

A H₂ molekula egyszeres ionizációja e⁺ és e⁻ lövedékekkel történő ütközéssel

Nagy Szilárd

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kolozsvár

Kivonat. Ebben a cikkben bemutatjuk a H₂ molekula egyszeres ionizációjára végzett hatáskeresztmetszet számításainkat a torzított hullámú Born-közelítés segítségével. A molekula lapállapotának leírására kétcentrumú Heitler-London típusú hullámfüggvényt használtunk. e⁻ lövedék esetén a kicserélődést elhanyagoltuk. Eredményeinket összehasonlítottuk Fromme [1] és Moxom [2] kísérleti eredményeivel, valamint más elméleti számításokkal.

Bevezetés

Az ütközési folyamatok szisztematikus tanulmányozása képezi az információszerzés alapját az erős-, elektromágneses- és gyenge-kölcsönhatások kutatásakor. Ütközési kísérleti eredményeknek köszönhetjük mai modern képünket az anyagról, azt, hogy az anyag kvarkokból és leptonokból áll.

A pozitron illetve elektron lövedékekkel megvalósított ionizációs folyamatok jó néhány tudományos dolgozat témájául szolgáltak az utóbbi években. Viszont nagyon kevés ezek közül azon munkák száma ahol a céltárgy molekulákból áll.

Kísérleti méréseket a H₂ molekulán több kutatócsoport is végzett a kilencvenes években, mi a Fromme [1] és a Knudsen [3] által vezetett kutatócsoportok eredményeivel hasonlítottuk össze eredményeinket. Elméleti számításokat erre a folyamatra Chen és társai [4-5], valamint Campeanu [6] és társai tettek közzé. Eredményeik többé-kevésbé összhangban vannak a kísérletekkel.

Mi a DWBA (Distorted wave-Born approximation) módszert alkalmaztuk az ionizációt jellemző T mátrix elemeinek a kiszámítására. Ezzel a módszerrel kiszámítottuk a teljes ütközési hatáskeresztmetszetet e⁺ és e⁻ lövedék esetén. e⁻ lövedék esetén az elektron kicserélődést nem vettük figyelembe. Az általunk kapott eredményeket összehasonlítottuk a kísérleti eredményekkel valamint más elméleti számításokkal. A molekula kezdeti kötött állapotát Heitler-London típusú kétcentrumú molekuláris hullámfüggvénnyel jellemeztük [8]. A végállapot leírására összesen hat különböző közelítéssel próbálkoztunk. Az alkalmazott közelítéseket két nagy csoportba sorolhatjuk, a CCA-típusú és a CPE-típusú közelítések. Ezek jelentéséről a következő bekezdésben részletesen beszélünk.

Elméleti alapok

A teljes hatáskeresztmetszet a következőképpen írható:

$$\int_0^E \sigma(E_e) dE_e. \quad (1)$$

ahol $E = E - I$ a kilökött e⁻ maximális mozgási energiája és I az ionizációs energia. Az energia szerinti differenciális hatáskeresztmetszetet felírjuk a parciális hullámok amplitúdóinak segítségével πa_0^2 egységekben:

$$\sigma(E_e) = \frac{16}{\pi E_e} \sum_{l_i l_b l_e l_f L} (2L+1) |f_{l_i l_b l_e l_f L}(E_e)|^2. \quad (2)$$

ahol l_i és l_f a lövedék kezdeti illetve végállapotát jellemző melékkvantumszámok, l_b a kötött elektront, míg l_e a kilökött elektront jellemzi. L a teljes orbitális impulzusmomentumot jellemzi. Az $f_{l_i l_b l_e l_f L}(E_e)$ ionizációs amplitúdó, ami egy orbitális faktorból és egy radiális részből áll:

$$f_{l_i l_b l_e l_f L}(E_e) = -Z \sum_{\lambda} f_{\lambda}(l_i l_b l_e l_f L) \int dr_1 dr_2 y_f(r_1) y_e(r_2) \frac{r_{\leq}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} y_i(r_1) y_b(r_2). \quad (3)$$

ahol f_λ orbitális faktor a következő alakú lesz:

$$f_\lambda(l_i l_b l_e l_f L) = (-1)^{l_b + l_e - L} \sqrt{(2l_i + 1)(2l_f + 1)(2l_b + 1)(2l_e + 1)(2L + 1)} \\ \left(\begin{matrix} l_i & l_f & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} l_b & l_e & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left\{ \begin{matrix} l_b & l_i & L \\ l_f & l_e & \lambda \end{matrix} \right\}. \quad (4)$$

Az $y(r)$ -ek radiális hullámfüggvényeket jelentenek melyekre még visszatérünk a következő bekezdésben.

Modellek és módszerek

Egy korábbi számításához hasonlóan [7], a molekula alap-állapotát Shull és Ebbing [8] Heitler-London típusú hullámfüggvényeivel írtuk le:

$$\Psi(r_1, r_2) = N[\varphi_a(r_1)\varphi_b(r_2) + \varphi_b(r_1)\varphi_a(r_2)]. \quad (5)$$

ahol φ a hidrogén atom s állapotára felírt hullámfüggvény.

A φ_a és φ_b összegét sorba fejtettük a Legendre polinomok szerint:

$$\varphi_a(r_2) + \varphi_b(r_2) = \sum_{l_b} C_{l_b}(r_2, R_0) P_{l_b}(\cos \omega). \quad (6)$$

ahol ω a lövedék pályája és a molekula tengelye \hat{R}_0 által bezárt szöget jelenti.

A kifejtési együtthatót a következő integrálból számíthatjuk ki:

$$C_{l_b}(r_2, R_0) = \frac{2l_b + 1}{2} \int_{-1}^{+1} dx P_{l_b}(x) \left\{ \exp \left[-\xi \left(r_2^2 + \frac{R_0^2}{4} - r_2 R_0 x \right)^{\frac{1}{2}} \right] + \exp \left[\xi \left(r_2^2 + \frac{R_0^2}{4} + r_2 R_0 x \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} \quad (7)$$

ahol $\xi = 1.165$ és $R_0 = 1.42$. Megfigyelhető, hogy így különválik a molekulatengely \hat{R}_0 iránya szerinti függés. A homonukleáris H_2 molekula esetében a 7 sz. integrál csak l_b páros értékeire fog különbözni nullától. Mi a számításainkat $l_b = 0$ -ra és $l_b = 2$ -re végeztük, ami megfelel a monopólus illetve quadropólus járulékoknak. A 3 sz. képletben szereplő folytonos állapot radiális hullámfüggvényeket numerikusan állítottuk elő megoldva az alábbi radiális Schrödinger egyenletet:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V_x(r) \right] y_x(r) = E_x y_x(r). \quad (8)$$

ahol $x \equiv i, f$ vagy e .

A lövedék-elektron kölcsönhatást a szokásos módon fejtettük sorba (multipólus sorfejtés):

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{\lambda} \frac{4\pi}{2\lambda + 1} \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} \sum_{\mu} Y_{\lambda\mu}(\hat{r}_1) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{r}_2). \quad (9)$$

A lövedékrészecske hullámfüggvényének a megválasztása nem nagyon lényeges, mi a számításaink során egyszerű síkhullámokkal illetve Coulomb hullámokkal dolgoztunk. A 8 sz. egyenletet összesen hat különböző közelítésben oldottuk meg, ami a végállapot hat különböző reprezentációjának felel meg. Az 1. sz. táblázatban feltüntettük a CCA-szerű közelítések esetén használt potenciálokat. A CCA közelítés azt jelenti, hogy a végállapotban mindkét részecske, a szóródott lövedék és kilökött elektron a reziduális ion terében egymástól

függetlenül, szabadon mozog. Ez a modell eléggé pontatlan, mert nem veszi figyelembe a maradékmolekulá-ion leárnnyékolásának lehetőségét.

1. Táblázat.

Approximation	E_i	E_f	E_e
CCA	0	$1/r_1$	$-1/r_2$
CCA*	0	$2/r_1-V(r)$	$-2/r_2+V(r)$
CCA**	$2/r_1-V(r)$	$2/r_1-V(r)$	$-1/r_2+V(r)$

A CPE-modellben a reziduális iont mindig leárnnyékolja a lassabban mozgó részecske. A potenciálok teljes listája a 2. sz. táblázatban van feltüntetve.

2. Táblázat.

Approximation	$E_e < E_f$			$E_e > E_f$		
	V_i	V_f	V_e	V_i	V_f	V_e
CPE	0	0	$-1/r_2$	0	$1/r_1$	$-2/r_2$
CPE*	0	0	$-1/r_2+V(r)$	0	0	$-1/r_2+V(r)$
CPE4	0	0	$-(1-E_e/E_{ef})/r_2$	0	$1/r_1$	$-2/r_2$

A táblázatban előforduló $V(r)$ jelenti a statikus potenciált amivel az elektronfelhőt jellemeztük.

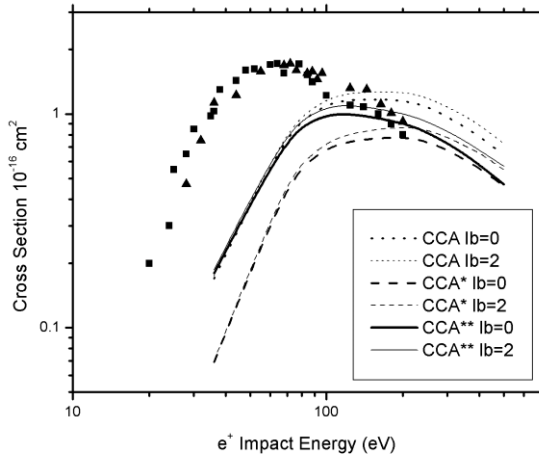
$$V(r) = \int dr_3 \frac{|\Psi(r_3)|^2}{|\rho_2 - \rho_3|} \tag{10}$$

és E_{ef} értékét pedig a következő egyszerű kifejezés adja meg: $E_{ef} = E_e + E_f - 2\sqrt{E_e E_f}$.

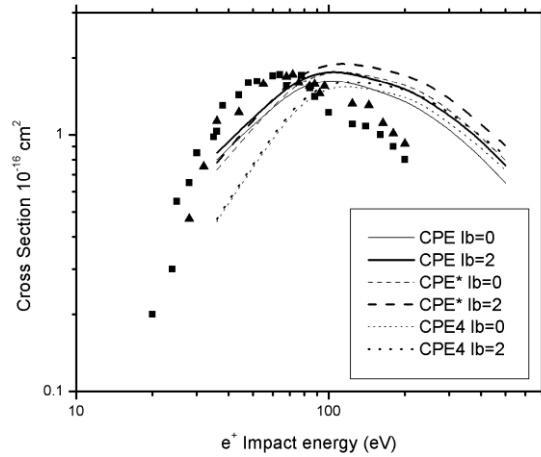
E modellek közül a legrafináltabbnak a CPE4 tűnik. Ebben a közelítésben a kilökött elektron mindig a maradék-ion és a szóródott lövedék kombinált terében mozog. A legjobb eredményeket viszont a CPE* modellel kaptuk, ahol a $V(r)$ statikus potenciált is figyelembevettük.

A kapott eredmények bemutatása

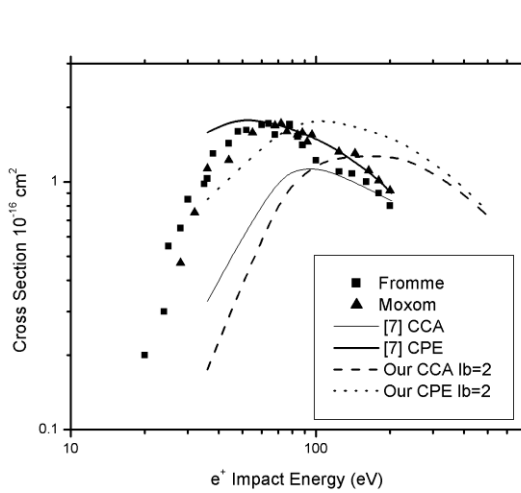
A hatáskeresztmetszet kiszámítására az 1. sz. összefüggést használtuk, a tanulmányozott energiaintervallum 30-500eV. Elektron lövedék esetén elhanyagoltuk a kicserélődést. A stacionárius szórási állapotokat a 8. sz. radiális Schrödinger egyenlet segítségével határoztuk meg. Ezt az egyenletet numerikusan oldottuk meg a NUMEROV módszer segítségével, így kaptuk meg a folytonos állapoti hullámfüggvényeket. A 3. sz. képletben szereplő kétszeres integrált SIMPSON módszerrel határoztuk meg. A kilökött elektron energiája szerinti integrál meghatározásához egy 6 pontra felírt Gauss-Legendre féle kvadraturaképletet használtunk. A parciális hullámok szerinti összegzés $l_e = 7$ valamint $l_i = 15$ értékig történt. Az l_f értékét a háromszög-szabály segítségével határoztuk meg.



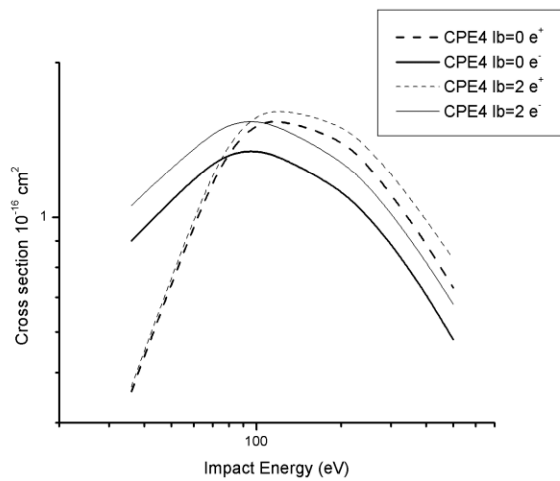
1. ábra



2. ábra



3. ábra



4. ábra

Az 1. ábrán láthatóak a CCA típusú közelítéssel számított hatáskeresztmetszetek a lövedékenergia függvényében, összehasonlítva a kísérletekkel. A kísérleti eredményeket háromszög és négyzet szimbólumok jelenti a grafikonon.

A 2. ábrán láthatóak az általunk számított hatáskeresztmetszetek a lövedékenergia függvényében a CPE típusú közelítéssel. Összehasonlítva a két típusú közelítést, észrevehető, hogy a CCA közelítés alacsony energián jóval kisebb hatáskeresztmetszeteket ad mint a CPE és mint a kísérleti mérések. A CPE közelebb van alacsony energiákon a kísérleti eredményekhez, de nagy energián túlbecsüli azokat.

A 3. ábrán összehasonlítottuk a CCA és CPE-vel kapott eredményeinket Fromme és Moxom kísérleteivel valamint R. I. Campeanu elméleti számításaival. Itt jól látszik, hogy a CCA nagyon a kísérletek alatt van, ennek oka az, hogy a CCA-szerű modellek nem vesznek figyelembe semmilyen árnyékolást. Ez egyezik R. I Campeanu tapasztalataival.

A 4. sz. ábrán a CPE4 modell elektronra illetve pozitron lövedékre kapott hatáskeresztmetszeteket hasonlítjuk össze. Ezen a grafikonon megfigyelhetjük, hogy alacsony energián e^- lövedékre kapunk nagyobb hatáskeresztmetszetet, míg nagy energián e^+ lövedékre kapunk nagyobb hatáskeresztmetszeteket.

Következtetések

Számításainkból kiderül, hogy a végállapotban az árnyékolási jelenségeknek fontos szerepük van.

Az eredmények mutatják, hogy a CPE-szerű modellek jobbak mint a CCA-típusúak.

A legjobb eredményt a CPE* modellel kaptuk, de nagy energiákon itt sem jó az egyezés. Ennek az oka valószínűleg a használt hullámfüggvények sajátosságaiban rejlik. Az egész számítás konzisztensebb volna ha a kilökött elektronnak a végállapotú hullámfüggvénye szintén kétcentrumú volna.

Köszönetnyilvánítás

A Szerző ezúton mond köszönetet az EMT és a SAPIENTIA alapítványnak a kapott támogatásért.

Irodalomjegyzék

- [1.] Fromme D, Kruse G, Raith W and Sinapius G J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 21 (1998) L261
- [2.] Moxom J, Ashley P and Laricchia G Can. J. Phys. 74 (1996) 367
- [3.] Knudsen H, Brun-Nielsen L, Charlton M and Poulsen M R J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23 (1990) 3955
- [4.] Xiao Xi Chen, Ji Chen and Jiyun Kuang J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 (1992) 5489-5494
- [5.] Xiao Xi Chen, Ji Chen Phys. Rev. A 46 No. 11 (1992)
- [6.] R I Campeanu, J W Darewych and A D Stauffer J. Phys. B: At. Mol. Phys. 30 (1997) 5033-5041
- [7.] L. Nagy, L Vegh, Phys. Rev. A 46, 284 (1992)
- [8.] H Schull, D. Ebbing, J. Chem. Phys. 28, 866 (1958)
- [9.] R I Campeanu, R P McEachran and A D Stauffer J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 (1987) 1635-1643
- [10.] R. I. Campeanu, R. P. McEachran, A. D. Stauffer Positron Impact Ionization of Hydrogen and Noble Gases, to be published in Canadian Journal of Physics (2001)