

**Egy- és többelektronos folyamatok  
nagyenergiájú atomi ütközésekben**

Akadémia doktori értekezés

Gulyás László

a fizikai tudomány kandidátusa

MTA ATOMKI, Debrecen

2005

# Tartalomjegyzék

|                                                                                  |           |
|----------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. Bevezetés</b>                                                              | <b>3</b>  |
| <b>2. Irodalmi áttekintés</b>                                                    | <b>6</b>  |
| 2.1. Alapfogalmak . . . . .                                                      | 8         |
| 2.2. A félklasszikus leírás . . . . .                                            | 13        |
| 2.2.1. Ütközési modellek . . . . .                                               | 22        |
| <b>3. Saját vizsgálatok, eredmények</b>                                          | <b>29</b> |
| 3.1. Egyelektronos folyamatok: az atomi potenciálok szerepe . . . . .            | 29        |
| 3.1.1. Az elektrongerjesztés leírása szimmetrikus eikonál közelítésben . . . . . | 31        |
| 3.1.2. Az elektronbefogás leírása CDW közelítésben . . . . .                     | 37        |
| 3.1.3. Az ionizáció leírása a CDW-EIS közelítésben . . . . .                     | 42        |
| 3.2. Egyelektronos folyamatok: dinamikai és kinematikai vizsgálatok . . . . .    | 53        |
| 3.2.1. Az elektron és a meglökött céltárgyion impulzuseloszlása . . . . .        | 53        |
| 3.2.2. A lövedékion szóródása . . . . .                                          | 59        |
| 3.2.3. Thomas-szórás . . . . .                                                   | 64        |
| 3.2.4. Az ECC folyamat és a lövedékion szóródása . . . . .                       | 67        |

|                                                                           |           |
|---------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.3. Többszörös ionizáció . . . . .                                       | 71        |
| 3.3.1. A hélium atom kétszeres ionizációja . . . . .                      | 74        |
| 3.3.2. Neon és argon atomok többszörös ionizációja . . . . .              | 75        |
| 3.3.3. Másodrendű folyamatok az argon többszörös ionizációjában . . . . . | 80        |
| <b>4. Összefoglalás és általános megjegyzések</b>                         | <b>83</b> |
| <b>5. Köszönetnyilvánítás</b>                                             | <b>88</b> |
| <b>A. Eikonál közelítés</b>                                               | <b>89</b> |
| <b>B. CDW integrálok</b>                                                  | <b>92</b> |

# 1. fejezet

## Bevezetés

Az 1960-as évektől kezdődően az atomfizikai jelenségek vizsgálataiban is alkalmazni kezdték a modern magfizikai kutatások számára kifejlesztett gyorsítókat és mérési eljárásokat. Azóta a terület jelentős fejlődésen ment keresztül. Kezdetben az elektron gerjesztődésével, ionizációjával és befogódásával járó ún. elemi folyamatok megismerése képezte a kutatások fő irányait [Be87]. Később a mérés technika fejlődése jelentősen kibővítette a tanulmányozható jelenségek körét, így például lehetővé vált a több elektron átmenetével járó folyamatok tanulmányozása is [McGu92, St97]. Napjainkban a reakciómikroszkópok elterjedése az ütközési jelenségek mind pontosabb és részletesebb megismerését teszi lehetővé [Do96, Ul03].

Az atomi ütközésekről szerzett információk számos más tudományterület és a gyakorlati élet szempontjából is meghatározó jelentőséggel bírnak. A kezdeti vizsgálatokban a nehéz töltött részecske ütközése által keltett atomi átmenetek tanulmányozása a termonukleáris fúzióra irányuló energiakutatások számára szolgáltatott igen hasznos információt [Jo83, Ja93]. Később a rendelkezésre álló gerjesztőforrások bővülésének (pl.

pozitronok, relativisztikus nehézion gyorsítók, szinkrotronok, lézerek, stb.) és molekulák, fullerének, vékonyrétegek, stb. mint céltárgyak alkalmazásának köszönhetően, az asztrofizikai [Bu75, Me83], anyagtudományi [Jo76, Jo90, It96], orvosbiológiai [In71, Ue99], stb. kutatások szempontjából válik a terület igen meghatározóvá. Napjainkban ezeknek az alkalmazásoknak az atomi ütközési folyamatok kutatásában egyre növekvő súlyuk van. Ezek mellett természetesen továbbra is jelen vannak az alapkutatások témakörébe sorolható, az alapvető törvényszerűségek vizsgálataira irányuló kutatási témák is. Ilyen például a rendkívül nagy perturbációk (pl. hidrogénszerű urán lövedékek) hatása alatt lejátszódó ionizációs jelenségek [Ma98], vagy a nagy elektromos térerősségek esetén fellépő spontán elektron-pozitron párkeltés [Io96].

Az atomi ütközési folyamatokban a hosszú hatótávolságú Coulomb-erő játssza a meghatározó szerepet. Ugyanakkor a kezdeti vizsgálatok a perturbációs eljárások témakörébe tartozó olyan Born-típusú közelítéseken alapultak, melyek rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetén érvényesek [McDo70]. A Coulomb-kölcsönhatás esetén érvényes eljárások alkalmazásának szükségességére az egyre megbízhatóbb mérési és a modellszámítások eredményei között meglévő eltérések hívták fel a figyelmet [De85, De94]. A hosszú hatótávolságú Coulomb-erő hatása alatt a mozgás még a távoli, aszimptotikus ütközési tartományokon sem közelíthető szabad mozgással. Ez igen komoly matematikai nehézségeket vet fel, mivel egzakt megoldás csak két részecske esetén ismert [Fa93]. Számos közelítő eljárás született a probléma kezelésére, azonban ezek bonyolultsága miatt sok esetben meg kell elégedni az első- és másodrendű tagok meghatározásával a vizsgált jelenség perturbációs közelítésen alapuló tárgyalásában [De94].

A számos biológiai, anyagtudományi, stb. alkalmazásban az ütközési folyamatok pon-

tos végigkövetése reménytelen feladatot jelentene. Erre sok esetben nincs is szükség, ugyanis a jelenségről már olyan modellek is kielégítő leírást nyújthatnak, amelyekben csak az egyes elemi ütközések ún. átlagolt jellemzőire vagyunk kíváncsiak. Ilyen mennyiségek például az átmeneti valószínűség vagy az ütközési hatáskeresztmetszet. Ezek pontos ismerete nagyon fontos, akár meghatározó szereppel is bírhat az adott elemi ütközések sorozatából felépülő jelenség globális megértése szempontjából.

A jelen értekezés tárgyát a nagyenergiájú lövedékionok és az „egyszerű” atomok vagy ionok ütközésekor lejátszódó elemi folyamatok vizsgálata képezi. A Coulomb-kölcsönhatás hosszú hatótávolságú voltát figyelembe vevő, a torzított hullámú modellek témakörébe tartozó eljárásokat alkalmazunk az elektron(ok) gerjesztődését, ionizációját és a lövedékion kötött állapotaiba történő befogódását eredményező folyamatok vizsgálatára. Ezek a vizsgálatok sok esetben kísérleti munkákhoz is kapcsolódnak, és a mért értékek értelmezésén keresztül hozzájárulnak az adott folyamat mind pontosabb megértéséhez is.

Az értekezés második fejezetében az elméleti alapfogalmakat és az alkalmazott modelleket tekintjük át. A vizsgálatokat és az eredményeket a harmadik fejezet ismerteti, amelynek első részében az atomi potenciálok szerepét tanulmányozzuk az egy elektron átmenetét eredményező ún. elemi (gerjesztés, ionizáció és elektronbefogódás) folyamatokban. A második részben az ionizációs folyamatnak a lövedékion szóródására és a céltárgyion meglökődésére is kiterjedő kinematikai és dinamikai vizsgálatait mutatjuk be. A harmadik rész a többelektronos ionizáció jelenségét tárgyalja a független részecske modell keretében. A negyedik fejezet az elért eredmények összefoglalását tartalmazza.

## 2. fejezet

### Irodalmi áttekintés

A dolgozat tárgyát egy nagyenergiájú, csupasz vagy elektronnal rendelkező lövedékion és egy semleges atom vagy ion ütközésekor létrejövő folyamatok vizsgálata képezi. Ebben a fejezetben áttekintjük azokat az elméleti alapfogalmakat és modelleket, amelyeket a vizsgálat során alkalmazni fogunk. A dolgozatban nagyenergiájú ütközéseknek azokat az ütközéseket tekintjük, amelyekben a bombázó részecske  $v$  sebessége közel azonos vagy nagyobb, mint annak az atomi elektronnak a  $v_o$  átlagos pályasebessége, amelynek átmenetét az ütközésben vizsgáljuk. A  $v \simeq v_o$  tartományt a közepes energiák tartományának is szokás nevezni. Ha a  $v$  ill.  $v_o$  nagyon nagy, a fény sebességével összemérhető, a mozgásokat relativisztikusan kell tárgyalni. A jelen dolgozatnak nem célja a relativisztikus energiákon lejátszódó jelenségek vizsgálata, ezekről részletesebb ismertetőt Eichler munkájában [Ei90] találhatunk. A dolgozatban tanulmányozott atomok rendszáma kicsi ( $Z \leq 30$ ), így a spineffektusok vizsgálatától is eltekintünk. A  $v \ll v_o$  tartomány hasonlóan nem képezi a dolgozat témakörét. Az ebben a tartományban elterjedt atomi és molekuláris bázisokra épülő csatolt-csatornás eljárásokról bővebb áttekintéshez juthatunk az irodalomban

Az előzőekben elmondottak alapján az ismertetendő modellek elsősorban olyan energiatartományon alkalmazhatóak, ahol a lövedék egy nukleonjára eső energia a néhány 10 keV-től a néhány 10 MeV-ig terjedő határok közé esik. A lövedék ilyen energiákon már olyan rövid ideig tartózkodik a céltárgy terében, hogy annak belső szerkezete nem tud folyamatosan alkalmazkodni a gyorsan változó körülményekhez. Következésképpen a rendszer állapotai között csak gyors, ugrásszerű átmenetek jönnek létre. Ezeket a folyamatokat primér folyamatoknak nevezzük, míg az ezeket követő, a részecskék kialakult belső állapotainak legerjesztődését eredményező mechanizmusokra pedig a szekundér folyamatok megnevezést használjuk. A szekundér folyamatok tárgyalása szintén túlmutat a jelen dolgozat témakörén, így a továbbiakban ezekkel nem foglalkozunk. Az utóbbi jelenségekről bővebb ismertetést találunk az irodalomban [Me78, McDa93].

Az atomi ütközések fizikájának vizsgálatai során alkalmazott módszerek és eljárások a kvantummechanikai szóráselmélet témakörébe tartoznak. Ezen módszerek egy része már a kvantummechanika fejlődésének kezdeti szakaszában létrejött, míg mások a későbbi alkalmazások során fejlődtek ki. Mivel az atomi ütközések fizikájának széleskörű elterjedése csak a 70-as évek elejére tehető, így számos olyan elméleti közelítő eljárás került alkalmazásra, amelyek jóval korábban más területek, pl. magfizika, kvantumelektrodinamika, stb. fejlődése során kialakultak. A nehéz részecske bombázása által kiváltott atomfizikai jelenségek tárgyalásában két körülmény is megkülönböztetett hangsúlyt kap. Az egyik a részecskék között ható Coulomb-erő. A Coulomb-kölcsönhatás kitüntetett szerepére már a korai „formális szóráselméleti” művek is felhívták a figyelmet, amelynek nyomán a szóráselmélet egy új fejezete, a hosszú hatótávolságú kölcsönhatások tárgyalására szolgáló,

„módosított hullámoperátorok” elmélete alakult ki [Me62, Am77, Fa93, De97]. A másik alapvető sajátság abból adódik, hogy a bombázó részecske tömege nagyságrendekkel nagyobb az elektronénál, ami a félklasszikus tárgyalásmód alkalmazhatóságát teszi lehetővé. Ez a módszer is már korábban, más, alapvetően nem atomfizikai szórási probléma megfogalmazódása során alakult ki [Ya79, Ha80, De72]. Ezek a módszerek a többi, itt nem említett módszerrel együtt széleskörű alkalmazást nyertek az atomi ütközések fizikájának vizsgálataiban. Ismertetésükről és alkalmazásaikról, az adott terület egyéb sajátosságait is figyelembe vevő, áttekintő monográfiák készültek. A dolgozatban többnyire ezekre a munkákra utalunk vissza, amelyekben fellelhetőek az eredeti források is.

A következő alfejezetekben áttekintjük a kvantummechanikai és félklasszikus tárgyalásmód főbb alapfogalmait, alapmennyiségeit. A folytonosan torzított hullámú közelítéseket a legegyszerűbb három részecske ütközésében ismertetjük, kitérve arra is, hogy azok az egyes primér jelenségek tárgyalásában milyen sikerrel alkalmazhatóak. Az atomfizikai szórási jelenségek leírására alkalmazott elméleti modellek átfogóbb áttekintése a [McDo70, Jo79, Be79, Br92, De94] művekben található meg.

A dolgozatban atomi egységeket (atomi units, a.u.) használunk, ha ettől eltérünk, azt külön jelöljük.

## 2.1. Alapfogalmak

Egy adott ütközési folyamat tárgyalása rendszerint a kezdeti állapot megadásával kezdődik, ahol az ütköző felek egymástól végtelen távolinak tekinthetők. Az ütközés után különböző részecskéket, részecske-csoportosulásokat detektálhatunk, melyek egymástól szintén

végtelen nagy távolságokra szeparálódnak. Az ütköző részecskék kezdőállapotai ( $t \rightarrow -\infty$ ) és végállapotai ( $t \rightarrow \infty$ ) elrendeződéseit befutó, illetve kifutó csatornáknak is szokás nevezni. A végállapotoknak megfelelően rugalmas szórással, gerjesztődéssel és elektronbefogással járó folyamatokat különböztethetünk meg. A lövedékion rugalmas szóródásával járó mechanizmusokkal a dolgozatban nem foglalkozunk. Gerjesztésről akkor beszélünk, ha csak az atom vagy ion belső állapotai között történt átmenet, azaz az elektron gerjesztődött. Átrendeződésről vagy elektronbefogásról akkor van szó, ha az elektron a lövedékion kötött állapotaiba fogódik be. Az ionizációt, amelynek során az elektron szabad állapotba kerül, a gerjesztés speciális esetének tekinthetjük. Az olyan ionizációt pedig, amelynek során a szabaddá vált elektron sebességvektora közel azonos a lövedékionéval (az elektron a lövedékkel együtt halad) a befogás egy speciális eseteként tárgyalhatjuk. Az irodalomban ez utóbbi esetet a lövedékion folytonos energiájú állapotába történő elektronbefogásnak nevezzük.

Az ütközési folyamat tanulmányozásához tekintsük a  $Z_P$  rendszámú,  $\mathbf{v}$  sebességű és  $M_P$  tömegű lövedékion és egy céltárgy kölcsönhatását, mely utóbbi egy  $Z_T$  rendszámú és egy  $M_T$  tömegű atommag és egy elektron kötött rendszeréből áll. A részecskék összes lehetséges elrendeződése a teljes rendszer

$$\mathcal{H} = T + V = T + V_{Te} + V_{Pe} + V_{PT} \quad (2.1)$$

Hamilton-operátorával adható meg, ahol

$$T = -1/(2\mu_{PT})\nabla_{\mathbf{R}}^2 - 1/(2\mu)\nabla_{\mathbf{r}}^2, \quad (2.2)$$

valamint

$$V_{Te} = -\frac{Z_T}{x}, \quad V_{Pe} = -\frac{Z_P}{s}, \quad V_{PT} = \frac{Z_P Z_T}{R}, \quad (2.3)$$

$\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{s}$ , ill.  $\mathbf{r}$  az elektronnak a céltárgy- és lövedékmaghoz, ill. a céltárgy magjától a lövedék magjához mutató  $\mathbf{R}$  vektor középpontjához viszonyított helyzetvektorai,  $\mu_{PT} = M_P M_T / (M_T + M_P)$  és  $\mu = m (M_P + M_T) / (M_T + M_P + m)$  pedig a redukált tömegeket jelölik.

Mivel a részecskék között a hosszú hatótávolságú Coulomb-erő hat, ezért nagy  $R$  ütközési távolságok esetén megadhatóak a  $V_{Te}$  és  $V_{Pe}$  potenciálok

$$V_{Te}^\infty = \lim_{R \rightarrow \infty, s \text{ véges}} V_{Te} = -\frac{Z_T}{R}, \quad V_{Pe}^\infty = \lim_{R \rightarrow \infty, x \text{ véges}} V_{Pe} = -\frac{Z_P}{R} \quad (2.4)$$

aszimptotikus alakjai. Így a rendszer állapota az  $i$ -vel jelzett befutó csatornában a

$$\begin{aligned} H_i^\infty &= \lim_{R \rightarrow \infty, x \text{ véges}} \mathcal{H} = T + V_{Te} + V_{Pe}^\infty + V_{PT} \\ &= -1/(2\mu_{PT}) \nabla_{\mathbf{R}}^2 + h_i + Z_P(Z_T - 1)/R \end{aligned} \quad (2.5)$$

aszimptotikus Hamilton-operátorral adható meg, ahol

$$h_i = -1/(2\mu) \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_{Te} \quad (2.6)$$

a céltárgymagból és az elektronból álló rendszer Hamilton-operátorát jelöli. Rövid ható-

távolságú kölcsönhatások esetén

$$H_i = \lim_{R \rightarrow \infty, x \text{ véges}} \mathcal{H} = -1/(2\mu_{PT})\nabla_{\mathbf{R}}^2 + h_i, \quad (2.7)$$

azaz  $H_i$  nem tartalmazza a lövedék és céltárgy kölcsönhatásait leíró tagokat.  $H_i^\infty$  és  $H_i$  abban különböznek egymástól, hogy  $H_i^\infty$  tartalmazza ez utóbbi kölcsönhatás aszimptotikus, hosszú hatótávolságú részét is. A  $H_i^\infty - H_i$  különbséget maradék Coulomb-kölcsönhatásnak is nevezik [De94]. A rendszert az  $f$ -el jelzett kifutó csatornában a  $H_f^\infty$  aszimptotikus Hamilton-operátor írja le.  $H_i^\infty \equiv H_f^\infty$  a gerjesztési folyamatra, mivel az  $i$  és  $f$  csatornában a részecskék elrendeződése azonos. Átrendeződés esetén  $H_i^\infty \neq H_f^\infty = -1/(2\mu_{PT})\nabla_{\mathbf{R}}^2 + h_f + Z_T(Z_P - 1)/R$ , ahol a lövedékmagból és az elektronból álló rendszer Hamilton-operátorát a  $h_f = -1/(2\mu)\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_{Pe}$  jelöli. Rövid hatótávolságú kölcsönhatásokra a  $H_f = -1/(2\mu_{PT})\nabla_{\mathbf{R}}^2 + h_f$  operátor írja le az átrendeződés csatornát. Az eddig ismertett jelenségeket egyelektronos vagy elemi folyamatoknak is nevezzük. Abban az esetben, ha az ütközésben több elektron vesz részt, a többelektronos, többszörös folyamat megnevezést használjuk, amely az ütközés típusától függően kétszeres ionizációt, egyidejű ionizációt és befogást, stb. jelölhet.

A befutó és kifutó csatornában a rendszert a  $\Phi_i^{\infty\pm}(E)$  és  $\Phi_f^{\infty\pm}(E)$  hullámfüggvények írják le, melyek a

$$(H_{i,f}^\infty - E)\Phi_{i,f}^{\infty\pm}(E) = 0 \quad (2.8)$$

Schrödinger-egyenletek ki- (+), ill. befutó (−) aszimptotikájú megoldásai. Az egyes csatornában a részecskék lehetséges belső szabadsági fokának megfelelően számos ún. alállapot alakulhat ki, melyeket itt külön nem tüntettünk fel.

Az ütközések vizsgálata során, rendszerint a kirepülő részecskék milyenségére, kirepülési gyakoriságára, eloszlására és az ezeket létrehozó mechanizmusokra vagyunk kíváncsiak. Ezen kérdések feltevésére és megválaszolására a hatáskeresztmetszet mennyisége bizonyul a legalkalmasabbnak. Ismerve az adott jelenségek hatáskeresztmetszeteit, a kezdeti feltételek ismeretében meghatározhatjuk a kijövő részecskék típusát, gyakoriságát, valamint tesztelhetjük a modellt, melyet ezen folyamatok értelmezésére hoztunk létre. A kvantummechanikában a hatáskeresztmetszetet a

$$\frac{d\sigma_{fi}(E)}{d\Omega_P} = \frac{\mu_{PT}^2}{4\pi^2} \frac{K_f}{K_i} |T_{fi}|^2, \quad (2.9)$$

módon definiálhatjuk, ahol  $\mathbf{K}_i$  ( $\mathbf{K}_f$ ) a bombázó részecske impulzusa a befutó (kifutó) csatornában,  $d\Omega_P = \sin\theta_P d\theta_P d\varphi_P$ ,  $(\theta_P, \varphi_P)$  a lövedékion szóródási szöge,  $T_{fi}$  pedig az átmeneti amplitúdó.  $T_{fi}$ -nek két egymással egyenértékű kifejezése adható meg, amelyek a rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetén a post

$$T_{fi}^+(E) = \langle \Phi_f(E) | H - H_i | \Psi_i^+(E) \rangle, \quad (2.10)$$

és prior

$$T_{fi}^-(E) = \langle \Psi_f^-(E) | H - H_i | \Phi_i(E) \rangle, \quad (2.11)$$

alakban írhatóak fel, ahol  $\Psi_{if}^\pm$  és  $\Phi_{if}$  a

$$\begin{aligned} (\mathcal{H} - E)\Psi_{if}^\pm(E) &= 0 \\ (H_{if} - E)\Phi_{if}(E) &= 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

egyenleteknek tesznek eleget.

A teljes vagy totális hatáskeresztmetszetet (total cross section, TCS) a lövedékion szóródási szöge szerinti integrálás után nyerhetjük

$$\sigma_{fi}(E) = \int \frac{d\sigma_{fi}(E)}{d\Omega_P} d\Omega_P. \quad (2.13)$$

## 2.2. A félklasszikus leírás

Az atomi ütközések egyik igen érdekes sajátossága, hogy az elektron, amelynek átmeneteit tanulmányozzuk egy adott folyamatban, jóval kisebb tömeggel rendelkezik, mint a bombázó részecske. Továbbá nagy ütközési energiák esetén a lövedékion  $K$  impulzusa nagyságrendekkel múlja felül azt az impulzust, amivel ez az elektron rendelkezik az atom magja körüli keringése során. A lövedékion haladási iránya tipikusan csak kis, milliradiánokban mérhető szögekben térül el, valamint a céltárgynak átadott impulzus nagyságrendekkel kisebb a lövedék impulzusánál. Ezek a körülmények a formalizmus egy igen lényeges egyszerűsítését teszik lehetővé, amit félklasszikus vagy ütközési paraméteres közelítésnek is nevezünk. A módszert az eikonál közelítésre alapozva ismertetjük, amelynek a potenciálszórás esetére történő tárgyalása az A függelékben található. A következő alfejezetekben a sokcsatornás ütközések leírására alkalmazott félklasszikus közelítést három részecske ütközésén keresztül ismertetjük.

## Három Coulomb-részecske ütközése

A nehéz és könnyű részek mozgásának szétválasztása céljából írjuk fel (az aszimptotikát külön nem jelölve) a (2.12) Schrödinger-egyenletet a

$$\mathcal{H}\Psi = \left[ -\frac{1}{2\mu_{PT}}\nabla_R^2 + W(R) + \tilde{H}_{el} \right] \Psi = E\Psi \quad (2.14)$$

alakban, ahol a  $W(R)$  potenciál a nehézrészecskék kölcsönhatását írja le, míg  $\tilde{H}_{el}$  az elektronra vonatkozó Hamilton-operátort

$$\tilde{H}_{el} = -\frac{1}{2\mu_{PT}}\nabla_r^2 + V - W(R) \quad (2.15)$$

jelöli. Keressük (2.14) megoldását a  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = F(\mathbf{R})\tilde{\psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  alakban, ahol  $F(\mathbf{R})$  a nehézrészecskék mozgását leíró

$$\left[ -\frac{1}{2\mu_{PT}}\nabla_{\mathbf{R}}^2 + W(R) - E \right] F(\mathbf{R}) = 0 \quad (2.16)$$

Schrödinger-egyenletnek tesz eleget. A  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = F(\mathbf{R})\tilde{\psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  szorzat (2.14)-be történő behelyettesítése után a

$$-\frac{1}{\mu_{PT}}\nabla_{\mathbf{R}}^2 F(\mathbf{R})\tilde{\psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \frac{1}{\mu_{PT}}\nabla_R F(\mathbf{R})\nabla_R \tilde{\psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + F(\mathbf{R})\tilde{H}_{el}\tilde{\psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = 0 \quad (2.17)$$

összefüggéshez jutunk. A nehéz részecskék mozgásának (2.16) leírására az eikonál közelítést (A.5) alkalmazva beláthatjuk, hogy a fenti egyenletben az első ( $\nabla_{\mathbf{R}}^2$ -et tartalmazó) tag elhagyható, mivel ez a második taghoz viszonyítva csak alacsonyabb rendű járulé-

ket jelent. Továbbá az  $\mathbf{R}(R, t)$  klasszikus pálya esetén  $\nabla_{\mathbf{R}}$ -t az időderivált segítségével fejezhetjük ki, így a második tag a

$$\frac{1}{F(R)} \left[ -\frac{1}{\mu_{PT}} \nabla_R F(\mathbf{R}) \nabla_R \right] = -\frac{i}{\mu_{PT}} \mathbf{p}(\mathbf{R}) \nabla_R = -i \mathbf{v} \nabla_R = -i \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.18)$$

alakban írható át. Ezt a (2.17)-be behelyettesítve az

$$i \frac{\partial \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \bigg|_{\mathbf{r}} = \tilde{H}_{el}(\mathbf{r}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) \quad (2.19)$$

összefüggéshez jutunk, ahol az időderiválás során az  $\mathbf{r}$  helykoordináta rögzített értéket vesz fel.

A (2.19) alapján megállapíthatjuk, hogy a lövedék mozgásának klasszikus pályán történő rögzítése után a (2.14) teljes probléma az elektron mozgásának meghatározására redukálódik a  $Z_P$  és a  $Z_T$  Coulomb-töltések keltette, időben változó potenciáltérben. Ezt nevezzük félklasszikus vagy impakt paraméteres leírásnak [McDo70].

A (2.9) hatáskeresztmetszetek vizsgálatához írjuk fel a (2.11) átmeneti amplitúdót a

$$T = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{R} \Psi_f^{-*}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) V_i \Phi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (2.20)$$

alakban<sup>1</sup>. Az egyszerűség érdekében tételezzük fel, hogy  $W(R) = 0$ , azaz a lövedékion az

$$\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{v} \parallel \mathbf{Z} \quad (2.21)$$

---

<sup>1</sup>A továbbiakban az egyszerűség érdekében az átmeneti amplitúdójának csak a prior verziójával foglalkozunk, megjegyezve, hogy a (2.10) post kifejezés a priorhoz hasonlóan tárgyalható.

egyenesvonalú pályán halad a koordinátarendszer Z tengelyének irányában. (A  $W(R) \neq 0$ , vagyis az ütköző magok közti kölcsönhatás szerepével a következő pontban foglalkozunk.) Ekkor a lövedékion mozgását megadó  $F(\mathbf{R})$  függvény alakja egy síkhullám lesz, mind a kezdeti- ( $F_i(\mathbf{R}) = \exp[i\mathbf{K}_i\mathbf{R}]$ ) mind a végállapothoz ( $F_f(\mathbf{R}) = \exp[i\mathbf{K}_f\mathbf{R}]$ ) tartozó csatornában (lásd A.8). Amint azt fentebb feltételeztük, az ütközés során átadott impulzus nagysága elhanyagolható a lövedék impulzusához képest, így  $|\mathbf{K}_i| \simeq |\mathbf{K}_f| = |\mathbf{K}|$ . Ezek után (2.20)-at a  $d\mathbf{R} = v d^2\mathbf{b} dt$  felhasználásával a

$$T = v \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d^2\mathbf{b} \exp[i(\mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f)\mathbf{R}] < \tilde{\psi}_f^- | V_i | \tilde{\phi}_i > \quad (2.22)$$

formában írhatjuk fel, ahol  $\tilde{\psi}_f^-$ , ill.  $\tilde{\phi}_i$  a (2.19) megfelelő aszimptotikájú megoldásai. Továbbá, mivel a lövedékion csak nagyon kis szögben szóródik, alkalmazhatjuk a

$$(\mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f) \cdot \mathbf{R} \approx \mathbf{q} \cdot \mathbf{b} \quad (2.23)$$

közelítést, ahol  $\mathbf{q} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$  az impulzusátadás, melynek nagysága

$$q = |\mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f| = 2\mu_{PT}v \sin \frac{\theta_P}{2} \approx \mu_{PT}v\theta_P. \quad (2.24)$$

(2.23)-at behelyettesítve (2.22)-be kapjuk, hogy

$$T = v \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d^2\mathbf{b} \exp[i\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}] < \tilde{\psi}_f^- | V_i | \tilde{\phi}_i > . \quad (2.25)$$

Ez a kifejezés, felhasználva a

$$V_i \tilde{\phi}_i = \left( \tilde{H}_{el} - i \frac{\partial}{\partial t} \right)_s \tilde{\phi}_i \quad (2.26)$$

azonosságot, majd elvégezve az idő szerinti integrálást, és figyelembe véve, hogy  $\tilde{H}_{el}$  Hermitikus operátor, kapjuk

$$\begin{aligned} T &= iv \int d^2 \mathbf{b} \exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{b}] | \langle \tilde{\psi}_f^-(\mathbf{r}, t) | \tilde{\phi}_i(\mathbf{r}, t) \rangle |_{t=-\infty}^{t=+\infty} \\ &= iv \int d^2 \mathbf{b} \exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{b}] A_{if}(\mathbf{b}), \end{aligned} \quad (2.27)$$

ahol  $A_{if}$  az átmeneti amplitúdót jelöli, ami a határfeltételeket figyelembe véve az

$$A_{if} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \tilde{\psi}_f^-(t) | \tilde{\phi}_i(t) \rangle \quad (2.28)$$

alakban is felírható.

A differenciális hatáskeresztmetszetet a (2.27) formula (2.9)-be történő behelyettesítése után nyerjük

$$\frac{d\sigma_{fi}(E)}{d\Omega_P} = \frac{\mu_{PT}^2 v^2}{4\pi^2} \left| \int d^2 \mathbf{b} \exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{b}] A_{if}(\mathbf{b}) \right|^2. \quad (2.29)$$

Ez a kifejezés tovább egyszerűsíthető. Ha az ütközési rendszer hengerszimmetrikus akkor  $A_{if}$  az

$$A_{if}(\mathbf{b}) = A_{if}(b) \exp[i(m_i - m_f)\varphi_b] \quad (2.30)$$

alakban írható fel, ahol  $A_{if}(b)$  független a  $\mathbf{b}$   $\varphi_b$  azimutszögétől. A fenti kifejezésben  $m_i$  és  $m_f$  a céltárgy mágneses kvantumszámát jelöli a kezdeti-, ill. végállapotban. (2.29)-ben a

$\varphi_b$ -szerinti integrálás analitikusan elvégezhető, így a

$$\frac{d\sigma_{fi}(E)}{d\Omega_P} = \mu_{PT}^2 v^2 \left| \int db J_{|m_i - m_f|}(qb) A_{if}(b) \right|^2 \quad (2.31)$$

alakra egyszerűsödik, ahol  $J_m$  az  $m$ -ed rendű Bessel-függvényt jelöli. A Bessel-függvények ortogonalitásának, valamint az

$$\int_0^\pi \sin(\theta_P) d\theta_P \simeq \frac{1}{(\mu_{PT} v)^2} \int_0^\infty q dq \quad (2.32)$$

integráltranszformáció felhasználásával a (2.13) teljes hatáskeresztmetszet a

$$\sigma_{if} = 2\pi \int_0^\infty b db |A_{if}|^2 \quad (2.33)$$

formula alapján határozható meg.

A továbbiakban ismertetünk néhány, az ütközési paraméteres közelítés formalizmusában használt fontos összefüggést. Mivel  $\mathbf{b}$  merőleges a koordináta-rendszer  $Z$  tengelyére, így  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{b} \equiv \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{b}$ , ahol  $\eta = K_f \sin(\theta_P) \simeq K \sin(\theta_P)$  az impulzusátadás merőleges komponensét méri. A párhuzamos komponens a  $K_i - K_f \cos \theta_P \simeq \Delta E/v$  formula alapján adható meg, ahol  $\Delta E = E_i - E_f$  a céltárgy energiállapot-változását jelöli. A kétdimenziós Fourier-transzformáció felhasználásával definiálhatunk egy, az  $\boldsymbol{\eta}$ -tól függő

$$R_{if}(\boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{b} e^{-i\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{b}} A_{if}(\mathbf{b}) \quad (2.34)$$

átmeneti amplitúdót is, ami a jelen nagyenergiájú ütközések esetén a (2.20) átmeneti

mátrixelemmel a

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{v} T_{if} \left( \frac{\eta}{\mu_{PT} v} \right) \right| = |R_{if}(\boldsymbol{\eta})| \quad (2.35)$$

kapcsolatban áll [McDo70]. Így a (2.9) differenciális hatáskeresztmetszet a  $\sin(\theta_P) d\theta_P d\varphi_P \simeq 1/(\mu_{PTV})^2 \eta d\eta \varphi_\eta$  összefüggés felhasználásával a

$$\frac{d\sigma}{d\boldsymbol{\eta}} = \frac{1}{4\pi^2} R_{if}(\boldsymbol{\eta}) \quad (2.36)$$

alakban is kifejezhető, ahol a hengerszimmetriát kihasználva a  $\varphi$  azimut szögére elvégeztük az integrálást. A Fourier-transzformáció tulajdonságai alapján megmutatható, hogy a lövedékion szórási szögére felintegrált (2.13) totális hatáskeresztmetszet a

$$\sigma_{if} = \int d\boldsymbol{\eta} R_{if}(\boldsymbol{\eta}) = \int d\mathbf{b} A_{if}(\mathbf{b}) \quad (2.37)$$

formulák alapján is kifejezhető. Amint ez az összefüggés is mutatja, az  $A_{if}(\mathbf{b})$  és  $R_{if}(\boldsymbol{\eta})$  átmeneti amplitúdók egymással ekvivalens szerepet töltenek be az ütközési folyamatok impakt paraméteres leírásában. Sok esetben az adott feladat határozza meg, hogy éppen melyik formát érdemes alkalmazni [McDo70, Fa91].

## A nukleonok közti kölcsönhatás szerepe

A lövedékion klasszikus pályán történő mozgását a  $W(R)$  potenciál határozza meg. Az A függelék alapján nagy  $K$  impulzus értékek esetén a lövedékion klasszikus mozgásához az

$$F(\mathbf{R}) \approx \exp \left[ i\mathbf{K}\mathbf{R} - i \int_{-\infty}^t W(R(t')) dt' \right] \quad (2.38)$$

hullámfüggvény rendelhető (A.10). Ennek felhasználásával az előzőekben ismerttetett

$W(R) = 0$  esethez hasonlóan a differenciális hatáskeresztmetszet alakjára a

$$\frac{d\sigma_{fi}(E)}{d\Omega_P} = \frac{\mu_{PT}^2}{4\pi^2} \frac{K_f}{K_i} \left| \int d^2\mathbf{b} \exp[i\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{b}] A_{if}(\mathbf{b}) \exp[2i\delta(b)] \right|^2 \quad (2.39)$$

kifejezést kapjuk. Ez a kifejezés (2.29)-től az  $\exp[2i\delta(b)]$  fázisban különbözik, ahol

$$2\delta(b) = - \int_{-\infty}^{\infty} W(R(t)) dt. \quad (2.40)$$

Amint az várható, a differenciális hatáskeresztmetszet értéke függ attól, hogy a lövedék az ütközés folyamán milyen pályát ír le. Azonban az a tény, hogy a lövedékion mozgását leíró potenciál csak a  $b$ -től függő fázisban jelenik meg, azt jelenti, hogy az (2.13) teljes hatáskeresztmetszetre, ellentétben a differenciális hatáskeresztmetszettel, már nincs hatással.

Ezt jól szemlélteti a  $W(R) = V_{AB}(R) = Z_A Z_B / R$  eset is, amikor

$$2\delta(b) = -Z_A Z_B \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{R(t)} dt = \frac{Z_A Z_B}{v} \ln b. \quad (2.41)$$

Az integrális hatáskeresztmetszetet a  $W(R) = 0$  esetnél ismerttetett eljáráshoz hasonlóan határozhatjuk meg (lásd (2.30) - (2.32) formulák). Az abszolútérték képzés során a (2.41) fázis kiesik, így nincs hatással a (2.33) értékére. A (2.41) összefüggés származtatásakor a lövedék mozgására az  $R = (b^2 + v^2 t^2)^{1/2}$  egyenesvonalú pályát tételeztük fel.

Felhívjuk még a figyelmet az ütközési paraméter közelítés egy további fontos tulajdonságára. Ha a nehéz részecskék mozgását csak a köztük ható Coulomb-erő befolyásolja

$(W(R) = V_{AB})$ , akkor az elektronok mozgását a

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Big|_{\mathbf{r}} = H_{el}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.42)$$

Schrödinger-egyenlet írja le, ahol  $H_{el} = \tilde{H}_{el} - V_{PT} = \frac{1}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_{Te} + V_{Te}$ . Ez azt jelenti, hogy (2.39)-ben az elektronra vonatkozó  $A_{if}$  átmeneti amplitúdóban a  $V_{PT}$  kölcsönhatás nem játszik szerepet.

A továbbiakban impakt paraméteres közelítés alatt a lövedékion egyenesvonalú pályán történő mozgását fogjuk érteni. Az elektronok mozgását az (2.42) egyenletből származtatjuk, és az erre vonatkozó (2.28) átmeneti amplitúdót pedig  $a_{if}$ -el fogjuk jelölni.

### Ionizációs hatáskeresztmetszetek

A hatáskeresztmetszetek eddigi ismertetése során nem tettünk különbséget abban, hogy az elektron az ütközés eredményeként kötött vagy folytonos energiájú végállapotba kerül. Folytonos energiájú állapotok esetén a hatáskeresztmetszet az elektron  $\mathbf{k}_e$  impulzusa szerint is differenciális mennyiségként vizsgálható. Ezen alfejezet hátralévő részében az ionizációs folyamatok tárgyalása során használatos differenciális hatáskeresztmetszeteket ismertetjük.

Mivel az ionizált elektron a végállapotban az energiájával ( $\epsilon = 1/2k_e^2$ ) és kirepülési szögével ( $\theta_e, \varphi_e$ ) jellemezhető, így a (2.9) differenciális hatáskeresztmetszet a

$$\frac{d\sigma_{if}}{d\Omega_P d\mathbf{k}_e} \simeq k_e \frac{d\sigma_{if}}{d\boldsymbol{\eta} d\epsilon d\Omega_e} = k_e \frac{1}{4\pi^2} R_{if}(\boldsymbol{\eta}) \quad (2.43)$$

alakú lesz, ahol  $d\Omega_e = \sin \theta_e d\theta_e d\varphi_e$ . A lövedékion szóródási, valamint a kirepülő elektron

azimut szögeire történő integrálás után a

$$\frac{d\sigma_{if}}{d\epsilon d\theta_e} = \int d\Omega_P d\varphi_e \frac{d\sigma_{if}}{d\Omega_P d\epsilon d\Omega_e} \quad (2.44)$$

mennyiséget kapjuk, amit az ionizáció tárgyalásában a kétszeresen differenciális hatáske-  
resztmetszetnek fogunk nevezni, (DDCS, doubly differential cross section). Az integrális  
vagy teljes hatáske-  
resztmetszetet (TCS) a

$$\sigma_{fi} = \int d\epsilon d\Omega_e \frac{d\sigma_{if}}{d\epsilon d\Omega_e} \quad (2.45)$$

kifejezésből határozhatjuk meg.

### 2.2.1. Ütközési modellek

Az atomi ütközések elméleti tárgyalásában az egyik legnagyobb nehézséget az a tény  
okozza, hogy az egyes elektronok mozgására az összes többi részecske Coulomb-tere mind-  
végig befolyással van. Ez azt jelenti, hogy az elektron állapotát egy többcentrumú térben  
kell megadni, ami még a legegyszerűbb háromrészecske ütközésben sem megoldott fela-  
dat. Az ütközés többcentrum jellege leginkább az ionizációban mutatkozik meg, különösen  
akkor, ha a "szabad"-állapotba került elektron mozgását a lövedékion és az ionizált cél-  
tárgyatom Coulomb-tere közel azonos mértékben befolyásolja [St87]. Ennek leírásához a  
perturbációs (pl. Born-) közelítés esetén magasabb rendű tagokat is figyelembe kell venni.  
Ez úgy is megfogalmazható, hogy az ionizált elektron (háromrészecske ütközést tekintve)  
egy kétcentrumú hullámfüggvénnyel modellezhető. Ugyanakkor az sem elhanyagolható,

hogy a lövedékion Coulomb-tere már az ionizálandó elektron kezdeti (atomi) állapotán is kifejti perturbáló hatását. Számos közelítő eljárás – például a kettős-ütközés közelítés, a Born-közelítés, az erős-potenciálú Born-közelítés, az impulzus közelítés, a folytonos torzított hullámú közelítés, az atomi és molekuláris bázison alapuló csatolt-csatornás eljárások, stb. – jött létre az elmúlt évek során. Amint azt vizsgálatok sokasága is tanúsítja, ezen modellek közül a folytonos torzított hullámú (continuum distorted wave, CDW) modellek birkóznak meg legsikeresebben a fenti nehézségekkel [Ch64, Be78, Cr83, Fa91, De93]. A dolgozatban ismertetendő vizsgálatokhoz is ezt a modellt alkalmaztuk, így a jelen fejezet hátralévő részében a CDW modellt ismertetjük. A fentebb felsorolt, ill. meg nem említett további közelítő eljárások ismertetését, áttekintését a [McDo70, Be79, Br92, De94] irodalmakban találhatjuk meg.

### Folytonos torzított hullámú közelítés (CDW)

A módszert röviden az ütközési paraméteres tárgyalásban, három részecske ütközésén keresztül ismertetjük. A lövedékion mozgását az  $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$  egyenesvonalú pályán írjuk le, így az elektron állapotait a (2.42) Schrödinger-egyenlet alapján határozzuk meg. A torzított hullámú (distorted wave, DW) közelítésben a  $V_{if}$  potenciálokat két részre bontjuk,  $V_{if} = U_{if} + w_{if}$ . Az  $U_{if}$  torzító potenciálokkal az

$$\left( H_i^{el} + U_i - i \frac{\partial}{\partial t} \right) X_i^+(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.46)$$

$$\left( H_f^{el} + U_f - i \frac{\partial}{\partial t} \right) X_f^-(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.47)$$

egyenletek alapján a  $X_{if}^{\pm}$  torzított állapotokat határozhatjuk meg.  $H_{if}^{el}$ -et  $H_{if}$ -ből,  $H_{el}$  és  $\mathcal{H}$ -hez hasonlóan, a magok relatív mozgását leíró tagok elhagyásával kapjuk. A (2.28) valószínűségi amplitúdó az

$$a_{fi}^{-}(\mathbf{v}, \mathbf{b}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi_f^{-}(t) | X_i^{+}(t) \rangle \right] + \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi_f^{-}(t) | X_i^{+}(t) \rangle \quad (2.48)$$

alakban írható fel. Itt a Coulomb-kölcsönhatás hosszú hatótávolságú voltát figyelembe véve  $X_i^{+}(t)$ -ről feltételezzük, hogy  $\lim_{t \rightarrow -\infty} X_i^{+}(t) \rightarrow \Phi_i^{\infty+}$ . Az  $U_i = (H_{el} - H_i^{el} - w_i)$  torzító potenciált úgy választjuk meg, hogy az ne okozzon átmenetet, így a második tag nullának vehető [McDo70, Fa91]. Az első tag pedig a  $\psi_f^{-}(t)$  és  $X_i^{+}(t)$ -re vonatkozó időfüggő Schrödinger-egyenletek alapján a

$$a_{fi}^{-}(\mathbf{v}, \mathbf{b}) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \psi_f^{-}(t) | w_i | X_i^{+}(t) \rangle \quad (2.49)$$

alakban írható fel.

Az elsőrendű torzított hullámú modellt (2.49)-ből a  $\psi_f^{-} \simeq X_f^{-}$  közelítéssel nyerjük. Ezt követően a CDW közelítés (első rendben) úgy származtatható, hogy a  $X_{if}^{\pm}$  megoldásokat egy olyan  $X_{if}^{\pm CDW}(\mathbf{r}, t) = \phi_{if}(\mathbf{r}, t) \alpha_{if}^{\pm CDW}(\mathbf{r})$  szorzat alakjában keressük, hogy az  $\alpha_{if}^{\pm CDW}$  faktorok megfelelő megválasztásával a Coulomb-határfeltételek is teljesüljenek [Be78, De93].  $\phi_{if}$  állapotokat a  $H_{if}^{el} \phi_{if}(\mathbf{r}) = \epsilon_{if} \phi_{if}(\mathbf{r})$  egyenletek határozzák meg, ahol  $\epsilon_{if}$  az elektron kötési energiája az  $i$  és  $f$  csatornában. A  $\phi_{if}$  a translációs faktorok

segítségével a  $\phi_{if}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{if}(\mathbf{x}) \exp(i\epsilon_{if}t - \frac{1}{2}i\mathbf{v}\mathbf{r} - \frac{1}{8}iv^2t)$  alakban fejezhető ki, ahol  $\varphi_{if}$  a

$$(-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{x}}^2 - V_{Te} - \epsilon_{if})\varphi_{if} = 0 \quad (2.50)$$

Hamilton-operátorhoz tartozó  $\epsilon_{if}$  energiájú állapotok. A  $X_i^{+CDW}$  közelítő megoldását a

$$H_{el}X_i^{+CDW} = i\frac{\partial}{\partial t}X_i^{+CDW} \quad (2.51)$$

egyenletbe behelyettesítve, valamint a (2.46)-et felhasználva a

$$\phi_i(\mathbf{r}) \left( -\frac{1}{2}\nabla_s^2 - \frac{Z_P}{s} + i\mathbf{v}\nabla_s \right) \alpha_i^{+CDW}(\mathbf{s}) = \phi_i(\mathbf{r})(\nabla_x \ln \varphi_i(\mathbf{x}) \nabla_s \alpha_i^{+CDW}(\mathbf{s})) \quad (2.52)$$

összefüggéshez jutunk, amelynek jobb oldalát elhanyagolva  $\alpha$  -ra a következő megoldást kapjuk

$$\alpha_i^+(\mathbf{s})^{CDW} = N(\nu) {}_1F_1(i\nu, 1; i\nu s + i\mathbf{v}\mathbf{s}), \quad (2.53)$$

ahol  $N(a) = \exp(\pi a/2)\Gamma(1 - ia)$  a Coulomb-faktor,  $\nu = Z_P/v$ ,  $\Gamma$  a Gamma-függvényt,  ${}_1F_1$  pedig az elfajult hipergeometrikus függvényt jelöli [Ab70]. A (2.52) egyenletben elhanyagolt jobboldali tag és a (2.46) egyenlet alapján a  $w_i$  torzított potenciált határozhatjuk meg,

$$w_i^{CDW} X_i^{+CDW} = \phi_i(\mathbf{r})(\nabla_x \ln \varphi_i(\mathbf{x}) \nabla_s \alpha_i^{+CDW}(\mathbf{s})). \quad (2.54)$$

A  $X_f^{-CDW}$  végállapot meghatározáskor különbséget kell tenni abban, hogy gerjesztéssel, ionizációval, ill. elektronbefogással járó folyamatot vizsgálunk.

*a/* Gerjesztés vagy ionizáció esetén  $H_i^{el} \equiv H_f^{el}$ , így  $\phi_f(\mathbf{r})$  a céltárgy perturbálatlan

$\epsilon_f$  kötött vagy  $\epsilon_k$  ( $= 1/2k^2$ ) folytonos energiájú állapotait írja le.  $H_i^{el}\phi_f(\mathbf{r}) = \epsilon_f\phi_f(\mathbf{r})$ , ill.  $H_i^{el}\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_k\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , továbbá gerjesztés esetén  $\alpha_f^{-CDW}(\mathbf{v}) = [\alpha_i^{+CDW}(-\mathbf{v})]^*$ , míg ionizáció során

$$\alpha_f^{-CDW} = \alpha_{\mathbf{k}}^{-}(\mathbf{r})^{CDW} = N^*(\zeta)_1F_1(-i\zeta, 1; -iv'_e s - i\mathbf{v}'_e \mathbf{s}) \quad (2.55)$$

ahol  $\zeta = Z_P/v'_e$ ,  $\mathbf{v}'_e = \mathbf{v}_e - \mathbf{v}$  az elektron lövedékhez viszonyított sebességvektora.

b/ Elektronbefogódás során  $H_i^{el}$  és  $H_f^{el}$  nem azonosak. Az elektron a lövedékion  $\epsilon_f$  kötött energiájú állapotaiba fogódik be,  $H_f^{el}\phi_f(\mathbf{r}) = \epsilon_f\phi_f(\mathbf{r})$ , ahol  $\phi_f(\mathbf{r}, t) = \varphi_f(\mathbf{s}) \exp(i\epsilon_f t - \frac{1}{2}i\mathbf{v}\mathbf{r} - \frac{1}{8}iv^2t)$ . Az  $\alpha_f^{-CDW}$  torzítást pedig az

$$\alpha_f^{-}(\mathbf{x})^{CDW} = N(\nu_f)_1F_1(i\nu_f, 1; -ivx - i\mathbf{v}\mathbf{x}), \quad (2.56)$$

formában adhatjuk meg, ahol  $\nu_f = Z_T/v$ .

A Coulomb-határfeltételek figyelembe vétele mellett a torzítások módosítása, egyszerűsítése útján a CDW modell különböző verzióihoz juthatunk. Így pl., ha a (2.52) egyenlet megoldásakor a  $-\frac{1}{2}\nabla_s^2$  tagot is elhanyagoljuk, ami kezdeti állapotban a Coulomb-határfeltételeket aszimptotikusan kielégítő, ún. eikonál szerű torzítást jelent, akkor

$$\alpha_i^{+}(\mathbf{s})^{CDW-EIS} = \exp(-i\nu \ln(vs + \mathbf{v}\mathbf{s})), \quad (2.57)$$

valamint

$$\begin{aligned} w_i^{CDW-EIS} X_i^{+CDW-EIS} &= \phi_i(\mathbf{r}) \left( -\frac{1}{2}\nabla_s^2 \alpha_i^{+}(\mathbf{s})^{CDW-EIS} \right. \\ &\quad \left. \times \nabla_x \ln \phi_i(\mathbf{x}) \nabla_s \alpha_i^{+CDW-EIS}(\mathbf{s}) \right). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Ezáltal a CDW-EIS (continuum distorted wave eikonal initial state) közelítéshez jutunk [Cr83, Fa91], amely a legsikeresebben alkalmazott eljárás az ionizáció leírására. Ha mind az  $i$  és mind az  $f$  állapotokban is eikonál torzításokat vezetünk be, a szimmetrikus eikonál (symmetric eikonal, SE) közelítést nyerjük [De86]. Ez utóbbi modell kevés alkalmazást nyert, ill. kevésbé ad helyes eredményt az ionizáció leírásában. Ez annak tudható be, hogy egy eikonál típusú torzítás során, különösen a folytonos állapotba került elektronok esetén, a lövedék és az elektron kölcsönhatásának csak igen durva közelítése adható meg. Az SE elsősorban a gerjesztési folyamat leírásában mutatkozik sikeresnek. Meglepő módon a CDW-EIS-el szemben az egzaktabb CDW a szimmetrikus ( $Z_P \simeq Z_T$ ) ütközésekben lejátszódó elektronbefogás esetére ad jó eredményt.

A CDW modellek az alkalmazások hosszú során a számos előny mellett hiányosságokat is felmutattak. Például helyesen adják vissza az elektronbefogás hatáskeresztmetszetének a nagyenergiákon megfigyelt  $\sigma \sim v^{11}$  függését, ugyanakkor egy valószínűtlen struktúrát (minimumot) is jósolnak a differenciális hatáskeresztmetszetben [Be79, De94]. A közepes bombázó energiákon a CDW túlbecsüli az ionizációs hozamot, ami annak tudható be, hogy a  $X_i^{\pm CDW}$  függvények nem normált volta miatti hiba egyre inkább megmutatkozik [Cr83, De93]. A CDW-EIS modellben az eikonál torzítás miatt ez nem jelentkezik, így alacsonyabb energiákon is jó eredményeket kapunk [Fa91]. Továbbá azt is meg kell említeni, hogy az ionizációs küszöb fölötti folyamatok tárgyalása során az alkalmazott aszimptotikus hullámfüggvények csak a részecskék végtelen szeparálódása esetén érvényesek [Al93, Mu96, Mi99].

A vizsgálatokban gyakran referenciaként is alkalmazott elsőrendű Born-közelítésben

(B1) az átmeneti amplitúdót a

$$a_{fi}^{B1}(\mathbf{v}, \mathbf{b}) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \phi_f(t) | V_{Pe} | \phi_i(t) \rangle \quad (2.59)$$

alakban írjuk fel [McDo70]. A B1-nek egy továbbfejlesztett változata a torzított hullámú Born-közelítés (DWB, Distorted wave Born), amelyet a CDW-ből a kezdeti állapotban alkalmazott torzítás elhanyagolásával nyerünk [Be78],

$$a_{fi}^{DWB-}(\mathbf{v}, \mathbf{b}) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle X_f^{CDW-}(t) | V_{Pe} | \phi_i(t) \rangle. \quad (2.60)$$

## 3. fejezet

# Saját vizsgálatok, eredmények

### 3.1. Egyelektronos folyamatok: az atomi potenciálok szerepe

Az atomi szórási folyamatok kísérleti vizsgálatának túlnyomó többségében a céltárgy valamilyen többelektronos atom. Az elméleti közelítésekben az elektronok számának növelése a rendszer szabadsági fokának növekedésével jár, ami jelentősen megnehezíti a leírást. Az előző fejezetben a háromrészecske tárgyalásban bemutatott modellek természetesen sok-elektronos ütközésekre is kiterjeszthetők, azonban tényleges alkalmazásukat két dolog is megnehezíti. Egyrészt, többelektronos atomokra nem tudunk egzakt hullámfüggvényeket megadni, így további közelítésekre van szükség. Másrészt pedig ezeknek a közelítő, elektronkorrelációt is figyelembe vevő, sokelektronos hullámfüggvényeknek az alkalmazása sok esetben meglehetősen bonyolulttá teszi a numerikus számolásokat. Vannak olyan folyamatok (pl. ionizáció nagyenergiájú ütközésekben), amelyekben egy adott elektron állapo-

tában létrejövő változásra a többi mozgása, és így a korreláció is elhanyagolható hatással van. Ezeket is egyelektronos folyamatoknak nevezhetjük. A fenti nehézségek kiküszöbölésére alakult ki az ilyen egyelektronos jelenségek vizsgálatában az ún. aktív elektron modell. Lényege, hogy csak egy elektron állapotának változását vizsgáljuk, míg a többit az ütközés alatt passzívnak tekintjük (befagyott pályák). A passzív elektronoknak csak annyi a szerepük, hogy a céltárgymag vagy lövedékmag Coulomb-terét árnyékolják, valamilyen átlagteret kialakítva az aktív elektron számára. Az aktív elektron átmenete az ebben az átlagtérben kialakuló egyrészecske állapotok között jön létre, vagyis az ütközés alatt az aktív elektronnak a többi (passzív) elektronnal való kölcsönhatását elhanyagoljuk. Így a több elektronnal rendelkező atom és egy ion ütközése is az egyszerűbb háromrészecske képben tárgyalható. Természetesen ez egy további közelítés, amelynek hatását az eredmények értelmezése során nem hagyhatjuk figyelmen kívül.

Napjainkban nem létezik egyértelmű módszer arra, hogyan kell a többelektronos atomok ütközését háromrészecske ütközésre egyszerűsíteni. A probléma kezelésére számos modell alakult ki [Be79, Fa91, De94]. Az egyik legismertebb a hidrogénszerű, amelyben az aktív elektron pályáit, valamilyen  $V_{eff}(r) = \zeta/r$  effektív potenciált feltételezve, hidrogénszerű hullámfüggvényekkel adjuk meg. A  $\zeta$  a feladattól függően lehet akár az árnyékolatlan magtöltés, vagy valamilyen  $\zeta = \sqrt{-2\varepsilon}$  árnyékolt magtöltés (effektív töltés), ahol  $\varepsilon$  az adott pálya kötési energiájának mért vagy számolt értéke. Ennél a módszernél jóval pontosabb leírást nyújtanak az olyan eljárások, ahol a  $\zeta$  is függvénye az  $r$ -nek. A számos ilyen közelítés közül a dolgozatban a Hartree-Fock-Slater (HFS) [He63] és az ún. optimalizált potenciál (optimised potential method, OPM) [Dr90, En93] módszereket fogjuk alkalmazni. Ezeket a potenciálokat numerikusan határozzák meg, azonban léteznek

analitikus közelítő változatai is. Ezek közül a Green, Selin és Zachor (GSZ) [Gr69], valamint az Opradolce és munkatársai által (HF) [Op83] a HFS potenciálokra meghatározott, analitikus alakok alkalmazására is fogunk példát mutatni.

A következő alfejezetekben az atomi potenciálok szerepét fogjuk vizsgálni egy elektron gerjesztődésével, ionizációjával és befogódásával járó folyamatok leírásában. Ezen számítások numerikus potenciálok alkalmazását igénylik a perturbálatlan atomi elektronpályák kiszámításánál. Ionizációs jelenségek tárgyalása esetén az ilyen irányú fejlesztést már a korábbi vizsgálataim során elvégeztem [Gu95, Fa96, Gu98]. A megfelelő SE és CDW modellek továbbfejlesztése a gerjesztési és befogódási folyamatokra viszont a jelen dolgozat tárgyát képezi.

A dolgozatban ismertetendő eredmények nemzetközi szakfolyóiratokban jelentek meg. Az eredményeket bemutató ábrák esetén megtartottuk az eredeti (angol) felírásokat, mivel néhány esetben a megőrzött formátum utólagos módosítása meglehetősen körülményes lett volna.

### **3.1.1. Az elektrongerjesztés leírása szimmetrikus eikonál közelítésben**

Amint azt a 2.2.1 pontban ismertettük, a szimmetrikus eikonál (SE) egy olyan folytonosan torzított hullámú közelítés, ahol mind a kezdeti és mind a végállapotban a (2.57) ún. eikonál típusú torzításokat alkalmazunk. A módszert Deco és munkatársai [De86] a háromrészeske tárgyalásban vezették be a gerjesztődéssel járó folyamatok értelmezésére. Alkalmazása többelektronos rendszerek esetén az aktív elektron közelítésben hidrogénszerű vagy

Hartree-Fock típusú analitikus atomi állapotokon keresztül történt [Re87, De93, Ol93]. Ezekben a munkákban az alap és a gerjesztett atomi állapotok, az egyszerű hidrogénszerű esettől eltekintve, nem voltak ortogonálisak.

A [Gu97] munkában, szintén az aktív elektron közelítés keretében, ezt az SE modellt terjesztettem ki a többelektronos atomok és ionok gerjesztési jelenségeinek vizsgálatára. Az atom vagy ion elektronállapotait mind a kezdeti, mind a végállapotban ugyanazon a numerikus potenciálon határoztam meg. Így az alap- és a gerjesztett állapotok egy ortogonális rendszer elemeit képezték.

Az átmeneti amplitúdó impulzus reprezentációban (2.34) az

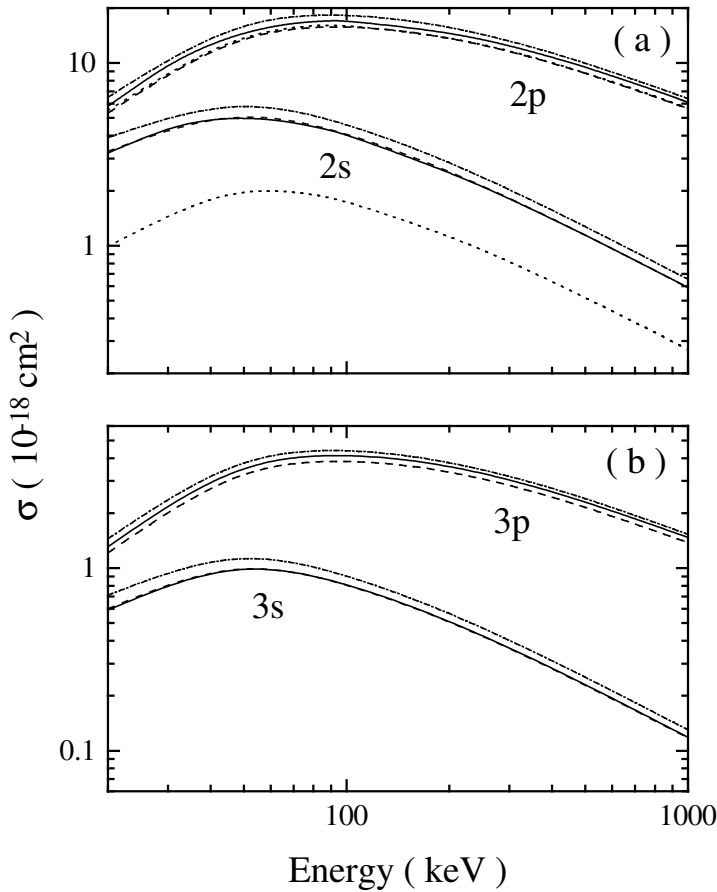
$$R_{if}(\boldsymbol{\eta}) = \frac{(2\pi)^2}{v} \left[ -i \frac{Z_P^2}{v} F_{1x}(-\mathbf{q}) F_{1s}(\mathbf{q}) + Z_P \mathbf{F}_{2x}(-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{F}_{2s}(\mathbf{q}) \right] \quad (3.1)$$

alakban írható fel [De86, Gu97], ahol  $\mathbf{q} = \boldsymbol{\eta} + (\Delta\varepsilon/v)\hat{\mathbf{v}}$  az impulzusátadást jelöli. Itt  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_f - \varepsilon_i$ , ahol  $\varepsilon_f$  és  $\varepsilon_i$  a kezdeti és végállapotú perturbálatlan atomi energiák, amelyekhez tartozó pályák a

$$\varphi_{if}(\mathbf{x}) = \frac{u_{(nl)if}(x)}{x} Y_{l_{if}}^{m_{if}}(\hat{x}) \quad (3.2)$$

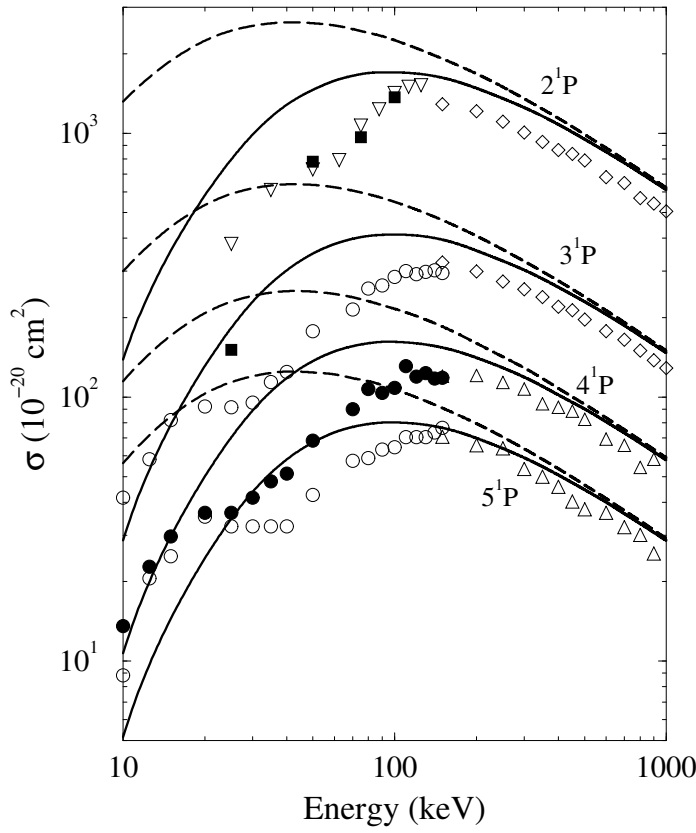
alakban írhatóak, ahol  $Y_m^l$  a gömbfüggvényeket jelöli. Az  $u_{nl}$  radiális hullámfüggvényeket adott analitikus vagy numerikus potenciálokra a radiális Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásával határoztam meg. Így a (3.1)-ben szereplő  $F_{1x}(-\mathbf{q})$ ,  $F_{1s}(\mathbf{q})$ ,  $\mathbf{F}_{2x}(-\mathbf{q})$  és  $\mathbf{F}_{2s}(\mathbf{q})$  mennyiségeket, amelyeket a B függelékben ismertettünk, szintén numerikusan kellett meghatározni [Gu97].

Elsőként vizsgáljuk meg az egy elektron gerjesztődésével járó folyamatot proton és hélium atom ütközésében. A hélium atom és egy ion ütközésekor lejátszódó jelenségek,



3.1. ábra. A hélium atom  $1s$  alapállapotából az (a)  $n = 2$  és (b)  $n = 3$  főkvantumszámú állapotokba proton bombázás hatására létrejövő elektron-gerjesztési folyamatok hatáske- resztmetszetei különböző po- tenciálokon kiszámított pertur- báltalan elektronállapotok ese- tén. Jelen SE számolások a HFS (pontosított-szaggatott vo- nal) [He63]; GSZ (szaggatott vonal) [Gr69]; ill. a HF poten- ciált (folytonos vonal) [Op83] alkalmazva. Analitikus hullám- függvényekkel végzett számítá- sokat [Ol93] a pontosított vonal jelöli.

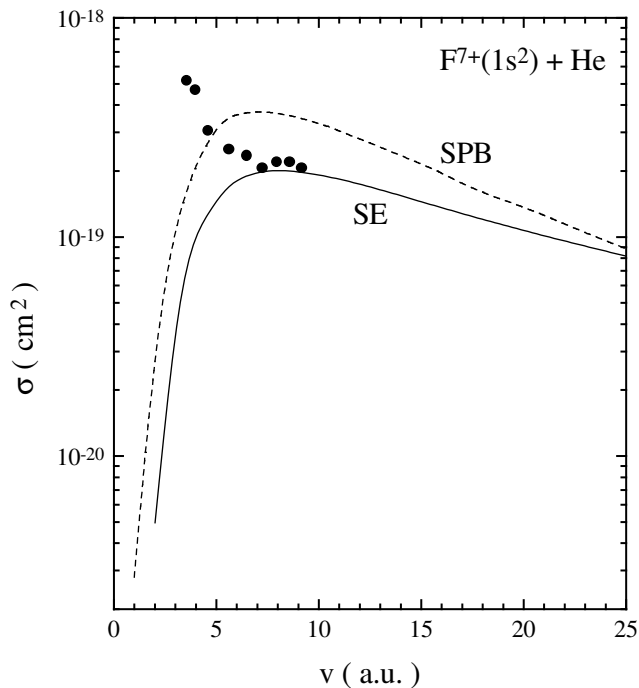
számos gyakorlati alkalmazásnak (pl. fúziós energia kutatások) köszönhetően, széleskörű és igen intenzív kutatások tárgyát képezik. Az SE modell korábbi alkalmazásai során [Ol93] a kezdeti perturbáltalan atomi állapotokra a Roothaan-Hartree-Fock (RHF) típusú pályákat [Cl74] választották, ugyanakkor a végállapotra, az analitikus formulák szabta korlátok miatt, egyszerűbb hidrogénszerű hullámfüggvényeket használtak. Az SE modell általam általánosított verziójában az atomi hullámfüggvények mind a kezdeti, mind a végállapotban ugyanazon a potenciálon írhatóak le [Gu97]. Ez, az atomi állapotok nem ortogonális voltából adódó hiányosság megszüntetésén túl, a módszer kiterjesztését is



3.2. ábra.  $1^1S \rightarrow n^1P$  gerjesztési hatáskeresztmetszetek a  $H^+ + He$  ütközési rendszerben. Elméletek: jelen SE (folytonos vonal) és B1 (szaggatott vonal) számolások HFS atomi potenciálon. Kísérletek: ( $\Delta$ ), [Th67]-ből; ( $\circ$ ) és ( $\bullet$ ), [De68]-ből; ( $\diamond$ ), [Hi74]-ből; ( $\nabla$ ), [Pa69]-ből; ( $\blacksquare$ ), [Kv85]-ből.

jelenti azáltal, hogy a (3.2) pályákat tetszőleges (centrális) potenciálok numerikusan határozzuk meg.

Számtalan, a független részecske modellen alapuló potenciál áll rendelkezésre a He atom elektronállapotainak leírására. A 3.1 ábra ezek közül a HFS, GSZ és HF potenciálok (lásd fentebb) alkalmazására mutat példát. Ezek a potenciálok néhány %-os eltéréssel közel azonos kötési energia értékeket határoznak meg az egyes  $nlm$  elektronállapotokra. A számolt gerjesztési hatáskeresztmetszetek között is hasonló eltérések mutatkoznak, ami a kötési energia meghatározó szerepére világít rá. Ezen megállapítás alól a  $2s$  állapotba történő gerjesztés kivételnek látszik, ugyanis a nem-ortogonális hullámfüggvényekkel végzett számolás [Ol93] (pontosított vonal a 3.1 ábrán) jelentősen alulbecsüli a más potenciálokra kapott eredményeket. Az eltérés oka az ortogonális pályák használatának fontosságára utal

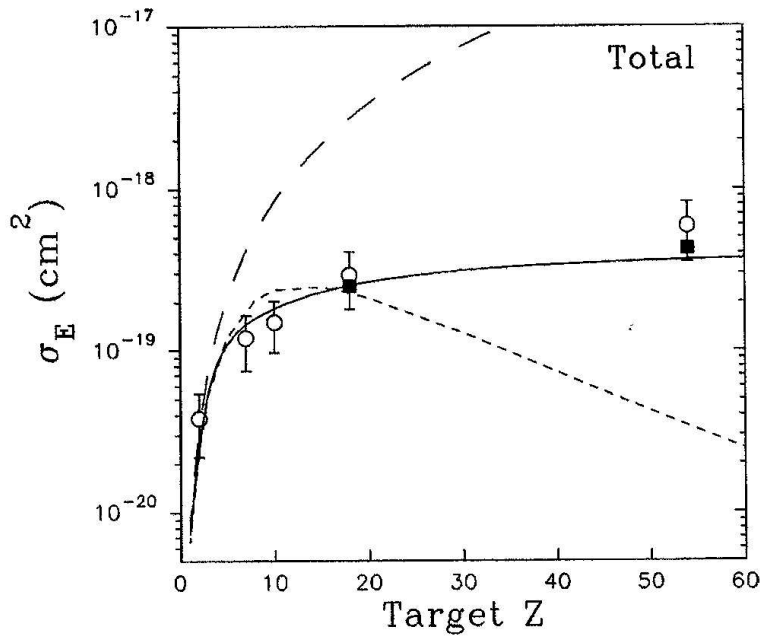


3.3. ábra. A bombázó  $\text{He}^{2+}$  ion által kiváltott,  $\text{F}^{7+}(1^1\text{S} \rightarrow 2^1\text{P})$  gerjesztési folyamatok hatáskeresztmetszetei a lövedék  $v$  sebességének függvényében. Elméletek: jelen SE számolás GSZ atomi potenciált [Gr69] alkalmazva (folytonos vonal); SPB számolás [Th88] (szaggatott vonal). Kísérleti adat [Te83] a (●)-ból.

az optikailag tiltott átmenetek esetén, de ennek ellenőrzése további vizsgálatot igényel.

Mint fentebb említettük, a He atomon végzett vizsgálatok nagyon fontosak a fúziós energiakutatások szempontjából, így az itt felhalmozódott nagyszámú kísérleti adat lehetőséget nyújt az elméletek széleskörű tesztelésére is. Példaként a 3.2 ábrán a HFS potenciálon végzett számolásom eredményei és a Fritsch által kritikailag elemzett és ajánlott kísérleti adatok [Fr92] összevetése található. A jelen SE számolás, különösen az alacsonyabb energiák tartományán, láthatóan jobb egyezést mutat a mért értékekkel, mint ahogy azt a B1 modell jósolja.

A numerikus hullámfüggvények alkalmazása az SE modell széleskörű kiterjesztését teszi lehetővé. Egy ilyen alkalmazást szemléltet a 3.3 ábra, ahol a hétszeresen ionizált fluor ion gerjesztési hatáskeresztmetszete látható. A fluor ion elektronállapotainak leírására a GSZ típusú potenciálokat alkalmaztam [Gr69]. A jelen SE számolás eredményeit egy ún. erős potenciálú Born-közelítésből [Th88] (strong potential Born, SPB) nyert adatokkal is



3.4. ábra.  $\text{Si}^{12+}(1^1\text{S} \rightarrow \sum(nlm)_f \text{ kivéve } 2s)$  gerjesztési hatáskeresztmetszetek az 5.7 MeV/nukleon energiájú bombázó részecske rendszámának függvényében (lásd a szövegben). Elméletek: jelen SE (rövid szaggatott vonal) és B1 (hosszú szaggatott vonal) számolások GSZ atomi potenciálon [Gr69]; Schwinger-elmélet [Ga89] (folytonos vonal). A szimbólumok a kísérleti eredményeket jelölik [Ti98].

összevetettük. A két modell a gerjesztési folyamat nagyon hasonló energiafüggését jósolja. A  $v=5-10$  a.u. tartományon a jelen számolás igen jó egyezést mutat a mért értékekkel. Kis lövedéksebességek esetén mindkét modell a kísérlettől eltérő viselkedést mutat. Ennek oka abban keresendő, hogy a megnövekedett járuléku befogási csatornát a mérés során nem lehetett leválasztani.

Egy adott  $(nlm)_i \rightarrow (nlm)_f$  gerjesztési folyamat hatáskeresztmetszete a lövedék töltésének növelésével növekszik, majd elér egy maximumot. Ez a viselkedés az ionizációs csatorna megnövekedett szerepével magyarázható [Ro92]. A maximum helye és nagysága erősen függ a bombázó részecske töltésétől és energiájától [Ja96]. A maximum elérése után a bombázó ion töltésének további növelésével, a korábbi elképzelések szerint, a görbe telítésbe megy, de a legújabb elemzések alapján a gerjesztési hatáskeresztmetszetek újra csökkenő tendenciát mutatnak [Ja96]. Ezt a viselkedést is tanulmányoztuk a [Ti98] munkában. Kapcsolódva a kísérleti vizsgálatokhoz, GSZ atomi modellpotenciált alkalmazva

az elektronállapotok leírására, az SE modellben végeztem számolásokat. A 3.4 ábrán modellszámítások eredményeit vetettem össze a mért értékekkel. A jelen SE számolás jól láthatóan növekvő ion töltés ( $Z$ ) esetén csökkenő hatáskeresztmetszet értékeket jósol. Ezt a tendenciát a jelen kísérleti adatok nem támasztják alá. Ez utóbbiak ugyanakkor jó egyezést mutatnak az Schwinger-féle perturbációs eljárással kapott elméleti adatokkal [Ga89]. (A mérés során a 80 MeV-es  $\text{Si}^{12+}$  iont He, O, Ne, Ar és Xe atomokkal ütköztettek, és a lövedékből jövő röntgensugárzás alapján azonosították a gerjesztési csatornákat. Ilyen nagy lövedék energiákon és töltéseken a céltárgy elektronjainak szerepe elhanyagolható, és jó közelítéssel a gerjesztődésért csak a céltárgymaggal történő ütközés tehető felelőssé. Ezért szerepel a 3.4 ábra X-tengelyén a „target” (céltárgy) megjelölés.) Szükséges megjegyezni, hogy ezek a perturbációs eljárások nagy  $Z$  esetén érvényüket veszítik, így ezeket az eredményeket csak megfelelő kritikával szabad fogadni.

### 3.1.2. Az elektronbefogás leírása CDW közelítésben

A CDW közelítést a 60-as évek közepén Chezhire [Ch64] vezette be a három Coulomb-részecske ütközése során lejátszódó, elektronátadással járó folyamatok tárgyalására. A modell egyik nagy előnye az, hogy az amplitúdó analitikus formában adható meg, amely előnyt az alkalmazások során igyekeztek mind a mai napig megőrizni [Be79, De94]. Ugyanakkor ez a tulajdonság komoly korlátozást is jelentett a többelektronos rendszerek esetén az analitikus függvények és potenciálok alkalmazása okozta kényszer miatt. Pl. a végállapotban a visszamaradó céltárgyion torzító hatásának leírásában a (2.56) Coulomb-függvény alkalmazása csak igen durva közelítést jelent. A [Gu02] munkában a CDW modell továbbfejlesztése során ezen korlátozástól is igyekeztem megszabadulni. A gerjesztési

folyamat tárgyalásához hasonlóan a perturbálatlan atomi pályákat numerikusan meghatározott függvényekkel írtam le. Meg kell említeni, hogy a gerjesztési folyamat tárgyalásától eltérően elektronbefogás esetén a végállapot  $\varphi_f$  függvényeket a lövedékmagra kell centrálni.

Az átmeneti amplitúdó impulzus-reprezentációban a

$$T_{if}(\boldsymbol{\eta}) = -N(\nu_P) N(\nu_T) \mathbf{F}_P \cdot \mathbf{F}_{2x}(\mathbf{p}_T), \quad (3.3)$$

formában írható fel [Be79, Gu02], ahol

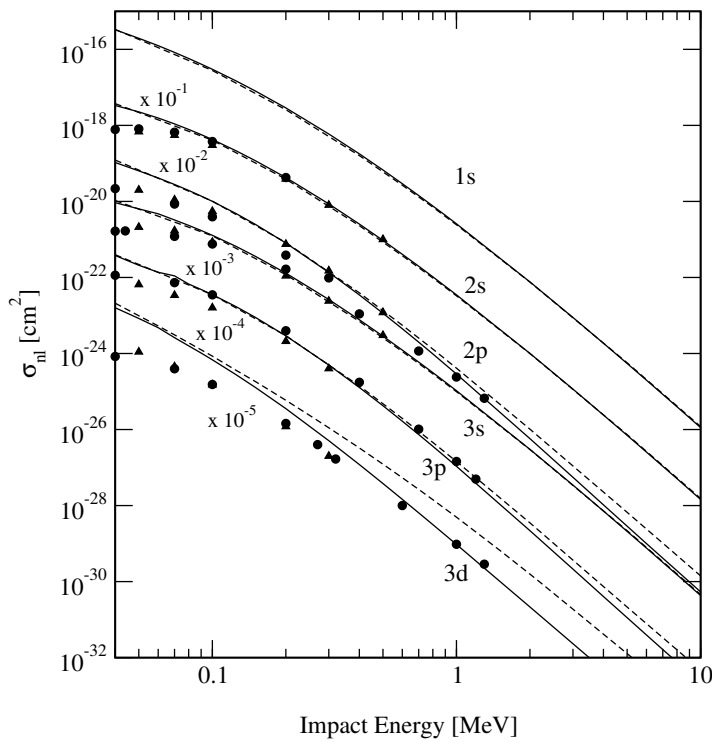
$$\mathbf{F}_P = i\mathbf{p}_P F_{1x}(\mathbf{p}_P) + \mathbf{F}_{2x}(\mathbf{p}_P), \quad (3.4)$$

valamint

$$\mathbf{p}_{P,T} = \pm \boldsymbol{\eta} - \left( \frac{v}{2} \pm \frac{\epsilon_i - \epsilon_f}{v} \right) \hat{\mathbf{v}}. \quad (3.5)$$

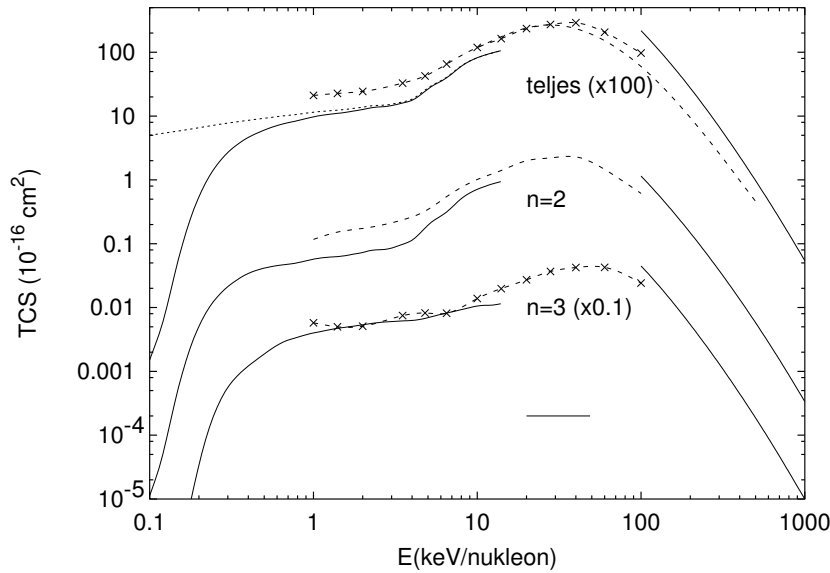
A  $+$ ( $-$ ) előjel a P(T) szerint választandó. A (3.3)-ben szereplő mennyiségeket, melyek ismertetése a B függelékben található, a numerikus atomi hullámfüggvényekből eredően numerikusan határoztam meg [Gu02]. (Itt meg kell jegyezni, hogy az  $F_{1x}(\mathbf{p}_P)$  és az  $\mathbf{F}_{2x}(\mathbf{p}_P)$  mennyiségek a (B.4) és (B.6)-ból az  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{s}$ , valamint az  $i$  és  $f$  állapotok cseréje után nyerhető.) A numerikus potenciálok alkalmazása lehetővé tette a (2.53) és a (2.56) torzító faktorok numerikus meghatározását is. Ezzel a tiszta Coulomb-szerű torzító faktorok használata miatt fellépő korlát is elhárult, ami a CDW modell további kiterjesztését (pl. elektronnal rendelkező lövedékionok esetére) is jelenti [Gu02].

A következőkben néhány, egy elektron befogódásával járó folyamaton keresztül mu-



3.5. ábra. A  $H^+ + He \rightarrow H(nl) + He^+(1s)$  elektronbefogási folyamatra vonatkozó hatáskeresztmetszetek a bombázó energia függvényében. Elméletek: jelen CDW számolás HFS atomi potenciálon (folytonos vonal); CDW számolás H-szerű torzítást alkalmazva [Be84] (szaggatott vonal); Kísérletek: ●: [It93]-ből; ▲ [Ho92]-ből.

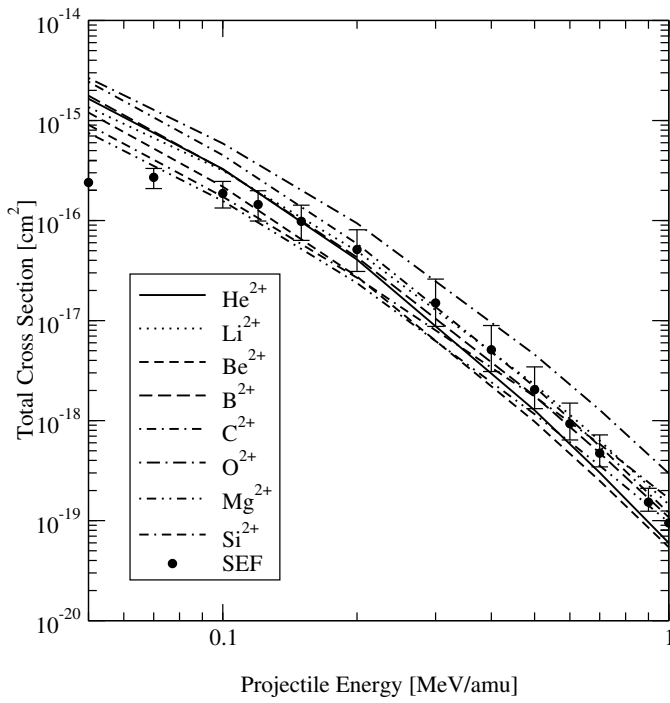
tatom be a jelen módszer teljesítőképességét. A 3.5 ábrán a proton - hélium ütközésben meghatározott elektronbefogási hatáskeresztmetszeteket tüntettem fel. A jelen, HFS atomi potenciálon meghatározott, CDW eredményeket egy olyan korábbi CDW számolással vettem össze, ahol a (2.56) végállapot torzításokat egy  $Z_{eff} = 1.65$  töltésű Coulomb-potenciál alapján határozták meg [Be84]. A jelen CDW modellben ezt a torzítást HFS potenciálon határoztam meg. A [Be84] munkában a hélium atom elektronállapotára Clementi és Roetti által táblázott, Roothan-Hartree-Fock típusú pályát [Cl74] alkalmazták, ami a HFS-hez nagyon hasonló leírást ad. Így ezen két CDW modell között a leglényegesebb különbség a végállapot torzítás közelítésében van. Eltérés a két modellszámítás eredményei között leginkább csak az anizotróp ( $p$  és  $d$ ) pályák esetén mutatkozik, ami a bombázó energia növelésével növekszik. Az eltérés az elektron klasszikus befogódását eredményező ún. Thomas-folyamat [Th27] eltérő járuléka miatt lép fel. Ebben a folya-



3.6. ábra. Elektronbefogási hatáskeresztmetszetek a  $Be^{2+} + He$  ütközési rendszerben. A „teljes” az  $n$  főkvantumszámokra felösszegzett hatáskeresztmetszeteket jelöli. Folytonos vonal az  $E > 100$  keV/nukleon tartományon: jelen CDW számolás HFS és GSZ atomi potenciálokon (lásd a szövegben); folytonos vonal az  $E < 10$  keV/nukleon tartományon: csatolt-csatornás számolás [Su98]; x, csatolt-csatornás számolás [Fr96].

matban az elektron a lövedékkel való ütközése után a céltárgymagon is szóródik, így nem mindegy, hogy ezen utóbbi kölcsönhatást milyen pontosan (pl. HFS, ill. H-szerű potenciálokkal) írjuk le [Gu02]. Jelen számolás, különösen a nagy bombázó energiák tartományán, jó egyezést mutat a mérési adatokkal.

A fúziós energiakutatások során alkalmazott nagyhőmérsékletű plazmában a He atomok kölcsönhatásba léphetnek a bejutó egyéb szennyezőanyagokkal is, amelyek így rontják a plazma összetarthatóságát. Ilyen szennyező anyag lehet a berílium is, amelyből a berendezés fala is készül. Ezért a berílium - hélium ütközése során lejátszódó folyamatok pontos ismerete alapvető ezen kutatások szempontjából. Ebben az esetben külön hangsúly helyeződik az elméleti vizsgálatokra, mivel a folyamat kísérleti tanulmányozása meglehetősen bonyolult. Ezt a folyamatot a  $0.1 \text{ keV/nukleon} \geq E \geq 1000 \text{ keV/nukleon}$



3.7. ábra. Elektronbefogási hatáskeresztmetszetek az  $A^{2+} + He$  ütközési rendszerben a bombázó lövedék energiájának függvényében. Elméletek: jelen CDW számolások (az egyes görbékhez tartozó  $A^{2+}$  lövedékiont az ábra jelöli). Kísérleti adatok: Félempirikus formula (SEF) (•) [Na89]

lövedéke energiák esetén a [Su00] munkában vizsgáltam.  $E \geq 100$  keV/nukleon bombázó energia tartományára CDW közelítésben határoztam meg a befogási hatáskeresztmetszeteket. A He atom elektronállapotát HFS modellben, míg a  $Be^{q+}$  és az elektron kölcsönhatását GSZ potenciállal vettem figyelembe. A 3.6 ábrán a  $Be^{2+}$ -He ütközésben lejátszódó elektronbefogási folyamatok hatáskeresztmetszetei láthatóak. Amint azt az ábra mutatja, az  $E_P \approx 100$  keV/amu átfedési energiatartományon a jelen CDW számolás jól illeszkedik a csatolt-csatornás eljárás alapján alapuló modellszámításhoz, hozzájárulva az elektronbefogási folyamatról szóló átfogó kép kialakításához.

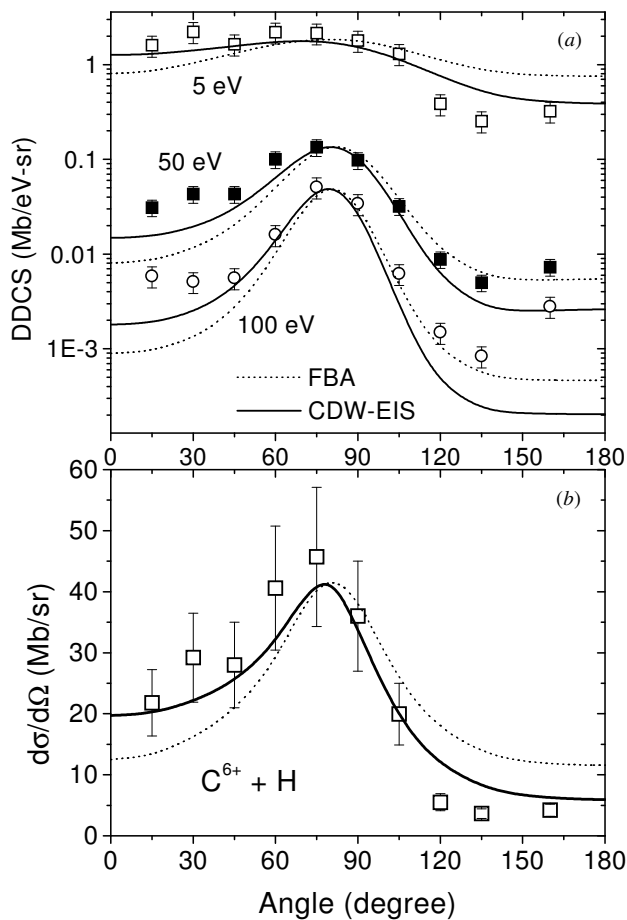
A 3.6 ábra egyben szemlélteti a jelen CDW modell alkalmazását elektronnal rendelkező lövedékek esetére is. A  $Be^{2+}$   $(1s)^2$  elektronszerkezettel rendelkezik. Bonyolultabb, de hasonlóan kétszeres ionizáltságú lövedékionok által történő elektronbefogási folyamatra a 3.7 ábra mutat példát. Itt az adott  $A^{2+}$  ion elektronszerkezete, melyre a GSZ potenciált alkalmaztam [Gu02], meghatározó szereppel bír a hatáskeresztmetszetek értékeire.

Más szóval az  $A^{2+}$  ionra történő elektronbefogódás nem tekinthető úgy, mintha az a  $Z=2$  töltésű Coulomb-részecskén menne végbe. Ez is magyarázza az ábrán a különböző hatás-keresztmetszet értékeket a különböző  $A^{2+}$  ionok esetén. Ezeket az eredményeket a kísérleti adatok elemzése után kapott ún. javasolt kísérleti adatokkal vetettem össze. A kísérleti adatok hibája az  $A^{2+}$  ionokra vonatkozó elméleti görbék közti eltérés nagyságrendjébe esik. Megemlíthetjük, hogy a kísérleti adatok elemzésekor a szerzők feltételezték, hogy a különböző  $A^{2+}$  ionokhoz azonos hatáskeresztmetszetek rendelhetőek.

### 3.1.3. Az ionizáció leírása a CDW-EIS közelítésben

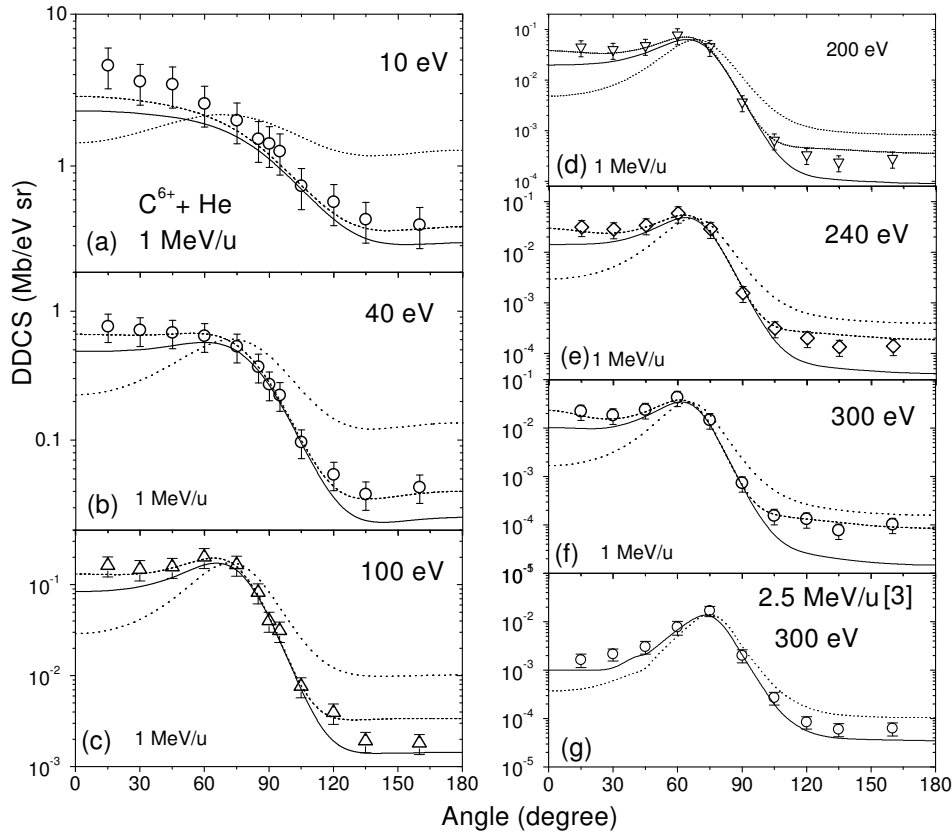
A CDW-EIS az egyik legsikeresebben alkalmazott folytonosan torzított hullámú közelítés az ionizációs folyamatok tárgyalásában. A modellt három Coulomb-részecske tárgyalásában Crothers és McCan vezette be a 80-as évek elején [Cr83], majd azt a sokelektronos atomi céltárgyak vizsgálatára az aktív elektron közelítés keretében Fainstein és munkatársai [Fa91] terjesztették ki. Ez utóbbi leírást numerikus potenciálokat alkalmazva az elektron-céltárgy kölcsönhatására egy korábbi munkámban [Gu95] már általánosítottam. A numerikus potenciálok/hullámfüggvények alkalmazása lehetővé tette az ortogonális atomi pályák alkalmazását, ami sok esetben lényegesnek bizonyult a folyamatok tárgyalásában. A módszert röviden ismertettük a 2.2.1 fejezetben. Numerikus atomi pályák alkalmazása során az átmeneti amplitúdó a gerjesztési és befogási folyamatoknál ismertetett amplitúdókhoz hasonló szerkezetű. Ez a B függelékben is megtalálható numerikus integrálokból építhető fel, így azt itt nem részletezzük, bővebb megismerése céljából a [Gu95] munkára hivatkozunk.

Mivel a CDW-EIS egy háromrészecske modell, így teljesítőképességéről leginkább egy



3.8. ábra. (a) Az ionizált elektronok kirepülési szöge szerint differenciális elektroneloszlások 2.5 MeV/nukleon  $C^{6+}$ -H ütközésben az elektronenergia különböző értékeinél. Elméletek: CDW-EIS számolás (folytonos vonal); B1 számolás (pontozott vonal). Kísérleti adatokat szimbólumok jelölik. (b) Az elektron energiája szerint kiintegrált egyszerűen differenciális szögeloszlás.

csupasz lövedékion és a hidrogén atom ütközésének vizsgálata során nyerhetünk valós képet. A kísérleti oldalról ilyen vizsgálatra egészen a 90-es évek közepéig kellett várni, az atomi hidrogén mint céltárgy előállításából adódó nehézségek miatt. Kerby és munkatársai [Ke95] proton bombázás során tanulmányozták az ionizált elektronok differenciális eloszlását. A [Tr98a, Tr01a] munkáinkban egy erősebb perturbációt képviselő  $C^{6+}$  lövedékion alkalmazásával terjesztettük ki az előző, proton lövedékkel elvégzett kísérleti és elméleti vizsgálatot. A kísérleti munkákhoz kapcsolódva B1 és CDW-EIS közelítésekben végeztem elméleti számításokat. A 3.8 ábrán a mért és az elméleti (DDCS, (2.44)) differenciális hatáskeresztmetszet adatok eredményeit tüntettem fel. Az ionizált elektronok kirepülési szöge és energiája szerinti, kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek (DDCS) az ún.



3.9. ábra. Az ionizált elektronok kirepülési szöge szerinti differenciális elektroneloszlások a  $C^{6+}$ -He ütközésekben, az elektronenergia különböző értékeinél. A lövedék és az elektron energiáit az egyes panelokon külön feltüntettük. Elméletek: CDW-EIS (folytonos vonal), CDW (szaggatott vonal) és B1 (pontosított vonal) számolások HFS atomi modellpotenciálon. A szimbólumok a kísérleti adatokat jelölik.

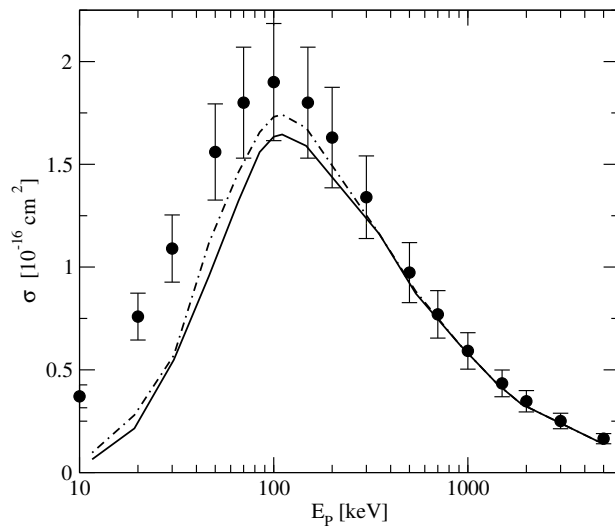
kétcentrumú effektusok (two-center effects, TCE) tanulmányozására is remek lehetőséget biztosítanak [St87]. A TCE alatt azt értjük, hogy az elektron a folyamat során végig a lövedék és a céltárgy ion keltette kétcentrumú térben mozog. A CDW modellek, ellentétben a B1 közelítéssel, a (2.53), (2.57), ill. (2.55) torzítófaktorok alapján képesek számot adni e jelenségről. Így a B1 és a CDW-EIS modellszámítások eredményeinek összevetéséből következtetni lehet a TCE szerepére az ionizációs folyamatban. Amint azt a 3.8 ábra is mutatja, a TCE elsősorban a szögeloszlás aszimmetriájában mutatkozik meg, amit a CDW-EIS, főként az alacsony elektron energiák esetén, igen jól ad vissza. Az elektronok

energiája szerint felintegrált ún. egyszeresen differenciális szögeloszlás esetén a mért és a CDW-EIS számított eredmények hibahatáron belül egyeznek, ami jól mutatja a modell alkalmazhatóságát nagy ( $C^{6+}$ ) perturbáló terek esetén is.

Hasonlóan a TCE jelenségét vizsgáltuk a  $C^{6+}$ -He ütközésben is [Tr98b, Tr01b]. Ugyancsak a kísérleti vizsgálatokhoz kapcsolódva, a B1 és a CDW-EIS mellett a CDW közelítésben [Be78] is végeztem elméleti számolásokat. A CDW modell numerikus potenciálokra történő általánosítását, amely a jelen dolgozat tárgyát is képezi, a [Gu98] munkámban végeztem el. A hélium atom elektronállapotait a HFS modellpotenciálon határoztam meg. Amint azt a 2.2.1 alfejezetben is ismertettünk a CDW-EIS a CDW modell egy további közelítése. A CDW-EIS bevezetésére azért volt szükség, mert a normálási problémák miatt a CDW túlbecsüli az ionizációs hozamot már a közepes bombázó energiákon is [Cr83, De93] (lásd a 2.2.1 alpontot). (A jelen vizsgálatban alkalmazott 1, ill. 2.5 MeV/nukleon bombázó energiákon a CDW még érvényesnek tekinthető.) Az eredményeket a 3.9 ábra mutatja.

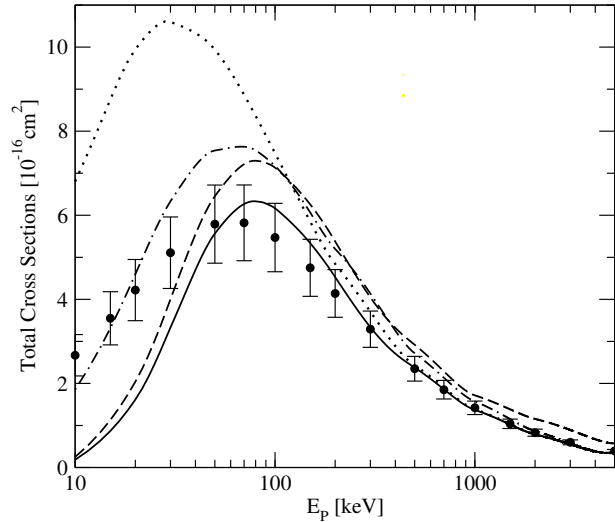
A 3.8 és a 3.9 ábra összevetése azt mutatja, hogy H és He céltárgyak esetén a B1 és a CDW-EIS modellek hasonló leírását adják az ionizációs folyamatnak. Ez azt is jelenti, hogy a He atomban a „passzív” elektronnak csak árnyékoló szerepe van, amiről a HFS modell is elég pontosan ad számot. Amint az a 3.9 ábrán látható, a CDW modell az összes elektronenergián igen jó leírását adja a folyamatnak, míg a CDW-EIS a nagy és a kis kirepülési szögek tartományán rendszerint alulbecsüli a mért értékeket. Ez a kezdeti állapotban való torzítás fontosságára utal, ami a CDW-EIS-ben az „egyszerűbb” (2.57) eikonál közelítésben valósul meg.

Ezen fejezet hátralévő részében az argon és a neon atomok ionizációjával foglalkozunk. A [Ki97, Ki98, Gu00, Gu04] munkákban teljes és differenciális hatáskeresztmet-



3.10. ábra. Teljes ionizációs hatáskeresztmetszetek a  $H^+$  - Ne ütközésben az  $E_P$  bombázó energia függvényében. Elmélet: jelen CDW-EIS számolások OPM (folytonos vonal) és HFS (pontosított-szaggatott vonal) atomi modellpotenciálokon. Kísérlet: •, Rudd és munkatársai [Ru85].

szeteket (TCS, (2.45), ill. DDCS (2.44)) tanulmányoztam a CDW-EIS közelítésben. Két különböző, HFS és OPM modellpotenciált (lásd fentebb) alkalmaztam a kötött és a folytonos energiájú atomi elektronállapotok leírásában. A 3.10 és a 3.11 ábrákon a CDW-EIS



3.11. ábra. Teljes ionizációs hatáskeresztmetszetek a  $H^+$  - Ar ütközésben az  $E_P$  bombázó energia függvényében. Elmélet: jelen CDW-EIS számolások OPM (folytonos vonal) és HFS (szaggatott vonal) atomi modellpotenciálokon; csatolt-csatornás [Gu04] (pontosított-szaggatott vonal) és jelen B1 (pontosított vonal) számolások OPM atomi modellpotenciálokon. Kísérlet: •, Rudd és munkatársai [Ru85].

modellben [Gu95] ezen potenciálokon meghatározott teljes ionizációs hatáskeresztmetszeteket tüntettem fel [Ki97, Ki98]. Amint azt a 3.10 ábra mutatja, Ne céltárgy esetén a HFS és OPM modellpotenciálokon meghatározott hatáskeresztmetszet értékek között nagyon jó az egyezés. Ez az állítás nem teljesül az Ar céltárgy esetén, még a nagy aszimptotikus ütközési energiák tartományán sem, ahol a CDW-EIS megbízhatóan alkalmazható. Az

eltérés oka nem a CDW-EIS ionizációs modellben keresendő. Ezt tanúsítja a 3.11 ábra is, ahol az általam a B1, ill. a szerzőtársaim által csatolt-csatornás közelítésekben meghatározott TCS eredményeket is feltüntettük. Nagy, aszimptotikus ütközési energiákon a TCE elhanyagolható, így már a B1 modell is pontosan ad számot az ionizáció jelenségéről. OPM modellpotenciál alkalmazása esetén jól láthatóan a B1 (pontosított vonal) és csatolt-csatornás (pontosított-szaggyatott vonal) számítások eredményei is a CDW-EIS-ben meghatározottal esnek egybe a nagy bombázó energiákon.

A HFS és OPM atomi potenciálok együttesen a következő alakban írhatóak fel:

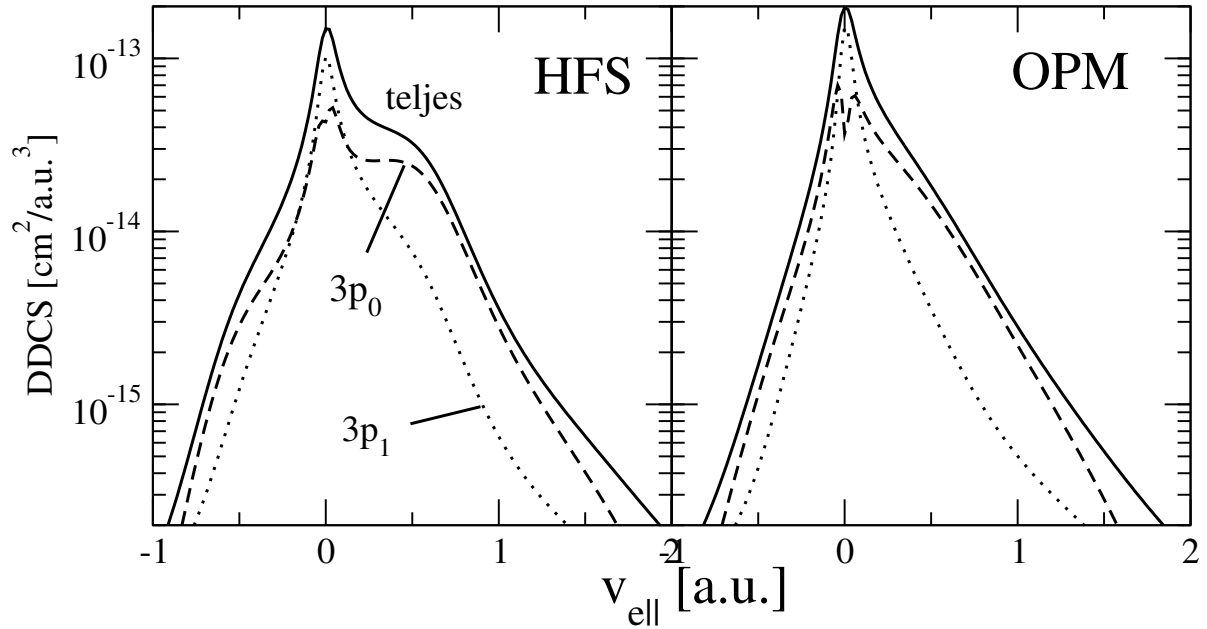
$$v_{atom}(r) = -\frac{Z_T}{r} + \int \frac{n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + v_x([n], r). \quad (3.6)$$

Itt  $n$  az elektronsűrűséget jelöli. (A korrelációs tag szerepe elhanyagolható a jelen vizsgálat szempontjából). A két potenciál között a leglényegesebb eltérés a  $v_x$  elektronkicszerélődési tag megadásában van [En93]. Az OPM potenciál esetén  $v_x$ -et egzakt módon veszik figyelembe, míg a HFS potenciál esetén a kicszerélődési tagot az  $n_{sz}$  szabadelektron-gáz sűrűségével arányosan a

$$v_x^{HFS}(n) = -\frac{3}{2} \cdot \frac{(3\pi^2 n_{sz})^{1/3}}{\pi} \quad (3.7)$$

formula alapján határozzák meg. Ezen kicszerélődési tag eredményeképpen az atomi potenciál exponenciális lefutású lesz, így a valós  $-1/r$  aszimptotikus limitet az ún. Latter-korrekciónak [La55]

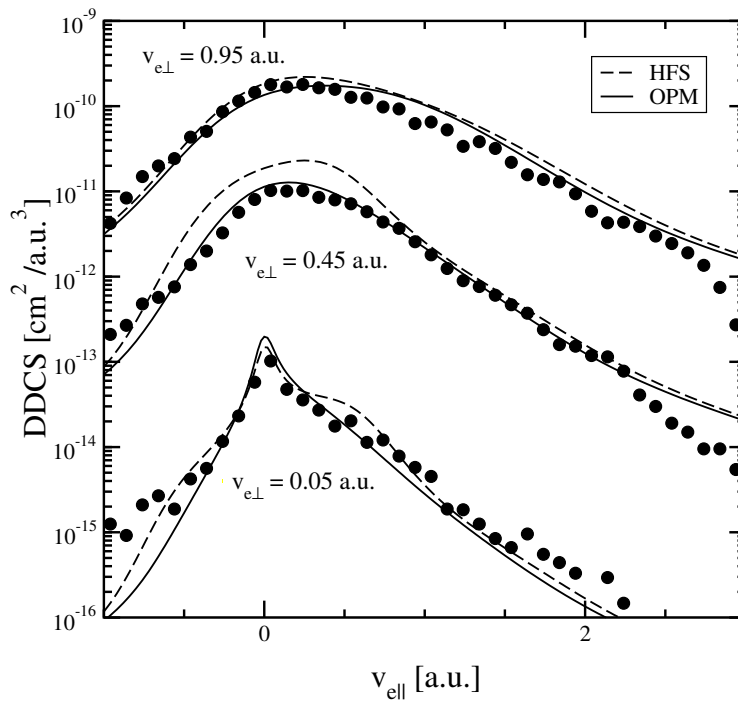
$$v_x^{HFS/L}(n) = \begin{cases} v_x^{HFS}(n) & \text{ha } v_x^{HFS}(n) < -1/r \\ -1/r & \text{egyébként} \end{cases} \quad (3.8)$$



3.12. ábra. A 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+}$ -Ar ütközést követően az Ar atom  $3p_0$  és  $3p_1$  alhéjairól kilökődő elektronok kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetei a kirepült elektron Z-tengely irányú sebességkomponensének függvényében. A Z-tengelyre merőleges komponens rögzített értéke 0.05 a.u.. A görbék az OPM és HFS potenciálokra elvégzett jelen CDW-EIS számítások eredményei. A „teljes” DDCS a  $3p_0$  és  $3p_1$  görbék (az elektronszámot is figyelembe vevő) összegeként adódik.

alkalmazásával utólagosan kell kiróni.

A HFS és az OPM potenciálok közti különbség a differenciális eloszlásokban (DDCS) is megmutatkozik, amelyet a [Gu00] munkában Ar céltárgyon vizsgáltam. Az eredményeket jól szemlélteti a 3.12 ábra. Az ábra csak a  $3p$  alhéjak ionizációs hatáskeresztmetszeteit mutatja, amelyek a legjelentősebb járulékot adják a teljes hozamhoz. A 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+}$ -Ar ütközési rendszeren Moshhammer és munkatársai végeztek méréseket [Mo99], és az eredményeiket a HFS modellpotenciálon számított elméleti adatokkal vetették össze. A DDCS spektrumban a  $v_{||} \approx 0.4$  a.u. körül megjelenő struktúrát a héjszerkezet megnyilvánulásának tulajdonították (lásd a teljes és a  $3p_0$  pályához tartozó DDCS spektrumok

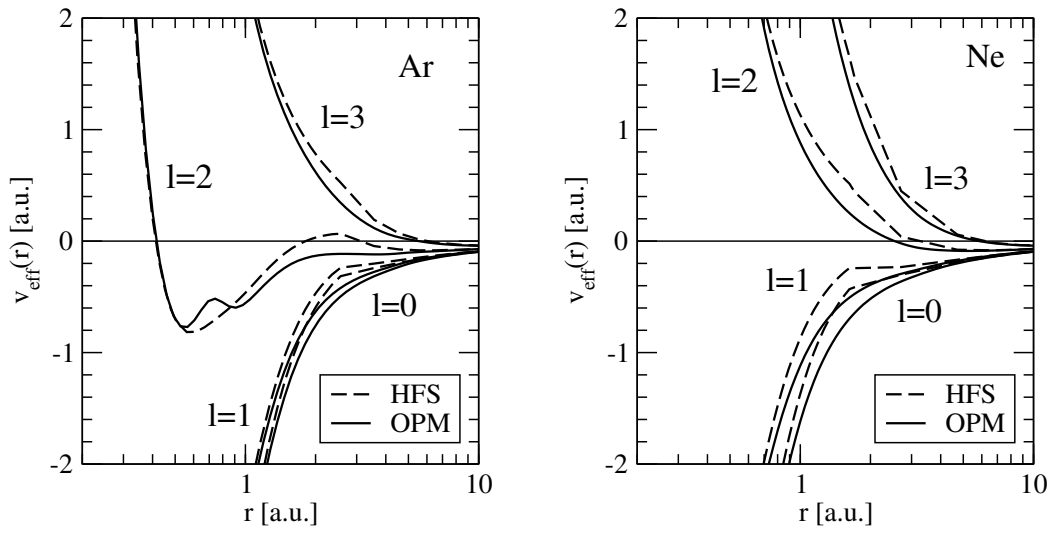


3.13. ábra. Az Ar atom 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+}$  lövedékkel történő ütközésének kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetei a kirepült elektron Z-tengely irányú sebességkomponensének függvényében, a Z-tengelyre merőleges komponens ( $v_{e\perp}$ ) különböző értéke mellett. Elmélet: a görbék az OPM és a HFS potenciálokon elvégzett jelen CDW-EIS számítások eredményei. Kísérlet: •, Moshhammer és munkatársai [Mo99].

alakjait a 3.12 ábrán). Az OPM modellpotenciálon általam végzett vizsgálatok ezt az interpretációt nem támasztja alá, amit a 3.12 ábra is mutat [Gu00]. A kísérleti adatok újránormálás után nagyon jó egyezést mutattak az OPM potenciálon kapott számítási eredménnyel, így arra a következtetésre juthatunk, hogy a héjszerkezet nem mutatható ki a spektrumban.

A HFS potenciálon meghatározott ionizációs hatáskeresztmetszetek argon céltárgyak esetén megfigyelt különös viselkedése (3.11 és 3.12 ábrák) a kicserélődési tagban bevezetett Latter-korrekcióra vezethető vissza. Ez a korrekció egy törést eredményez a (3.6) atomi potenciálgörbe alakjában. Ez a törés nem mutat érzékelhető hatást a kötött állapotok leírásában, azaz pl. a HFS és OPM potenciálokban számolt 3s, ill. 3p pályák alakja nagyon hasonló. Teljesen más a helyzet viszont a szabad állapotok esetén. Ezeket a

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} u_{kl}(r) P_l(\cos(\theta_k)) \quad (3.9)$$



3.14. ábra. Ne és Ar atomokra a HFS és az OPM modellpotenciálokon meghatározott effektív potenciálok (lásd (3.11) formula).

sorfejtett alakban írhatjuk fel, ahol az  $u_{kl}(r)$ -et a radiális Schrödinger-egyenlet

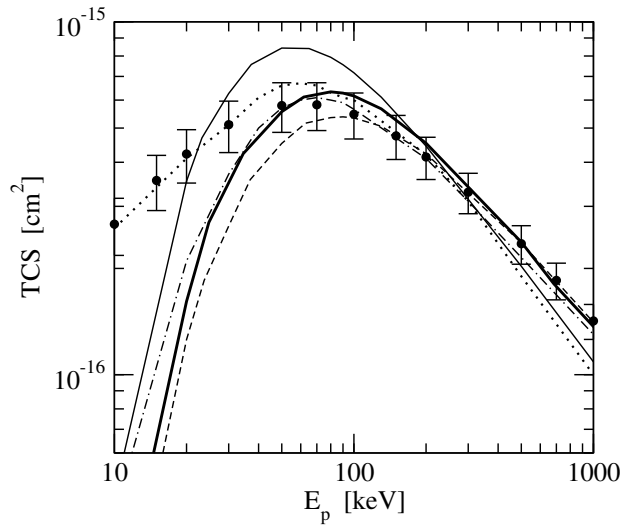
$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - v_{atom}(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} + k^2 \right) u_{kl}(r) = 0 \quad (3.10)$$

megoldásával nyerjük. Amint azt a 3.14 ábra mutatja, a Latter-korrekciónak következtében az ún. effektív potenciál

$$v_{eff}(r) = v_{atom}(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}, \quad (3.11)$$

$l = 2$  értékénél az  $r \approx 2$  a.u. tartományon a potenciális energia taszítóvá válik, pozitív energiaértékeket vesz fel. Ez eredményezi a HFS potenciál esetén az argon céltárgyon meghatározott ionizációs hatáskeresztmetszetek aránytalan megnövekedését (lásd 3.13 ábra). Ennél a céltárgynál az OPM potenciál esetén, valamint a neon céltárgynál úgy a HFS és mind az OPM potenciálok esetén, nem jelentkeznek hasonló effektusok.

A hélium atom mellett az argon az egyik kedvenc céltárgya az elméleti vizsgálatoknak. A [Gu04] munkánkban az Ar atom teljes ionizációs hatáskeresztmetszeteire vonatkozó, az



3.15. ábra. Teljes ionizációs hatáskeresztmetszetek a  $p$ -Ar ütközésben az  $E_p$  bombázó energia függvényében. Elméletek: jelen CDW-EIS számolás OPM atomi modell potenciálon (vastag vonal); jelen CDW-EIS számolás RHF atomi modell potenciálon, lásd a szövegben (vékony vonal); jelen CDW-EIS számolás [Bh03]-ból vett atomi modell potenciálon (szaggatott vonal); CDW-EIS számolás [Sh03]-ból (pontosított szaggatott vonal); torzított hullámú Born számolás [Bh03]-ból (pontosított vonal). Kísérlet: •[Ru85]-ból .

utóbbi időben megjelent elméleti vizsgálatok kritikai elemzését végeztem el. Felhívtam a figyelmet az atomi modellpotenciálok megfelelő megválasztásának a fontosságára. Ebben az esetben az OPM referenciának is tekinthető. Továbbá hangsúlyoztam az ortogonális kötött és folytonos energiájú atomi pályák alkalmazásának alapvető szerepét. Ezen követelmények elhanyagolása olyan hibákat okoz a számolt hatáskeresztmetszet adatokban, amelyek az eredmények hibás értelmezéséhez is vezethetnek. Ez fordult elő a [Bh03] munkában is, ahol a szerzők egy pontatlan torzított hullámú Born-modellt alkalmazva jó eredményeket kaptak ugyan a közepes bombázó energiák esetén, de alulbecsülték a kísérleti TCS adatokat az aszimptotikus tartományon, ahol pedig már a B1 modellnek is helyes adatokat kell szolgáltatnia. Ezt alátámasztottam egy CDW-EIS számolással is, egy, a [Bh03]-ból vett atomi modellpotenciált alkalmazva. Ezt szemlélteti a 3.15 ábra, ahol a szaggatott vonallal jelzett számítás eredményei jó egyezést mutatnak a mért értékekkel a nagy bombázó energiákon. A [Sh03] munkában a nem ortogonális atomi pályák alkalmazása vezetett hasonlóan rossz következtetésekre. Ebben az esetben is elvégeztem egy

CDW-EIS számolást, ahol a perturbálatlan atomi elektronállapotokat a nem ortogonális RHF [Cl74], ill. H-szerű pályákkal írtam le. Az atomi orbitálok ezen megválasztása azonos azzal amit a [Sh03] is alkalmaztak. A különbség abban van, hogy [Sh03]-ban az átmeneti amplitúdót, jelen prior-al szemben, post formában határozták meg. Ortogonális atomi pályák esetén a két számítás azonos hatáskeresztmetszet adatokat eredményez, ellentétben az ábrán feltüntetetekkel (lásd vékony és a pontozott-szaggatott vonalak) szemben.

## 3.2. Egyelektronos folyamatok: dinamikai és kinematikai vizsgálatok

Az ionizációs mechanizmusok alaposabb megértését teszi lehetővé, ha a kilöködött elektron(ok) energia- és szögeloszlásán (DDCS, (2.44)) túl a többi részecske tulajdonságait, (pl. a meglöködött céltárgyion momentumát, a lövedékion szóródási szögét stb.,) is vizsgáljuk. Három részecske ütközésében két részecske impulzusának és energiájának ismerete a rendszer teljes kinematikai ismeretét jelenti, mivel a megmaradási tételek rögzítik a harmadik részecske jellemzőit. Természetesen egy ilyen ún. kinematikailag teljes vizsgálat mind a kísérleti, mind az elméleti oldalról további nehézségeket vet fel. Kísérleti oldalról a céltárgy statisztikus mozgásából eredő bizonytalanságok csökkentésére és többszörös koincidencia feltételek alkalmazására van szükség, amelyek a jelenleg kifejlesztett, reakciómikroszkópként is ismert, COLTRIMS (cold target recoil-ion momentum spectroscopy) berendezésekkel megvalósíthatóak [U103]. Az elméleti vizsgálatokat az impakt paraméteres tárgyalás alkalmazásával lehet jelentősen egyszerűsíteni. A következőkben az elektron impulzuseloszlása mellett vizsgáljuk az ütközésben meglöködött céltárgyion impulzuseloszlását, valamint tanulmányozzuk a lövedékion szóródását.

### 3.2.1. Az elektron és a meglökött céltárgyion impulzuseloszlása

Az impakt paraméteres tárgyalás (2.2 fejezet) során a lövedékről feltételezzük, hogy az  $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$  egyenesvonalú pályán halad, ahol a lövedék  $\mathbf{v}$  sebességvektora a koordináta rendszer Z-tengelyének irányába mutat. A  $\mathbf{q} = \mathbf{K}_f - \mathbf{K}_i$  impulzusátadást a  $(\boldsymbol{\eta}, q_z)$  vektorral közelítjük, ahol  $\boldsymbol{\eta}$  a  $\mathbf{q}$  Z-tengelyre merőleges komponensét jelöli,  $q_z$  pedig a Z-tengely

irányú komponens, amelynek nagysága,  $q_z = (\varepsilon_e - \varepsilon_i)/v$ .  $\varepsilon_{ie}$  az elektron kezdeti-, ill. végállapot energiáját jelöli. Az impulzusmegmaradás tétele alapján

$$k_{e||} + K_{T||} = q_z = (\varepsilon_e - \varepsilon_i)/v. \quad (3.12)$$

Itt  $k_{e||}$  és  $K_{T||}$  az elektron, ill. a meglökött céltárgyon impulzusának Z-tengely irányú komponenseit jelöli.  $\varepsilon_e$  a  $\theta_e$  kirepülési szög ismeretében a

$$\varepsilon_e(K_{T||}, \theta_e) = \varepsilon_e^\pm = [K_{T||}v - |\varepsilon_i| + (v \cos \theta_e)^2] \pm |v \cos \theta_e| \sqrt{(v \cos \theta_e)^2 + 2(K_{T||}v - |\varepsilon_i|)}. \quad (3.13)$$

formulával fejezhető ki.  $\varepsilon_e$  a  $\theta_e < 90^\circ$  esetén  $K_{T||}$ -nek kétértékű függvénye, amelyeket a távoli és a közeli ütközési mechanizmusok jellemeznek [Ro95a].

A  $\mathbf{k}_e$ -nek a Z-tengellyel párhuzamos és arra merőleges komponensei szerinti differenciális eloszlásait a

$$\frac{d^2\sigma}{dk_{e||}d\Omega_e} = \frac{|k_{e||}|}{\cos^2 \theta_e} \frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e}, \quad (3.14)$$

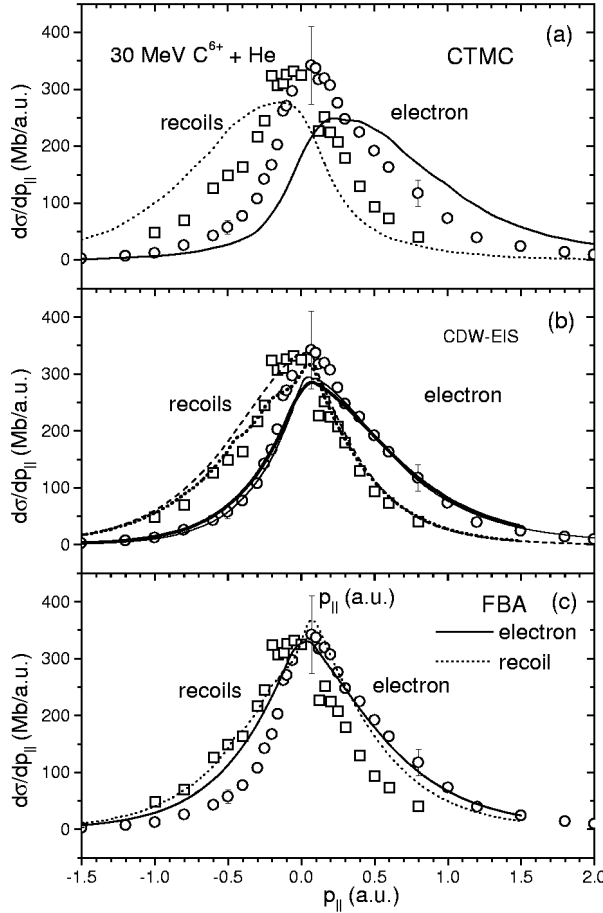
és a

$$\frac{d^2\sigma}{dk_{e\perp}d\Omega_e} = \frac{|k_{e\perp}|}{\sin^2 \theta_e} \frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e}. \quad (3.15)$$

formulákkal fejezzük ki. A (3.12) felhasználásával a meglökött ion momentumának párhuzamos komponense szerinti differenciális eloszlást a DDSCS ismeretében a

$$\frac{d^2\sigma}{dK_{T||}d\Omega_e} = \left| \frac{1}{\frac{1}{v} - \frac{\cos \theta_e}{\sqrt{2\varepsilon_e}}} \right| \frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_e d\Omega_e}. \quad (3.16)$$

formula adja meg. Ez azt jelenti, hogy a (2.44) összefüggés alapján definiált DDSCS is-



3.16. ábra. Az elektron és a meglöködött céltárgyon Z-irányú sebességkomponensei szerint differenciális eloszlások a 30 MeV  $C^{6+}$  - He ütközésben. (a) Az elektronra (folytonos vonal) és a meglöködött céltárgyra (pontosított vonal) vonatkozó CTMC számolások. Kísérletek: kör: elektron; négyzet: meglöködött ion. (b) Az elektronra vonatkozó jelen CDW-EIS számolás HFS (vastag vonal) és H-szerű (vékony vonal) atomi modellpotenciálok. A meglöködött ionra vonatkozó jelen CDW-EIS számolás HFS (pontosított vonal) és H-szerű (szaggatott vonal) atomi modellpotenciálok. (c) ugyanaz, mint (b), kivéve az ionizáció a B1 (FBA) számolásban.

meretében meg tudjuk adni a  $K_{T||}$  eloszlását is. Ez természetesen nem azonos egy kinematikailag teljes leírással, ugyanis  $K_T$  merőleges komponensének meghatározásához nem elegendő csak az elektron impulzusának ismerete.

A [Tr98c] munkában, kapcsolódva a kísérleti vizsgálatokhoz, a DDCS-ből a fenti összefüggések alapján meghatározható impulzuseloszlásokat tanulmányoztam a  $C^{6+}$ - He ütközésében. Az elméleti számításokat a B1 és a CDW-EIS közelítésekben HFS atomi potenciálok végeztem. A 3.16 ábrán az elektron és a meglöködött ion párhuzamos sebességkomponensei szerinti differenciális eloszlások láthatóak. Az ábráról láthatóan az elektronok eloszlása a pozitív, míg a meglöködött céltárgyak spektruma a negatív irányba tolódik

el a szimmetrikus eloszlásokhoz képest. Az elektroneloszlás eltolódásának kísérleti mértéke közel 0.1 a.u., amit a lövedékion a minimális impulzusátadása révén többnyire fedez is. Így a meglöködött ion eloszlása a 0 és -0.1 a.u. tartományban csúcsosodik. A perturbációs modellek eredményeit a klasszikus (CTMC, classical trajectory monte-carlo) számítás eredményeivel is összevetettük. Látható, hogy a CTMC túlbecsüli a csúcsok eltolódásának mértékét, míg a CDW-EIS igen jó egyezést mutat a mért adatokkal. A B1 modell csak a spektrumok pozitív (elektron) vagy negatív (ion) tartományait képes leírni, mivel szimmetrikus eloszlásokat produkál. A jelen B1 és CDW-EIS számolásokat a HFS mellett egy H-szerű atomi modellpotenciálon is elvégeztük, a különbség nem meghatározó (lásd 3.16 b ábra). Az eloszlások aszimmetriájára és eltolódásának mértékére a már távolodó elektron és a céltárgy ion ún. ütközés utáni kölcsönhatása (PCI, post collision interaction) is jelentős befolyással bír. A jelen ütközési rendszerben ezt a jelenséget a CDW-EIS igen jól adja vissza. Erősebb perturbációt képviselő ütközések esetén a CDW-EIS, annak ellenére, hogy az egyszerűen differenciális eloszlást jól írja le, a mért értékeknél kisebb PCI eltolódásokat jósol [Mo94, Ro95b].

A [Sa02] munkában is a PCI és a TCE jelenségeit tanulmányoztam a He atom 75 keV energiájú  $H_2^+$ -es bombázó lövedékkel kiváltott ionizációjában. Az [An01] kísérleti vizsgálatok eredményeit értelmezendő, a lövedékion  $\Delta E$  energiaveszteségének függvényében határoztam meg a  $k_{e||}$ ,  $k_{e\perp}$  és  $K_{T||}$  súlyponti értékeit. Az elméleti számításokat a B1 és CDW-EIS közelítésekben HFS atomi potenciálokra végeztem. A kísérleti feltételeknek megfelelően a DDCS értékeit csak a  $\mathbf{q}$  impulzusátadás Z-irányú komponenseire határoz-

tam meg, ( $\eta=0$ ). A lövedékion energiavesztesége a

$$\Delta E_P \equiv E'_P - E_P = \varepsilon_e + \varepsilon_i + E_T. \quad (3.17)$$

formula alapján határozható meg, ahol  $E_P$ ,  $E'_P$ , ill.  $E_T$  a lövedék ütközés előtti, utáni, ill. a meglökődött céltárgy energiája. Mivel  $\Delta E_p \ll E'_p$ , az  $E'_p = K_P'^2/(2M_P)$ -t a  $E_P = K_P^2/(2M_p)$  körül Taylor-sorba fejtve a

$$\Delta E_P = \frac{K_P'^2}{2M_P} - \frac{K_P^2}{2M_P} \approx v_p q_{||} \quad (3.18)$$

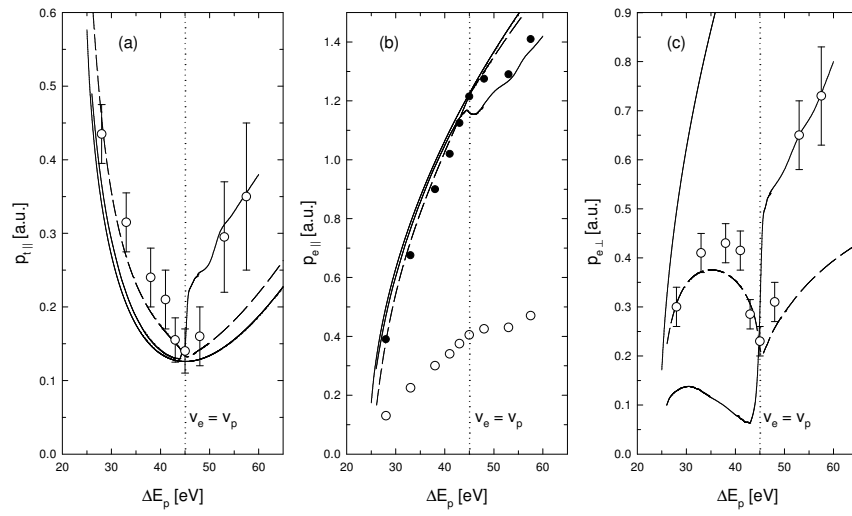
kifejezéséhez jutunk. A (3.12), (3.17) és (3.18) összefüggések felhasználásával és az  $m/M$  rendű tagok elhanyagolásával a

$$K_{T||} = \frac{\Delta E_p}{v_p} - \cos \theta_e \sqrt{2m_e(\Delta E_p - \varepsilon_e)} \quad (3.19)$$

$$k_{e||} = \cos \theta_e \sqrt{2m_e(\Delta E_p - \varepsilon_e)} \quad (3.20)$$

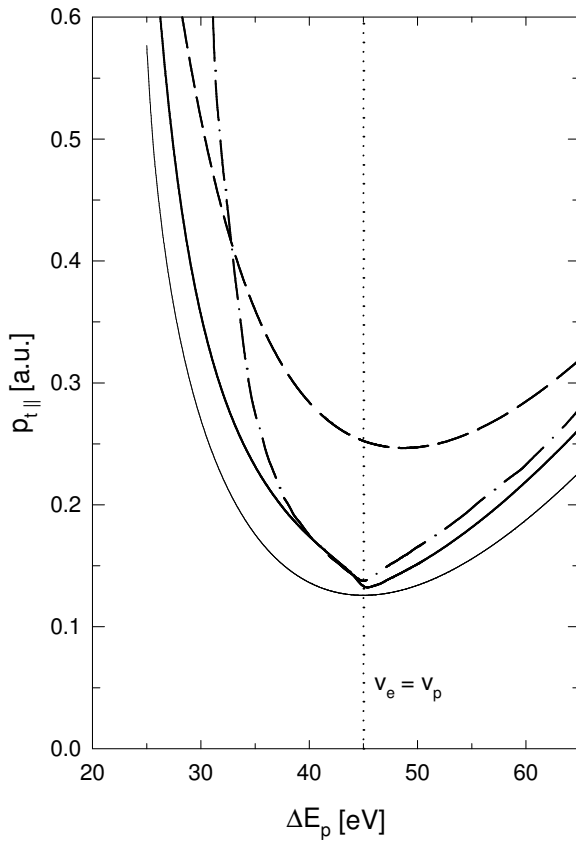
$$k_{e\perp} = \sin \theta_e \sqrt{2m_e(\Delta E_p - \varepsilon_e)}. \quad (3.21)$$

kifejezésekhez jutunk. Ezen mennyiségeknek az eloszlásuk alapján meghatározott ún. súlyponti értékeit tüntettük fel a 3.17 ábrán. A (3.19) és a (3.20) a  $\theta_e = 0^\circ$ , valamint a (3.21) a  $\theta_e = 90^\circ$  értékei esetén a kinematikai határokat definiálják. Amint azt a 3.17 (a) és (b) ábrák mutatják, a mért és számolt értékek egyaránt követik ezt a határt, ami nagy vonalakban azt is jelenti, hogy az ionizáció pusztán a kinematikai feltételek alapján értelmezhető, illetve azt is, hogy az elektronok túlnyomó többsége a  $\theta_e = 0^\circ$  irányban emittálódik.



3.17. ábra. Az elektron és a meglöködött céltárgyon impulzuseloszlásainak súlypontjai 75 keV  $H_2^+$  - He ütközésben, a lövedék energia veszteségének függvényében. (a) és (b) a céltárgyon és az elektron Z-tengely irányú impulzusai. (c) az elektron Z-tengelyre merőleges impulzusa. Elméletek: CTMC számolás (vastag vonal); jelen CDW-EIS számolás HFS atomi potenciálon (szaggatott vonal); kinematikai határok, lásd a szövegben (vékony vonal). Kísérletek: üres és telt körök [An01]-ből.

Ez a kép összetettebbé válik a  $\Delta E_P > 45$  eV tartományon, ahol már nagyobb az eltérés a kísérleti és a limitet jelző adatok között. Az eltérés részben a PCI-nek tulajdonítható [An01], amit a jelen ütközési rendszeren a CTMC jobban értelmez. A CTMC számításokat szerzőtársaim végezték. Ugyanakkor, amint azt a 3.18 ábra a B1 és a CDW-EIS számítás eredményeinek összevetése alapján mutatja,  $K_{T||}$  alakját leginkább a kétcentrumú effektusok határozzák meg. Kétféle B1 számolást is végeztem: az egyikben a kiütött elektron végállapotban a céltárgyra centrált folytonos energiájú állapotba, míg a másikban a lövedékionra centrált folytonos energiájú állapotba került. Láthatóan nagy eltérés mutatkozik a kétféle B1 számolás között, mutatva, hogy egyes tartományokon (pl.  $\Delta E_P = 45$  eV) az egycentrum jelleg dominál, ugyanakkor az is nyilvánvaló, hogy az általános karakterisztika csak a kétcentrumú tárgyalásban adható vissza. A 3.17 (c) ábrán a mért és számolt  $k_{e\perp}$  adatok messze esnek a kinematikai határtól, ami azzal magyarázható, hogy az elektro-



3.18. ábra. A meglöködött céltárgyon Z-tengely irányú impulzuseloszlásának súlypontja a 75 keV  $H_2^+$  - He ütközésben, a lövedék energia veszteségének függvényében. Elméletek: jelen CDW-EIS számolás HFS atomi potenciálon (vastag vonal); jelen B1 számolás céltárgyon elhelyezett elektronnal (szaggatott vonal); jelen B1 számolás lövedéken elhelyezett elektronnal (szaggatott - pontozott vonal); kinematikai határok, lásd a szövegben (vékony vonal).

nok nagy valószínűséggel nem a határt definiáló  $\theta_e = 90^\circ$ -os szög környékén emittálódnak.

A  $\Delta E_p = 45$  eV környékén fellépő ugrást az erős PCI hatás okozza, amit a CDW-EIS nem tud leírni, mivel a  $v_e = v_p$  tartomány körül közel szimmetrikus szögeloszlást jósol.

### 3.2.2. A lövedékion szóródása

Amint azt a 2.2 pontban is említettük, a nukleonok kölcsönhatását, a lövedékion céltárgymagon (-ionon) történő szóródását az impakt paraméteres tárgyalásban a

$$A_{if}^+(\mathbf{b}) = -i \exp \left( -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt V_{PT}(\mathbf{R}) \right) a_{if}^+(\mathbf{b}) \quad (3.22)$$

amplitúdóval írjuk le, ahol  $a_{if}$  a nukleonok közti kölcsönhatás elhanyagolásával számolt átmeneti amplitúdó [Fa88]. Elektronokkal rendelkező lövedékek esetén a független részecske modellben az árnyékolt potenciált a

$$V_{PT}(\mathbf{R}) = \frac{Z_T Z_P}{R} - \left\langle \varphi_i \left| \sum_{k=1}^N \frac{Z_P}{s_k} \right| \varphi_i \right\rangle \quad (3.23)$$

formula adja, ahol  $\varphi_i$  a passzív elektronok pályáit,  $s_k$  pedig a lövedékion és a  $k$ -ik passzív elektron közti távolságot jelöli.  $A_{if}$ -ből a (2.34) Fourier-transzformációval az impulzusátadás merőleges komponense ( $\boldsymbol{\eta}$ ) szerinti differenciális amplitúdó nyerhető, amiből az elektron  $\mathbf{k}$  impulzusa ( $E_k = 1/2k^2$ ) és az  $\boldsymbol{\eta}$  szerinti differenciális eloszlás a

$$\frac{d^5\sigma}{d\boldsymbol{\eta}d\mathbf{k}} = |R_{if}(\boldsymbol{\eta})|^2 \quad (3.24)$$

összefüggés alapján határozható meg.

Moshammer és munkatársai [Mo01] (3.24) típusú hatáskeresztmetszetet mértek 100 MeV/nukleon  $C^{6+}$  és 3.6 MeV/nukleon  $Au^{53+}$  -He ütközési rendszerekben. A két lövedék meglehetősen eltérő erősségű ( $Z_P/v$ ) perturbációt jelentett, azonban az eredményekben az volt a meglepő, hogy az  $\eta$  kis értékeinél meghatározott nagy hatáskeresztmetszet értékek csak a  $V_{PT}$  kölcsönhatás figyelembe vételével volt értelmezhető. A jelenségről az [Ol01] és [Ro03] elméleti munkák csak részben tudtak számot adni, lényeges eltérések mutatkoztak a mért és számolt adatok között.

A [Fa05] munkában ezt a jelenséget vizsgáltam, a passzív elektronok árnyékoló szerepére való különös tekintettel. A CDW-EIS modellt alkalmazva, az aktív elektron és a

$He^+$  ion kölcsönhatását a HFS potenciállal vettem figyelembe. Ez javította a kísérleti adatokkal való egyezést egy olyan számoláshoz képest, amelyben a kötött és a folytonos energiájú atomi állapotokat nem ortogonális pályákkal reprezentálták [Ro03]. Ugyanakkor a további, a teljesebb megértés érdekében a lövedék és a  $He^+$  ion kölcsönhatását is meg kellett vizsgálni.

A  $V_{PT}$  legegyszerűbb közelítése a

$$V_{PT}^C(\mathbf{R}) = \frac{Z_P Z_T}{R} \quad (3.25)$$

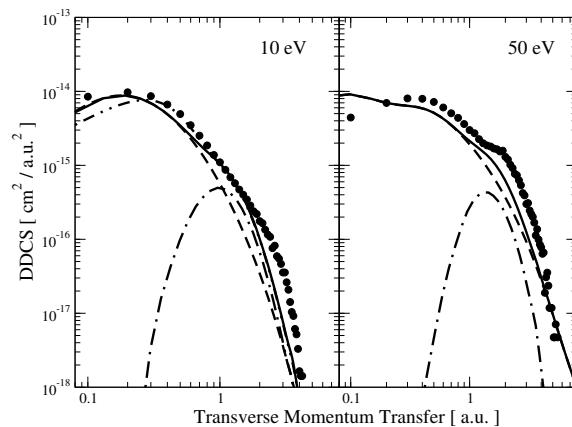
Coulomb-potenciállal írható le, ahol  $Z_T$ -re a  $Z_T = \sqrt{2\varepsilon_i} \simeq 1.35$ , vagy pedig a kis, ill. a nagy ütközési távolságokon érvényes  $Z_T = 1$ , ill.  $Z_T = 2$  értékeket is választhatjuk. Az árnyékolást a (3.25)-nél pontosabban írja le a

$$V_{PT}^S(\mathbf{R}) = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{R} [1 - (1 + Z_T R) e^{-2Z_T R}] \quad (3.26)$$

potenciál, amit a (3.23)-ból a hidrogénszerű

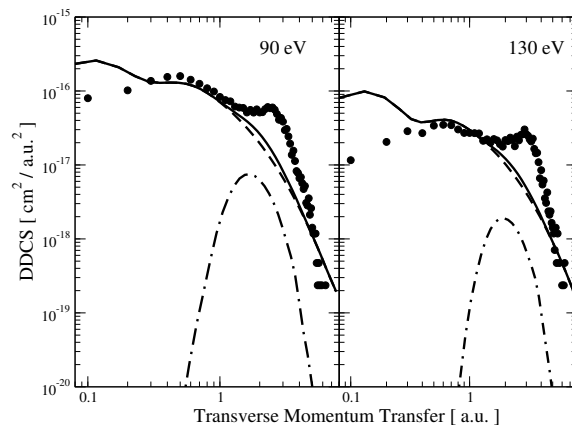
$$\varphi_i(x) = \left( \frac{Z_T^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-Z_T x} \quad (3.27)$$

$1s$  pálya alkalmazásával nyerünk [Ri80].  $V^S$ , ellentétben a  $V^C$  -vel, helyesen adja vissza a  $\lim_{R \rightarrow 0} V_{PT} = Z_P Z_T / R$ , ill.  $\lim_{R \rightarrow \infty} V_{PT} = Z_P (Z_T - 1) / R$  határértékeket. Ugyanakkor ezek a potenciálok csak sztatikus árnyékolást vesznek figyelembe. Az árnyékolást dinamikusnak nevezzük akkor, ha az ionizáció mellett megengedjük a másik elektron gerjesztődését is. Ez egy bonyolultabb, mindkét elektronnak aktív szerepet tulajdonító, ún.

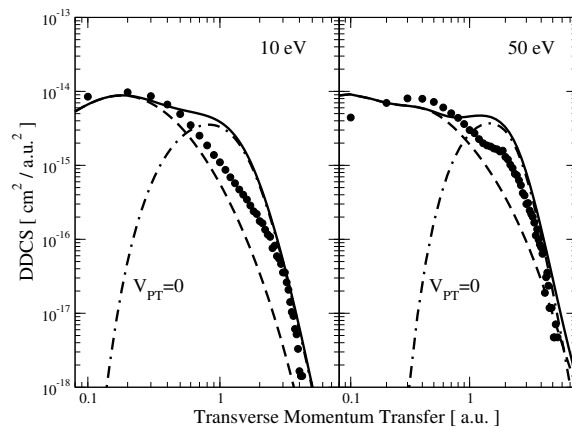


3.19. ábra. Az impulzusátadás Z-tengelyre merőleges komponense szerinti differenciális eloszlások az elektronenergia rögzített,  $E_k = 10$  eV és 50 eV, értékeinél, a He atom ionizációját eredményező 3.6 MeV/nukleon  $Au^{53+} - He$  ütközésekben. Elméletek: jelen CDW-EIS számolás sztatikus árnyékolással, lásd a szövegben (szaggatott vonal); jelen CDW-EIS számolás dinamikus árnyékolással (szaggatott- pontozott vonal); sztatikus + dinamikus számolások összege (folytonos vonal). Kísérlet: (•), [Mo01]-ből.

négyrészesecske tárgyalást igényelne. A jelen vizsgálatban az egyszerűbb, független részesecske modell keretében becsültem meg a másik elektron gerjesztődésének a jelentőségét. Az ionizációt és a gerjesztődést eredményező folyamat valószínűségét az egyelektronos ionizációs és gerjesztési valószínűségek szorzatával kapjuk, ahol az utóbbit a 3.1.1 fejezetben ismertett SE modellben határoztam meg. A sztatikus és dinamikus árnyékolás szerepére a 3.19 és a 3.20 ábra mutat példát. Láthatóan a második elektron gerjesztődése akkor

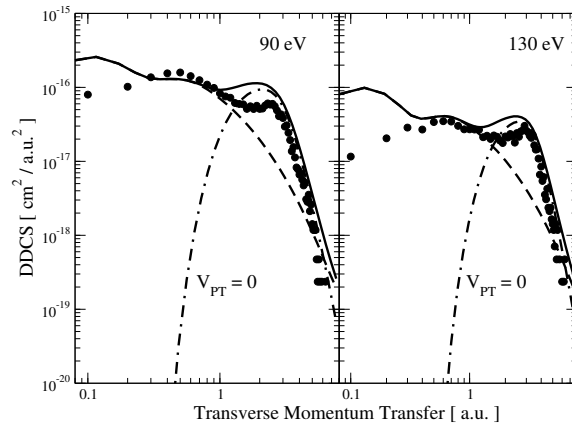


3.20. ábra. Ugyanaz, mint a 3.19 ábra, kivéve  $E_k = 90$  eV és 130 eV.



3.21. ábra. Az impulzusátadás Z-tengelyre merőleges komponense szerinti differenciális eloszlások, az elektronenergia rögzített,  $E_k = 10$  eV és 50 eV, értékeinél, a He atom ionizációját eredményező 3.6 MeV/nukleon  $Au^{53+} - He$  ütközésekben. Elméletek: jelen CDW-EIS számolás a lövedék és a céltárgyon kölcsönhatásával ( $V_{PT} \neq 0$ ), lásd a szövegben (szaggatott vonal); jelen CDW-EIS számolás a lövedék és a céltárgyon kölcsönhatása nélkül (szaggatott- pontozott vonal ); szaggatott és a szaggatott-pontozott vonalakkal jelzett számítások összege (folytonos vonal). Kísérlet: ( $\bullet$ ), [Mo01]-ből.

ad jelentős járulékot, ha az ionizált elektron csak kis energiával rendelkezik.  $E_k$  növekedtével az ütközés a kisebb impakt paraméterek tartománya felé tolódik el, ami egyben nagy  $\eta$ -t is jelöl, ahol az ionizációs csatorna válik egyedül meghatározóvá. A kis  $\eta$  és kis  $E_k$  tartományokban a kísérlet és az elmélet láthatóan jó egyezést mutat. Ekkor az ütközés távolinak tekinthető, a lövedék a céltárgyat mint „egészet” látja, és az ionizációs, gerjesztési és az árnyékolási mechanizmusok közel azonos hangsúlyt kapnak. Ekkor a folyamatban a négyrészeske jelleg dominál. A nagy  $\eta$  és nagy  $E_k$  tartományokhoz viszont kis impakt paraméterű ütközések rendelhetők. Ekkor egy közeli, „klasszikus” kétrészeske ütközés játszódik le az ionizált elektron és a lövedék között. Ilyen esetben a másik elektron és a céltárgymag szerepe is elhanyagolható az ütközés szempontjából. Az ezen folyamatot jelző ún. BEA (binary encounter approximation) csúcsot a  $V_{PT}$ -et is tartalmazó jelen számolás nem képes leírni. Ezért a 3.21 és a 3.22 ábrákon a kísérleti adatokat olyan számolás



3.22. ábra. Ugyanaz, mint 3.21 ábra, kivéve  $E_k = 90$  eV és 130 eV.

eredményeivel vetettem össze, ahol  $V_{PT} \neq 0$  (lásd (3.23), ill.  $V_{PT} = 0$  volt. A  $V_{PT} = 0$  esetben a BEA csúcs megjelenik, és a nagy  $\eta$  és nagy  $E_k$  tartományok esetén jó egyezés mutatkozik a mért és számított értékek között.

Összegzésképpen elmondhatjuk, hogy sikerült értelmezni a Moshhammer és munkatársai  $\text{Au}^{53+}$ -He ütközési rendszerre kapott kísérleti eredményeit [Mo01]. Ugyanakkor szükséges megjegyezni, hogy ez nem egy egységes modell keretében történt, a spektrum különböző tartományaira különböző háromrészesecske modellt kellett alkalmazni. Egy teljesebb, pontosabb leírás négyrészesecske modell keretében adható meg, ami további fejlesztéseket igényel.

### 3.2.3. Thomas-szórás

Amint az már az eddigiek során is kitűnt, az ionizált elektronok egy része a lövedék sebességével megegyező sebességre tesz szert, amit úgy értelmezhetünk, hogy ezen elektronok a lövedékion folytonos energiájú állapotaiba fogódnak be (ECC, elektron capture into the continuum). Az ECC és az adott  $n$  kötött állapotba történő befogódás (EB, electron cap-

ture into the bound state) hatáskeresztmetszetei között ugyanolyan folytonos átmenetnek kell lennie, mint a céltárgy gerjesztődése és ionizációja között [Bu84, Du87, Ro79]. Vagyis,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{d\sigma_n}{dE'_n} = \lim_{E'_e \rightarrow 0} \frac{d\sigma}{dE'_e}, \quad (3.28)$$

ahol

$$\frac{d\sigma}{dE'_e} = \int \frac{d^2\sigma}{dE'_e d\Omega'_e} d\Omega'_e, \quad (3.29)$$

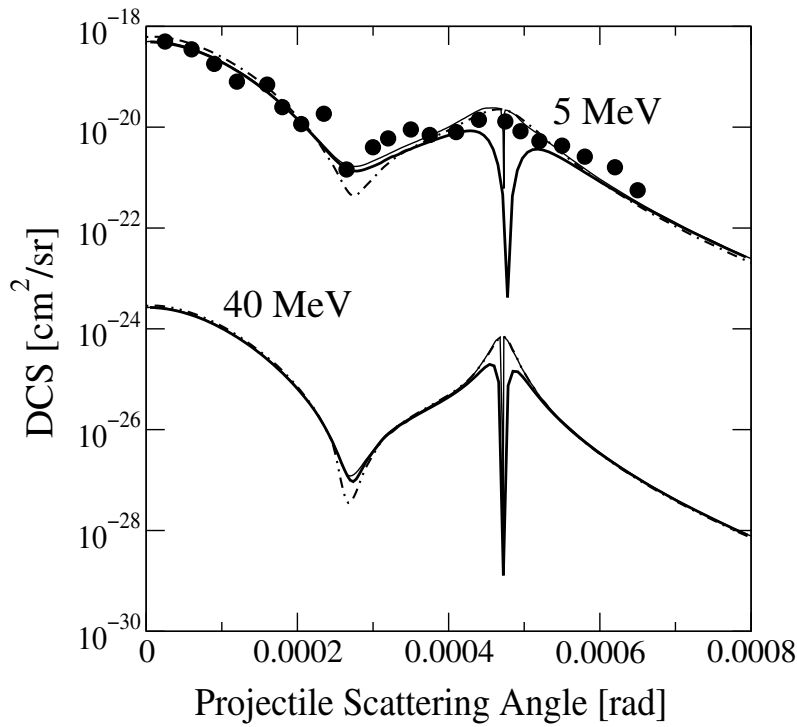
az elektronbefogódás hatáskeresztmetszete a lövedék  $E'_e$  folytonos energiájú állapotába,  $\sigma_n$  pedig a lövedékion  $n$  főkvantumszámú és  $E'_n$  energiájú állapotába történő befogódás hatáskeresztmetszetét jelöli. Megjegyezzük, hogy a fenti lövedékrendszerben  $(E'_e, \Omega'_e)$  felírt összefüggés a labor rendszerbe  $(E_e, \Omega_e)$  a

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega_e} = \frac{v'_e}{v_e} \frac{d^2\sigma}{dE'_e d\Omega'_e} \quad (3.30)$$

transzformációval vihető át.

Az EB és az ECC folyamatok között a folytonos átmenetet a [Ro79, Du87] munkákban már tanulmányozták és demonstrálták a teljes (TCS) hatáskeresztmetszetek szintjén. A [Gu01] munkában ezt a folytonosságot a lövedékion szóródása szerinti differenciális eloszlásban (DCS, differential cross section) tanulmányoztam.

A DCS szögfüggésének alakját két folyamat határozza meg. Az egyik a lövedékion és a elektron kezdeti impulzuseloszlásának átfedésével arányos, és a lövedékion kis szóródási szögeinél ad jelentős járulékot [De94]. A másik a klasszikus kettős ütközési, vagy Thomas-folyamat [Th27]. Itt az elektron először a lövedékkel ütközve egy  $60^\circ$ -os szóródás



3.23. ábra. A lövedékion szóródási szöge szerinti differenciális eloszlások a  $H^+ - H$  ütközésekben. Elméletek: CDW számolás elektronbefogásra (vastag folytonos vonal); CDW számolás ionizációra (vékony folytonos vonal); DWB számolás (ionizációra szaggatott - pontozott vonal). Kísérlet: (•), [Vo86]-ból.

után a lövedék sebességével megegyező  $v_e = v$  sebességre tesz szert. A céltárgy magján létrejövő újabb  $60^\circ$ -os szóródás után, amelyben  $v_e$  nagysága már nem változik, az elektron a lövedékkel párhuzamos irányban halad tovább. A folyamat eredményeként a DCS-ben egy csúcs jelenik meg, amelynek közelítő értéke a  $\theta_P \simeq \sqrt{3}m/2M_P$  formula alapján határozható meg. Ez a csúcs csak a nagy, aszimptotikus ütközési energiákon emelkedik ki a folytonos háttérből [Be79, De94], amit a proton - hidrogén ütközés esetén a 3.23 ábra is jól szemléltet.

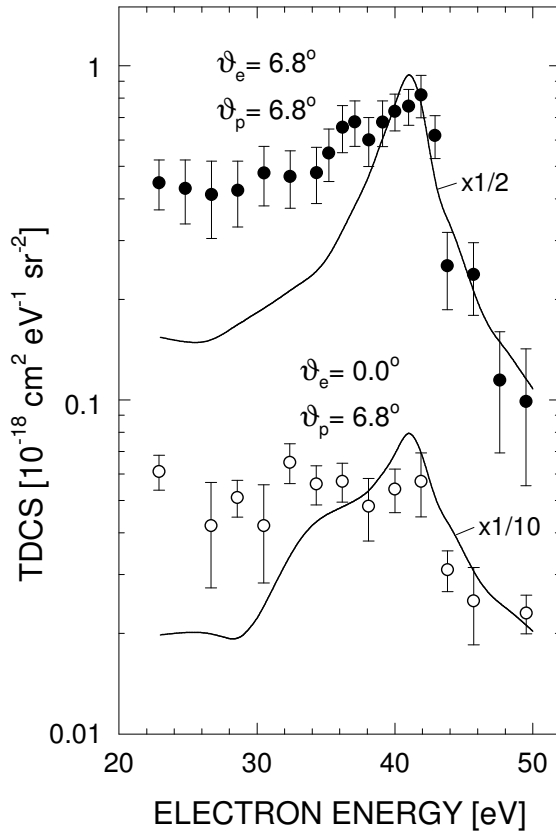
Az ionizációs és befogási csatornákra vonatkozó differenciális eloszlásokat a CDW modellekben ([Gu98], ill. 3.1.2 fejezet) határoztam meg (3.23 ábra). A lövedékion szóródási szöge az  $\eta = M_P v \sin \theta_P$  formula alapján határozható meg, feltételezve, hogy az impakt paraméteres közelítés érvényes (2.2 fejezet). Feltételeztem, hogy a lövedék csak az elektronnal való ütközés során szóródik, azaz  $V_{PT} = 0$ . Továbbá ionizációs folyamat hatáskeresztmet-

szetének szögeloszlását csak a  $\mathbf{v}_e = \mathbf{v}$  esetre határoztam meg. Nagy bombázó energiákon az elektron nagy valószínűséggel az  $n=1$  kvantumszámú állapotba fogódik be, és a magas gerjesztett  $n$  állapotba történő befogás a  $\sigma_n = \sigma_1 n^{-3}$  alapján skálázódik [Be79]. Így  $\sigma_n$  értékeit az  $n=1$  állapotra meghatározott hatáskeresztmetszetből ezen skálázási szabály alapján határoztam meg. A 3.23 ábra nagyon jó egyezést mutat a számolt befogási és az ionizációs hatáskeresztmetszetek értékei között, ami az ECC és az EB folytonosságát demonstrálja az ionizációs küszöbnél. A Thomas-szórás maximuma a proton bombázás esetén 0.48 milliradián körül van, ami az elektron és lövedék klasszikus szóródásából is adódik. A számított adatok az 5 MeV bombázó energia esetén nagyon jó egyezést mutatnak a mért értékekkel. A számolásokban a Thomas-csúcson jelentkező minimum a CDW modell normalizálási hibájából ered, valós fizikai alapja nincs [De94].

A [Gu01] munkában az EB és ECC mechanizmusok teljes folytonosságát bizonyítva, meghatároztam az egyszeres és kétszeres (Thomas-) szóródási folyamatok szerepét az ECC folyamatban. (A Thomas-szóródást korábban csak az EB folyamatban tanulmányozták.) Továbbá vizsgáltam az elektron többszörös szóródásának szerepét más ionizációs jelenségekben is (pl. közeli és távoli ütközések).

### 3.2.4. Az ECC folyamat és a lövedékion szóródása

Mint fentebb említettük, az ECC folyamat során az elektron az ionizációt követően a lövedékkel együtt halad, annak folytonos energiájú állapotaiba fogódik be. A 80-as években számos tanulmány jelent meg, amelyekben különböző ütközési rendszerekben vizsgálták az elektronhozam nagyságát és eloszlását, lásd pl. a [St97] áttekintő művet. Ezekben a vizsgálatokban az volt a közös, hogy a lövedék csak igen kicsi, milliradiánokban mérhető



3.24. ábra. Az elektron energiája szerint differenciális eloszlások az elektron ( $\vartheta_e$ ) és a lövedékion( $\vartheta_P$ ) rögzített szóródási szögei estén a 75 keV  $H^+ - Ar$  ütközésben. Elmélet: jelen DWB számolás (folytonos vonal). A szimbólumok a kísérleti adatokat jelöli.

eltérülést szenvedett az ütközés során.

A [Sa98] munkában azt vizsgáltuk, hogyan játszódik le az ECC folyamat abban az esetben, amikor a lövedék jóval nagyobb, fokokban mérhető szögű szóródást szenved. Vajon képes-e a lövedék ilyen mértékű irányváltoztatás után is maga köré vonzani, fókuszálni az elektronokat? Kapcsolódva a kísérleti vizsgálatokhoz, torzított hullámú Born-közelítésben (DWB, lásd 2.60 formula) végeztem elméleti számításaimat.

Az ütközési rendszert a 75 keV energiájú proton lövedék és az argon céltárgy alkotta. Az elektronok intenzitásának mérése a  $3.7^\circ$  az  $5.0^\circ$  és a  $8.1^\circ$ -os lövedék szóródási irányokban koincidencia feltételek esetén történt. A lövedékion nagyfokú eltérülése nyilvánvalóan a nehéz céltárgymagon való szóródása következtében jön létre. Ugyanakkor a 2.2 fejezetben ismertetett, a nukleonok közti kölcsönhatást is magukban foglaló formulák csak

kis lövedékion eltérések esetén érvényesek. A lövedékion nagyszögű eltérése, szintén a félklasszikus közelítésben, a

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\Omega_e d\Omega_P} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega_P} \right)^{\text{scatt.}} \frac{d^2P(b)}{dE_e d\Omega_e}, \quad (3.31)$$

formában adható meg [Gr81], ahol  $(d\sigma/d\Omega_P)^{\text{scatt.}}$  a lövedékion céltárgyon való szóródásának a hatáskeresztmetszete,  $d^2P(b)/dE_e d\Omega_e$  pedig az adott  $b$  impakt paraméterre vonatkozó ionizációs valószínűséget jelöli. A lövedékion szóródásának leírásakor egy további, ún. törtpálya közelítést alkalmaztam, amely során a lövedék az ütközés előtt és után is egyenesvonalú pályán halad, és így a  $\theta_P$  szögű törés a pálya alakjában a  $t=0$  időpillanatban következik be [An76]. Az ECC folyamatban a kirepülő elektronok irányát a lövedék iránya határozza meg ( $\mathbf{v}_e = \mathbf{v}$ ). Mivel a befutó és kifutó pályaszakaszokon is létrejöhet az ionizáció, és a jelen közelítésben a két pályaszakasz független egymástól, így az eredeti  $0^\circ$  és az eltérült  $\theta_P$  irányokban is jelentkezik az ECC csúcs (lásd a 3.24 ábrát). A jelen DWB számolás a  $6.8^\circ$ -os lövedékion szóródás esetén is jósol ECC csúcsot a  $0^\circ$ -os irányban, ellentétben a jóval egyenletesebb eloszlást mutató kísérleti adatokkal szemben. A lövedék szóródási irányában mért ECC csúcs alakjával jobb egyezést mutat a számolás, bár a csúcs alacsonyabb energiájú tartományát alulbecsüli.

Amint azt a kísérleti és elméleti adatok összevetése mutatja, a jelen számolás számot ad a lövedékion szóródási irányában megjelenő megnövekedett (ECC) elektronhozamról, azonban a folyamatnak csak egy igen durva becslését adja. Ez részben az ionizációs DWB modell és a törtpálya közelítés hiányosságainak tudható be. A teljes háromtest kinematika, ezen belül is a lövedékpálya mind pontosabb leírásának szükségességét hangsúlyozták Fiol

ás munkatársai a [Fi01] munkában. Egy (teljes) kvantummechanikai tárgyalás keretében sikeresen adtak számot a 3.24 ábrán szereplő TDCS spektrumok alakjáról, megmutatva ezzel a befutó pályaszakasz túlhangsúlyozott szerepét a jelen törtpályás közelítésben.

### 3.3. Többszörös ionizáció

A több elektron átmenetével járó folyamatok tanulmányozása egy igen tekintélyes részét képezi az atomi ütközési folyamatok témakörének [McGu92, St97, McGu97]. Az előző fejezetekben a többelektronos céltárgyakon vizsgált egyelektronos jelenségek precíz tárgyalása is végsősoron a többelektronos folyamatok tárgykörébe tartozik, olyan értelemben, hogy ezekben egyetlen elektron átmenete dominál. Ez az ún. aktív elektron modell bizonyos feltételekkel továbbfejleszthető a több elektron átmenetével járó jelenségek vizsgálatára is.

Vizsgáljunk meg egy  $N$  elektronos atom és egy csupasz lövedék alkotta rendszert. A Hamilton-operátor a

$$\begin{aligned} H = & - \frac{\Delta^2}{2\mu_P} + \frac{Z_P Z_T}{R(t)} - \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{|R(t) - x_j|} + \sum_{j=1}^N \left[ \frac{-\Delta_j^2}{2} - \frac{Z_T}{x_j} + \sum_{k>j} \frac{1}{|x_k - x_j|} \right] \\ = & T + V + H_T \end{aligned} \quad (3.32)$$

formában adható meg, ahol  $x_j$  a  $j$ -ik elektronnak a céltárgymagra vonatkoztatott helyvektora, és  $\mu_P$  a lövedékion redukált tömege (a többi jelölés a 2.1 pontban ismertetettel azonos).  $T = \frac{\Delta^2}{2\mu_P}$  a relatív mozgás kinetikus energia operátora, a  $V$  kölcsönhatási potenciál egyrészecske potenciálok összegeként adódik ( $V = \sum_{j=1}^N \frac{Z_P}{|R(t) - x_j|} = \sum_{j=1}^N V_j$ ), míg

$$H_T = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{-\Delta_j^2}{2} - \frac{Z_T}{x_j} + \sum_{k>j} \frac{1}{|x_k - x_j|} \right] \equiv \sum_j H_j^T. \quad (3.33)$$

A  $H_j^T$  operátor a  $\sum_{k>j} \frac{1}{|r_k - r_j|}$  elektron - elektron (e-e) kölcsönhatás miatt nem egyrészecske

operátor. Ha az e-e kölcsönhatást valamilyen átlagtérrel közelítjük

$$\sum_{k>j} \frac{1}{|r_k - r_j|} \approx v_j(x_j), \quad (3.34)$$

akkor  $H_j^T$  is egyrészecske operátor lesz  $[H_j^T, H_k^T]$ . Így, a kölcsönhatási képből definiálható

$$\begin{aligned} V_I(t) &= e^{iH_T t} V e^{-iH_T t} \\ &= \sum_j \exp \left[ i \sum_k H_T^k t \right] V_j \exp \left[ -i \sum_l H_T^l t \right] \\ &= \sum_j e^{iH_T^j t} V_j e^{-iH_T^j t} = \sum_j V_I^j(t) \end{aligned} \quad (3.35)$$

operátor alapján, a rendszer  $U(t_1, t_2)$  időfejlődés operátora a  $t_1 - t_2$  időintervallumban az

$$\begin{aligned} U(t_1, t_2) &= T \exp \left[ -i \sum \int_{t_1}^{t_2} V_I(t_1) dt_1 \right] \\ &= \prod_j T \exp \left[ -i \int_{t_o}^t V_I(t_1) dt_1 \right] = \prod_j U_j(t, t_o) \end{aligned} \quad (3.36)$$

formában adható meg. Vagyis, ha a

$$\sum_{j=1}^N \left( \sum_{k>j} |x_k - x_j|^{-1} - v_j(r_j) \right) \quad (3.37)$$

elektronkorrelációtól eltekintünk, akkor az elektronok mozgása egymástól függetlenül megy végbe. A többielektronos átmenetek valószínűségi amplitúdói az adott átlagtéren számolt egyelektronos átmenetek amplitúdóinak szorzataként adódik. Ez a független részecske modell (independent particle model, IPM). A IPM egy igen hatékony eljárás, ugyanis az IPM-ben számított és a mért adatok összevetése alapján a korreláció szerepére

is kaphatunk információt.

Ebben a fejezetben az IPM keretében a többelektronos ionizációt tárgyaljuk.  $N$  darab azonos elektronból  $q$  darab elektron  $P_q$  ionizációs valószínűsége a

$$P_q(\mathbf{b}) = \binom{N}{q} p^q (1-p)^{N-q} \quad (3.38)$$

binomiális eloszlás alapján határozható meg. Megemlíthetjük, hogy a  $q=1$  és a  $p \ll 1$  esetén az egyelektronos jelenségek tárgyalásánál alkalmazott aktív elektron közelítéshez jutunk. A (3.38) formula  $m$  héjból álló, héjanként egyenként  $N_m$  elektront tartalmazó atom esetére a

$$\frac{d^q P_q(\boldsymbol{\rho})}{d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_q} = \sum_{q_1, \dots, q_m=0, \sum_{i=1}^m q_i=q}^{N_1, \dots, N_m} \prod_{i=1}^m \binom{N_i}{q_i} \prod_{j=1}^{q_i} \frac{dp_i(\boldsymbol{\rho})}{d\mathbf{k}_j} (1-p_i(\boldsymbol{\rho}))^{N_i-q_i} \quad (3.39)$$

formulával általánosítható [Ki98, Ki02], ahol  $\{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_q\}$  a  $q$  darab ionizált elektron impulzusát,  $p_i$  ( $dp_i/d\mathbf{k}$ ) pedig az  $i$ -ik elektronra vonatkozó teljes (differenciális) ionizációs valószínűséget jelöli. Egyetlen,  $\mathbf{k}_1$  impulzussal kirepülő elektronra vonatkozó hatáskeresztmetszetet a

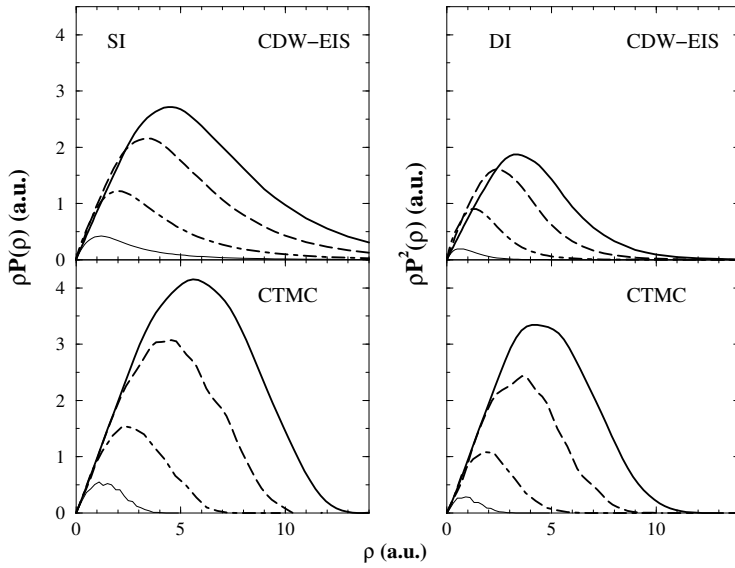
$$\frac{d\sigma}{d\mathbf{k}_1} = \int d\mathbf{k}_2 \dots d\mathbf{k}_q \int d\mathbf{b} \frac{d^q P_q(\mathbf{b})}{d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_q} \quad (3.40)$$

összefüggés adja.

A következőkben a hélium, neon és argon atomok többszörös ionizációját fogjuk vizsgálni, ahol az egyes egyelektron átmenetek valószínűségeit a CDW-EIS modell keretében határozzuk meg.

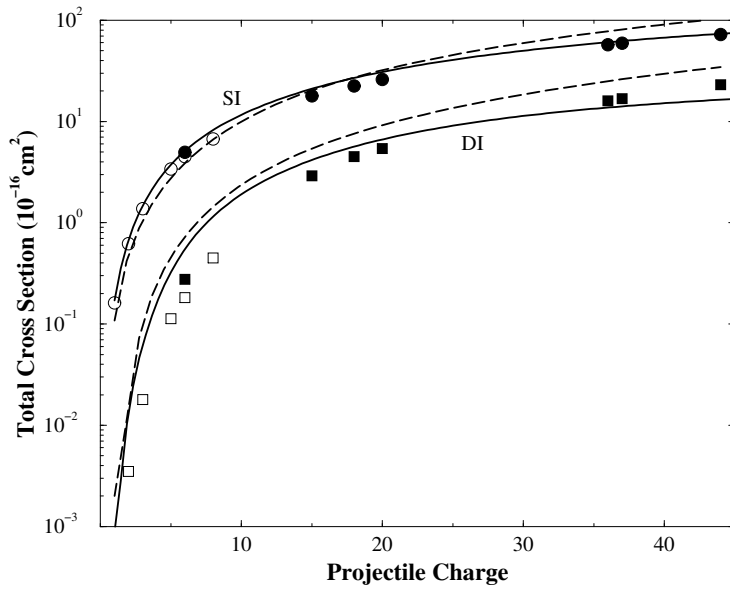
### 3.3.1. A hélium atom kétszeres ionizációja

A [Fa98] munkában az egyszeres és a kétszeres ionizáció (2.45) teljes hatáskeresztmetszeteit az 1.4 MeV/nukleon  $X^{Z_P^+} - He$  ütközési rendszerben vizsgáltam. A csupasz lövedék töltése a  $Z_P=1-40$  határok között változott. Az IPM közelítésben az egyszeres ionizáció valószínűségeit a CDW-EIS modell keretében HFS atomi potenciálon határoztam meg [Fa96]. A folyamat leírására szerzőtársaim alkalmazták a CTMC modellt is. A 3.25 ábrán a kétféle leírással kapott ionizációs valószínűségek összevetése látható. A két számolás nagyon hasonló valószínűségeloszlásokat produkál. Mind az egyszeres, mind a kétszeres ionizáció esetén az az impakt paraméter tartomány, amely a legnagyobb járulékot adja a TCS-hez, a nagy  $b$  értékek felé tolódik el  $Z_P$  növekedtével. Ez azt jelenti, hogy az erősebb perturbációt jelentő lövedéktöltések esetén már nagyobb ütközési távolságokon is lejátszódhat a folyamat.



3.25. ábra. Teljes ionizációs valószínűségek az 1.4 MeV/nukleon  $X^{q^+}$ -He ütközésben, a  $q = 6$  (vékony vonal);  $q = 15$  (szaggatott-pontozott vonal);  $q = 30$  (szaggatott vonal);  $q = 45$  (vastag vonal) értékeknél, a  $\rho \equiv b$  impakt paraméter függvényében. A baloldali ábra az egyszeres ionizáció (SI), míg a jobboldali ábra a kétszeres ionizáció (DI) esetét mutatja.

A 3.26 ábrán az egyszeres és kétszeres teljes ionizációs TCS adatok láthatóak. A CDW-

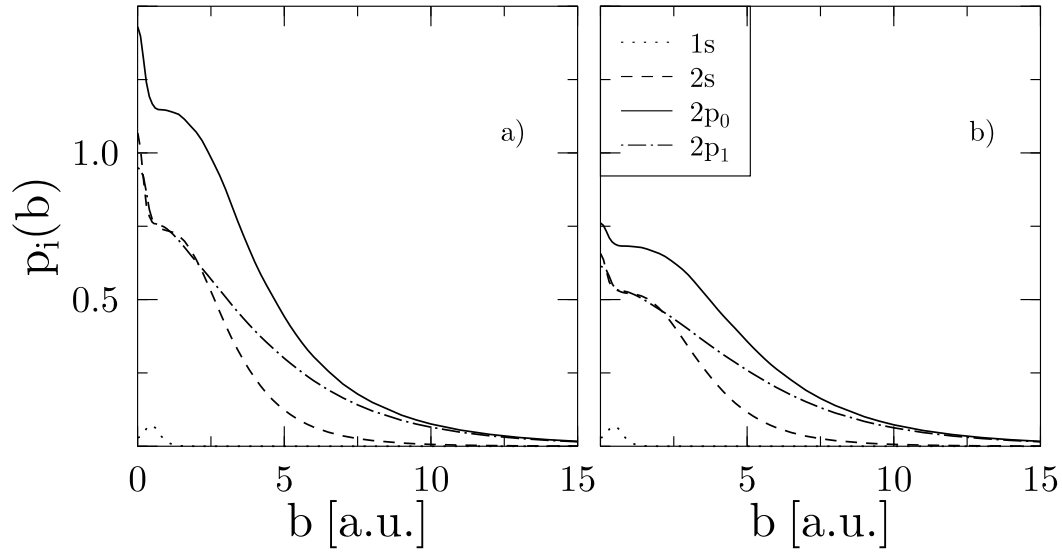


3.26. ábra. Egyszeres (SI) és kétszeres (DI) hatáskeresztmetszetek az 1.4 MeV/nukleon  $X^{q+}$ -He ütközésben, a lövedék töltésének függvényében. Elméletek: jelen CDW-EIS számolás (folytonos vonal); CTMC számolás (szaggatott vonal). Kísérletek: teljes kör és teljes négyzet [McGu87]-ből; nyitott kör és nyitott négyzet [Kn84]-ből.

EIS igen jó egyezést mutat a kísérleti adatokkal, még a nagy lövedékion töltések esetén is. Ez a modell alkalmazhatóságát mutatja az erős (nagy  $Z_P$ ) perturbációk esetén. Itt meg kell jegyezni, hogy a B1 modellben a valószínűségek és a hatáskeresztmetszetek is a  $Z_P^n$ -el arányosak ( $n=2$ , ill  $n=4$  az egyszeres és kétszeres ionizáció során). Így egy B1 számolás a TCS-re, főként nagy  $Z_P$  esetén, jelentősen eltérő értékeket jósolna.

### 3.3.2. Neon és argon atomok többszörös ionizációja

A perturbációs eljárások nem teljesítik az ún. unitaritást, ami szerint az összes lehetséges folyamat valószínűségeinek összege 1-et kell, hogy adjon [McGu92]. Ugyanakkor a binomiális formula alkalmazásakor szükséges, hogy az adott folyamatra a  $p(b) < 1$  teljesüljön, különben a sokelektronos valószínűség negatív értéket is felvehet. A  $p(b) > 1$  értékek már olyan ütközési tartományokon is előfordulhatnak, ahol az adott modell még helyesen ad számot az egyelektronos folyamat hatáskeresztmetszetéről. Ez akkor fordul elő, ha  $p$  az



3.27. ábra. Az  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_0$  és  $2p_1$  pályák ionizációs valószínűségei a  $3.6 \text{ MeV/nukleon Au}^{53+} + \text{Ne}$  ütközésben. a) Korrekció nélküli CDW-EIS számolás, b) a (3.42) alapján korrigált CDW-EIS számolás.

1-et csak olyan kis  $b$  értékek esetén lépi túl, amelyek a  $b \cdot p(b)$  szorzat miatt csak elhanyagolható járulékot eredményeznek a TCS meghatározása során (lásd a 2.37 összefüggést).

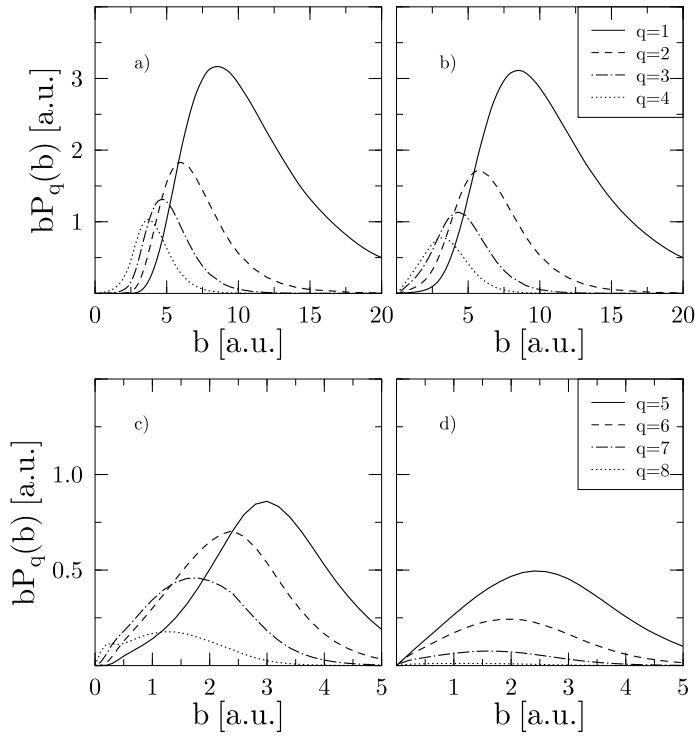
A  $p(b) > 1$  előfordulása az adott perturbációs eljárás alkalmatlanságából ered, amit az IPM modell alkalmazásakor korrigálni kell. Természetesen egy korrekciónak csak akkor van értelme, ha azt viszonylag kis, az adott folyamat szempontjából nem meghatározó impakt paraméter tartományon kell alkalmazni. Az irodalomban két, empirikus megfontolásokból eredő, korrekciós módszer terjedt el:

a/ az 1-nél nagyobb értékeket 1-nek veszik

$$\tilde{p}(b) = 1, \quad \text{ha} \quad p(b) > 1 \quad (3.41)$$

b/ a

$$\tilde{p}(b) = 1 - \exp[-p(b)] \quad (3.42)$$



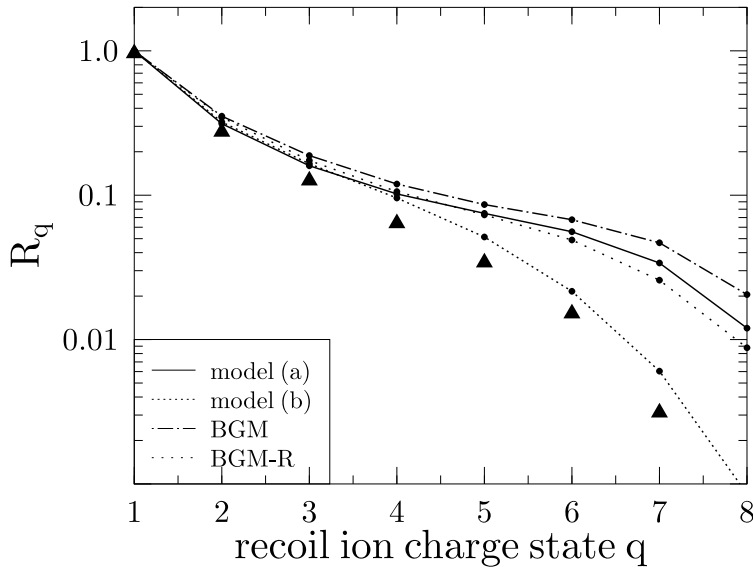
3.28. ábra. CDW-EIS közeli-  
lítésben számított, impakt  
paraméterrel szorozott  $q$ -  
szoros ionizációs valószínű-  
ségek a 3.6 MeV/nukleon  
 $\text{Au}^{53+} + \text{Ne}$  ütközésben  
az impakt paraméter függ-  
vényében. CDW-EIS szá-  
molások a  $q = 1, \dots, 4$   
esetén a (3.41) (a) és  
a (3.42) (b) korrekció-  
val; CDW-EIS számolások  
a  $q = 5, \dots, 8$  esetén a  
(3.41) (c) és a (3.42) (d)  
korrekcióval,

formulát alkalmazzák, melyet Sidorovich és Nikolaev javasolt [Si83].

A [Ki02] munkában a neon atom többszörös ionizációját a 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+}$  lövedékkel történő ütközésében vizsgáltam. Az egyelektronos ionizációs valószínűségeket a CDW-EIS modellben HFS atomi potenciálon határoztam meg [Fa96]. A vizsgált folya-  
matban a lövedék egy igen erős  $Z_P/v_P \approx 4.4$  perturbációt jelent, így a  $b$  kis értékeinél  $p > 1$ . A 3.27 ábrán jól látszik, hogy a (3.42) korrekció elsősorban a kis  $b$  értéke esetén jelentős.

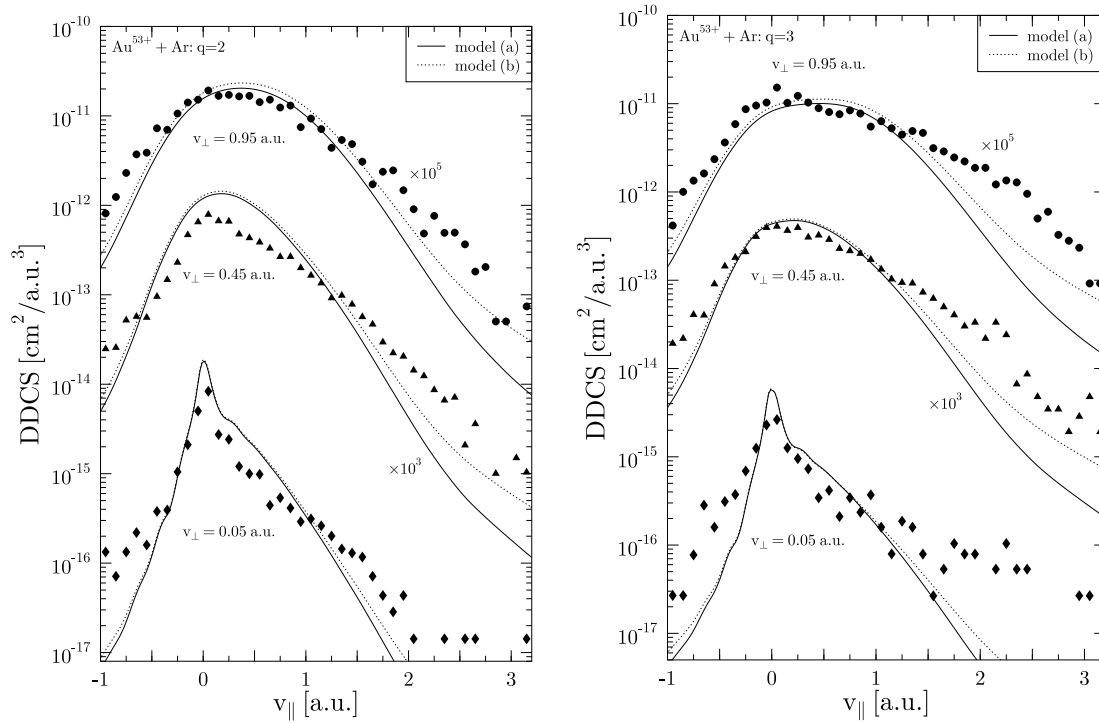
A 3.28-ábra a kétféle,  $a/$  és  $b/$  korrekcióval meghatározott többszörös ionizációs való-  
színűségeket mutatja. Alacsony  $q < 4$  ionizáltság esetén nincs lényeges eltérés. Nagyobb  
 $q$  értékek esetén, ahogy az ionizációs valószínűségek súlypontja tolódik a kisebb impakt  
paraméterek felé, úgy növekszik az  $a/$  és  $b/$  korrekciós eredmények közti különbség.

A 3.29 ábrán a  $q$ -szeresen ionizált Ne céltárgy atomhoz tartozó TCS ( $\sigma_q$ ) és a tel-



3.29. ábra. Teljes ionizációs hatáskeresztmetszetek aránya,  $R_q = \sigma_q/\sigma_1$  a 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+} + \text{Ne}$  ütközésben az ionizált céltárgy  $q$  töltésének függvényében. Elméletek: jelen CDW-EIS számolás a (3.41) (model (a)) és (3.42) (model (b)) korrekciókat alkalmazva; csatolt-csatornás számolás céltárgy effektus nélkül (BGM) ill. céltárgy effektussal (BGM-R). A ▲ a mérési adatokat jelöli [Ki02].

jes egyszeres ionizáció ( $\sigma_1$ ) arányát hasonlítottuk össze. Nincs lényeges eltérés a  $q < 4$  esetén az a/ és b/ módon korrigált jelen CDW-EIS eredmények között, mivel kis  $q$  esetén, ahogy azt a 3.28 ábra is mutatja, a távoli ütközések dominálnak. Lényeges eltérés  $q < 4$  értékeknél jelentkezik, ahol a b/ eljárással korrigált CDW-EIS adatok jó egyezést mutatnak a mért értékekkel. Ez alapján azt mondhatjuk, hogy a b/ korrekciós modell javít a CDW-EIS alkalmazhatóságán a nagy perturbációk esetén is. Ugyanakkor a jelen CDW-EIS számolások nem veszik figyelembe azt, hogy a céltárgy elektronállapotai is módosulhatnak az egyes ionizációs események között, amit válasz (R, response) effektusnak is nevezünk. Ez az effektus, a csatolt-csatornás (basis generator model, BGM [Ki02]) közelítésben elvégzett becslés (BGM-R) alapján nem tűnik jelentősnek. A BGM modell teljesíti az unitaritást, és eredményei a (3.41) korrekcióval számított CDW-EIS eredményekhez állnak közel. Ez viszont azt jelenti, hogy a (3.42) eljárás túl nagy korrekciót jelent a kis  $b$  értékek esetén. A jelenség pontosabb megértése további vizsgálatokat igényel.

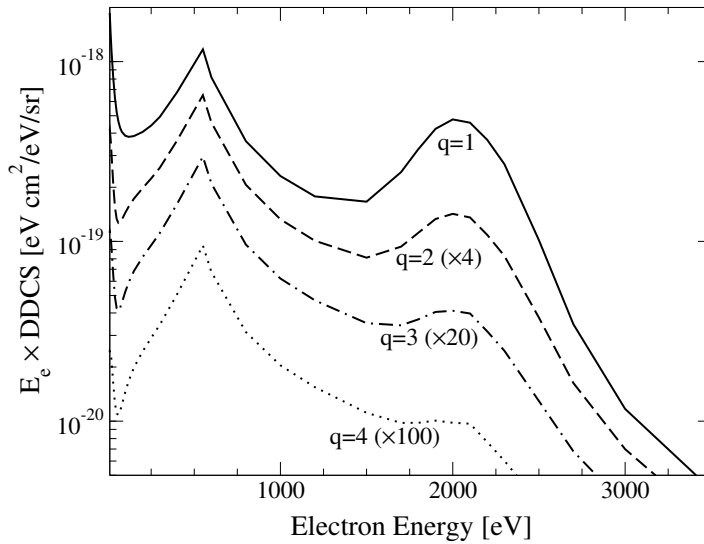


3.30. ábra. DDCS eloszlások az elektronsebesség Z-tengely irányú vetületének ( $v_{\parallel}$ ) függvényében 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+} + \text{Ar}$  ütközésben a céltárgy  $q$  töltése és az elektronsebesség Z-tengelyre merőleges vetületének ( $v_{\perp}$ ) különböző értékei mellett. A DDCS adatok a  $v_{\perp} = 0.45$  és  $0.95$  a.u. esetén a jelzett faktorokkal szorozódnak. Elméletek: CDW-EIS számolások a (3.41) (folytonos vonal) és a (3.42) (pontosított vonal) korrekciókat alkalmazva. A szimbólumok a mérési adatokat jelölik [Ki02].

A [Ki01, Ki02] munkákban a többszörös ionizáció differenciális hatáskeresztmetszeteit vizsgáltam, a 3.6 MeV/nukleon  $\text{Au}^{53+} + \text{Ar}$  ütközés esetén. A  $q = 2, 3$  értékeire meghatározott, (3.40) szerint definiált DDCS eloszlások a 3.30 ábrán láthatók. Az egyszeres ionizáció valószínűségeit a CDW-EIS modellben határoztam meg [Fa96], ahol OPM potenciált alkalmaztam a perturbálatlan atomi állapotok leírása során. A (3.41) és (3.42) korrekciókkal kapott eredmények között a legnagyobb eltérés  $v_{\parallel}$  nagy értékeinél jelentkezik. A nagy  $v_{\parallel}$  nagy  $v$ -t is jelent, mely elektronok elsősorban közeli, kis impakt paraméterű ütközésekből származnak. A b/ korrekcióval kapott CDW-EIS eredmények közelebb állnak a mért értékekhez, azonban a kísérleti adatok nagy szórása nem ad lehetőséget további

### 3.3.3. Másodrendű folyamatok az argon többszörös ionizációjában

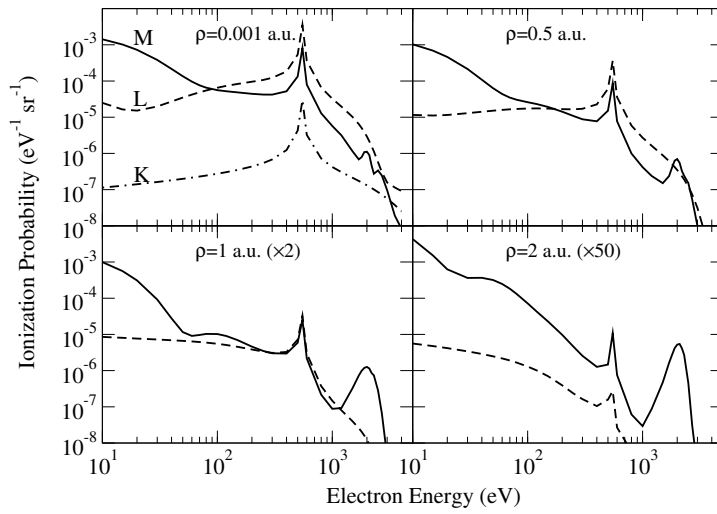
Afrosimov és munkatársai az 1 MeV  $H^+ + Ar$  ütközésben kísérletileg tanulmányozták a többszörös ionizáció jelenségét [Af00]. A  $\theta_e = 0^\circ$ -ban kirepülő elektronok energiaeoszlásával együtt az ionizált atom  $q$  iontöltését is meghatározták a  $q=[1-4]$  tartományban. Azt a meglepő eredményt találták, hogy a kétszeres és háromszoros ionizációs csatornák járuléka bizonyos esetben felülmúlta az egyszeres ionizációét, amit a másodrendű legerjesztődéses folyamatok járulékának tulajdonítottak.



3.31. ábra. DDCS eloszlások az 1 MeV proton - Ar ütközésben, az elektron energiájának ( $E_e$ ) függvényében a  $\theta_e = 0^\circ$  rögzített értékénél. Elméletek: CDW-EIS számítások a  $q = 4$  (pontosított vonal);  $q = 3$  (pontosított-szaggatott vonal);  $q = 2$  (szaggatott vonal);  $q = 1$  (folytonos vonal) értékeire.

A [Fa01] munkában ezt a jelenséget tanulmányoztam. A CDW-EIS modellben HFS atomi potenciálokon meghatározott egyelektronos valószínűségekből [Fa96] az IPM modell keretében (3.39) határoztam meg a többszörös ionizáció valószínűségeit.

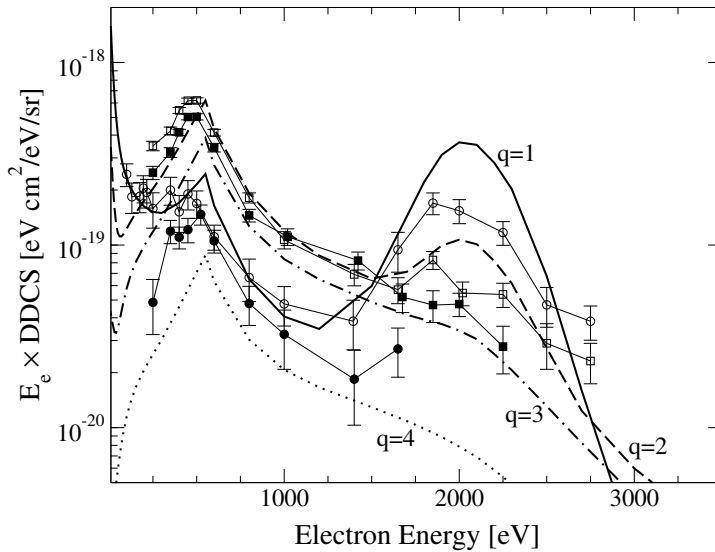
A 3.31 ábrán a  $q = 1 - 4$  értékeire meghatározott ionizációs valószínűségeket tüntettük



3.32. ábra. Egyelektron ionizációs valószínűségi eloszlások az 1 MeV proton - Ar ütközésben, az elektron energiájának ( $E_e$ ) függvényében, az impakt paraméter különböző  $b \equiv \rho$  és a  $\theta_e = 0^\circ$  rögzített értékeinél. Elmélet: CDW-EIS számítások a K (pontosított-szaggatott vonal); L (szaggatott vonal) és az M (folytonos vonal) alhéjak járulékaira.

fel. Jól látható, hogy a DDCS értékei, Afrosimov és mtsi. eredményeitől eltérően [Af00],  $q$  növekedtével egyenes arányban csökkennek a teljes  $E_e$  elektronenergia tartományon.

A 3.32 ábra az egyelektronos ionizációs valószínűségeket mutatja. Megállapítható, hogy vannak olyan tartományok, ahol az L-héj ionizációs valószínűsége nagyobb, mint az M-héj esetén. Egy, a belső héjról kiütött elektron ionizációja során keletkezett lyuk egy legerjesztődési folyamat során nagyon hamar betöltődik. Az L-alhéjon keletkezett lyuk 90-93%-os



3.33. ábra. Ugyanaz, mint a 3.31 ábrán. Elméletek a jelölések a 3.31 ábrával azonosak. Kísérletek: nyitott kör,  $\text{Ar}^+$ ; nyitott négyzet,  $\text{Ar}^{2+}$ ; teljes négyzet,  $\text{Ar}^{3+}$ ; teljes kör,  $\text{Ar}^{4+}$  a [Af00]-ból.

valószínűséggel egy Auger-folyamat során bomlik el [Me78]. A spektroszkópiai táblázatok

alapján egy, a 2p héjon lévő lyuk nagy valószínűséggel az M-héjról beugró elektronnal  
 töltődik be, és a felszabaduló energiát egy másik M elektron viszi el [Ca66]. Ezt LMM  
 Auger-folyamatnak nevezzük. Így egy, a lövedék által az L-héjról kiütött elektron ionizá-  
 cióját követően a céltárgy atom töltése  $q = 2$  lesz. Mivel a mérésben az egyes ionizációs  
 csatornákat a  $q$  alapján azonosították, így a fenti L-héj egyszeres ionizációja a  $q = 2$ -es  
 (kétszeres ionizáció) csatornában fog megjelenni. Hasonlóan, a 2s héjon keletkezett lyuk  
 egy, az L-héjon belüli átrendeződést (Kroster-Kronig) követő LMM Auger-folyamat során  
 a  $q = 3$ -as csatornát fogja szaporítani [Ca66]. Ha a számolásban ezeket a legerjesztődés-  
 sel járó folyamatokat is figyelembe vesszük, akkor a 3.33 ábrán szereplő eredményekhez  
 jutunk. A sok görbe meglehetősen zsúfoltta teszi az ábrát, azonban az megállapítható,  
 hogy az  $E_e = 500$  eV környékén jelentkező ECC csúcs intenzitása a  $q = 2$  és  $q = 3$  esetén  
 nagyobb, mint a  $q = 1$  értékénél. Ez az a tartomány, ahol az L-héj az M-héjnál nagyobb  
 ionizációs valószínűségekkel rendelkezik (3.32 ábra). Így itt a legerjesztődéssel járó folya-  
 matok az egyszeres ionizáció hozamát a többszörösen ionizált csatornákhöz „irányítják”.  
 Ez más  $E_e$  tartományokon nem jelentős, mivel azokon az M-héj ionizációja a domináns  
 folyamat. Ezzel sikerült értelmezni a kísérletileg megfigyelt főbb tendenciákat [Af00]. A  
 jobb egyezés érdekében a modell további finomítása szükséges.

## 4. fejezet

# Összefoglalás és általános megjegyzések

Az értekezés a folytonosan torzított hullámú modellek (CDW) alkalmazásán keresztül nyújt betekintést a nagyenergiájú atomi ütközésekben lejátszódó, az elektron(ok) gerjesztődésével, ionizációjával és befogódásával járó elemi jelenségek vizsgálataiba. Ezen elemi jelenségeket az elméleti modellek túlnyomó többsége a legegyszerűbb háromrészecske tárgyalásban vizsgálja. Ugyanakkor három részecskéből álló ütközési rendszer környezetünkben csak ritkán fordul elő, és a laboratóriumban is nehezen valósítható meg, így a kísérleti vizsgálatok túlnyomó többsége, a gyakorlati alkalmazásokat is szem előtt tartva, többelektronos rendszereken történik. A háromrészecske modellek egy, az elektronkorrelációt elhanyagoló egyszerű kiterjesztése sokelektronos rendszerekre a független részecske közelítés keretében adható meg. Ezen közelítés alkalmazhatóságát az indokolja, hogy sok esetben az egyes elektronok átmenetei függetleneknek tekinthetők. Így a dolgozatban ismertetett vizsgálatok a háromrészecske modellek tanulmányozásán túl a független részecske közelítések érvényességét is tesztelik.

A 3.1 fejezetben ismertetett, az ütközési hatáskeresztmetszetek meghatározására vo-

natkozó vizsgálatok alapján megállapítható, hogy az elemi folyamatok lejátszódásában a céltárgymag Coulomb-terét leárnyékoló (passzív) elektronoknak is komoly szerepe lehet. A  $H^+ - He$  ütközési rendszeren elvégzett vizsgálatok azt mutatják, hogy az árnyékoló potenciál típusa kevésbé meghatározó a gerjesztéssel és befogódással járó folyamatok esetén [Gu97, Gu02]. Ez annak tudható be, hogy ezen jelenségek lejátszódása során az elektron végig az egyik ütköző fél közelében, annak valamilyen kötött állapotában tartózkodik, ahol az árnyékolási viszonyok nem változnak jelentősen. Ilyen esetekben a kétcentrumú effektusok (TCE) elhanyagolhatóak, és a folyamatok leírása leginkább az atomi elektron-állapotok megválasztására mutat érzékenységet. Megállapítható, hogy a viszonylag kis perturbációk ( $Z_P/v < 1$ ) és egy megfelelő, pl. Hartree-Fock típusú modellpotenciál alkalmazása esetén az SE (symmetric eikonal) közelítés helyesen ad számot a gerjesztési folyamat dinamikájáról [Gu97, Ti98]. Erősebb perturbációk esetén a modell veszít érvényességéből, és a megbízhatóbb eredmények elérése érdekében valószínűleg a perturbációs sor magasabb rendű tagjainak meghatározása válik szükségessé. Hasonló következtetések állapíthatóak meg a befogási jelenségek vizsgálatára alkalmazott CDW modellre vonatkozóan is [Su00, Gu02].

Az elektron ionizációját eredményező folyamatokban a dinamikának is fontos szerep jut azáltal, hogy a kilökődött elektron a lövedék- és a visszamaradó céltárgyion terében mozog. Ezt a kétcentrumú effektust a CDW és CDW-EIS modellek igen jól visszaadják, feltéve, hogy megfelelő potenciálokat alkalmazunk az atomi elektronállapotok leírásakor [Gu98, Tr98a, Tr01a, Tr98b, Tr98a]. Mivel az ionizáció során tetszőleges impulzusmomentumú állapotok jöhetnek létre, így ez a folyamat az atomi potenciálok egy igen érzékeny tesztjét is jelenti [Ki97, Ki98, Gu04]. Ezt jól szemlélteti az argon atom esete is, ahol a HFS modell

hiányossága ütközött ki az  $l=2$  impulzusmomentumú állapot kialakulásakor [Gu00].

A 3.2 fejezet tanúsága szerint az ionizációs folyamatokban az elektron(ok) emissziójának vizsgálatán túl a lövedékion szóródásának vagy a céltárgyion meglökődésének tanulmányozása a folyamatok alaposabb megértését teszi lehetővé. Ilyen vizsgálatokban az egyes modellek hiányosságai is jobban kiütköznek.

A nehéz részecskék mozgásáról a megmaradási törvények alkalmazásán keresztül már az elektron energia- és emissziós szög szerinti eloszlásai (DDCS) alapján is képet nyerhetünk. Az ütközés során szétrepülő részecskék impulzuseloszlásainak vizsgálataiból leginkább a kétcentrumú (TCE) és az ütközés utáni kölcsönhatások (PCI) szerepére következtethetünk. Ez utóbbi kölcsönhatás, ami igen jelentősnek mutatkozott a 30 MeV  $C^{6+} - He$  ütközési rendszerben, elsősorban az eloszlások alakjának aszimmetriájában mutatkozik meg [Tr98c]. Ezt az effektust a CDW-EIS modell helyesen írja le. A 75 keV energiájú  $H_2^+$  lövedékion és hélium atom ütközésében a CDW-EIS modell már pontatlanabban ad számot a PCI jelenségről [Sa02]. Ugyanakkor a kétcentrumú effektusokat a modell ebben az ütközésben is helyesen írja le.

A lövedékion az atomon történő szóródása során az elektronnak és az atomtörzsnek ad át impulzust. Kiszögű szóródása egyaránt létrejöhet az elektronnal és az atomtörzzsel történő kölcsönhatása következtében, azonban léteznek olyan jelenségek, pl. a Thomas-folyamat, amely során a lövedékion nagy valószínűséggel csak az elektronon szóródik. A proton és hélium atom ütközésének vizsgálata azt mutatja, hogy a Thomas-folyamat lejátszódásában nincs különbség abban, hogy az elektron végül a lövedékion erősen vagy lazán kötött állapotaiba kerül [Gu01].

Más, elsősorban a nagy töltésű nehéz részecskék keltette folyamatokban a lövedékion-

nak már kisszögű szóródásáért is az elektronnal és az atomtörzzsel történő kölcsönhatása egyaránt felelős. A  $3.6 \text{ MeV/amu } Au^{53+} - He$  ütközési rendszeren végzett vizsgálatok azt mutatják, hogy az utóbbi kölcsönhatás során a céltárgyon lévő elektronok árnyékoló szerepe is igen lényeges [Fa05]. Ilyen esetben, mivel a lövedék igen közel kerül a céltárgyhoz, az is megtörténhet, hogy egy elektron ionizáció mellett egy további elektront is gerjesztett állapotba juttat. A jelenség pontos lejátszódása még nem teljesen tisztázott.

A lövedékion nagyszögű eltérése kizárólag a céltárgy magján történő szóródása során jön létre. Az ionizációs jelenség globális vizsgálata (pl. a teljes ionizációs hozam meghatározása) szempontjából a lövedékion szóródásának, ill. mozgásának részletes ismerete nem bír meghatározó jelentőséggel. Ugyanakkor, mint azt a proton és argon atom ütközésében elvégzett vizsgálat mutatja, a lövedékion pályájának pontos meghatározása bizonyos esetekben, például az ECC folyamat megfelelő értelmezése során, igen lényeges [Sa98].

A 3.3 fejezet eredményei alapján megállapítható, hogy számos, több elektron átmene-tével járó folyamat a független részecske modell (IPM) segítségével is kielégítően értelmezhető. A hélium atom  $1.4 \text{ MeV/nukleon}$  energiájú  $Z$  töltésű Coulomb-részecske bombázása által létrejövő kétszeres ionizációjának mért és számított teljes hatáskeresztmetszetei nagyon jó egyezést mutatnak a  $Z$  széles ( $1 \leq Z \leq 40$ ) tartományában [Fa98]. Az elmélet hasonlóan jól írja le az elektronok impulzuseloszlásait a  $3.6 \text{ MeV/nukleon } Au^{53+} - Ne, Ar$  ütközési rendszerekben lejátszódó többszörös ionizáció folyamatában is [Ki01, Ki02]. A proton és argon atom ütközésében a többszörös ionizáció során az előre irányban emittálódott elektronok energiaszétválásának helyes értelmezéséhez az ionizációt követő leg-erjesztődéses folyamatokat is figyelembe kellett venni [Fa01]. Ezekben a folyamatokban az elektronok közti kölcsönhatás elhanyagolható az ütközés szempontjából. Ugyanakkor

fontos, hogy az egyes egyrészecske átmenetek valószínűségeit mennyire pontosan tudjuk meghatározni. Az esetek tanúsága szerint a megfelelő CDW modellek elég pontosan adnak számot az egyes elemi eseményekről. Érvényességi tartományaikat a hatáskeresztmetszetek vizsgálataira alapozva állapították meg. Ez a tartomány az átmeneti valószínűségeket tekintve meglehetősen szűk, ami különösen a nagy perturbációt jelentő lövedékek keltette többszörös ionizációban mutatkozik meg. Nagy perturbációk esetén egyre inkább megmutatkozik az unitaritás teljesülésének a hiánya. Az egyszeres és kétszeres ionizációban a perturbációs CDW modellek ezen defektusa még nem vezet jelentős hibához, vagy egyszerű módon korrigálható, de természetesen ez az adott ütközési rendszertől is függ. Olyan esetekben, ahol az adott jelenséget csak kvalitatív módon sikerült értelmezni, a kísérleti és az elméleti adatok közötti eltérés az elektronkorreláció szerepére utalhat. Kapcsolódva a dolgozatban bemutatott kutatásaimhoz, újabban a kételektronos rendszerekben jelentkező elektronkorreláció jelenségét tanulmányozom.

## 5. fejezet

# Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom az Atomfizikai Főosztály és az ATOMKI számos munkatársának, amiért érdeklődésükkel ösztönzést adtak kutatásaimhoz. Köszönöm Sarkadi Lászlónak, hogy munkámat minden lehetséges eszközzel támogatta.

Ezúton mondok köszönetet külföldi társszerzőimnek is, azoknak akikkel a témakört érintő, számomra igen értékes vitákat folytathattam, így Berényi Dénesnek, Pablo Fainsteinnek, Hock Gábornak, Tom Kirchnernek, Kövér Ákosnak, Orbán Andreának, Papp Tibornak, Ricz Sándornak, Antoine Salinnak, Nicol Stolterfoltnak, Sulik Bélának, Roberto Rivarolának és Tőkési Károlynak.

Köszönet illeti az OTKA-t, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Kuratóriumát, a japán Tudományos és Technológiai Szervezetet, valamint a német DAAD hivatalt, amelyek ösztöndíjaikkal segítették a munkámat.

# A. Függelék

## Eikonál közelítés

Tekintsünk egy  $M$  tömegű részecskét, amely  $\mathbf{K}$  kezdeti impulzussal mozog a  $W(R)$  potenciál terében. A részecske mozgása a

$$[\nabla_{\mathbf{R}}^2 + K^2 - 2MW(R)]F(\mathbf{R}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

Schrödinger-egyenlettel adható meg. Keressük ezen egyenlet megoldását az

$$F(\mathbf{R}) = \exp[iS(\mathbf{R})] \quad (\text{A.2})$$

alakban. Behelyettesítés után az ún.  $S(\mathbf{R})$  eikonál függvény az

$$[-i\nabla_{\mathbf{R}}^2 S(\mathbf{R}) + (\nabla_{\mathbf{R}} S(\mathbf{R}))^2] = p^2(\mathbf{R}) \quad (\text{A.3})$$

egyenletből határozható meg, ahol

$$p^2(\mathbf{R}) = K^2 - 2MW(R). \quad (\text{A.4})$$

Keressük a megoldást olyan tartományokon, ahol  $K^2 \gg 2MW(R)$ . Ekkor  $S$  egy lassan változó függvénye  $\mathbf{R}$ -nek, azaz  $\nabla_R S(\mathbf{R}) \gg |\nabla_R^2 S(\mathbf{R})|$ . Ebből adódóan a  $\nabla^2$ -el arányos tag elhanyagolható [McDo70, Be79, Br92]. Ilyen feltételek mellett  $S(\mathbf{R})$  a

$$(\nabla_R S(\mathbf{R}))^2 = p^2(\mathbf{R}) \quad (\text{A.5})$$

Hamilton-Jacobi egyenletnek tesz eleget. Ez az egyenlet határozza meg az összes olyan lehetséges klasszikus pályát a  $W(R)$  potenciáltérben, amelyet ezen részecske  $K^2/2M$  energiával futhat be. Ezen pályák érintője merőleges az  $S(\mathbf{R})$  konstans felületre. Így, ha bevezetünk egy  $\mathbf{p}(\mathbf{R})$  vektort a  $\mathbf{p}(\mathbf{R}) = \nabla_R S(\mathbf{R})$  definícióval, akkor  $\mathbf{p}(\mathbf{R}) = M\mathbf{v}(t)$ -vel definiálhatunk egy klasszikus, lokális impulzust, ahol  $\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{R}}$  a sebesség. Minden egyes klasszikus pálya jellemezhető egy (kétdimenziós)  $\mathbf{b}$  impakt paraméterrel és (mint harmadik koordináta) az idővel

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{b}, t). \quad (\text{A.6})$$

A koordináta rendszert választhatjuk úgy, hogy a Z-tengelye essen egybe a bejövő részecske irányával és  $\mathbf{b}$  legyen benne az XY szórási síkban, a  $t = 0$  időpont pedig jelölje ki a legkisebb megközelítési távolságot. Ha  $s$  jelöli az adott pályán megtett távolságot, akkor  $S(\mathbf{R})$  a

$$S(\mathbf{R}) = \int_0^s p(\mathbf{R}) ds \quad (\text{A.7})$$

alakban adható meg, ahol  $\mathbf{R}$ -t mint  $\mathbf{b}$  és  $s$  függvényeként fejezzük ki. Mivel a koordináta-rendszert úgy választottuk, hogy a pálya a befutó ágon párhuzamos a  $Z$ -tengellyel, így  $s \rightarrow -\infty$  és a  $s \rightarrow -KZ$ -nek megfelelően

$$F(\mathbf{R}) \simeq_{Z \rightarrow -\infty} \exp(iKZ). \quad (\text{A.8})$$

Nagy  $K$  impulzus értékek esetén a (A.4) klasszikus momentum elsőrendben a

$$p(R) \approx K - \frac{\mu}{K} W(R) \quad (\text{A.9})$$

kifejezéssel közelíthető, ami alapján a lövedékion klasszikus mozgásához (A.7)-ben az  $ds = K/Mdt$  integrációs változó cseréje után  $F(\mathbf{R})$  a

$$F(\mathbf{R}) \approx \exp \left[ i\mathbf{K}\mathbf{R} - i \int_{\infty}^t W(R(t')) dt' \right] \quad (\text{A.10})$$

függvénnyel adható meg.

Végül az eikonál közelítés alkalmazhatóságának feltétele a következő szemléletes képpel is megfogalmazható [McDo70, Be79]. Jelölje  $a$  azt az  $[R_o, R_o + a]$  tartományt, amelyen belül a potenciál, és így az  $S$  függvény is egyenletesen, simán viselkedik. A fentiek alapján ez a kiterjedés arányos  $1/K$ -val, ami egyben azt is jelenti, hogy a részecske deBroigle-hullámhossza rövidebb, mint az a távolság, amelyen túl már a potenciál, és így a hullámfüggvény is lényeges változást mutat. Ez a tartomány atomi ütközések esetén rendszerint az atom kiterjedésével arányos.

## B. Függelék

### CDW integrálok

Itt azokat az integrálokat ismertetjük, amelyek a vizsgálatok során alkalmazott CDW típusú számolásokban fordulnak elő.

Az  $F_{1s}$  és  $F_{2s}$  azonosak a CDW-EIS korábbi, nem ortogonális atomi pályákra épülő verziójában szereplő integrálokkal [Fa89]:

$$\begin{aligned} F_{1s}(\mathbf{p}) &= (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{s} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}} [\alpha_f^-(\mathbf{s})]^* q_v^{-i\nu-1}/s \\ &= \frac{N(\zeta)\Gamma(-i\nu)}{(2\pi)^{-1/2}\beta} \left(\frac{i\beta}{\alpha}\right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{-i\zeta} [F(1) + i\zeta z F(2)], \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

valamint

$$\begin{aligned} F_{2s}(\mathbf{p}) &= (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{s} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{s}} [\alpha_f^-(\mathbf{s})]^* q_v^{-i\nu-1}(\hat{s} + \hat{v}) \\ &= \frac{N(\zeta)\Gamma(1-i\nu)}{(2\pi)^{-1/2}\beta} \left(\frac{i\beta}{\alpha}\right)^{-i\nu} \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{-i\zeta} \\ &\quad \times \left\{ \begin{aligned} &- [F(1) - i\zeta(1-z)\frac{\alpha-\beta}{\delta}F(2)] \mathbf{p} \\ &+ i\zeta(1-z)F(2)\frac{\beta}{\delta}[\mathbf{k}' - k'\hat{v}] \end{aligned} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

ahol  $\alpha = p^2/2$ ,  $\beta = -\mathbf{p}\mathbf{v}$ ,  $\gamma = \alpha - \mathbf{p}\mathbf{k}'$ ,  $\delta = \beta + \mathbf{k}'\mathbf{v} - k'v$ ,  $z = 1 - \alpha\delta/\beta\gamma$ ,  $F(1) = {}_2F_1(\imath\zeta, \imath\nu; 1; z)$  és  $F(2) = {}_2F_1(1 + \imath\zeta, 1 + \imath\nu; 2; z)$ ,  ${}_2F_1$  pedig a Gauss-féle hipergeometrikus függvény [Ab70]. ( $\alpha_f^-$ ,  $q_v^{-\imath\nu-1}$ ,  $\zeta$ ,  $\nu$  értékeit a 2.2 alfejezetben definiáltuk).

$F_{1x}$  és  $F_{2x}$  számolása során meg kell különböztetni, hogy az elektron végállapotát kötött ( $\varphi_f$ ) vagy folytonos ( $\varphi_\epsilon^-(\mathbf{x})$ ) energiájú pálya írja le. Az alábbi ismertetés az utóbbi esetre vonatkozik. Ettől a kötött energiájú állapotra vonatkozó eset annyiban tér el, hogy a  $\sum_{l'm'} (-\imath)^{l'} e^{\imath\delta_{l'}} \left[ Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) \right]^*$  tényezőt elhagyjuk, és a  $l'$  ill.  $m'$  helyébe  $l_f$  ill.  $m_f$ -et írunk.

Az  $F_{1x}$  hasonló a Born-közelítésben megismert Form faktorhoz [McDo70],

$$\begin{aligned} F_{1x}(\mathbf{K}) &= (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{x} e^{-\imath\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}} [\varphi_\epsilon^-(\mathbf{x})]^* \varphi_i(\mathbf{x}) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{l'm'} (-\imath)^{l'} e^{\imath\delta_{l'}} \left[ Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) \right]^* C_{l'm'} e^{\imath M\phi_K}, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

amelyekben szereplő Fourier-Bessel-integrálok a következő alakúak

$$\begin{aligned} C_{l'm'} &= \sum_l (-\imath)^l (-)^M \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)(2l_i+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & l' & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} l & l' & l_i \\ -M & m' & m_i \end{pmatrix} \cdot \mathcal{Y}_l^M(\hat{\mathbf{K}}) \int dx u_{n_i l_i}(x) j_l(Kx) u_{\epsilon l'}(x) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

ahol  $\mathcal{Y}_l^m = Y_l^m \exp(-\imath m\phi)$ , a  $j_l$  pedig a szferikus Bessel-függvény.

$F_{2x}$  a

$$\mathbf{F}_{2x}(\mathbf{K}) = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{x} e^{-\imath\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}} [\varphi_\epsilon^-(\mathbf{x})]^* \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (\text{B.5})$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{l'm'} (-i)^{l'} e^{i\delta_{l'}} \left[ Y_{l'}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) \right]^* \mathbf{L}(\mathbf{K}, \epsilon),$$

kifejezést jelöli, ahol az  $\mathbf{L}(\mathbf{K}, \epsilon)$  vektorfüggvény definíciója:

$$\mathbf{L}(\mathbf{K}, \epsilon) = \mathbf{L}^+(\mathbf{K}, \epsilon) e^{iM^+ \phi_K} + \mathbf{L}^-(\mathbf{K}, \epsilon) e^{iM^- \phi_K} + \mathbf{L}^0(\mathbf{K}, \epsilon) e^{iM \phi_K} \quad (\text{B.6})$$

$$L_x^\pm(\mathbf{K}, \epsilon) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left( A_{l'm'}^{l_i^+ m_i^\pm} + B_{l'm'}^{l_i^- m_i^\pm} \right)$$

$$L_y^\pm(\mathbf{K}, \epsilon) = \mp i L_x^\pm(\mathbf{K}, \epsilon)$$

$$L_z^\pm(\mathbf{K}, \epsilon) = 0$$

$$L_{x,y}^0(\mathbf{K}, \epsilon) = 0$$

$$L_z^0(\mathbf{K}, \epsilon) = A_{l'm'}^{l_i^+ m_i^+} + B_{l'm'}^{l_i^- m_i^-},$$

ahol  $l_i^\pm = l_i \pm 1$ ,  $m_i^\pm = m_i \pm 1$ ,  $M^\pm = M \pm 1$ ,  $M = m' + m_i$ .  $A_{ij}^{kl}$  és  $B_{ij}^{kl}$  az  $u_{n_i l_i}$  és

deriváltjait tartalmazó Fourier-Bessel-transzformációk:

$$\begin{aligned} A_{l'm'}^{\lambda_1 \lambda_2} &= \sum_l (-i)^l (l_i + 1)^{1/2} \mathcal{Y}_l^M(\hat{\mathbf{K}}) \begin{bmatrix} l & l' & \lambda_1 \\ m & m' & \lambda_2 \end{bmatrix} \\ &\times \int dx \frac{x u'_{n_i l_i}(x) - (l_i - 1) u_{n_i l_i}(x)}{x} j_l(Kx) u_{\epsilon l'}(x) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} B_{l'm'}^{\lambda_1 \lambda_2} &= - \sum_l (-i)^l (l_i)^{1/2} \mathcal{Y}_l^M(\hat{\mathbf{K}}) \begin{bmatrix} l & l' & \lambda_1 \\ m & m' & \lambda_2 \end{bmatrix} \\ &\times \int dx \frac{x u'_{n_i l_i}(x) + l_i u_{n_i l_i}(x)}{x} j_l(Kx) u_{\epsilon l'}(x) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

ahol a bevezetettük a

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} l & l' & \lambda_1 \\ m & m' & \lambda_2 \end{bmatrix} &= \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)(2\lambda_1+1)}{4\pi}} \\
 &\times \begin{pmatrix} \lambda_1 & l' & l_i \\ \lambda_2 & m_i - \lambda_2 & -m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l' & \lambda_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 &\times \begin{pmatrix} l & l' & \lambda_1 \\ -m & m' & \lambda_2 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

jelölést.

# Irodalomjegyzék

- [Ab70] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York (1970).
- [Af00] Afrosimov V V, Basalaev A A, Fastrup B, Horsdal-Pedersen E, Kashnikov K V and M N Panov, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **33** (2000) 4237.
- [Al93] Alt E O and Mukhazmedzhanov A M, Phys. Rev. A **47** (1993) 2004.
- [Am77] Amrein W. Q., Jauch J. M. and Sinha K. B., Scattering Theory in Quantum Mechanics, Benjamin Inc., Reading, Mass. (1977).
- [An76] Andersen J U, Kocbach L, Lægsagaard E, Lund M, and Moak C D, J. Phys. B **9** (1976) 3247.
- [An01] An L, Khayyat Kh and Schultz M, Phys. Rev. A **63** (2001) 030703(R).
- [Br92] Bransden B. H. and McDowell M. R. C., Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions, Oxford Scientific Publications (1992).
- [Be78] Belkic Dz, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **11** (1978) 3529.
- [Be79] Belkic Dz, Gayet R and Salin A, Phys. Rep. **56** (1979) 279.

- [Be84] Belkic Dz, Gayet R and Salin A, Comp. Phys. Comm. **32** (1984) 385.
- [Be87] Berényi D and Hock G., High-Energy Ion-Atom Collisions, Lecture Notes in Physics **294** Springer-Verlag Heilderberg (1987).
- [Bh03] Bhattacharya S, Das R, Deb N, Roy K and Crothers D S F, Phys. Rev. A **68** (2003) 052702.
- [Br92] Brauner M and Macek J H, Phys. Rev. A **46** (1992) 2519.
- [Bu75] Burch T E, Caroff L J and Mark H, Atomic Inner Shell Procsss II., ed.: Crasemann B (New York: Academic Press) (1975) 187.
- [Bu84] Burgdörfer J, Forward Electron Ejection in Ion Atom Collisions, Lecture Notes on Physics Vol.**213** eds. K O Groeneveld, W Meckbach and I A Sellin (Berlin:Springer) (1984) 32.
- [Ca66] Carlson T A, Hunt W E and Krause M O Phys. Rev. **151** (1966) 41.
- [Ch64] Cheshire I M, Proc. Phys. Soc **84** (1964) 89.
- [Cl74] Clementi E and Roetti C, At. Data Nucl.Data Tables **14** (1974) 177.
- [Cr83] Crothers D S F and McCann J F, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **16** (1983) 3229.
- [De68] van den Bos J., Winter G. J. and de Heer F. J., Physica **40** (1968) 357.
- [De72] Delos J. B. and Thorson W. R., Phys. Rev. A **6** (1972) 709.
- [De85] Dewangan D P and Eichler J, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **22** (1985) L65.

- [De86] Deco G R, Fainstein P D and Rivarola R, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **19** (1986) 213.
- [De93] Derrick S F, Crothers and Dube L., Adv. in At., Mol. and Opt. Phys. **30** (1993) 287.
- [De94] Dewangan D P and Eichler J, Phys. Rep. **247** (1994) 59.
- [De97] Dereziński J. and Gérard, Scattering Theory of Classical and Quantum N-Particle Systems, Springer-Vlg. (1997).
- [Do96] Dörner R, Klemliche H, Prior N H, Cocke C L, Gary J A, Olson R E, Mergel V, Ulrich J and Schmidtt-Böcking, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4250.
- [Dr90] Dreizler R M and Gross E U K, Density Functional Theory, Springer Vlg. Heilderberg (1990).
- [Du87] Dubé L J and Salin A, J. Phys. B **20** (1987) L499
- [Ei90] Eichler J, Phys. Rep. **193** (1990) 165.
- [En93] Engel E and Vosko S H, Phys. Rev. A **47** (1993) 2800.
- [Fa88] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **21** (1988) 287.
- [Fa89] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **22** (1989) 1207.
- [Fa91] Fainstein P D, Ponce V H and Rivarola R D, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **24** (1991) 3091.

- [Fa93] Faddeev and Merkuriev, Quantum Scattering Theoury for Several Particle Systems, Kluver, Dordrecht (1993).
- [Fa96] Fainstein P D, Gulyás L and Salin A, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **29** (1996) 1225.
- [Fa98] Fainstein P D, Gulyás L and Dubois A, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **31** (1998) L171.
- [Fa01] Fainstein P D and Gulyás L, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **34** (2001) 3003.
- [Fa05] Fainstein P D and Gulyás L, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **38** (2005) 317.
- [Fi01] Fiol J, Rodriguez V D and Rarrachina R O, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **32** (2000) 933.
- [Fr91] Fritsch W. and Lin C D, Phys. Rep. **202** (1991) 1.
- [Fr92] Fritsch W., Nucl. Fusion Suppl. **3** (1992) 41.
- [Fr96] Fritsch W, Phys. Scr. **T62** (1996) 59.
- [Ga89] Gayet R and Bouamoud M, Nucl. Instrum. Meth. B **42** (1989) 515.
- [Gr81] Greenland P T, J. Phys. B **14** (1981) 3707.
- [Gr69] Green A. E. S., Sellin D. L. and Zachor A. S., Phys. Rev. **184** (1969) 1.
- [Gu95] Gulyás L, Fainstein P D, and Salin A, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **27** (1995) 245.
- [Gu97] Gulyás L and Fainstein P D, Phys. Rev. **A56**, (1997) 1321.

- [Gu98] Gulyás L and Fainstein P D, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **31** (1998) 3297.
- [Gu00] Gulyás L, Kirchner T, Shirai T and Horbatsch, Phys. Rev. **A62** (2000) 022702.
- [Gu01] Gulyás L, Fainstein P D and Shirai T, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. **34** (2001) 1473.
- [Gu02] Gulyás L, Fainstein P D and Shirai T, Phys. Rev. **A65** (2002) 052720.
- [Gu04] Gulyás L, and Kirchner T, Phys. Rev. **A70** (2004) 022704.
- [Ha75] Halpern A M and Law J, Phys. Rev. A **12** (1975) 1776.
- [Ha76] van Haringen H, J. Math. Phys. **17** (1976) 995.
- [Ha80] Hegedon G. A., Commun Math. Phys. **71** (1980) 265.
- [He63] Herman F. and Skillman S., Atomic Structure Calculations, Prentice Hall, New Jersey (1963).
- [Hi74] Hippler R. and Scharfner K. H., J. Phys. B **7** (1974) 618.
- [Ho92] Hoekstra R, Summers H P and de Heer F J, Supplement of J. Nuclear Fusion **4** (1992) 63.
- [In71] Inokuti M, Rev. Mod. Phys. **43** (1971) 297.
- [Io96] Ionescu D C and Eichler J, Phys. Rev. A **54** (1996) 4960.
- [It93] Ito R, Tabata R, Shirai T and Phaneuf R A, Analytic cross sections for collisions of H, H<sub>2</sub>, He, and Li atoms and ions with atoms and molecules. I, Report JAERI-M 93-117, Japan Atomic Energy Research Institute (1993).

- [It96] Itikawa R, Adv. At. Mol. Phys. **33** (1996) 253.
- [Ja93] Janev R K and Darwin H W, Proceedings of the IAEA Committee Meeting on Atomic and Molecular Data for Fusion Reactor Technology, Cadarache, France (1993) 130.
- [Ja96] Janev R K, Phys. Rev. A **53** (1996) 219.
- [Jo76] Johansson S A E, Johansson T B, Nucl. Instr. and Methods **137** (1976) 473.
- [Jo79] Joachain C J, Quantum Collision Theory, North-Holland Publishing C. (1979)
- [Jo83] Joachain C J and Post D E, "Atomic and Molecular Process in Controlled Thermonuclear Fusion", Plenum Press, New-York (1983) 320.
- [Jo90] Johnson R E, Energetic Charged Particle Interaction with Atmospheres and Surfaces, Springer, Berlin (1990).
- [La55] Latter R, Phys. Rev. **99** (1955) 510.
- [Ke95] Kerby III G. W, Gealy M W, Hsu Y -Y, and Rudd M E, Phys. Rev. A **51** 2256 (1995).
- [Ki97] Kirchner T, Gulyás L, Lüdde H J, Henne A, Engel E and Dreizler R M, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 1658.
- [Ki98] Kirchner T, Gulyás L, Lüdde H J, Engel E and Dreizler R M, Phys. Rev. A **58** (1998) 2063.
- [Ki01] Kirchner T and Gulyás L, Physica Scripta T **72** (2001) 348.

- [Ki02] Kirchner T, Gulyás L, Moshhammer R, Schultz M and Ullrich J, *Phs. Rev. A* **65** (2002) 042727.
- [Kn84] Knudsen H, Andersen L H, Hvelplund P, Astner G, Cederquist H, Danared H, Liljeby L and Rensfelt K-G, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** (1984) 3545.
- [Kv85] Kvale T. J., Seely D. G., Blankenship D. M., Gay T. J., Kimura K., Rille E., Peacher J. L. and Park J. T., *Phys. Rev. A* **32** (1985) 1369.
- [Ma98] Macel J et. al., *Phs. Rev. Lett* **80** (1998) 2298.
- [McDa93] McDaniel E W, Mitchell J B A and Rudd M E, *Atomic Collisions*, Wiley-InterScience (1993).
- [McDo70] McDowell M R C and Colemann J P, *Introduction to the Theory of ion Atom Collisions*, Amsterdam: North-Holland (1970).
- [McGu87] McGuire J H, Müller A, Schuch B, Groh W and Salzborn E, *Phys. Rev. A* **35** (1987) 2479.
- [McGu92] McGuire J H, *Adv. in At. Mol. Phys.* **29** (1992) 217.
- [McGu97] McGuire J H, *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions*, Cambridge Univ. Press (1997).
- [Me62] Messiah A, *Quantuum Mechanics Vol. II*, North Hollanad, Amsterdam 1962.
- [Me78] Melhorn W, *Electron Spectroscopy of Auger and Autoionizing States*, Lectures held during the summer of 1978 at the Institute of Physics University of Aarhus, Denmark.

- [Me83]    Merczbacher E and Feagin J M, Comments Nucl. Part. Phys. **11** (1983) 139.
- [Mi99]    Miraglia J E, Bustamente M G and Nacri P A, Phys. Rev. A **60** (1999) 4532.
- [Mo94]    Moshhammer R, Ullrich J, Unverzagt M, Schmidt W, Jardin P, Olson R E, Mann R , Dörner R, Mergel V, Buck U and Schmidt-Böcking H, Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 3371.
- [Mo99]    Moshhammer R et. al., Phys. Rev. Lett **83** (1999) 4721.
- [Mo01]    Moshhammer R, Perumal A, Schulz M, Rodríguez V D, Kollmus H, Mann R, Hagmann S and Ullrich J, Phys. Rev. Lett. **87**(2001) 223201.
- [Mu96]    Mukhazmedzhanov A M and Lieber M, Phys. Rev. A **54** (1996) 3078.
- [Na89]    Nakai Y, Shirai T, Tabata T and Ito R, Phys. Scr **T28** (1989) 77.
- [Ol93]    Olivera G. H., Ramírez C. and Rivarola R. D., Phys. Rev. A **47** (1993) 1000.
- [Ol01]    Olson R E and Fiol J, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **34** (2001) L625
- [Op83]    Opradolce L., Valiron P. and McCarroll R., J. Phys. B: At. Mol. Phys. **16** (1983) 2017.
- [Pa69]    Park J. T. and Schowengerdt F. D., Phys. Rev. A **185** (1969) 152.
- [Re87]    Reinhold C and Miraglia J E, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **20** (1987) 1069.
- [Ri80]    Rivarola R D, Piacentini R D, Salin A and Belkić Dž J. Phys. B: At. Mol. Phys. **13** (1980) 2601.
- [Ro79]    Rodbro M and Andersen F D, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17** (1979) 2883.

- [Ru85] Rudd M E, Kim Y K, Madison D H and Gallagher, Rev. Mod. Phys. **57** (1985) 965.
- [Ro92] Rodriguez V D and salin A, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **25** (1992) L467.
- [Ro95a] Rodríguez V D, Wang Y D and Lin C D Phys. Rev. A **52** (1995) R9.
- [Ro95b] Rodríguez V D, Wang Y D and Lin C D, J. Phys. B: At. Mol. Phys. (1995) L471.
- [Ro03] Rodríguez V D, Nucl. Instr. and Meth. B **205** (2003) 498.
- [Sa98] Sarkadi L, Bringmann U, Báder A, Hippler R, Tökési K and Gulyás L, Phys. Rev. A **58** (1998) 296.
- [Sa02] Sarkadi L, Gulyás L and Lugossi L, Phys. Rev. A **65** (2002) 052715.
- [Sh03] McSherry D, Rourke S F C and Crothers D S F, Comp. Phys. Comm. **155** (2003) 144.
- [Si83] Sidorovich V A and Nikolaev V S, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **16** (1983) 3243.
- [St87] Stolterfoht N et al, Europhys. Lett. **4** (1987) 899.
- [St97] Stolterfoht N, DoBois R D and Rivarola R D, Electron Emission in Heavy ION-Atom Collisions, Springer, Berlin (1997).
- [Su98] Suzuki S, Shimakura N, Shirai T and Kimura M, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **31** (1998) 1471.

- [Su00] Suzuki S, Gulyás L, Shimakura N, Fainstein P D and Shirai T, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **33** (2000) 3307.
- [Te83] Terasawa M, Gray T J, Hagmann S, Hall J, Newcomb J, Pepmiller P and Richard P, Phys. Rev. A **27** (1983) 2868.
- [Th88] Thumm U, J. S. Briggs and O. Schöller, J. Phys. B **21** (1988) 833.
- [Th27] Thomas L H, Proc. Roy. Soc. (London) A **114** (1927) 561.
- [Th67] Thomas E. W. and Bent G. D., Phys. Rev. **164** (1967) 143 (1967).
- [Ti98] Tivari U, Saha A K, Tribedi L C, Kurup M B, Tandon P and Gulyás L, Phys. Rev. A **58** (1998) 4494.
- [Tr98a] Tribedi L C, Richard P, DeHaven W, Gulyás L, Gealy M W and Rudd M E, J. Phys. B **31** (1998) L369.
- [Tr98b] Tribedi L C, Richard P, Wang Y D, Lin C D, Gulyás L and Rudd M E, Phys. Rev. A **55** (1998) 3619.
- [Tr98c] Tribedi L C, Richard P, Wang Y D, Lin C D, Gulyás L and Rudd M E, Phys. Rev. A **55** (1998) 3626.
- [Tr01a] Tribedi L C, Richard P, Gulyás L, Rudd M E and Moshhammer R, Phys. Rev. A **63** (2001) 062723.
- [Tr01b] Tribedi L C, Richard P, Gulyás L and Rudd M E, Phys. Rev. A **63** (2001) 062724.

- [Ue99] Uehara S and Goodhead D T, Radiat. Res. **152** (1999) 202.
- [U103] Ullrich J, Moshhammer R, Dorn A, Dörner R, Schmidt L Ph H and Schmidt-Böcking H, Rep. Prog. Phys. **66** (2003) 1463.
- [Vo80] Vosko S H, Wilk L, and Nusair M, Can. J. Phys. **58** (1980) 1200.
- [Vo86] Voght H, Schuch, Justiniano E Shulz M and Schwab W, Phys. Rev. Lett **57** (1986) 2256.
- [Ya79] Yajima K., Commun. Math. Phys. **69** (1979) 101.
- [Wa96] Wang Y D, Toshima N and Lin C D Phys. Scr. **T62** (1996) 63.