



*Magasabb rendű folyamatok foton- és töltött részecske-atom
ütközésekben*

doktori (Ph.D.) értekezés

Ricsóka Tícia

Debreceni Egyetem
Természettudományi Kar
Debrecen, 2007

Az értekezés témakörében megjelent közlemények

1. S. Ricz, R. Sankari, Á. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Nikkinen, T. Ricsóka, H. Aksela and S. Aksela: *Strong nondipole effect created by multielectron correlation in 5s photoionization of xenon*, Physical Review A **67**, 012712 (2003).
2. R. Sankari, S. Ricz, Á. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Nikkinen, T. Ricsóka, H. Aksela and S. Aksela: *Angular distribution of Xe 5p spin-orbit components at 100-200 eV photon energies*, Physical Review A **69**, 012707 (2004).
3. S. Ricz, J. Nikkinen, R. Sankari, T. Ricsóka, Á. Kövér, D. Varga, S. Fritzsche, H. Aksela and S. Aksela: *Interference effects in the angular distribution of the Ar 3p photoelectrons across 2p \rightarrow ns/md resonances*, Physical Review A **72**, 014701 (2005).
4. T. Ricsóka, S. Ricz, Á. Kövér, R. Sankari, J. Nikkinen, D. Varga, S. Aksela: *Interferencia effektusok az argon 3p héjának fotoionizációjában*, Tavasz Szél 2005, Debrecen, Hungary, 5-8 May, 2005, Konferencia-kiadvány, p. 336-339.
5. T. Ricsóka, Gy. Víkor, Sz. Nagy, K. Tökési, Z. Berényi, B. Paripás, N. Stolterfoht and B. Sulik: *Accelerating multiple scattering of the emitted electrons in collisions of ions with atoms and molecules*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **235**, 397 (2005).
6. B. Sulik, K. Tökési, N. Stolterfoht, T. Ricsóka, Gy. Víkor, Sz. Nagy, Z. Berényi, R. Hellhammer, Z. Pesic, D. Berényi: *Fermi-shuttle processes in the emission by ion impact: Contribution to radiation damages*, Radiation Physics and Chemistry **76**, 483 (2007).

Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondok Dr. Kövér Ákos témavezetőmnek, hogy lehetőséget biztosított munkám sikeres elvégzéséhez és dolgozatom megírásához. Köszönöm segítőkész támogatását és dolgozatom alapos és kritikus átnézését.

Hálás vagyok Dr. Ricz Sándornak és Dr. Sulik Bélának, akik nélkülözhetetlen szakmai tanácsaikkal, önzetlen támogatásukkal alapvetően hozzájárultak szakmai fejlődésemhez és sikeres munkámhoz.

Köszönöm Dr. Varga Dezsőnek hasznos szakmai tanácsait, segítőkészségét és dolgozatom figyelmes átolvasását.

Köszönetem fejezem ki az Atomfizikai Főosztály minden munkatársának támogatásukért és segítőkészségükért. Külön szeretnék köszönetet mondani Gáll Ferencnek a kísérletek feltételeinek megteremtése érdekében végzett munkájáért.

Köszönetet mondok az Elektrosztatikus Gyorsítók Osztályán dolgozó valamennyi operátornak a kísérleti munka során felvetődött gyakorlati problémák megoldásában nyújtott segítségükért. Köszönöm továbbá az Oului Egyetem Elektron-spektroszkópiai Osztályának a kísérleti munkákban való részvételét ill. a MAX-lab munkatársainak a kiváló munkakörülményeket és a nyálábidőket.

Köszönettel tartozom Dr. Berényi Dénes, Dr. Lovas Rezső és Dr. Pálkás József akadémikusoknak a Ph.D. tanulmányaim befejezéséhez szükséges anyagi háttér megteremtéséért és munkám figyelemmel kíséréséért.

Szívből köszönöm barátomnak, Henriknek a szeretetét, türelmét és támogatását.

Hálával tartozom szüleimnek és nagymamámnak, akik minden körülmények között önzetlenül támogattak és bíztattak ill. gyakran önfeláldozásukkal is lehetővé tették, hogy tanulmányaimat végezhessem.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. Elméleti áttekintés	3
2.1 Elektronállapotok és átrendeződési folyamatok atomokban	3
2.1.1 A Hartree-Fock eljárás	3
2.1.2 Az atomi egyelektron állapotok osztályozása	7
2.1.3 Atomi elektronok közötti csatolástípusok	9
2.1.4 Alapvető elektronátmenetek	11
2.1.4.1 Fotoelektromos effektus	12
2.1.4.2 Auger-effektus	12
2.1.5 Fotoelektronok szögeloszlása	15
2.2 Kiütött elektronok többszörös szóródása a céltárgy és a lövedék Coulomb-terén	20
2.2.1 Fermi-féle gyorsítási mechanizmus	20
2.2.2 A háromtest klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) számolás	25
3. Kísérleti berendezések	29
3.1 Gerjesztő források	29
3.1.1 Van de Graaff generátor	29
3.1.2 Szinkrotron sugárzás és tárológyűrűk	31
3.1.3 A MAX-II tárológyűrű és az I411 nyalábcatorna	34

II

3.2 Elektron spektrométerek	36
3.2.1 Elektrosztatikus elektron spektrométerek típusai, jellemző paraméterei és üzemmódjai	36
3.2.2 Az ESA-21 elektron spektrométer	39
3.2.3 Az ESA-22 elektron spektrométer	42
4. Saját eredmények	47
4.1 Fotoelektronok szögeloszlásának mérése nemesgáz céltárgyakon	47
4.1.1 Kísérleti elrendezés, mérőrendszer hitelesítése és a spektrumok kiértékelése	47
4.1.2 A Xe $5s$ héjról származó fotoelektronok szögeloszlásának anizotrópia paraméterei	52
4.1.3 A Xe $5p$ héjról származó fotoelektronok szögeloszlásának anizotrópia paraméterei	59
4.1.4 Az Ar $3p$ héjról származó fotoelektronok szögeloszlásának anizotrópia paraméterei	66
4.2 Kiütött elektronok többszörös szóródása a céltárgy és a lövedék ionok terén	73
4.2.1 Kísérleti körülmények és az adatok kiértékelése	73
4.2.2 Kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek mérése ion-atom, ion-molekula és molekulaion-atom ütközésekben	75
5. Összefoglalás	85
6. Summary	89
Irodalomjegyzék	93
Az értekezés témakörében megjelent közlemények	101
Köszönetnyilvánítás	102

1. Bevezetés

Napjainkban az elektronspektroszkópiai módszereket széles körben alkalmazzák atom- és molekulaszervezeti vizsgálatokra ill. felületanalitikai célokra. Különböző gerjesztő források alkalmazásával az atomok és molekulák ill. a lejátszódó kölcsönhatások más és más tulajdonságai tanulmányozhatók. A mérési módszerek és berendezések fejlődése az atomi folyamatok jobb megismerését és az elméleti modellek egyre pontosabb ellenőrzését teszi lehetővé.

A foton illetve töltött részecske bombázást követő elektronemisszió kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetének mérése egy nagyon érzékeny módszer az ionizációs folyamatok vizsgálatára. Az ilyen típusú mérések hagyományos berendezések alkalmazásával meglehetősen időigényesek és nehézkesek. Az elmúlt két évtizedben az ATOMKI-ban számos olyan speciális elektrosztatikus elektron spektrométert fejlesztettek ki, amelyek alkalmasak a mintából kilépő elektronok energia- és szögeloszlásának egyidejű analizására. Ezek használata nemcsak a mérési időt csökkenti, hanem jelentősen megnöveli az adatok megbízhatóságát. A berendezések nagy térszögének köszönhetően kis valószínűségű (pl. másodrendű) folyamatok is megbízhatóan tanulmányozhatók.

A dolgozatomban kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet mérésekben elért eredményeimet ismertetem, különös tekintettel a magasabb rendű kölcsönhatásokból és a több lépcsőben végbemenő folyamatokból származó effektusokra. A fotoionizáció során kilépő fotoelektronok kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetében az elektromos dipól (E1) és a magasabb rendű vagy nondipól (E2, M1) járulékok fotonenergia-függését vizsgáltam lineárisan polarizált szinkrotron sugárzás alkalmazásával. A szögeloszlást meghatározó anizotropia paraméterek fotonenergia-függéséből következtetni lehet az atomok sokelektronos tulajdonságaira és a csatorna-kölcsönhatások

fontosságára. Vizsgáltam ion-atom, ion-molekula és molekulaion-atom ütközésekben szabaddá vált elektronok többszörös szóródását a céltárgy és a lövedék Coulomb-terén (Fermi-féle gyorsítási folyamat) a céltárgy atomszámának függvényében, kiemelt figyelemmel kísérve a magasabb rendű (háromszoros, négyszeres szórással járó) gyorsítási szekvenciákat.

A dolgozatom három fő részből áll. A 2. fejezetben tárgyalom a sokelektronos atomok leírására használt elméleti közelítéseket ill. azokat az atomi ionizációs, gerjesztési és átrendeződési folyamatokat, amelyek szorosabban kapcsolódnak az általam vizsgált területhez. Bemutatom a Fermi-féle gyorsítási mechanizmust és a leírására leggyakrabban használt klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) számolást. Ez a fejezet tartalmazza még a munkámhoz kapcsolódó irodalom rövid áttekintését is. A 3. fejezetben a mérésekhez használt berendezéseket (gerjesztő források és elektron spektrométerek) tekintem át. Végül a 4. fejezetben ismertetem az eredményeimet, amelyek egyrészt a fotoelektronok szögeloszlását jellemző anizotrópia paraméterek (β , γ és δ) fotonenergia-függésének vizsgálatával, másrészt az ion-atom, ion-molekula és molekulaion-atom ütközésekben kilépő elektronok többlépcsős Fermi-gyorsításával (magasabb rendű gyorsítási szekvenciákkal is) és ezek következményeivel kapcsolatosak.

2. Elméleti áttekintés

2.1 Elektronállapotok és átrendeződési folyamatok atomokban

Ebben a fejezetben beszélek a Hartree-Fock eljárásról, az atomi egyelektron állapotokról, az atomi elektronok közötti csatolástípusokról ill. azokról az atomi ionizációs, gerjesztési és átrendeződési folyamatokról (fotoeffektus és Auger-effektus) és jellemzőikről, amelyek szorosabban kapcsolódnak az általam vizsgált területhez.

2.1.1 A Hartree-Fock eljárás

Méréseink sokelektronos atomokon és molekulákon történtek ill. a legtöbb fotoionizációs elméletben a kezdeti és a végállapot hullámfüggvényeket és energiákat a Hartree-Fock módszer segítségével határozzák meg, ezért a következőkben röviden ismertettem ezt az eljárást.

Nemrelativisztikus közelítésben az atom stacionárius állapotait az atommag elektrosztatikus terében mozgó, egymással kölcsönható elektronok rendszerére felírt Schrödinger-egyenlet határozza meg. A Z rendszámú atom energiasajátértékeit meghatározó Schrödinger-egyenlet [Nag78]:

$$\left[\sum_{l=1}^Z \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_l - \frac{Ze^2}{r_l} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l=1 \\ (k \neq l)}}^Z \frac{e^2}{r_{lk}} \right] \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = E \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z), \quad (2.1.1)$$

ahol E az atom teljes energiája, m és e az elektron tömege és töltése, Δ_l az l -edik elektron koordinátái szerinti Laplace-operátor, r_l az l -edik elektron atommagtól való távolsága, r_{lk} az l -edik és k -edik elektron közötti távolság, $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$ a

$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_Z) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z, s_1, s_2, \dots, s_Z) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) \chi(s_1, s_2, \dots, s_Z)$ sajátfüggvény térkoordinátáktól $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$ függő része és s_1, s_2, \dots, s_Z a spinváltozók. Ennek megoldása többelektronos atomok esetén csak közelítő eljárásokkal lehetséges. Az egyik ilyen közelítő eljárás a Hartree-Fock közelítés [Nag78, Fis77, Kap75, Gom71, Foc78], amelynél feltételezik, hogy minden egyes elektron a mag és a többi elektron átlagterében mozog (centrális erőter).

A (2.1.1) egyenlet bal oldalán álló, szögletes zárójelben lévő kifejezés a Z rendszámú atom \mathbf{H} Hamilton-operátora:

$$\mathbf{H} = \sum_{l=1}^Z \mathbf{H}_l + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l=1 \\ (k \neq l)}}^Z \frac{e^2}{r_{lk}}, \quad (2.1.2)$$

ahol \mathbf{H}_l az l -edik elektron Hamilton-operátora:

$$\mathbf{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_l - \frac{Ze^2}{r_l}. \quad (2.1.3)$$

A \mathbf{H} Hamilton-operátor három részből áll: az első tag az elektronok kinetikus energiáját jellemzi, a második és harmadik tag az elektron-mag és elektron-elektron kölcsönhatást írja le.

Az alapállapot E_0 energiáját a variációs eljárással határozzuk meg, azaz az

$$I = \int \dots \int \Phi^* \mathbf{H} \Phi dx_1 \dots dx_f \quad (2.1.4)$$

integrál minimumát keressük az

$$\int \dots \int \Phi^* \Phi dx_1 \dots dx_f = 1 \quad (2.1.5)$$

mellékfeltétel figyelembevételével és az ortonormalitás megkövetelésével (f a szabadsági fokok száma). A Φ függvényt egyelektron hullámfüggvények szorzataként vesszük fel:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = \Phi_1(\mathbf{r}_1) \Phi_2(\mathbf{r}_2) \dots \Phi_Z(\mathbf{r}_Z). \quad (2.1.6)$$

Az I integrál minimumának az a feltétele, hogy a δI variáció zérus legyen, amikor a Φ_l -eket ($l=1, 2, 3, \dots, Z$) variáljuk. Ez csak akkor teljesül, ha

$$\left[\mathbf{H}_l + \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq l)}}^Z \int \Phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \Phi_k dV_k - E_l \right] \Phi_l = 0 \quad l=1,2,\dots,Z, \quad (2.1.7)$$

ahol E_l az atom l -edik elektronjának az energiája és $dV_k=dx_k dy_k dz_k$. Ez egy nem lineáris integro-differenciálegyenlet-rendszer az ismeretlen Φ_l egyelektron függvényekre, amelyet a szukcesszív approximáció módszerével oldunk meg a következőképpen: A Φ_l függvényeket nulladik közelítésben ($\Phi_l^{(0)}$) hidrogénszerű sajátfüggvényeknek vesszük fel és először ezekkel kiszámítjuk az első közelítés $\Phi_l^{(1)}$ függvényeit, majd ez utóbbi függvényekkel meghatározzuk a második közelítés $\Phi_l^{(2)}$ függvényeit és így tovább. Ezt az eljárást addig folytatjuk, amíg az n -edik lépésben az $(n-1)$ -edik lépés függvényeit kapjuk vissza, tehát $\Phi_l^{(n)} = \Phi_l^{(n-1)}$ -et. Ezek a Φ_l függvények lesznek a (2.1.7) egyenletek megoldásai. A számolás eredményeként az adódik, hogy az atom alapállapotának energiáját a következő kifejezés határozza meg:

$$E = \sum_{l=1}^Z E_l - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l=1 \\ (k \neq l)}}^Z \iint \Phi_l^* \Phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \Phi_k \Phi_l dV_l dV_k. \quad (2.1.8)$$

Ez a közelítés a (2.1.6) próbafüggvénnyel Hartree-től származik. Hibája, hogy ez a próbafüggvény nem rendelkezik a kívánt szimmetriatulajdonsággal, mert nem veszi figyelembe a Pauli-elvet, amely szerint az atom állapotfüggvényének a spinváltozókat is figyelembe véve antiszimmetrikusnak kell lennie.

Az eljárást Fock általánosította úgy, hogy a (2.1.6) próbafüggvény helyett, a Pauli-elvet is figyelembe vevő, determináns hullámfüggvényt használta kiinduló függvényként, amely már antiszimmetrikus:

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_Z) = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_Z) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_Z) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_Z(\xi_1) & \psi_Z(\xi_2) & \dots & \psi_Z(\xi_Z) \end{vmatrix}, \quad (2.1.9)$$

ahol $\xi_k = (\mathbf{r}_k, s_k)$ ($k=1,2,\dots,Z$) a térkoordinátákat és a spinváltozókat jelöli. A $\psi_l(\xi)$ függvényekről ismét feltesszük, hogy ortonormáltak. Az eljárás menete ugyanaz, mint az előbb. Képezzük az

$$I = \int \dots \int \psi^* \mathbf{H} \psi d\xi_1 \dots d\xi_Z \quad (2.1.10)$$

integrált és a variációs elvvel keressük azokat a függvényeket, amelyek ennek a minimumához vezetnek. Az integrálás valamennyi változóra (térkoordinátákra és spinváltozókra) értendő. Mivel a spin diszkrét változó, ezért arra összegezni kell. Így az integráljel a koordinátákra integrálást, a spinváltozókra összegzést jelent. A számolás eredményeként az adódik, hogy a $\psi_l(\xi)$ függvények a következő egyenletrendszerrel elégitik ki:

$$\left[\mathbf{H}_l + \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq l)}}^Z \int \psi_k^*(\xi_k) \frac{e^2}{r_{kl}} \psi_k(\xi_k) d\xi_k - E_l \right] \psi_l(\xi_l) - \\ - \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq l)}}^Z \int \psi_k^*(\xi_k) \frac{e^2}{r_{kl}} \psi_l(\xi_k) d\xi_k \psi_k(\xi_l) = 0 \quad (2.1.11)$$

$$l=1,2,\dots,Z.$$

Ezek a Hartree-Fock egyenletek, amelyek a (2.1.7) Hartree-egyenletektől a kicserélődési integrálban különböznek. Utóbbi annak a következménye, hogy a kvantummechanika szerint az elektronok nem megkülönböztethetőek. A (2.1.11) egyenletrendszerrel ismét a szukcesszív approximációval oldjuk meg, addig folytatva az eljárást, amíg az önmagát nem reprodukálja. Ekkor az atom alapállapotának energiájára a következő kifejezést kapjuk:

$$E = \sum_{l=1}^Z E_l - \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l=1 \\ (k \neq l)}}^Z \iint \psi_k^*(\xi_k) \psi_l^*(\xi_l) \frac{e^2}{r_{kl}} [\psi_k(\xi_k) \psi_l(\xi_l) - \psi_l(\xi_k) \psi_k(\xi_l)] d\xi_k d\xi_l. \quad (2.1.12)$$

A (2.1.11) Hartree-Fock egyenletek áttekinthetőbb alakba írhatók a következő jelölések bevezetésével:

$$G_l(\xi_l) = \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq l)}}^Z \int \psi_k^*(\xi_k) \frac{e^2}{r_{kl}} \psi_k(\xi_k) d\xi_k \quad (2.1.13)$$

$$F_l(\xi_k, \xi_l) = \sum_{\substack{k=1 \\ (k \neq l)}}^Z \psi_k^*(\xi_k) \frac{e^2}{r_{kl}} \psi_k(\xi_l), \quad (2.1.14)$$

ahol az első kifejezés a k -adik és l -edik elektron közötti direkt-, míg a második a kicserélődési kölcsönhatást írja le. Ezek felhasználásával a (2.1.11) Hartree-Fock egyenletek a következő alakot veszik fel:

$$[\mathbf{H}_l + G_l(\xi_l) - E_l] \psi_l - \int F(\xi_k, \xi_l) \psi_l(\xi_k) d\xi_k = 0 \quad l=1, 2, \dots, Z. \quad (2.1.15)$$

Sok elektront tartalmazó atomok esetén ezek az egyenletek elég bonyolultak és megoldásuk számítógépekkel lehetséges. Az eljárás sikerrel alkalmazható magfizikai feladatoknál is.

2.1.2 Az atomi egyelektron állapotok osztályozása

Mint az előző alfejezet is mutatja, sokelektronos atomok esetén valójában a teljes rendszer stacionárius állapotait írjuk le a kvantummechanikában. Ennek ellenére van létjogosultsága az atom egyelektron állapotairól beszélni. Ugyanis az atomi folyamatok jelentős része, mind az elméleti leírás mind a kísérleti adatok értelmezése szempontjából, gyakran tárgyalható megfelelő pontossággal az egyelektron állapotokból kiindulva (ilyen pl. a részecske-atom ütközések nagy része).

Centrális erőterben, amikor többelektronos atomban a kiszemelt i -edik elektron a mag és a többi elektron átlagterében végzi mozgását, az atom bármelyik elektronjának az állapota négy független kvantumszámmal

jellemezhető a spin-pálya kölcsönhatás elhanyagolása esetén [Nag78, Lan78, You04, Eis85, Mar96, Bud94b]:

- az n főkvantumszámmal ($n = 1, 2, 3, \dots$),
- az l mellékkvantumszámmal ($l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$),
- az m_l mágneses kvantumszámmal ($m_l = -l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l$), amely az \mathbf{l} pályaimpulzusmomentumnak egy kitüntetett irányra eső vetülete (ez lehet például egy külső mágneses vagy elektromos tér iránya),
- az s spinkvantumszámmal ($s = +1/2, -1/2$), amely az \mathbf{s} spinnek egy kitüntetett irányra eső vetülete, hasonlóan a pályaimpulzusmomentumhoz.

A négy kvantumszám a spin-pálya kölcsönhatás figyelembe vételével a következő:

- n főkvantumszám,
- l mellékkvantumszám,
- j belső kvantumszám ($\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ a teljes impulzusmomentum kvantumszáma, j értékeit a háromszög-egyenlőtlenség alapján határozhatjuk meg $|l - 1/2| \leq j \leq |l + 1/2|$),
- m_j mágneses kvantumszám, amely a \mathbf{j} teljes impulzusmomentumnak egy kitüntetett irányra eső vetülete ($m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$).

A négy kvantumszám lehetséges kombinációira a Pauli-féle kizárási elv korlátozásokat jelent. A Pauli-elv kimondja, hogy az atom nem lehet olyan állapotban, amelyben egyidejűleg két vagy több elektronjának mind a négy kvantumszáma megegyezik. Ez azt jelenti, hogy minden kvantumállapot csak egy elektronnal lehet betöltve.

Az azonos n főkvantumszámmal rendelkező elektronok összessége héjat alkot. Az ugyanazon n főkvantumszámú és l mellékkvantumszámú, azaz ekvivalens elektronok alhéjat képeznek. Az $n = 1, 2, 3, \dots$ főkvantumszámú

héjakat rendre K, L, M,... betűkkel, az $l = 0,1,2,3,\dots$ mellékkvantumszámú alhéjakat pedig s, p, d, f,\dots betűkkel jelöljük. A Pauli-elv szerint egy alhéjon $2(2l+1)$ számú elektron helyezkedhet el. Ily módon az adott n főkvantumszámú elektronok maximális száma:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2. \quad (2.1.16)$$

Innen $n = 1,2,3,\dots$ -ra kapjuk, hogy a K-, L-, M-,... héjon rendre 2, 8, 18,...elektron foglalhat helyet, ill. az s -, p -, d -, f -,... alhéjak rendre legfeljebb maximum 2, 6, 10, 14,...elektront tartalmazhatnak.

Az elektronok különböző n, l állapotok szerinti eloszlását az atomban elektronkonfigurációnak nevezzük, amelynek megadása az alhéjak és az ekvivalens elektronok számának ismeretét jelenti. Az elektronkonfigurációt általában a következőképpen jelöljük: $(n_1 l_1)^{k_1} (n_2 l_2)^{k_2} \dots (n_q l_q)^{k_q}$, ahol n_i és l_i ($i=1,2,\dots,q$) az i -edik alhéj fő- és mellékkvantumszáma (utóbbit a megfelelő betűvel jelöljük), k_i pedig az $n_i l_i$ alhéjon elhelyezkedő elektronok száma ($k = \sum k_i$ az atom elektronjainak száma). Pl.: az argon atom elektronkonfigurációja: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. Azt a folyamatot, amelyben az elektronkonfiguráció változik, elektronátmenetnek nevezzük.

2.1.3 Atomi elektronok közötti csatolástípusok

Többelektros atomokban az elektronok nem mozognak egymástól függetlenül. Impulzusmomentumaik a közöttük lévő mágneses és elektromos kölcsönhatások révén csatolódnak egymáshoz és ezen kölcsönhatások egymáshoz viszonyított erősségétől függően adódnak össze az atom teljes \mathbf{J} impulzusmomentumává.

A legfontosabb csatolástípusok a következők [Lan78, You04, Eis85, Mar96, Bud94b]:

1. LS- vagy Russel-Saunders csatolás: Akkor alkalmazhatjuk, ha az atomban fellépő elektrosztatikus kölcsönhatások nagyságrendekkel nagyobbak a spin-pálya kölcsönhatásokhoz képest. Ekkor először az elektronok \mathbf{l}_i pálya-impulzusmomentumai csatolódnak az $\mathbf{L} = \sum \mathbf{l}_i$ eredő pályamomentummá, az \mathbf{s}_i spinmomentumai pedig az $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$ eredő spinmomentummá, majd pedig az \mathbf{L} és \mathbf{S} vektorok az atom $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ teljes impulzusmomentumává tevődnek össze. \mathbf{L} , \mathbf{S} és \mathbf{J} nagyságára nézve írhatjuk, hogy $|\mathbf{L}| = \sqrt{L(L+1)}\hbar$, $|\mathbf{S}| = \sqrt{S(S+1)}\hbar$ és $|\mathbf{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$. L , S és J rendre az atom pálya-impulzusmomentum, spin- ill. belső (a teljes impulzusmomentum) kvantumszámát jelenti ($J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$). Egy meghatározott L , S értékpárnak megfelelő energiaállapotot vagy termet a következőképpen jelölünk: Az $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ kvantumszám értékeknek megfelelően S, P, D, F, ... betűket írunk, a term $2S+1$ multiplicitását a nagybetű bal felső, a J kvantumszám értékét a jobb alsó indexeként írjuk, pl. $^1S_0, ^2P_{1/2}, ^2P_{3/2}, \dots$. Az LS-csatolás kis rendszámú ($Z < 20$) atomok esetén bizonyul jó közelítésnek.
2. jj-csatolás: Amikor az elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatás elhanyagolható a spin-pálya kölcsönhatáshoz képest, akkor először az egyes elektronok \mathbf{l}_i pálya- és \mathbf{s}_i spinmomentumai kapcsolódnak össze az elektronok $\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i$ teljes impulzusmomentumaivá, majd az összes elektron \mathbf{j}_i teljes impulzusmomentuma az atom $\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_i$ teljes impulzusmomentumává. Itt $|\mathbf{J}| = \sqrt{J(J+1)}\hbar$. A jj-csatolás nagy rendszámú ($Z > 40$) atomok esetén mutatkozik jó közelítésnek.

3. Közbenső csatolás: Ez akkor valósul meg, amikor az elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatás és a spin-pálya kölcsönhatás nagyságrendje közel azonos (közepes rendszámú atomok tartománya). Ekkor az állapotokat az LS- és jj-csatolt állapotok lineáris kombinációjaként írjuk le.

2.1.4 Alapvető elektronátmenetek

Alapállapotú atomok szerkezetéről jelenlegi ismereteink szerint nem tudunk információt szerezni kísérleti úton. Ahhoz, hogy megfigyelhető megnyilvánulásokra kényszerítsük az atomokat, gerjeszteni vagy ionizálni kell őket, és ezen elektronszerkezeti változások megfigyeléséből következtetünk vissza az alapállapotú atom felépítésére. Az atomoknak elektromágneses sugárzással (fotonokkal) vagy más részecskékkel (pl. elektron, proton, semleges atom vagy más nehezebb töltött részecske) való rugalmatlan ütközése során az atomból egy vagy több elektron kerülhet szabad állapotba (ionizáció) vagy magasabb, be nem töltött atomi pályára (gerjesztés). A szabadállapotú elektronok energia és irány szerinti eloszlása már jól mérhető. Az elektron(ok) helyén egy (vagy több) lyuk keletkezik, amely egy magasabb pályán lévő elektronnal töltődhet be. A két héj közötti energiakülönbséget egy elektromágneses kvantum (foton) vagy egy elektron (Auger-elektron) viszi el [Meh85, Car75], amelyek már kísérletileg jól megfigyelhetők. Az ütközési folyamat ilyen kétlépcsős tárgyalása, azaz amikor a gerjesztést és a bomlást két egymástól független folyamatnak tekintjük, csak nagy sebességű lövedékek esetén jó közelítés, amikor az ütközési idő elhanyagolható a gerjesztett állapotok élettartamához képest. Ha az atomi átrendeződési folyamatok időtartama összemérhető az ütközés idejével, a fejlődés kvázimolekuláris jellegűvé válik. Az általunk vizsgált energiatartományban azonban eltekinthetünk a kvázimolekuláris folyamatoktól és így a kétlépcsős modell használható.

2.1.4.1 Fotoelektromos effektus

Fotoelektromos effektus (fotoeffektus) esetén a foton, nagy valószínűséggel, teljes energiáját átadja egy atomi elektronnak, aminek következtében az atom gerjesztett állapotba kerül [Car75, Cow81]. Ha a foton energiája nagyobb, mint az adott héj kötési energiája, akkor fotoionizációról (bal felső ábra a 2.1.1 ábrán), ha kisebb, akkor fotogerjesztésről beszélünk (bal alsó ábra a 2.1.1 ábrán). Az első esetben az atom mint egyszeresen töltött ion, a másodikban mint semleges, gerjesztett állapotú atom marad vissza. Fotoionizációban emittált elektron (fotoelektron) E kinetikus energiával hagyja el az atomot, amely a bemenő foton $h\nu$ energiájával az alábbi kapcsolatban van:

$$E = h\nu - (E_i - E_f), \quad (2.1.17)$$

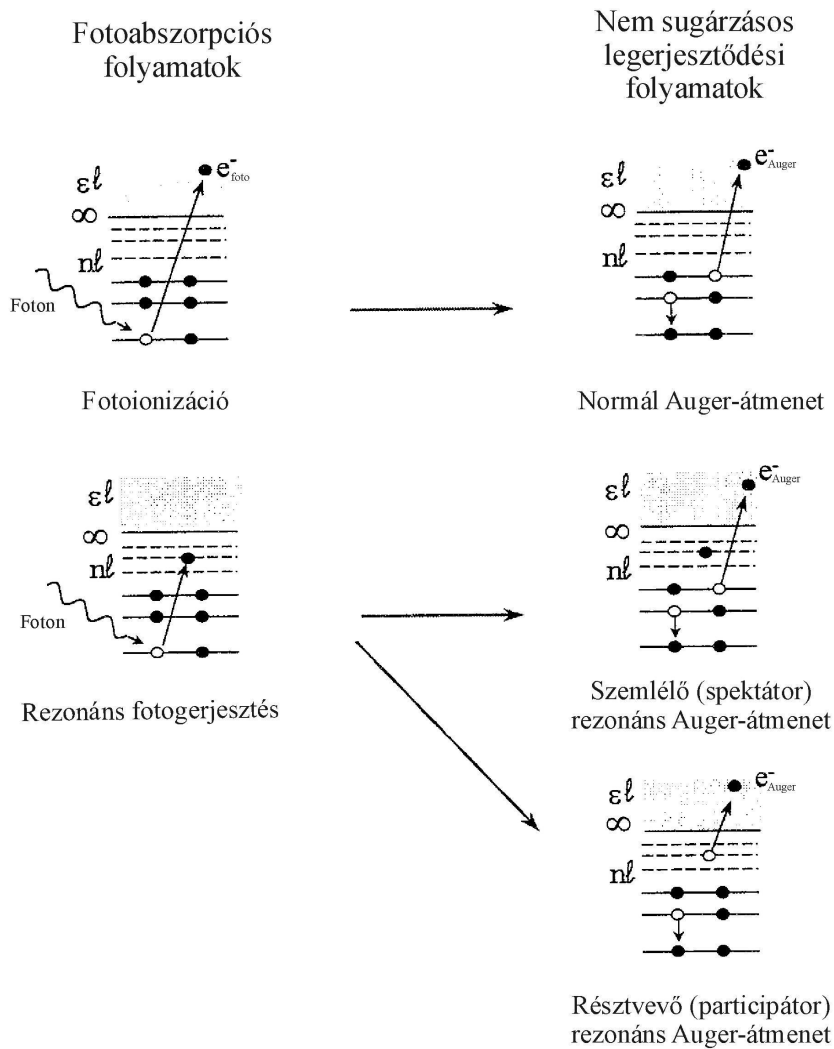
ahol E_i és E_f az atom teljes energiája a kezdeti és végállapotban. A jelenséget többen is vizsgálták a 19. század végén és a 20. század elején (pl. Hallwachs, Lénárd Fülöp), elméleti magyarázatát Einstein adta meg 1905-ben [Ein05].

Rezonáns fotogerjesztés (2.1.1 bal alsó ábra) esetén egy kötött elektron betöltetlen, külső héjra kerül (Rydberg-pálya), amelynek a főkvantumszáma nagyobb, mint az alapállapotban bármelyik betöltött pálya főkvantumszáma. Ez a gerjesztési folyamat akkor jöhet létre, ha a beérkező foton energiája pontosan megegyezik a két nívó közötti energiakülönbséggel.

2.1.4.2 Auger-effektus

Az ionizációs vagy gerjesztési folyamat eredményeként az alapállapotban lévő atom belső héjainak egyikén egy (vagy több) lyuk (vakancia, elektronhiány) keletkezik, amely egy magasabb pályán lévő elektronnal töltődhet be. A legerjesztődésnek azt a módját, amikor a lyuk betöltődésekor felszabaduló energia egy magasabb héjon lévő elektronnak adódik át úgy, hogy ezáltal az

szabad állapotba kerül, Auger-folyamatnak nevezzük, az emittált elektront pedig Auger-elektronnak [Meh85] (2.1.1 jobb oldali ábrák). Az elnevezés onnan ered, hogy ezt a típusú folyamatot Pierre Auger francia fizikus figyelte meg 1923-ban [Aug25].



2.1.1 ábra Fotoabszorpciós és nem sugárzásos legerjesztődési folyamatok.

Az Auger-elektron E_A kinetikus energiája [Meh78]:

$$E_A = E_i^+ - E_f^{++}, \quad (2.1.18)$$

ahol E_i^+ és E_f^{++} az atom egyszeresen (kezdeti állapot) ill. kétszeresen (végállapot) ionizált állapotának teljes energiája.

Az átmenetek jelölésére hárombetűs szimbólumokat használunk. Pl. K-L₂L₃ egy olyan folyamatot jelent, ahol a kezdeti K-héj vakanciát az L₂-héj ($n=2, j=1/2$) egy elektronja tölti be és az Auger-elektron az L₃-héjról ($n=2, j=3/2$) emittálódik. Ha a vakancia és az azt betöltő elektron ugyanazon a héjon (de különböző alhéjakon) vannak, akkor az átmenetnél felszabaduló többletenergia mennyisége kicsi, így ezt csak aránylag gyengén kötött elektron tudja elvinni. Az ilyen átmenetet nevezzük Coster-Kronig típusú átmeneteknek [Cos35]. Ezek az átmenetek főleg nagyobb rendszámú atomoknál jelentkeznek számottevően, mivel itt az alhéjak közötti kötési energia-különbség elegendően nagy, hogy egy külső kötött elektron a bomlás során szabad állapotba kerüljön. A Coster-Kronig folyamat speciális esete a szuper Coster-Kronig folyamat. Ebben az esetben, az átmenetben résztvevő mindhárom elektron ugyanazon a héjon van.

Ha a kezdeti állapotban egyetlen belső lyuk van, akkor diagram (normál) Auger-átmenetről beszélünk (2.1.1 jobb felső ábra). Amennyiben a kezdeti állapotban a belső lyuk mellett még egy vagy több elektron hiányzik vagy egy gerjesztett állapot van (itt fotonnal történő gerjesztés esetén az ún. rezonáns Auger-átmenetekről van szó), akkor az átmenetet szatellit Auger-átmenetnek nevezzük. Rezonáns Auger-átmeneteknél, attól függően, hogy a gerjesztett elektron részt vesz-e az elbomlásban vagy sem, résztvevő (participátor) ill. szemlélő (spektátor) rezonáns Auger-átmenetekről beszélünk (2.1.1 jobb oldali alsó és középső ábra). Ha a gerjesztő forrásként alkalmazott fotonnyaláb szélessége keskenyebb, mint a gerjesztett (rezonancia) állapot természetes vonalszélessége, akkor a folyamatot rezonáns Raman Auger-effektusnak nevezzük. Ebben az esetben az elektronspektrumban az Auger-csúcs

energiaszélessége megegyezik a fotonéval és lehetőséget biztosít az átfedő vonalak szétválasztására ill. nívószélességének kísérleti meghatározására.

2.1.5 Fotoelektronok szögeloszlása

Az atomok elektromágneses térrel való kölcsönhatását elméletileg az időtől függő perturbációs számítás segítségével írjuk le [Nag78, Woo80], amelyben az elektromágneses teret a klasszikus elektrodinamika alapján állítjuk elő (félklasszikus tárgyalásmód). Ebben a közelítésben, amely számot ad az atomok sugárzásáról és fényelnyeléséről, az i -edik állapotból az f -edik állapotba történő átmenet időegységre eső valószínűségét (W_{if}) a Fermi-féle aranyszabály [Woo80, Co076, Sch97, Cra96] adja meg:

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|T|i\rangle|^2 \rho(E_f), \quad (2.1.19)$$

ahol $|i\rangle$ és $|f\rangle$ a kezdeti és végállapotot jelöli, $\rho(E_f)$ a végállapot energiasűrűsége, T a kölcsönhatási operátor.

Fotoionizáció esetén a kezdeti állapot egy atomi kötött állapot (általában az alapállapot), a végállapot folytonos állapot (visszamaradó ion és egy vagy több szabad elektron), a kölcsönhatási operátor pedig

$$T = \mathbf{A} \alpha \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \mathbf{P} \nabla_j, \quad (2.1.20)$$

ahol $|\mathbf{A}|$ a fotonnyaláb intenzitását adja meg, \mathbf{k} és \mathbf{P} a foton hullámszám ill. polarizációs vektora ($|\mathbf{k}| = \alpha\omega$, ahol ω a foton frekvenciája), \mathbf{r}_j a j -edik elektron helyzetvektora, ∇_j a gradiens operátor (\mathbf{r}_j szerinti) és α a finomszerkezeti állandó. A fotoionizáció differenciális hatáskeresztmetszetét a következő kifejezés adja meg:

$$\frac{d\sigma(E, \theta, \Phi)}{d\Omega} = \frac{4\pi^2\alpha}{\omega} \left| \langle f | T | i \rangle \right|^2 = \frac{4\pi^2\alpha}{\omega} \left| \langle f | \sum_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \mathbf{P}\nabla_j | i \rangle \right|^2, \quad (2.1.21)$$

ahol E az emittált fotoelektron kinetikus energiája, θ és Φ pedig a polarizációs vektorhoz képesti polár és azimutális szög.

A differenciális hatáskeresztmetszet (2.1.21) kifejezésében, a számolások egyszerűsítése érdekében, a foton elektromos terének térbeli eloszlását leíró $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ kifejezést $\mathbf{k}\mathbf{r}$ szerint Taylor-sorba fejtjük:

$$\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \approx 1 + i\mathbf{k}\mathbf{r} + \frac{(i\mathbf{k}\mathbf{r})^2}{2!} + \frac{(i\mathbf{k}\mathbf{r})^3}{3!} + \dots \quad (2.1.22)$$

Ezt az eljárást a klasszikus elektrodinamikai analógia alapján multipól sorfejtésnek nevezzük. Elektromos dipól-közelítést kapunk, ha a Taylor-sorban az első tag kivételével a magasabb rendű tagokat elhanyagoljuk, azaz a kifejezést $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \approx 1$ -gyel közelítjük. Ez akkor tekinthető jó közelítésnek, amikor a foton hullámhossza lényegesen nagyobb az atom méretéhez képest. A sorfejtésben ez a tag az elektromos dipól (E1) kölcsönhatásnak felel meg. A sorfejtés első rendű tagjának figyelembe vételével a kölcsönhatási operátor $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \approx 1 + i\mathbf{k}\mathbf{r}$ alakú lesz, amely az elektromos kvadrupól (E2) és a mágneses dipól (M1) típusú kölcsönhatásokat írja le. A következő, kvadratikusság tag, az elektromos oktapól (E3) és mágneses kvadrupól (M2) multipólusoknak felel meg, és így tovább. A multipól sorfejtés alkalmazásával a differenciális hatáskeresztmetszet alakja a következő:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto E1 \cdot E1 + E1 \cdot E2 + E1 \cdot M1 + E1 \cdot E3 + E2 \cdot E2 + E1 \cdot M2 + \dots, \quad (2.1.23)$$

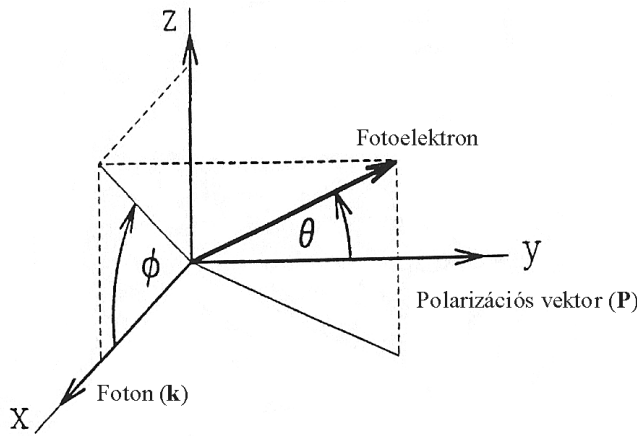
ahol a vegyes tagokat ($E1 \cdot E2$, $E1 \cdot M1$, ...) az irodalomban interferencia tagnak is nevezik.

Alacsony fotonenergián ($h\nu \leq 5$ keV), ahol a dipól kölcsönhatás domináns a magasabb rendű foton kölcsönhatásokhoz képest, a fotoionizáció leírására

általában a dipól-közelítést használják. Ez esetben a lineárisan polarizált fényvel létrehozott fotoionizáció differenciális hatáskeresztmetszetét a következő kifejezés adja [Sch97, Coo93]:

$$\frac{d\sigma_{nl}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}}{4\pi} (1 + \beta P_2(\cos \theta)), \quad (2.1.24)$$

ahol $P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$ a másodrendű Legendre-polinom, σ_{nl} az nl atomi héj teljes fotoionizációs hatáskeresztmetszete, β az elektromos dipól (E1) kölcsönhatás anizotrópia paramétere és θ a fotoelektron impulzus vektora és a foton polarizációs vektora közötti szög (lásd 2.1.2 ábrán). Ebben a közelítésben minden magasabb rendű kölcsönhatást, mint pl. elektromos kvadrupól (E2) és mágneses dipól (M1), elhanyagolnak.



2.1.2 ábra A θ polárszög és a ϕ azimutális szög definíciója. [Hem97]

Nondipól-közelítésben az E2 és M1 kölcsönhatások figyelembe vételével, lineárisan polarizált fényvel, véletlenszerűen orientált mintából emittált fotoelektronok szögeloszlását a következő kifejezés írja le [Coo93]:

$$\frac{d\sigma_{nl}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}}{4\pi} (1 + \beta P_2(\cos \theta) + [\delta + \gamma \cos^2 \theta] \cos \phi \sin \theta), \quad (2.1.25)$$

ahol σ_{nl} az nl atomi héj teljes fotoionizációs hatáskeresztmetszete, $P_2(\cos\theta)$ a másodrendű Legendre-polinom, β az elektromos dipól (E1), γ és δ az elektromos kvadrupól (E2) és mágneses dipól (M1) kölcsönhatás anizotrópia paraméterei, θ a fotoelektron impulzus vektora és a foton polarizációs vektora közötti polárszög és ϕ a foton terjedési vektora és a fotoelektron impulzusának a foton polarizációs és terjedési vektora által kifeszített síkra merőleges síkba (XZ sík) eső vetülete közötti azimutális szög (lásd 2.1.2 ábrán).

Krause és Wuilleumier [Wui74] a fotoelektronok szögeloszlásában a dipól szögeloszlástól való eltérést figyelt meg közel 30 évvel ezelőtt 1 és 2 keV (azaz alacsony) fotonenergián, amit a magasabb rendű multipól kölcsönhatásnak tulajdonítottak. Ezek az ún. nondipól effektusok elsődlegesen a dipól-közelítés első rendű (E2 és M1) korrekciójának tulajdoníthatók. Hemmers és munkatársai a Ne $2s$ és $2p$ fotoelektronok szögeloszlásában mutattak ki nondipól hozzájárulást a 250-1200 eV fotonenergia-tartományban [Hem97].

Az elmúlt évtizedben számos elméleti munka foglalkozott a fotoionizációban fellépő nondipól effektusokkal. Bechler *et al* [Bec90], Cooper *et al* [Coo90, Coo93] ill. Derevianko és munkatársai [Der99] relativisztikus független részecske modell (**r**elativistic **i**ndependent **p**article **m**odel, RIPM) számolásokat közöltek széles atomszám és fotonenergia-tartományban, amelyekben a fotoelektronok szögeloszlásának elsőrendű nondipól korrekcióját is figyelembe vették. A független részecske modellben feltételezik, hogy minden egyes elektron a mag és a többi elektron átlagterében mozog és az egyes elektronok közötti kölcsönhatást elhanyagolják. Ezek az elméleti munkák relatíve nagy nondipól járulékot jósoltak még néhány száz eV fotonenergián is. A különböző ionizációs csatornák közötti kölcsönhatást is figyelembe vevő nem relativisztikus véletlen fázisú közelítésen (**r**andom **p**hase **a**pproximation with **e**xchange, RPAE) [Amu77, Amu99, Amu01] ill. ennek relativisztikus (**r**elativistic **r**andom **p**hase **a**pproximation, RRPA) [Joh79a, Joh79b, Kut89, Dol99, Joh99] változatán

alapuló számítások rezonanciaszerű nondipól hatást mutattak az anizotrópia paramétereiben számos valencia alhéjra a belsőbb héjak ionizációs küszöbe körüli fotonenergia-tartományban. Amusia és munkatársai RPAE számolásaikban [Amu01] kimutatták, hogy a Xe $5s$ és $5p$ héjak $4d$ héjjal való csatolásának erős hatása van a nondipól paraméterekre 150 eV körüli fotonenergián. Johnson és Cheng RRPA számolása [Joh01, Joh02] szerint 200 eV alatti fotonenergián a γ és δ nondipól paraméterek rezonanciaszerű viselkedésére további hatással van, ha aXe $5s$ és $5p$ héjak $4s$ és $4p$ héjakkal való csatolását is figyelembe vesszük. Gorczyca és Robicheaux [Gor99] R-mátrix eljárással számolásokat végzett az argon $2p^{-1}ns(md)$ fotogerjesztett állapotaira a direkt fotoionizáció és a rezonáns gerjesztést követő participátor Auger-átmenetek közötti interferencia figyelembe vételével. Úgy találták, hogy az interferencia fontos szerepet játszik az Ar $3p$ fotoelektronok szögeloszlásának pontos leírásában ill. azt is megjósolták, hogy az interferencia effektus megfigyelhető nagy felbontású mérésekben.

Nayadin és munkatársai [Nay01] valamint Camilloni és munkatársai [Cam96] argon céltárgy esetén kísérletileg megfigyeltek interferencia effektusokat a direkt fotoionizáció és a spektátor rezonáns Auger-folyamatok között.

2.2 Kiütött elektronok többszörös szóródása a céltárgy és a lövedék Coulomb-terén

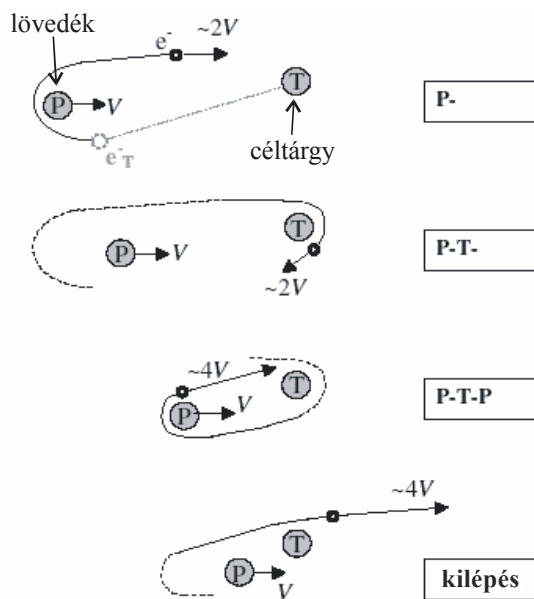
Ebben a fejezetben a Fermi-féle gyorsítási mechanizmust és a leírására leggyakrabban használt klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) számolást mutatom be.

2.2.1 Fermi-féle gyorsítási mechanizmus

Fermi 1949-ben adott egy lehetséges magyarázatot a nagyenergiájú kozmikus sugárzás keletkezésére [Fer49]: A világűrben a töltött részecske-áramok által keltett óriási méretű mágneses terek minden irányban mozoghatnak, így egymással szemben is. Az ilyen terek a folyamatba megfelelő kezdősebességgel és helyes irányban belépő töltött részecskéket nagyon nagy energiára tudják felgyorsítani. A gyenge, de hatalmas kiterjedésű (és nagy effektív tömegű) mozgó mágneses terekbe hatoló részecske nagy sugarú pályán mozogva végül legtöbbször visszafordul. Ha a részecske és a mágneses tér a világűr „laboratóriumi rendszerében” eredetileg egymással szemben mozogtak, akkor a mozgó mágneses térről visszaverődő, a mágneses térhez képest könnyűnek tekinthető részecske kinetikus energiája megnő. Néhány MeV-es protonok esetében a visszaverődések hosszú sorozata akár GeV nagyságrendű energiát is eredményezhet.

Ezzel a Fermi-féle gyorsítással analóg folyamat atomi szinten is lejátszódhat. Ekkor a mágneses terek szerepét az atomok, molekulák vagy atomfürtök (klaszterek) mikroszkópikus terei veszik át. Ion-atom ütközésekben a Fermi-féle gyorsítás mechanizmusa a kiütött elektronnak a céltárgy és a lövedék iontörzseinek árnyékolt Coulomb-terén történő többszöri szóródásával jár.

Klasszikus képben ez egy ping-pong játszmahoz hasonlítható. A 2.2.1 ábrán példaként a céltárgy ionizációjához tartozó háromszoros elektronszóródási (P-T-P) folyamatot láthatunk [Sul03]. Az ábrán P-vel az elektron-lövedék szórását (az elektronnak a lövedékion terén történő szóródását), T-vel pedig az elektron-céltárgy szórását jelöljük. Az egyszerűség érdekében a céltárgy lövedékkel kölcsönható (aktív) elektronját ütközés előtt nyugalomban lévőnek tekintjük. Az első lépésben (P-folyamat) a V sebességgel közeledő nehéz lövedékion szorosan (kis ütközési paraméterrel) ütközik a céltárgy egyik elektronjával, melynek eredményeként az elektron előreszóródik a laboratóriumi rendszerben gyakorlatilag $2V$ sebességgel. A második (T-folyamat) lépésben a nagy sebességű, szabaddá vált elektron visszaszóródik a céltárgyion terén. A harmadik lépésben (P-folyamat) az elektron ismét szorosan ütközik a lövedékionnal, visszaszóródik annak terén és közben a sebessége újból közelítőleg $2V$ -vel növekszik. Végül kb. $4V$ sebességgel elhagyja az ütközési zónát a lövedék irányához képesti kis szögben.



2.2.1 ábra Példa a Fermi-féle gyorsítási mechanizmusra (háromszoros elektronszóródási folyamat (P-T-P)) [Sul03]. P az elektron-lövedék szórás, T az elektron-céltárgy szórás, e_T az aktív céltárgy elektron és e^- az e_T elektron szabad állapotban.

A rugalmas szórás törvényeiből következik, hogy a kistömegű (m) ($m \ll M_p, M_T$) elektron sebessége gyakorlatilag $2V$ -vel növekszik a V sebességgel mozgó nehéz lövedék (M_p) terén való visszaszóródáskor, míg a nagytömegű céltárgyon (M_T) történő visszaszóráskor csak az elektron mozgásának iránya változik, sebessége nem.

A 2.2.1 ábra jelölésmódja szerint a jól ismert „kettős ütközési” (binary encounter, BE) folyamatot [Lee90, Sto97], azaz a bombázóion és a céltárgy egy elektronja közötti közeli (kis ütközési paraméterű) ütközés révén létrejövő céltárgyionizációt P-vel jelöljük. Az elektronvesztési folyamat (EL) [Dre76], vagyis a lövedék ionizációja a céltárgy tere által, T-vel jelölhető. Látható, hogy a bevezetett jelöléssel hosszabb sorozatok pl. P-T-P, T-P-T-P is azonosíthatók. A céltárgy ionizációjához tartozó folyamatok mindig egy P folyamattal kezdődnek, míg a lövedék ionizációjához (elektronvesztési folyamat) tartozó sorozatok mindig egy T folyamattal.

Eltételezve az elektron kötött állapotú mozgásából származó sebességtől és az ütközések során az atommagok által elszenvedett magmeglökődéstől (recoil-folyamat), céltárgyionizáció esetén a P-T-P-...-Pⁿ-T^m ($n-1 \leq m \leq n$) többszörös szórást szenvedett elektron sebessége (v) laboratóriumi rendszerben a θ kirepülési szög ill. a V lövedéksebesség függvényében a következő [Sul02]:

$$v = \begin{cases} V \left(\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta + 2m(2m+2)} \right) & \text{ha } m < n \\ 2nV & \text{ha } m = n, \end{cases} \quad (2.2.1)$$

ahol n a lövedéken való szóródások száma és m a céltárgyon való szóródások száma. Hasonló formula adható a T-P-T-...-Tⁿ-P^m ($n-1 \leq m \leq n$) többszörös szórást szenvedett ionizált lövedékelektron sebességére is. A céltárgy ionizációjához tartozó folyamatokban emittált elektronok sebessége a lövedék mozgásához képesti előre és hátra irányokban $2nV$ körüli értéket vehet fel, ahol n

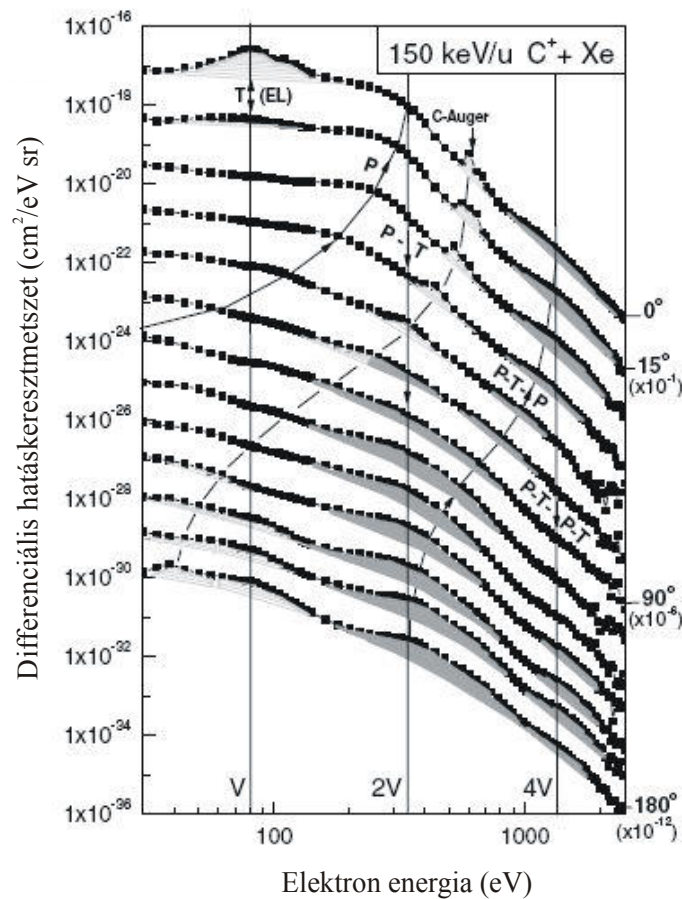
a lövedéken való szóródások számát jelenti, míg a lövedék ionizációja esetén ez az érték közelítőleg $(2n+1)V$.

A Fermi-féle gyorsítási mechanizmus kísérleti észlelése először ion-szilárdtest ütközésekben történt [Bar92, Sch93, Yam90, Yam92], ahol széles lövedékenergia tartományban (keV-GeV) gyors elektronoknak a vártnál nagyobb intenzitását tapasztalták. Ion-atom ütközésekben a Fermi-féle gyorsítás első két szekvenciáját ionizált lövedékelektronra (T-P folyamat) először Suarez és munkatársai [Sua96] azonosították $H+He$ ütközésekben. Az elektronspektrumban megnövekedett intenzitást figyeltek meg a lövedék irányához képest előreszögben közelítőleg háromszoros lövedéksebességnek megfelelő elektronenergián. Céltárgyionizációnál ennek a kétszeres szórási effektusnak megfelelő P-T folyamatot Bechtold és munkatársai mutatták ki [Bec97, Bec98] 5.9 MeV/u energiájú U^{27+} ionnak gáz céltárgyakkal való ütközésében.

A Fermi-féle gyorsítás első elméleti leírását Wang és munkatársai [Wan91] adták elektronoknak modellpotenciálokra történő szóródásaiban. Számolásaikban nulla hatótávolságú potenciálokra (Dirac-delta) alapozott kvantummechanikai modellt alkalmaztak kétcentrumú ütközésekben. Nulla ütközési paraméternél, a lövedék sebességének függvényében meghatározták az "ionizációs valószínűségeket", amelyek tisztán mutatták a többszörös szórási szekvenciákat. Ezt klasszikus [Jak95, Rei98, Sul99a, Jak96] és más kvantummechanikai [Jak96, Ovc99] elméleti leírások követték, teljes értékű elméleti leírás azonban még nem létezik. Legjobb közelítésnek ma a klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) számítások [Spa95, Rei98, Sul99a, Sul01, Sul02, Tök05] tekinthetők.

Az elmúlt években egyre szélesebb körben vizsgálták a Fermi-gyorsítás folyamatát ion-atom és ion-szilárdtest ütközésekben [Rei98, Rot98a, Rot98b, Lan01, Lan03]. Lanzano és munkatársai [Lan99] sikeresen magyarázták a relativisztikus sebességű elektronok nagy hozamát a Fermi-féle gyorsítási

mechanizmussal 45 MeV/u energiájú Ni atomok Au céltárggyal való ütközésében. Az ATOMKI-ban Sulik és munkatársai [Sul99a, Sul99b, Sul01, Sul02, Sul03] végeztek hasonló jellegű méréseket közepes lövedéksebességeken különböző ütközési rendszerekre ionok és atomok ütközéseiben. Sikeresen azonosították a kétszeres (P-T), háromszoros (P-T-P) és négyszeres (P-T-P-T) szórási sorozatokat. A 2.2.2 ábrán példaként mutatom be az 1.8 MeV (150 keV/u) $C^+ + Xe$ ütközésre vonatkozó kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket a kilökött elektron energiájának függvényében 0° - 180° szögtartományban [Sul02]. Az árnyékolással jelzett viszonylag nagy intenzitásnövekedések feleltethetők meg a P-T, P-T-P és P-T-P-T többszörös szórási mechanizmusoknak.



2.2.2 ábra A kirepülő elektronok energiája és szöge szerint kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek az 1.8 MeV (150 keV/u) $C^+ + Xe$ ütközésben az elektronenergia függvényében a 0° és 180° közötti szögtartományban. [Sul02]

Az elektron a Fermi-féle gyorsítás során egy olyan folyamatban válik szabaddá, amely egy speciális háromtest-állapottal társítható. Az ilyen jellegű folyamatok vizsgálata alapvető fontosságú az atomi ütközések fizikájában. Ionbombázás esetén a folyamatból ily módon szabaddá váló gyors (nagy energiájú) elektronok egy hosszú hatótávolságú másodlagos sugárzást jelentenek, ezért a Fermi-gyorsítás folyamata általában fontos az ion-anyag kölcsönhatásokban és ebből kifolyólag sok alkalmazásban is, mint pl. daganatos betegségek sugárterápiája, anyagok tulajdonságainak megváltoztatása, ionnyomok keltése szilárd anyagokban, stb.. Elmondható tehát, hogy fontos a mechanizmus további vizsgálata, tulajdonságainak részletesebb megismerése és a folyamat pontosabb megértése ill. leírása.

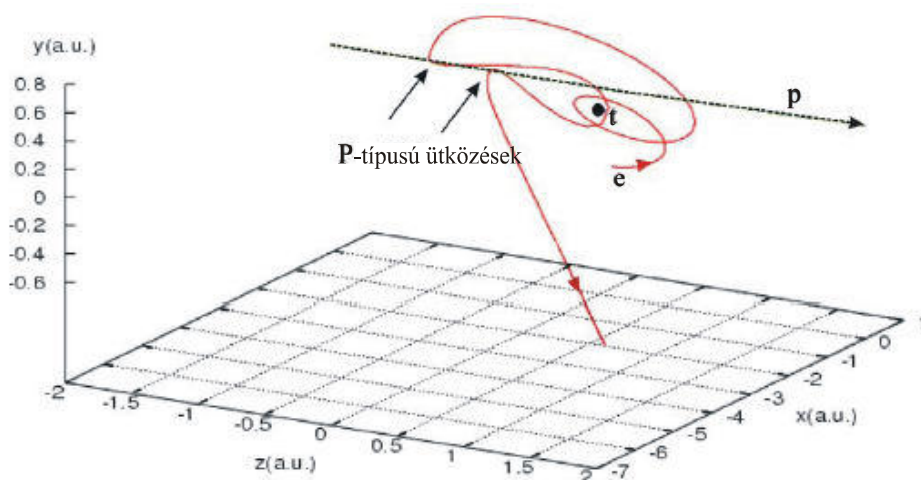
2.2.2 A háromtest klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) számolás

A klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) [Spa95, Rei98, Tök00, Tök05] közelítés egy nem-perturbatív modell, amely az atomi ütközésekben résztvevő részecskék mozgását klasszikus fizikai alapon tárgyalja. Az elektront és a nehéz lövedék ill. céltárgy magot véletlenszerűen kiválasztott fázistérpontokból indítják úgy, hogy az ütközés előtti elektronmozgás lényegében a céltárgymag körüli Bohr-pályáknak feleljen meg. Ezután megoldják a Newton-egyenleteket a háromtest-rendszerre [Tök05, Abr66, Ols77, Tök00]. A céltárgyatom-elektron és a lövedékion-elektron kölcsönhatásokat vagy Coulomb-potenciállal vagy centrális modellpotenciállal [Gree73] írják le, ahol a paramétereket a Hartree-Fock eljárással határozzák meg. A mozgásegyenleteket idő szerint integrálják. Az ütközés utáni szakaszon számolt részecskepályákat megvizsgálva dönthető el, hogy milyen végállapotba kerül a rendszer.

A kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket a

$$\frac{d^2\sigma_i}{dE d\Omega} = \frac{2\pi b_{\max} \sum_{j=1}^N b_j^{(i)}}{N \Delta E \Delta \Omega} \quad (2.2.2)$$

kifejezéssel [Tök05] határozzák meg, ahol $b_j^{(i)}$ a j -edik egyedi pályaszámolásoknak megfelelő ütközési paraméter, N a maximális ütközési paraméternél (b_{\max}) kisebb ütközési paraméterrel rendelkező pályák teljes száma, ΔE és $\Delta \Omega$ pedig az elektron energia és emissziós-térszög intervalluma.



2.2.3 ábra Példa egy P-T-P típusú „CTMC eseményre”, ahol t a céltárgy magját, e az aktív céltárgy elektront és p a lövedéket jelenti. A lövedék pályáját szaggatott vonal, míg az elektront folytonos vonal jelöli. A lövedék- és elektronpályák két találkozási pontját nyilak mutatják. [Ric05b]

Egy folyamat hatáskeresztmetszetének meghatározásához nagyszámú véletlenszerű kezdeti feltételekkel indított ütközést kell végigszámolni, azaz szimulációt kell végezni. A kölcsönhatási potenciálok alakja analitikus, a Hartree-Fock számításokra való illeszkedést biztosító változtatható paraméterekkel. Ez lehetővé teszi az elektronmozgás gyors leírását árnyékolt

iontörzsek terében is. A CTMC számolások egy másik fontos tulajdonsága az egyedi ütközési események pályáinak vizsgálata, ami lehetővé teszi a Fermi-féle gyorsítási mechanizmus egyszeres és többszörös szórási sorozatainak azonosítását. A 2.2.3 ábrán egy ilyen „CTMC esemény” látható [Ric05b] példaként, ahol t a céltárgy magját, e az aktív céltárgy elektront és p a lövedéket jelenti. A lövedék pályáját szaggatott vonal, míg az elektront folytonos vonal jelöli. Látható, hogy a lövedék és elektron pályák két ponton találkoznak egymással (ezeket nyilak mutatják), amelyek két egymást követő, szoros ütközésnek (P folyamatnak) felelnek meg az elektron és a lövedékion között.

3. Kísérleti berendezések

3.1 Gerjesztő források

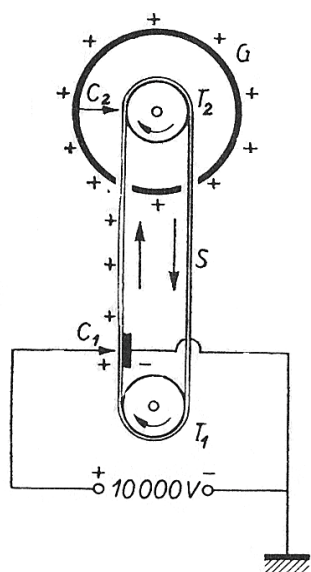
Ebben a fejezetben ismertetem a munkám során gerjesztő forrásként használt berendezéseket, úgymint az ATOMKI 5 MV-os Van de Graaff generátorát (VdG) és a lundi (Svédország) harmadik generációs MAX-II 1.5 GeV energiájú elektron-szinkrotronját. A méréseknél a VdG jobb oldali 30^0 -os nyalábcatornáján az ESA-21 elektron spektrométerrel, míg a MAX-II szinkrotron I411 nyalábcatornáján az ESA-22 analizátorral detektáltuk az ütközés során emittált elektronokat.

3.1.1 Van de Graaff generátor

A Van de Graaff generátor egy elektrosztatikus részecskegyorsító, amelynek működési elve a következő [Sim73, Bud94a]: A motorral meghajtott T_1 és T_2 tárcsákon (3.1.1 ábra) körülfutó, selyemből vagy alkalmas szigetelő anyagból készült S szalagot a néhány kV feszültségű C_1 csúcs feltölti. A töltés a C_2 túsoron keresztül a szigetelt G elektróda külső felületére kerül. E folyamat állandó ismétlődése következtében az elektróda addig töltődik, amíg a térerő a 'legveszedelmesebb' helyen meg nem haladja az átütési szilárdságot, illetve amíg a töltő áram nagyobb, mint a veszteségi áram (ez utóbbi a szigetelő felületén, a gyorsítócső ellenállás-osztóláncán folyó áram és a gyorsított részecskeáram összege).

1 MV feletti feszültségek esetén a méretek csökkentésére a Van de Graaff gyorsítót olyan tartályba helyezik, amelyben nagy nyomású és nagy átütési szilárdságú szigetelő gáz van (általában N_2 és CO_2 keveréke). Az átütési szilárdság tovább növelhető freon (CCl_2F_2) vagy kénhexafluorid (SF_6)

hozzákeverésével, illetve az elektródarendszer alakjának kedvező megválasztásával (élek, sarkok lekerekítésével).



3.1.1 ábra Van de Graaff generátor. T_1 és T_2 a tárcsákat, S a szigetelő anyagból készült szalagot, C_1 a feltöltő csúcsot, C_2 a túsort és G a szigetelt elektródát jelöli. [Bud94a]

Az ATOMKI-ban végzett mérésekhez a nagyenergiájú ionnyalábot az ATOMKI 5 MV-os Van de Graaff generátora szolgáltatja [Kol79]. A gyorsító rádiófrekvenciás ionforrásában keletkezett ionok a gyorsítócsőben történő gyorsulás után az analízáló mágnesen haladnak keresztül. A gyorsító öt nyalábcatornával rendelkezik. Az ionokat egy kapcsolómágnes segítségével juttatják el a különböző nyalábcatornákra. A nyaláb fókuszálását és finom mozgatóását mágneses kvadrupól lencsék végzik.

Az ütközési folyamatok során emittált elektronok detektálására a jobb oldali 30^0 -os nyalábcatornán lévő ESA-21 elektron spektrométert használtuk. Az analízátor előtt egy kollimátor rendszert helyeztünk el az ionnyaláb helyzetének meghatározására ill. méretének és szögterjedésének csökkentése érdekében.

3.1.2 Szinkrotron sugárzás és tárológyűrűk

Ha egy töltött részecske sebességét változtatja (gyorsul, lassul vagy mozgásának iránya megváltozik), elektromágneses sugárzás lép fel, amely csökkenti a töltött részecske kinetikus energiáját. Relativisztikus sebességű ($v \approx c$) töltött részecskénél az emittált sugárzást szinkrotron sugárzásnak nevezzük [Ber94, Mun87, Mar88, Koc83]. A leadott teljesítmény egyenesen arányos a részecske energiájának negyedik hatványával és fordítva arányos a részecske tömegének negyedik hatványával, így nagy tömegű részecskékkel nagy intenzitású szinkrotron sugárzást előállítani nehézkes [Mar88, Mun87]:

$$P = \frac{2}{3} \frac{q^2 c}{R^2} \left(\frac{E}{m_0 c^2} \right)^4 \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right), \quad (3.1.1)$$

ahol P a leadott teljesítmény, c a fénysebesség, q , R , E és m_0 a részecske töltése, pályájának görbületi sugara, kinetikus energiája és nyugalmi tömege. Látható, hogy a leadott teljesítmény növelhető nagy energiájú, könnyű részecskék (a gyakorlatban elektron) használatával.

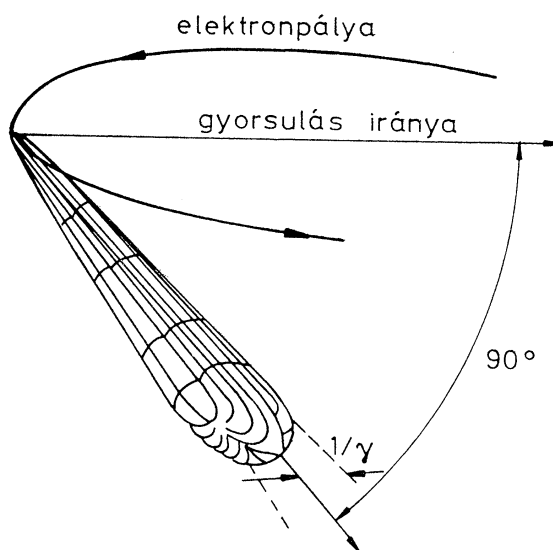
Ezt a sugárzást először 1947-ben a General Motors szinkrotron laboratóriumában észlelték [Eld47] (innen ered a sugárzás neve). Szinkrotron sugárzás minden ciklikus gyorsítóban és tárológyűrűben fellép. A szaknyelvben többnyire szinonimaként használják a tárológyűrű és a szinkrotron fogalmakat. A szinkrotron sugárzás jellemzői:

- Határozott irányfüggés: a sugárzás igen szűk kúpszögben az elektronpálya érintője irányában előre lép ki (3.1.2 ábra). A fél kúpszöget ($1/\gamma$) a következő kifejezés adja meg:

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{m_0 c^2}{E}. \quad (3.1.2)$$

Látható, hogy minél nagyobb az elektron kinetikus energiája, annál kisebb kúpszögben lép ki a sugárzás.

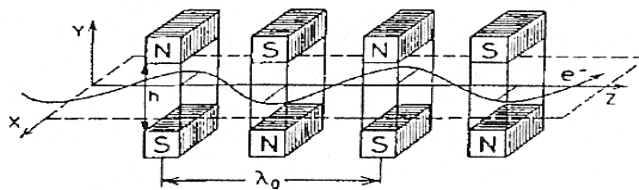
- Nagy fotonintenzitás.
- A kibocsátott elektromágneses sugárzás széles, folytonos spektrális eloszlású (néhány eV-től néhányszor tíz keV-ig), amelyből általában monokromátorral kell kiválasztani a szükséges fotonenergiát.
- A szűk kúpszög miatt a sugárzás erősen kollimált.
- Polarizált és koherens sugárzás hozható létre.
- Pulzált időstruktúra: Az elektronok a tárológyűrűben csomagokban keringenek órákon át, ezért a sugárzás adott irányban meghatározott időnként bizonyos ideig lép fel.



3.1.2 ábra Relativisztikus elektronenergiák esetén keletkező szinkrotronsugárzás emissziós képe. [Ber94]

Az 1970-es években kezdték el építeni a második generációs szinkrotronokat (pl. TANTALUS, Wisconsin, USA) kifejezetten fotonnyaláb előállítására. Ezekben eltérítő mágneseket használnak szinkrotron sugárzás létrehozására, míg a manapság leggyakrabban alkalmazott harmadik generációs szinkrotron-sugárforrásokban már wigglereket és undulátorokat. A wigglerék és undulátorok

lényege, hogy periódikusan elhelyezett mágnesek sorával az eredetileg egyenes vonalban haladó elektront sokszoros irányváltásra, hullámvonal alakú pályára kényszerítik (3.1.3 ábra).

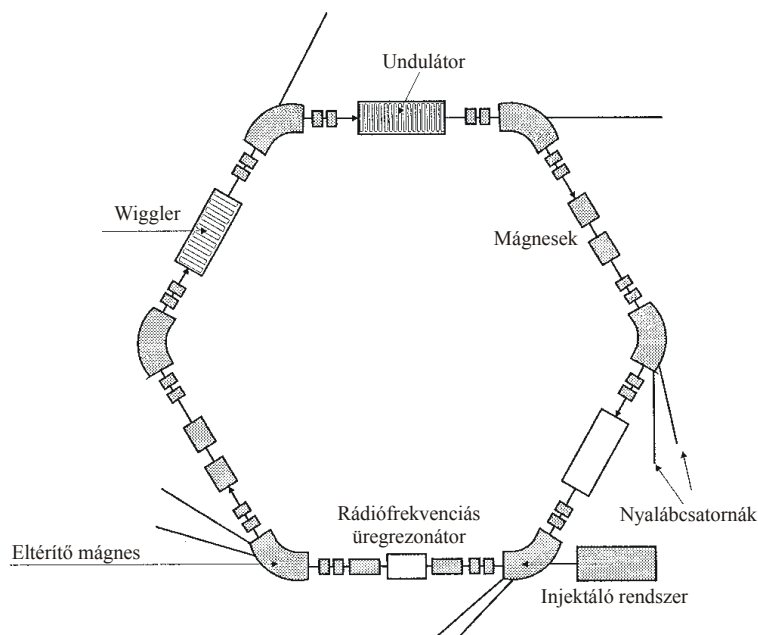


3.1.3 ábra Undulátor ill. wiggler elrendezési vázlata. N és S az északi és déli mágneses pólusok, λ_0 a mágnesek elrendezésének periódushossza, h a mágneses pólusok közötti távolság és e^- az elektron.

Wiggleres esetében a mágneses tér nagyobb, periódusainak száma pedig kisebb, mint undulátorok esetében. A wiggleresek úgy működnek, mintha egy sor, az elektront görbült pályára kényszerítő eltérítő mágnes volna jelen. Az így létrejött szinkrotron sugárzás energiaeloszlása folytonos, hasonlít az eltérítő mágnesből származó sugárzáséhoz, de az intenzitása nagyobb és az erős mágneses tér következtében az energiaspektrum eltolódik a nagyobb energiák felé. Az undulátoroknál kisebb az elektronok kitérése (pályájuk amplitúdója kisebb) és mivel az elektronok relativisztikus sebességgel mozognak, a szinuszoidális pályákról kilépő szinkrotron sugárzás interferálni fog egymással, így N^2 -tel arányos intenzitásnövekedést kapunk, ahol N a mágneses tér periódusainak a száma. A konstruktív interferenciának köszönhetően az undulátorspektrum keskeny, jól elkülönült csúcsokat tartalmaz. Az így létrejövő sugárzás monokromatikus és hullámhossza változtatható a mágneses térerősség változtatásával.

Egy harmadik generációs sugárforrás tárológyűrűje (3.1.4 ábra) általában nem kör alakú, mert a wiggleresek és undulátorok beiktatása az egyenes szakaszokban történik. Az egyenes szakaszok között eltérítő mágneseket használnak. Az elektronokat a tárológyűrűbe egy injektáló rendszeren keresztül viszik be, amely egyben elő is gyorsítja azokat. A keringő elektronok kinetikus energiát

veszítenek, miközben szinkrotron sugárzást emittálnak az eltérítő mágnesek, wigglerok és undulátorok mágneses mezejében. Az energiaveszteséget rádiófrekvenciás üregrezonátorral pótolják. Dipól mágneseket, kvadrupól és sextupól mágneses lencsákat használnak az elektronnyaláb zárt pályán tartására és fókuszálására. A szinkrotronsugárzás a tárológyűrűből a nyalábcsatornán keresztül jut el a mérőberendezésig.



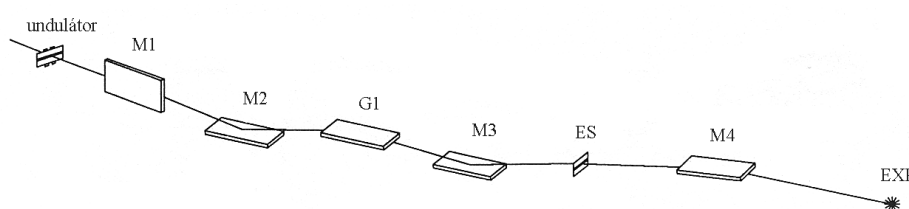
3.1.4 ábra Egy harmadik generációs sugárforrás tárológyűrűje.

3.1.3 A MAX-II tárológyűrű és az I411 nyalábcsatorna

A harmadik generációs MAX-II 1.5 GeV energiájú elektron-szinkrotron egyike a MAX-lab nemzetközi szinkrotron laboratórium három tárológyűrűjének (Lund, Svédország, nevét a laboratórium első gyorsítójáról kapta: **M**icrotron **A**ccelerator for **X**-rays). A MAX-II-vel (www.maxlab.lu.se) előállítható sugárzás energiatarományja 10 eV-től 20 keV-ig terjed. A tárológyűrűbe az elektronokat

naponta egyszer vagy kétszer injektálják egy 500 MeV energiájú lineáris gyorsító (LINAC) segítségével.

Az I411 nyalábsatornán [Guo99, Bäs99, Bäs01] a lineárisan polarizált szinkrotron sugárzást (98% a lineáris polarizáció foka) egy undulátorral állítják elő és a fotonenergiát egy SX700-as sík optikai rácscsal ellátott (1221 vonal/mm) Zeiss gyártmányú monokromátorral lehet beállítani. A fotonok energiatarományja 50 eV és 1500 eV között folyamatosan változtatható. A maximális fotonfluxus 10^{13} foton/sec 100 mA tárolt elektronáram, 150 eV fotonenergia és 20 meV fotonnyaláb-sávszélesség esetén. Az I411 nyalábsatorna optikai vázlatát mutatja a 3.1.5 ábra.



3.1.5 ábra A lundi I411 nyalábsatorna.

Az első három elemet a hőterhelés miatt vízzel hűtik. Az undulátorból kilépő fotonnyalábot az ábrán *M1*-gyel jelölt hengertükör a monokromátor bemenő részére fókuszálja. A monokromátor egy síktükörből (*M2*), egy sík optikai rácsból (*G1*) és egy sík-elliptikus tükörből (*M3*) áll. A fotonnyaláb energiaszórását *M3* kimenő résszélességének (*ES*) változtatásával tudjuk beállítani. A legutolsó optikai elem egy újrafókuszáló toroidális tükör (*M4*), amely a monokromatizált fotonnyalábot horizontálisan és vertikálisan a mérőberendezés (*EXP*) forrásponjtjába fókuszálja. Esetünkben a mérőberendezés az ESA-22 elektrosztatikus elektron spektrométer (lásd később). A nyaláb mérete az általunk használt mérőhelyen 0.5 mm vízszintesen és függőlegesen egyaránt. Ezek a nyalábparaméterek ideálisak elektronspektroszkópiai vizsgálatokra még kis sűrűségű gáz céltárgy használata esetén is.

3.2 Elektron spektrométerek

Ebben a fejezetben először röviden ismertetem az elektrosztatikus elektron spektrométerek típusait, főbb jellemzőit és üzemmódjait, majd pedig a munkám során használt ESA-21 és ESA-22 nevű analizátorokat.

3.2.1 Elektrosztatikus elektron spektrométerek típusai, jellemző paraméterei és üzemmódjai

\mathbf{E} elektromos és \mathbf{B} mágneses térben \mathbf{v} sebességgel mozgó q töltésű részecskére ható erőt (Lorentz-erő) a következő kifejezés adja meg:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (3.2.1)$$

Ennek megfelelően mind az elektromos mind a mágneses tér használható a töltött részecskék energiájának ill. impulzusának meghatározására. Jelen fejezetben töltött részecske alatt elektronokat értek, de a leírtak igazak minden töltéssel rendelkező mikroszkopikus és makroszkopikus részecskére. Manapság az alacsony energiájú (az elektronok kinetikus energiája kisebb, mint 20 keV) elektron spektrométerek többségében elektrosztatikus teret használnak. Homogén elektrosztatikus térben mozgó részecske mozgásegyenletét felírva és megoldva kapjuk, hogy a részecske pályája parabola (például egy síkkondenzátor fegyverzetei között). A mozgásegyenletek a ferde hajítás mozgásegyenleteinek felelnek meg [Sim73, Hev95].

Elektrosztatikus analizátorok elektródái egy időben állandó elektrosztatikus tereeloszlást alakítanak ki. Ebben a térben a különböző kinetikus energiával mozgó elektronok különböző pályákon mozognak. Amikor az elektron áthalad ezen az erőtéren, az eltérítés nagysága függ az analizátor geometriájától, az elektródák közötti feszültségtől és az elektron kinetikus energiájától. Így, megfelelően elhelyezett be- és kilépő rések esetén, csak egy

adott kinetikus energiával és beesési szöggel rendelkező elektronok mennek át az analizátoron (ΔE energiaszórással) és jutnak el a detektorba.

Az elektrosztatikus analizátorok három fő csoportba sorolhatóak [Var79, Tay69]:

- A diszperzív típusú rendszerek, amelyek a különböző szög alatt kilépő, adott energiájú elektronokat fókuszálják. Ezek további két alcsoportja:
 - Az eltérítő (deflektor) típusúak terében az elektronok pályája ekvipotenciális felületek mentén halad.
 - A tükör típusúak, melyekben az ekvipotenciális felületeket metsző pályájú elektronokat a fékező potenciálú elektróda tükrözi.
- A fékező teres analizátorok, amelyek az adott energiánál nagyobb energiájú elektronokat engednek át egy rácson.
- Az ún. repülési idő (time of flight) típusú spektrométerek, ahol a repülési idő pontos méréséből határozzák meg a részecske energiáját.

Mivel munkám során diszperzív, tükör típusú elektron spektrométereket használtam, ezért a továbbiakban csak az ilyen típusú analizátorokról lesz szó.

Ezen elektrosztatikus elektron spektrométerek alapvető jellemzői a következők:

- A spektrométerfüggvény az elektródokra adott feszültség függvényében írja le a detektált részecskék számának eloszlását, monoenergetikus nyalábot feltételezve, adott résszélesség mellett.
- A spektrométer-konstans (c) az elektródákra adott feszültség (U) és a fókuszált elektronok energiájának (E) a hányadosa: $c = \frac{U}{E}$.
- Ha megváltoztatjuk az adott E energiájú monoenergetikus elektronnyaláb energiáját, akkor a kép helyzete (x) eltolódik. Ezt az eltolódást lineáris diszperzióknak (D) nevezzük:

$$D = E \frac{dx}{dE}, \quad (3.2.2)$$

ahol x iránya megegyezik az elmozdulás irányával ($x=0$ a kép alaphelyzetével esik egybe). A lineáris diszperzió tehát azt mutatja meg, hogy állandó potenciál mellett mennyi a kép Δx eltolódása adott relatív energiaváltozás ($\Delta E/E$) esetén.

- Az analizátorok relatív energiafelbontása megadja, hogy az adott spektrométer egy E energiájú monoenergetikus elektronnyalábot milyen széles energiasávként képez le a detektorra az elektron kinetikus energiához viszonyítva. Értéke meghatározható a spektrométerfüggvény maximumának felénél lévő pontok távolságából vagy pedig a következő kifejezésből:

$$R = \frac{\Delta E}{E} = \frac{MS_1 + S_2 + \Sigma}{2D}, \quad (3.2.3)$$

ahol S_1 a bemenő, S_2 a detektor előtti rés szélessége, M a spektrométer lineáris nagyítása és Σ a leképezési hibák összege.

- Az analizátorok relatív térszöge (4π százalékában kifejezve) általában nem állandó a kiterjedt forrás felületén. A középponthez tartozó térszöget szokás fényerőnek nevezni.
- Egy spektrométer transzmissziója (T) a detektorba jutó elektronáramnak a forrásból kiinduló elektronáramhoz viszonyított aránya (%-ban kifejezve). Pontforrás esetén: $T=T'\Omega$, ahol Ω a bemeneti térszög, T' az elektronok útjában elhelyezkedő rácsok és blendék miatti veszteséget figyelembe vevő tényező (beleértve a kilépő spektrométernylás és a detektorméret hatását).
- Kiterjedt forrásnál a transzmisszió a forrás felületére vett integrálja a luminozitás (T_L), mely egyenlő a forrás területének és a fényerőnek a szorzatával, ha az utóbbi a forrás minden pontjában azonos.
- Ha pontforrás esetében a tárgy és a kép távolságát a bemenő szög szerint differenciálva az első n differenciálhányados nulla, akkor n -ed rendű szög szerinti fókuszálásról beszélünk.

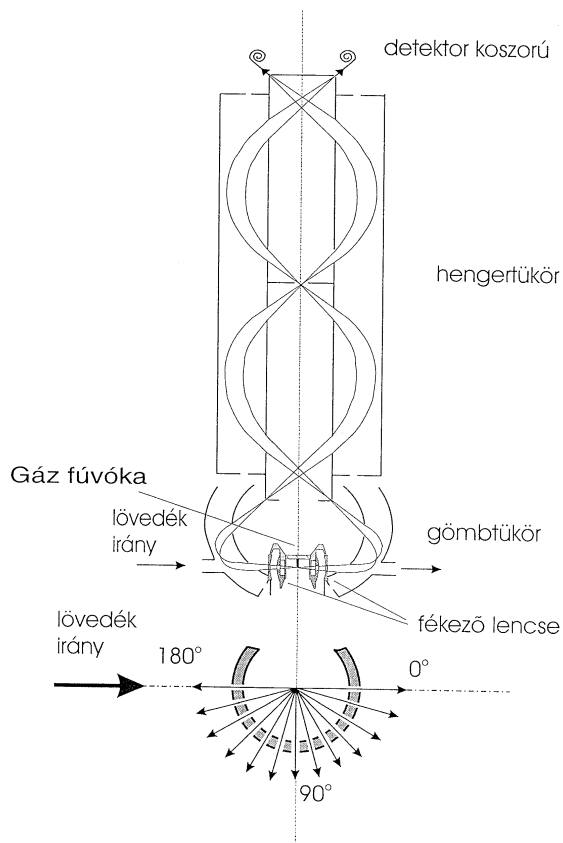
Elektrosztatikus analizátorok relatív energiafelbontása ($R=\Delta E/E$) egy adott bemenő és kimenő résszélesség esetén állandó (amíg az elektron sebessége nem relativisztikus). Az abszolút feloldást (ΔE) javítani lehet, ha a forrás és az analizátor bemenete közé egy fékezőlencsét helyezünk, amellyel a mérendő feladatnak megfelelően változtatható a spektrométeren áthaladó elektronok energiája. Ilyenkor több üzemmód lehetséges [Var79, Ric90]:

- Állandó átmenő energiájú üzemmódban az analizátor elektródái között a feszültségkülönbség állandó. Ilyenkor a spektrométer bemenő rése és a céltárgy közötti fékezés változtatásával mérik a spektrumot. Az elektron-detektor hatásfoka, a csúcsalak és a félértékszélesség az energiától független, azaz az analizátor felbontása minden kinetikus energiára (azaz a spektrum minden csúcsára) azonos, változik azonban a fékezőrendszer hatásfoka.
- Ha a lencsére adott feszültség konstans, a spektrométer a szokásos módon működik, csak alacsonyabb energiatarományban. Ebben az esetben a spektrométer transzmissziója állandó, a vonalak félértékszélessége azonban változik az energiával.
- Előfordul a két módszer kombinációja, az arányos fékezés, amelynél a spektrométerbe jutó elektronok kinetikus energiáját az eredetinek egy meghatározott hányadára csökkentjük a fékezőlencse segítségével, miközben a rendszerben az elektronoptikai viszonyok nem változnak.

3.2.2 Az ESA-21 elektron spektrométer

Az ESA-21 elektrosztatikus elektron spektrométer az 1980-as évek elején épült az ATOMKI Atomi Ütközések Osztályán (a kettős szám a két paraméter (szög és energia) egyidejű mérésére utal) [Var79, Ric90, Var92, Var95]. Ez egy gömbtükör és egy kétmenetes, másodrendben fókuszáló hengertükör

kombinációja (3.2.1 ábra). A gömbtükrő az elektronokat a szórási síkból a hengertükrő gyűrű alakú belépő részére fókuszálja, tehát transzportlencseként működik. Az elektronok nagy pontosságú energiaanalízisét a másodrendben fókuszáló kétmenetes hengertükrő végzi.



3.2.1 ábra Az ESA-21 elektron spektrométer keresztmetszete.

A gyűrű alakú kimenőrés után a gyorsító nyalábirányához képest 0° - 180° szögtartományban $15^{\circ} \pm 5^{\circ}$ -onként elhelyezett detektorokkal (csatorna-elektronsokszorozókkal) egyidejűleg tudunk 13 szög alatt energiaanalízist végezni. Ez jelentősen csökkenti a mérési időt és növeli az adatok megbízhatóságát, mivel az elektronok detektálása minden csatornában egy időben történik. A kétmenetes hengertükrő növeli az analizátor

energiafelbontását és egyúttal jelentősen csökkenti az elektródák felületéről szórt elektronok bejutását a detektorokba, ami nagyon fontos kis valószínűségű folyamatok vizsgálatánál. A másodrendű fókusz azért lényeges, mert a fókusz távolság széles szögtartományban független az elektron sebességvektorának a henger tengelyével bezárt szögétől, ami növeli az analizátor térszögét a felbontás romlása nélkül és a spektrumban szimmetrikus Gauss-függvénnyel leírható vonalalakot eredményez.

A hengertükör belsejében található a két, vákuumkamrán kívülről mozgatható, változtatható szélességű rés, amelyek az energiafelbontást határozzák meg. Az energiafelbontás további javítását szolgálja a forrás és a gömbtükör között elhelyezett kételektródos, gömb alakú fékezőlencse.

Mivel a mérendő elektronok energiája kicsi (az analizátor 0-13 keV energiatarományban használható), a Föld mágneses terének csökkentése végett a spektrométert háromrétegű hőkezelt μ -metál árnyékolással láttuk el. A maradék mágneses tér értéke közelítőleg 1 mG.

A spektrométer egy rozsdamentes vákuumkamrában helyezkedik el, amelynek vákuumszivását három diffúziós szivattyú biztosítja (2 db 2000 l/s és 1 db 400 l/s szívósebességű). A mérések során a céltárgyként használt gázok beeresztésére egy 0.5 mm átmérőjű fúvóka szolgál, amelynek a végére egy mikrocsatornás elektronsokszorozó darabkája van felragasztva annak érdekében, hogy irányított nyalábot érjünk el az ütközési tartományban. Az állandó céltárgyatomszámot a fúvóka előtt elhelyezett puffertartály nyomásának állandó értéken tartásával biztosítjuk. A kamrában $2-3 \cdot 10^{-7}$ mbar végvákuum érhető el (gázbeömlés nélkül).

A kísérletek során többféle lövedékkel mérhetünk. A gyorsító (esetünkben az 5 MV-os VdG) ionnyalábjain kívül lehetőség van elektronbombázásos mérésekre is a gyorsító nyalábirányához képest 60^0 -os szögben beépített elektronágyú segítségével.

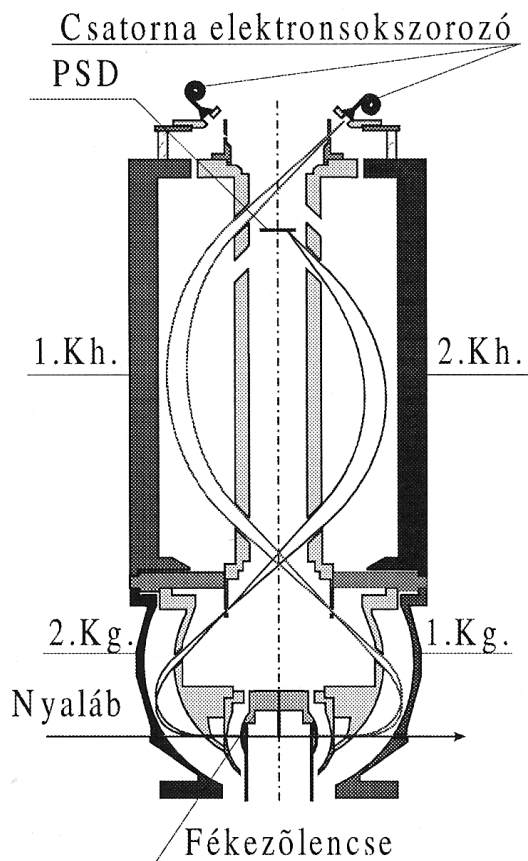
A spektrométer elektronikus vezérlőrendszerének alapja egy személyi számítógépre alapozott, speciális mérésvezérlő és adatgyűjtő egység, valamint a működtetéséhez szükséges vezérlő program [Kád81, Kád83, Mol93a]. Az elektronspektrumok felvétele energiapontonként történik. A mérni kívánt energiának megfelelő feszültséget a számítógép által vezérelt nagyfeszültségű tápegység adja az elektródákra. A spektrométeren átjutó elektronok a 13 elektrondetektor valamelyikébe becsapódva elektronikus jelet generálnak, amely egy előerősítő és egy integrál diszkriminátor után jut a számlálóba. Az egyes energiapontokat azonos bombázó részecskeszámra normáljuk. A nyalábáramot egy Faraday-kalitkában mérjük és áramintegrátor segítségével digitalizáljuk. Ez a jel szintén a számítógépbe jut, amely a megfelelő töltésmennyiség beérkezése után leállítja a számlálót, eltárolja az adatokat és indítja a következő energiapont mérését.

Munkám során a spektrométert fékezés nélküli üzemmódban használtam. Ekkor a spektrométer átmenő energiája megfelel a mért elektron névleges kinetikus energiájának. A céltárgy, a belső henger és a belső gömb, valamint a fékezőlencse mindkét elektródája földpotenciálra van. A névleges energiát a külső gömbre ill. külső hengerre adott feszültségek határozzák meg.

3.2.3 Az ESA-22 elektron spektrométer

Az ESA-22 elektrosztatikus elektron spektrométer (3.2.2 ábra) [Ric02, Jur01] az ESA-21 nevű analizátor továbbfejlesztett változata. Az analizátor az 1990-es évek elején épült az ATOMKI Atomi Ütközések Osztályán. A teljes mérőrendszer 1998-ban készült el az Oului Egyetem Elektronspektroszkópiai Osztályával (Finnország) együttműködve. Jelenleg is közösen használjuk a Lundi Egyetem (Svédország) MAX-II szinkrotron I411 nyalábcatornáján.

Az első rész itt is egy gömbtükör, mely a mintából kilépő elektronokat a következő fokozat bemenő részére fókuszálja úgy, hogy megőrzi az eredeti emisszió szögét. Az energiaanalízist egy gyűrűből-gyűrűbe fókuszáló, másodrendű fókusszal rendelkező hengertükör végzi.



3.2.2 ábra Az ESA-22 elektron spektrométer keresztmetszete. Az azonos árnyalatú elektródák azonos analízátorhoz tartoznak, míg a belső henger és belső gömb közös. 1. Kh. és 1. Kg. az 1. spektrométer külső hengerét és külső gömbjét, 2. Kh. és 2. Kg. a 2. spektrométer külső hengerét és külső gömbjét, míg PSD a helyzetérzékelő detektort jelöli.

A hengertükörrel két különböző átmérőjű fókuszot (20 mm és 88 mm) lehet beállítani és így kétféle detektorrendszer használható a mintából kilépő elektronok észlelésére. A nagyobbik gyűrűfókusznál 20 db csatorna elektronsokszorozót használunk 15° - 345° szögtartományban 15° -os lépésként (kivéve a $0^{\circ} \pm 5^{\circ}$, $90^{\circ} \pm 5^{\circ}$, $180^{\circ} \pm 5^{\circ}$ és $270^{\circ} \pm 5^{\circ}$ -okat). Az egyes szögcsatornák vízszintes irányban $\pm 5^{\circ}$ -t, míg függőleges irányban $\pm 1.5^{\circ}$ -t fednek le. A kisebbik

gyűrűfókusz esetén egy kétdimenziós helyzetérzékeny detektort (**P**osition **S**ensitive **D**etector, angol rövidítése PSD) használunk. Ez két egymás után elhelyezett mikroszatornás elektronsokszorozó lapból (channel plate) és egy 'párna' alakú ellenállás réteggel ellátott 2 dimenziós anódból áll (egy csatorna átmérője $8\ \mu\text{m}$, az érzékeny felület átmérője $25\ \text{mm}$). A detektor a töltésmegosztás elvén működik. Az anód négy sarkáról kapott jelamplitúdókat az elektronok becsapódásának helye és a sarkok közötti ellenállás értéke határozza meg. A jelamplitúdókat megmérve a becsapódás x, y koordinátája jobb, mint $0.2\ \text{mm}$ pontossággal meghatározható. Az ESA-22 elektron spektrométer helyzetérzékeny detektor használata esetén spektrográfként viselkedik, azaz a beállított energiához képest egy $\pm 0.8\%$ -os energiasávot képez le a detektor felületére kb. 1.5^0 -os szögfelbontással. Ez további jelentős időmegtakarítást eredményez a mérések során.

A külső gömb és henger elektródáit a spektrométer tengelyén átmenő sík mentén kettévágtuk. Így két egymástól független analizátort kaptunk, amellyel két különböző energián, egyidejű szög- és energiaanalízist végezhetünk a vágási síkhoz képest 0^0 - 180^0 szögtartományban. A két "felspektrométer" belső és külső hengere ill. belső és külső gömbje között térkorrekciós elektródákat használunk, hogy a határokon is biztosítsuk a megfelelő elektrosztatikus tereeloszlást. A 3.2.2 ábrán az azonos árnyalatú elektródák azonos analizátorhoz tartoznak, míg a belső henger és belső gömb közös. Látható, hogy az 1. spektrométer az E_1 kinetikus energiával érkező elektronokat a csatorna-elektronsokszorozóra, míg a 2. spektrométer az E_2 energiájúakat a helyzetérzékeny detektorra fókuszálja. Így ez egy olyan egyedülálló berendezés, mely alkalmas mind szögeloszlás mind elektron-elektron koincidencia ill. szöggkorrelációs mérésekre.

Elektrosztatikus elektron spektrométereknél a relatív energiefelbontás az átmenő energiától független ($\Delta E/E = \text{állandó}$) és a bemenő és a kimenő résszélesség határozza meg. Ezt a tulajdonságot felhasználhatjuk az

energiafelbontás növelésére fékező lencse segítségével úgy, hogy a spektrométer geometriáján nem változtatunk semmit. Így az ESA-22 analizátor érzékeny térfogata köré is egy gömb alakú fékező lencsét építettünk.

Mivel ez az analizátor is alacsony energiájú elektronspektroszkópia céljára készült, így ezt is háromrétegű mágneses árnyékolással láttuk el a Föld mágneses terének csökkentésére. A maradék mágneses tér értéke kisebb, mint 5 mG.

Az ultra-nagyvákuum tartomány elérése érdekében a kamra teljes egészében fémtömítéses és 250 °C-ig kifűthető. A kamrát három 250 l/s szívósebességű turbomolekuláris szivattyúval láttuk el. A gázok beeresztésére itt is egy 0.5 mm átmérőjű fúvóka szolgál, amelynek a végén egy mikroszatornás elektronsokszorozó darabkája van felragasztva. Gáz céltárgy és kifűtés nélkül 24 órás szívás után a háttérnyomás $5 \cdot 10^{-8}$ mbar.

A rendszer elektronikus vezérlő rendszerének alapja két személyi számítógép, amelyek az RS-232-es vonalon keresztül vannak összekötve. A mester gép két ATOMKI gyártmányú, 40 csatornás számlálót és 64 input/output vonalat tartalmazó kártyán keresztül végzi a csatorna-elektronsokszorozóból jövő impulzusok számlálását ill. beállítja két digitál-analóg (DAC) konverteren keresztül a spektrométer elektródáin a megfelelő feszültséget. A szolgálka gépben két ATOMKI gyártmányú analóg-digitál (ADC) kártya van. Az egyik a helyzetérzékeny detektor 'analóg számítógépének' jeleit dolgozza fel és a digitális x, y koordinátákat tárolja egy 256x256-os (8x8 bit) mátrix memóriában. A másik kártyát csak koincidencia mérések esetén használjuk, amely az idő-amplitúdó konverter analóg jelét alakítja át digitális címmé, amiből kapjuk a koincidencia időspektrumot.

Mivel munkám során koincidenciafeltétel nélküli méréseket végeztem csatorna-elektronsokszorozók használatával, ezért csak ennek a folyamatát írom le, mely hasonló az ESA-21 analizátornál leírtakhoz. Először a mester számítógép beállítja a mérendő energiának megfelelő feszültséget a spektrométer

elektródáin a digitál-analóg konvertereken keresztül és kinyitja a 40 csatornás számláló bemeneteit. A mintából a megfelelő energiájú elektronok a csatorna elektronsokszorozók bemenetére érkeznek, amelyek jelei a gyors előerősítőkhöz jutnak mind a két spektrométerből. Ezt követi három, 8 csatornás, állandó időzítésű diszkriminátor (Constant Fraction Discriminator, CFD), amit jelformálásra ill. zajvágásra használunk. A CFD-ből jövő jel beíródik a megfelelő számlálóba. A beállított mérési idő lejártával a számlálók bemenete lezáródik és tartalmuk kiolvasásra ill. törlésre kerül. A mért adatokat a bombázó nyaláb adott fluxusára vagy az időre normaljuk. Mivel a számlálók és a detektorok között egyértelmű a hozzárendelés, így az emisszió szöge is egyértelműen meghatározható. Ezután a mester számítógép beállítja a következő energiát a spektrométeren és indul előlről az eljárás [Ric02, Mol93a, Mol93b].

4. Saját eredmények

4.1 Fotoelektronok szögeloszlásának mérése nemesgáz céltárgyakon

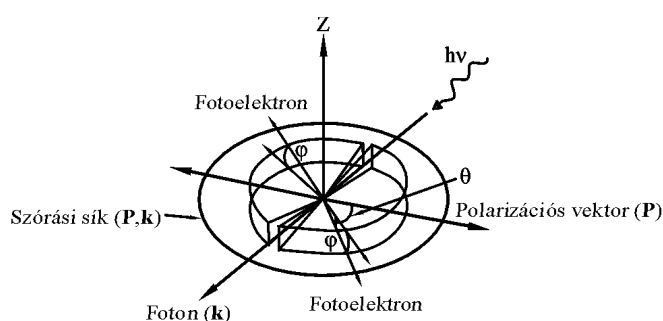
A fotoelektronok szögeloszlását jellemző dipól (β) és nondipól (γ és δ) anizotrópia paraméterek meghatározása céljából a Xe $5s$ [Ric03], Xe $5p_{1/2,3/2}$ [San04] és Ar $3p_{1/2,3/2}$ [Ric05a] alhéjakról származó fotoelektronok szögeloszlását mértük rendre a 90-225 eV, 100-200 eV és 90-330 eV fotonenergia-tartományokban lineárisan polarizált szinkrotron sugárzással. A kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek (és így jelen esetben az anizotrópia paraméterek) sokkal érzékenyebbek az ionizációs folyamat dinamikájára, mint a teljes ionizációs hatáskeresztmetszetek. A kísérleti és a számolt adatok összehasonlításából egyértelműen lehet következtetni az atomok sokrészecskés tulajdonságaira és a különböző gerjesztési csatornák közötti kölcsönhatások jelentőségére.

4.1.1 Kísérleti elrendezés, mérőrendszer hitelesítése és a spektrumok kiértékelése

Hagyományos berendezésekkel a fotoelektronok kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetét (energia és emisszió szöge szerinti) egy vagy több elektron spektrométer forgatásával mérik (többnyire néhány szögnél). Lineárisan polarizált fotonok esetén a vizsgálatok döntő többségét az ún. dipól síkban (amely a foton impulzusára merőleges és a polarizációs vektoron megy keresztül (YZ sík a 2.1.2 ábrán)) végzik, általában két szögnél a polarizációs vektorhoz képest (0° és 54.7° -nál, ahol a másodrendű Legendre-polinom értéke nulla).

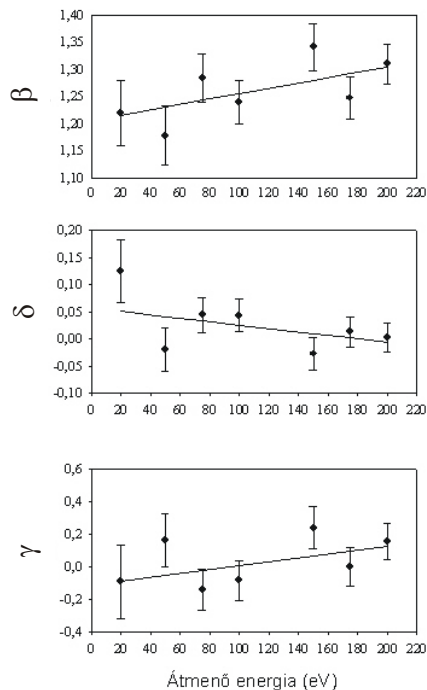
Ezekből a mérésekből egyértelműen meghatározható a β dipól anizotrópia paraméter (lásd a 2.1.5 fejezetben a 2.1.25 kifejezést $\phi=90^\circ$ -nál). A mérőrendszer intenzitás-hitelesítését nemesgázok s-héjáról származó fotoelektronok szögeloszlásával végzik a $\beta=2$ elméleti anizotrópia paraméter alapján, ami jó közelítés az ionizációs küszöbtől távoli fotonenergiáknál (eltekintve olyan speciális esetektől például, mint amit a Xe 5s héjnál bemutatok). Mivel vizsgálatainkat a foton polarizációs és impulzus vektora által kifeszített síkban végeztük, ez a módszer esetünkben nem használható. Ugyanis korábban ebben a síkban nem történtek mérések, így a fotoelektronok szögeloszlása ebben az esetben ismeretlennek tekinthető kísérleti szempontból.

Kísérleteinket Lundban, Svédországban végeztük a harmadik generációs MAX-II tárológyűrű I411 nyalábcatornáján [Guo99, Bäs99, Bäs01]. A tárológyűrű és a nyalábcatorna részletes leírása a 3.1.3 fejezetben található. A folyamat során emittált elektronokat az ESA-22 elektrosztatikus elektron spektrométerrel [Ric02] mértük. Az analízátort részletesen a 3.2.3 fejezetben mutattam be. A fotoelektronokat egyidejűleg 20 különböző szögnél detektáltuk a foton polarizációs és impulzus vektora által kifeszített síkban ($\phi=0^\circ$), a polarizációs vektorhoz képest (θ) 15° és 345° közötti szögtartományban. Ennek a mérési geometriának az előnye, hogy egyetlen szögeloszlás felvételéből meg tudjuk határozni az összes dipól és nondipól anizotrópia paramétert. Az így kapott eloszlások alakjából következtetni lehet a fotoionizációban jelentős szerepet játszó kölcsönhatások típusára. A mérési geometria a 4.1.1-es ábrán látható.



4.1.1 ábra
Mérési geometria.
[Ric02]

Az egyedi szögcsatornák relatív intenzitás-kalibrációja alapvető fontosságú a kísérleti adatok helyes kiértékelése szempontjából. A detektorok relatív hatásfokának meghatározásához az Ar $L_2-M_{2,3}M_{2,3}^3P_{0,1,2}$ izotróp Auger-átmenet használtuk 440 eV fotonenergián mérve. Mivel a fotoelektronok energiája széles tartományban változott, így vizsgáltuk a fékezés esetleges torzító hatását is oly módon, hogy mértük az argon $2p$ fotoelektronok anizotrópia paramétereinek átmenő energia függését 440 eV fotonenergián. A fékezési arány (fotoelektron kinetikus energiája/átmenő energia) 1-8.5 között változott. A 4.1.2 ábrán láthatjuk az anizotrópia paramétereiket az átmenő energia függvényében. A paraméterek értékét konstansnak találtuk $\Delta\beta = \pm 0.05$, $\Delta\delta = \pm 0.05$ és $\Delta\gamma = \pm 0.06$ eltéréseken belül, amelyek az adott paraméterek statisztikai hibájával azonos nagyságúak és amelyeket szisztematikus hibaként kezeltük.



4.1.2 ábra 440 eV fotonenergián mért Ar $2p$ fotoelektronok anizotrópia paramétereinek átmenő energiától való függése. A pontok a kísérleti értékek, a vonal pedig az ezekre illesztet görbe.

A Xe 5s fotoelektronok szögeloszlását két eljárással mértük, fékezés nélkül és fékezéssel. Fékezés nélküli esetben a detektorok relatív hatásfokát úgy határoztuk meg, hogy az argon $^3P_{0,1,2}$ Auger-elektronjait lefékeztük 75, 100, 125, 150, 175 és 200 eV átmenő energiára és az így mért spektrumokból meghatározott csúcsterületeket használtuk mint hatásfokot az egyes szögcsatornáknak az adott elektronenergiára (a közbenső energia értékekre interpoláltunk). A fékezéses mérésekben, függetlenül a fotoelektronok kinetikus energiájától, állandó 70 eV átmenő energiát használtunk, az Auger-elektronokat is ide fékeztük vissza. A két módszerrel kapott anizotrópia paraméterek hibán belül egyeztek egymással, ami megerősítette a hatásfok hitelesítési eljárás helyességét. A Xe 5p és Ar 3p fotoelektronok szögeloszlását már csak fékezéssel mértük.

Azért, hogy a Xe 5s fotocúcsból el tudjuk különíteni a $4p^4(^3P)6s^4P_{1/2}$ szatellit vonalat [Fah84], méréseinkben az analizátor relatív energiafelbontása $2.4 \cdot 10^{-3}$ volt. Ez fékezés nélküli méréseinkben 70 eV ill. 200 eV átmenő energián 170 meV és 480 meV közötti félértékszélességet (FWHM), míg fékezéssel a fotoelektron kinetikus energiájától függetlenül 170 meV FWHM-et eredményezett. Kísérleteink során a monokromátor kimenő résszélessége 120 μm volt (a fotonnyaláb sávzélessége így 0.09 eV és 0.3 eV között változott a fotonenergiától függően). A Xe 5p fotoelektronok szögeloszlását 70 eV átmenő energián (ez 170 meV energiafelbontást eredményezett a spektrométernél) és 100 μm kimenő monokromátor résszélesség mellett (a fotonnyaláb sávzélessége ekkor 0.05 eV és 0.24 eV között változott a fotonenergiától függően) mértük, mert így szét tudtuk választani a Xe $5p_{1/2}$ és Xe $5p_{3/2}$ alhéjaknak megfelelő fotocúcsokat. Az Ar 3p fotoelektronok szögeloszlását először, mint áttekintő mérés, szintén 70 eV átmenő energián mértük, ami 100 meV energiafelbontást eredményezett. 110 μm kimenő monokromátor rést használva a fotonnyaláb szélességét 60-560 meV között változtattuk a fotonenergiától függően. Később, hogy jól el tudjuk különíteni az Ar 3p fotoelektron-vonal spin-pálya

komponenseit, 30 eV átmenő energiát (ami 50 meV energiafelbontást eredményezett) ill. 15 μm kimenő monokromátor rést (a fotonnyaláb szélességét így 57 meV és 59 meV között változtattuk a bemenő fotonenergiától függően) használtunk.

A lineáris polarizáció fokát a Ne 2s fotoelektron-vonal 250 eV fotonenergián mért szögeloszlásával határoztuk meg, ahol a nondipól hozzájárulás elhanyagolható [Hem97]. A sugárzást teljesen lineárisan polarizáltak (100%) találtuk.

Elvégeztük a fotonenergia-skála (vagy ha úgy tetszik a monokromátor) kalibrációját is az Ar $2p_{3/2}-4s$, $2p_{3/2}-4d$ és $2p_{1/2}-3d$ rezonáns gerjesztések használatával. King és munkatársai [Kin77] által korábban meghatározott Ar $2p$ gerjesztési energiákat fogadtuk el rezonáns gerjesztési energiákként.

A mért adatok kiértékelése során az első lépés a mért fotoelektron-spektrumok és Auger-spektrumok lineáris háttérlevonásának elvégzése volt. Esetünkben egy spektrum az egyidejűleg 20 szögben történő szögeloszlásmérés miatt az irodalomban szokásos spektrumelnevezésben 20 db. különálló intenzitáseloszlás kiértékelését jelentette. Egy hetes mérési idő alatt kb. 70-80-szor 20 db. spektrum kiértékelését kellett elvégezni. A háttérlevonás százalék körüli korrekciót jelentett. A jó energiafelbontásnak köszönhetően nem kellett csúcsalakat illeszteniük, elegendő volt a csúcsterületek meghatározása, hiszen a p héjak esetén minden esetben jól elkülönültek a finomszerkezeti komponensek és a háttér gyakorlatilag nulla volt. Ezután az egyes szögcsatornákhöz tartozó fotoelektronok intenzitását elosztottuk a hozzájuk tartozó Auger-intenzitásokkal. Az így kapott relatív kétszeresen (szög és energia szerinti) differenciális hatáskeresztmetszetekre illesztettük rá a következő kifejezést [Coo93] és ebből határoztuk meg a dipól (β) és nondipól (γ és δ) anizotrópia paramétereit:

$$\frac{d\sigma_{nl}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}}{4\pi} \left(1 + \beta P_2(\cos \theta) + [\delta + \gamma \cos^2 \theta] \cos \phi \sin \theta \right), \quad (4.1.1)$$

ahol σ_{nl} az nl atomi héj teljes fotoionizációs hatáskeresztmetszete, $P_2(\cos\theta)$ a másodrendű Legendre-polinom, β az elektromos dipól (E1), γ és δ az elektromos kvadrupól (E2) és mágneses dipól (M1) kölcsönhatás anizotrópia paramétere, θ a fotoelektron impulzus vektora és a foton polarizációs vektora közötti polárszög és ϕ a foton terjedési vektora és a fotoelektron impulzusának a foton polarizációs és terjedési vektora által kifeszített síkra merőleges síkba (XZ sík) eső vetülete közötti azimutális szög (lásd a 2.1.5 fejezetben az 2.1.2 ábrát).

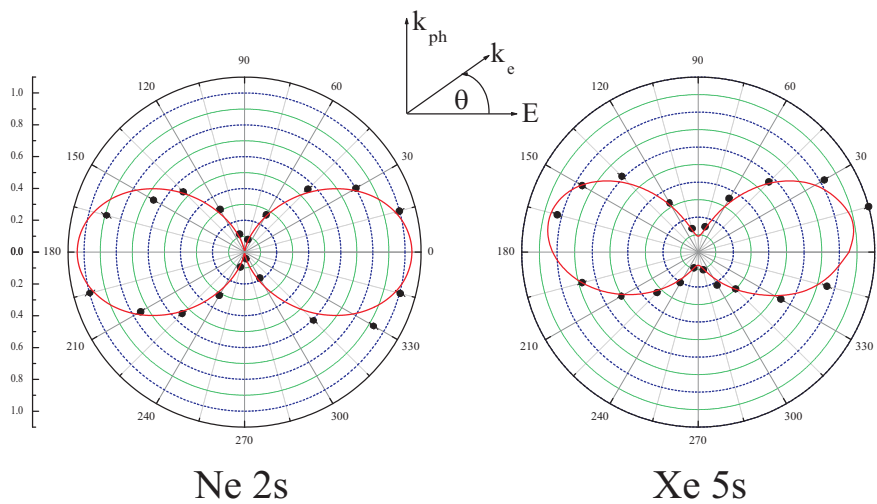
A hibákat a Gauss-féle hibaterjedési törvénnyel számoltuk a statisztikus és az illesztésből kapott hibákból. A fékezés esetleges torzító hatásának vizsgálata során az anizotrópia paraméterek konstanstól való eltérését, mint szisztematikus hibát, hozzáadtuk az egyes anizotrópia paraméterek előbb elmondott hibáihoz.

A fentiekben leírt, az Ar L_2 - $M_{2,3}$ - $M_{2,3}$ - $^3P_{0,1,2}$ izotróp Auger-átmenetre való normáláson alapuló új kalibrálási módszert, amely alkalmas az elektron spektrométer hatásfokának meghatározására, teljes egészében én dolgoztam ki. Ez az eljárás lehetővé teszi a fotoelektronok szögeloszlásának vizsgálatát az általunk használt mérési geometriában. Ennek eredményeként egyetlen szögeloszlás méréssel meg lehet határozni a kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetekből mind a dipól mind a nondipól anizotrópia paramétereit.

4.1.2 A Xe 5s héjról származó fotoelektronok szögeloszlásának anizotrópia paraméterei

Méréseink kezdetekor az irodalomban kétféle modellszámolás állt rendelkezésre a xenon 5s héjról származó fotoelektronok szögeloszlására vonatkozóan. Ezek jelentősen eltértek egymástól mind a dipól mind a nondipól anizotrópia paraméterek tekintetében. Az egyik a független részecske modell (nem relativisztikus (independent particle model, IPM) ill. relativisztikus

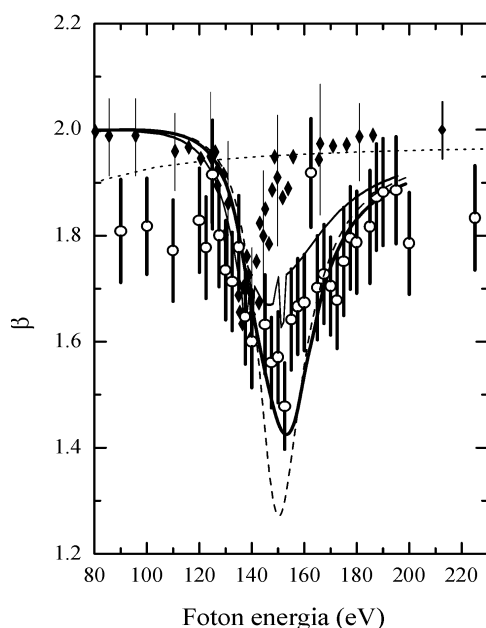
(**r**elativistic **i**ndependent **p**article **m**odel, RIPM)) keretein belül végzett számolás [Bec90, Coo90, Coo93, Der99], mely elhanyagolja a kontinuum és gerjesztési csatornák közötti csatolásokat. A másik modell az atomi elektronok kollektív mozgását is figyelembe vevő leírás, a nem relativisztikus véletlen fázisú közelítés (**r**andom **p**hase **a**pproximation with **e**xchange, RPAE) [Amu99, Amu01] ill. ennek relativisztikus változata (**r**elativistic **r**andom **p**hase **a**pproximation, RRPA) [Dol99, Joh99, Joh01, Joh02]). Ez utóbbiak között is jelentős eltérések mutatkoznak az anizotrópia paraméterek energfüggésére. Sőt az RRPA eredmények még attól is függenek, hogy milyen kölcsönhatást ill. kötési energiát vettek figyelembe az atomi elektronok között. A számolások közötti jelentős eltérések indukálták kísérleti vizsgálatainkat, mivel az irodalomban ilyen jellegű méréseket korábban nem közöltek.



4.1.3 ábra 250 eV és 150 eV fotonenergián mért Ne 2s és Xe 5s fotoelektronok szögeloszlása polárkoordináta rendszerben ábrázolva. A pontok a különböző szögek alatt mért intenzitásokat jelölik, míg a vonal az ezekre illesztett eloszlást mutatja. A középső ábrán a mérési geometria látható, ahol k_{ph} és k_e a foton ill. a fotoelektron impulzus vektorai, E a foton polarizációs vektora és θ a polárszög.

A Xe $5s$ héjról származó fotoelektronok szögeloszlását vizsgáltuk [Ric03] a fotonenergia függvényében 90-225 eV közötti fotonenergia-tartományban. A nondipól kölcsönhatások jelenlétének szemléltetéseként a 4.1.3 ábrán a Ne $2s$ és a Xe $5s$ héjakról származó fotoelektronok szögeloszlását mutatom be, amelyeket rendre 250 eV és 150 eV fotonenergián mértünk. A baloldali ábra (Ne $2s$) a fotonnyaláb irányához képest előre-hátra jó közelítéssel szimmetrikus (fel-le irányban), míg a jobboldali (Xe $5s$) aszimmetrikus. Ez azt jelenti, hogy neon esetében a nondipól jellegű kölcsönhatás elhanyagolható, míg xenonnál ezek járuléka jelentős a használt fotonenergiákon. A foton impulzus vektorához képesti bal-jobb oldali maximum mutatja mindkét ábrán, hogy a spektrométeren belüli maradék mágneses tér nem zavarja az elektronpályákat.

A 4.1.4 ábrán látható a Xe $5s$ fotoelektronok kísérleti [Ric03, Hem01] és elméleti [Der99, Joh01, Joh02, Tof02] β dipól anizotrópia paramétereinek összehasonlítása. Az általunk mért adatokat üres körök, míg a számoltakat különböző típusú vonalak jelölik.



4.1.4 ábra A Xe $5s$ fotoelektronok kísérleti és elméleti dipól (β) anizotrópia paramétereinek összehasonlítása a fotonenergia függvényében.

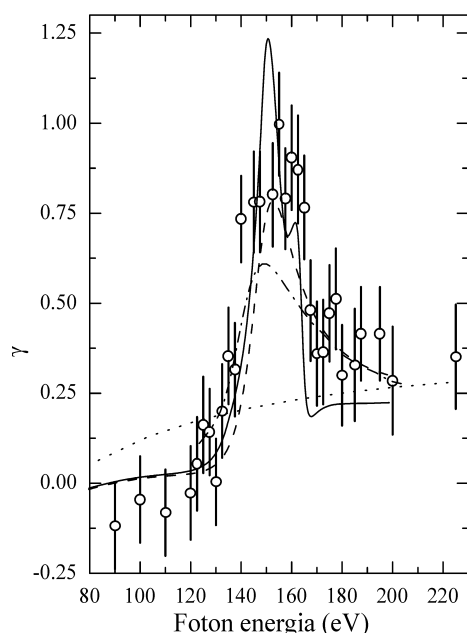
Kísérlet: \circ saját mérés; \blacklozenge Hammers és mtsai. [Hem01];

Elmélet: \cdots RIPM [Der99]; $---$ 13 csatornás RRP [Joh01]; $—$ 20 csatornás RRP [Joh02]; $—$ TDDFT [Tof02].

Az ábrán Hemmers és munkatársainak kísérleti eredménye [Hem01] (tömött rombuszok) is fel van tüntetve, amely kissé eltér a mienktől. Az általunk mért β paraméterek hasonló, de szélesebb és mélyebb minimumot mutatnak, a minimum helyzete a nagyobb energiák felé tolódik el ill. a dipól paramétereink értéke a vizsgált fotonenergia-tartományban kisebb. Az eltérés oka Hemmers és munkatársai által használt rossz energiafelbontás (nem tudták szétválasztani a $4p^4(^3P)6s^4P_{1/2}$ szatellit vonalat [Fah84] az $5s$ fotocúcsától).

Kísérleti β paramétereinket összehasonlítottuk a relativisztikus független részecske modellel (RIPM) [Der99], a 13 és 20 csatornás relativisztikus véletlen fázisú közelítéssel (RRPA) [Joh01, Joh02] és az időfüggő sűrűségfunkcionál elmélettel (time-dependent density functional theory, TDDFT) [Tof02] kapott eredményekkel. Tisztán látható, hogy a független részecske modell teljesen más energiafüggést mutat, mint a kísérlet és, hogy a mért adatok az RRPA és TDDFT elmélettel sokkal jobb egyezést mutatnak. A mért β értékek a 20 csatornás RRPA és TDDFT elméletekből kapott értékek között helyezkednek el. Bár a TDDFT számolás tartalmazza a szatellit (gerjesztési) csatornákkal való korrelációt egy modellpotenciál révén, a kísérleti értékekkel való összehasonlítás azt mutatja, hogy ez az elmélet hibásan ad számot ezen korrelációkról. A 20 csatornás RRPA számolásból kapott β értékek, ahol figyelembe veszik a $4s$, $4p$, $4d$, $5s$, $5p$ héjak közötti kölcsönhatást, közelebb vannak a kísérletiekhez, mint a csak a $4d$, $5s$ és $5p$ héjak közötti kölcsönhatást tartalmazó 13 csatornás RRPA elmélettel meghatározott értékek. Ez azt jelenti, hogy a $4p$ és $4s$ héjak hatása fontos a Xe $5s$ héjat jellemző β dipól paraméterek fotonenergia-függésének leírásában. Mindezekből arra következtethetünk, hogy az atomi elektronok közötti kölcsönhatás jelentős szerepet játszik a Xe $5s$ héj fotoionizációjában. Általánosan mondhatjuk, hogy a kísérleti β paraméterek jól egyeznek az elméletiekkel, eltekintve a 90 és 130 eV közötti tartománytól, ahol a közöttük lévő eltérés jelentős. Ez az eltérés annak tulajdonítható, hogy a gerjesztett állapotokat nem vették figyelembe az RIPM, a 13 és 20 csatornás RRPA számolásokban.

A mérési geometriáknak köszönhetően a γ és δ nondipól anizotrópia paramétereit külön-külön meg tudtuk határozni. A δ paramétert hibán belül nullának találtuk, ahogy azt korábban elméletileg is megjósolták [Coo93]. A 4.1.5 ábra mutatja a Xe $5s$ fotoelektronok kísérleti és elméleti [Der99, Joh01, Joh02, Amu01] γ anizotrópia paramétereit a fotonenergia függvényében. Ezen az ábrán is, ahogy előzőleg a β paraméterekre vonatkozóan is, az általunk mért adatokat körök, míg a számoltakat különböző típusú vonalak jelölik. A mért γ paramétereinket összehasonlítottuk a relativisztikus független részecske modellel (RIPM) [Der99], a 13 és 20 csatornás relativisztikus véletlen fázisú közelítéssel (RRPA) [Joh01, Joh02] ill. a 13 csatornás, kicserélődést tartalmazó nem relativisztikus véletlen fázisú közelítéssel (RPAE) [Amu01] kapott eredményekkel.



4.1.5 ábra A Xe $5s$ fotoelektronok kísérleti és elméleti γ nondipól anizotrópia paramétereinek összehasonlítása a fotonenergia függvényében.

Kísérlet: \circ saját mérés;

Elmélet: \cdots RIPM [Der99]; $- \cdot -$ 13 csatornás RPAE [Amu01]; $---$ 13 csatornás RRPA [Joh01]; $—$ 20 csatornás RRPA [Joh02].

Látható, hogy az RIPM számolások [Der99] egy szerkezet nélküli enyhe növekedést mutatnak, míg 13 és 20 csatornás RRPA [Joh01, Joh02]

számolásokban egy csúcs látható 150 eV körüli maximummal, éppen ott, ahol a $4d$ hatáskeresztmetszet Cooper-minimuma [Yeh85] található. (Ha a fotoelektronok ionizációs hatáskeresztmetszetét ábrázoljuk a fotonenergia függvényében, akkor egy bizonyos fotonenergiánál, héjtól és rendszámtól függően, minimum található a görbén, amelyet Cooper-minimumak nevezünk.) A 20 csatornás RRPA módosítja a maximum nagyságát ill. felhasítja a csúcsot két komponensre. Meg kell jegyeztem, hogy az ábrán látható 20 csatornás RRPA eredményeken [Joh02] kívül létezik egy korábbi 20 csatornás RRPA számolás [Joh01] is. A különbség a kettő között az, hogy a korábbiiban a számolások során használt $4p$ héj ionizációs küszöbenergia $E_B(4p_{3/2}) = 156.5 \text{ eV}$ és $E_B(4p_{1/2}) = 163.9 \text{ eV}$ [Sev79] volt, míg az ábrán is feltüntetett számolás a realisabb $E_B(4p_{3/2}) = 145.5 \text{ eV}$ és $E_B(4p_{1/2}) = 157 \text{ eV}$ [Car75] értékeken alapul. A $4p$ héj küszöbenergiájának módosítása eltolja a maximumot az alacsonyabb fotonenergiák felé, de a csúcs magasságát nem változtatja meg. A kísérleti γ paramétereink a 20 csatornás RRPA számolások eredményeihez hasonló szerkezetet mutatnak [Joh02]. A csúcs felmenő és leszálló ága jól egyezik az elmélettel [Joh02], de a kísérletileg talált maximum kisebb fotonenergián található, mint az elméletileg jósolt. A kísérleti és elméleti [Der99, Joh01, Joh02, Amu01] értékek összehasonlításából arra következtethetünk, hogy a Xe $4s$ és $4p$ csatornák figyelembe vétele fontos a Xe $5s$ héj fotoionizációját jellemző γ nondipól paraméter fotonenergia-függésének leírásában, éppúgy, ahogy azt a β paraméterek esetében is tapasztaltuk. A 20 csatornás RRPA számolás [Joh02] kissé túlbecsüli a $4p$ héj járulékát, ami nem meglepő, hiszen a Xe $4p^{-1}$ állapot korrelál a $4d^2nf,ef$ állapotokkal, amit azonban az elmélet nem tartalmaz.

Tulkki [Tul89] a többcsatornás multikonfigurációs Dirack-Fock eljárás keretein belül végzett számolásaiban azt találta, hogy 30 eV körüli fotonenergiákon a fő és a szatellit csatornák közötti kölcsönhatás nagyban befolyásolja a Xe 5s héj fotoionizációját. Ez alapján a kísérlet és az elmélet között továbbra is jelenlévő eltéréseket az 5s és 4p ionizációkhoz kapcsolódó $5p^{-2}nd,ed$ és $4d^{-2}nf,ef$ típusú szatellit csatornák elméletekben való elhagyásával magyarázhatjuk. Látható, hogy a kicserélődést is tartalmazó nemrelativisztikus 13 csatornás RPAE számolások [Amu01] kisebb γ paraméter értékeket eredményeznek, mint a megfelelő 13 csatornás RRPA számolások [Joh01]. Ezek azt mutatják, hogy a relativisztikus effektusokat valószínűleg túlbecsülték az RRPA számolásokban [Joh01, Joh02] és hogy a szatellit csatornák tekintetbe vétele fontos a Xe 5s fotoionizációjának a pontos leírása szempontjából.

Összefoglalásul mondhatjuk, hogy a Xe 5s fotoelektronok szögeloszlását jellemző dipól (β) és nondipól (γ és δ) paraméterek fotonenergia-függésében tisztán látható szerkezetet találtunk (völgyet a β paramétereknél és csúcsot a γ paramétereknél), kivéve a δ paramétereket, amelyeket jó közelítéssel nullának mértünk az elméletekkel [Coo93] megegyezően. A kísérleti β és γ paraméterek jó egyezésben vannak a 20 csatornás RRPA számolásokkal [Joh02], de jelentősen különböznek a független részecske modellből [Der99] kapott értékektől. Mindezek azt mutatják, hogy a többelektronos korrelációs effektusok lényeges szerepet játszanak a fotoionizáció folyamatában.

Végül megjegyzem, hogy ez volt az első olyan kísérleti vizsgálat, amely rámutatott a nondipól kölcsönhatás figyelembevételének jelentőségére alacsony energiájú foton-atom ütközésekben.

A fejezetben ismertetett eredmények elérésében saját munkámnak tekintem a mért spektrumok teljes körű feldolgozását (100%). Továbbá jelentősen hozzájárultam a mérések kivitelezéséhez (60%) és a kísérleti adatok értelmezéséhez (50%).

4.1.3 A Xe 5p héjról származó fotoelektronok szögeloszlásának anizotrópia paraméterei

A Xe 5p héj esetében a Xe 5s héjnal elvégzett és az előző fejezetben bemutatotthoz hasonló méréseket végeztünk, azaz vizsgáltuk a Xe 5p fotoelektronok dipól és nondipól anizotrópia paramétereinek fotonenergia-függését a 100-200 eV közötti fotonenergia-tartományban [San04]. A spektrométer energiafelbontásának (170 meV) és a fotonnyaláb-sávszélességnek (50-240 meV) köszönhetően jól el tudtuk különíteni a Xe 5p fotoelektron-vonal spin-pálya komponenseit ($5p_{1/2}$ és $5p_{3/2}$).

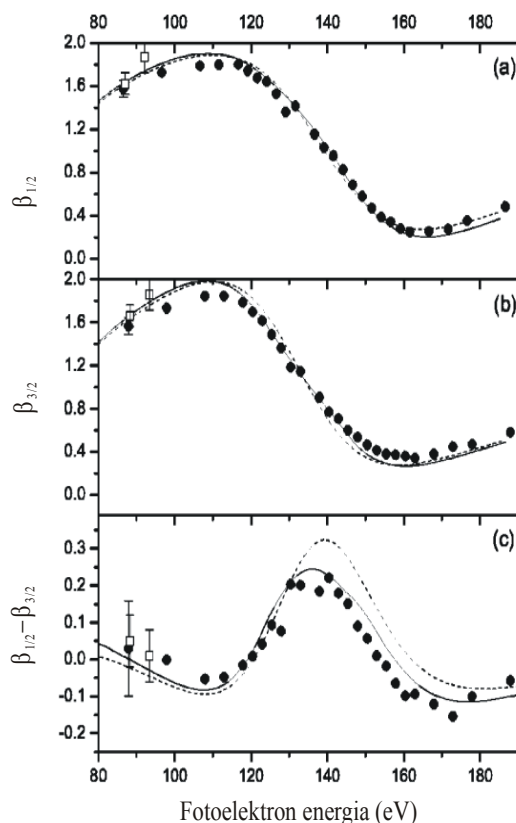
Már korábban is végeztek alacsony fotonenergián olyan méréseket [Kra81, Sou83, Sou86], ahol a spin-pálya komponenseket szét tudták választani. Ezen kísérleti vizsgálatokban azonban csak a β dipól paramétert határozták meg. A mérések eredményeit sikeresen magyarázták a relativisztikus véletlen fázisú közelítéssel (RRPA) [Joh79a, Joh79b, Kut89] és a kicserélődési effektust is tartalmazó nem relativisztikus véletlen fázisú közelítéssel (RPAE) [Amu77].

Méréseink eredményeit Johnson és Cheng legutóbbi 13 és 20 csatornás RRPA számolásaival hasonlítottuk össze [Joh02], ahol az utóbbiban $E_B(4p_{3/2}) = 145.5 \text{ eV}$ és $E_B(4p_{1/2}) = 157 \text{ eV}$ 4p héj ionizációs küszöbenergia-értékeket [Car75] használtak a számolások során. Emlékeztetőül: a 13 csatornás RRPA elmélet a 4d, 5s és 5p héjak közötti kölcsönhatást tartalmazza, míg a 20 csatornás RRPA ezeken felül a 4s és 4p, héjakat is figyelembe veszi.

Az anizotrópia paraméterek összehasonlítását azonos fotoelektron-energián végeztük. Így az $5p_{3/2}$ fotoelektronok kinetikus energiájának megfelelő $\beta_{1/2}$, $\gamma_{1/2}$ és $\delta_{1/2}$ paraméterek értékét interpoláltuk a kísérleti adatokból.

A 4.1.6 a.) és b.) ábrán látható a Xe 5p spin-pálya komponensek kísérleti [San04, Kra81] és elméleti [Joh02] $\beta_{1/2}$ és $\beta_{3/2}$ dipól anizotrópia paramétereinek

összehasonlítása a fotoelektronok energiájának a függvényében. A 4.1.6 c.) ábra mutatja a $\beta_{1/2}$ és $\beta_{3/2}$ dipól paraméterek különbségének ($\beta_{1/2}-\beta_{3/2}$) fotoelektronenergia-függését. Mint már említettem, méréseinket 100 eV és 200 eV közötti fotonenergián végeztük, ami a Xe $4d$ alakrezonancia maximumának és a Xe $4d$ Cooper minimum közötti tartománynak felel meg [Lin88].



4.1.6 a.), b.) és c.) ábra A Xe $5p_{1/2}$ (a) és $5p_{3/2}$ (b) alhéjak kísérleti β dipól paramétereinek illetve ezek különbségének ($\beta_{1/2}-\beta_{3/2}$) (c) összehasonlítása a 13 és 20 csatornás RRPA számolások eredményével a fotoelektronok energiájának függvényében. Kísérlet: ● saját mérés; □ Krause és mtsai. [Kra81]; Elmélet: --- 13 csatornás RRPA [Joh02]; — 20 csatornás RRPA [Joh02].

Az általunk mért adatokat tömött körökkel, míg a számoltakat különböző típusú vonalakkal ábrázoltam. Az ábrán Krause és munkatársainak kísérleti eredménye (üres négyzet) [Kra81] is fel van tüntetve, amely mindkét alhéj esetén jól egyezik az általunk mért β paraméterek értékével. A kísérleti β paraméterek

hibái csak az első pontoknál vannak feltüntetve az ábra könnyebb átláthatósága kedvéért. Ez az ábrázolásmód megtehető, hiszen a többi ponthoz tartozó hibák nagysága közel azonos az első pontokéval.

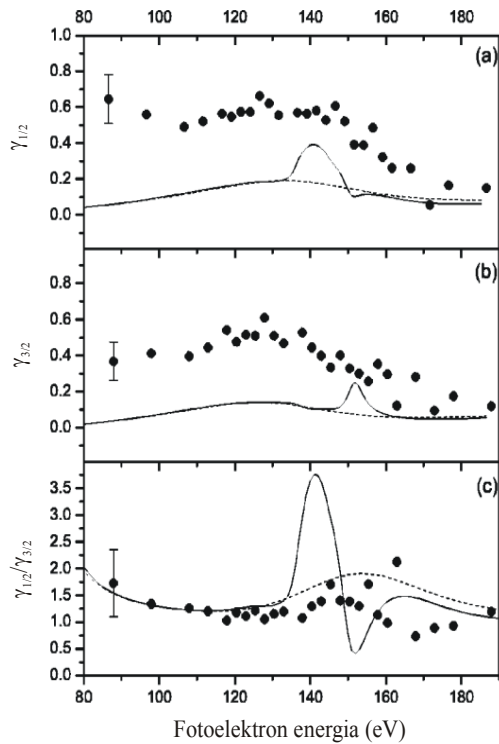
Látható, hogy az elméletek jól reprodukálják a kísérleti $\beta_{1/2}$ és $\beta_{3/2}$ paramétereket a Xe $5p_{1/2}$ és $5p_{3/2}$ alhéjakra egyaránt (lásd 4.1.6 a.) és b.) ábra). A két közelítés majdnem ugyanazt a viselkedést jósolja a dipól paraméterek fotoelektronenergia-függésére mindkét esetben, ami felveti, hogy a $4s$ és $4p$ ionizációs csatornák nem hatnak erősen kölcsön az $5p$ csatornával. A 4.1.6 c.) ábrán mutatott $\beta_{1/2}$ és $\beta_{3/2}$ anizotrópia paraméterek különbségének ($\beta_{1/2}-\beta_{3/2}$) fotoelektronenergia-függését nézve azonban láthatjuk, hogy a 20 csatornás RRPA számolás eredményei mégiscsak jobban egyeznek a kísérleti értékekkel, mint a 13 csatornásé. Természetesen ez a különbség a 4.1.6 a.) és b.) ábrán is jelen van, csak kevésbé feltűnően. A $\beta_{1/2}$ és $\beta_{3/2}$ anizotrópia paraméterek erősen változnak (lásd 4.1.6 a.) és b.) ábrát) abban a tartományban, ahol a Xe $4d$ hatáskeresztmetszet is jelentősen változik [Bec88], mutatva, hogy az $5p$ és $4d$ csatornák közötti kölcsönhatás meglehetősen erős. Az előbb elmondottakból arra következtethetünk, hogy az atomi elektronok közötti kölcsönhatás fontos szerepet játszik a Xe $5p$ héj fotoionizációjában. Megjegyzem, hogy a független részecske modellben végzett számolások közel konstans β paramétert adnak az általunk vizsgált fotonenergia-tartományban (lásd pl. [Der99]).

Az 4.1.6 c.) ábrán látható $\beta_{1/2}-\beta_{3/2}$ különbség fotoelektronenergia-függése mutatja a Xe $5p$ fotoionizációjában jelenlévő relativisztikus effektusokat. Ez azt tükrözi, hogy az átmeneti amplitúdó minimuma vagy nullátmenete eltérő fotoelektron energiánál van a két alhéj esetén az erős spin-pálya kölcsönhatásnak köszönhetően. A relativisztikus effektusok hiányában ez a különbség nulla lenne. Az ábrából világosan látszik, hogy a $\beta_{1/2}$ és $\beta_{3/2}$ anizotrópia paraméterek különbsége jelen esetben eltér nullától. Ez alapján megállapíthatjuk, hogy a relativisztikus effektusok is fontos szerepet játszanak a Xe $5p$ fotoionizációjának

pontos leírásában. A β értékek változásának összehasonlításából azonban világossá válik, hogy az elektronok közötti kölcsönhatás β dipól paraméterekre kifejtett hatása nagyobb, mint a relativisztikus effektusoké. A $\beta_{1/2}$ - $\beta_{3/2}$ különbség a Xe $5p$ Cooper minimumnak megfelelő helyen a legnagyobb (150 eV körüli fotonenergián). Ez jó egyezésben van Kim és munkatársai által végzett számolásokkal [Kim81] és a Xe $5p$ [Kra81] és Xe $4d$ [Wan01] fotoelektronok szögeloszlását vizsgáló korábbi mérések eredményeivel. Általánosan mondhatjuk, hogy a kísérleti β paraméterek jól egyeznek az elméletiekkel a vizsgált fotonenergia-tartományban.

Ahogy azt már a Xe $5s$ héjra vonatkozó eredmények bemutatásánál is említettem, a mérési geometriánknak köszönhetően a γ és δ nondipól anizotrópia paramétereket külön-külön meg tudtuk határozni.

A 4.1.7 a.) és b.) ábra mutatja a Xe $5p_{1/2}$ és Xe $5p_{3/2}$ alhéjak kísérleti [San04] és elméleti [Joh02] $\gamma_{1/2}$ és $\gamma_{3/2}$ nondipól paramétereinek összehasonlítását, míg a 4.1.7 c.) ábra a $\gamma_{1/2}$ és $\gamma_{3/2}$ anizotrópia paraméterek hányadosát ($\gamma_{1/2}/\gamma_{3/2}$) a fotoelektronok energiájának függvényében. Az általunk mért adatokat itt is tömött körökkel, a számoltakat különböző típusú vonalakkal ábrázoltam. A kísérleti γ paraméterek hibái ezen az ábrán is csak az első pontnál vannak feltüntetve. A mért γ értékeket a 13 és 20 csatornás relativisztikus véletlen fázisú közelítésekből (RRPA) [Joh02] kapott adatokkal hasonlítottuk össze. A 13 csatornás RRPA számolások szerkezet nélküli energiafüggést mutatnak a Xe $5p$ spin-pálya komponensek γ paramétereire vonatkozóan. A 20 csatornás RRPA leírásban a γ értékek fotonenergia-függésében éles csúcs található 140 eV körüli fotoelektronenergia-maximummal a Xe $5p_{1/2}$ alhéj esetén és 150 eV körüli maximummal a Xe $5p_{3/2}$ alhéjnál (lásd 4.1.7 a.) és b.) ábrát). A kísérleti adatok gyenge változást mutatnak a maximumok körüli tartományban mindkét spin-pálya komponens esetében, és inkább széles, elkenet szerkezet jellemző rájuk, mint a 20 csatornás RRPA közelítés által jósolt éles szerkezet.



4.1.7 a.), b.) és c) ábra A Xe $5p_{1/2}$ (a) és $5p_{3/2}$ (b) alhéjak kísérleti γ anizotrópia paramétereinek ill. ezek hányadosának ($\gamma_{1/2}/\gamma_{3/2}$) (c) összehasonlítása a 13 és 20 csatornás RRPAszámolások eredményével a fotoelektronok energiájának függvényében.

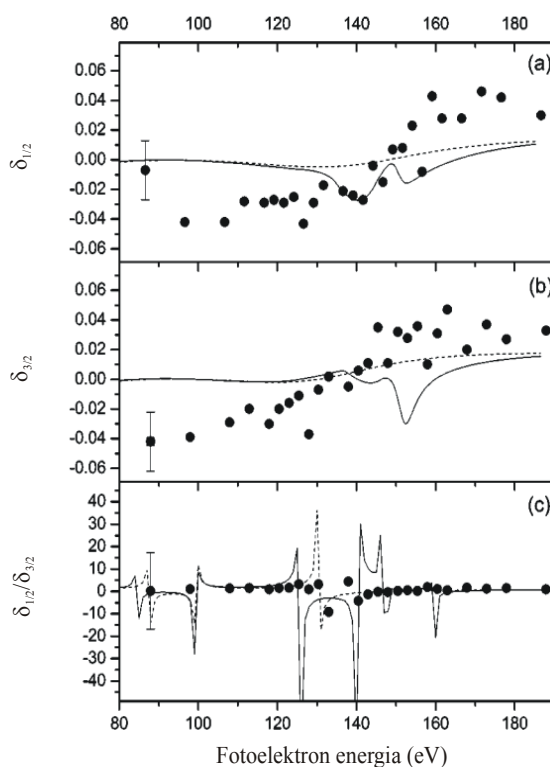
Kísérlet: ● saját mérés;

Elmélet: --- 13 csatornás RRPAszámolás [Joh02]; — 20 csatornás RRPAszámolás [Joh02].

A 4.1.7 c.) ábrán láthatjuk, hogy a kísérleti $\gamma_{1/2}$ és $\gamma_{3/2}$ nondipól paraméterek hányadosa ($\gamma_{1/2}/\gamma_{3/2}$) változást mutat 130 eV és 190 eV közötti fotoelektron energián, amiből a $4p$ és/vagy $4s$ csatornák és az $5p$ csatorna közötti kölcsönhatásra következtethetünk. A 13 csatornás RRPAszámolások itt is szerkezet nélküli fotonenergia-függést jósolnak, míg a 20 csatornás RRPAszámolások eredményében egy csúcs látható 140 eV körüli fotoelektronenergia-maximummal ill. egy völgy 150 eV körüli minimummal. Ennek az éles szerkezetnek a hiánya a kísérleti γ értékekben azt mutatja, hogy az elmélet túlbecsüli az $5p$ ionizációs csatorna és a $4p$ és/vagy $4s$ csatornák közötti kölcsönhatást. Az eltérést a kísérleti és a 20 csatornás RRPAszámolások között valószínűleg az okozza, hogy az RRPAszámolásokban a $4p$ héj ionizációját egyelektronos folyamatnak tekintik annak ellenére, hogy tudjuk, hogy a Xe $4p^{-1}$ állapot erősen kölcsönhat a $4d^{-2}nf,ef$ állapotokkal [Hei04].

Megjegyzem, hogy az ionizációs csatornák közötti kölcsönhatások a Xe $5p$ héj γ paramétereit kevésbé, míg β paramétereit erőteljesen módosítják. Ez ellentétben van azzal az eredménnyel, amit a Xe $5s$ héj fotoionizációjánál találtunk [Ric03], hiszen ott a γ paraméterek bizonyultak érzékenyebbnak a csatornák közötti kölcsönhatásra.

Az 4.1.8 a.) és b.) ábrán a Xe $5p$ spin-pálya komponensek kísérleti [San04] és elméleti [Joh02] $\delta_{1/2}$ és $\delta_{3/2}$ nondipól paramétereinek összehasonlítása látható, míg a 4.1.8 c.) ábrán a $\delta_{1/2}$ és $\delta_{3/2}$ anizotrópia paraméterek hányadosa ($\delta_{1/2}/\delta_{3/2}$) a fotelektronok energiájának függvényében. A tömött körök itt is az általunk mért adatokat jelentik, míg a különböző típusú vonalak az elméleti értékeket. A mért δ paraméterek hibái ezen az ábrán is, ahogy az előző két ábrán is, csak az első pontoknál vannak feltüntetve.



4.1.8 a.), b.) és c.) ábra A Xe $5p_{1/2}$ (a) és $5p_{3/2}$ (b) fotelektronok kísérleti δ nondipól paramétereinek ill. ezek hányadosának ($\delta_{1/2}/\delta_{3/2}$) (c) összehasonlítása a 13 és 20 csatornás RRP számítások eredményével a fotelektronok energiájának függvényében. Kísérlet: ● saját mérés; Elmélet: --- 13 csatornás RRP [Joh02]; — 20 csatornás RRP [Joh02].

A 13 és 20 csatornás relativisztikus véletlen fázisú közelítésekből (RRPA) [Joh02] kapott elméleti értékekkel hasonlítottuk össze a kísérleti δ paramétereinket. A 13 csatornás RRPA számolások csekély növekedést mutatnak, míg a 20 csatornás RRPA számolások éles szerkezetet jósolnak a Xe $5p$ spin-pálya komponensek δ paramétereinek fotonenergia-függésében. Látható, hogy kísérleti adatok értéke enyhén növekszik a fotoelektronok energiájának növekedésével mindkét spin-pálya komponens esetén, azaz a 20 csatornás RRPA által jósolt éles szerkezet nem található meg a kísérleti adatokban. A mért δ paraméterek értékére azonban óvatosan kell tekintenünk, mivel sajnos a statisztikai bizonytalanságuk (hibájuk) elég nagy, ahogy azt az ábrán is láthatjuk.

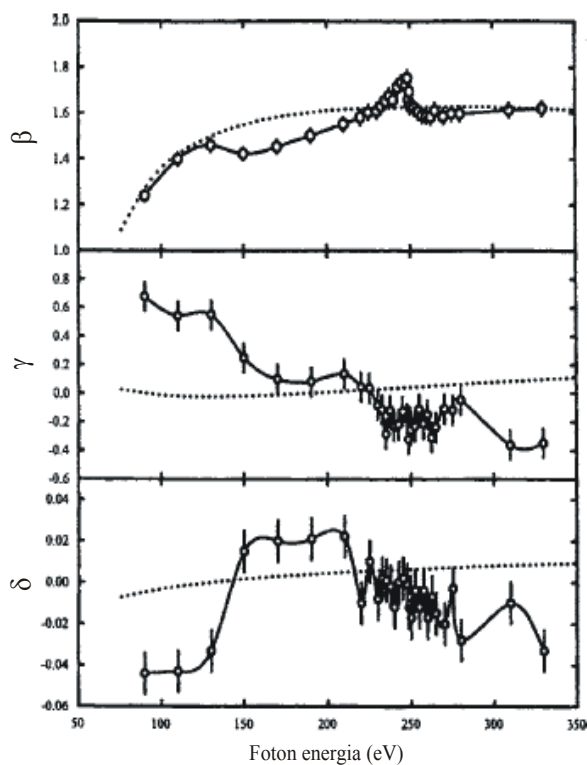
Összefoglalásul mondhatjuk, hogy a kísérleti β , γ és δ anizotrópia paraméterek jó egyezésben vannak az $5s$, $5p$ és $4d$ csatornák közötti kölcsönhatást tartalmazó RRPA számolásokkal. Az $5p$ és $4p$ csatornák közötti kölcsönhatás erősségét továbbra sem ismerjük, mivel a számolásokban a $4p$ héj ionizációját egyelektronos folyamatnak tekintik és ez nem írja le megfelelően ezt a folyamatot [Hei04]. A kísérleti eredményeink tisztán mutatják, hogy nemcsak a többelektronos korrelációs effektusok játszanak lényeges szerepet a Xe $5p$ héj fotoionizációjának pontos leírásában, hanem a relativisztikus effektusok is. Megjegyzem, hogy a korábbi kísérleti munkákban csak a dipól kölcsönhatást jellemző β paramétereket tudták meghatározni. Elsőként mutattuk ki, hogy a magasabb multipólusoknak jelentős járuléka van a Xe $5p$ héj fotoionizációjában.

A Xe $5p$ héjra vonatkozó vizsgálataink során részt vettem a mérésekben (60%), a kísérleti eredmények értelmezésében (50%) és az adatok teljes kiértékelését (100%) én végeztem.

4.1.4 Az Ar 3p héjról származó fotoelektronok szögeloszlásának anizotrópia paraméterei

Felvetődik a kérdés, hogy az előzőekben ismertetett jelenségek csak a xenonra vagy más atomokra is jellemzőek. Ezt ellenőrzendő, hasonló méréseket végeztünk az Ar 3p fotoelektronok anizotrópia paramétereinek fotonenergia-függésére is a 90-330 eV közötti fotonenergia-tartományban [Ric05a].

Vizsgálatainkat mérsékelt energiafelbontás mellett (70 eV átmenő energia) széles fotonenergia-tartományon (90-330 eV) kezdtük. A 4.1.9 ábra mutatja az Ar 3p fotoelektronok kísérleti és a relativisztikus független részecske modellből (RIPM) [Der99] kapott elméleti dipól (β) és nondipól (γ és δ) [Ric05a] anizotrópia paramétereit a fotonenergia függvényében. A mérési geometriánknak köszönhetően külön meg tudtuk határozni a γ és δ paramétereket.

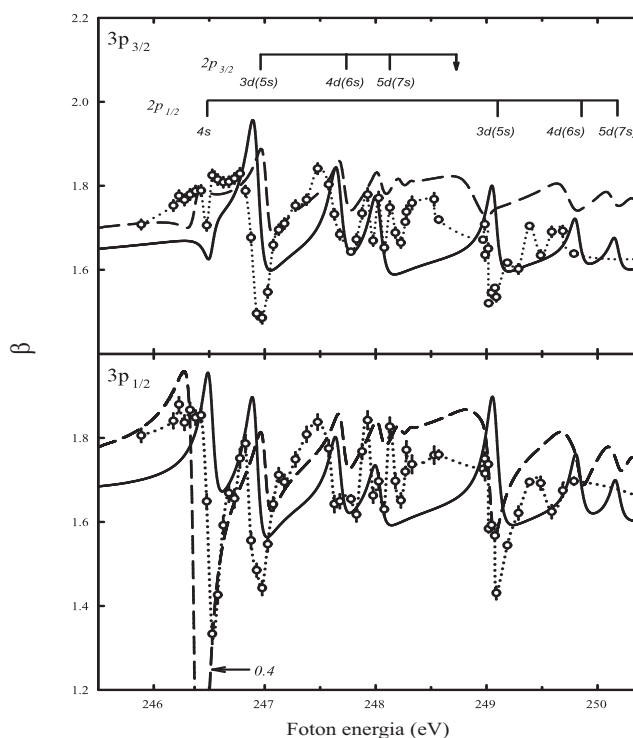


4.1.9 ábra Az Ar 3p fotoelektronok kísérleti és a relativisztikus független részecske modellből (RIPM) kapott elméleti β , γ és δ anizotrópia paramétereinek fotonenergia-függése. Kísérlet: \circ saját mérés; Elmélet: \cdots RIPM [Der99]. A folytonos vonal csak a szem vezetésére szolgál.

A kísérleti β paramétereket összehasonlítottuk a relativisztikus független részecske modellből (RIPM) [Der99] kapott értékekkel. Ez a számolás szerkezet nélküli telítésbe futó eloszlást jósol a β paraméterek fotonenergia-függésében, míg a mért β értékek 250 eV körüli maximummal rendelkező gyors növekedést mutatnak az Ar $2p$ ionizációs küszöb körüli tartományban. Ez a szerkezet hasonló, mint amit a Xe $5s$ fotoelektronok szögeloszlásánál tapasztaltunk a $4p$ ionizációs küszöb környékén [Ric03, Hem01]. Ebből arra következtethetünk, hogy a xenonnál tapasztaltak bármelyik atomnál bekövetkezhetnek egy-egy újabb ionizációs vagy gerjesztési csatorna megnyílásánál. Az RIPM számolás és a kísérleti adatok közötti különbség felveti, hogy az elektronkorreláció lényeges szerepet játszik a fotoionizációs folyamatban, vagyis ilyen kölcsönhatást tartalmazó számolásban a $2p$, $3s$ és $3p$ ionizációs vagy gerjesztési csatornák közötti kölcsönhatást is figyelembe kell venni.

Az anizotrópia paraméterek fotonenergia-függésénél a $2p_{1/2,3/2} \rightarrow ns/md$ rezonáns gerjesztés tartományában megjelenő szerkezet részletes vizsgálatát is elvégeztük keskeny fotonenergia-tartományban (246-253 eV) nagyon jó energiafelbontással mind a fotonnyaláb (szélessége 57 meV és 59 meV közötti), mind az elektron spektrométer (30 eV átmenő energia) oldaláról (a részleteket lásd a 4.1.1 fejezetben). A spektrométer energiafelbontásának és a fotonnyaláb-sáv szélességnek köszönhetően jól el tudtuk különíteni az Ar $3p$ fotoelektron-vonal spin-pálya komponenseit. A 4.1.10 ábrán ezeknek a vizsgálatoknak az eredménye látható a $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjak dipól paramétereire, összehasonlítva olyan két elméleti számolással [Ric05a, Gor99], amelyekben a direkt és indirekt ionizációs folyamatok közötti kölcsönhatást is figyelembe vették. Az egyik elmélet az R-mátrix eljárás [Gor99], amely az optikai potenciálon és a többszörös kvantumdefekt elméleten (**multichannel quantum defect theory**, MQDT) alapul. Ez egyrészt erős interferenciát jósol a direkt fotoionizáció és a rezonáns gerjesztést követő participátor Auger-átmenetek

között az argon $2p^{-1}$ belső héj gerjesztések esetén, másrészt azt mondja, hogy az interferencia effektusok mérhetővé válnak nagy felbontású mérésekben (mint például a mi méréseink).



4.1.10 ábra Az Ar $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjak kísérleti β dipól paramétereinek összehasonlítása az R-mátrix és az MCDF számolások eredményeivel a fotonenergia függvényében. Kísérlet: \circ saját mérés. Elmélet: --- R-mátrix [Gor99]; — MCDF [Ric05a]. A pontozott vonal csak a szem vezetésére szolgál. A függőleges vonalak mutatják a $2p_{1/2,3/2} \rightarrow ns/md$ rezonanciahelyeket és a nyíl mutatja az ionizációs küszöbenergiát.

A másik számolás [Ric05a] alapja a multikonfigurációs Dirack-Fock eljárás (multi-configuration Dirack-Fock approximation, MCDF), melyet a GRASP92-csomag [Par96] használatával saját magunk végeztünk el. A számolás során feltételeztük, hogy a polarizálatlan argon atomok alapállapotait teljesen lineárisan polarizált fotonnyalábbal ionizáljuk és gerjesztjük. A RATIP-program [Fri01] (ami a GRASP92-csomag továbbfejlesztése) segítségével kiszámoltuk az

MCDF participátor Auger-bomlás és a direkt fotoionizáció átmeneti amplitúdóit. Ezeket az átmeneti mátrixelemeket használtuk a dipól anizotrópia paraméterek meghatározásához (lásd a 26. kifejezést [Bai94]-ben). A rezonáns gerjesztés és az azt követő participátor Auger-bomlás amplitúdóinak leírásában csak a $2p \rightarrow 3d, 4s, 4d, 5s, 5d, 6s, 7s$ gerjesztéseket vettük figyelembe. Azért, hogy a kapott eredményeket össze tudjuk hasonlítani a kísérleti értékekkel, a $2p \rightarrow ns/md$ gerjesztett állapotok energiefelhasadását a [Kin77] irodalomban található kísérleti energiákkal korrigáltuk ill. ezen állapotok Γ_i teljes bomlási szélességeként Sairanen és munkatársai kísérleti eredményeit [Sai96] fogadtuk el.

A kísérleti β paraméterek éles völgyeket mutatnak a $2p$ elektronoknak az ns ($n \geq 4$) vagy nd ($n \geq 3$) állapotokba történő megengedett átmenetei körül az Ar $3p$ héj mindkét spin-pálya komponense esetében. Ezt a rezonancia-szerkezetet az Ar $3p$ héj fotoionizációjában a direkt és indirekt csatornák között fellépő interferencia okozza. Látható, hogy a $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjakra vonatkozó dipól paraméterek eltérnek egymástól. Pl. a β paraméter energiatfüggésében a $2p_{1/2} \rightarrow 4s$ átmenetnek megfelelő völgy a $3p_{1/2}$ alhéj esetén mélyebb, mint a $3p_{3/2}$ alhéj esetén. Az Ar $3p$ alhéjak dipól paramétereinek különböző viselkedése mutatja a spin-pálya kölcsönhatás fontosságát a fotoionizációban.

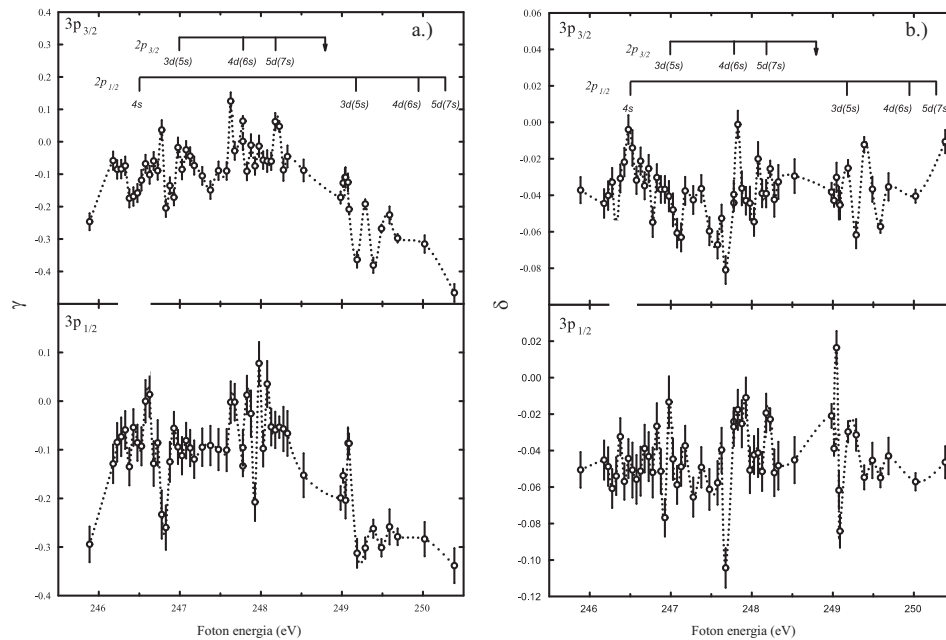
Látható, hogy az R-mátrix számolás [Gor99] is erős változást jósol a β paraméterek viselkedésében. A kísérleti és elméleti értékek fotonenergia-függése mindkét alhéj esetén jól egyezik egymással, bár kisebb eltérések megfigyelhetők. A kísérleti és elméleti rezonanciahelyek között egy kis elcsúszás látható, ami a $2p_{1/2}$ és $2p_{3/2}$ finomszerkezeti felhasadás nem megfelelő elméleti becsléséből eredhet [Gor05]. Az elmélet szélesebb és kevésbé mély minimumokat jósol a rezonanciaenergiák körül, mint amit kísérletileg kaptunk, kivéve a $2p_{1/2} \rightarrow 4s$ átmenetet a $3p_{1/2}$ alhéj esetén (a minimum elméleti értéke 0.4, míg a mért érték 1.35). Az eltérések a következőképpen magyarázhatók: Méréseink során a

fotonnyaláb sávszélessége sokkal kisebb volt, mint a $2p^{-1}nl$ rezonáns állapot természetes vonalszélessége ($\Gamma_{ph}=50$ meV, $\Gamma_{2p-1n}\approx 110$ meV), ami azt jelenti, hogy a $2p^{-1}nl$ állapot természetes vonalszélessége közelítőleg megegyezik a fotonnyaláb sávszélességével a rezonáns Raman Auger-effektusnak megfelelően. Ez az interferencia által okozott völgyek szélességének elmélethez képesti csökkenését és amplitúdóinak elmélethez képesti növekedését eredményezi. Az R-mátrix számolásban [Gor99] a “normál” természetes vonalszélességet használják az optikai potenciálban, ami helyes a töltött részecskékkel való ütközések leg többjénél ill. abban az esetben, amikor a gerjesztő nyaláb energiaszélessége nagyobb, mint a rezonáns állapoté. Nagyobb fotonenergiákon ($h\nu \geq 249$ eV) az elméleti β paraméterek maximális értéke egy kissé nagyobb, mint a kísérleti dipól paramétereké mindkét alhéjnél. Az R-mátrix számolás elég jól visszaadja a magasabban gerjesztett állapotoknak megfelelő tartományt, annak ellenére, hogy sok átfedés van a $2p \rightarrow nd/(n+2)s$ rezonanciaállapotokkal.

Az MCDF számolásból [Ric05a] kapott elméleti görbe eltér mind a kísérleti mind az R-mátrix elméletből [Gor99] meghatározott görbétől. Ez annak tulajdonítható, hogy a számolásban csak az első néhány rezonanciát vettük figyelembe és a magasabban fekvő Rydberg-állapotok hatását elhanyagoltuk. Az elmélet nem adja meg jól a $3p_{1/2}$ héj β paraméterét sem a $2p_{1/2} \rightarrow 4s$ rezonanciánál. Ennél az átmenetnél az MCDF elmélet kevésbé mély völgyet jósol, mint amit az R-mátrix számolás ill. a kísérlet ad. Mindkét alhéj esetén a $2p_{1/2,3/2} \rightarrow 3d(5s)$ átmenetnek megfelelő, az MCDF közelítéssel számolt völgy elég jól egyezik a kísérleti és R-mátrix eredményekkel, csak a völgy minimuma és szélessége különbözik kissé a kísérlettől az R-mátrix elmélethez hasonló módon.

A 4.1.11 a.) és b.) ábra mutatja az Ar $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ fotoelektronok kísérleti nondipól (γ és δ) paramétereinek fotonenergia-függését. Sajnos az általunk vizsgált energiatartományban a nondipól paraméterekre eddig nincs olyan

elméleti számolás, amelyben a direkt és indirekt ionizációs folyamatok közötti kölcsönhatást is figyelembe veszik.



4.1.11 a.) és b.) ábra Az Ar $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjak kísérleti γ és δ nondipól paraméterei a fotonenergia függvényében. A függőleges vonalak mutatják a $2p_{1/2,3/2} \rightarrow ns/md$ rezonanciahelyeket és a nyíl mutatja a megfelelő küszöbenergiát.

A kísérleti eredmények értelmezése során óvatosnak kell lennünk mindkét nondipól paraméter esetén, hiszen a δ paramétereket közelítőleg nullának találtuk, a γ paraméterek abszolút értékei pedig elég kicsik. Az azonban tisztán látszik, hogy mindkét nondipól paraméterben megfigyelhető a rezonanciaszerkezet. Különösen igaz ez a $3p_{3/2}$ alhéj fotoionizációjában a $2p_{1/2} \rightarrow 4s$ és $2p_{3/2} \rightarrow 3d(5s)$ gerjesztéshez tartozó fotonenergiánál. Az is jól látható, hogy a $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjakra vonatkozó γ és δ paraméterek eltérően viselkednek.

Befejezésül azt mondhatjuk, hogy direkt és indirekt csatornák közötti erős interferenciát figyeltünk meg az Ar $3p$ héj fotoionizációjában. Az Ar $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjakhoz tartozó β , γ és δ paraméterek közötti különbségek mutatják a

spin-pálya kölcsönhatás fontosságát a fotoionizációban. A Xe $5s$ [Ric03] és Xe $5p$ [San04] fotoelektronok előzőekben bemutatott vizsgálati eredményeivel együtt kijelenthetjük, hogy a többelektronos korrelációs effektusok fontos szerepet játszanak a fotoionizációban minden olyan esetben, amikor egy új ionizációs vagy gerjesztési csatorna nyílik meg. A kísérleti dipól (β) anizotrópia paraméterek jól egyeznek mind az R-mátrix [Gor99] mind az MCDF [Ric05a] számolásból kapott elméleti értékekkel. A két elmélet közti eltérés az alkalmazott modelltől és a figyelembe vett indirekt ionizációs csatornák számából ered. A kísérleti és elméleti rezonanciahelyek között egy kis eltolódás figyelhető meg. A nondipól paraméterekre eddig nincs olyan elméleti számolás, amely tartalmazza a direkt és indirekt ionizációs folyamatok közötti kölcsönhatást. Ezek az első olyan kísérleti dipól és nondipól paraméter adatok, amelyek igazolják a participátor rezonáns Auger-folyamat (indirekt) és a direkt fotoionizáció közötti interferencia létezését.

Az Ar $3p$ héjra vonatkozó vizsgálataink során részt vettem a mérésekben (70%) és az adatok teljes kiértékelését én végeztem (100%). Meghatározó szerepem volt továbbá a kísérleti adatok értelmezésében (60%).

4.2 Kiütött elektronok többszörös szóródása a céltárgy és a lövedék ionok terén

Kísérletünk célja ion-atom, ion-molekula és molekulaion-atom ütközésekben a Fermi-féle gyorsítási mechanizmus P, P-T, P-T-P és P-T-P-T szórási sorozatainak tanulmányozása a céltárgy atomszámának függvényében ill. az esetlegesen fellépő molekuláris effektusok kimutatása. E célból a következő ütközési folyamatok során emittált elektronok kétszeresen differenciális abszolút hatáskeresztmetszeteit (DDCS) határoztuk meg: 0.75 MeV $N^+ + Ar$, 1 MeV $N^+ + N_2$, 1 MeV $N^+ + Ne$ és 1.5 MeV $N_2^+ + Ar$ [Ric05b, Sul07].

4.2.1 Kísérleti körülmények és az adatok kiértékelése

Kísérleteinkben egyszeresen töltött nitrogéniont és egyszeresen töltött nitrogén molekulaiont használtunk lövedékként, amelyeket az ATOMKI 5 MV-os Van de Graaff generátora [Kol79] állított elő. A gyorsító részletesebb leírása a 3.1.1 fejezetben található. A méréseket N^+ lövedék esetén 0.75 MeV és 1 MeV, míg N_2^+ lövedék esetén 1.5 MeV energián végeztük. Az atomi N^+ és molekuláris N_2^+ nitrogénion lövedékek energiáját úgy választottuk meg, hogy sebességük ugyanaz legyen az esetlegesen fellépő molekuláris effektusok kimutatása céljából. Céltárgyként argon, neon és nitrogén gázt alkalmaztunk. Mivel a visszaszórási hatáskeresztmetszet közelítőleg arányos a céltárgy atomszámának négyzetével (Z_T^2) [Sul02, Sul03], N_2 ($Z_N=7$ és így $Z_N^2=2 \cdot 7^2=98$) és Ne ($Z_{Ne}=10$, $Z_{Ne}^2=10^2=100$) céltárgyakra hasonló hatáskeresztmetszeteket kellene kapnunk a kétszeres (P-T) és a magasabb rendű (P-T-P, P-T-P-T) sorozatokra. Az 4.2.1 táblázatban foglaltam össze azokat az energiákat, ahol a többszörös szórást szenvedett elektronok jelentkezhetnek a spektrumban.

Lövedék	$E_{\text{lövedék}}$	$V_{\text{lövedék}}$ (a.u.)	n	v_{elektron} (a.u.)	E_{elektron} (eV)
N_2^+	53.6 keV/u (1.5 MeV)	1.46	1	1.46	29
			2	2.92	116
			3	4.38	261
			4	5.84	464
N^+	53.6 keV/u (0.75 MeV)	1.46	1	1.46	29
			2	2.92	116
			3	4.38	261
			4	5.84	464
	71.4 keV/u (1 MeV)	1.69	1	1.69	39
			2	3.38	156
			3	5.07	351
			4	6.76	624

4.2.1 táblázat A többszörös szórást szenvedett elektronok $v_{\text{elektron}} = nV_{\text{lövedék}}$ sebessége és energiája a mérések során használt lövedékek és lövedékenergiák esetén ($V_{\text{lövedék}}$ a lövedék sebességét jelöli).

Látható, hogy 53.6 keV/u lövedékenergia esetén a kétszeres, háromszoros és négyszeres szórás körülbelül a 30 eV és 470 eV közötti elektronenergia-tartományt jelöli ki, míg 71.4 keV/u lövedékenergiánál ez az energiatartomány közelítőleg 40-630 eV. Ezeket rendre az 5-1500 eV és az 5-1700 eV elektronenergia-tartományokban végzett mérésekkel fedték le. A folyamatok során emittált elektronokat az ESA-21 elektrosztatikus elektron spektrométerrel [Var79, Ric90, Var92, Var95] detektáltuk egyidejűleg a nyalábirányhoz képest 0^0 és 180^0 közötti szögtartományban (kivéve 60^0 -ban) 15^0 -os lépésként. Így az elektronok energia- és szögeloszlását egyidejűleg mértük, ami a mérési idő jelentős csökkenését és az adatok megbízhatóságának növekedését eredményezte.

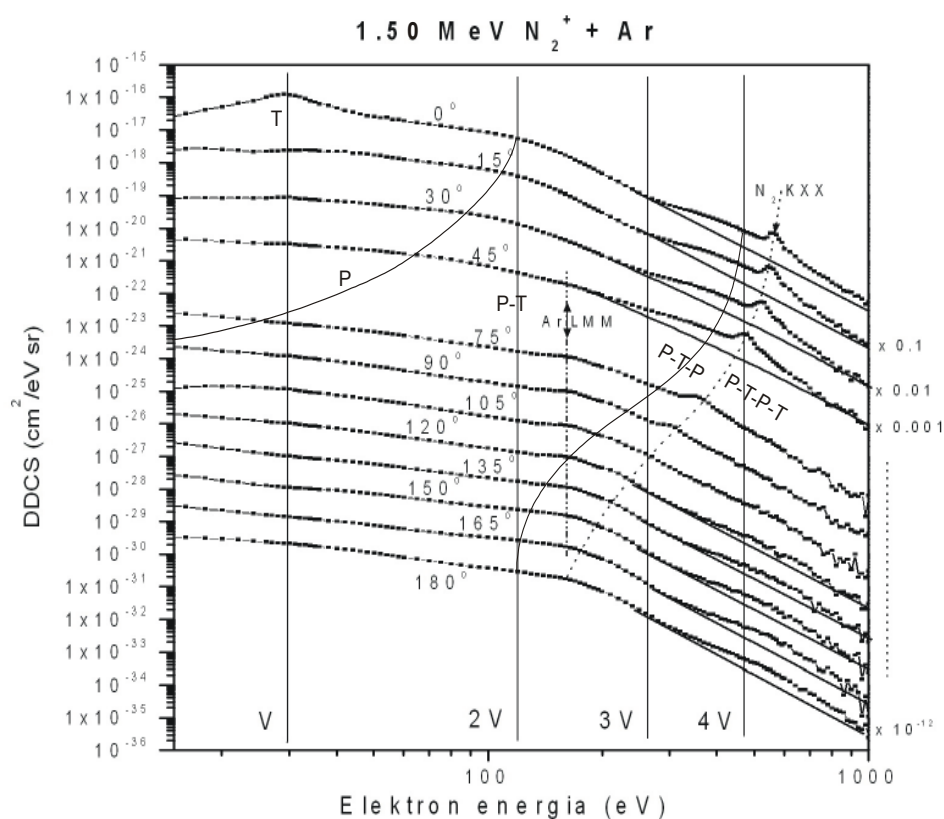
Az analízátort részletesen a 3.2.2 fejezetben mutattam be. A szögeloszlásokat fékezés nélkül mértük. A mérések alatt a kamrában a háttérnyomás (gázbeömlés nélkül) $2 \cdot 10^{-7}$ mbar, míg gázbeömléssel $5 \cdot 10^{-5}$ mbar volt mindhárom céltárgy esetén.

A mérésekben a kirepülő elektronok energiája és szöge szerinti kétszeresen differenciális abszolút hatáskeresztmetszeteket határoztuk meg. Az adatok abszolút normalizálásához a 1.5 MeV *proton+argon* ütközés esetén mért spektrumokat használtuk, amelyeket referencia hatáskeresztmetszetekkel hasonlítottuk össze [Rud79]. A meghatározott abszolút hatáskeresztmetszetek hibája 120 eV feletti elektronenergia esetén kevesebb, mint 40%, míg 120 eV alatt kevesebb, mint 60% volt. Ez részben a használt referencia adatok [Rud79] közötti hibáiból, részben a mi adataink statisztikus ill. reprodukálhatósági hibájából adódott.

4.2.2 Kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetek mérése ion-atom, ion-molekula és molekulaion-atom ütközésekben

A 4.2.1 ábra mutatja a 1.5 MeV $N_2^+ + Ar$ ütközés kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteit a kilökött elektron energiájának függvényében a 0^0 - 180^0 szögtartományban. A spektrum kisenergiás részén 29 eV energián (V) 0^0 -ban jelenik meg a lövedék ionizációjából (T) származó csúcs. Ezen az elektronenergián az elektron sebessége megegyezik a lövedék sebességével. A kettős ütközés (binary encounter, BE) folyamatának a P görbe mentén megjelenő (ezen a lövedékenergián nem túl feltűnő) váll felel meg. A BE csúcsot az ionizált céltárgyelektronok hozzák létre. Ez egy tipikus kéttest kölcsönhatás, amely a céltárgyelektron és a lövedék közeli ütközéseinek felel meg. Ez a csúcs 0^0 -ban a $2V$ sebességnek (V a lövedéksebesség) megfelelő energián (116 eV) látható és a

2.2.1 fejezet (2.2.1) kifejezésének megfelelően a kisebb energiák felé tolódik el növekvő megfigyelési szöggel a 0^0 - 90^0 közötti szögtartományban.

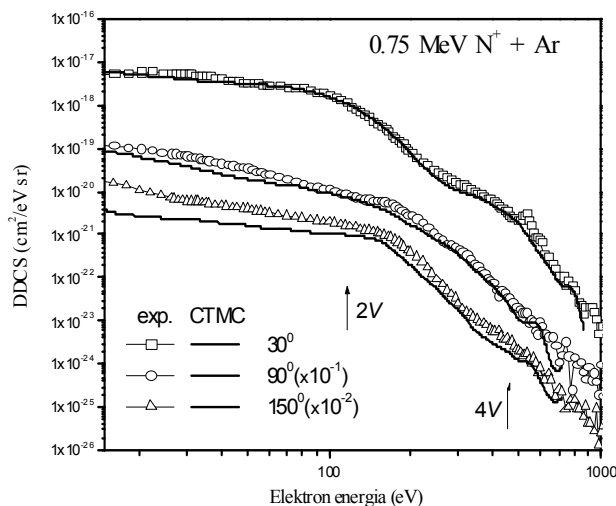


4.2.1 ábra $1.5 \text{ MeV } N_2^+ + Ar$ ütközés kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetei (DDCS) a kilökött elektron energiájának függvényében a 0^0 - 180^0 szögtartományban. A hatáskeresztmetszeteket 15^0 -tól kezdődően besoroztuk rendre 10^{-1} -gyel, ..., 10^{-12} -vel az ugyanazon ábrán való jobb ábrázolhatóság kedvéért. A szorzófaktorok az ábra jobb oldalán vannak feltüntetve.

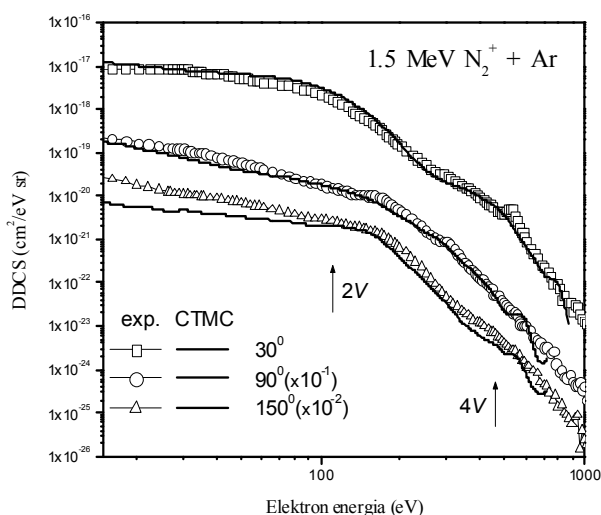
A céltárgyelektronok lövedékkel majd céltárggyal való ütközésének köszönhető P-T szekvencia ($n=m=1$ a 2.2.1 fejezet (2.2.1) kifejezésében) a függőleges P-T egyenes mentén jelenik meg a megfigyelési szögtől függetlenül 116 eV körüli energián. Ez érthető, hiszen az állónak tekinthető céltárggyal való ütközés nem változtat az ionizált elektron sebességének nagyságán (lásd 2.2.1

fejezetben). A következő gyorsítási fázisnak, a lövedékkel való újbóli ütközésnek, a P-T-P görbe felel meg ($n=2$, $m=1$ a 2.2.1 fejezet (2.2.1) kifejezésében). Ez a folyamat előreszögben $4V$ elektronsebességet (464 eV) eredményez és a 2.2.1 fejezet (2.2.1) kifejezésének megfelelően kisebb energiák felé tolódik el a megfigyelési szög növekedésével. Ez a háromszoros gyorsítási sorozat inkább előreszögekben eredményez nagyobb intenzitásokat. A négyszeres P-T-P-T szórási sorozat ($n=2$, $m=2$) minden megfigyelési szögnél a $4V$ sebességnek megfelelő 464 eV elektronenergia körül körvonalazódik. A spektrum jellegzetes szerkezete még a nitrogén K -Auger-csoportja, amely a mozgó lövedékből emittált elektronokat tartalmazza, 0° -os megfigyelési szögnél 600 eV elektronenergia körül jelentkezik és növekvő megfigyelési szöggel a kisebb elektronenergiák felé tolódik el. A céltárgy Ar LMM Auger-csoportja 150 eV körül figyelhető meg a spektrumban. Megjegyezzük, hogy itt a nehézion lövedékkel való ütközésnél többszörös ionizáció történik, és ezért ez a csoport a fotongerjesztéshez képest a kisebb energiák irányába tolódik el. Az is látható, hogy a P-T és P-T-P-T folyamatoknak megfelelő csúcsok, főleg hátraszögekben, kissé eltolódtak a nagyobb energiák felé. Ez egybevág azzal a klasszikus képpel, hogy a többlépéses Fermi-gyorsításban nagyobb valószínűséggel azok az elektronok vesznek részt, amelyek az ütközés előtt a lövedékkel ellentétes irányban mozognak. A mért spektrumokban nem figyelhetők meg a lövedékelektronok többszörös szóródására utaló határozott mintázatok.

A $0.75 \text{ MeV } N^+ + Ar$ és a $1.5 \text{ MeV } N_2^+ + Ar$ folyamatokra vonatkozó kísérleti [Ric05b, Sul07] és elméleti [Ric05b, Sul07, Tök05] kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket a kilökött elektron energiájának függvényében a nyalábirányhoz képesti előre (30°), merőleges (90°) és hátra (150°) irányokban a 4.2.2 és 4.2.3 ábrán láthatjuk. A 90° -os és a 150° -os adatokat rendre 10-el ill. 100-al osztottuk az ugyanazon ábrán való jobb ábrázolhatóság kedvéért.



4.2.2 ábra A $0.75 \text{ MeV } N^+ + Ar$ ütközés kísérleti [Ric05b, Sul07] és elméleti [Ric05b, Sul07, Tök05] kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetei a nyalábirányhoz képesti előre (30°), merőleges (90°) és hátra (150°) irányokban a kilökött elektron energiájának függvényében. Kísérlet: $-\square-$ 30° , $-\circ-$ 90° , $-\triangle-$ 150° . Elmélet: $—$ CTMC [Ric05b, Sul07, Tök05].



4.2.3 ábra A $1.5 \text{ MeV } N_2^+ + Ar$ ütközés kísérleti [Sul07] és elméleti (az N^+ -ra vonatkozó hatáskeresztmetszetek kétszerese) [Sul07, Tök05] kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetei a nyalábirányhoz képesti előre (30°), merőleges (90°) és hátra (150°) irányokban a kilökött elektron energiájának függvényében. Kísérlet: $-\square-$ 30° , $-\circ-$ 90° , $-\triangle-$ 150° . Elmélet: $—$ CTMC (az atomi hatáskeresztmetszet kétszerese) [Sul07, Tök05].

A kísérleti adatokat a klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) közelítés eredményével [Ric05b, Sul07, Tök05] hasonlítottuk össze mindkét ütközési rendszer esetén. A CTMC számolásban lehetőség van az egyedi ütközési események pályáinak fejlesztésére (lásd a 2.2.2 fejezetben és [Tök05]-ben). Ezáltal vizsgálhatóvá válik az egyszeres és többszörös szórások járuléka, ami lehetővé teszi a Fermi-féle gyorsítási mechanizmus egyszeres és többszörös szórásai sorozatainak azonosítását. Számolások csak a 30° , 90° és 150° szórási szögekre és a 0-1000 eV közötti elektronenergia-tartományban állnak rendelkezésünkre ill. ezekben csak a céltárgy ionizációja van figyelembe véve.

Mind a nitrogénion mind a molekulaion lövedék spektrumában (4.2.2 és 4.2.3 ábra) láthatjuk a kettős ütközésnek (BE) megfelelő vállat 30° -nál közelítőleg a $2V$ sebességnek megfelelő elektronenergián (~ 100 eV). A P-T kétszeres szórásból eredő csúcyszerű szerkezet elsősorban nagy szögeknél látható egy kicsit nagyobb elektronenergiáknál mint a $2V$ -nek megfelelő 116 eV. A P-T-P folyamat előreszögben (lásd a 30° -os görbéket az ábrákon) szintén a $4V$ elektronsebességnek megfelelő energián található. A P-T-P-T szórásai sorozat minden megfigyelési szögnél a $4V$ sebességnek megfelelő elektronenergia körül körvonalazódik (hátraszögekben inkább e felett). A nitrogén *K*-Auger-csoportja (előreszögben, az ábrán 30° -nál, 600 eV elektronenergiánál) és az Ar *LMM* Auger-csoport (150 eV körül) jól megfigyelhetők a spektrumokban. Nem figyelhetők meg viszont a lövedékelektronok többszörös szóródására utaló mintázatok. Elmondhatjuk tehát, hogy mindkét spektrumban megjelennek a céltárgyionizációs P, P-T, P-T-P és P-T-P-T szórásai sorozatok.

Mivel az atomi és molekuláris nitrogénion lövedékek sebességét azonosnak választottuk, a molekuláris N_2^+ lövedékre vonatkozó emissziós hatáskeresztmetszeteknek akkor kell közelítőleg azonosnak lenniük az atomi N^+ lövedék hatáskeresztmetszeteinek kétszeresével, ha a molekuláris effektusokat elhanyagolhatjuk. A 4.2.2 és 4.2.3 ábrákból jól látható, hogy az N_2^+ lövedék kísérleti emissziós hatáskeresztmetszetei alig kisebbek az N^+ lövedék kísérleti

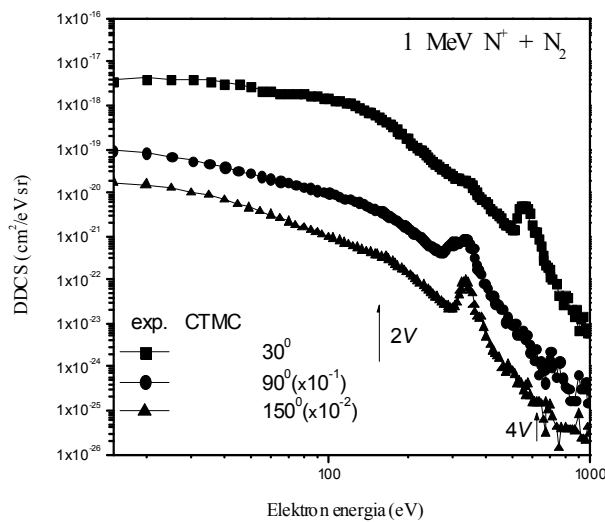
hatáskeresztmetszeteinek kétszeresénél. Ezek alapján molekuláris lövedéknél (4.2.3 ábra) a kísérleti hatáskeresztmetszeteket az N^+ lövedék elméleti hatáskeresztmetszeteinek kétszeresével hasonlítottuk össze.

A kísérleti adatok jól egyeznek a CTMC számolásból [Ric05b, Sul07, Tök05] kapott értékekkel mind atomi mind molekuláris lövedék esetén. Az elmélettel való egyezés majdnem tökéletes a 30^0 -os megfigyelési szögnél mindkét esetben. A számolás atomi és molekuláris ionra ennél a szögnél V (29 eV) és $3V$ (261 eV) környékén alulbecsüli a kísérleti értékeket ill. N_2^+ lövedék esetén $2V$ körül kissé nagyobb hatáskeresztmetszeteket mutat. A másik két megfigyelési szögnél mindkét ütközés esetén az elméleti értékek általában kisebbek a kísérletieknél, elsősorban alacsonyabb energiákon. Ez az eltérés minden szögnél V és $3V$ környékén a legnagyobb és egyszerűen annak tulajdonítható, hogy a CTMC számolás során csak a céltárgy ionizációját vették figyelembe. A lövedék ionizációjának figyelembe vétele várhatóan tovább növelné az egyezést a kísérleti és elméleti értékek között minden szögnél.

A CTMC-pályák egyedi elemzésével készült statisztika szerint mindkét ütközési rendszernél a 250 eV elektronenergia fölött emittált CTMC "elektronok" több mint 60%-át azonosíthatjuk a háromszoros (P-T-P) és négyzetes (P-T-P-T) sorozatban szabaddá vált elektronokkal. Ilyen elektronenergián a Fermi-folyamatban gyorsított elektronok hozzájárulását az elektronok emissziójához a teljes elektronemissziós hatáskeresztmetszet 4.5%-nak találtuk. Mondhatjuk tehát, hogy a Fermi-gyorsítás többszörös szórási sorozatai nagyban hozzájárulnak a nagy energiájú elektronok emissziójához az atomi ütközésekben a vizsgált lövedéksebességen.

A 4.2.4 ábra mutatja a nyalábirányhoz képesti előre (30^0), merőleges (90^0) és hátra (150^0) irányokban az 1 MeV $N^+ + N_2$ ütközésre vonatkozó [Ric05b] kísérleti kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket a kilökött elektron energiájának függvényében. A 90^0 -os és a 150^0 -os adatokat most is beszoroztuk

10^{-1} -gyel és 10^{-2} -vel. Erre az ütközési rendszerre sajnos csak egy gyenge statisztikájú CTMC számolás áll rendelkezésünkre, amellyel ugyan hibahatáron belüli a mért adatok egyezése, de határozott következtetés nem vonható le, ezért az elméleti eredményeket nem is tüntettem fel az ábrán. Látható, hogy sem a háromszoros (P-T-P), sem a négyszeres (P-T-P-T) szórási sorozatok nem különíthetők el. A P-T-P szekvenciának megfelelő csúcsnak előreszögben $4V$ elektronsebesség környékén (624 eV mindkét ütközésnél) kellene jelentkeznie. Ez a csúcs a 2.2.1 fejezet (2.2.1) kifejezésének megfelelően a megfigyelési szög növekedésével kisebb energiák irányába tolódik el, míg a P-T-P-T folyamatból származót szögtől függetlenül a $4V$ sebességnek megfelelő (624 eV) elektronenergián kellene látnunk. Az erős céltárgy és lövedék Auger-vonalak jelenléte elfedi ezeket a szerkezeteket.

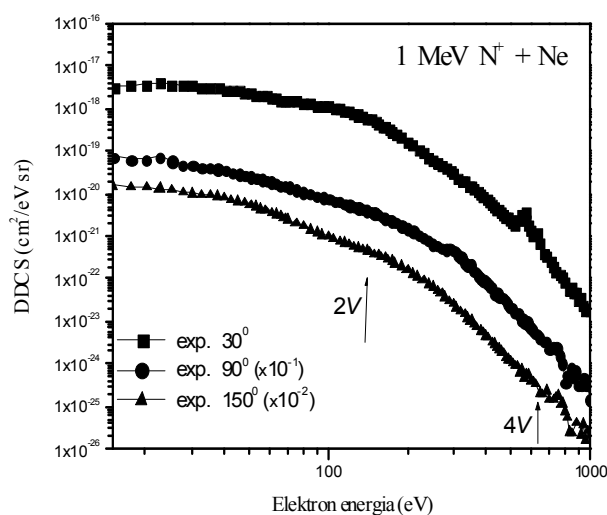


4.2.4 ábra Az $1 \text{ MeV } N^+ + N_2$ ütközés [Ric05b] kísérleti kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetei a nyalábirányhoz képesti előre (30°), merőleges (90°) és hátra (150°) irányokban a kilökött elektron energiájának függvényében. Kísérlet: \blacksquare – 30° , \bullet – 90° , \blacktriangle – 150° .

A nitrogénion lövedék K -Auger-csoportja 30° -os megfigyelési szögnél 600 eV elektronenergia körül található és növekvő megfigyelési szöggel a kisebb energiák felé tolódik el. A nitrogén céltárgy K -Auger-csoportja minden szögnél

300-400 eV körül figyelhető meg a spektrumban. Az előbb elmondottak következtében 90^0 -ban a 350 eV körül található csúcsot a céltárgy és a lövedék Auger-vonalai együttesen hozzák létre, míg 150^0 -nál az ezen az energián található csúcs csak a céltárgy Auger-csoportjától származik. A kettős ütközés (BE) csúcsa 30^0 -ban 140 eV körül jelenik meg, míg a P-T szórási szekvencia 90^0 -ban és 150^0 -ban 180 eV környékén, azaz hátraszögekben itt is eltolódik kissé a nagyobb energiák felé, ahogy ezt már az előzőekben leírt ütközéseknél is tapasztaltuk.

Az 4.2.5 ábra mutatja a nyalábirányhoz képesti előre (30^0), merőleges (90^0) és hátra (150^0) irányokban az 1 MeV $N^+ + Ne$ ütközésre vonatkozó [Ric05b] kísérleti kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszeteket a kilökött elektron energiájának függvényében. A 90^0 -os és a 150^0 -os adatokat rendre ebben az esetben is beszoroztuk 10^{-1} -gyel és 10^{-2} -vel. Erre a folyamatra vonatkozóan sajnos még nincs elméleti számolás.



4.2.5 ábra Az 1 MeV $N^+ + Ne$ ütközés [Ric05b] kísérleti kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetei a nyalábirányhoz képesti előre (30^0), merőleges (90^0) és hátra (150^0) irányokban a kilökött elektron energiájának függvényében. Kísélet: \blacksquare – 30^0 , \bullet – 90^0 , \blacktriangle – 150^0 .

A visszaszórási hatáskeresztmetszet közelítőleg arányos a céltárgy atomszámának négyzetével (Z_T^2) [Sul02, Sul03], ezért N_2 ($Z_N=7$ és így $Z_N^2=2\cdot 7^2=98$) és Ne ($Z_{Ne}=10$, $Z_{Ne}^2=10^2=100$) céltárgyak esetén hasonló hatáskeresztmetszeteket várunk a kétszeres (P-T) és a magasabb rendű (P-T-P, P-T-P-T) sorozatokra. Látható, hogy a teljes neon spektrum hasonló az 1 MeV $N^+ + N_2$ ütközés spektrumához. A P-T folyamat nagyságrendileg hasonló a nitrogén céltárgynál tapasztaltakéhoz és elektronenergiát tekintve természetesen ugyanott jelenik meg. A P-T-P és P-T-P-T magasabb rendű szórási sorozatoknak megfelelő csúcsoakat nem tudjuk elkülöníteni a spektrumban. A korábbi, szén-neon ütközésekre vonatkozó számolások és kísérletek alapján [Sul01] arra következtethetünk, hogy ez a szerkezetnélküliség a majdnem azonos erősségű céltárgy- és lövedékionizáció jelenlétéből ered. A nitrogénion lövedék K-Auger-csoportja 30^0 -os megfigyelési szögénél 600 eV elektronenergia körül található és növekvő megfigyelési szöggel a kisebb energiák felé tolódik el.

Összefoglalásul mondhatjuk, hogy a 0.75 MeV $N^+ + Ar$ és a 1.5 MeV $N_2^+ + Ar$ ütközések esetén az azonos sebességű atomi és molekuláris nitrogénion lövedékekkel kiváltott elektronspektrumokban jól azonosíthatók a céltárgyionizáció során kialakuló háromszoros (P-T-P) és négyszeres (P-T-P-T) szórási sorozatok. Az N_2^+ lövedékekkel keltett kísérleti elektronemissziós hatáskeresztmetszetek alig kisebbek az N^+ lövedékionnal mért hatáskeresztmetszetek kétszeresénél, ami azt mutatja, hogy nem lép fel számottevő molekuláris effektus a céltárgyionizációs folyamatban a vizsgált bombázóenergián. Ezek alapján molekuláris lövedéknél a kísérleti hatáskeresztmetszeteket az N^+ lövedék elméleti hatáskeresztmetszeteinek kétszeresével hasonlítottuk össze. A mért adatok jól egyeznek a CTMC számolásból kapott értékekkel mindkét ütközési rendszer esetén. Mindkét esetben az elektronspektrumokban a 250 eV-nél nagyobb elektronenergián emittált CTMC elektronok több mint 60%-át azonosíthatjuk a háromszoros (P-T-P) és négyszeres (P-T-P-T) sorozatokban szabaddá vált elektronokkal.

Általánosan megállapíthatjuk, hogy a Fermi-gyorsítás többszörös szórási sorozatai nagyban hozzájárulnak a nagy energiájú elektronok emissziójához azokban az atomi ütközésekben, ahol a lövedéksebesség 1-2 a.u..

Az $1 \text{ MeV } N^+ + N_2$ és az $1 \text{ MeV } N^+ + Ne$ ütközési rendszerek elektronspektrumai egyszerűbbek, mint az előző két folyamaté, ami a nagyobb lövedéksebességnek és kisebb céltárgy atomszámnak tulajdonítható. Ezekben a spektrumokban a P-T-P és P-T-P-T magasabb rendű szórási sorozatoknak megfelelő csúcsok nem különíthetők el. A korábbi, szén-neon ütközésekre vonatkozó számolások és kísérletek alapján arra következtethetünk, hogy ez a majdnem azonos erősségű céltárgy- és lövedékionizáció jelenlétéből ered. A teljes neon spektrum hasonló a nitrogénmolekula spektrumához, ahogy az várható is volt a Z_T^2 skálázási törvénynek megfelelően.

Ez a munka egy olyan szisztematikus vizsgálat első lépése, ahol az ütközési rendszerek széles tartományában a Fermi-gyorsítás kísérletileg és elméletileg együttesen tanulmányozható.

E fejezet témájában végzett vizsgálatoknál a mérések 70%-át én végeztem. Saját munkámnak tekintem még a mért spektrumok teljes körű feldolgozását (100%). Meghatározó szerepem volt a kísérleti adatok értelmezésében is (50%).

5. Összefoglalás

Az atomi fotoionizációs folyamatok ill. az ion-atom, ion-molekula és ion-szilárdtest ütközések során kilépő elektronok kétszeresen differenciális spektruma részletes információt ad az atomok, molekulák és szilárd testek szerkezetéről, a folyamat dinamikájáról és a többelektronos korrelációs effektusokról. A kísérleti és elméleti adatok összevetése az atomi folyamatok jobb megismerését és az elméleti modellek egyre pontosabb ellenőrzését teszi lehetővé.

A dolgozatomban kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszet mérésekben elért eredményeimet ismertettem, különös tekintettel a magasabb rendű kölcsönhatásokból és a több lépcsőben végbemenő folyamatokból származó effektusokra.

Fotoionizációban emittált fotoelektronok kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetében az elektromos dipól (E1) és a magasabb rendű vagy nondipól (E2, M1) járulékok fotonenergia-függését vizsgáltam. A fotoelektronok szögeloszlását jellemző dipól (β) és nondipól (γ és δ) anizotrópia paraméterek meghatározása céljából a Xe $5s$, Xe $5p_{1/2,3/2}$ és Ar $3p_{1/2,3/2}$ alhéjakról származó fotoelektronok szögeloszlását mértük lineárisan polarizált szinkrotron sugárzással rendre a 90 eV és 225 eV, 100 eV és 200 eV ill. 90 eV és 330 eV közötti fotonenergia-tartományokban.

A fotoelektronok szögeloszlását az ESA-22 elektrosztatikus elektron spektrométerrel mértük, amelynek mérési geometriája jelentősen eltér a hagyományos mérőrendszerektől, ezért a korábbiaktól eltérő intenzitáskalibrálási módszert kellett kidolgozni. A vizsgálatokat a foton polarizációs és impulzus vektora által kifeszített síkban végeztük, ahol az összes anizotrópia paraméter megfigyelhető. Korábban ebben a síkban nem történtek mérések, így a fotoelektronok szögeloszlása ismeretlennek tekinthető kísérleti szempontból. Az

elektron spektrométer határfokának meghatározására kidolgoztam egy módszert, amely egy izotróp Auger-vonalra való normáláson alapul. Ezen eljárás alkalmazásával egyetlen szögeloszlásból meghatározhatók a fotoelektronok dipól és nondipól paraméterei. Ez pedig jelentős mérési idő megtakarítást jelent, ami fontos pl. szinkrotron nyálábon végzendő méréseknél.

A Xe $5s$ fotoelektronok szögeloszlását jellemző dipól (β) és nondipól (γ és δ) anizotrópia paraméterek fotonenergia-függésében tisztán látható rezonanciaszerű szerkezetet találtunk a relativisztikus véletlen fázisú közelítésnek (RRPA) megfelelően. Ez a többelektronos korrelációs effektusok lényeges szerepét mutatja a fotoionizáció folyamatában, még az ionizációs küszöbtől relatíve távol is.

A Xe $5p$ héj spin-pálya komponenseire elsőként mértük meg mind a három anizotrópia paramétert az általunk vizsgált fotonenergia-tartományban. A kísérleti anizotrópia paraméterek jó egyezésben vannak az $5s$, $5p$ és $4d$ csatornák közötti kölcsönhatást tartalmazó RRPA számolásokkal. Eredményeink tisztán mutatják, hogy nemcsak a többelektronos korrelációs effektusok játszanak lényeges szerepet a Xe $5p$ fotoionizációjának pontos leírásában, hanem a relativisztikus effektusok is.

Direkt és indirekt csatornák közötti erős interferenciát figyeltünk meg az Ar $3p$ héj fotoionizációjában. Az Ar $3p_{1/2}$ és $3p_{3/2}$ alhéjakhoz tartozó anizotrópia paraméterek közötti különbségek jól mutatják a spin-pálya kölcsönhatás fontosságát. A kísérleti dipól paraméterek jól egyeznek mind az R-mátrix eljárással mind a multikonfigurációs Dirack-Fock (MCDF) számolással kapott elméleti értékekkel mindkét spin-pálya komponensre vonatkozóan. Ezek az első olyan kísérleti dipól és nondipól paraméter adatok, amelyek igazolják a rezonáns gerjesztést követő participátor Auger-átmenetek és a direkt fotoionizáció közötti interferencia létezését.

Az előbb említett eredmények alapján kijelenthetjük, hogy a többelektronos korrelációs effektusok fontos szerepet játszanak a fotoionizációban minden olyan

esetben, amikor egy új ionizációs vagy gerjesztési csatorna nyílik meg. Ezek az első olyan kísérleti munkák, amelyekben jelentős nondipól kölcsönhatást sikerült megfigyelni a Xe $5s$, Xe $5p$ és Ar $3p$ fotoelektronok szögeloszlásában.

Vizsgáltam ion-atom, ion-molekula és molekulaion-atom ütközésekben szabaddá vált elektronok többszörös szóródását a céltárgy és a lövedék Coulomb-terén (Fermi-féle gyorsítási folyamat) a céltárgy atomszámának függvényében. E célból a $0.75 \text{ MeV } N^+ + Ar$, $1 \text{ MeV } N^+ + N_2$, $1 \text{ MeV } N^+ + Ne$ és $1.5 \text{ MeV } N_2^+ + Ar$ ütközések során emittált elektronok kétszeresen differenciális abszolút hatáskeresztmetszeteit határoztam meg.

A $0.75 \text{ MeV } N^+ + Ar$ és $1.5 \text{ MeV } N_2^+ + Ar$ ütközések esetén az azonos sebességű atomi és molekuláris nitrogénion lövedékekkel kiváltott elektronspektrumokban jól azonosíthatók a céltárgyionizáció során kialakuló háromszoros (P-T-P) és négyszeres (P-T-P-T) szórási sorozatok. Az N_2^+ lövedékekkel keltett kísérleti elektronemissziós hatáskeresztmetszetek és az N^+ lövedékionnal mért hatáskeresztmetszetek kétszerese között nincs szignifikáns eltérés, ami azt mutatja, hogy a céltárgyionizációs folyamatban nem lép fel számottevő molekuláris effektus a vizsgált bombázóenergián. Ezek alapján molekuláris lövedéknél a kísérleti hatáskeresztmetszeteket a klasszikus pályájú Monte-Carlo (CTMC) számolás N^+ hatáskeresztmetszeteinek kétszeresével hasonlítottam össze. A mért adatok mindkét ütközési rendszer esetén nagyon jól egyeznek a CTMC számolásból kapott értékekkel. A CTMC pályák analízise azt mutatta, hogy a 250 eV elektronenergia fölött emittált CTMC "elektronok" több mint 60% -a azonosítható a háromszoros (P-T-P) és négyszeres (P-T-P-T) sorozatban szabaddá vált elektronokkal. Általánosan megállapíthatjuk, hogy a Fermi-gyorsítás többszörös szórási sorozatai nagyban hozzájárulnak a nagy energiájú elektronok emissziójához azokban az atomi ütközésekben, ahol a lövedéksebesség $1-2 \text{ a.u.}$.

Az $1 \text{ MeV } N^+ + Ne$ és az $1 \text{ MeV } N^+ + N_2$ ütközési rendszerek elektronspektrumai nagyon hasonlóak egymáshoz, ahogy az várható is volt a Z_T^2

skálázási törvénynek megfelelően. Ezekben a spektrumokban a P-T-P és P-T-P-T magasabb rendű szórási sorozatoknak megfelelő csúcsok nem különíthetők el. A korábbi, szén-neon ütközésekre vonatkozó számolások és kísérletek alapján arra következtethetünk, hogy ez a majdnem azonos erősségű céltárgy- és lövedékionizáció jelenlétéből ered. Mindkét ütközési rendszer elektronspektruma egyszerűbb, mint az előző két folyamaté, ami a nagyobb lövedéksebességnek és kisebb céltárgy atomszámnak tulajdonítható.

Ez a munka egy olyan szisztematikus vizsgálat első lépése, ahol az ütközési rendszerek széles tartományában a Fermi-gyorsítást kísérletileg és elméletileg együttesen tanulmányozzuk

A fenti mérésorozatok mindegyike esetén aktívan részt vettem a mérésekben, a kísérleti eredmények értelmezésében és az adatok teljes kiértékelését én végeztem.

6. Summary

Double differential spectra of electrons ejected in photoionization, ion-atom and ion-solid collisions provide information on the electronic structure of atoms, molecules and solids, the dynamics of the processes and the multi-electron correlation effects. The comparison between the experimental and theoretical data helps to understand better the basic atomic processes and to test the theoretical models.

In this thesis the results of my double differential cross section measurements were presented, in special consideration of higher-order effects and multi-step processes. In the photoionization the photon energy dependence of the dipole (E1) and nondipole (E2 and M1) contributions of the angular distribution of photoelectrons was investigated. The angular distributions of photoelectrons of the Xe $5s$, Xe $5p_{1/2,3/2}$ and Ar $3p_{1/2,3/2}$ subshells were measured with linearly polarized synchrotron radiation in the 90-225 eV, 100-200 eV and 90-330 eV photon energy range, respectively, in order to determine the dipole (β) and nondipole (γ and δ) angular anisotropy parameters.

The angular distribution of photoelectrons was measured with the ESA-22 electrostatic electron spectrometer. These studies were performed in the plane of the polarization and momentum vectors of the photons where all anisotropy parameters could be observed. To the best of my knowledge no experimental data have been published for this plane. Since the measuring geometry of the ESA-22 analyzer is very different from the traditional ones, I introduced a new method for the efficiency calibration of the electron spectrometer based on the normalization relative to an isotropic Auger line. The dipole and nondipole parameters can be determined from an angle-resolved photoelectron spectrum using this calibration method, which can save a lot of measuring time.

In the case of the Xe $5s$ shell clear structures were found in the photon energy dependence of the dipole and nondipole anisotropy parameters in agreement with the theoretical results based on the relativistic random phase approximation (RRPA). This indicates that the multielectron correlation effects are very important in the photoionization even far from the ionization threshold.

For the Xe $5p$ shell this was the first measurement where the dipole and nondipole anisotropy parameters of the spin-orbit components were determined in the studied photon energy range. The experimental angular distribution parameters agree with the RRPA calculation including the interaction between the $5p$, $5s$ and $4d$ channels. The experimental results clearly show that both the interchannel interaction and the relativistic effects play an important role in the accurate description of the angular distribution of the Xe $5p$ photoionization.

In the case of the Ar $3p$ shell photoionization strong interference was observed between the direct and indirect channels. The differences between the anisotropy parameters of the Ar $3p_{1/2}$ and $3p_{3/2}$ subshells indicate the importance of the spin-orbit interaction in photoionization. The present experimental dipole angular distribution parameters agree with theoretical values based on both the R-matrix method and the multi-configuration Dirac-Fock approximation (MCDF) for the spin-orbit components. These are the first experimental data for the dipole and nondipole parameters to verify the interference between direct photoionization and the resonant excitation participator Auger-transitions.

The above mentioned results indicate that the many-electron correlation effects are important in the photoionization when a new ionization or excitation channel opens. These were the first measurements where significant nondipole contributions could be observed in the angular distributions of photoelectrons of the Xe $5s$, Xe $5p_{1/2,3/2}$ and Ar $3p_{1/2,3/2}$ subshells.

The target atomic number dependence of the multiple scattering of electrons ejected in ion-atom, ion-molecule and molecular ion-atom collisions (Fermi-shuttle type acceleration mechanism) was investigated. In this mechanism

the electrons undergo multiple scattering on the Coulomb fields of the target and projectile. The absolute double differential cross sections for electron emission were determined for the following collision systems: 0.75 MeV $N^+ + Ar$, 1 MeV $N^+ + N_2$, 1 MeV $N^+ + Ne$ and 1.5 MeV $N_2^+ + Ar$.

In the case of the 0.75 MeV $N^+ + Ar$ and 1.5 MeV $N_2^+ + Ar$ collision systems the multiple scattering target ionization structures (P-T-P and P-T-P-T) clearly appear in the spectra. There is no significant difference between the experimental emission cross sections of the equal-velocity atomic and molecular nitrogen ion projectiles when the cross section of the atomic projectile is multiplied by two. This indicates that the molecular effects do not play an important role in the target ionization process in the studied energy range. On the basis of this experimental finding the measured double differential cross sections of the molecular nitrogen ion were compared with the theoretical values (obtained from the classical trajectory Monte Carlo calculation, CTMC) calculated for nitrogen ion and multiplied by two. For both the atomic and the molecular projectile ions, the experimental double differential cross sections are in good agreement with the theoretical values. More than 60% of the “CTMC electrons” “emitted” above 250 eV can be identified as Fermi-shuttle accelerated electrons, liberated in P-T-P or P-T-P-T processes. The multiple scattering due to the Fermi-shuttle type acceleration mechanism strongly contributes to the high-energy electron emission in the studied collisions in the 1-2 a.u. projectile velocity range.

For the 1 MeV $N^+ + N_2$ and 1 MeV $N^+ + Ne$ collision systems the two electron spectra are very similar as it was expected in accordance with the scaling rule Z_T^2 . In these spectra the peaks attributable to the P-T-P or P-T-P-T processes cannot be separated. On the basis of the earlier calculations and experiments for carbon-neon collisions the reason is the almost equal strength of target and projectile ionization. The significantly structureless electron spectra, compared to the previously mentioned two spectra, are owed to the higher projectile velocity and the lower target atomic number.

The present work is a starting point of a systematic investigation where combined experimental and theoretical studies are carried out for wide range of collision systems.

I took part in the measurements and the interpretation of the experimental results and I made the complete data evaluation.

Irodalomjegyzék

- [Abr66] R. Abrines and I. C. Percival, Proc. Phys. Soc (London) **88**, 861 (1966).
- [Amu01] M. Ya. Amusia, A. S. Baltenkov, L. V. Chernysheva, Z. Felfli and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A **63**, 052506 (2001).
- [Amu77] M. Ya. Amusia and V. K. Ivanov, Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser. (Engl. Transl.) **41**, 39 (1977).
- [Amu99] M. Ya. Amusia, A. S. Baltenkov, Z. Felfli and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A **59**, R2544 (1999).
- [Aug25] M. P. Auger, Compt. Rend. **180**, 65 (1925).
- [Bai94] S. Baier, A. N. Grum-Grzhimailo and N. M. Kabachnik, J. Phys. B **27**, 3363 (1994).
- [Bar92] R. A. Baragiola, E. V. Alonso, A. Oliva, A. Bonnano and F. Xu, Phys. Rev. A **45**, 5286, (1992).
- [Bäs01] M. Bäessler, A. Ausmees, M. Jurvansuu, R. Feifel, J.-O. Forsell, P. de Tarso Fonseca, A. Kivimäki, S. Sundin, S. L. Sorensen, R. Nyholm, O. Björneholm, S. Aksela and S. Svensson, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **469**, 382 (2001).
- [Bäs99] M. Bäessler, J.-O. Forsell, O. Björneholm, R. Feifel, M. Jurvansuu, S. Aksela, S. Sundin, S. L. Sorensen, R. Nyholm, A. Ausmees and S. Svensson, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **101-103**, 953 (1999).
- [Bec88] U. Becker, D. Szostak, H. G. Kerkhoff, M. Kupsch, B. Langer, R. Wehlitz, A. Yagishita and T. Hayaishi, Phys. Rev. A **39**, 3902 (1988).
- [Bec90] A. Bechler and R. H. Pratt, Phys. Rev. A **42**, 6400 (1990).
- [Bec97] U. Bechthold, S. Hagmann, J. Ullrich, B. Bathelt, A. Bohris, R. Moshhammer, U. Ramm, C. Bhalla, G. Kraft and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett. **79**, 2034 (1997).
- [Bec98] U. Bechthold, S. Hagmann, J. Ullrich, B. Bathelt, G. Kraft and H. Schmidt-Böcking, Nucl. Instr. and Meth. B **143**, 441 (1998).

-
- [Ber94] D. Berényi, *Fizikai Szemle* **7**, 285 (1994).
- [Bud94a] Á. Budó, *Kísérleti fizika II.*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (1994)
- [Bud94b] Á. Budó és T. Mátrai, *Kísérleti fizika III.*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (1994).
- [Cam96] R. Camilloni, M. Žitnik, C. Comicioli, K. C. Prince, M. Zacchigna, C. Crotti, C. Ottaviani, C. Quaresima, P. Perfetti and G. Stefani, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2646 (1996).
- [Car75] T. A. Carlson, *Photoelectron and Auger Spectroscopy*, Plenum Press, New York and London (1975).
- [Coo76] J. W. Cooper, *Photoionization and Other Probes of Many-Electron Interactions*, edited by F. J. Wuilleumier, Plenum Press, New York and London (1976).
- [Coo90] J. W. Cooper, *Phys. Rev. A* **42**, 6942 (1990).
- [Coo93] J. W. Cooper, *Phys. Rev. A* **47**, 1841 (1993).
- [Cos35] D. Coster and R. L. Kronig, *Physica* **2**, 13 (1935).
- [Cow81] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, Berkeley (1981).
- [Cra96] B. Crasemann, in *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook*, Edited by G. W. F. Drake, AIP Press, Woodbury (1996).
- [Der99] A. Derevianko, W. R. Johnson and K. T. Cheng, *At. Data Nucl. Data Tables* **73**, 153 (1999).
- [Dol99] V. K. Dolmatov and S. T. Manson, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 939 (1999).
- [Dre76] F. Drepper and J. S. Briggs, *J. Phys. B* **9**, 2063 (1976).
- [Ein05] A. Einstein, *Ann. Phys.* **17**, 132 (1905).
- [Eis85] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*, John Wiley & Sons, New York (1985).
- [Eld47] F. R. Elder, A. M. Gurewitsch, R. V. Langmuir and H. C. Pollock, *Phys. Rev.* **71**, 829 (1947).

-
- [Fah84] A. Fahlman, M. O. Krause, T. A. Carlson and A. Svensson, Phys. Rev. A **30**, 812 (1984).
- [Fer49] E. Fermi, Phys. Rev. **75**, 1169 (1949).
- [Fis77] C. F. Fischer, *The Hartree-Fock Method for Atoms*, John Wiley & Sons, New York (1977).
- [Foc78] V. A. Fock, *Fundamentals of Quantum Mechanics (english translation)*, Mir Publishers, Moscow (1978).
- [Fri01] S. Fritzsche, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **114-116**, 1155 (2001).
- [Gom71] P. Gombás és D. Kisdi, *Bevezetés az elméleti fizikába II.*, Akadémiai Kiadó, Budapest (1971).
- [Gor05] T. W. Gorczyca Private Communication (2005).
- [Gor99] T. W. Gorczyca and F. Robicieux, Phys. Rev. A **60**, 1216 (1999).
- [Gree73] A. E. S. Green, Adv. Quantum Chem. **7**, 221 (1973).
- [Guo99] J.-H. Guo, S. M. Butorin, C. Sâthe, J. Nordgen, M. Bäessler, R. Feifel, S. Werin, M. Georgsson, A. Åndersson, M. Jurvansuu, R. Nyholm and M. Eriksson, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **431**, 285 (1999).
- [Hei04] S. Heinäsmäki, H. Aksela, J. Nikkinen, E. Kukk, A. Kivimäki, S. Aksela and S. Fritzsche, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **137-140**, 281 (2004).
- [Hem01] O. Hemmers, S. T. Manson, M. M. Sant'Anna, P. Focke, H. Wang, I. A. Sellin and D. W. Lindle, Phys. Rev. A **64**, 022507 (2001).
- [Hem97] O. Hemmers, G. Fisher, P. Glans, D. L. Hansen, H. Wang, S. B. Whitfield, R. Wehlitz, J. C. Levin, I. A. Sellin, R. C. C. Perera, E. W. B. Dias, H. S. Chakraborty, P. C. Deshmukh, S. T. Manson and D. W. Lindle, J. Phys. B **30**, L727 (1997).
- [Hev95] I. Hevessy, *Elektromosságtan I.*, JATE Press, Szeged (1995).
- [Jak95] M. M. Jakas, Phys. Rev. A **52**, 866 (1995).
- [Jak96] M. M. Jakas, Nucl. Instr. and Meth. B **115**, 255 (1996).

- [Joh01] W. R. Johnson and K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **63**, 022504 (2001).
- [Joh02] W. R. Johnson and K. T. Cheng, Private Communication (2002).
- [Joh79a] W. R. Johnson and K. T. Cheng, *Phys. Rev. A* **20**, 978 (1979).
- [Joh79b] W. R. Johnson and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **20**, 964 (1979).
- [Joh99] W. R. Johnson, A. Derevianko, K. T. Cheng, V. K. Dolmatov and S. T. Manson, *Phys. Rev. A* **59**, 3609 (1999).
- [Jur01] M. Jurvansuu, *Ph.D. thesis*, University of Oulu, Oulu, Finland (2001).
- [Kád81] I. Kádár, B. Sulik, I. Csernyi, T. Lakatos and J. Végh, *ATOMKI Közlemények* **23**, 42 (1981).
- [Kád83] I. Kádár, *Kandidátusi értekezés*, MTA ATOMKI, Debrecen (1983).
- [Kap75] E. Kapuy és F. Török, *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai Kiadó, Budapest (1975).
- [Kim81] Y. S. Kim, A. Ron, R. H. Pratt, B. R. Tambe and S. T. Manson, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1326 (1981).
- [Kin77] G. C. King, M. Tronc, F. H. Read and R. C. Bradford, *J. Phys. B* **10**, 2479 (1977).
- [Koc83] E. E. Koch, D. E. Eastman and Y. Farge, *Handbook on Synchrotron Radiation*, Edited by E. E. Koch, North Holland, Amsterdam (1983).
- [Kol79] E. Koltay and A. Szalay, *The 5 MV Van de Graaff generator of ATOMKI*, Technical Report, MTA ATOMKI, Debrecen (1979).
- [Kra81] M. O. Krause, T. A. Carlson and P. R. Woodruff, *Phys. Rev. A* **24**, 1374 (1981).
- [Kut89] M. Kutzner, V. Radojević and H. P. Kelly, *Phys. Rev. A* **40**, 5052 (1989).
- [Lan01] G. Lanzano, E. De. Filippo, D. Mahboub, H. Rothard S. Aiello, A. Anzalone, S. Cavallaro, E. Elanique, E. Geraci, M. Geraci, F. Giustolisi, A. Pagano and G. Politi, *Phys. Rev. A* **63**, 032702 (2001).

-
- [Lan03] G. Lanzano, E. De. Filippo, A. Anzalone, N. Arena, M. Geraci, F. Giustolisi, A. Pagano, H. Rothard and C. Volant, *Nucl. Instr. and Meth. B* **205**, 841 (2003).
- [Lan78] L. D. Landau and E. M. Lifšic, *Elméleti fizika III. Kvantummechanika*, Tankönyvkiadó, Budapest (1978).
- [Lan99] G. Lanzano, E. De. Filippo, D. Mahboub, H. Rothard S. Aiello, A. Anzalone, S. Cavallaro, E. Elanique, E. Geraci, M. Geraci, F. Giustolisi, A. Pagano and G. Politi, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4518 (1999).
- [Lee90] D. H. Lee, P. Richard, T. J. M. Zouros, J. M. Sanders, J. L. Shinpaugh and H. Hidmi, *Phys. Rev. A* **41**, 4816 (1990).
- [Lin88] D. W. Lindle, T. A. Ferrett, P. A. Heimann and D. A. Shirley, *Phys. Rev. A* **37**, 3808 (1988).
- [Mar88] G. Margaritondo, *Introduction to Synchrotron Radiation*, Oxford University Press, New York (1988).
- [Mar96] W. C. Martin and W. L. Wiese, in *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook*, Edited by G. W. F. Drake, AIP Press, Woodbury (1996).
- [Meh78] W. Mehlhorn, *Electron Spectrometry of Auger and Autoionizing States: Experiment and Theory*, University of Freiburg, Germany (1978).
- [Meh85] W. Mehlhorn, in *Atomic Inner-Shell Physics*, Edited by B. Crasemann, Plenum Press, New York and London (1985).
- [Mol93a] J. Molnár, J. Végh, Á. Kövér, S. Ricz and B. Sulik, *ATOMKI Annual Report*, 152 (1993).
- [Mol93b] J. Molnár and J. Végh, *ATOMKI Annual Report*, 150 (1993).
- [Mun87] I. H. Munro and G. V. Marr, in *Handbook of Synchrotron Radiation*, Edited by G. V. Marr, North-Holland, Amsterdam (1987).
- [Nag78] K. Nagy, *Kvantummechanika*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest (1978).
- [Nay01] O. Nayadin, T. W. Gorczyca, A. A. Wills, B. Langer, J. D. Bozek and N. Berrah, *Phys. Rev. A* **64**, 022505 (2001).

-
- [Ols77] R. E. Olson and A. Salop, Phys. Rev. A **16**, 531 (1977).
- [Ovc99] S. Yu. Ovchinnikov and J. H. Macek, Nucl. Instr. and Meth. B **154**, 41 (1999).
- [Par96] F. A. Parpia, C. Froese Fisher and I. P. Grant, Comput. Phys. Commun. **94**, 249 (1996).
- [Rei98] C. O. Reinhold, D. R. Schulz, U. Bechthold, G. Kraft, S. Hagmann and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. A **58**, 2611 (1998).
- [Ric02] S. Ricz, Á. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Molnár and S. Aksela, Phys. Rev. A **65**, 042707 (2002).
- [Ric03] S. Ricz, R. Sankari, Á. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Nikkinen, T. Ricsóka, H. Aksela and S. Aksela, Phys. Rev. A **67**, 012712 (2003).
- [Ric05a] S. Ricz, J. Nikkinen, R. Sankari, T. Ricsóka, Á. Kövér, D. Varga, S. Fritzsche, H. Aksela and S. Aksela, Phys. Rev. A **72**, 014701 (2005).
- [Ric05b] T. Ricsóka, Gy. Víkor, Sz. Nagy, K. Tökési, Z. Berényi, B. Paripás, N. Stolterfoht and B. Sulik, Nucl. Instr. and Meth. B **235**, 397 (2005).
- [Ric90] S. Ricz, *Kandidátusi értekezés*, MTA ATOMKI, Debrecen (1990).
- [Rot98a] H. Rothard, Nucl. Instr. and Meth. B **146**, 1 (1998).
- [Rot98b] H. Rothard, D. H. Jakubassa-Amundsen and A. Billebaud, J. Phys. B **31**, 1563 (1998).
- [Rud79] M. E. Rudd, L. H. Toburen and N. Stolterfoht, At. Data Nucl. Data Tables **23**, 405 (1979).
- [Sai96] O.-P. Sairanen, A. Kivimäki, E. Nömmiste, H. Aksela and S. Aksela, Phys. Rev. A **54**, 2834 (1996).
- [San04] R. Sankari, S. Ricz, Á. Kövér, M. Jurvansuu, D. Varga, J. Nikkinen, T. Ricsóka, H. Aksela and S. Aksela, Phys. Rev. A **69**, 012707 (2004).
- [Sch93] D. Schneider, G. Schiwietz and D. DeWitt, Phys. Rev. A **47**, 3945 (1993).

-
- [Sch97] V. Schmidt, *Electron Spectrometry of Atoms using Synchrotron Radiation*, Cambridge University Press, Cambridge (1997).
- [Sev79] K. D. Sevier, *At. Data Nucl. Data Tables* **24**, 323 (1979).
- [Sim73] K. Simonyi, *Elektronfizika*, Tankönyvkiadó, Budapest (1973).
- [Sou83] S. H. Southworth, U. Becker, C. M. Truesdale, P. H. Kobrin, D. W. Lindle, S. Owaki and D. A. Shirley, *Phys. Rev. A* **28**, 261 (1983).
- [Sou86] S. H. Southworth, A. C. Parr, J. E. Hardis, J. L. Dehmer and D. M. P. Holland, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **246**, 782 (1986).
- [Spa95] R. A. Sparrow, R. E. Olson and D. Schneider, *J. Phys. B* **28**, 3427 (1995).
- [Sto97] N. Stolterfoht, R. D. DuBois and R. D. Rivarola, *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions*, Springer, Berlin (1997).
- [Sua96] S. Suárez, R. O. Barrachina and W. Meckbach, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 474 (1996).
- [Sul01] B. Sulik, K. Tőkési, Cs. Koncz, Á. Kövér, S. Ricz, A. Orbán, N. Stolterfoht, J.-Y. Chesnel and D. Berényi, *Physica Scripta T* **92**, 463 (2001).
- [Sul02] B. Sulik, Cs. Koncz, K. Tőkési, A. Orbán and D. Berényi, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 073201 (2002).
- [Sul03] B. Sulik, N. Stolterfoht, R. Hellhammer, Z. Pešić, Cs. Koncz, K. Tőkési and D. Berényi, *Nucl. Instr. and Meth. B* **212**, 32 (2003).
- [Sul07] B. Sulik, K. Tőkési, N. Stolterfoht, T. Ricsóka, Gy. Víkor, Sz. Nagy, Z. Berényi, R. Hellhammer, Z. Pešić and D. Berényi, *Rad. Phys. and Chem.* **76**, 483 (2007).
- [Sul99a] B. Sulik, Cs. Koncz, K. Tőkési, Á. Kövér, S. Ricz, Gy. Víkor, J.-Y. Chesnel, N. Stolterfoht and D. Berényi, *Nucl. Instr. and Meth. B* **154**, 281 (1999).
- [Sul99b] B. Sulik, Á. Kövér, S. Ricz, Cs. Koncz, K. Tőkési, Gy. Víkor, J.-Y. Chesnel, N. Stolterfoht and D. Berényi, *Physica Scripta T* **80**, 338 (1999).

-
- [Tay69] N. J. Taylor, Rev. Sci. Instr. **40**, 792 (1969).
- [Tof02] D. Toffoli, M. Stener and P. Declewa, J. Phys. B **35**, 1275 (2002).
- [Tök00] K. Tökési and Á. Kövér, J. Phys. B **33**, 3067 (2000).
- [Tök05] K. Tökési, B. Sulik and N. Stolterfoht, Nucl. Instr. and Meth. B **233**, 187 (2005).
- [Tul89] J. Tulkki, Phys. Rev. Lett. **62**, 2817 (1989).
- [Var79] D. Varga, *Kandidátusi értekezés*, MTA ATOMKI, Debrecen (1979).
- [Var92] D. Varga, I. Kádár, S. Ricz, J. Végh, Á. Kövér, B. Sulik and D. Berényi, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **313**, 163 (1992).
- [Var95] D. Varga, K. Tökési and I. Rajta, J. Electron Spectr. Relat. Phenom. **76**, 433 (1995).
- [Wan01] H. Wang, G. Snell, O. Hemmers, M. M. Sant'Anna, I. Sellin, N. Berrah, D. W. Lindle, P. C. Deshmukh, N. Haque and S. T. Manson, Phys. Rev. Lett **87**, 123004 (2001).
- [Wan91] J. Wang, J. Burgdörfer and A. Bárány, Phys. Rev. A **43**, 4036 (1991).
- [Woo80] G. K. Woodgate, *Elementary Atomic Structure 2nd Edition*, Clarendon Press, Oxford (1980).
- [Wui74] F. J. Wuilleumier and M. O. Krause, Phys. Rev. A **10**, 242 (1974).
- [Yam90] Y. Yamazaki, K. Komaki, T. Azuma, K. Kuroki, K. Kawatsura, Y. Kanai, T. Kambara, M. Ohura and Y. Awaya, RIKEN Accel. Prog. Rep. **24**, 54 (1990).
- [Yam92] Y. Yamazaki, K. Komaki, T. Azuma, K. Kuroki, K. Kawatsura, Y. Kanai, T. Kambara, M. Ohura and Y. Awaya RIKEN Accel. Prog. Rep. **26**, 66 (1992).
- [Yeh85] J. J. Yeh and I. Lindau, At. Data Nucl. Data Tables **32**, 1 (1985).
- [You04] H. D. Young and R. A. Freedman, *University Physics with Modern Physics*, Addison Wesley, San Francisco (2004).

Magasabb rendű folyamatok foton- és töltött részecske-atom ütközésekben

Értekezés a doktori (Ph.D.) fokozat megszerzése érdekében a fizika tudományágban

Írta: Ricsóka Tícia okleveles fizikus

Készült a Debreceni Egyetem Fizika tudományok doktori iskolájának
Atom- és molekulafizika programja keretében

Témavezető: Dr. Kövér Ákos

A doktori szigorlati bizottság:

Elnök: Dr.
Tagok: Dr.
Dr.

A doktori szigorlat időpontja:

Az értekezés bírálói:

Dr.
Dr.

A bírálóbizottság:

Elnök: Dr.
Tagok: Dr.
Dr.
Dr.
Dr.

Az értekezés védésének időpontja:

Ezen értekezést a Debreceni Egyetem TTK *Fizika tudományok* doktori iskolájának *Atom- és molekulafizika* programja keretében készítettem a Debreceni Egyetem TTK doktori (Ph.D.) fokozatának elnyerése céljából.

Debrecen, 2007. április 24.

Ricsóka Tícia

Tanúsítom, hogy *Ricsóka Tícia* doktorjelölt 2001 és 2007 között a fent megnevezett doktori iskola Atom- és molekulafizika programjának keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglalt eredményekhez a jelölt önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Az értekezés elfogadását javaslom.

Debrecen, 2007. április 24.

Dr. Kövér Ákos
témavezető