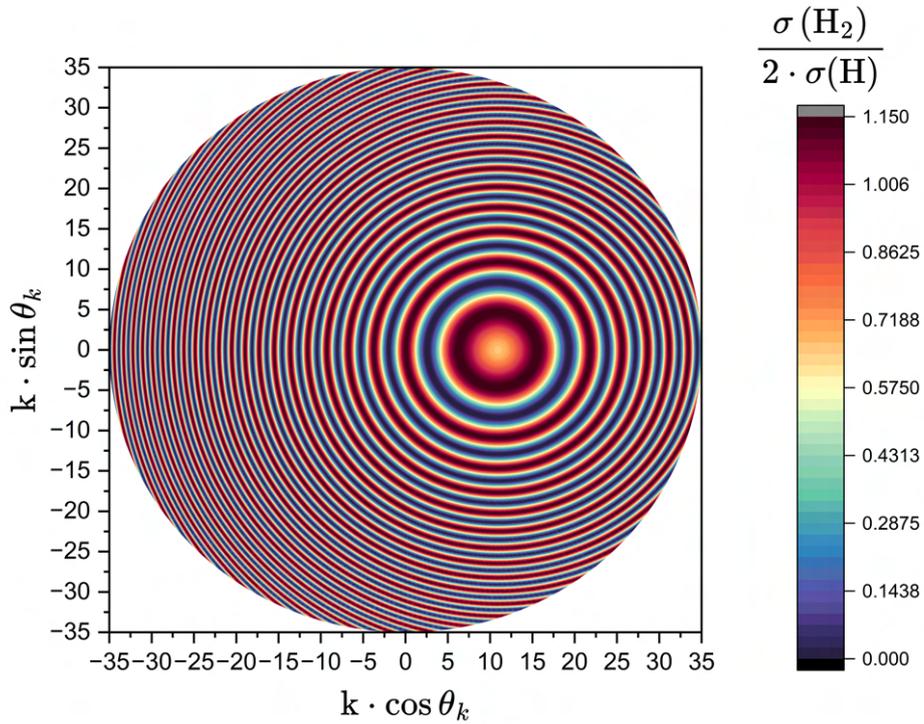


b) $\theta_D = 90^\circ$

5.6. ábra. H_2 és 2H ionizációja 13.7 MeV/u C^{6+} ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A molekulatengely merőleges a lövedék trajektóriájára. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.

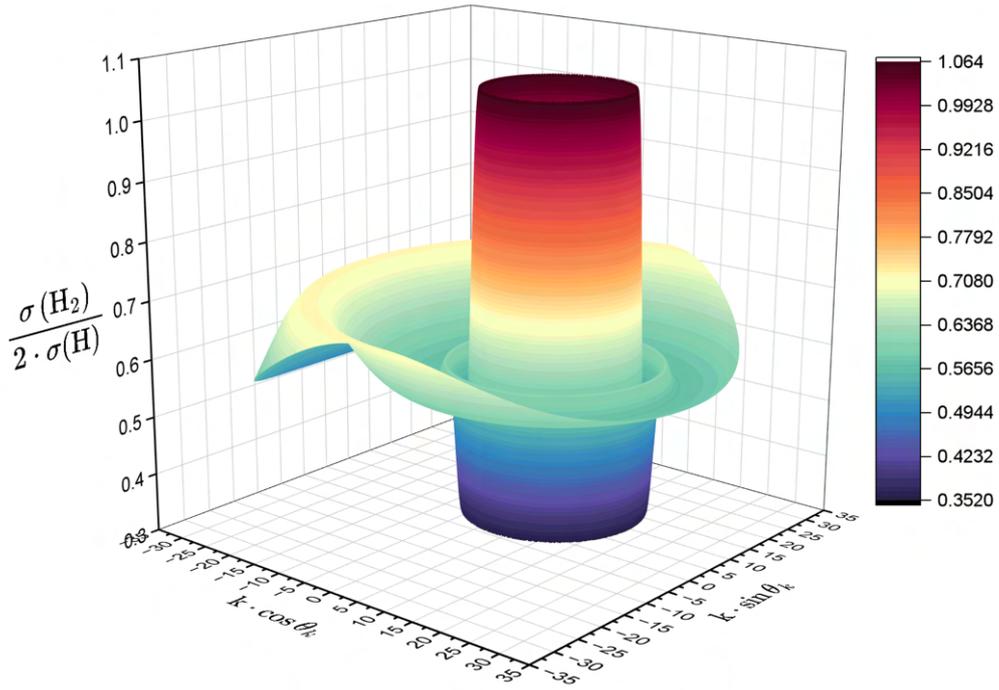


a) $\theta_D = 0^\circ$

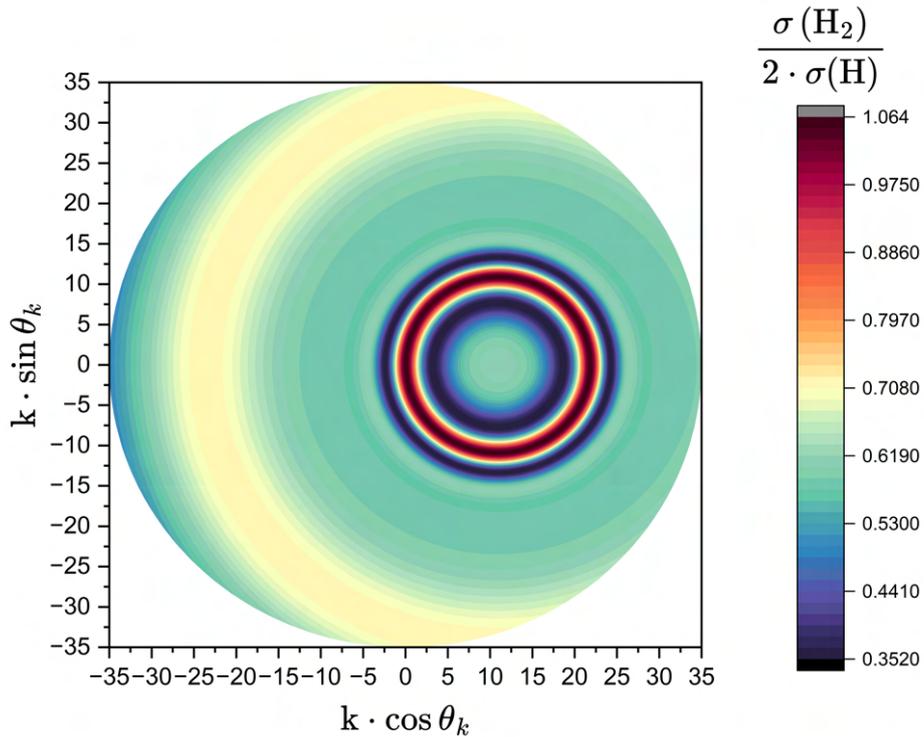


b) $\theta_D = 0^\circ$

5.7. ábra. H_2 és 2H ionizációja 3 MeV/u H^+ ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A molekulatengely párhuzamos a lövedék trajektóriájával. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.

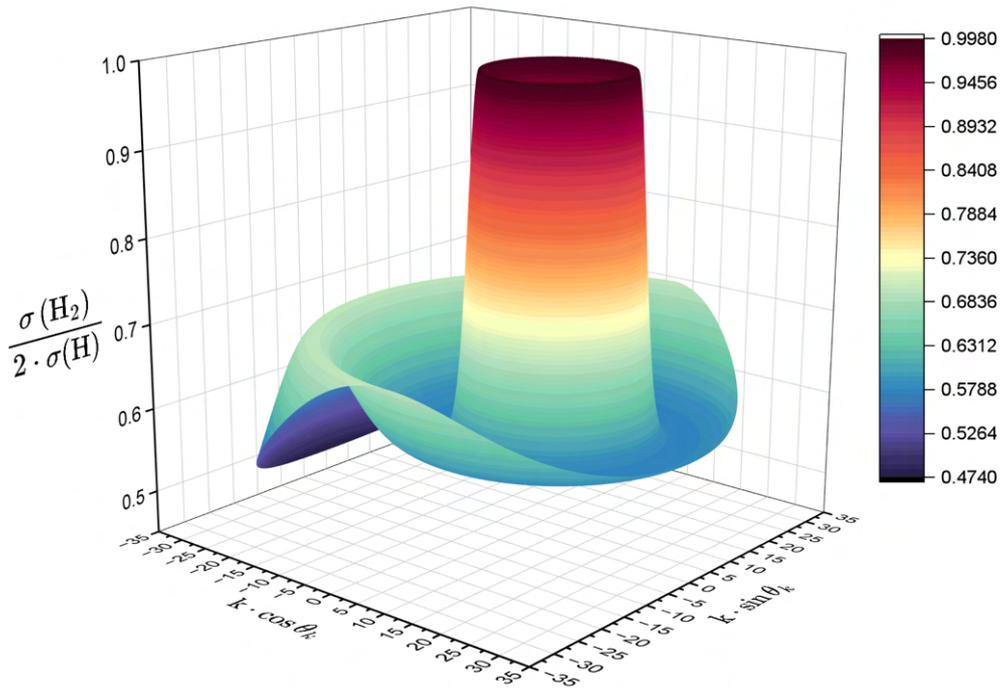


a) $\theta_D = 45^\circ$

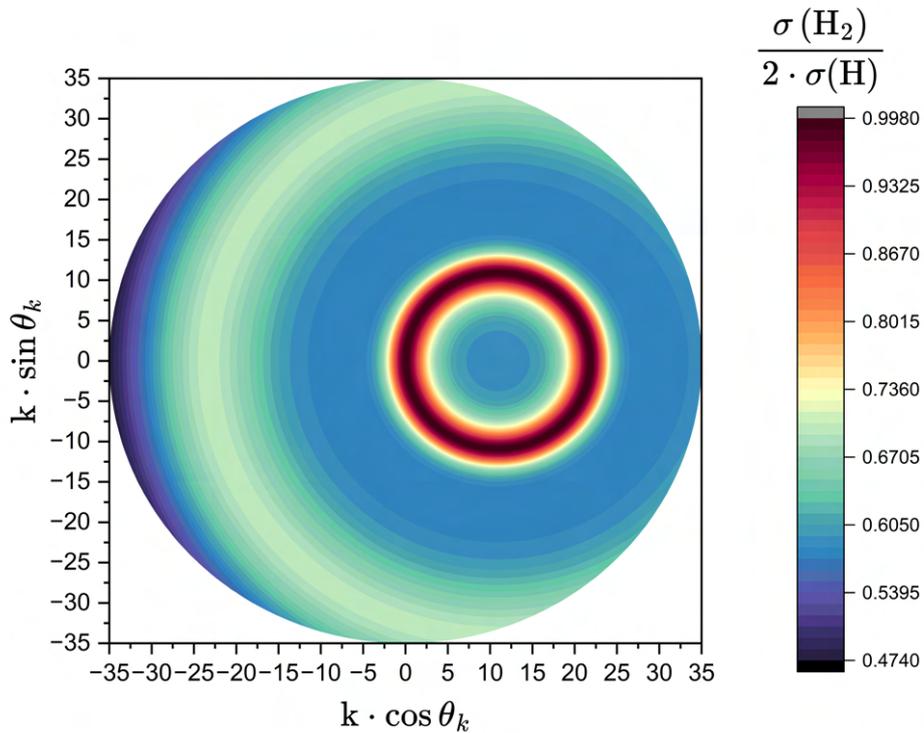


b) $\theta_D = 45^\circ$

5.8. ábra. H_2 és 2H ionizációja 3 MeV/u H^+ ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A molekulatengely 45° -os szöget zár be a lövedék trajektóriájával. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.



a) $\theta_D = 90^\circ$



b) $\theta_D = 90^\circ$

5.9. ábra. H_2 és 2H ionizációja 3 MeV/u H^+ ionnal való ütközés során, a számolt kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet-arányok a kilökött elektron sebessége és szöge függvényében. A molekulatengely merőleges a lövedék trajektóriájára. A sebesség radiális koordinátaként van tekintve. Maximum sebesség 35 a.u.

Következtetések

Az elektron hullámtermészetéből adódóan, illetve a hidrogénmolekula két-centrum jellege miatt, a molekula ionizációja során interferencia jelenségek észlelhetők. Ezt először Stolterfoht és társai tudták kísérleti úton kimutatni a kilökött elektron spektrumában [1]. Dolgozatunk központi témája a fellépő interferencia jelenségek vizsgálata elméleti módon.

A dolgozat kereteiben végzett számolások a félklasszikus ütközési paraméter közelítésen alapszanak. Ebben a modellben a lövedék pályáját egyenes vonalúnak tekintjük, és az általa végzett mozgást klasszikus módon értelmezzük. Ezzel szemben a céltárgy elektronjait kvantummechanikai formalizmus jellemzi. A lövedék és a céltárgy elektronjai közötti kölcsönhatást perturbációnak tekintjük. A modell segítségével többféle nagyenergiájú ion hidrogénmolekulával való ütközésekor differenciális ionizációs hatáskeresztmetszeteket számolunk a kilökött elektronok sebességének vagy energiájának függvényében. Szimuláció segítségével végzett számolások eredményeit összevetettük az említett kísérleti eredményekkel, jó egyezés tapasztalható.

Az interferencia-mintázat tanulmányozásakor a kísérleti eredményeket ismertető cikkben leírt módszer szerint jártunk el: nem elegendő csupán a differenciális hatáskeresztmetszetet megnézni, jobb eredményt lehet elérni, ha kiszámoljuk a hidrogénatom elméleti hatáskeresztmetszetét is kétszer véve, és ezek arányát vizsgáljuk meg. Abban az esetben, amikor a molekulatengely-irány szerint is átlagoltunk, az elméleti számolások azt mutatják, hogy az interferencia-mintázatban az oszcilláció periódusa és fázisa függ a kilökött elektron szögétől és sebességétől.

A dolgozatban az az egyedi, hogy rögzített molekulatengely-irányok esetén is megvizsgáltuk az interferencia-mintázatot. Összehasonlítva a félklasszikus közelítés (SCA) eredményeit a CDW-EIS elméleti számolások eredményeivel [16, 4], az elmélet helyesen írja le a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetet adott molekulatengely-irányra. Az interferencia-mintázatot megadó hatáskeresztmetszet-arányokat nemcsak a kilökött elektron szöge, hanem sebessége szerint is kiértékeljük. Az vehető észre, hogy akkor a legerőteljesebb az oszcilláció, amikor a molekulatengely párhuzamosan áll a lövedék mozgásirányához viszonyítva, míg ha a molekulatengely-irány merőleges, az oszcilláció eltűnik. A kapott elméleti eredmények kísérleti alátámasztásra várnak.

Összegezve, a félklasszikus ütközési paraméter közelítésen alapuló elméleti modell jó leírást ad a differenciális hatáskeresztmetszetekre, az ionizációkor fellépő interferencia jelenségekre és

ennek a molekulatengely-iránytól való függésére.

Hivatkozások

- [1] N. Stolterfoht és mások. „Evidence for Interference Effects in Electron Emission from H₂ Colliding with 60 MeV/u Kr³⁴⁺ Ions”. *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), 23201. oldal.
- [2] L. Nagy és mások. „Interference effects in the ionization of H₂ by fast charged projectiles”. *J. Phys. B: At., Mol. Phys.* 35 (2002), L453–L459. oldal.
- [3] N. Stolterfoht és mások. „Interference effects in electron emission from H₂ by 68-MeV/u Kr³³⁺ impact: Dependence on the emission angle”. *Phys. Rev. A* 67 (2003), 30702. oldal.
- [4] Póra Melinda-Katalin. „Interference effects in the ionization of the hydrogen molecule”. Disszertáció. Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, 2010.
- [5] Nagy L. *Atomfizika*. Erdélyi Tankönyvtanács, Kolozsvár, 1997.
- [6] Czipa Loránd-Szabolcs. „Efecte de interferență în ionizarea moleculelor diatomice”. Disszertáció. Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, 2018.
- [7] Néda Z., Libál A. és Kovács K. *Elemi kvantummechanika*. Kolozsvári Egyetemi Kiadó, 2006.
- [8] Clinton J. Davisson. „The discovery of electron waves”. *Nobel Lecture* (1937).
- [9] C. Davisson és L. Germer. „The Scattering of Electrons by a Single Crystal of Nickel”. *Nature* (1927).
- [10] G. P. Thomson. „Experiments on the Diffraction of Cathode Rays”. *Royal Society* (1927).
- [11] R. P. Feynman, R. B. Leighton és M. Sands. *A Feynman-előadások fizikából III.* Typotex Kiadó, 2020.
- [12] A. Tonomura és mások. „Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern”. *American Journal of Physics* (1989).
- [13] Nagy L. *Numerikus és közelítő módszerek az atomfizikában*. Scientia Kiadó, Kolozsvár, 2002.
- [14] H. A. Bethe. *Ann. Phys. (Leipzig)* 5 (1930), 325. oldal.
- [15] J. P. Hansen és L. Kocbach. „Ejection angles of fast delta electrons from K-shell ionisation induced by energetic ions”. *J. Phys. B: At., Mol. Phys.* 22 (1989), L71–L77. oldal.
- [16] G. Laurent és mások. „Orientation and interference effects in single ionization of H₂ by fast ions”. *J. Phys. B: At., Mol. Phys.* 35 (2002), L495. oldal.