

# Molekulák pozitronnal történő ionizációja

## Ionization of Molecules by Positron Impact

TÓTH István<sup>1</sup>, Radu I. CAMPEANU<sup>2</sup>, Vasile CHIȘ<sup>1</sup>, NAGY László<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Babeș-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar,  
Kolozsvár 400084, Kogălniceanu 1, Románia, <sup>\*</sup>nagy@phys.ubbcluj.ro

<sup>2</sup> Department of Physics and Astronomy, York University,  
4700 Toronto, Keele Street, ON Canada

### ABSTRACT

*We have refined previously performed calculations for the positron impact ionization of the N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> molecules. In the framework of the DWBA method we have calculated the wavefunctions of the incoming and outgoing particles numerically in the spherically averaged, screened field of the molecule. Present results are in very good agreement with experiment for the N<sub>2</sub> and CO molecules, while the results for the CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> molecules need more improvements.*

### ÖSSZEFOGLALÓ

*A torzított hullámú Born közelítést (DWBA) alkalmaztuk az N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák pozitron lövedékekkel történő ionizációs folyamatának leírására. A módszer keretében valószerűbb hullámfüggvényekkel írtuk le a lövedéket, a szórt pozitront illetve a kilökött elektront. Az így kapott ionizációs hatáskeresztmetszetek nagyon jó egyezést mutatnak a kísérletileg mért hatáskeresztmetszetekkel az N<sub>2</sub> és a CO molekulák esetén, míg a CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák eredményei további javításokat igényelnek.*

**Kulcsszavak:** Pozitron; Ionizáció; Torzított hullámú Born közelítés; Több-centrumú hullámfüggvény

### 1. BEVEZETŐ

A molekulák pozitronnal történő ionizációja viszonylag új kutatási terület. Az utóbbi évtizedek során több ilyen jellegű kísérletet végeztek [1-5], vizsgálva a H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, és O<sub>2</sub> molekulák pozitron lövedékekkel való ionizációját. Elméleti szempontból a pozitronnal történő ionizáció tanulmányozása egyszerűbb mint az elektronok előidézte ionizáció, ugyanis ebben az esetben nem lép fel a szórt pozitron és a kilökött elektron között a kicserélődési kölcsönhatás. Az utóbbi évek során több olyan tanulmány született, amely az említett molekulák pozitron általi ionizációját vizsgálta. Ezek a tanulmányok [6-9] a CPE (Coulomb plus plane waves with full energy range) modellt alkalmazták az ionizációs folyamat leírására. A CPE modell keretében a kilökött elektront Coulomb-típusú hullámfüggvénnyel írták le, míg a szórt pozitron leírására síkhullámot vagy Coulomb-típusú hullámfüggvényt alkalmaztak. Továbbá, az aktív elektron kezdeti állapotának a jellemzésére többcentrumú, Gauss-típusú hullámfüggvényeket alkalmaztak. A számítások egyszerűsítése végett, a többcentrumú hullámfüggvényeket sorba fejtették a Legendre-polinomok, vagy a gömbfüggvények szerint (a nem lineáris molekulák esetén). A CPE modell szolgáltatja elméleti hatáskeresztmetszetek jó egyezést mutattak a H<sub>2</sub> [6] és CO [7] molekulák esetében a kísérleti hatáskeresztmetszetekkel, azonban a CO<sub>2</sub> [7], N<sub>2</sub> [8] és CH<sub>4</sub> [9] molekulákra számolt elméleti eredmények nagyobbak voltak a kísérleti értékeknél.

A kísérlettel való jobb egyezés elérésének érdekében, jelen tanulmány során az N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák pozitronnal történő ionizációja esetén, alkalmaztuk a DWBA (Distorted Wave Born Approximation) módszert. A módszer keretében valószerűbb hullámfüggvényekkel írtuk le a lövedéket, a szórt pozitront illetve a kilökött elektront. Ezt úgy valósítottuk meg, hogy az atommagok illetve az elektronok keltette valódi potenciált szférikusan átlagoltuk, és a szabad részecskék kezdeti valamint végállapotú hullámfüggvényeit ebben az árnyékolt térben, numerikusan határoztuk meg. Ezen átlagolt tér hatását külön vizsgáltuk a kilökött elektron illetve a szórt pozitron esetén. Az így kapott eredmények nagyon jó egyezést mutatnak

a kísérleti adatokkal az N<sub>2</sub> és CO molekulák esetén, míg a CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák eredményei további javításokat igényelnek. Az itt közölt eredmények, a [10]-es tanulmányban mutattuk be.

## 2. ELMÉLET

Valamely molekula pozitronnal való ionizációjának részletes elméleti leírása a már említett [6-9] tanulmányokban található meg. Itt röviden felvázoljuk az ionizációs hatáskeresztmetszetek kiszámításának főbb lépéseit, kiemelve a jelenleg bevezetett elméleti modell sajátosságait.

A teljes ionizációs hatáskeresztmetszet kiszámítása érdekében a háromszorosan differenciális hatáskeresztmetszet képletéből indultak ki

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_f d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} = \sum_r \frac{(2\pi)^4}{E_i} |f_r|^2 \quad (1)$$

Itt  $E_i$  a lövedék energiáját jelöli,  $E_e$  pedig a kilökött elektronét.  $\hat{\mathbf{k}}_e$  illetve  $\hat{\mathbf{k}}_f$ -el jelöltük a kilökött elektron illetve a szórt pozitron hullámvektorainak a lövedék irányegyenesével bezárt szögeit. Az  $r$  szerinti összegzést a betöltött molekula-orbitálokra végezzük. A szórás amplitúdó felírható mint

$$f_r = \langle \phi_f(\mathbf{r}_1) \phi_e(\mathbf{r}_2) | V(r_{12}) | \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_r(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (2)$$

ahol  $\phi_i$  és  $\phi_f$  a pozitron kezdeti illetve végállapotának hullámfüggvényei, míg  $\phi_e$  jelöli a kilökött elektron állapotát.  $\phi_r$  az aktív elektron kezdeti állapotát jelenti. A pozitron helyzetvektorát  $\mathbf{r}_1$ -el míg a kilökött elektronét  $\mathbf{r}_2$ -vel jelöltük. Az aktív elektron kezdeti állapotát többcentrumú, Gauss-típusú hullámfüggvények írják le. A számítások egyszerűsítése végett, a többcentrumú hullámfüggvényeket sorba fejtettük a Legendre-polinomok (a lineáris molekulák esetén), vagy a gömbfüggvények szerint (a nem lineáris molekulák esetén)

$$\phi_r(\mathbf{r}_2) = \sum_{l_b} c_{l_b}(r_2, R_0) P_{l_b}(\cos \omega_2) \quad (3)$$

$$\phi_r(\mathbf{r}_2) = \sum_{l_b \mu} c_{l_b \mu}(r_2) Y_{l_b \mu}(\hat{r}_2) \quad (4)$$

Itt  $R_0$  az atommagok közötti távolság,  $\omega_2$  az  $\mathbf{r}_2$  és  $\mathbf{R}_0$  közötti szög.  $c$ -vel a kifejtési együtthatókat jelöltük. Továbbá, a teljes ionizációs hatáskeresztmetszet kiszámításához, az (1) képlettel megadott differenciális hatáskeresztmetszetet kell integrálni a szórt pozitron és a kilökött elektron hullámvektorainak irányai szerint, valamint a kilökött elektron energiája szerint.

Az eddigi tanulmányok a CPE modellt alkalmazták az ionizációs folyamat leírására. A CPE modell feltetelezi, hogy a lövedék a semleges molekula terében mozog. Továbbá, ha a szórt pozitron gyorsabb mint a kilökött elektron, akkor az előbbi ugyancsak a semleges molekula terében mozog, míg az utóbbi a molekulaion egységnyi töltésének a terében. Ha a kilökött elektron energiája nagyobb mint a szórt pozitroné, akkor az elektron két töltés terében mozog (a molekulaion illetve a pozitron töltésének a terében), míg a szórt pozitron a molekulaion keltette potenciál terében fog mozogni.

A jelen tanulmány során a DWBA módszert alkalmaztuk az ionizációs folyamat jellemzésére. A módszer keretében szférikusán átlagoltuk az atommagok és az elektronok keltette valódi potenciált. A lövedék, a szórt pozitron és a kilökött elektron hullámfüggvényeit úgy határoztuk meg, hogy numerikusan oldottuk meg a radiális Schrödinger-egyenletet ebben az árnyékolt potenciálban.

A továbbiakban két modell segítségével, fokozatosan vezettük be a szférikusán átlagolt potenciálnak a bejövő illetve a szórt és kilökött részecskék hullámfüggvényeire gyakorolt hatását.

Az első modell úgy tekinti a kilökött elektront, hogy az a magok és a maradék elektronok szférikusán átlagolt terében mozog, ha a szórt pozitron gyorsabb mint az elektron. Ekkor a pozitron a semleges molekula terében mozog. Ha a kilökött elektron a gyorsabb, akkor ez a magok és a pozitron töltése illetve a maradék elektronok által keltett potenciálban mozog, míg a szórt pozitron csak a molekulaion hatását érzékeli. Végül, a lövedék a semleges molekula terében mozog. Mivel ez a modell csak a kilökött elektron hullámfüggvénye esetén alkalmazza az árnyékolt potenciál hatását, elektron-árnyékoló (ES – Electron Screening) modellnek neveztük el. Matematikailag az ES modellt a következőképpen lehet megfogalmazni

$$V_i = 0,$$

$$\begin{cases} V_f = 0 \\ V_e = V_{magok} + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_f > E_e$$

$$\begin{cases} V_f = \frac{1}{r'} \\ V_e = V_{magok} (+) + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_e > E_f,$$

ahol az  $f$  index a szórt pozitronra, az  $e$  a kilökött elektronra és az  $i$  index a lövedékre vonatkozik.  $V_{elektronok} (-)$  a maradék elektronrendszer keltette átlagolt potenciált,  $V_{magok} (+)$  az atommagok és a pozitron által keltett potenciált jelöli.  $E_e, E_f$  a kilökött elektron illetve a szórt pozitron energiája.

A második modell keretében a kilökött elektron az atommagok és a maradék elektronok terében mozog, ha a szórt pozitronnak nagyobb az energiája. Ekkor a szórt pozitron a magok és az összes elektron átlagolt terében mozog. Ha a kilökött elektron energiája a nagyobb, akkor ez a magok és a pozitron illetve a maradék elektronok árnyékolt terében mozog, míg a szórt pozitron a magok és a maradék elektronok keltette átlagolt potenciál hatását érzékeli. Végül, a lövedék a magok és a teljes elektronrendszer átlagolt terében fog mozogni. Ebben az esetben az árnyékolt potenciált mindegyik szabad részecske hullámfüggvényének a kiszámításánál alkalmaztuk, ezért ennek a modellnek a teljesen-árnyékoló modell (TS – Total Screening) elnevezést adtuk. Ennek matematikai megfogalmazása.

$$V_i = V_{magok} + V_{elektronok}$$

$$\begin{cases} V_f = V_{magok} + V_{elektronok} \\ V_e = V_{magok} + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_f > E_e$$

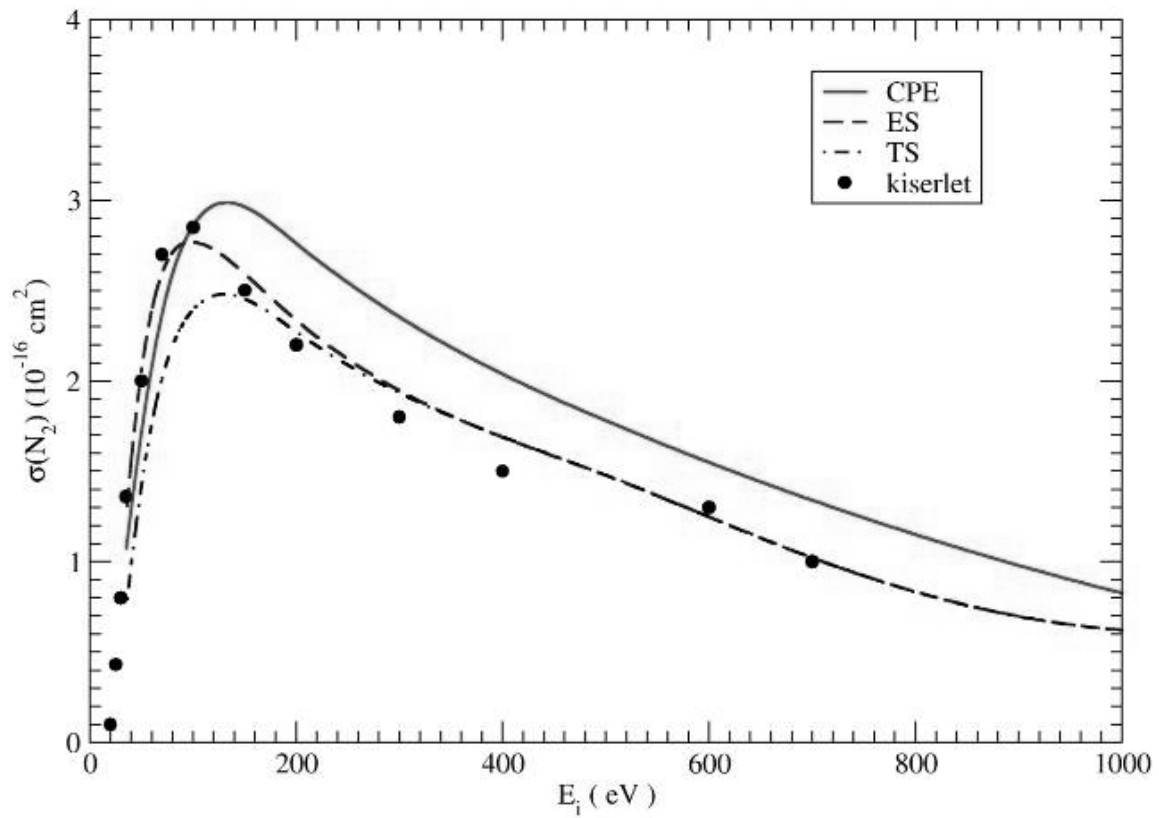
$$\begin{cases} V_f = V_{magok} + V_{elektronok} (-) \\ V_e = V_{magok} (+) + V_{elektronok} (-) \end{cases}, \text{ ha } E_e > E_f$$

A jelölések ugyanazok mint az (5) képletek esetén.

### 3. EREDMÉNYEK

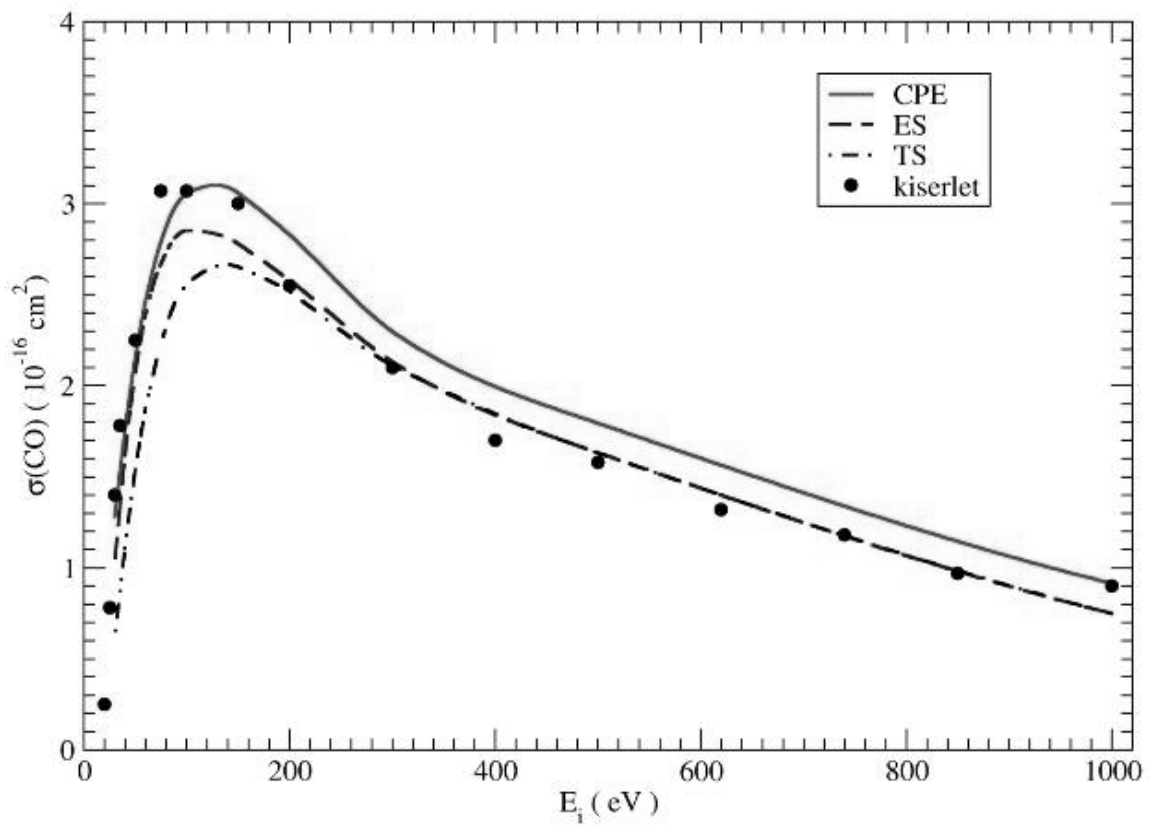
Az 1, 2, 3 és 4 ábrákon a teljes ionizációs hatáskeresztmetszeteket ábrázoltuk a lövedék energiájának a függvényében a tanulmányozott molekulák esetén. Az ábrák a CPE, ES illetve a TS modelleknek megfelelő hatáskeresztmetszeteket valamint Bluhme et al. [1] kísérleti adatait mutatják.

Az 1. ábra az  $N_2$  molekulára kapott eredményeket rögzíti. Ebben az esetben az ES modell alkalmazása a kísérleti adatokkal nagyon jól egyező eredményekhez vezet. A CPE modell 100 eV-nál kisebb energiákon vezet a kísérlettel való egyezéshez. Végül a TS modell csak a hatáskeresztmetszet maximumának környékén és alacsony energiákon tér el az ES modell eredményeitől.



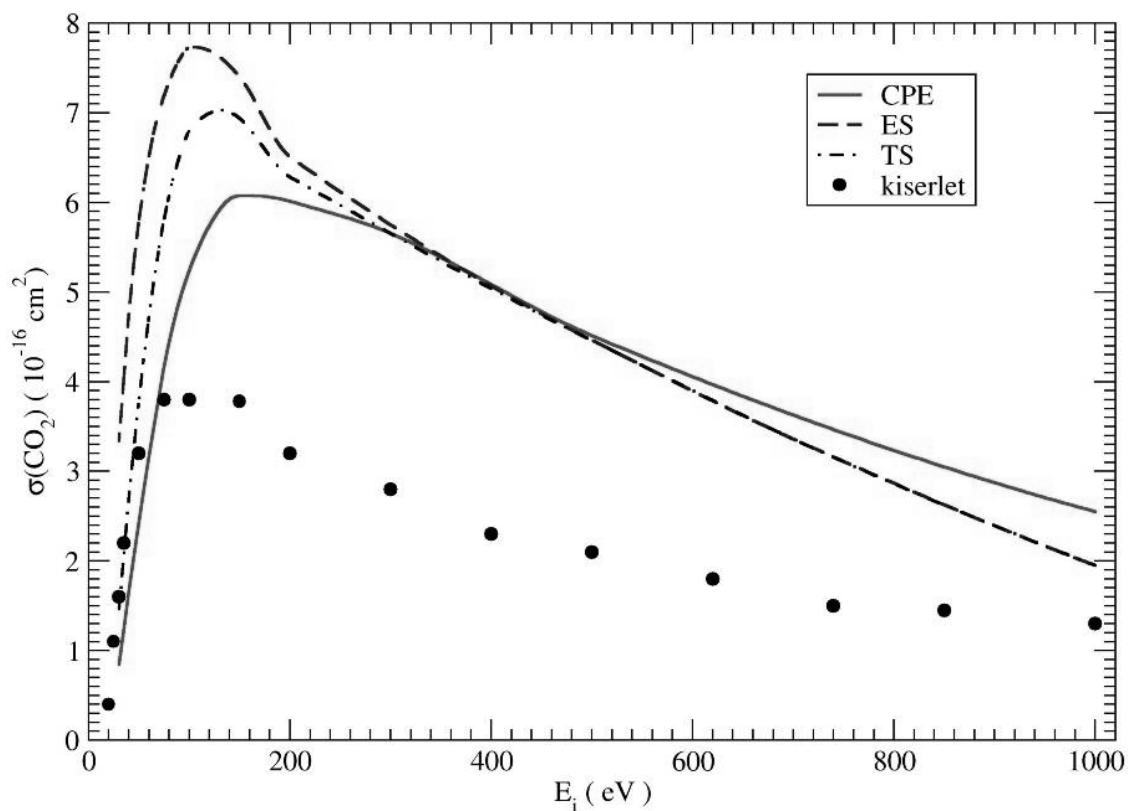
1. ábra

Az  $N_2$  molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(N_2)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1] -től származnak



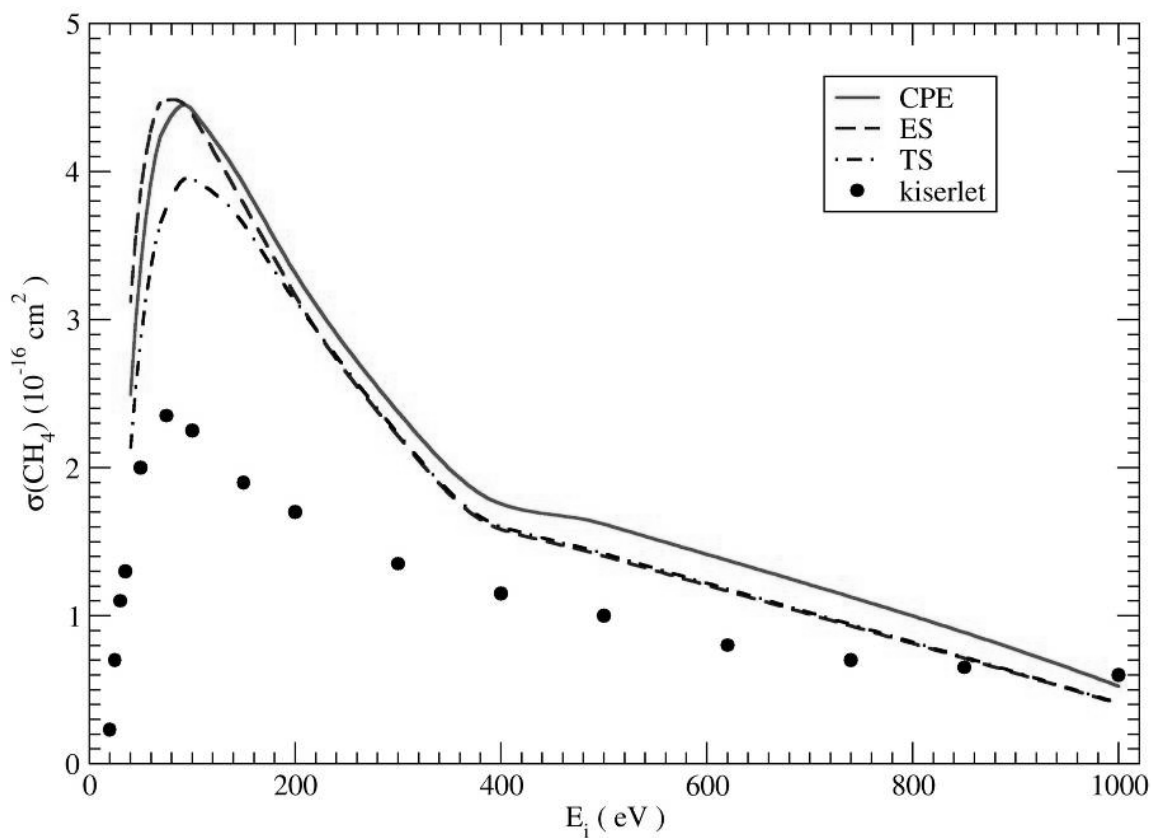
2. ábra

A CO molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(CO)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1] -től származnak



3. ábra

*A CO<sub>2</sub> molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(\text{CO}_2)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1] -től származnak*



4. ábra

*A CH<sub>4</sub> molekula teljes ionizációs hatáskeresztmetszete ( $\sigma(\text{CH}_4)$ ) a lövedék energiájának ( $E_i$ ) a függvényében.  
A kísérleti adatok Bluhme et al. [1] -től származnak*

A 2. ábra a CO molekula esetén kapott eredményeket mutatja. 200 eV-nál nagyobb energiákon az ES és TS modellek eredményei jobb egyezést mutatnak a kísérleti értékekkel mint a CPE eredmények. A maximum környékén illetve kis energiákon a CPE modell egyezik jobban a kísérlettel.

A CO<sub>2</sub> molekula ionizációs hatáskeresztmetszeteit a 3. ábrán rögzítettük. Ezen molekula esetében a torzított hullámokat alkalmazó modelljeink a kísérleti eredményektől jelentős mértékben eltérő eredményekhez vezetnek. A CPE modell alacsonyabb hatáskeresztmetszet-értékeket szolgáltat, azonban a kísérlettől való eltérés ebben az esetben is jelentős. A kísérlet és elmélet közti nagy eltérés oka a CO<sub>2</sub> molekula nagy méretében rejlik illetve abban, hogy a kilökött elektron hullámfüggvényét egy-centrumú, szférikus potenciálban határoztuk meg. Egy lehetséges megoldás lehet a kilökött elektron több-centrumú hullámfüggvényekkel való leírása.

Végül, a 4. ábrán a CH<sub>4</sub> molekulára kapott eredmények láthatók. 800 eV alatti energiákon az ES és TS modellek jelentős eltérést mutatnak a kísérletileg mért hatáskeresztmetszetektől. A maximum környékén a TS modell alacsonyabb értékeket szolgáltat mint a CPE és ES modell.

#### 4. KÖVETKEZTETÉSEK

A jelen tanulmány során a DWBA módszert alkalmaztuk az N<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> és CH<sub>4</sub> molekulák pozitronokkal való ionizációjának a tanulmányozására. A módszer keretében a lövedék, a szórt pozitron illetve a kilökött elektron hullámfüggvényeit egy szférikusan átlagolt, árnyékolt térben határoztuk meg. A tanulmányozott molekulák esetén javított eredményeket kaptunk az előzőleg alkalmazott CPE modell eredményeihez képest, ahol a szabad részecskék leírására Coulomb-típusú hullámfüggvényeket vagy síkhullámokat alkalmaztak. Ezek a javítások főleg a nagyobb impakt-energiák tartományában egyértelműek. Az eredmények azt sugallják, hogy a torzított hullámokat alkalmazó modelljeink főleg a kétatomos molekulák esetén működőképesek. Az N<sub>2</sub> és CO molekulára kapott eredmények nagyon jó egyezést mutatnak a kísérleti adatokkal, azonban a CH<sub>4</sub> molekula esetén is tapasztaltunk javulást. Továbbra is fennmaradt a kísérleti és elméleti eredmények közti jelentős eltérés a CO<sub>2</sub> molekula esetében. Úgy találtuk, hogy az eltérés oka a molekula nagy méretében rejlik. Egy lehetséges megoldást jelenthet ebben az esetben a kilökött elektron állapotának a jellemzése több-centrumú hullámfüggvényekkel.

#### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Tóth István munkáját a Sapientia Alapítvány Kutatási Programok Intézete támogatta.

#### HIVATKOZÁSOK

- [1] H. Bluhme, N. P. Frandsen, F. M. Jacobsen, H. Knudsen, J. Merrison, R. Mitchell, K., Paludan, M. R. Poulsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32** (1999) 5825.
- [2] H. Knudsen, L. Brun-Nielsen, M. Charlton, M. R. Poulsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt., Phys. **23** (1990) 3955.
- [3] J. Moxom, P. Ashley, G. Laricchia, Can. J. Phys. **74** (1996) 367.
- [4] F. M. Jacobsen, N. P. Frandsen, H. Knudsen, U. Mikkelsen, D. M. Schrader, J. Phys., B: At. Mol. Opt. Phys **28** (1995) 4675.
- [5] G. Laricchia, J. Moxom, M. Charlton, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 3229.
- [6] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Phys. Lett. A **310** (2003) 445.
- [7] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Phys. Lett. A **344** (2005) 247.
- [8] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Nucl. Instr. Meth. B **221** (2004) 21.
- [9] R. I. Campeanu, V. Chis, L. Nagy, A. D. Stauffer, Nucl. Instr. Meth. B **247** (2006) 58.
- [10] I. Tóth, R. I. Campeanu, V. Chiş and L. Nagy, Phys. Lett. A, **360** (2006) 131.