

Doktori (PhD) értekezés tézisei

Nagy energia- és szögfelbontású elektron  
spektroszkópiai vizsgálatok fotonok és töltött  
részecskék atomokkal és molekulákkal való  
ütközésének megfigyelésére

Ábrók Levente

Témavezetők:

Dr. Orbán Andrea

Dr. Ricz Sándor



DEBRECENI EGYETEM  
Fizikai Tudományok Doktori Iskola  
Debrecen, 2022



# Bevezetés

A természetben lejátszódó jelenségek megértésében fontos szerep jut az atomok és molekulák elektron szerkezetéről és kölcsönhatásairól szerzett ismereteinknek. A kozmikus részecskék ütközése a légkört alkotó molekulákkal, az elektromágneses sugárzás hatása a biológiai rendszerekre, a töltött és semleges részecskék kölcsönhatásainak szerepe az asztro- és plazmafizikai kutatásokban csak néhány példa arra, hogy az elektronok gerjesztése vagy épp az ionizáció jelensége a hétköznapijaink szerves része. Épp ezért vizsgálatuk és mélyebb megértésük ma is a fizikai kutatások élvonalába tartozik.

A kilépő elektronok energiájának és szögeloszlásának, a kétszeresen differenciált hatáskeresztmetszetnek a mérése az egyik olyan módszer, amellyel információt gyűjthetünk a lejátszódó folyamatokról. A kísérletekből nyert adatok elméleti számolásokkal való összevetése lehetőséget nyújt megérteni az elektronszerkezetben bekövetkező változásokat, valamint a modellek ellenőrzését, finomítását is segíti.

# Célkitűzések

Az Atomkiban nagy hagyománya van az elektrosztatikus elektron spektrométerek fejlesztésének és az ezekre épülő kísérleti kutatásoknak. Az egyik kutatási terület az elektromágneses sugárzás atomokkal és molekulákkal való kölcsönhatását vizsgálja. Ebbe a munkába kapcsolódtam be a doktori témámon keresztül, amelynek kettős célja volt: egyrészt fontos volt, hogy megismerjem a kísérletek során használt eszközöket és a mérések aktív résztvevője legyek. Másrészt az elméleti ismeretek elsajátításával képes legyek önálló fotoionizációs számolások végzésére. Ezen kettősséget az motiválta, hogy a kutatási témán belül képes legyek mind a kísérleti, mind az elméleti kutatók nézőpontjának elsajátítására.

Bár az ionizáció, az elektronemisszió jelensége, hosszú múltra tekint vissza, kutatások ma is aktívan folynak a témában. Én ennek egy szeletével, elsősorban a nondipól járulékok jelenlétével és a direkt ionizációval párhuzamosan lejátszódó, azzal kölcsönható gerjesztési folyamattal foglalkoztam.

# Tézispontok

**T1.1:** Munkám során az ESA-22D elektronspektrométer fejlesztésébe és tesztelésébe kapcsolódtam be. A beépített, vákuumkörülmények között forgatható detektortartó lehetővé tette, hogy meghatározzam a használt elektronsokszorozók egyedi hatásfokait és az elektronoptikára jellemző átviteli függvényt. Ehhez argon céltárgyon rugalmasan és rugalmatlanul szóródó elektronok energia és szögeloszlását mértem meg, a detektorok különböző mértékű elforgatásait alkalmazva. Kihasználtam azt a két ténytet, hogy egy adott pozícióba forgatott detektorok által mért intenzitás értékeket a detektor hatásfoka határozza meg, míg egy adott detektor által különböző pozíciókban mért intenzitás értékeket az átvitelbeli eltérések határozzák meg. Így sikerült meghatározni 20 db elektronsokszorozó relatív hatásfokát, amelyek között igen nagy eltéréseket tapasztaltam. A kidolgozott kalibrációs módszer könnyen alkalmazható más típusú detektorokra pl. helyzetérzékeny detektorra is. [1]

**T1.2:** Abszolút ionizációs hatáskeresztmetszet méréseket végeztem proton argon ütközésekre a Német Mérésügyi Hivatallal együttműködve. Felhasználva a mérőrendszeren végzett kalibrációs módszert az eredményeket korábbi kísérleti adatokkal vetettem össze, amely során igen jó egye-

zést tapasztaltam. A mérések nem csupán a kalibrációs módszer alkalmazhatóságát bizonyították, hanem az elérhető kísérleti adatok számát is gyarapították és kiterjesztették a rendelkezésre álló mérések elektron energia tartományát. [1]

**T2:** Egy HeI VUV fotonforrást alkalmazva megmértem a tetrahidrofurán molekula (THF) külső héjairól származó fotoelektronok energia- és szögeloszlását. Az eredményeket összehasonlítottam más, korábbi mérések eredményeivel, valamint az általunk végzett számításokkal. Irodalmi ismereteim szerint elsőként határoztam meg a kísérleti szögeloszlásokat. A saját és más kísérleti adatok összehasonlítása azt is megmutatta, hogy az energiaeioszlások jelentős eltéréseket mutatnak a különböző kísérleti megfigyelések között. [2]

**T3.1:** Elméleti vizsgálataim során számításokat végeztem az emittált fotoelektronok energia- és szög szerint differenciált hatáskeresztmetszetére. A foton-atom kölcsönhatás során bekövetkező ionizáció leírásában a dipól közelítést meghaladó magasabb multipólusok járulékát is figyelembe vettem. Ennek érdekében saját programot fejlesztettem. Számításokat végeztem a kripton 4p alhéjának fotoionizációjára és meghatároztam a fotoelektron szögeloszlásra jellemző anizotrópia paramétereit, széles fotonenergia tartományban. Az eredményeket összehasonlítottam korábbi spinfüggő számításokkal. [3]

**T3.2:** Annak érdekében, hogy belső héjak rezonáns gerjesztéseit is figyelembe tudjam venni a számításaimban, megvizsgáltam a direkt ionizáció és a gerjesztési folyamatok között fellépő interferencia hatását a fotoelektronok

szögeloszlásában. Az indirekt ionizációs folyamat leírására egy egyszerűsített két-lépéses modellt alkalmaztam. A nondipól járulékokat figyelembe vevő programomat kibővítettem az autoionizációs csatornák figyelembe vételével. A numerikus eredmények azt mutatták, hogy a csatorna kölcsönhatások jelentős változásokat okozhatnak a szögeloszlások energiafüggő viselkedésében. [3]

**T4:** A hamburgi szinkrotron forrásnál kripton céltárggyal végzett fotoionizációs kísérletek kiértékelését végeztem el. A vizsgált energiatartományban (205-230 eV) lehetséges a 3p belső héj rezonáns gerjesztése is, amelynek egyik lehetséges relaxálódása participátor Auger-folyamat útján történik. Meghatároztam a kísérleti fotoelektron szögeloszlásokat jellemző anizotrópia paramétereit a fotonenergia függvényében, valamint összehasonlítottam elméleti számítások eredményeivel, a saját elméleti munkámat is beleértve. A kísérleti  $\gamma$  nondipól paraméter energiafüggő viselkedése és a  $\nu$  paraméter nagyságrendje jelentősen különbözött az elméleti jóslatoktól. Bár nem sikerült egyértelmű magyarázatot adnom a megfigyelt eltérésekre, ezek okára több lehetőséget is felvettem. Érdekes lenne a jövőben részletgazdagabb méréseket, valamint komplexebb modelleken alapuló számításokat végezni. [3]

## Tézisekhez kapcsolódó közlemények

1. L. Ábrók, T. Buhr, Á. Kövér, R. Balog, D. Hatvani, P. Herczku, S. Kovács, S. Ricz, A method for intensity calibration of an electron spectrometer with multi-angle detection, NIM-B **369**, 24 - 28, 2016
2. I. Márton, L. Ábrók, D.Nagy, Á. Kövér, L. Gulyás, S. Demes, S. Ricz, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **249**, 147070, 2021
3. L. Ábrók, T. Buhr, Á. Kövér, D. Varga, K. Holste, A. A. Borovik, Jr., S. Schippers, A. Müller, L. Gulyás, S. Ricz, A. Orbán, beküldve a J. Electron Spectros. Relat. Phenomena folyóirathoz, két pozitív bírálói vélemény (2022. május 10)



Nyilvántartási szám: DEENK/328/2022.PL  
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Ábrók Levente

Doktori Iskola: Fizikai Tudományok Doktori Iskola

MTMT azonosító: 10052476

## **A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények**

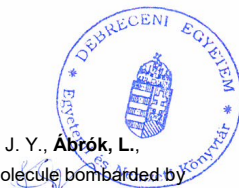
### Idegén nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (3)

1. **Ábrók, L.**, Buhr, T., Kövér, Á., Varga, D., Holste, K., Borovik, A. A. J., Schippers, S., Müller, A., Gulyás, L., Ricz, S., Orbán, A.: Non-dipole anisotropy parameters in the photoionization of Kr in the region of deep inner shell excitations.  
*J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. Epub*, 1-27, 2022. ISSN: 0368-2048.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.elspec.2022.147209>  
IF: 1.957 (2020)
2. Márton, I., **Ábrók, L.**, Nagy, D., Kövér, Á., Gulyás, L., Demes, S., Ricz, S.: Angular distribution and energy spectra of photoelectrons from tetrahydrofuran illuminated by VUV photon source.  
*J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 249, 1-5, 2021. ISSN: 0368-2048.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.elspec.2021.147070>  
IF: 1.957 (2020)
3. **Ábrók, L.**, Buhr, T., Kövér, Á., Balog, R., Hatvani, D., Herczku, P., Kovács, S. T. S., Ricz, S.: A method for intensity calibration of an electron spectrometer with multi-angle detection.  
*Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B-Beam Interact. Mater. Atoms.* 369, 24-28, 2016. ISSN: 0168-583X.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2015.10.037>  
IF: 1.109

## **További közlemények**

### Idegén nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (2)

4. Kovács, S. T. S., Herczku, P., Juhász, Z., Sarkadi, L., Gulyás, L., Chesnel, J. Y., **Ábrók, L.**, Frémont, F., Hajaji, A., Sulik, B.: Dissociative ionization of the H<sub>2</sub>O molecule bombarded by swift singly charged and slow highly charged ions.  
*X-Ray Spectrom.* 49 (1), 133-137, 2019. ISSN: 0049-8246.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/xrs.3072>  
IF: 1.254





5. Schippers, S., Beerwerth, R., **Ábrók, L.**, Bari, S., Buhr, T., Martins, M., Ricz, S., Viefhaus, J., Fritzsche, S., Müller, A.: Prominent role of multielectron processes in K-shell double and triple photodetachment of oxygen anions.  
*Phys. Rev. A* **94** (4), 1-5, 2016. ISSN: 1050-2947.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.94.041401>  
IF: 2.925

Idegen nyelvű absztrakt kiadványok (3)

6. Schippers, S., Beerwerth, R., **Ábrók, L.**, Bari, S., Martins, M., Ricz, S., Viefhaus, J., Fritzsche, S., Müller, A.: Multi-electron processes in K-shell double and triple photodetachment of oxygen anions.  
*J. Phys. Conf. Ser.* **875** (3), 1, 2017. ISSN: 1742-6588.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/875/3/022004>
7. Buhr, T., Ricz, S., **Ábrók, L.**, Kövér, Á., Wang, M., Hilgers, G., Rabus, H.: Double differential ionization cross section of tetrahydrofuran for proton impact.  
*J. Phys. Conf. Ser.* **635** (3), 1, 2015. ISSN: 1742-6588.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/635/3/032047>
8. **Ábrók, L.**, Balog, R., Herczku, P., Kovács, S. T. S., Hatvani, D., Ricz, S., Kövér, Á.: Upgrade of ESA-22D photoelectron spectrometer.  
*J. Phys. Conf. Ser.* **635** (9), 1, 2015. ISSN: 1742-6588.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/635/9/092092>

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 9,202**

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapjául szolgáló közleményekre): 5,023**

A DEENK a Jelölt által az iDEa Tudóstérbe feltöltött adatok bibliográfiai és tudománymetriai ellenőrzését a tudományos adatbázisok és a Journal Citation Reports Impact Factor lista alapján elvégezte.

Debrecen, 2022.06.08.



Short thesis for the degree of doctor of  
philosophy (PhD)

Investigation of the interactions of photons  
and charged particles with atoms and  
molecules with the method of high energy and  
angle resolved photoelectron spectroscopy

by Levente Ábrók

Supervisors:

Dr. Andrea Orbán

Dr. Sándor Ricz



UNIVERSITY OF DEBRECEN  
Doctoral School of Physics  
Debrecen, 2022



# Introduction

The electron structure of atoms and molecules and their interactions play a crucial role in the understanding of the various processes in nature. The excitation of electrons or the ionization phenomena are part of our everyday life, e.g. the collision of cosmic particles with the atmosphere, the effect of electromagnetic radiation on organic matter, the role of charged and neutral particles in astro and plasma physics. Thus their study and the interpretation of the results are still hot topics in many research fields.

One of the experimental methods to obtain information about the processes is to measure the double differential (angle and energy resolved) cross sections of the emitted electrons. By comparing the data obtained from the experiments with the theoretical predictions one can understand the changes occurring in the electron structure, as well as verify and refine the applied model.

# Motivation

The development of electrostatic electron spectrometers and research based on these equipments in Atomki has a long history. One of the research directions is related to the study of the interaction between the electromagnetic radiation and atoms or molecules. During my PhD work I joined these studies with two main goals. One was to learn the practical skills and methods to be able to perform experiments. On the other hand, I acquired the theoretical knowledge to perform calculations on photoionization.

While ionization, the electron emission process, has been studied for a long time now, it is still a hot research topic. During my studies I was involved in studying the effects of nondipole contributions and excitations which interact with the direct ionization process.

# Results

**T1.1:** During my PhD work I took part in the development and testing of the ESA-22D electron spectrometer. With the help of the detector holder that is rotatable under vacuum conditions I determined the relative efficiencies of the channel electron multipliers (CEMs) and the transmission function of the electron optic system. For this reason I measured the angular distribution of the electrons in elastic and nonelastic electron scattering experiments using argon gas target. The calibration method is based on two facts: the measured intensity at a given detector position depends only on the efficiency of the CEM, while a chosen detector at different positions measures the difference in the transmission of the system. In this way I determined the relative efficiencies of the 20 CEMs and found significant differences between their sensitivity. This calibration method can also be used for other types of detectors, like microchannel plates. [1]

**T1.2:** I measured the absolute ionization cross sections for proton-argon collisions in collaboration with the National Metrology Institute in Germany. Based on the calibration method described previously in T1.1 I compared the data with results from the literature and found good agreement

between them. The good agreement supports the applicability of the calibration method and these measurements also provide new experimental data at higher electron energies. [1]

**T2:** We measured the angle and energy resolved photoelectron cross sections for the outer valence shells of the tetrahydrofuran molecule (THF) induced by a HeI VUV photon source. The results were compared with other measurements and with our theoretical calculations. As far as I know our measurements are the first one in the literature that determines the photoelectron angular distributions for THF. The comparison also highlighted the differences of the measured electron energy distributions among the various groups. [2]

**T3.1:** During my PhD studies I calculated the energy and angular differential cross sections for photoionization. In my description of the photon-atom interaction I went beyond the dipole approximation, including higher multipole terms. To perform these calculations I developed computer codes. I evaluated the anisotropy parameters of the angular distributions of the Kr 4p subshell in a wide photon energy range. I compared my results with the previous spin dependent calculations. [3]

**T3.2:** I applied a simplified two-step model to take into consideration the resonant excitations of inner subshells. The motivation was to study the interference effect on the photoelectron angular distributions between the direct ionization and excitation processes. Therefore I extended my program by including resonant excitations. The calculations proved that channel interactions affect the energy

dependent behaviour of the angular distributions. [3]

**T4:** I evaluated photoionization measurements for krypton performed at the synchrotron in Hamburg. In the studied photon energy region (205-230 eV) the inner 3p subshell was also excited which relaxes through a participator Auger decay process. I determined the experimental anisotropy parameters related to the photoelectron angular distributions as the function of the photon energy and I also compared the results with mine and other theoretical calculations. I found that the energy dependent behaviour of the  $\gamma$  nondipole parameter and the magnitude of the  $\nu$  parameter differed considerably from the theoretical predictions. Although my calculations do not fully explain the behaviour of the experimental data but I suggested possible explanations. More detailed measurements and complex theoretical models are recommended for further studies. [3]

## Publications related to the thesis

1. L. Ábrók, T. Buhr, Á. Kövér, R. Balog, D. Hatvani, P. Herczku, S. Kovács, S. Ricz, A method for intensity calibration of an electron spectrometer with multi-angle detection, NIM-B **369**, 24 - 28, 2016
2. I. Márton, L. Ábrók, D.Nagy, Á. Kövér, L. Gulyás, S. Demes, S. Ricz, Angular distribution and energy spectra of photoelectrons from tetrahydrofuran illuminated by VUV photon source, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **249**, 147070, 2021
3. L. Ábrók, T. Buhr, Á. Kövér, D. Varga, K. Holste, A. A. Borovik, Jr., S. Schippers, A. Müller, L. Gulyás, S. Ricz, A. Orbán, submitted to J. Electron Spectros. Relat. Phenomena, two positive referee reports (10. 05.2022.)



Registry number:  
Subject:

DEENK/328/2022.PL  
PhD Publication List

Candidate: Levente Ábrók

Doctoral School: Doctoral School of Physics

MTMT ID: 10052476

## List of publications related to the dissertation

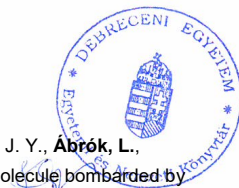
### Foreign language scientific articles in international journals (3)

1. **Ábrók, L.**, Buhr, T., Kövér, Á., Varga, D., Holste, K., Borovik, A. A. J., Schippers, S., Müller, A., Gulyás, L., Ricz, S., Orbán, A.: Non-dipole anisotropy parameters in the photoionization of Kr in the region of deep inner shell excitations.  
*J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. Epub*, 1-27, 2022. ISSN: 0368-2048.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.elspec.2022.147209>  
IF: 1.957 (2020)
2. Márton, I., **Ábrók, L.**, Nagy, D., Kövér, Á., Gulyás, L., Demes, S., Ricz, S.: Angular distribution and energy spectra of photoelectrons from tetrahydrofuran illuminated by VUV photon source.  
*J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 249, 1-5, 2021. ISSN: 0368-2048.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.elspec.2021.147070>  
IF: 1.957 (2020)
3. **Ábrók, L.**, Buhr, T., Kövér, Á., Balog, R., Hatvani, D., Herczku, P., Kovács, S. T. S., Ricz, S.: A method for intensity calibration of an electron spectrometer with multi-angle detection.  
*Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B-Beam Interact. Mater. Atoms.* 369, 24-28, 2016. ISSN: 0168-583X.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2015.10.037>  
IF: 1.109

## List of other publications

### Foreign language scientific articles in international journals (2)

4. Kovács, S. T. S., Herczku, P., Juhász, Z., Sarkadi, L., Gulyás, L., Chesnel, J. Y., **Ábrók, L.**, Frémont, F., Hajaji, A., Sulik, B.: Dissociative ionization of the H<sub>2</sub>O molecule bombarded by swift singly charged and slow highly charged ions.  
*X-Ray Spectrom.* 49 (1), 133-137, 2019. ISSN: 0049-8246.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/xrs.3072>  
IF: 1.254





5. Schippers, S., Beerwerth, R., **Ábrók, L.**, Bari, S., Buhr, T., Martins, M., Ricz, S., Viefhaus, J., Fritzsche, S., Müller, A.: Prominent role of multielectron processes in K-shell double and triple photodetachment of oxygen anions.  
*Phys. Rev. A* **94** (4), 1-5, 2016. ISSN: 1050-2947.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.94.041401>  
IF: 2.925

Foreign language abstracts (3)

6. Schippers, S., Beerwerth, R., **Ábrók, L.**, Bari, S., Martins, M., Ricz, S., Viefhaus, J., Fritzsche, S., Müller, A.: Multi-electron processes in K-shell double and triple photodetachment of oxygen anions.  
*J. Phys. Conf. Ser.* **875** (3), 1, 2017. ISSN: 1742-6588.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/875/3/022004>
7. Buhr, T., Ricz, S., **Ábrók, L.**, Kövér, Á., Wang, M., Hilgers, G., Rabus, H.: Double differential ionization cross section of tetrahydrofuran for proton impact.  
*J. Phys. Conf. Ser.* **635** (3), 1, 2015. ISSN: 1742-6588.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/635/3/032047>
8. **Ábrók, L.**, Balog, R., Herczku, P., Kovács, S. T. S., Hatvani, D., Ricz, S., Kövér, Á.: Upgrade of ESA-22D photoelectron spectrometer.  
*J. Phys. Conf. Ser.* **635** (9), 1, 2015. ISSN: 1742-6588.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/635/9/092092>

**Total IF of journals (all publications): 9,202**

**Total IF of journals (publications related to the dissertation): 5,023**

The Candidate's publication data submitted to the iDEa Tudóstér have been validated by DEENK on the basis of the Journal Citation Report (Impact Factor) database.

08 June, 2022

