

Teljesen differenciális hatáskeresztmetszetek számítása félklasszikus, impakt-paraméter közelítésben

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

JÁRAI-SZABÓ Ferenc¹, NAGY László²

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

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

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

ABSTRACT

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

ÖSSZEFOGLALÓ

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

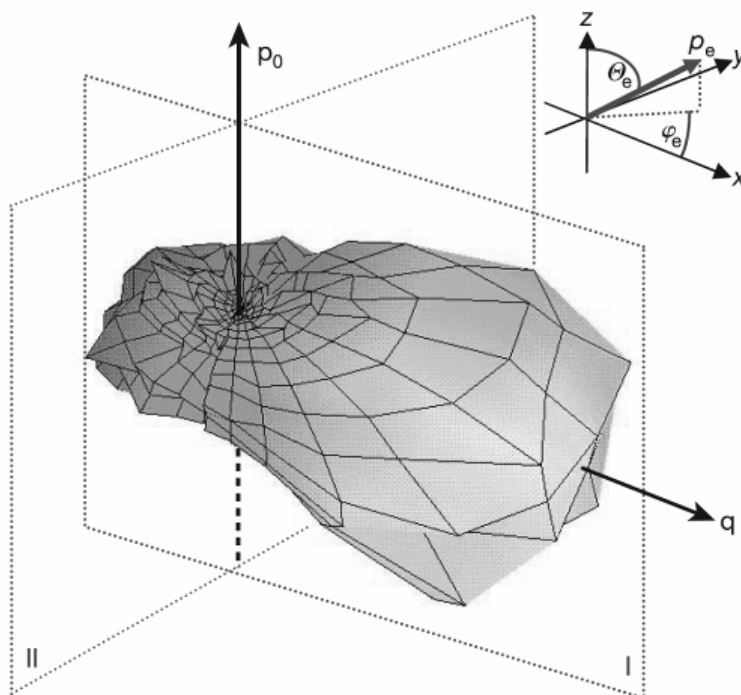
Kulcsszavak: atomi ütközések, ionizáció, hatáskeresztmetszet, impakt paraméter, héliumatom.

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

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

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

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



1. ábra

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

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

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

Elsőrendű perturbációszámítás alapján kiszámíthatjuk az ionizációs átmeneti amplitúdót, melynek kifejezése

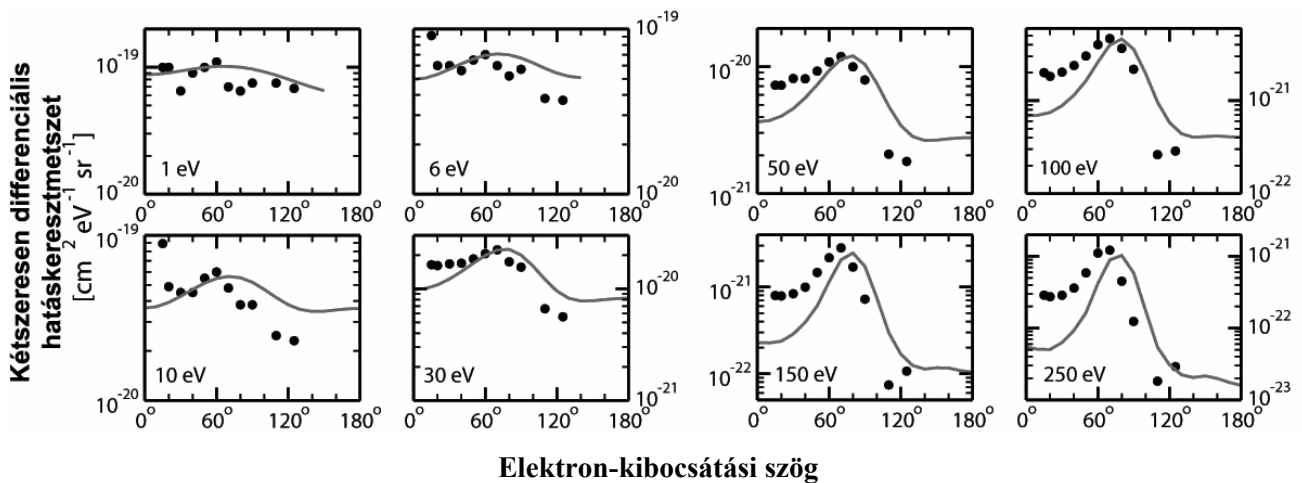
$$a^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E_f - E_i)t} \langle f | V(t) | i \rangle$$

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

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

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

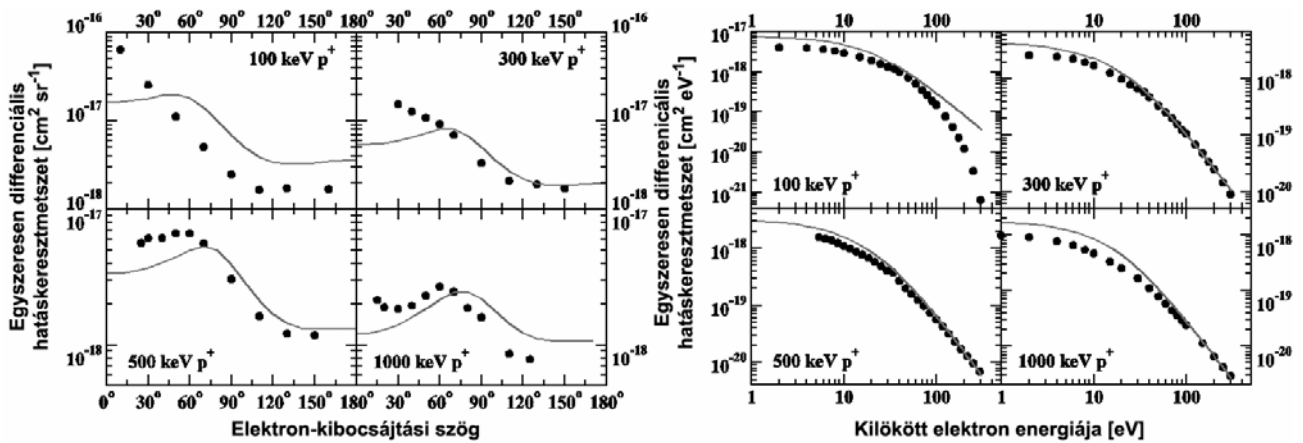
Ha az átmeneti valószínűséget kiintegráljuk az összes lehetséges impakt paraméter értékre, vagyis átlagolunk az összes lehetséges lövedékpályára, kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket kapunk. Ezek a hatáskeresztmetszetek függenek a kilökött elektron energiájának nagyságától, valamint impulzusának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



2. ábra

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

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



3. ábra

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

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

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

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

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

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

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

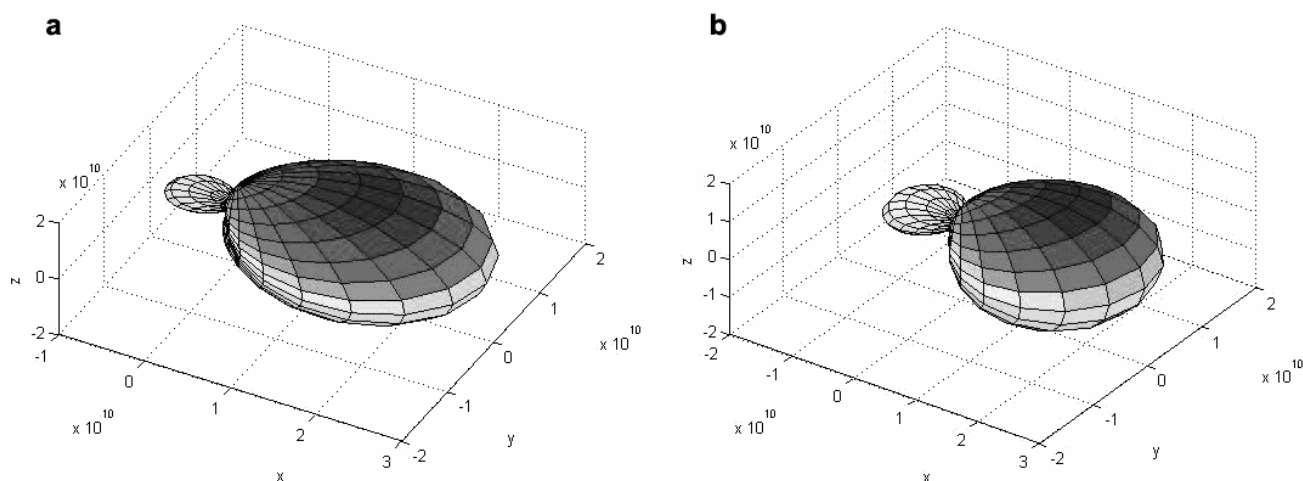
$$B = \frac{4Z_{löv} Z_{eff}}{v_0 q},$$

ahol v_0 -al a lövedék sebességét jelöljük.

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

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

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



4. ábra

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

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

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

IRODALOM

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