1

Kitűzött kutatási célunk a szabad atomok és molekulák elektronszerkezetének komplex vizsgálata volt. Különböző gerjesztő források (foton, elektron, pozitron, ion) alkalmazása elősegíti, hogy azonos céltárgy atom vagy molekula esetében az ütközés során létrejövő végállapotokat szelektíven tudjuk létrehozni. A vizsgált atom/molekula szerkezetére, a folyamat dinamikájára sokkal részletesebb információt kaphatunk, ha céltárgyból kilépő elektronok energia és szögeloszlását is vizsgáljuk.

A kutatásaink során az általunk fejlesztett elektronspektrométereket használtuk, amelyek közül az ESA-22 jelü nagy energiafeloldással rendelkezik és egyidőben képes több szögnél mérni elektronspektrumot. Ez lehetőséget nyújt olyan többparaméteres vizsgálatokra, amelyeket mások nem tudnak elvégezni, mivel az általuk használt elektronspektrométerek vagy jó energiafelbontással de kis térszöggel vagy nagy térszöggel de gyenge felbontással rendelkeznek, így bonyolultabb atomi folyamatok vizsgálatára nem alkalmasak.

Eredemények

I. Foto-ionizációs folyamat vizsgálatát szabad atomokon és molekulákon.

Foton - atom ütközéseknél az ionizációs folyamat leírására a leggyakrabban a dipól közelítést használják, vagyis az elektromágneses hullám sorfejtésében csak az első tagot veszik figyelembe. Ez azt jelenti, hogy lineárisan polarizált fotonnyaláb esetében a fotoelektronok szögeloszlása hengerszimmetrikus a polarizációs vektor körül (1.ábra). Hosszúideig úgy gondolták, hogy a magasabb multipól járulékok csak nagy foton (hv > 5 keV) energiákon jelentősek. Az utóbbi években végzett elméleti kutatások felvetették azonban, hogy az alacsony fotonenergiák esetében az általánosan alkalmazott és jónak tartott dipól közelítés nem írja le helyesen a fotoelektronok



1. ábra. Fotoelektronok szögeloszlása tiszta dipól kölcsönhatás ($\beta = 2$) és lineárisan polarizált fotonok esetében. \vec{k}, \vec{P} a foton impulzus és a polarizációs vektora, Θ a polárszög a \vec{k}, \vec{P} síkban, L és R a bal ill. a jobb oldalt jelenti.

szögeloszlását, magasabb multipól járulékokat is figyelembe kell venni az ionizációs folyamat pontos leírásánál.

A fotoelektronok szögeloszlását az alábbi módon lehet leírni:

$$\frac{d\sigma_{nl}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}}{4\pi} \left\{ 1 + \beta P_2(\cos \theta) + \left[\delta + \gamma \cos^2(\cos \theta) \right] \cos(\varphi) \sin(\theta) \right\}$$

ahol σ_{nl} a foto-ionizációs folyamat hatáskeresztmetszete az *nl* héjon, β az *E1* átmenet dipól és δ, γ az *M1, E2* quadrupol anizotrópia paraméter, P₂ a másodrendű Legendre polinóm, ϑ, φ az azimutál és polár szög.

Az irodalomban található elméleti eredmények azt mutatták, hogy a nem-dipól járulékok különösen érzékenyek a korrelációs effektusokra. A kísérleti vizsgálatok során kapott és a számolt adatok összehasonlításából egyértelműen lehet következtetni az atom sokrészecskés tulajdonságára és a különböző gerjesztési csatornák közötti kölcsönhatás jelentőségére.

Méréseink előtt nem voltak kísérleti vizsgálatok a nem-dipól paraméterekre, mivel a szögeloszlás pontos meghatározásához több szögnél kell az elektronspektrumot felvenni, ami a szokásos módszer esetében igen hosszú mérési időt igényel. (A szokásos elektron analizátor csak egy szögnél mér, ezért forgatni kell a céltárgy körül, hogy különböző szögeknél lehessen vele mérni.). Az általunk kifejlesztett ESA-22 elektronspektrométer különösen alkalmas ilyen típusú mérések végzésére, mivel egyidejűleg 20 kirepülési szögnél képes mérni az elektronok intenzitását (0°-360°, 15°-os lépésekben), ami nagymértékben csökkeneti a mérési időt, és növeli a mérési adatok megbízhatóságát. A spektrométer szórási síkja egybeesik a foton impulzusa és az elektromos vektor által kifeszített síkkal, amelyben legnagyobb nem-dipól járulék figyelhető meg. A méréseket a lundi MAX-2 szinkrotron I411-es nyalábján, az oului egyetem kutatóival együttműködésben végeztük az EU FP6 keretprogramjának támogatásával.

Az elmúlt 5 évben a fotoelektronok szögeloszlását jellemző dipól (β) és nemdipól (γ és δ) anizotrópia paraméterek meghatározása céljából a Xe 5s [R03], Xe 5p_{1/2,3/2} [S04] és Ar 3p_{1/2,3/2} [R05] alhéjakról származó fotoelektronok szögeloszlását mértük rendre a 90-225 eV, 100-200 eV és 90-330 eV fotonenergia-tartományokban lineárisan polarizált szinkrotron sugárzással.

A 2.a. ábrán a *Xe* 5s héj esetében általunk [R03] és Hemmers és mts-i által mért [H01] ill. különböző módszerekkel számolt β anizotrópia paramétereket összehasonlítottuk össze. Kimutattuk, hogy a két kísérleti adat közti eltérés oka az, hogy Hemmers és munkatársai mérésénél rossz volt az energiafelbontás. Ezt később ők is elismerték. Az általunk mért β értékek jól egyeznek a 20 csatornás RRPA (relativisztikus véletlen fázisú közelítés) számolással [J01]. Ez azt jelenti, hogy a 4p és 4s héjak hatása fontos a Xe 5s héjat jellemző β dipól paraméter fotonenergia függésének leírásában, vagyis az atomi elektronok közötti kölcsönhatás fontos szerepet játszik



2. ábra Dipól (béta) és non-dipól (gamma) anizotrópia paraméterek fotonenergia függése a Xe 5s fotoelektronokra.
Kísérlet: ○ saját mérés; ◆ Hammers és mtsai [H01]. Elmélet:a) — RIPM [D99]; — RRPA három atomi héj; -- RRPA öt atomi héj [J01, J03], b). — RIPM [D99];---- RRPA öt atomi héj [J01],-.-. RPAE 3 alh;jra [A01]

Először sikerült külön-külön meghatároznunk a Xe 5s héj esetében, a γ és δ nem-dipól anizotrópia paramétereket. A δ paramétert közelítőleg nullának találtuk, ahogy azt korábban elméletileg is megjósolták. A 2.b. ábra mutatja a kísérleti és elméleti γ anizotrópia paraméterek összehasonlítását. Látható, hogy az RIPM számolások itt is (ahogy a β paramétereknél is) egy szerkezet nélküli enyhe növekedést mutatnak, míg 13 és 20 csatornás RRPA számolások eredményében egy csúcs látható 150 eV körüli maximummal, éppen ott, ahol a 4d hatáskeresztmetszet Cooper-minimuma [L85] található. Tehát mind a 13 csatornás, mind a 20 csatornás RRPA számolások erős változást mutatnak a 150 eV körüli tartományban, a 4p gerjesztési csatornák környezetében.

A *Xe* 5*p* héjra nyert adatok [S04] újdonsága az 5s héjhoz képest az, hogy ebben az esetben a finomszerkezeti komponensekre is sikerült meghatározni a szögeloszlás dipól és nem-dipól jellegű járulékait. Ez igen jelentős eredmény, ugyanis: 1) ebben a fotonenergia-tartományban ez az első olyan kísérlet, amelyben az $5p_{1/2}$ és $5p_{3/2}$ alhéjakról származó fotoelektronok anizotrópia-

paramétereit külön-külön is meghatároztuk, 2) a magasabb rendű tagok (γ és δ) járulékát korábban egyáltalán nem vizsgálták kísérletileg. A kísérleti eredményeket csatolt-csatornás számításokkal hasonlítottuk össze. Úgy találtuk, hogy mind a relatívisztikus effektusok, mind a csatorna-csatorna kölcsönhatások fontos szerepet játszanak az ionizációs folyamatban. Megállapítottuk továbbá, hogy

3

az elmélet jelentősen felülbecsüli a 4s, 4p héjak járulékát, amely különösen szembeötlő a nem-dipól anizotrópia-paraméterek esetében.

Az *Ar 3p fotoelektronok* szögeloszlás paramétereinek foton-energiától való függésénél is hasonló rezonancia jelenséget találtunk mint a Xe esetében [R05]. Ez esetben csak függetlenrészecske modellszámolások álltak rendelkezésünkre. Így vizsgálatainkat mérsékelt energiafelbontás mellett, széles fotonenergia tartományon való méréssel kezdtük. A 3. ábra mutatja a kísérleti és elméleti adatok összehasonlítását.



3. ábra Argon *3p* fotoelektronok dipól anizotrópia paraméterének fotonenergia függése. ■ kísérleti adatok (a folytonos vonal csak a szem vezetésére szolgál), pontozott vonal RIPM számolás [D99].

Mint látható, a függetlenrészecske modell jelentős eltérést mutat a mért adatoktól. Az is látható, hogy kísérleti spektrum alakja hasonló a 250 foton-energia környezetében, eV-es 150 mint а xenonnál eV környezetében. Kézenfekvő az а következtetés, hogy a Xe-nál bármelyik tapasztaltak atomnál bekövetkezhetnek egy bizonyos foton energiánál.

A keskeny energiatartományban nagyon jó energiafelbontással (mind a fotonnyaláb, mind az elektron-



4. ábra Ar 3p_{1/2} fotoelektronok dipól paraméterének finom szerkezete jó energiafelbontás esetén. Kísérlet: o (pontozott vonal a szem vezetésére szolgál). Elmélet: folytonos [N05] és szaggatott vonal [R03].

spektrométer esetében) végeztünk méréseket a 250 eV foton energia környezetében. A 4.ábrán látható a $3p_{1/2}$ alhéj dipól paraméterére, összehasonlítva olyan elméleti adatokkal, amelyek a direkt és indirekt ionizációs folyamatok közötti kölcsönhatást is tartalmazzák. A két közelítés közti eltérés

az alkalmazott modellből és a figyelembe vett indirekt ionizációs csatornák számából ered. Látható, hogy a kísérleti és elméleti foton energia függés nagy vonalakban hasonló, bár a részletekben jelentős eltérések is tapasztalhatók. A mért és számolt adatok közötti eltérések nem cáfolják azt a következtetést, hogy a direkt ionizáció mellett az indirekt ionizációs folyamat is jelentős szerepet játszik és az ezek közötti interferencia eredménye az argon 3p fotoelektronok dipól paramétereinél megfigyelt finomszerkezet. Hasonló eredményt kaptunk a $3p_{3/2}$ alhéj esetében is.

A fentebb említett mérések során meghatározott szögeloszlásokat részletes vizsgálatakor arra a megdöbbentő felfedezésre jutottunk, hogy a szögeloszlások jobb és bal oldali intenzitása (az impulzus vektorra mint szimmetria tengelyre nézve) nem azonos (1 ábra). A részletesebb kísérleti vizsgálatok érdekében kértük, hogy egy évvel hosszabbítsák meg ezt az OTKA pályázatot.

A jobb-bal aszimmetria paritás sértésre utal, mint az történt a béta bomlás esetében, amikor Wu és munkatársai előre-hátra aszimmetriát mutattak ki orientált ⁶⁰Co magok esetében. A kvantum mechanikai számítások szerint az ionizáció/gerjesztés ill. a legerjesztődési folyamat során a paritás megmarad (elektromágneses kölcsönhatásban) és így a fotoelektronok szögeloszlásánál a jobb és bal oldal intenzitásának azonosnak kell lennie.

A fent említett jobb-bal aszimmetria részletes vizsgálatára szisztematikus méréseket végeztünk H₂, He, Ne, Ar, Kr és Xe céltárgyak esetében. A foton energiát úgy választottuk meg, hogy fotoelektronok energiája a kalibrálásra használt izotróp Ar L₂- M₂₃M₂₃ Auger vonal (207 eV) közelében legyen. A mérések során igyekeztünk minden kísérleti hibát kiküszöbölni, így pl. az ESA-22 elektronspektrométert is elforgattuk 180°-al annak érdekében, hogy a jobb és bal oldal felcserélődjön. Méréseink egy részét Scienta típusú elektronspektrométerekkel is megismételtük, amelyekkel ugyanolyan aszimmetria értékeket kaptunk. Ezek alapján ki lehetett zárni a kísérleti tévedéseket.



5.ábra.Kísérleti és elméleti jobb-bal aszimmetria paraméterek a tömegszám függvényében.

A kapott eredmények a 5. ábrán láthatóak. Az ábrán az aszimmetriát a $(\sigma_L - \sigma_R)/(\sigma_L - \sigma_R)$ hányados jellemzi, ahol az *L* a bal és *R* a jobb oldalt jelenti. Mérési eredményeink alapján elmondhatjuk, hogy jelentős aszimmetriát találtunk minden céltárgy esetében. A legnagyobb értéket H₂ céltárgy esetében észleltük., majd az értékek monoton csökkennek a nagyobb rendszámok irányban (a folytonos vonal a szem vezetését szolgája.).

Atomfizikában a paritás sértést, a Standard modell keretében értelmezik az atomi elektron és a nukleonok közötti semleges gyenge áram eredményeként. Mi és végeztünk egy becslést fotoionizáció estére. Az 5. ábrán látható eredmények tisztán mutatják, hogy sem a nagyságrend sem a tendencia nem egyezik a kísérleti adatokkal (--- vonal és a jobb oldali skála). Ennek alapján azt a következtetést lehet levonni, hogy nem az elektronok és a nukleonok közötti gyengekölcsönhatás felelős az aszimmetriáért. A fenti eredményekkal kapcsolatos közleményünket beküldtük a Phys. Rev. Lett. folyóiratba. További elméleti és kísérleti vizsgálatok szükségesek a jelenség megmagyarázására.

II. Pozitron - atom/molekula ütközések vizsgálata.

Az elmúlt tizenöt évben szorosan együttműködtünk a londoni University College munkatársaival a pozitron - atom ütközési folyamatok kutatásában. A vizsgálatokat az Royal Society East European Collaboration ill. az EU6 keretprogram is támogatta.

Kutatásainknak nagy kísérleti és elméleti jelentősége van mivel a pozitron és az elektron csak a töltés előjelében különbözik egymástól. Ez lehetőséget nyújt arra, hogy mélyebben megismerhessük a Coulomb kölcsönhatás természetét, az ütközési folyamat dinamikáját. További előnyt jelent, hogy a lövedékként használt pozitron és az ionizációból származó elektron megkülönböztethető és így nem játszik szerepet a kicserélődési kölcsönhatás. A vízmolekula kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetének a vizsgálata mellett [A07] elsősorban a folytonos energiájú állapotba történő befogási folyamatot (Electron Capture to Continuum State, ECC) vizsgáltuk, amely jól ismert ion - atom ütközések esetében. A lövedék irányában egy jellegzetes, éles csúcs ('cusp') jelenik meg az elektron spektrumban. Ez annál az elektronenergiánál figyelhető meg, amelyhez tartozó elektronsebesség megegyezik a lövedék sebességével. Ebből következik, hogy az elektron a lövedék vonatkoztatási rendszerében nagyon lassan mozog, azaz a lövedék alacsony energiájú folytonos állapotában van. Ez a folyamat különösen érdekes pozitronok esetében, ahol a lövedék és az ionizált elektron tömege megegyezik, és így az ECC folyamat során a pozitron energiájának is jelentősen meg kell változnia ahhoz, hogy az elektron fel tudjon gyorsulni a közös azonos sebességre. A folyamat elméleti szempontból is igen lényeges mivel a három részecske kölcsönhatásáról van szó és egyiket sem lehet elhanyagolni (elektron, pozitron, ion).

Számos ellentmondó elméleti eredmény után, az ECC folyamat létezését először nekünk sikerült kísérletileg kimutatni 100 eV e⁺ - H₂ ütközésben [K98] 0° környezetében [K98]. 50 eV-es bombázó energián arra a meglepő eredményre jutottunk, hogy az ECC csúcs eltolódott 2.7 eV-al a kisebb elektron energiák irányában az elméletileg jósolt értékhez képest [K01, K02]. Az elmúlt években szisztematikus vizsgálatot folytattunk az eltolódás okainak a kiderítésére. Vizsgáltuk a folyamatot különböző céltárgyak pl. D2 és He esetében. Mind a két esetben hasonló eltolódást kaptunk a H2 céltárgyon mérthez. Mivel a He atomi céltárgy így a molekuláris effektusok (gerjesztés, vibráció, disszociáció) nem okozhatják az eltolódást. A kísérleti hibákat is kizártuk a pontos abszolút energia kalibrációval. H₂ esetében megmértük a szórt pozitron spektrumot is. Itt is megtaláltuk az ECC csúcsot, de ez a nagyobb energiák irányában volt eltolódva (6 ábra) [A05]. Publikált eredményeink nagy érdeklődést váltottak ki. Több közlemény jelent meg az irodalomban, amelyekben kvantummechanikai és CTMC (Klasszikus pályájú Monte-Carlo módszer) számolások alapján értelmezték az általunk kapott adatokat. Az ECC csúcs eltolódását a a CTMC-vel számolt adatok igen a kvantumechanikán alapuló elméletek nem tudták reprodukálni. Jelenleg a legvalószínűbb magyarázatnak az tűnik, hogy az eltolódás a pozitronium (egy elektron-pozitron pár kötött állapota) keletkezés és az ionizációs folyamat közötti interferencia eredménye ill. a visszamaradó ionizált céltárgy Coulomb terének a hatására a pozitron-elektron pár polarizálódik.



6. ábra Elméleti és kísérleti ionizációból származó elektronok (o, ▼, ●)
és szórt pozitronok (●) energiaeloszlása [A05]. Folytonos vonal: elmélet [F01].

A mérésvezérlő és adat gyűjtő rendszer továbbfejlesztése a teljes szögkorreláció mérésére.

Jelen pályázat keretében megépítettük az ESA-22D jelű elektronspektrométert Debrecenben, amely különösen alkalmas szilárdtest minták vizsgálatára. A vákuum és mintakezelő rendszerében 10⁻¹⁰ mBarr nyomás érhető el kifűtés után. Maga az analizátor nagyon hasonló az ESA-22L jelű az

I. pontban leírt méréseknél használt spektrométerhez. Az elektronok detektálására egy 80 mm átmérőjű mikrocsatornás-elektronsokszorozót használunk, amely lehetővé teszi a mintából 0°-360°ban szóródó elektronok egyidejű regisztrálását. Elkészül a mérések vezérlésére szolgáló szoftver is.

Első alkalmazáskánt amorf szilícium mintában elektronütközés révén keltett felületi és térfogati plazmonokat vizsgáltuk a beesési szögfüggvényében 2000 eV bombázó energián (45⁰ ill. 89⁰ (súrlódó beesés) beesési szögeknél, a felületi normálvektorhoz viszonyítva). 45⁰-nál a rugalmatlanul szórt elektronok spektrumában a felületi plazmon csúcs csak, mint egy váll jelenik meg a térfogati plazmon csúcsán, míg 89⁰



esetében a térfogati és felületi plazmon csúcsok jól elkülöníthetőek. Előzetes eredményeinket az ICPEAC 2005 konferencián mutattuk be [R05a].

III. Elektron - atom/molekula ütközéseknél a rugalmas szórási folyamat vizsgálata. Elektron - ion ütközéseket vizsgálata az elektron-spektroszkópia módszerével.

A méréseket a Justus - Liebig Egyetem (Giessen, Németország) Magfizikai Tanszékének kutatóival együttműködésben végeztük. Giessen-ben található az egyik legjobb keresztezet nyalábbal (elektron-ion nyaláb) működő berendezés a világon. A 3-15 keV/töltés energiájú ionnyalábot egy állandó mágneses ECR ionforrás szolgáltatja. Az Esa-22 spektrométer nagy térszöge miatt, ideálisnak tűnik az ilyen típusú mérésekhez is. Terveink alapján elkészült az ESA-22 analizátor egy változata harmadik újabb (ez már működő berendezés **ESA-22** típusú a az Cs^+ elektronspektrométerből). Először а ionokon rugalmasan szóródott elektronok elektronspektrumát vizsgáltuk. Az előzetes eredményeket az ICPEAC 07 fogjuk bemutatni [H07].

Megjegyzések

A pályázat keretében egy PhD-s hallgató dolgozata is elkészült (Ricsóka Ticia).

A pályázatban megítélt összegből két ízben történ 15% elvonás, ami nagymértékben megnehezítette a tervezett tudományos program megvalósítását.

Hivatkozások

A pályázathoz kapcsolódó közlemények

- [A05] C. Arcidiacono, A. Kövér, G. Laricchia: Energy-Sharing Asymmetries in Ionization by Positron Impact, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 223202.
- [A07] C. Arcidiacono, Á. Kövér, Z.D. Pesic, J. Beale, G. Laricchia : Double-differential ionization cross-section for H₂O, Rad. Phys. Chem. 86(2007)431-435.
- [H07] K. Holste, S. Schippers, A. Müller and S. Ricz, A setup for electron-ion studies employing high-resolution electron spectroscopy, , ICPEAC_07 XXV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Freiburg, Germany, July 25-31, 2007
- [K04] Á. Kövér, C. Arcidiacono, G. Laricchia: Differential ionization experiments on positronatom scattering. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 221 (2004)56.
- [R03] S. Ricz, R. Sankari, Á. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Nikkinen, T. Ricsóka, H. Aksela, S. Aksela: Strong nondipole effect created by multielectron correlation in 5s photoionization of xenon. Physical Review A 67 (2003) 012712.
- [R05] S. Ricz, J. Nikkinen., R. Sankari, T. Ricsóka, Á. Kövér, D. Varga, S. Fritzsche, H. Aksela, S. Aksela: Interference effects in the angular distribution of Ar 3p photoelectrons across the 2p/ns/md resonances Physical Review A 72 (2005) 014701
- [R05a] S. Ricz, T. Ricsóka, J. Gervansoni, Á. Kövér, D. Varga, Plasmon excitation in amorphous silicon by electron impact: dependence of the surface and bulk plasmon yield ont he angle of incidence, ICPEAC_05 XXIV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Rosarion, Argentina, July 20-26, 2005
- [S04] R. Sankari, S. Ricz, A. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Nikkinen, T. Ricsóka, H. Aksela, S. Aksela: Angular distribution of Xe 5p spin-orbit components at 100-200-eV photon energies. Physical Review A 69(2004)012707.

Egyéb közlemények

- [A01] M.Ya. Amusia, A.S. Baltenkov, L.V. Chernysheva, Z. Felfli, and A.Z. Msezane, Phys. Rev. A63 (2001)052506.
- [D99] A. Derevianko, W. R. Johnson, and K. T. Cheng, At. Data Nucl. Data Tables 73(1999)153.
- [F01] J. Fiol, V. D. Rodri'guez, and R. O. Barrachina, J. Phys. B 34, 933 (2001).
- [H01] O. Hemmers, S.T. Manson, M.M. Sant'Anna, P. Focke, H. Wang, I.A. Sellin, and D.W. Lindle, Phys. Rev. A64(2001)022507.
- [J01] W.R. Johnson and K.T. Cheng, Phys. Rev. A 63(2001)022504.
- [J03] W.R. Johnson and K.T. Cheng 2003 private communication
- [K98] Kövér Á., Laricchia G. Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 5309.
- [K01] Kövér Á., Paludan K., Laricchia G.: J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys. 34 (2001) L219.
- [K02] Kövér Á., Paludan K. and. Laricchia G, Nucl. Instrum. Meth. B. 192 (2002) 167
- [L85] Yeh and I. Lindau, At. Data Nucl. Data Tables 32,(1985)1.
- [**N05**] J. Nikkinen, R. Sankari, S. Ricz, Á. Kövér, T. Ricsóka, S. Heinäsmäki, H. Aksela, and S. Aksela 2005 unpublished.