

# Atomi ütközési folyamatok tanulmányozása klasszikus pályájú Monte Carlo módszerrel

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

TÖKÉSI Károly

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

### ABSTRACT

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

### KIVONAT

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

### 1. BEVEZETÉS

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

### 2. ELMÉLETI ALAPOK

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

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

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

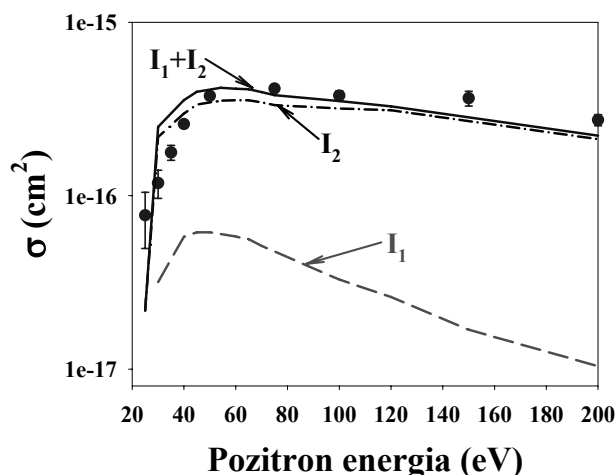
### 3. EREDMÉNYEK

#### 3.1. Elektronbefogás a lövedék folytonos állapotaiba

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

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

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



1. ábra

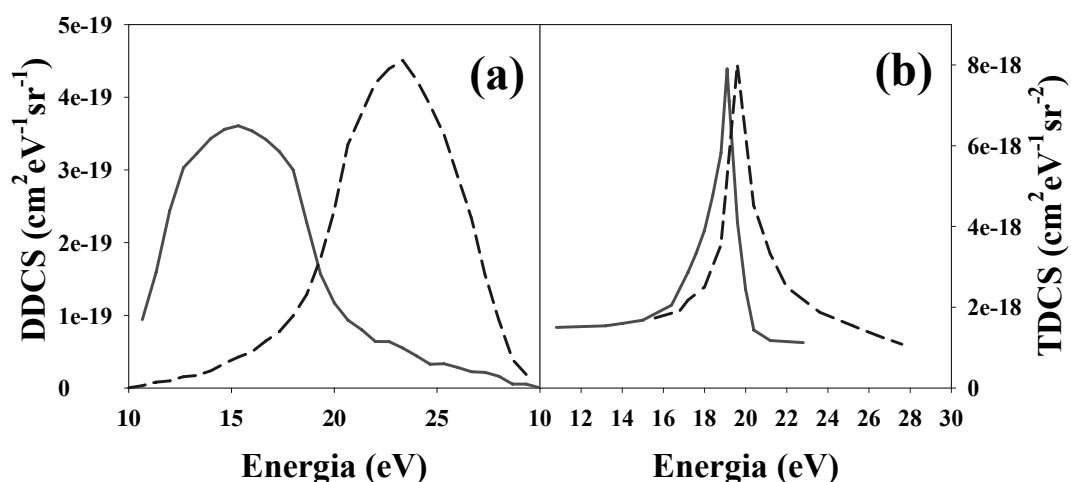
*Ar ionizációs hatáskeresztmetszete pozitron bombázás esetében.*

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

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

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

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



2. ábra

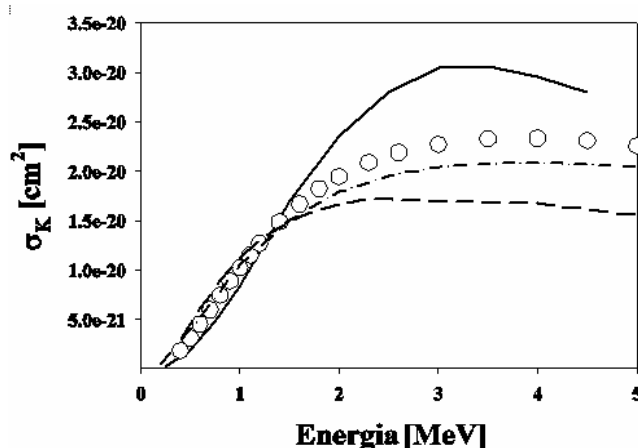
*Az  $I_1$  ionizációs folyamatban keletkezett elektronok és pozitronok differenciális hatáskeresztmetszetei 54.4 eV pozitron és Ar ütközésben,  $\theta=0^\circ$  megfigyelési irányban.*

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

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

### 3.2 Si K-héjának ionizációja

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



3. ábra

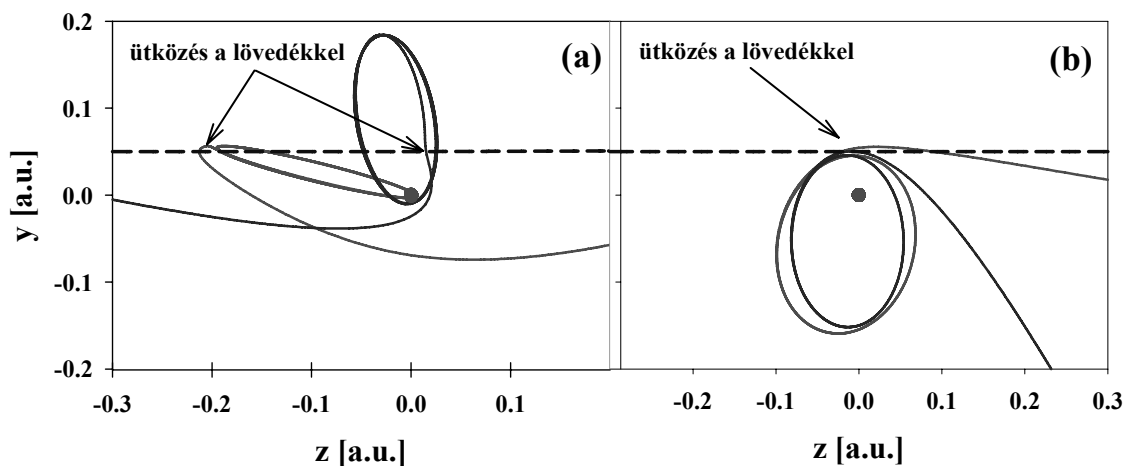
*Si K-héjának egyszeres ionizációs hatáskeresztmetszete proton bombázás esetében.*

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

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

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

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



4. ábra

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

## ÖSSZEFOGLALÁS

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

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

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

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

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

## IRODALMI HIVATKOZÁSOK

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