

Az ionizációs differenciális hatáskeresztmetszet tanulmányozása H₂ molekula esetében

Study of Ionization Differential Cross Section in Case of H₂ Molecule

PÓRA Katalin, NAGY László

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

ABSTRACT

Ionization differential cross section is investigated in case of ionization of hydrogen molecule by fast charged ion impact. There are several experimental results for Kr³⁴⁺, Kr³³⁺ ions [1, 2] and proton projectile [3, 4]. This phenomena was investigated theoretically too by several studies [5, 6, 7, 8, 9, 10]. The present paper gives a theoretical model for calculation of differential cross section using numerical methods. Performing the calculations the results are compared with the experimental ones.

ÖSSZEFOGLALÓ

A hidrogénmolekula ionizációs differenciális hatáskeresztmetszetét tanulmányozzuk gyors töltött lövedék esetében. Több kísérleti eredmény is van Kr³⁴⁺, Kr³³⁺ ionlövedékre [1, 2] illetve proton lövedékre [3, 4]. Elméleti tanulmányok is születtek a jelenség megmagyarázására és leírására [5, 6, 7, 8, 9, 10]. A jelenlegi dolgozat egy elméleti modellt dolgoz ki a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet kiszámolására. Az így kapott eredményeket összehasonlítjuk a kísérleti-ekkel.

Kulcsszavak: ionizáció, hatáskeresztmetszet, hidrogénmolekula, interferencia

BEVEZETŐ

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

A hidrogénmolekula gyors, töltött részecskével történő ionizációja során fellépő interferenciahatás kapcsán több kísérleti eredmény született. Lövedéknek használtak Kr³⁴⁺-t [1], Kr³³⁺-t [2] és protont [3, 4]. Elméleti eredmények is vannak e téren [5, 6, 7, 8, 9, 10].

Az általunk kidolgozott analitikus számolások [7] jól igazolták az interferenciahatást, és viszonylag jó egyezést eredményeztek a kísérletileg kapott hatáskeresztmetszettel. A jelenlegi munkánkban megpróbáljuk egy más módszerrel kiszámolni a differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetet annak érdekében, hogy a kísérletihez közelebbi eredményt kapjunk. Mivel magas lövedékenergiákkal számolunk, a lövedék pályáját egyenes vonalúnak feltételeztük, míg a célmolekulában levő részecskék leírására kvantummechanikai formalizmust használtunk, vagyis félklasszikus (impakt paraméter) közelítést alkalmazunk. A lövedék kölcsönhatását ezekkel a részecskékkel perturbációnak vesszük, melynek hatására a célmolekula kvantumállapota megváltozik. A H₂ kezdeti állapotának leírására Heitler–London típusú molekula-hullámfüggvényt alkalmaztunk. A kilökött elektron végállapotát a molekula középpontjára centrált Coulomb-hullámfüggvény adja meg.

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

ELMÉLET

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

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

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

A H₂ molekula alapállapotát kétcentrumú, atomi hullámfüggvényekből felírt Heitler–London típusú molekuláris hullámfüggvénnyel írjuk le. D -vel jelölve a molekulában a két mag közti távolságot és α -val az effektív töltést, a hullámfüggvény a következőképpen írható:

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

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

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

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

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

ahol \mathbf{k} a kilökött elektron impulzusa.

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

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

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

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

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

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

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

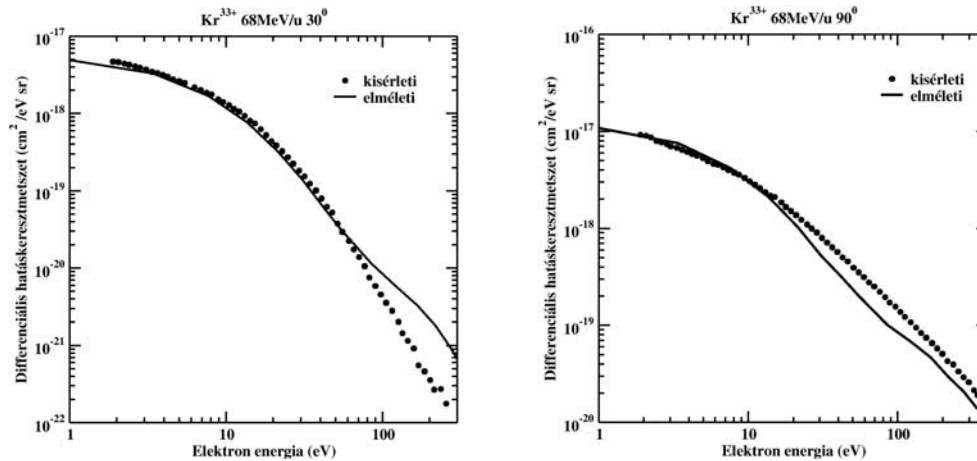
Az átmeneti amplitúdó modulusának négyzetét integrálva a D szögei, a b impact paraméter φ_b azimutális szöge szerint megkapjuk a kilökött elektron impulzusa és szóródási szöge szerinti differenciális hatáskeresztmetszetet:

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

EREDMÉNYEK

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

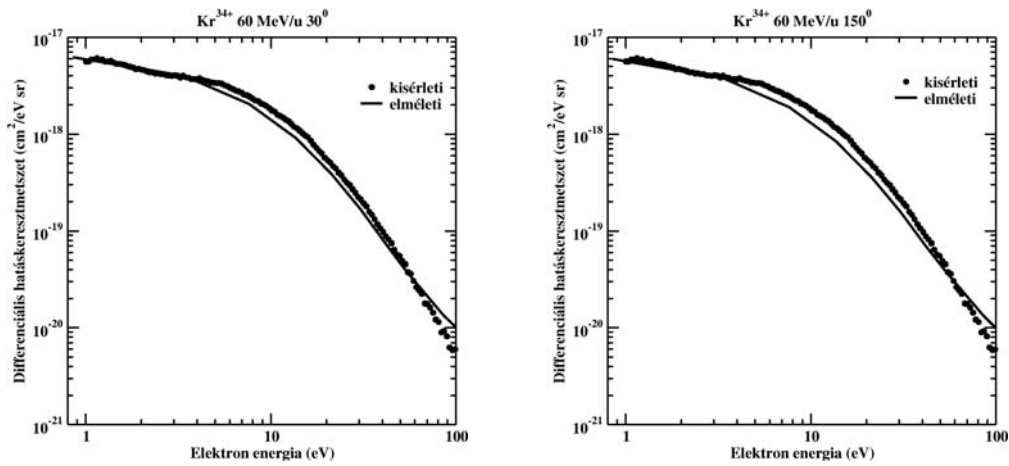
A 1. ábrán látható a differenciális hatáskeresztmetszet a kilökött elektron energiájának függvényében. Lövedéknek a 68 MeV/u energiájú Kr^{33+} iont vettük, míg a kilökött elektron szóródási szöge 30° és 90° . A pontok jelképezik a kísérleti eredményeket [2], míg a csillag az általunk számolt eredményeket.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



1. ábra

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

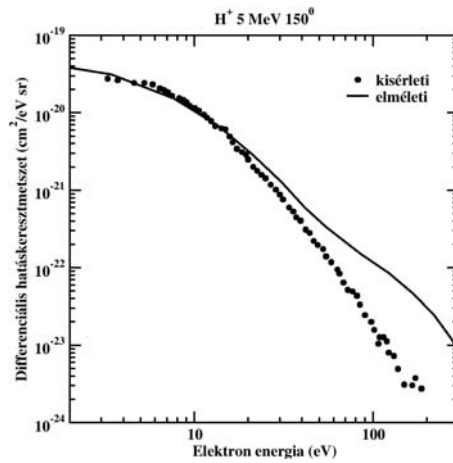
A 2. ábrán ugyancsak az általunk számolt differenciális hatáskeresztmetszet van feltüntetve a kísérleti eredmény [1] mellett. A lövedék ebben az esetben 60 MeV/u energiájú Kr^{34+} ion, a kilökött elektron szóródási szöge 30° és 150° . Ebben az esetben is a mi eredményeink jól visszaadják a kísérletileg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



2. ábra

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

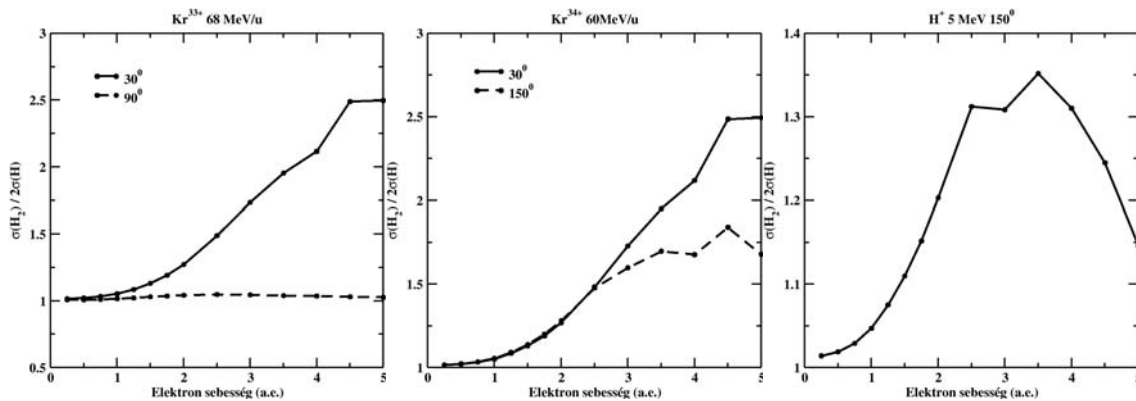
A 3. ábrán a differenciális hatáskeresztmetszetet 5 MeV energiájú H^+ lövedék esetén ábrázoltuk, a kilökött elektron szóródási szöge pedig 150° . Látható, hogy ebben az esetben is alacsony elektronenergián jó az egyezés a kísérleti [3] értékekkel.



3. ábra

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

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



4. ábra

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

KÖVETKEZTETÉSEK

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

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

Póra Katalin munkáját a Sapientia Alapítvány Kutatási Programok Intézete támogatja.

HIVATKOZÁSOK

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