



Többszörös elektronszóródás ion–atom ütközésekben

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Koncz Csaba József

Debreceni Egyetem
Természettudományi Kar
Debrecen, 2005

Bevezetés

A jelen tézisekben azt a tudományos munkát foglalom össze, amelyet 1997 és 2000 között az MTA Atommagkutató Intézetének fiatal kutatójaként valamint a Debreceni Egyetem PhD hallgatójaként végeztem dr. Pálinkás József és dr. Sulik Béla irányítása alatt.

Atomi ütközések egyik kísérőjelensége az ionizáció. Kísérleti körülmények között az ütközési tartományt elhagyó elektronok energiájuk és irányuk szerint osztályozhatók. Ennek az osztályozásnak a felhasználásával határozhatjuk meg az elektronkibocsátás enenergia és irány szerint kétszeresen differenciális hatáskeresztmetszetét (angolul *doubly differential cross section*, DDCS).

A kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszet egyik jellegzetes összetevője a kéttest-ütközési (*binary encounter*, BE) csúcs, melynek keletkezése klasszikus magyarázattal bír: a céltárgy elektronjai a lövedékkel ütközve az energia- és impulzusmegmaradás törvényeiből meghatározható irányban és energiával hagyják el az ütközés színhelyét:

$$E_{BE} = \frac{(2v_P)^2}{2} \cos^2 \theta,$$

ahol E_{BE} a kilökött elektron energiáját jelöli, v_P a beeső lövedék sebessége, θ pedig az elektron kibocsátási szöge (atomi egységeket feltételezve).

A fenti kifejezésből kiolvasható, hogy a lövedék irányában kibocsátott BE elektronok a lövedék sebességének kétszeresével rendelkeznek. Folytatva a fenti gondolatmenetet, elképzelhető, hogy az aktív elektron többször is kölcsönhatásba lép a lövedékkel és a céltárggyal, és ennek során minden lövedékkel való ütközéskor az elektron a lövedék sebességének kétszeresével növelheti laboratóriumi rendszerbeli sebességét. Ezt a mechanizmust elsőként Fermi javasolta 1949-ben a nagy energiájú kozmikus sugárzás keletkezésének magyarázataképpen: elképzelése szerint hatalmas méretű, egymás fele közeledő mágneses terek gyorsítják a töltött részecskéket a Földön megfigyelt energiákra. Atomi ütközések területén a Fermi-gyorsítás azért érdemel figyelmet, mert az ilyen módon felgyorsított elektronok másodlagos sugárzást jelentenek, amit például dózisszámításokor figyelembe kell venni.

Az utóbbi másfél évtizedben több olyan kísérleti eredmény is napvilágot látott, amely többszörös ütközési sorozatokkal magyarázható. Az ATOMKI-ban végzett munkánkkal mintegy ezek folytatásaként további adatokat szolgáltatottunk a jelenségkör megvilágítására.

A doktori értekezés tézisei:

1. Részt vettem közepes sebességű egyszeresen töltött hélium- és szénion lövedékek és nemesgáz céltárgyatombok (Ne, Ar, Xe) ütközését jellemző kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszetek kísérleti meghatározásában.

A méréseket az ATOMKI 5 MV Van de Graaff gyorsítója által szolgáltatott 2.45 illetve 3 atomi egység sebességű (azaz 150 keV/u, illetve 233 keV/u atomtömeg egységre vonatkoztatott energiájú) C⁺ és He⁺ ionnyalábokkal végeztük. Az ionizációs spektrumot az ESA-21 elektronspektrométer rögzítette. Ezekkel az eszközökkel a 30-2500 eV kibocsátott elektronenergia-tartományban és a 0°-180° szögtartományt lefedő tizenhárom kibocsátási irányban mértük az elektronkibocsátás spektrumát. Az elektronspektrométer detektorainak hatásfokát az 1.5 MeV H⁺ + Ar ütközési rendszerre meghatározott DDCS-nek a Rudd és társai ¹ által közölt abszolút hatáskeresztmetszet-értékekkel való összehasonlításával becsültem meg. Ezt követően a mért spektrumokból valamennyi ütközési rendszerre abszolút hatáskeresztmetszeteket határoztam meg.

A C⁺ lövedékekkel mért spektrumok mindegyikében megfigyelhető, hogy a lövedéknyaláb irányával tompaszöget bezáró elektronkibocsátási irányokban és a kétszeres lövedéksebességnek megfelelő energián a DDCS értékei nagyobbak, mint ami az elsőrendű Born-közelítés alapján várható. A nagyobb rendszámú céltárgyak esetén (Ar, Xe) a maximális BE energiát meghaladó energiatartományban a DDCS rendkívül szerkezetgazdag és számos, a hatványfüggvényszerű lecsengéstől eltérő intenzitás-

¹M. E. Rudd, L. H. Toburen, and N. Stolterfoht, Atomic Data and Nuclear Data Tables **23**, 405 (1979).

ingadozást mutat. A mért és az elsőrendű Born-közelítésben számított DDCS arányát elemezve azt a következtetést vontuk le, hogy a $C^+ + Xe$ ütközési rendszerben a háromszoros (lövedék - céltárgy - lövedék), illetve négyszeres elektronszóródási mechanizmusnak is szerepe van az ionizációs spektrum kialakításában. Megállapítottuk, hogy a lövedék és a céltárgy erősen árnyekolt (sokelektronos) voltának jelentős szerepe van a vizsgált jelenség kialakulásában.

A jelen tézisponthoz a közleménylista 1. és 2., valamint 5.– 9. közleményei kapcsolódnak.

2. Az előző pontban ismertetett mérések eredményeinek értelmezhetősége érdekében kidolgoztam egy számítógépes programot, amellyel az elsőrendű Born közelítés keretein belül nagy pontossággal lehet kétszeresen differenciális ionizációs hatáskeresztmetszeteket kiszámítani. Erre azért volt szükség, mert a korábban kifejlesztett ilyen jellegű programokat nem készítették fel a BE energiát jóval meghaladó energiákon, vagy akár a BE energiával összevethető, de a lövedék irányával nagy szöget bezáró kibocsátási irányokra történő számításokra.

A nevezett programmal végzett számítások a 233 keV/u $He^+ + Xe$ ütközési rendszer esetén a DDCS nagyenergiás (BE energiánál nagyobb) részén nagyon jól egyeznek a kísérletileg megállapított értékekkel. A C^+ ionokkal végzett mérések esetén az általam számított DDCS értékek adták a kiindulási alapot a többszörös szórási folyamatok azonosításához.

Az elsőrendű Born közelítésen alapuló számításokat az 1.– 4., valamint a 6.– 9. közleményekben használtuk fel.

3. Kiterjesztettem a klasszikus kéttest-ütközés közelítést (*Binary Encounter Approximation*, BEA) arra az esetre, amikor a lövedék elektronokat is hordoz. Ez a módszer elsősorban a céltárgyból származó nagy energiájú elektronok (a BE csúcs) vizsgálatára alkalmas. Kidolgozására azért volt szükség, mert az előző pontokban ismertetett vizsgálatainkból azt a következtetést vonhattuk le, hogy a többszörös szóródási folyamatokban

a megnövekedett BE elektronkibocsátásnak fontos szerepe van.

A módszer lényege, hogy a céltárgy ionizációját az aktív elektronnak a lövedéken történő rugalmas szóródásaként fogja fel, ezért ismertnek tételezi a lövedék potenciálján számított rugalmas elektronszórási hatáskeresztmetszetet. A céltárgy atom szerepe az aktív elektron sebességeloszlásának kialakítására korlátozódik.

Ez a közelítés akkor nyújt az elsőrendű Born-közelítésnél (B1) jobb eredményt, ha a lövedék árnyékolt és a beeső lövedék sebességének megfelelő elektronergián a lövedékre jellemző rugalmas elektronszórási hatáskeresztmetszet lényegesen eltér a csupasz lövedéket jellemző hatáskeresztmetszettől. Míg a B1 közelítés esetén a kéttest-ütközési csúcs intenzitása növekszik a kibocsátási szög növelésével, addig a BEA közelítésben a rugalmas hatáskeresztmetszetben jelentkező intenzitás-hullámzások hatással vannak a BE csúcs nagyságára, így az egyes kibocsátási irányokban meghaladhatja, máshol pedig alulmarad a B1 közelítés jósólta BE intenzitásnak. Hasonlóképpen, míg adott szög és energia esetén a lövedék ionizációs fokának növelésével az első Born hatáskeresztmetszetek növekszenek, addig a BEA DDCS ingadozhat. A nevezett közelítésen alapuló számítások segítségével becsültük meg a szénion lövedék által kiváltott BE ionizáció tényleges hatáskeresztmetszetét, így választva ki a többszörös szórás folyamat szempontjából optimális ütközési rendszert ($C^+ + Xe$).

A kéttest-ütközési közelítésre az 1., 2. és 4. közleményekben támaszkodtunk.

4. Egy másodrendű Born-közelítésen alapuló számítás segítségével megmutattam, hogy a kétszeres elektronszórás mechanizmusa, amelyben a céltárgyból kiszabaduló elektron első lépésként a lövedékkel lép kölcsönhatásba, utána pedig a céltárgy atomtörzsszel, leírható kvantummechanikai tárgyalásmóddal.

Tekintve a másodrendű kvantummechanikai hatáskeresztmetszetszámí-

tások bonyolult voltát, a tényleges számításokat egy egyszerűsített modellrendszerben végeztem el, ahol az aktív elektron és a nehéz ütköző részecskék (a lövedék, illetve a céltárgymag) közötti kölcsönhatást Yukawapotenciálok segítségével közelítettem. Kimutattam, hogy a kétszeres szóródást leíró átmeneti amplitudó ebben az ütközési rendszerben egy váll megjelenéséhez vezet, amely a maximális BE emergián helyezkedik el és főképp a lövedék irányával nagy szöget bezáró kibocsátási irányokban figyelhető meg. Továbbá rámutattam, hogy a széles körben alkalmazott elsőrendű Born-közelítés, amennyiben a végállapotban a kilökött elektron realisztikus (az elektronnak a céltárggyal való kölcsönhatását figyelembe vevő) hullámfüggvényeit használja, ezt a mechanizmust teljes egészében magában foglalja.

A tézisponthoz a 4.-es és 9.-es közlemények kapcsolódnak.

5. Kvantummechanikai impulzusközelítésben (*impulse approximation*, IA) számításokat végeztem a Bechthold és társai² által vizsgált ütközési rendszerekre. Céлом az volt, hogy olyan közelítő módszert dolgozzak ki, amely képes a kétszeres szórási jelenségek előrejelzésére.

A számítások egyszerűsítésére irányuló közelítéseket úgy választottam meg, hogy az eredmény továbbra is rendelkezzen az elsőrendű Born és a kéttest-ütközés közelítések előnyös tulajdonságaival: adjon számot a kilökött elektronnak a visszamaradt céltárgyon történő szóródásáról és vegye figyelembe a lövedék erősen árnyékolt voltának a BE csúcsra gyakorolt hatását.

Azt tapasztaltam, hogy abban az esetben amikor a lövedékre jellemző rugalmas elektronszórási hatáskeresztmetszetnek a lövedéksebességnek megfelelő elektronenergián éles minimuma van, a céltárgy legkeskenyebb impulzuseloszlással rendelkező alhéjának ionizációs spektrumában az impulzusközelítés szerint is megjelenik egy csúcs, amely a mérésekhez hasonlóan a kibocsátási iránytól függetlenül a maximális BE energián

²Bechthold *et al.*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2034, 1997.

helyezkedik el. Más elméleti számítások eredményeiben ez a csúcs nem jelenik meg.

A fenti eredményeket a 4.-es közlemény tartalmazza.

Multiple electron scattering in ion-atom collisions

The present theses represent the summary of my work conducted between 1997 and 2000 as a junior research fellow of the Institute of Nuclear Research and as a PhD student of the University of Debrecen. My supervisors were dr. József Pálinkás and dr. Béla Sulik.

The ionization process is one of the phenomena accompanying ion-atom collisions. During experiments we are able to determine the energy and the direction under which the electrons leave the collision area. Using this information we can calculate the electron ejection cross section differential in the energy and direction of the ejected electron. We often refer to this quantity as *doubly differential cross section* (DDCS).

One of the prominent features of the ionization DDCS is the binary encounter (BE) peak. According to the classical explanation for the formation of this peak the electrons initially bound in the target atom undergo a head-on collision with the projectile and are ejected from the target. The energy and direction of the ejected electrons can be determined from the conservation laws of energy and momenta:

$$E_{BE} = \frac{(2v_P)^2}{2} \cos^2 \theta,$$

where E_{BE} denotes the energy of the ejected electron, v_P is the velocity of the incident projectile, and θ is the electron ejection angle relative to the direction of the incident projectile. (Atomic units are considered.)

According to the above formula, BE electrons ejected under $\theta=0^\circ$ have twice the velocity of the projectile. Going further we can imagine that the ejected electron undergoes more collisions with the projectile and the target. After each collision with the projectile the electron might increase its velocity by as much as $2v_P$ in the laboratory reference frame. This mechanism was first proposed by Fermi in 1949 as an explanation of the high-energy component of the cosmic radiation. According to him, giant magnetic fields approaching each other are capable of accelerating charged particles to the high energies observed on Earth. In the field of atomic collisions the Fermi-

shuttle acceleration is of interest because the high-energy electrons resulting from this process can function as secondary irradiation source, which has to be accounted for in dosimetric calculations.

Theses:

1. I have participated in experiments aimed at determining doubly differential ionization cross sections for collision systems involving intermediate-velocity singly-charged helium and carbon ions and noble gas (Ne, Ar Xe) targets.

The experiments were carried out at the 5 MV Van de Graaf accelerator of ATOMKI. The experiments were carried out at two velocities of the incident ion beam: 2.45 and 3 atomic units (which correspond to energies of 150 and 233 keV/u). The ejected electrons were analyzed using the ESA-21 electron spectrometer. The ionization spectrum was recorded in the energy range of 30-2500 eV and for 13 different ejection angles ranging from 0° to 180° . I estimated the efficiency of the spectrometer by comparing the data measured for the 1.5 MeV $H^+ + Ar$ collision system with the absolute DDCS data published by Rudd *et al*¹. Using this data I was able to determine the absolute ionization cross sections for all the collision systems studied.

Examining the spectra recorded for C^+ projectiles we noticed that for large ejection angles and energy corresponding to $2 v_P$ the DDCS values are larger than the results of theoretical calculations based on the first Born approximation. In the case of heavy targets (Ar, Xe) the high-energy part of the DDCS exhibits intensity variations which are quite different from the expected power-law-like attenuation. Analyzing the ratio of the experimental and theoretical data (calculated using the first Born approximation) we concluded that part of the electronic spectra characterizing the $C^+ + Xe$ collision system can be attributed to

¹M. E. Rudd, L. H. Toburen, and N. Stolterfoht, Atomic Data and Nuclear Data Tables **23**, 405 (1979).

triple (projectile - target - projectile) and quadruple (projectile - target - projectile-target) scattering of the active electron. We also found that the screened nature of the projectile and target fields are essential in the formation of multiple scattering sequences.

The above results were published in references 1., 2. and 5.- 9.

2. In order to be able to interpret the results of the measurements mentioned previously, I developed a computer program which, within the framework of the first Born approximation, is able to calculate high-precision ionization DDCS values. Compared to computer codes published previously, this program performs well at energies well above the maximum BE energy and also at large ejection angles.

The calculations performed with the above code for the collision system of 233 keV/u $\text{He}^+ + \text{Xe}$ are in excellent agreement with the experimentally determined cross section values. In the case of the experiments performed with C^+ projectiles the results of the calculations served as reference data in identifying the multiple collision sequences. Publications 1.-4. as well as 6.-9. all make use of this code.

3. I have extended the classical binary-encounter approximation (BEA) for the case when the projectile is not bare, but also carries electrons. This method is especially useful for modelling the ejection of the energetic electrons (the BE peak). The need for this approximation arose from the experimental observation that multiple scattering sequences are observable only in conjunction with an enhanced BE peak emission. In the binary-encounter approach target ionization is regarded as elastic collision of the active electron and the projectile. Thus, knowledge of the cross section characterizing the elastic electron - projectile scattering is needed. The only role of the target core in this picture is to determine the initial velocity distribution of the active electron.

This approach provides better DDCS estimates compared to the first-order Born (B1) calculations in the case when the incident projectile is

screened and the actual elastic electron-projectile scattering cross evaluated at the electron energy corresponding to the projectile velocity is quite different from the cross section characterizing the bare projectile. While in the case of B1 calculations the intensity of the BE peak increases with increasing ejection angles, the intensity oscillations observable in the elastic scattering cross sections are reflected by BEA calculations so that the intensity of BE peak oscillates, too. Similarly, while for a fixed energy and ejection angle the B1 DDCS values become larger as the projectile ionization degree is increased, the BEA cross sections can oscillate. We used this approximation to estimate the real binary-encounter emission induced by C^+ ions, and for selecting the collision system ($C^+ + Xe$) optimal for the formation of multiple scattering sequences.

This approach was used in references 1., 2. and 4.

4. With the aid of a second-order Born calculation I demonstrated that the double scattering mechanism (which implies two interactions of the active electron: first with the projectile, then with the residual target core) can be described by a quantal theory.

Due to the complexity of DDCS calculations involving second-order terms of the Born series, the actual calculations were performed for a simplified collision system, where the interactions between the active electron and the heavy collision partners (the projectile and the target core) were modeled with Yukawa potentials. I was able to demonstrate that in this collision system the inclusion of the second-order amplitude describing the double scattering sequence gives rise to a shoulder in the DDCS which is situated at the maximal BE energy at all emission angles. Furthermore, I pointed out that even the first Born approximation is able to account for this process, provided that the final electronic wave function accounts for the electron - target core interaction.

The publications related to this item are no. 4. and 9.

5. I have performed calculations using the quantum-mechanical impulse approximation (IA) for a number of collision systems studied experimentally by Bechthold and coworkers.² My purpose was to find an approach that is able to predict the double scattering phenomena observed for those systems.

When deciding on the approximations needed in order to reduce the immense computing time required otherwise by a full impulse approximation, I paid attention on preserving the features essential for describing the double scattering effect: accounting for the final-state electron - target interaction as the first Born approximation does; and describing the binary-encounter emission similarly to the binary-encounter approximation.

Although this approach did not produce a double scattering peak for the whole target ionization, it did produce a peak for the target subshell which had the narrowest momentum distribution. This peak is situated at the maximal BE energy for all ejection angles. No other theory is known to exhibit this behaviour.

The above results were published in item 4. of the publications list.

²Bechthold *et al.*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2034, 1997.

Az értekezés témakörében megjelent közlemények/

Publications related to the dissertation

1. Sulik B., Kövér Á., Ricz S., Koncz Cs., Tőkési K., Víkor Gy., Chesnel J.-Y., Stolterfoht N., Berényi D.: *Projectile and target contributions to the continuous electron spectra from 150 keV/u C^+ + He, Ne collisions; Multiple ionization and multiple scattering*, Physica Scripta T **80** (1999) 338.-340.
2. Sulik B., Koncz Cs., Tőkési K., Kövér Á., Ricz S., Víkor Gy., Chesnel J.-Y., Stolterfoht N., Berényi D.: *Continuous electron spectra from 150 keV/u C^+ + He, Ne, Ar collisions at electron emission angles from 0 degree to 180 degree*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **154** (1999) 281.-285.
3. Koncz Cs., Sulik B.: *Double scattering of ejected electrons in ion-atom collisions*, Journal of Physics B **32** (1999) 5009.-5015.
4. Koncz Cs.: *Double scattered electrons in ion-atom collisions: an impulse approximation*, Journal of Physics B **34** (2001) 3879.
5. Sulik B., Tőkési K., Koncz Cs., Kövér Á., Ricz S., Orbán A., Stolterfoht N., Chesnel J.-Y., Berényi D.: *Multiple scattering of the emitted electrons in intermediate velocity C^+ + Ne collisions: Search for Fermi-Shuttle acceleration in experiment and CTMC calculations*, Physica Scripta T **92** (2001) 463.
6. Sulik B., Koncz Cs., Tőkési K., Orbán A., Kövér Á., Ricz S., Chesnel J.-Y., Stolterfoht N., Berényi D.: *Hot electrons from intermediate velocity C^+ + inert gas collisions: Experimental signatures of Fermi-Shuttle ionization*, Photonic, electronic, and atomic collision. XXII International Conference, Santa Fe, New Mexico, July 18-24, 2001. Proceeding. Eds.: Joachim Burgdörfer, James S. Cohen, Sheldon Datz, et al. Princeton, Rinton Press (2002) 567.

7. Sulik B., Koncz Cs., Tókési K., Orbán A., Berényi D.: *Evidence for Fermi-Shuttle ionization in intermediate velocity C^+ + Xe collisions*, Physical Review Letters **88** (2002) 3201.
8. Sulik B., Koncz Cs., Tókési K., Orbán A., Kövér Á., Ricz S., Stolterfoht N., Hellhammer R., Chesnel J., Richard P., Tawara H., Alia-badi H., Berényi D.: *Multiple electron scattering in ion-atom collisions: Fermi-Shuttle acceleration in ionization*, X-Ray and Inner-Shell Processes: 19th International Conference. Eds: Antonio Bianconi, Augusto Marcelli, Naurong L. Saini. Melville, AIP (AIP Conference Proceedings 652) 652 (2003) 195.
9. Sulik B., Stolterfoht N., Hellhammer R., Pesić Z., Koncz Cs., Tókési K., Berényi D.: *Fermi-shuttle acceleration of electrons in ion-matter interaction*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **212** (2003) 32.