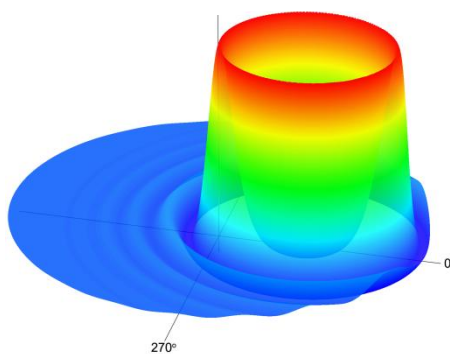


Universitatea "Babeş-Bolyai" Cluj-Napoca

Facultatea de Fizică

**REZUMATUL TEZEI DE
DOCTORAT**

**EFECTE DE INTERFERENȚĂ ÎN
IONIZAREA MOLECULELOR
DIATOMICE**



Conducător de doctorat
Prof. Dr. LADISLAU NAGY

Doctorand
LORÁND-SZABOLCS CZIPA

2018

CUPRINS

Cuprinsul tezei.....	3
Cuvinte cheie.....	4
Introducere.....	5
1. Teorie.....	8
2. Observarea și descrierea efectelor de interferență în ionizarea moleculei de hidrogen.....	9
3. Efecte de interferență în ionizarea moleculelor heteronucleare.....	10
3.1. Descriere teoretică.....	10
3.2. Rezultate și discuții.....	13
3.3 Concluzii.....	19
4. Efecte de interferență în ionizarea moleculei H₂ prin impact cu ioni rapizi. Compararea diferitelor modele.....	20
4.1. Descriere teoretică.....	21
4.2. Rezultate și discuții pentru ionizarea moleculei H ₂ cu proiectile F ⁹⁺ , Kr ³³⁺ și Kr ³⁴⁺	24
4.3. Concluzii.....	31
Concluzii finale.....	33
Bibliografie.....	35

CUPRINSUL TEZEI

Cuvânt înainte.....	3
Introducere.....	4
1. Teorie.....	7
1.1. Proprietatea ondulatorie a electronilor.....	7
1.1.1. Efectul Ramsauer-Townsend.....	9
1.1.2. Experimentul lui George Paget Thomson.....	10
1.1.3. Experimentul lui Davisson și Germer.....	12
1.1.4. Experimentul lui Young cu electroni.....	14
1.2. Secțiunea eficace.....	19
1.2.1. Definiție clasică.....	19
1.2.2. Definiție cuantică.....	21
1.3. Teoria perturbativă dependentă de timp.....	23
1.4. Tranziții unielelectronice induse de particule încărcate electric. Metoda parametrului de impact.....	28
2. Observarea și descrierea efectelor de interferență în ionizarea moleculei de hidrogen.....	31
2.1. Ionizarea moleculei de hidrogen. Observarea efectelor de interferență.....	31
2.2. Descrierea efectelor de interferență în aproximația undelor plane.....	36
3. Efecte de interferență în ionizarea moleculelor heteronucleare.....	44
3.1. Descriere teoretică.....	44
3.2. Rezultate și discuții.....	50
3.3 Concluzii.....	57
4. Efecte de interferență în ionizarea moleculei H₂ prin impact cu ioni rapizi. Compararea diferitelor modele.....	58
4.1. Descriere teoretică.....	59
4.2. Rezultate și discuții pentru ionizarea moleculei H ₂ cu proiectile F ⁹⁺ , Kr ³³⁺ și Kr ³⁴⁺	62
4.3 Concluzii.....	69
Concluzii finale.....	71
Bibliografie.....	73

Cuvinte cheie

Efecte de interferență

Ionizare

Împrăștiere

Moleculă diatomică

Secțiune eficace diferențială

Introducere

Mărimea sistemelor moleculare, ca și raza de acțiune a forțelor este foarte mică, și nu pot fi măsurate direct. De aceea împrăștierea este foarte importantă în studiul sistemelor atomice. S-au obținut foarte multe informații despre atomi, nucleeele atomilor și despre particulele elementare prin experimente de împrăștiere. Pentru interpretarea rezultatelor experimentale este foarte importantă descrierea teoretică a fenomenului observat și efectuarea calculelor, care de obicei sunt foarte dificile chiar și cu calculatoare de înaltă performanță.

Deși proprietatea ondulatorie a electronilor a fost cunoscută încă din 1924, consecințele ei asupra ionizării moleculelor diatomice prin proiectile încărcate au fost observate și descrise prima dată abia în 2001 de N. Stolterfoht și colab. [1]. Mai înainte, în general, coliziunea moleculelor cu electroni, ioni sau fotoni a fost descrisă de așa-numita regulă de aditivitate [2], neglijând coerența dintre undele asociate electronilor emiși de diferiți atomi ai moleculei. Stolterfoht și colab. au măsurat secțiunea eficace dublă diferențială în funcție de viteza și unghiul de ejecție ale electronului. Pentru a observa efectele de interferență, au împărțit secțiunea moleculară obținută cu două secțiuni atomice independente. Oscilațiile observate în raportul secțiunii eficace – raportul dintre secțiunea eficace moleculară și suma secțiunilor eficace atomice – în funcție de viteza electronului, au fost o dovadă clară a interferenței.

Cele două nuclee ale moleculelor diatomice se află la distanța de ordinul Å , care este comparabilă cu lungimea de undă a electronilor. Aceste nuclee pot fi concepute ca două surse coerente de electroni. Undele coerente emise, din apropierea nucleelor moleculei, interferă în spectrul electronului emis. Efectele de interferență au fost observate chiar și în cazul unei orientări aleatorii a moleculelor țintă.

Stolterfoht și colab. au construit un model teoretic, dar nu au reușit să explice dependența oscilațiilor de unghiul de emisie al electronului. Au comparat rezultatele lor cu cele experimentale

[1]. Corespondența relativ bună, între teorie și experiment, a trezit interesul pentru cercetarea în domeniu.

La scurt timp după publicarea acestor rezultate, în 2002, Nagy și colab. [3] au realizat o descriere teoretică a acestui efect. Au arătat dependența oscilațiilor raportului secțiunii eficace de unghiul de ejecție al electronului și au constatat dispariția aproape totală a oscilațiilor la emisia perpendiculară. Rezultatele lor au fost confirmate experimental de Stolterfoht și colab. [4].

În același timp, alte experimente au confirmat efectele de interferență în ionizarea moleculelor diatomice homonucleare: la H_2 [5-12] și la molecule mai mari [13-16], prin diferite proiectile – proton, C^{6+} , F^{9+} , Kr^{33+} , Kr^{34+} – cu energii mari, urmate de mai multe descrieri teoretice [17-26]. Recent a fost studiată molecula diatomică heteronucleară HeH^+ [27, 28] – unde ejectarea electronilor de cei doi atomi nu este simetrică – precum și alte molecule mai complexe, de exemplu H_2O [29], unde efectul este mai complicat decât în cazul moleculelor diatomice. Cu toate acestea, în ciuda acestei cantități uriașe de muncă, unele aspecte ale interferenței nu au fost clarificate – de exemplu, dublarea frecvenței și discrepanța între experiment și teorie, la emisia perpendiculară.

Această teză conține patru capitole. În primul capitol am prezentat cele mai importante experimente care au confirmat proprietatea ondulatorie a particulelor, teoria generală a secțiunilor eficace [30-32], teoria perturbației dependente de timp [30-32] și tranzițiile unui singur electron, induse de impactul particulelor încărcate electric. În al doilea capitol am prezentat primele rezultate experimentale și teoretice ale efectelor de interferență în ionizarea moleculei de hidrogen datorită impactului ionic, și o analiză analitică a efectelor de interferență. În capitolul al treilea am prezentat un studiu teoretic pentru ionizarea ionului molecular heteronuclear HeH^+ cu protoni rapizi. Am generalizat modelul analitic utilizat cu succes pentru descrierea efectelor de interferență în molecula H_2 a lui Nagy [3] și l-am aplicat pentru studiul efectelor de interferență în ionizarea ionului molecular HeH^+ . Este interesant studiul moleculelor diatomice heteronucleare, când ejectarea electronilor de cei doi atomi nu este simetrică. Pentru descrierea emisiei de electroni s-a aplicat aproximația semi-clasică, conform căreia proiectilul a fost tratat cu formulele fizicii clasice și s-a presupus – datorită energiei mari a proiectilului – că traiectoria lui este liniară. Prin contrast, electronii din țintă au fost tratați cu formalisme ale mecanicii cuantice, iar interacțiunea dintre proiectil și particula țintă ca perturbație, deoarece proiectilul influențează starea cuantică a țintei. În final am identificat structurile de interferență, am analizat oscilațiile observate în raportul secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului ejectat pentru diferite unghiuri de emisie, și am comparat rezultatele noastre cu cele ale lui Tachino [27, 28] și cu cele calculate, pentru molecula de hidrogen cu metoda din [3]. Rezultatele noastre au fost publicate [33] și prezentate la conferințe [34, 35].

În ultimul capitol am prezentat un nou model teoretic pentru descrierea procesului de ionizare al moleculei homonucleare de H_2 , prin impact cu proiectile încărcate electric. Am analizat deficiențele modelului precedent, și am efectuat modificări substanțiale în scopul obținerii unor rezultate mai precise. Astfel am reușit o descriere teoretică mult mai exactă a procesului ionizării datorită impactului ionic. În acest model nou, ca și în cazul modelului anterior, am folosit de asemenea aproximația electronilor independenți și aproximația perturbativă de ordinul întâi, dar cu o descriere a stării finale mult mai precisă. În modelul anterior, funcția de undă finală a electronului este de fapt o undă plană, iar în acest model, este îmbunătățită prin unde coulombiene, centrate pe cele două nuclee ale moleculei de H_2 . Aceste schimbări semnificative au condus la o formulă mai precisă a secțiunii eficace diferențiale moleculare, care depinde numai de amplitudinea atomică. Descrierea mai exactă a stării finale și a parametrilor de impact – conform așteptărilor noastre – au condus la rezultate mai exacte. Am comparat rezultatele noastre cu datele experimentale și cu rezultatele altor modele – inclusiv cu cele ale modelului anterior – și am analizat cauzele diferențelor. Rezultatele noastre au fost publicate [36] și prezentate la conferințe [37, 38].

Scopul cercetării mele a fost studiul și înțelegerea profundă a fenomenelor de interferență în ionizarea moleculelor diatomice prin particulele încărcate electric, alcătuirea unui model teoretic mai dezvoltat, care să ofere o înțelegere mai bună a fenomenelor și a efectelor de interferență, precum și obținerea rezultatelor mai precise, comparativ cu alte modele teoretice. Cu rezultatele prezente vom contribui la înțelegerea mai profundă a efectelor de interferență în ionizarea moleculelor homo- și heteronucleare.

1. Teorie

În prima parte a acestui capitol am prezentat principalele experimente care au demonstrat ipoteza lui de Broglie, adică caracterul ondulatoriu al particulelor (în primul rând al electronului): efectul Ramsauer-Townsend, experimentele lui G. P. Thomson (1927), al lui Davisson și Germer (1927), și al lui Feynman, realizat de R. Bach (2013).

În partea a doua a acestui capitol, am prezentat teoria împrăștierilor dependente de timp, relevantă pentru studiul nostru, de la definiția secțiunilor eficace prin teoria perturbației dependente de timp până la tratarea ionizării atomilor prin impact cu particule încărcate.

Acest capitol se bazează pe referințele [39-54].

2. Observarea și descrierea efectelor de interferență în ionizarea moleculei de hidrogen

În ionizările induse de particule încărcate electric, o atenție deosebită s-a acordat celei mai simple ținte moleculare diatomice, moleculei de H_2 [53]. Deoarece nucleele acestora sunt identice, prin ionizarea moleculei apar unde coerente, și drept consecință, interferența. Totuși, până în anul 2001, efectele de interferență nu au fost observate în spectrele electronilor emiși de molecule în urma ionizării prin ioni rapizi.

În 2001 Stolterfoht și colab. au efectuat un experiment [1], folosind un fascicul de ioni Kr^{34+} cu energia de 60 MeV/u, care a fost direcționat pe o țintă de gaz de H_2 . Au măsurat secțiunea eficace dublă diferențială în emisia electronilor pentru diferite unghiuri de ejecție, apoi au împărțit acest rezultat cu dublul secțiunii eficace a atomilor de hidrogen independenți. Au constatat că raportul secțiunii eficace oscilează în funcție de viteza electronului emis, și au realizat că aceasta este dovada clară a efectelor de interferență. Este de remarcat faptul, că efectele de interferență au fost observate în cazul orientării aleatorii a moleculelor țintă de H_2 .

După rezultatele experimentale, Stolterfoht și colab. au construit un model teoretic pentru descrierea efectelor de interferență în ionizarea moleculei de H_2 , au efectuat calcule și comparații între rezultatele teoretice și cele experimentale. Au constatat, că efectele de interferență se pot evidenția prin reprezentarea raportului secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului emis.

În acest capitol am prezentat și am interpretat primele rezultate experimentale și teoretice ale lui Stolterfoht. Cu toate că nu au reușit să explice dependența oscilațiilor de unghiul de emisie al electronului, corespondența relativ bună între teorie și experiment, a trezit interesul pentru cercetarea în domeniu.

La scurt timp după publicarea acestor rezultate, în 2002, Nagy și colab. [3] au realizat o descriere teoretică a acestui efect. Au prezis dependența oscilațiilor raportului secțiunii eficace de unghiul de emisie al electronului și au constatat dispariția aproape totală a oscilațiilor la ejecția perpendiculară. Rezultatele au fost confirmate experimental în 2003 de Stolterfoht și colab. [4].

Am prezentat descrierea teoretică a efectelor de interferență în ionizarea moleculei de hidrogen cu ioni rapizi a lui L. Nagy și colab. [3].

3. Efecte de interferență în ionizarea moleculelor heteronucleare

Pentru a înțelege în detaliu efectele de interferență observate în ionizarea moleculelor, este interesant studiul moleculelor diatomice heteronucleare, când ejectarea electronilor din vecinătatea celor doi atomi nu este simetrică.

În lucrarea de față am generalizat modelul analitic pentru H_2 al lui L. Nagy [3] și îl aplicăm pentru studierea efectelor de interferență pentru ionizarea ionului molecular HeH^+ – o moleculă heteronucleară cu doi electroni – prin impactul protonic. Tachino și colab. [27, 28] au efectuat calcule teoretice pentru a studia ionizarea moleculei heteronucleare HeH^+ . Am comparat rezultatele noastre cu cele al lui Tachino și colab. [28] și cu cele apărute pentru molecula de hidrogen, cu rezultatele lui L. Nagy și colab. [3]. Analizăm oscilațiile observate în raportul secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului ejectat pentru diferite unghiuri de emisie.

3.1. Descriere teoretică

Având în vedere viteza mare a proiectilului, pentru ionizarea moleculei heteronucleare de HeH^+ , aplicăm aproximarea semi-clasică, considerând că traiectoria proiectilului este rectilinie. Direcția axei z coincide cu direcția proiectilului, care se mișcă cu viteza v_p . Originea sistemului de coordonate o luăm la distanța χD ($0 < \chi < 1$) de nucleul de He, și respectiv, la distanța de $(1 - \chi)D$ de nucleul de H.

Starea inițială a electronului activ în molecula heteronucleară este descrisă printr-o combinație liniară a doi orbitali atomici de tip hidrogen $1s$ centrați pe fiecare nucleu. Notând cu

α_1 și α_2 sarcinile efective ale atomilor de He, respectiv H, funcția de undă inițială a electronului activ este:

$$\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{D}) = c_1 e^{-\alpha_1 |r+\chi D|} + c_2 e^{-\alpha_2 |r-(1-\chi)D|}, \quad (3.1)$$

unde coeficienții c_1 și c_2 dau contribuțiile orbitalilor atomici la orbitalul molecular pentru atomii de He, respectiv H. Funcția de undă finală aproximăm cu funcția corespunzătoare unei plane:

$$\Psi_k(\mathbf{r}) \approx (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (3.2)$$

unde \mathbf{k} este impulsul electronului ejectat.

Amplitudinea de tranziție de ordinul întâi pentru un proiectil având sarcina electrică Z_p și parametrul de impact b , pentru o anumită orientare a axei moleculare $\hat{\mathbf{D}}$ și pentru impulsul \mathbf{k} al electronului emis, poate fi scrisă sub forma

$$a(b, \hat{\mathbf{D}}) = \frac{iZ_p}{v_p} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iqz} \left\langle \Psi_k(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} \right| \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{D}) \right\rangle, \quad (3.3)$$

unde q este transferul minim de impuls către electron, iar \mathbf{r} și \mathbf{R} sunt vectorii de poziție al electronului activ, respectiv al proiectilului.

Amplitudinea de tranziție a fost calculată, folosind integrala Bethe pentru descrierea potențialului. În calcule am folosit aproximația "peaking", și astfel am luat în considerare numai electronii cu viteze mari.

Având în vedere că probabilitatea de tranziție pentru un parametru de impact b și o orientare $\hat{\mathbf{D}}$ a axei moleculare, este egală cu pătratul modulului amplitudinii de tranziție, am arătat că prima este exprimată cu următoarea relație:

$$w(b, \hat{\mathbf{D}}) = \frac{8}{\pi} \frac{Z_p^2}{v_p^2 k^4} \left[c_1^2 \frac{\alpha_1^2}{\gamma_1^2} (b_+ K_1(b_+ \gamma_1))^2 + c_2^2 \frac{\alpha_2^2}{\gamma_2^2} (b_- K_1(b_- \gamma_2))^2 + c_1 c_2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\gamma_1 \gamma_2} b_+ b_- K_1(b_+ \gamma_1) K_1(b_- \gamma_2) (e^{-i(k_{\parallel} - q)D_{\parallel}} + e^{+i(k_{\parallel} - q)D_{\parallel}}) \right], \quad (3.4)$$

unde

$$\gamma_{1,2} = [\alpha_{1,2}^2 + (q - k_{\parallel})^2]^{1/2}, \quad (3.5)$$

iar b_+ și b_- sunt parametrii de impact relativ ai celor două nuclee, k_{\parallel} și D_{\parallel} sunt componentele paralele ale impulsului final al electronului k , respectiv a distanței internucleare D , relativ la axa z .

Relația (3.4) depinde nu numai de parametrul de impact b și de orientarea axelor moleculare. În comparație cu experimentul, probabilitatea trebuie calculată în medie pe toate orientările moleculare posibile:

$$w(b) = \frac{1}{4\pi} \int d\varphi_D \int \sin \theta_D d\theta_D w(b, \hat{\mathbf{D}}). \quad (3.6)$$

Secțiunea eficace diferențială o obținem prin integrarea probabilității după parametrul de impact:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_k dk} = 2\pi \int bw(b)db. \quad (3.7)$$

Integralele (3.6) și (3.7) trebuie calculate numeric.

Dacă mediem doar factorul de interferență

$$e^{-i(k_{\parallel}-q)D_{\parallel}} + e^{+i(k_{\parallel}-q)D_{\parallel}} \quad (3.8)$$

după orientarea axei moleculare, *presupunând* că celelalte variații ale ecuației (3.4) sunt neimportante, pentru probabilitatea de tranziție și secțiunea eficace diferențială rezultă:

$$w(b) = c(b) + g(b) \frac{\sin[(k_{\parallel} - q)D]}{(k_{\parallel} - q)D} \quad (3.9)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_k dk} = C + G \frac{\sin[(k_{\parallel} - q)D]}{(k_{\parallel} - q)D}. \quad (3.10)$$

Relațiile (3.9) și (3.10) sunt asemănătoare cu cele obținute de L. Nagy și colab. [3].

3.2. Rezultate și discuții

Așa cum a arătat Stolterfoht [1], interferența nu se poate observa în secțiunea eficace diferențială, dar poate fi demonstrată prin calculul raportului secțiunii eficace diferențiale.

Am realizat calcule pentru ionizarea ionului molecular HeH^+ prin impactul protonilor, pentru trei energii diferite ale proiectilelor: 1 MeV, 13,7 MeV și 100 MeV. Am analizat secțiunile eficace obținute în funcție de impulsul electronului ejectat, pentru patru unghiuri de emisie: 0° , 30° , 90° și 150° . Am efectuat calculele având în vedere originea atât în centrul geometric cât și în centrul de masă al moleculei. Calculele au arătat că rezultatele obținute nu depind de valoarea lui χ , adică de alegerea poziției originii.

Pentru a arăta efectele de interferență, am calculat raportul secțiunii eficace diferențiale și am studiat dependența sa de impulsul și unghiul de emisie al electronului ejectat, și am comparat cu rezultatele lui Tachino și colab. [28]. În figurile 3.1-3 am reprezentat raportul secțiunii eficace pentru trei energii ale protonilor, și pentru patru unghiuri de emisie ale electronilor. Rezultatele noastre arată oscilații în raportul secțiunilor eficace și sunt în acord cu cele obținute de Tachino și colab. [28].

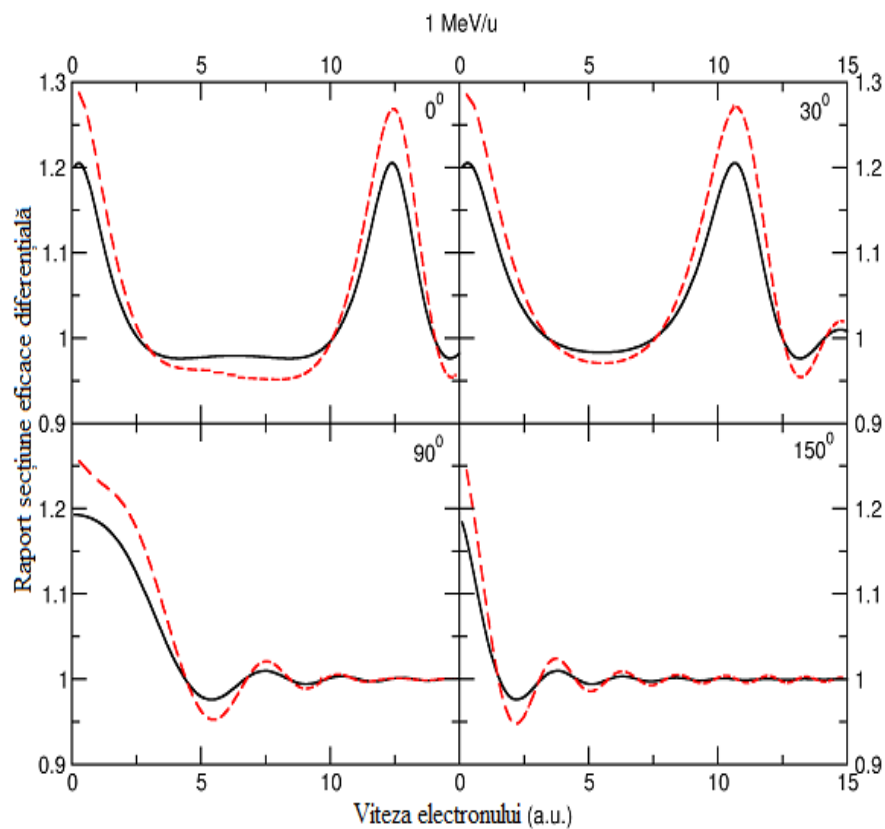


Figura 3.1. Raportul secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului emis, în ionizarea ionului molecular heteronuclear HeH^+ cu proiectile protoni cu energia de 1 MeV/u, pentru diferite unghiuri de emisie ale electronilor. Liniiile continue (-) reprezintă rezultatele noastre, iar liniile roșii întrerupte(- -) sunt rezultatele lui Tachino și colab. [28].

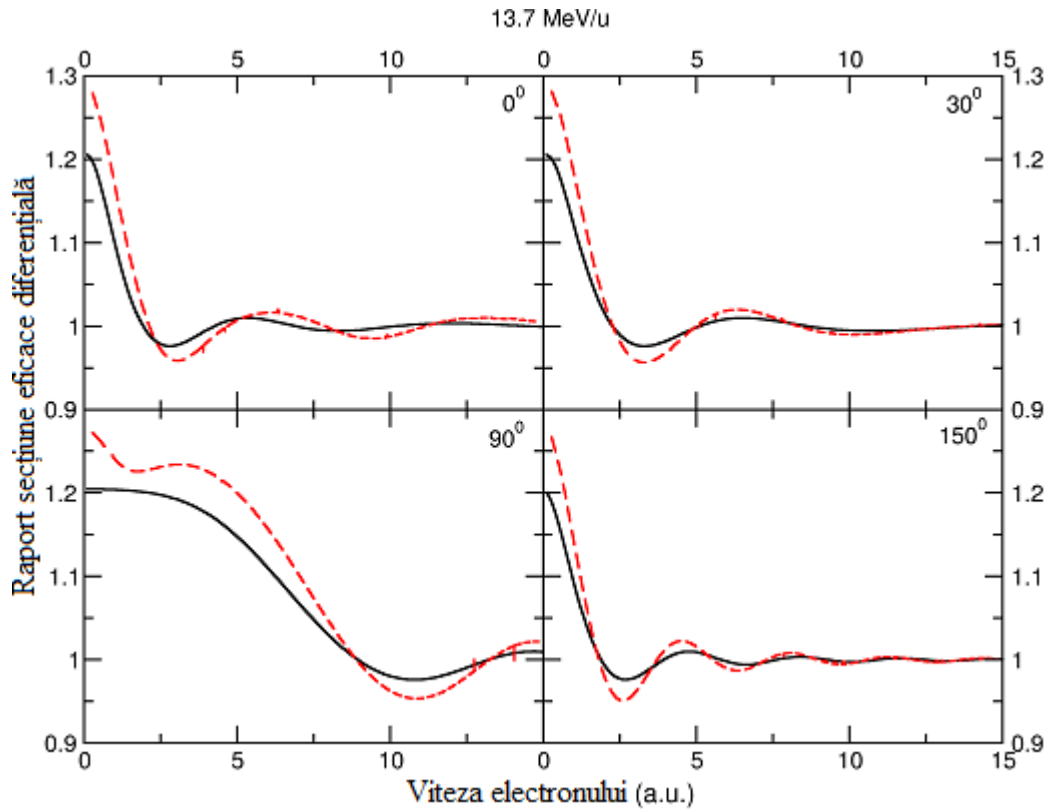


Figura 3.2. Același ca în figura 3.1, dar energia protonului este de 13,7 MeV/u.

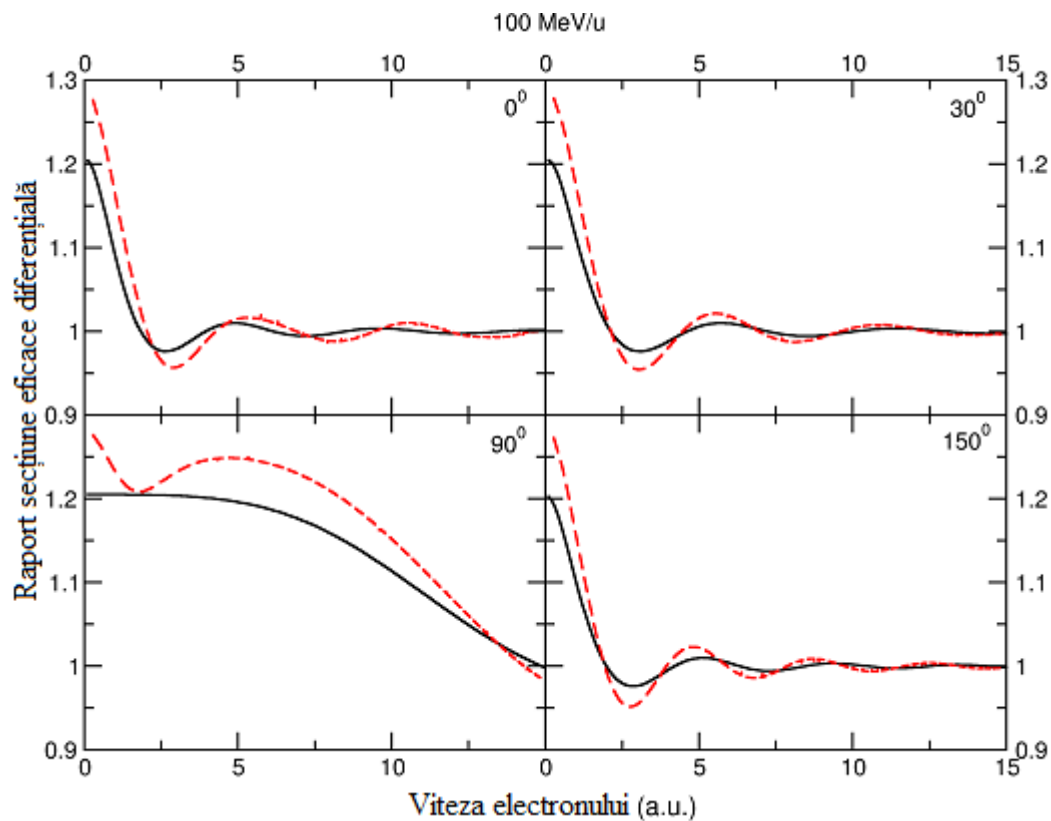


Figura 3.3. Același ca în figura 3.1, dar energia protonului este de 100 MeV/u.

În figurile 3.4-6 se pot observa reprezentările polare ale raportului secțiunii eficace în funcție de impulsul electronului ejectat, ca coordonată radială, și de unghiul de emisie pentru trei energii diferite ale proiectilului. În cazul unui impact cu un proiectil de 1 MeV/u (figura 3.4), maximum principal cu forma circulară poate fi observat în totalitate, deoarece raza cercului binar este 12,54 a.u. și cel mai mare impuls, în grafice, este de 15 a.u. La energii mai mari ale protonilor, raza cercului binar crește. În figurile 3.5 și 3.6 vârful binar este doar parțial vizibil, deoarece raza cercului binar este 46,77 a.u. în cazul proiectilelor cu energia de 13,7 MeV/u și respectiv 125,47 a.u. pentru 100 MeV/u. În figurile 3.5-6, se pot observa oscilațiile secundare atât în interiorul, cât și în exteriorul cercului de vârf binar, și totodată, că valoarea maximumului binar, este independentă de unghiul de ejeție al electronului.

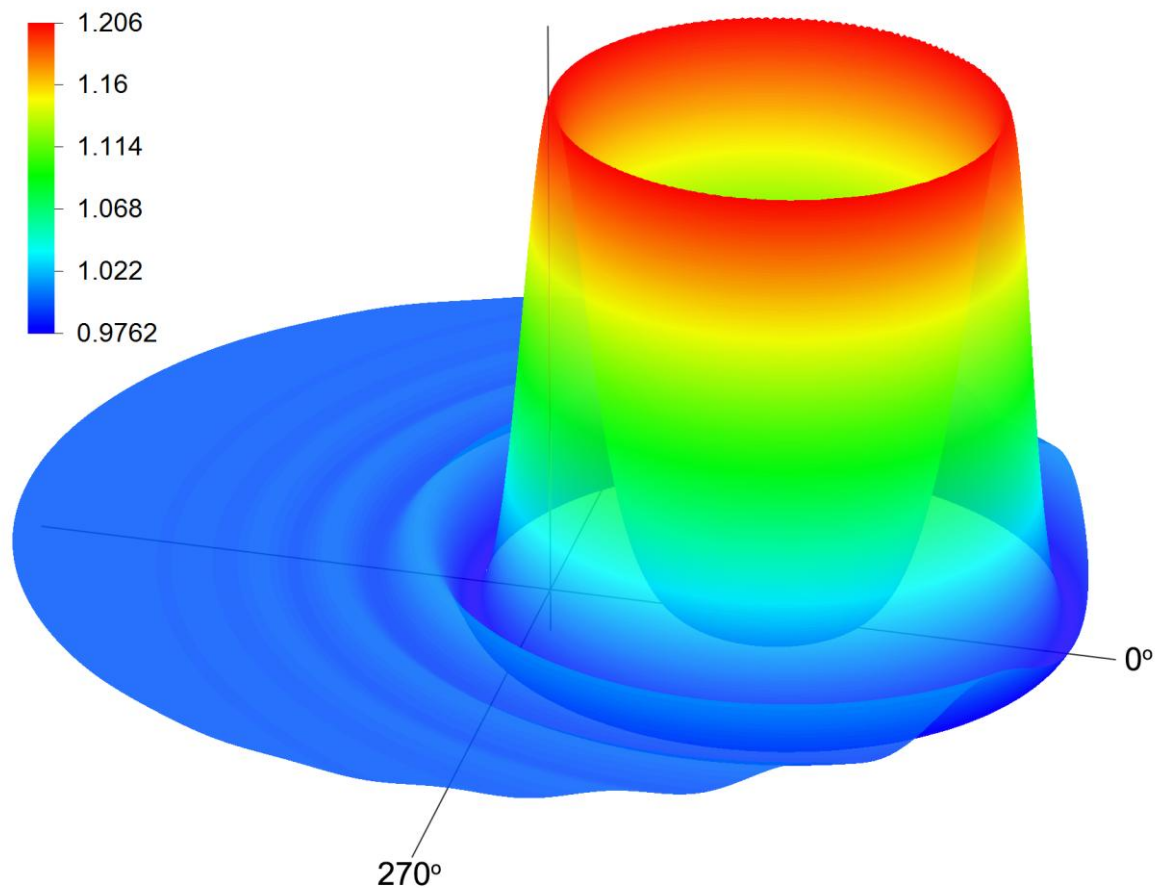


Figura 3.4. Raportul secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului emis, ca coordonată radială, a cărei valoare maximă este 15 a.u., și de unghiul de emisie în ionizarea ionului molecular heteronuclear HeH^+ . Energia protonului este de 1 MeV/u.

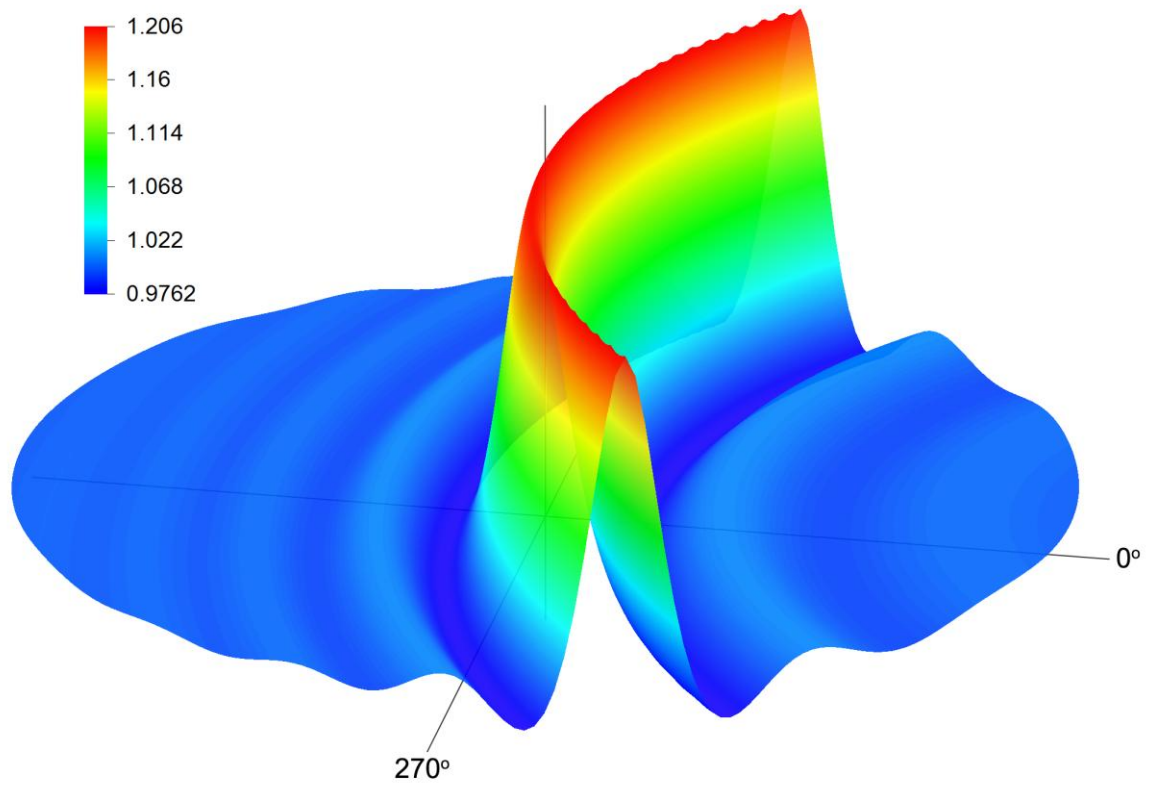


Figura 3.5. Același ca în figura 3.4, dar energia protonului este de 13,7 MeV/u.

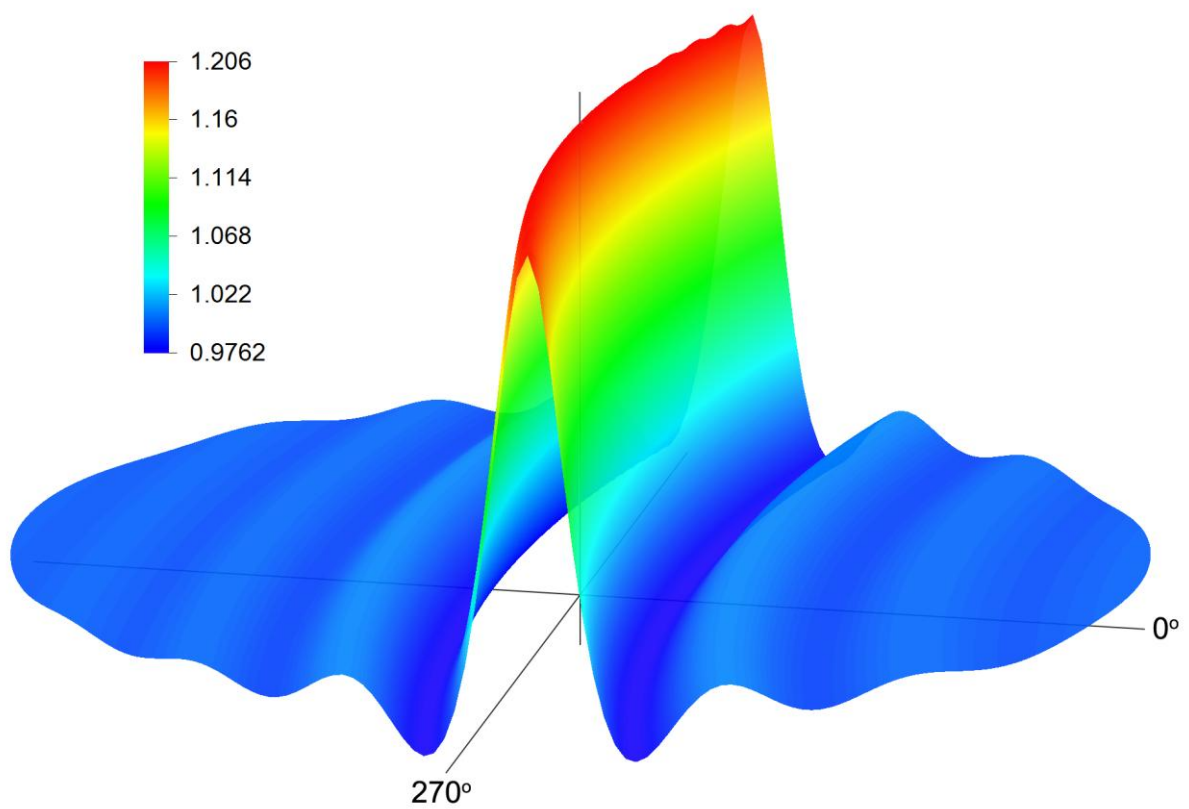


Figura 3.6. Același ca în figura 3.4, dar energia protonului este de 100 MeV/u.

Am comparat raportul secțiunilor eficace al moleculei heteronucleare HeH^+ cu cel al moleculei homonucleare cu H_2 (figurile 3.7-9). Amplitudinea oscilațiilor este mult mai mică, decât în cazul moleculei homonucleare de H_2 calculată cu metoda din [3]. Acest lucru este firesc, deoarece densitatea electronilor este mult mai mare în jurul atomului de heliu decât în jurul protonului, iar efectele de interferență între undele cu amplitudini diferite sunt mai puțin pronunțate decât pentru unde cu amplitudini egale.

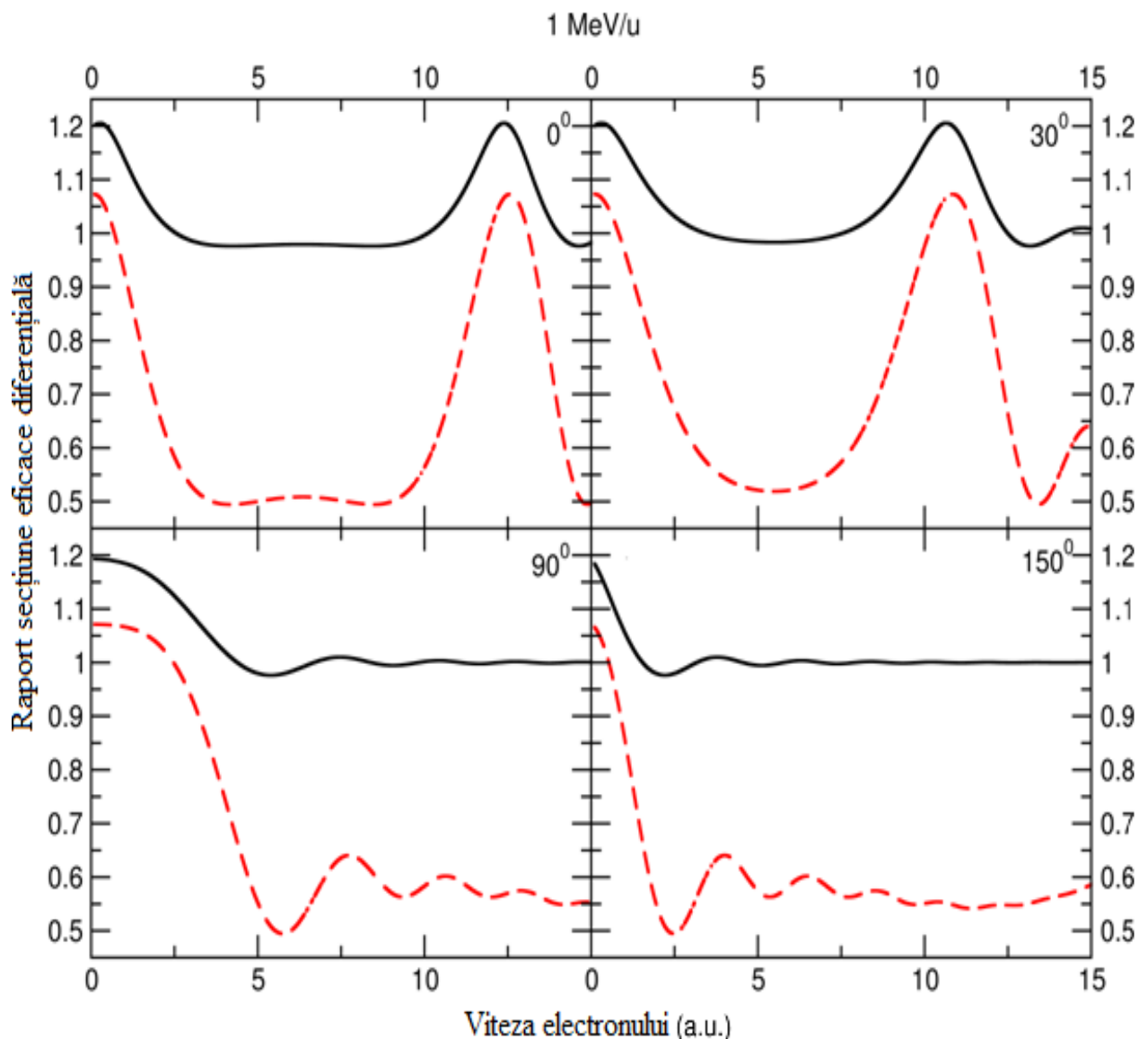


Figura 3.7. Raporturi ale secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului și unghiul de emisie, în cazul ionizării cu proton cu energia 1 MeV/u. Liniile groase (-) reprezintă rezultatele noastre pentru ionizarea ionului molecular heteronuclear HeH^+ . Liniile roșii întrerupte (- -) sunt rezultatele pentru molecula H_2 .

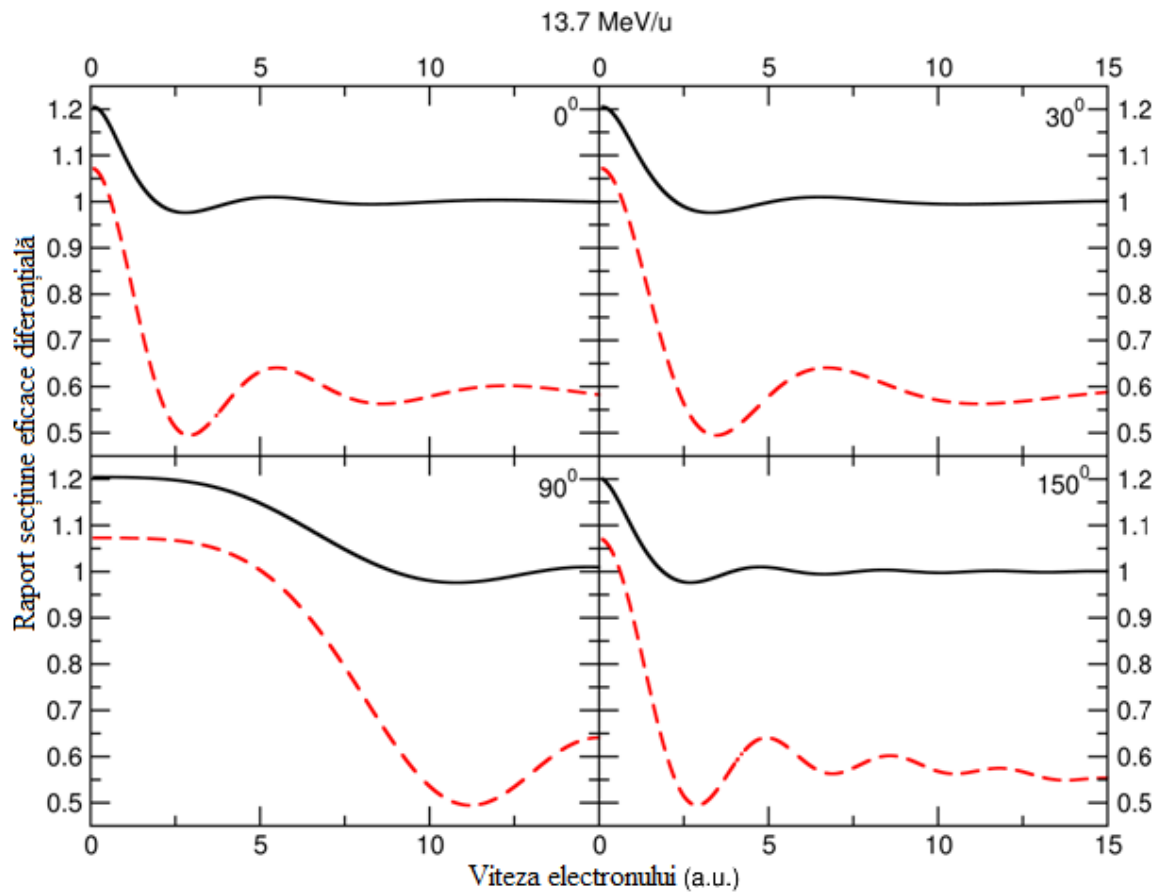


Figura 3.8. Același ca în figura 3.7, dar energia protonului este de 13,7 MeV/u.

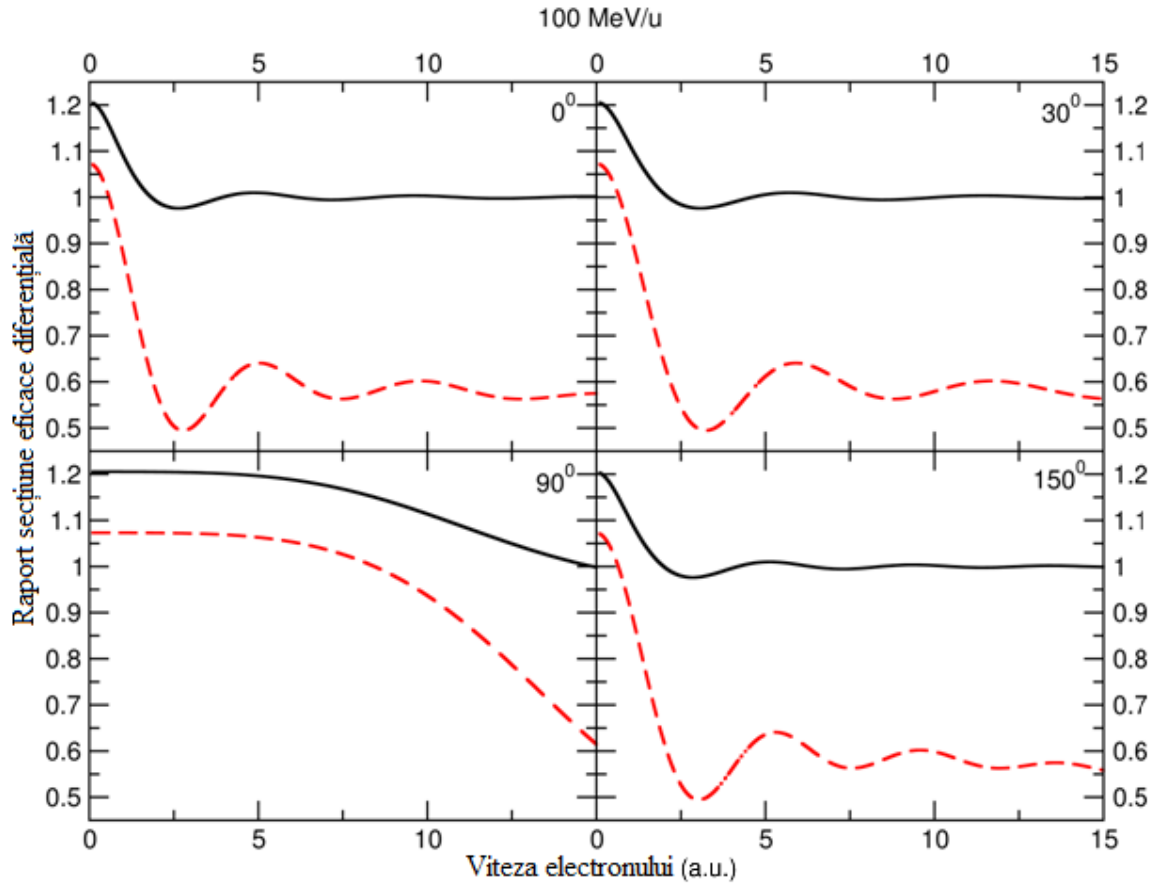


Figura 3.9. Același ca în figura 3.7, dar energia protonului este de 100 MeV/u.

3.3 Concluzii

Am studiat teoretic efectele de interferență în ionizarea ionului molecular HeH^+ , folosind modelul dezvoltat pentru molecula H_2 [3], generalizat pentru moleculele heteronucleare. Efectele de interferență au fost evidențiate prin reprezentarea raportului secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului ejectat. Atât maximele principale cât și cele secundare pot fi calculate și sunt foarte clare pe graficele noastre. Rezultatele noastre sunt în concordanță foarte bună cu rezultatele lui Tachino și colab. [28]. Am comparat rezultatele noastre și cu cele pentru molecula homonucleară H_2 , și conform așteptărilor, oscilațiile la molecula heteronucleară au fost mai puțin pronunțate decât la molecula homonucleară.

4. Efecte de interferență în ionizarea moleculi H₂ prin impact cu ioni rapizi. Compararea diferitelor modele

În acest capitol voi prezenta un model teoretic, mai avansat în comparație cu modelul precedent, bazat pe unde plane (PW), folosit pentru studiul efectelor de interferență în ionizarea moleculei heteronucleare HeH⁺. În modelul anterior, funcția de undă finală a electronului este o undă plană, iar în acest model este îmbunătățită prin unde coulombiene, centrate pe cele două nuclee ale moleculei de H₂. După aceste modificări substanțiale, am reușit o descriere teoretică mult mai exactă a procesului ionizării datorită impactului ionic. Pentru descrierea efectelor de interferență, un alt grup a aplicat un alt model teoretic, denumit CDW-EIS (Continuum Distorted Wave – Eikonal Initial State), efectuând calculele pentru același fenomen [18, 19]. Au obținut rezultate asemănătoare pentru secțiunea eficace diferențială, raportul secțiunii eficace și pentru oscilațiile raportului secțiunii eficace.

Unele aspecte ale interferenței cauzate de impactul ionic nu au fost clarificate, de exemplu, discrepanța între teorie și experiment la unghiul de emisie de 90°, sau dublarea frecvenței [7], etc.

Cu prezenta formulare vom contribui la o înțelegere mai profundă a fenomenelor de interferență în ionizarea moleculelor diatomice prin ioni rapizi. Vom compara rezultatele noastre cu rezultatele modelelor PW și CDW-EIS, împreună cu cele obținute prin formula analitică, și în final vom analiza cauza diferențelor.

4.1. Descriere teoretică

Folosim aproximația perturbativă de ordinul I, considerând că energia proiectilului este mult mai mare în comparație cu energia interacțiunii. Originea sistemului de coordonate o alegem în centrul moleculei. Considerăm numai un singur electron activ. \mathbf{R} este distanța de la origine până la proiectil, \mathbf{r} este poziția electronului activ, iar \mathbf{r}_+ și \mathbf{r}_- sunt distanțele de la nuclee până la electron.

Starea inițială a moleculei o aproximăm ca o combinație liniară a doi orbitali atomici de hidrogen $1s$

$$\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{D}) = N \left(e^{-\alpha|\mathbf{r}-\frac{\mathbf{D}}{2}|} + e^{-\alpha|\mathbf{r}+\frac{\mathbf{D}}{2}|} \right). \quad (4.1)$$

Introducând ultima relația (4.1) în formula (3.3), amplitudinea de tranziție pentru un anumit parametru de impact și orientare a axei moleculare, se împarte în doi termeni:

$$a(\mathbf{b}, \hat{\mathbf{D}}) = a_+(\mathbf{b}, \hat{\mathbf{D}}) + a_-(\mathbf{b}, \hat{\mathbf{D}}), \quad (4.2)$$

unde

$$a_{\pm}(\mathbf{b}, \hat{\mathbf{D}}) = \frac{iZ_p}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iqz} \left\langle \Psi_k(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}|} \right| \Psi_H(\mathbf{r}_{\pm}) \right\rangle, \quad (4.3)$$

sunt amplitudinile de tranziție ale celor doi atomi ai moleculei, unde

$$\Psi_H(\mathbf{r}_{\pm}) = N e^{-\alpha r_{\pm}}. \quad (4.4)$$

Înlocuind

$$\mathbf{r}_{\pm} = \mathbf{r} \pm \frac{\mathbf{D}}{2} \quad (4.5)$$

în relația (3.2), obținem funcția de undă finală, în sistemele de coordonate centrate pe fiecare nucleu

$$\psi_k^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-ikr_{\pm}} e^{\pm ik\frac{D}{2}} = \psi_k^*(\mathbf{r}_{\pm}) e^{\pm ik\frac{D}{2}}. \quad (4.6)$$

În relația amplitudinii (4.3), coordonata z o considerăm de la centrul moleculei. Notăm cu z_{\pm} coordonatele față de nucleele moleculei

$$z_{\pm} = z \pm \frac{D_{\parallel}}{2}, \quad (4.7)$$

astfel,

$$a_{\pm}(\mathbf{b}, \hat{\mathbf{D}}) = e^{\pm i\mathbf{k}_{\perp} \frac{\mathbf{D}}{2}} e^{\mp i q \frac{D_{\parallel}}{2}} \frac{iZ_p}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dz_{\pm} e^{iqz_{\pm}} \left\langle \psi_k(\mathbf{r}_{\pm}) \left| \frac{1}{|\mathbf{r}_{\pm} - \mathbf{R}_{\pm}|} \right| \psi_H(\mathbf{r}_{\pm}) \right\rangle, \quad (4.8)$$

unde \mathbf{R}_{\pm} se referă la distanțele proiectilului măsurate de la cele două nuclee.

Parametrii de impact față de cele două nuclee sunt

$$\mathbf{b}_{\pm} = \mathbf{b} \pm \frac{\mathbf{D}_{\perp}}{2}, \quad (4.9)$$

astfel, amplitudinile de tranziție ale celor doi atomi,

$$a_H(\mathbf{b}_{\pm}, \mathbf{D}) = \frac{iZ_p}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dz_{\pm} e^{iqz_{\pm}} \left\langle \psi_k(\mathbf{r}_{\pm}) \left| \frac{1}{|\mathbf{r}_{\pm} - \mathbf{R}_{\pm}|} \right| \psi_H(\mathbf{r}_{\pm}) \right\rangle. \quad (4.10)$$

Folosind relațiile (4.8) și (4.10), amplitudinile de tranziție relativ la centrul moleculei devin

$$a_{\pm}(\mathbf{b}, \hat{\mathbf{D}}) = e^{\pm i[(k_{\parallel} - q)\frac{D_{\parallel}}{2} + \mathbf{k}_{\perp} \frac{\mathbf{D}_{\perp}}{2}]} a_H(\mathbf{b}_{\pm}, \mathbf{D}). \quad (4.11)$$

Secțiunea eficace diferențială pentru o anumită orientare a axei moleculare o obținem prin integrarea probabilității de tranziție – care este pătratul modulului amplitudinii de tranziție – după parametrul de impact. Luând în considerare că suma

$$e^{i[(k_{\parallel} - q)D_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp} \mathbf{D}_{\perp}]} + e^{-i[(k_{\parallel} - q)D_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp} \mathbf{D}_{\perp}]} = 2 \cos[(k_{\parallel} - q)D_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp} \mathbf{D}_{\perp}], \quad (4.12)$$

obținem secțiunea eficace diferențială

$$\frac{d^2\sigma(\hat{\mathbf{D}})}{d\Omega_k dk} = 2 \frac{d^2\sigma_H}{d\Omega_k dk} + 2 \cos[(k_{\parallel} - q)D_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp} \mathbf{D}_{\perp}] \int d\mathbf{b} a_H^*(\mathbf{b}_+, \mathbf{D}) \cdot a_H(\mathbf{b}_-, \mathbf{D}). \quad (4.13)$$

Primul termen al ecuației de mai sus reprezintă secțiunea diferențială atomică. Al doilea termen poate fi interpretat ca *termen de interferență*, datorită emisiei coerente a electronilor de la cei doi atomi. Factorul cosinus, din ecuația (4.13) se aseamănă cu cel din (3.8), obținut prin calcul analitic, cu diferența, că în prima, în argumentul funcției cosinus apare în plus produsul $\mathbf{k}_{\perp} \mathbf{D}_{\perp}$. În

procedura de mediere a secțiunii eficace după orientarea axei moleculare, acest termen al componentelor perpendiculare tinde să se anuleze, dar această anulare nu este exactă.

Pentru comparație cu experimentul, secțiunea eficace diferențială (4.13) trebuie mediată după orientarea moleculară

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_k dk} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{d^2\sigma(\hat{\mathbf{D}})}{d\Omega_k dk} d\hat{\mathbf{D}}. \quad (4.14)$$

Dacă presupunem că termenul

$$\frac{d^2\sigma_{int}(\hat{\mathbf{D}})}{d\Omega_k dk} = \int d\mathbf{b} a_H^*(\mathbf{b}_+, \mathbf{D}) \cdot a_H(\mathbf{b}_-, \mathbf{D}) \quad (4.15)$$

are o dependență slabă față de orientarea axei moleculare, iar termenul cu componentele perpendiculare în argumentul funcției cosinus se anulează în integrarea după φ_D , pentru secțiunea moleculară obținem formula analitică

$$\frac{d^2\sigma_{analitic}}{d\Omega_k dk} = 2 \frac{d^2\sigma_H}{d\Omega_k dk} \left\{ 1 + G_0 \frac{\sin(k_{\parallel} - q)D_{\parallel}}{(k_{\parallel} - q)D_{\parallel}} \right\}. \quad (4.16)$$

Împărțind ecuația (4.16) cu secțiunea diferențială atomică totală $2 \frac{d^2\sigma_H}{d\Omega_k dk}$, obținem formula analitică a raportului secțiunii eficace diferențiale

$$R = 1 + G_0 \frac{\sin(k_{\parallel} - q)D_{\parallel}}{(k_{\parallel} - q)D_{\parallel}}. \quad (4.17)$$

În cele ce urmează, vom examina valabilitatea acestei ipoteze.

4.2. Rezultate și discuții pentru ionizarea moleculei H_2 cu proiectile F^{9+} , Kr^{33+} și Kr^{34+}

Am efectuat calculele pentru secțiunea eficace diferențială, și pentru raportul secțiunii eficace diferențiale în ionizarea moleculei de H_2 prin proiectile Kr^{33+} cu energia de 68 MeV/u, Kr^{34+} de 60 MeV/u și F^{9+} de 5 MeV/u, pentru diferite unghiuri de ejecție. Comparăm rezultatele noastre cu cele obținute prin aproximația cu unde plane – modelul PW, bazat pe integrarea numerică a probabilităților de ionizare după parametrul de impact și orientarea moleculară, prezentate în [3] – cu calcule CDW-EIS [18, 19], și cu rezultatele, cu ajutorul formulei analitice (4.17).

În figura 4.1 am reprezentat secțiuni eficace diferențiale pentru unghiuri de emisie 30° (stânga) și 150° (dreapta) în funcție de energia electronului ejectat. Comparăm rezultatele noastre cu cele ale modelului PW [3], cu calculele CDW-EIS [18, 19] și cu datele experimentale [1].

Modelul nostru – în care folosim o funcție de undă finală (4.6) cu două centre, situate în cele două nuclee ale moleculei de hidrogen – descrie mai exact starea finală decât modelul PW folosit pentru H_2 [3], dar și în capitolul precedent pentru ionul molecular HeH^+ . Așa cum era de așteptat, descrierea actuală, mai exactă, a stării finale conduce la rezultate în acord cu datele experimentale, și sunt mai precise decât cele ale modelului PW. Se poate observa că, pentru unghiuri mari de ejecție teoria supraestimează valorile experimentale [1]. La fel – cu excepția energiilor mici – valorile secțiunii eficace ale modelului nostru sunt mai mari la ambele unghiuri de emisie, decât cele ale modelului PW.

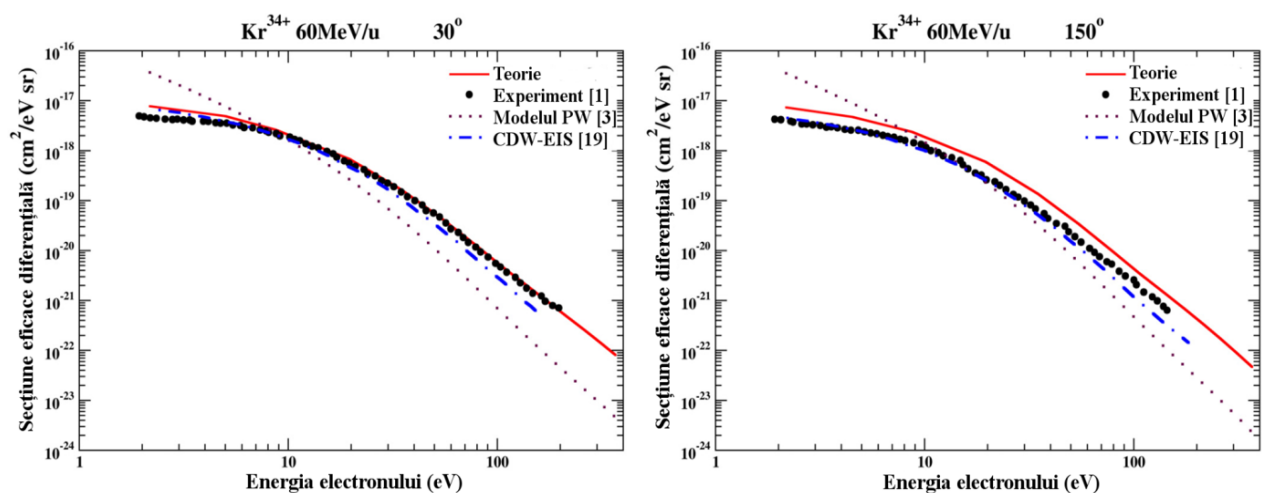


Figura 4.1 - Secțiuni eficace diferențiale în ionizarea moleculei H_2 prin ioni rapizi Kr^{34+} cu energia 60 MeV/u, pentru unghiuri de emisie 30° (stânga) și 150° (dreapta), în funcție de energia electronului. Rezultatele actuale sunt comparate cu cele ale modelelor PW [3] și CDW-EIS [19], precum și cu datele experimentale [1].

În figura 4.2 am reprezentat raportul secțiunii eficace diferențiale – raport pe care l-am obținut prin împărțirea ecuației (4.14), a secțiunii eficace diferențiale, cu două secțiuni eficace atomice efective – în funcție de viteza electronului emis. Comparăm rezultatele noastre cu datele experimentale [1, 4], cu modelul PW [3], cu calcule CDW-EIS [18, 19] și cu calculele obținute prin formula analitică dată de ecuația (4.17). În această ecuație, factorul G_0 este o constantă a cărei valoare am ales-o ca 0,4 pentru a se potrivi cu datele experimentale [1, 4].

Asemănător cu secțiunile eficace diferențiale, valorile rapoartelor sunt întotdeauna mai mari, decât cele obținute prin modelul PW. Ceea ce privește frecvența oscilațiilor, valoarea lor este cu puțin mai mare, comparativ cu cel prin modelul PW, și mult mai mare decât cele date de formula analitică (4.17).

Putem observa, că la viteze mai mici de 1,5 a.u., există o neconcordanță între rezultatele teoretice și cele experimentale. Explicația acestei diferențe este, că în acest interval de viteză, așa cum s-a arătat în [20], împrăștierea electronului pe nuclee devine importantă, și noi nu am inclus aceste efecte în modelul nostru teoretic. De asemenea, corelația electronilor, este importantă în sistemul cu doi electroni ai moleculei de H_2 , care poate influența raportul secțiunii eficace pentru viteze mici [56].

La viteze mai mari de 1.5 a.u., pentru unghiurile 30° și 150° , dar mai ales pentru primul unghi, rezultatele sunt în acord atât cu datele experimentale [1], cât și cu calculele CDW-EIS [18]. La unghiul de emisie 150° , acordul este foarte bun cu rezultatele CDW-EIS [19], dar ambele au frecvență mai mică decât oscilația datelor experimentale [4].

Pentru emisia în jurul unghiului de 90° – al doilea și al treilea panou al figurii 4.2 – există o discrepanță mai mare între modelul nostru și CDW-EIS [19]. Cel mai important rezultat al acestei abordări poate fi observat la aceste unghiuri de ejecție, dar mai ales pentru 90° , unde formula analitică și modelul PW dau un raport constant, în intervalul de viteză studiat, raportul CDW-EIS are o tendință monoton crescătoare cu viteza, în timp ce modelul nostru, în mod surprinzător, reproduce o parte din oscilațiile secundare observate în experiment, la ambele unghiuri de emisie. Pentru a investiga originea acestui comportament surprinzător, pornind de la ecuația (4.13), fără factorul oscilant cosinus

$$\frac{d^2\sigma(\hat{\mathbf{D}})}{d\Omega_k dk} = 2 \left[\frac{d^2\sigma_H}{d\Omega_k dk} + \int d\mathbf{b} a_H^*(\mathbf{b}_+, \mathbf{D}) \cdot a_H(\mathbf{b}_-, \mathbf{D}) \right], \quad (4.18)$$

am calculat raportul secțiunii eficace

$$R' = 1 + \left(\frac{d^2\sigma_{int}}{d\Omega_k dk} \right) / \left(\frac{d^2\sigma_{2H}}{d\Omega_k dk} \right), \quad (4.19)$$

unde $\frac{d^2\sigma_{int}}{d\Omega_k dk}$ este expresia (4.15) mediată pe orientarea axei moleculare.

În figura 4.2 se poate observa, că raportul fără factorul cosinus (4.19) oscilează, nu numai pentru ejecția perpendiculară, dar și pentru unghiul de 60° . Dacă luăm în considerare în plus efectul factorului cosinus, ajungem la oscilații mai complexe ale raportului secțiunii eficace în funcție de viteza electronului ejectat, observate în principal pentru emisia perpendiculară, dar și pentru 60° – ceea ce înseamnă de fapt, că ”constanta” G_0 din ecuația (4.17) se comportă într-o manieră oscilantă, și presupunerea, că ecuația (4.15) are o dependență slabă față de orientarea moleculară, nu este valabilă. Așadar oscilația nu este guvernată doar de funcția sinus, ci este modulată de factorul G_0 .

Cauzele acestor oscilații suplimentare, datorită interferenței dintre undele electronilor emise din vecinătatea celor două nuclee pot fi:

1. diferența de fază $\mathbf{kD} = k_{\parallel}D_{\parallel} + k_{\perp}D_{\perp}$, provenind din ecuația (4.6), care de fapt exprimă diferența de distanță dintre nuclee și detector, sau/și
2. transferul de impuls paralel qD_{\parallel} , provenind de la ecuația (4.7), semnifică diferitele momente de timp pentru transferul de impuls, către electronul din vecinătatea celor două nuclee, datorită faptului că proiectilul ajunge mai târziu la unul dintre nuclee cu $\Delta t = \frac{D_{\parallel}}{v_p}$.

Astfel,

$$qD_{\parallel} = \frac{E_i + \frac{k^2}{2}}{v_p} D_{\parallel} = \left(E_i + \frac{k^2}{2} \right) \Delta t. \quad (4.20)$$

Pe de altă parte, transferul de impuls perpendicular qD_{\perp} , provine din ecuația (4.9), care nu influențează factorul cosinus în ecuația (4.13). Acesta este răspunzător doar pentru fazele diferite ale amplitudinilor, și influențează comportamentul integralei (4.15).

Rezumând cele spuse mai înainte, se poate afirma că oscilațiile produse de factorul cosinus al ecuației (4.13) sunt modulate, datorită diferitelor faze ale amplitudinilor cauzate de transferul de impuls perpendicular către electronul din vecinătatea celor două nuclee.

Deoarece nu am introdus în modelul nostru împrăștierea electronilor pe nucleele moleculei de H_2 , descrierea noastră este de ordinul întâi. Pentru rezultate mai precise și pentru înțelegerea mai profundă a efectelor de interferență, trebuie luat în considerare reîmprăștierea electronului. Acest efect de ordinul doi a fost modelat anterior [7].

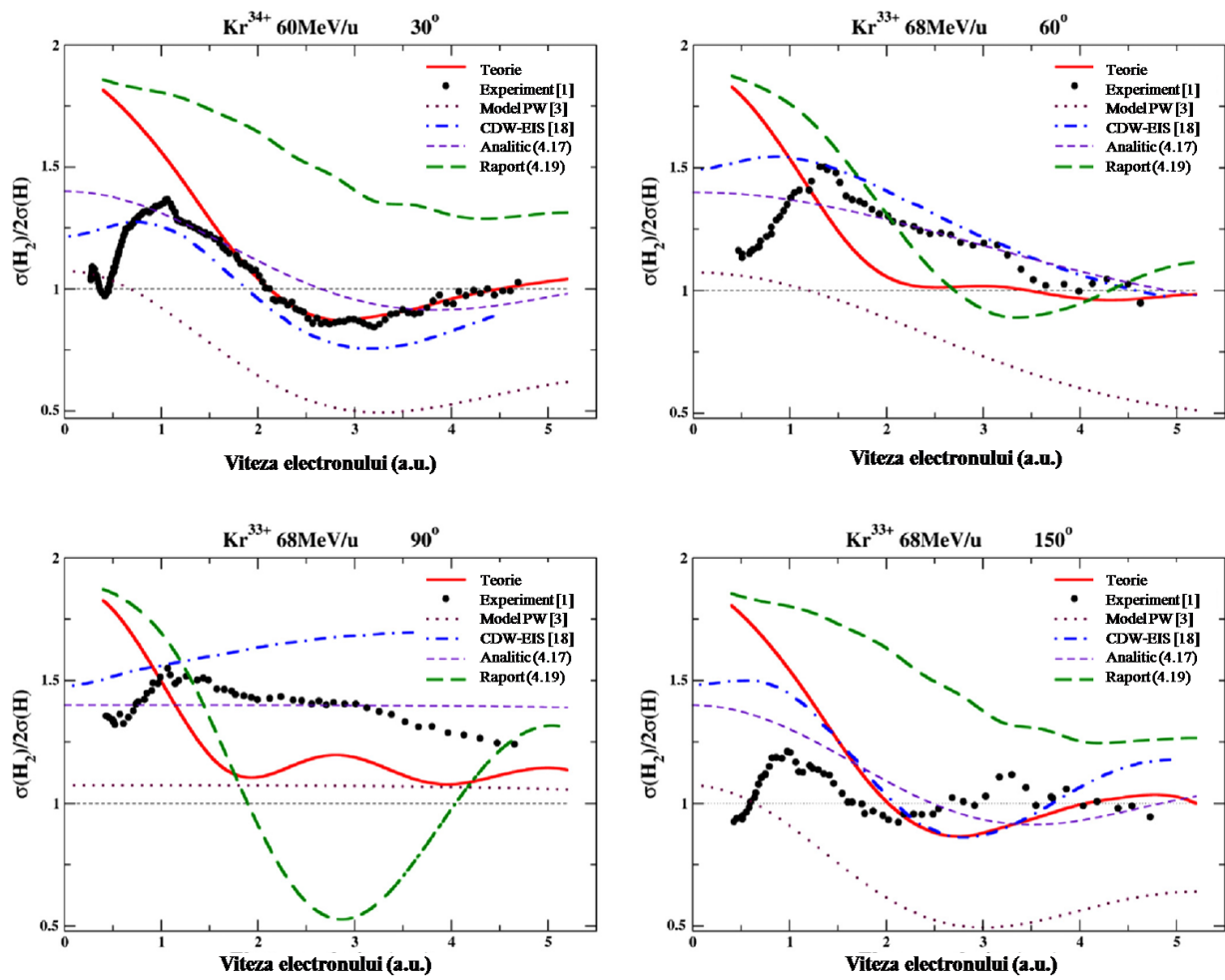


Figura 4.2. Raport al secțiunilor eficace H_2 și $2H$ în ionizarea cu ioni rapizi Kr^{33+} cu energia 68 MeV/u și Kr^{34+} de 60 MeV/u , pentru diferite unghiuri de emisie, în funcție de viteza electronului. Rezultatele actuale sunt comparate cu datele experimentale [1], cu modelele PW [3], CDW-EIS [18], analitic (4.17) și cu raportul ecuației (4.19).

În figurile 4.3 și 4.4 am comparat rezultatele acestui model cu datele experimentale pentru proiectile F^{9+} , cu energia 5 MeV/u [11]. În figura 4.3 am reprezentat secțiunile eficace duble diferențiale pentru ionizarea moleculei de H_2 și pentru doi atomi efectivi de H , împreună cu rezultatele experimentale pentru H_2 [11], în funcție de energia electronului ejectat. Figura 4.3 arată, că rezultatele teoretice pentru moleculă sunt în acord cu cele experimentale, în special pentru unghiuri mici, cu excepția energiilor mici. Pentru unghiuri mai mari de 30° , rezultatele teoretice depășesc pe cele experimentale. Este însă mai important faptul, că efectele de interferență sunt evidente pentru toate unghiurile, mai ales pentru energii mici, unde putem remarca diferența dintre secțiunile eficace diferențiale atomice totale $2H$, și cea a moleculei de H_2 .

În figura 4.4 am comparat rezultatele raportului teoretic al secțiunii eficace diferențiale cu rezultatele experimentale [11], cu modelele CDW-EIS [11] și analitic (4.17), precum și cu raportul ecuației (4.19), în funcție de viteza electronului, pentru aceleași unghiuri de emisie ca și în cazul figurii anterioare, în cazul impactului proiectilelor rapizi F^{9+} , cu energia 5 MeV/u.

Pentru unghiurile de 30° și 150° , oscilațiile prezintă un comportament asemănător, observat în figura 4.2, pentru aceleași unghiuri, și sunt în acord cu datele experimentale [11], și cu rezultatele CDW-EIS [11]. Observăm, că frecvența oscilației crește pentru unghiuri mai mari de 90° , așa cum am văzut și în fig. 4.2, fapt care este confirmat și de formula analitică (4.17). În comparație cu modelul CDW-EIS [11] și cu formula analitică (4.17), valorile modelului nostru teoretic sunt mai mici în comparație cu ambele, dar – ceea ce este cel mai important – rezultatele noastre sunt mai apropiate de cele experimentale [11], atât din punct de vedere al valorii raportului secțiunii eficace, cât și al frecvenței oscilațiilor.

Observăm și în cazul ionizării cu proiectilului F^{9+} , că în jurul unghiului de ejecție de 90° – mai precis de la 60° până la 120° – raportul modelului nostru oscilează, în timp ce raportul analitic, în afara unghiului de emisie de 120° , nu prezintă oscilații, având valoare constantă sau o descreștere monotonă, în intervalul de viteză studiat.

Raportul, fără factorul cosinus (4.19), are același comportament ca în cazul ionizării cu proiectilele Kr^{33+} și Kr^{34+} (fig. 4.2): nu complică oscilațiile simple – de exemplu, pentru unghiuri de ejecție de 30° și 150° – dar modulează factorul cosinus din (4.13).

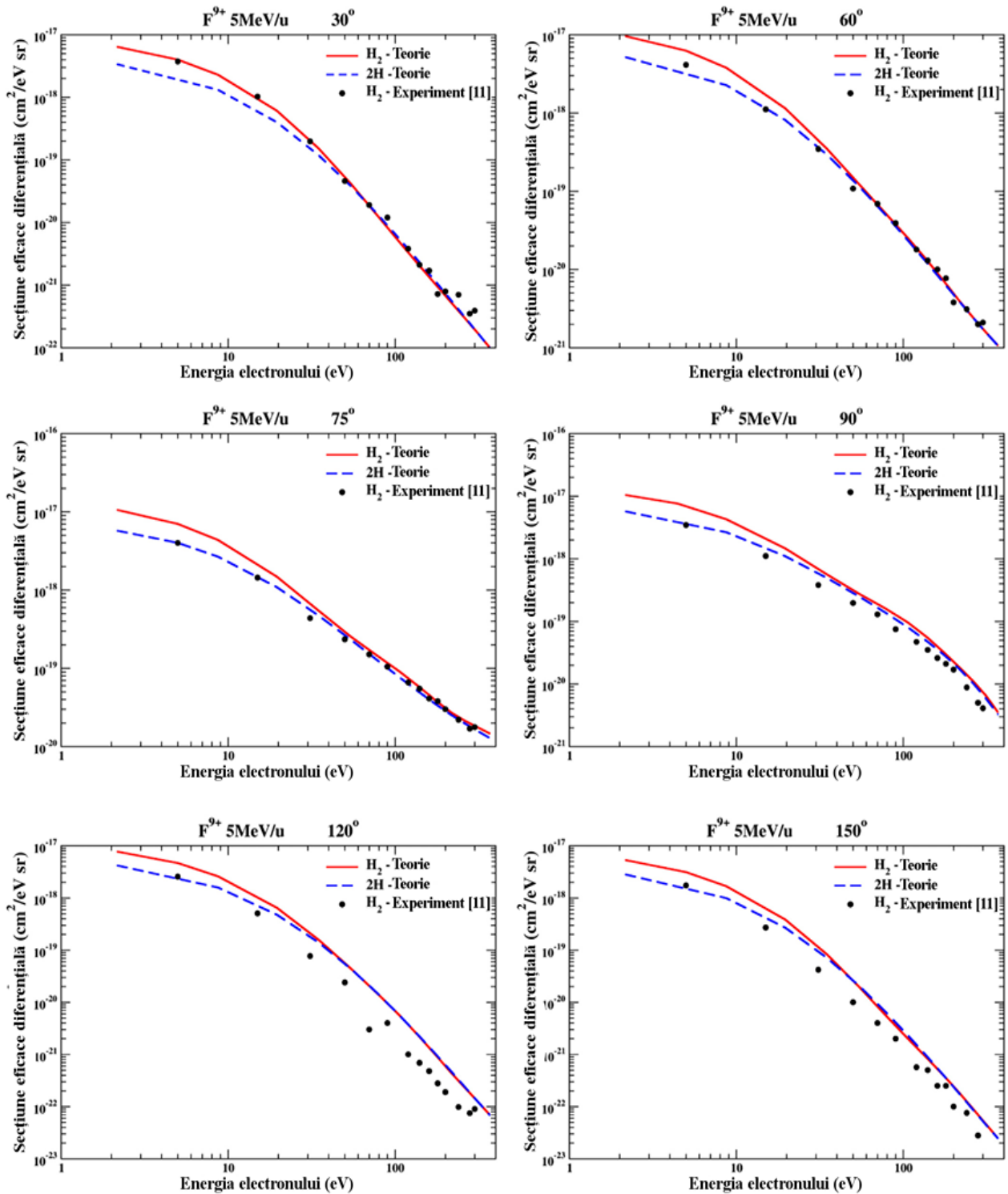


Fig. 4.3. Secțiuni eficace diferențiale în ionizarea moleculei H_2 și a doi atomi efectivi de H cu ioni F^{9+} cu energia 5 MeV/u , în comparație cu datele experimentale pentru molecula H_2 [11], pentru diferite unghiuri de emisie, în funcție de energia electronului.

Trebuie să subliniem faptul, că valorile experimentale pentru unghiul 90° , și pentru viteza electronului de peste 3 a.u. – în special pentru unghiurile de 30° , 120° și 150° – au erori mari. De aceea, comparația cu experimentul – în principal pentru aceste unghiuri de ejecție – nu este foarte convingătoare.

Având în vedere valorile raportului secțiunii eficace ale acestui model, este clar că pentru viteze mai mici de 1 a.u., descrierea noastră de ordinul întâi nu poate să dea rezultate în acord cu cele experimentale [11], fără a lua în considerare corelația între electroni [56] și efectele secundare pe care le-am amintit mai înainte [20].

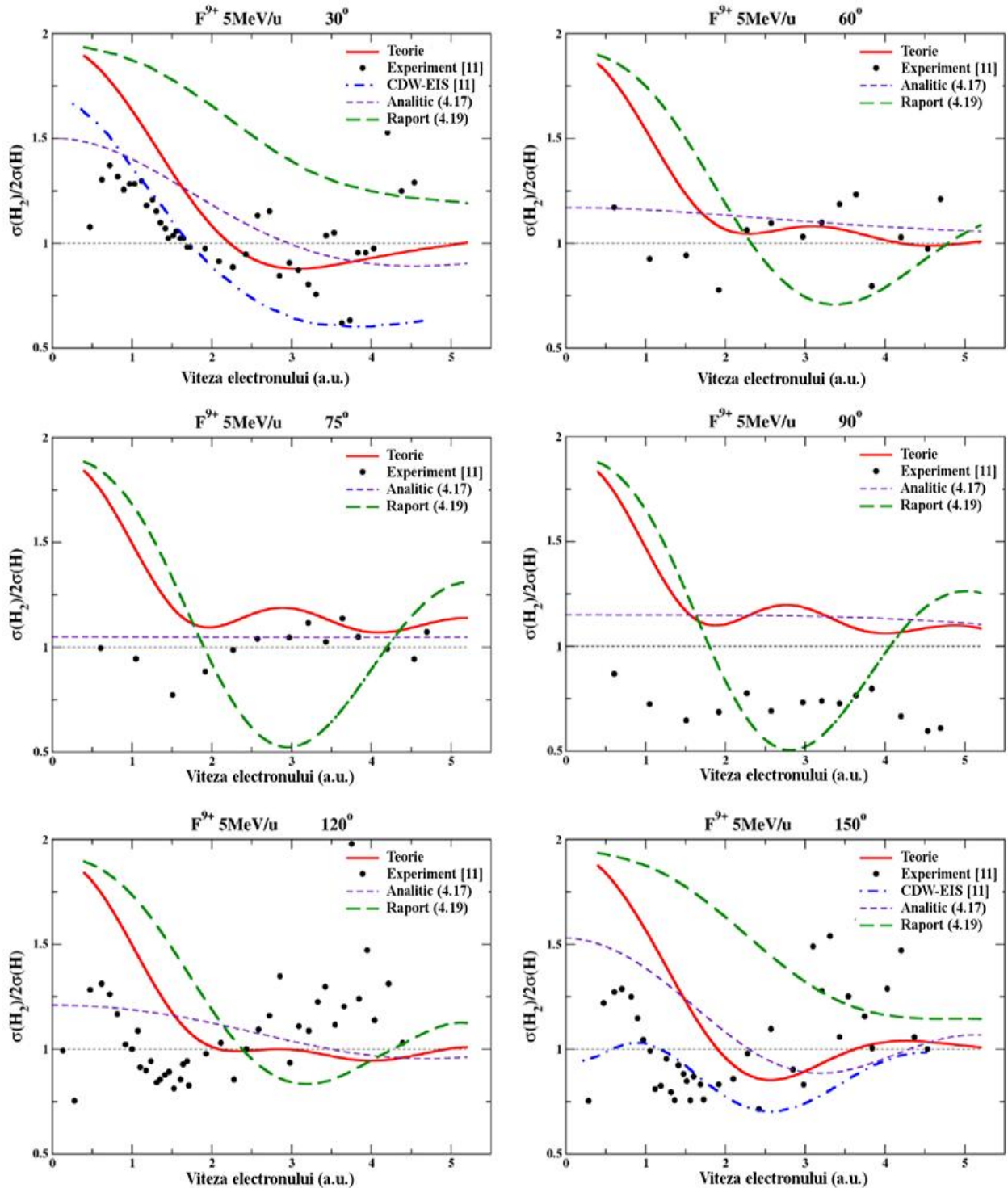


Figura 4.4. Raport al secțiunilor eficace H_2 și $2H$ în ionizarea cu ioni rapizi F^{9+} cu energia 5 MeV/u pentru diferite unghiuri de emisie în funcție de viteza electronului. Rezultatele teoretice sunt comparate cu datele experimentale [11], cu modelele CDW-EIS [11] și analitic (4.17), precum și cu raportul ecuației (4.19).

4.3. Concluzii

Am efectuat calcule pentru ionizarea moleculei de H_2 prin impact cu ioni rapizi (F^{9+} , Kr^{33+} și Kr^{34+}), urmărind în principal efectele de interferență, datorită caracterului cu două centre ale țintei. Rezultatele obținute pentru secțiunile eficace diferențiale sunt în acord cu datele experimentale [1, 11], în principal la unghiuri de ejecție mici.

Am evidențiat efectele de interferență datorate emisiei electronilor coerenți din vecinătatea celor două nuclee, prin reprezentarea grafică a secțiunii eficace diferențiale în funcție de energia electronului ejectat (fig. 4.3), și a raportului secțiunii eficace, în funcție de viteza electronului (figurile 4.2 și 4.4), pentru diferite unghiuri de emisie. Diferența dintre secțiunile eficace diferențiale atomice $2H$ și ale moleculei de hidrogen, în special pentru energii mai mici, este semnul clar al interferenței. Efectele de interferență sunt însă mult mai evidente din privința raportului secțiunii eficace diferențiale. Aceste rezultate sunt în acord cu datele experimentale [1, 11] pentru viteze mai mari de 1,5 a.u.; pentru viteze mai mici, corelația între electroni și efectele de ordinul doi pot fi importante. Frecvența oscilației raportului secțiunii eficace este mai mare decât a raportului analitic și sunt în acord cu rezultatele CDW-EIS [18, 19] și cu datele experimentale [1, 11], pentru unghiuri mai mici de 90° .

Rezultatul principal al prezentei abordări poate fi observat pentru ejecții între $60 - 120^\circ$, unde raportul modelului nostru oscilează, în timp ce raportul analitic (4.17), și calculele CDW-EIS [19] nu prezintă oscilații, având valoare constantă sau o creștere monotonă. Aceste oscilații sunt vizibile și în datele experimentale [1, 11]. Este surprinzător faptul că obținem aceste oscilații secundare într-o aproximare de ordinul întâi, pentru că acestea au fost interpretate ca urmare a reîmprăștierii electronului ejectat pe nuclee [7] și au fost atribuite efectelor de ordinul doi. Cu toate acestea, pentru o descriere precisă a tuturor oscilațiilor secundare observate experimental, trebuie luate în considerare și efectele de ordinul doi.

Pentru a înțelege diferența între modelul PW – pe care l-am aplicat în capitoul precedent pentru molecula heteronucleară HeH^+ – și modelul nostru teoretic mai avansat, folosit pentru investigarea efectelor de interferență la molecula homonucleară H_2 , este indicat să comparăm cele două modele în lumina rezultatelor obținute.

În ambele modele folosim o aproximație de ordinul întâi și a electronilor independenți, însă cu diferite funcții de undă finale. În modelul PW, funcția de undă finală, dată de relația (3.2) este o undă plană. La celălalt model, funcția de undă finală este îmbunătățită (4.6), având două centre, situate în nucleele moleculei de H_2 . Aceste schimbări importante au determinat obținerea unei formule mai precise a secțiunii eficace diferențiale moleculare (4.13), care depinde numai de amplitudinea atomică. Comparațiile realizate între cele două modele cu ajutorul figurilor 4.1-, arată că nu numai valorile secțiunii eficace diferențiale și ale raportului secțiunii eficace diferențiale, dar și frecvența oscilațiilor raportului, sunt mai apropiate de datele experimentale [1, 11], decât rezultatele modelului PW.

În modelul PW, pe care l-am aplicat pentru molecula heteronucleară HeH^+ , s-a folosit aproximația „peaking” – care a permis evaluarea analitică ulterioară a rezultatelor teoretice. Prin urmare, aceste rezultate sunt valabile numai pentru electroni cu viteză relativ mare, de aceea, la viteze mici ale electronilor, rezultatele modelului PW prezintă erori. Figura 4.1 arată clar, că la energii mici ale electronilor, rezultatele modelului nostru în comparație cu modelul PW, sunt mult mai precise.

În concluzie, putem să remarcăm, că descrierea mai bună a stării finale – conform așteptărilor noastre – a condus la rezultate mai exacte. Conform celor spuse mai înainte, putem să afirmăm, că modelul nostru teoretic folosit pentru descrierea efectelor de interferență pentru molecula de H_2 , este mult mai precis decât modelul PW, pe care l-am aplicat pentru molecula heteronucleară.

Concluzii finale

În această teză am studiat și am prezentat efectele de interferență în ionizarea moleculelor diatomice homo- și heteronucleare, datorită impactului cu ioni rapizi, pentru diferite unghiuri de emisie ale electronilor. Oscilațiile cauzate de caracterul bi-centric al moleculelor diatomice, pot fi observate în raportul secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului.

Pentru descrierea emisiei de electroni am aplicat aproximația semi-clasică, conform căreia, proiectilul a fost tratat cu formulele fizicii clasice, iar electronii din țintă cu formalisme ale mecanicii cuantice. Am considerat că interacțiunea dintre proiectil și particula din țintă este o perturbație, și astfel, am calculat secțiunea eficace diferențială.

Am prezentat două modele teoretice: unul pentru molecula heteronucleară HeH^+ , și celălalt pentru molecula homonucleară de H_2 . În primul model, am aplicat pentru molecula HeH^+ , modelul dezvoltat pentru molecula de hidrogen al lui Nagy [3]. Am identificat efectele de interferență prin reprezentarea raportului secțiunii eficace diferențiale în funcție de viteza electronului emis. Rezultatele noastre sunt în concordanță cu cele ale lui Tachino [28], atât din punct de vedere valoric, cât și a frecvenței și al amplitudinii oscilațiilor. Am comparat rezultatele noastre și cu cele ale moleculei homonucleare H_2 ale lui Nagy [3]. Rezultatele noastre arată un consens în privința frecvenței oscilațiilor, dar – conform așteptărilor – amplitudinile la molecula heteronucleară sunt mai mici decât la molecula homonucleară.

În cea de a doua parte a cercetării noastre, am realizat un model teoretic nou, mai avansat, cu o descriere mai precisă a stării finale, pentru prezentarea efectelor de interferență în ionizarea moleculei de hidrogen prin impact ionic. Schimbările realizate, au determinat o formulă mai precisă a secțiunii eficace diferențiale moleculare. Am efectuat calcule pentru ionizarea moleculei H_2 pentru impactul ionilor rapizi – F^{9+} , Kr^{33+} și Kr^{34+} – urmărind în principal efectele de interferență, datorate caracterului cu două centre ale țintei. Conform așteptărilor noastre, rezultatele sunt în acord cu datele experimentale și cu rezultatele altor modele teoretice. Cel mai important rezultat al acestui model este pentru emisia în apropierea unghiului de 90° . În

timp ce alte modele arată a suprimare aproape totală a oscilațiilor, modelul nostru reproduce o parte a acestor oscilații, care se pot observa în rezultatele experimentale. Am obținut aceste oscilații într-o aproximare de ordinul întâi, cu toate că până acum s-a presupus, că acestea sunt consecințele reîmprăștierii electronului ejectat pe nuclee [7], adică au fost atribuite efectelor de ordinul doi. Cu toate acestea, pentru o descriere precisă a tuturor oscilațiilor secundare observate experimental, trebuie luate în considerare și efectele de ordinul doi.

Am comparat rezultatele celor două modele, împreună cu datele experimentale [1, 11], pentru molecula H_2 . Rezultatele modelului nostru mai avansat, sunt mai apropiate de cele experimentale, decât cele ale primului model [3], atât pentru secțiunea eficace diferențială cât și pentru raportul secțiunii eficace diferențiale. În primul model, în care s-a folosit aproximația „peaking”, conform căreia s-au luat în considerare numai electronii cu viteze relativ mari, rezultatele pentru viteze mai mici de 1,5 a.u. sunt imprecise. La aceste energii, rezultatele modelului nostru mai avansat, sunt mai exacte, dar în același timp, diferă de cele experimentale, deoarece efectele de ordinul doi – care la energii mici devin mai importante – nu au fost luate în considerație. Desigur, pentru rezultate mai precise, aceste efecte trebuie luate în calcul.

Cu aceste rezultatele obținute, vom contribui la o înțelegere mai profundă a efectelor de interferență în ionizarea moleculelor diatomice homo- și heteronucleare.

Bibliografie

- [1] N. Stolterfoht, B. Sulik, V. Hoffmann, B. Skogvall, J.Y. Chesnel, J. Rangama, F. Frémont, D. Hennecart, A. Cassimi, X. Husson, A. L. Landers, J. A. Tanis, M. E. Galassi și R. D. Rivarola, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 023201 (2001).
- [2] H. Deutsch, T. Märk, V. Tarnovsky, K. Becker, C. Cornelissen, L. Cespiva și V. Bonacic-Koutecky, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **137**, 77 (1994).
- [3] L. Nagy, L. Kocbach, K. Póra și J. P. Hansen, *J. Phys. B* **35** L453-L459 (2002)
- [4] N. Stolterfoht, B. Sulik, L. Gulyás, B. Skogvall, J. Y. Chesnel, F. Frémont, D. Hennecart, A. Cassimi, L. Adoui, S. Hossain, *Phys. Rev. A* **67**, 030702 (2003)
- [5] S. Hossain, A. S. Alnaser, A. L. Landers, D. J. Pole, H. Knutson, A. Robison, B. Stamper, N. Stolterfoht și J. A. Tanis, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **205**, 484 (2003)
- [6] S. Hossain, A. L. Landers, N. Stolterfoht și J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* **72**, 010701 (2005).
- [7] N. Stolterfoht, B. Sulik, B. Skogvall, J. Y. Chesnel, F. Frémont, D. Hennecart, A. Cassimi, L. Adoui, S. Hossain și J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* **69**, 012701 (2004)
- [8] D. Misra, U. Kadhane, Y. P. Singh, L. C. Tribedi, P. D. Fainstein și P. Richard, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 153201 (2004)
- [9] D. Misra, A. Kelkar, U. Kadhane, A. Kumar, L. C. Tribedi și P. D. Fainstein, *Phys. Rev. A* **74**, 060701 (2006)
- [10] D. Misra, A. Kelkar, U. Kadhane, A. Kumar, Y. P. Singh, L. C. Tribedi și P. D. Fainstein, *Phys. Rev. A* **75**, 052712 (2007)
- [11] S. Chatterjee, D. Misra, A. H. Kelkar, P. D. Fainstein și L. C. Tribedi, *J. Phys. B* **43**, 125201 (2010)
- [12] J. S. Alexander și colab., *Phys. Rev. A* **78**, 060701 (2008)
- [13] J. L. Baran, S. Das, F. Járαι-Szabó, K. Póra, L. Nagy și J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* **78**, 012710 (2008)
- [14] B. Zimmermann, D. Rolles, B. Langer, R. Hentges, M. Braune, S. Cvejanovic, O. Geβner, F. Heiser, S. Korica, T. Lischke, *Nat. Phys.* **4**, 649 (2008)
- [15] S. E. Canton, E. Plésiat, J. D. Bozek, B. S. Rude, P. Decleva și F. Martín, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108**, 7302 (2011)
- [16] M. Winkworth și colab., *Nucl. Instrum. Meth. B* **267**, 373 (2009)
- [17] L. Nagy, S. Borbély și K. Póra, *Braz. J. Phys. volt. 36 no. 2b São Paulo June* (2006)
- [18] M. E. Galassi, R. D. Rivarola, P. D. Fainstein și N. Stolterfoht, *Phys. Rev. A* **66**, 052705 (2002)
- [19] M. E. Galassi, R. D. Rivarola și P. D. Fainstein, *Phys. Rev. A* **70**, 032721 (2004).
- [20] L. Nagy și K. Póra, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **233**, 293 (2005)
- [21] N. Sisourat, J. Caillat, A. Dubois și P. D. Fainstein, *Phys. Rev. A* **76**, 012718 (2007)
- [22] M. F. Ciappina și R.D. Rivarola, *J. Phys. B* **41**, 015203 (2008)
- [23] C. A. Tachino, F. Martín și R. D. Rivarola, *J. Phys. B* **45**, 025201 (2012)
- [24] M. F. Ciappina, O. A. Fojón și R. D. Rivarola, *J. Phys. B* **47**, 042001 (2014)

- [25] L. Sarkadi, *J. Phys. B* **36**, 2153 (2003)
- [26] D. Misra, A. H. Kelkar, S. Chatterjee, L. C. Tribedi, *Phys. Rev. A* **80**, 062701 (2009)
- [27] C. A. Tachino, M. E. Galassi, F. Martín și R. D. Rivarola, *J. Phys. B-At. Mol. Opt.* **42**, 075203 (2009)
- [28] C. A. Tachino, M. E. Galassi, F. Martín și R. D. Rivarola, *J. Phys. B-At. Mol. Opt.* **43**, 135203 (2010)
- [29] A. Dubois, S. Carniato, P. D. Fainstein și J. P. Hansen, *J. Phys. Rev. A* **84**, 012708 (2011)
- [30] A. M. L. Messiah: *Quantum Mechanics*, Editura North-Holland, Amsterdam, 1970
- [31] L. Nagy: *Numerikus és közelítő módszerek az atomfizikában*, Editura Scientia, Cluj-Napoca, 2002
- [32] L. Nagy și L. Végh, *Phys. Rev. A* **46** 284-289, (1992)
- [33] K. Nagy-Póra, **L. Czipa** și L. Nagy, *Two-center Effects in the Ionization of Heteronuclear Molecules*, Studia UBB Physica, Vol. 57, 1, p. 49 – 58, (2012)
- [34] K. Nagy-Póra, **L. Czipa** și L. Nagy, *Interference Effects in the Ionization of Homonuclear and Heteronuclear Molecules*, TIM-11 Conference, Timișoara, Romania, (2011)
- [35] L. Nagy, K. Nagy-Póra și **L. Czipa**, *Interference Effects in the Ionization of Heteronuclear Diatomic Molecules*, 16th HCI Conference, **A b-18**, Heidelberg, Germany, (2012)
- [36] **L. Czipa** și L. Nagy, *Two-center Interference in the Ionization of H_2 by Ion Impact: Comparison of Different Models*, *Phys. Rev. A* **95**, 062709, (2017)
- [37] L. Nagy, **L. Czipa** și K. Nagy-Póra, *Improved Description of the Interference Effects in the Ionization of H_2* , *J. Phys: Conf. Series*, **635**, 032040, (2015)
- [38] L. Nagy și **L. Czipa**, *Improved Model for the Interference Effects in the Ionization of H_2 by Fast Ions*, *J. Phys: Conf. Series*, **875**, 102035, (2017)
- [39] <https://www.maths.tcd.ie/~sheridev/labs/RT.pdf>
- [40] H. Haken, H. C. Wolf: *The Physics of Atoms and Quanta*, Editura Springer-Verlag, Berlin, 2004
- [41] <http://www.hep.wisc.edu/~prepost/407/ramsauer/ramsauer.pdf>
- [42] J. Walker: *Fundamentals of Physics*, Editura John Wiley & Sons, Cleveland, 2003
- [43] W. Demtröder: *Atoms, Molecules and Photons*, Editura Springer-Verlag, Berlin, 2006
- [44] R. B. Singh: *Introduction to Modern Physics, Vol. I*, Editura New Age International Publishers, New Delhi, 2009
- [45] P. A. Tipler, R. A. Llewellyn: *Modern Physics*, Editura W. H. Freeman & Company, New York, 2008
- [46] R. Feynman: *The Feynman Lectures on Physics, vol. 3*, Editura California Institute of Technology, 2006
- [47] C. Jönsson, *Z. Phys.* **161** 454–474 (1961)
- [48] P. G. Merli, G. F. Missiroli și G. Pozzi, *Am. J. Phys.* **44** 306–7 (1976)
- [49] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki și H. Ezawa, *Am. J. Phys.* **57** 117–120 (1989)
- [50] H. Vogel: *Gerthsen Physik*, Editura Springer-Verlag, Berlin, 1977
- [51] P. W. Hawkes, E. Kasper: *Principles of Electron Optics*, Editura Academic Press, London, 1996
- [52] R. Bach, D. Pope, S. Liou și H. Batelaan, *New J. Phys.* **15** 033018 (2013)
- [53] C. E. Kuyatt și T. J. Jorgensen, *J. Phys. Rev.* **130**, 1444 (1963)
- [54] H. A. Bethe, *Ann. Phys. (Leipzig)* **5**, 325 (1930)
- [55] <http://blitiri.blogspot.ro/2012/11/solving-tan-x-x.html>
- [56] O. A. Fojón, J. Fernández, A. Palacios, R. D. Rivarola și F. Martín, *J. Phys. B* **37**, 3035 (2004).