

ETDK-dolgozat

Bálint Zsuzsánna

XXVI. reál- és humántudományi Erdélyi Tudományos Diákköri Konferencia (ETDK)

Fizika szekció

Kolozsvár, 2023. május 18–21.

Töltött részecskék mozgása az anyagban – a nukleáris fékezőerő számítása

Szerzők:

Bálint Zsuzsánna

Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Fizika szak, III. év

Témavezetők:

dr. Nagy László, egyetemi tanár

Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar

Kivonat

A töltött részecskék lefékeződéséért az anyagban az elektronokkal és az atommagokkal való ütközés együttesen felelős. A töltött részecskék mozgása során az atommagnak egységnyi úthossz megtétele során átadott mozgási energiát nukleáris fékezőerőnek hívjuk; kis energiájú lövedékek esetén ez a domináns hatás a részecskék lefékeződésében.

Munkánk során a különböző töltött részecskék, protonok, antiprotonok és alfa-részecskék lefékeződését tanulmányozzuk többféle anyagban az atommagokkal való rugalmas ütközés hatására. Numerikusan kiszámoljuk a nukleáris fékezőerőt, és megvizsgáljuk, hogy hogyan függ a lövedékek energiájától és a céltárgy anyagától. Vizsgáljuk továbbá a különbséget a kis energiájú, pozitívan és negatívan töltött részecskék lefékeződése között, illetve összehasonlítjuk azt az elektronok általi fékező hatással.

XXVI. ERDÉLYI TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA
CONFERINȚA ȘTIINȚIFICĂ STUDENȚEASCĂ DIN TRANSILVANIA (CȘST), EDIȚIA A XXVI-A
26TH TRANSYLVANIAN STUDENTS' SCIENTIFIC CONFERENCE (TSSC)
reál- és humántudományok • științe reale și umane • real and human sciences

KOLOZSVÁR, 2023. MÁJUS 18–21.

Kolozsvári Magyar Diákszövetség • Uniunea Studențească Maghiară din Cluj
400083 Kolozsvár, Petőfi Sándor/Avram Iancu utca 21 • tel./fax: 0755116251
e-mail: etdk@kmdsz.ro, etdk.kolozsvar@gmail.com • honlap/web: <https://etdk.kmdsz.ro>

Témavezetői igazolás

Alulírott *dr. Nagy László* igazolom, hogy *Bálint Zsuzsánna* hallgató a(z) *Töltött részecskék mozgása az anyagban – a nukleáris fékezőerő számítása* című dolgozatot az alulírott szakmai irányításával készítette el, és javaslom az említett tudományos munka bemutatását a XXVI. Reál- és Humántudományi Erdélyi Tudományos Diákköri Konferencia (ETDK) *Fizika* szekciójában.

dr. Nagy László, egyetemi tanár
Babeș–Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar

Kolozsvár, 2024. május 20.

Tartalomjegyzék

Bevezető	1
1. Elméleti leírás	2
2. A modell leírása	9
3. Eredmények	11
3.1. Hélium	11
3.2. Hidrogén	14
3.3. Nehezebb célatomok esete	17
Következtetések és továbbfejlesztési lehetőségek	26
Saját eredmények	27

Bevezető

A részecskék anyagban való lefékeződése a tudomány és a technika számos területén fontos. Pozitív ionok esetén a fékezőerő számítása alapvető fontosságú a hadronterápiás rákkezelésben, az atomi rétegleválasztásban félvezetők esetén, és az űrkutatásban a hosszútávú sugárzás elleni védelemben [1]. Az antiprotonok lelassítása (a MeV, illetve keV nagyságrendű energiákról termikus energiákra) a stabil antihidrogén atomok előállításának alapját képezi. A lassítás első lépésében vékony fékezőrétegeket használnak, hogy a részecskék mozgási energiáját néhány keV-ra csökkentsék, ennek a technológiának azonban még kicsi a hatékonysága. Az új, hatékonyabb módszerek kidolgozása megköveteli, hogy megértsük az antiprotonok anyagban való lefékeződését [2].

A töltött részecskék anyagban való lefékeződésének tárgyalásánál megkülönböztetjük a beeső részecskék atommagokon való rugalmas szóródása miatt bekövetkező energiaveszteséget (nukleáris fékezés), illetve az elektronrendszer gerjesztése és ionizációja miatt bekövetkező elektronfékezést [3]. Nagy energián a részecskék lefékeződésében az elektronfékezés a domináns hatás, alacsonyabb energiákon azonban az energiaveszteségben nagy szerepet kap a nukleáris fékezés, ennek értéke akár meg is haladhatja az elektronfékezését. A nukleáris fékezés nehezen mérhető; a kísérletekben a részecskék teljes energiaveszteségét mérik, a nukleáris fékezéssel kapcsolatban kevés kísérleti adat áll rendelkezésre [3].

Jelen dolgozatban elsősorban a nukleáris fékezőerővel foglalkozunk. Mivel ez amiatt jelentkezik, mert a lövedék rugalmas ütközés során mozgási energiát ad át az atomnak, jól leírható egy klasszikus ütközés modellel. Az egyes számítások abban különböznek egymástól, hogy milyen potenciált veszünk figyelembe a lövedék és az atom között. Mi is egy klasszikus modellt alkalmazunk, amiben a célatom és a lövedék között fellépő elektrosztatikus kölcsönhatás okozza az energiaveszteséget. Kiszámoljuk a nukleáris fékezőerőt proton és antiproton lövedékekre H, He, Be, C, N, O, Ne, Al, illetve Si céltárgyak esetén. Megvizsgáljuk a különbséget a proton és az alfa részecske lefékeződése között héliumban. Hidrogén esetén megvizsgáljuk, hogyan változik a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet különböző potenciálok alkalmazásával. A nukleáris fékezőerőt numerikusan számoljuk ki, majd összehasonlítjuk az eredményeket más meglévő modellek eredményeivel.

1. Elméleti leírás

A töltött részecskék az anyagban való haladás során lefékeződnek. Az N atomsűrűségű és Δx vastagságú anyagrétegen áthaladva az eredetileg $E_p = \frac{1}{2}m_p v_p^2$ energiájú monoenergetikus részecskenyaláb energiát veszít; az energiaveszteséget a $P(\varepsilon)$ energiaveszteség-eloszlás jellemzi [1], ahol $\varepsilon = E - E_p$ a céltárgy atomjainak átadott energia. A $P(\varepsilon)$ eloszlás a $d\sigma(\varepsilon)/d\varepsilon$ differenciális energiatranszfer hatáskeresztmetszettől függ:

$$P(\varepsilon) = N \Delta x \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon}. \quad (1)$$

Az átlagos energiaveszteség [1] megadható, mint

$$\langle \Delta E \rangle = N \Delta x S, \quad (2)$$

ahol S a fékezési hatáskeresztmetszet:

$$S = \int \varepsilon \frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon. \quad (3)$$

Az egységnyi megtett úthosszra vonatkoztatott átlagos energiaveszteséget fékezési erőnek nevezzük. A (2) egyenlet alapján megadható a fékezési erő:

$$-\frac{\langle \Delta E \rangle}{\Delta x} = N(-S), \quad (4)$$

ahol a negatív előjel a lövedékatomok által a célatomoknak átadott energiát jelzi.

A nagy energiájú töltött részecskék elsősorban az atomok elektronjaival való kölcsönhatás miatt fékeződnek, ezeknek gerjesztés és ionizáció során adnak át energiát. Az elektronikus fékezőerő első kvantummechanikai meghatározása Bethe nevéhez fűződik. Ebben a megközelítésben az anyagban nemrelativisztikus v sebességgel haladó nehéz részecskékre a fékezési erőt a következő képlet adja meg [4]:

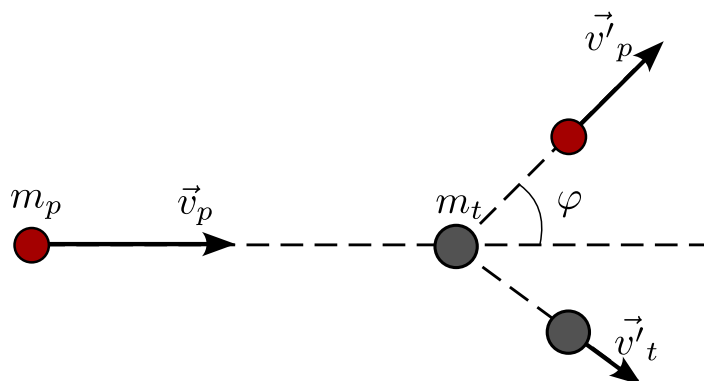
$$-\frac{dE}{dx} = N \frac{4\pi k_e^2 e^4 Z_p^2 Z_t^2}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2m_e v^2}{\bar{E}} \right), \quad (5)$$

ahol k_e a Coulomb-állandó, e az elemi elektromos töltés, m_e az elektron tömege, Z_t a célatom (target) rendszáma, $Z_p e$ a beeső lövedék töltése és $\bar{E}$ a célatom átlagos gerjesztési energiája. Ez

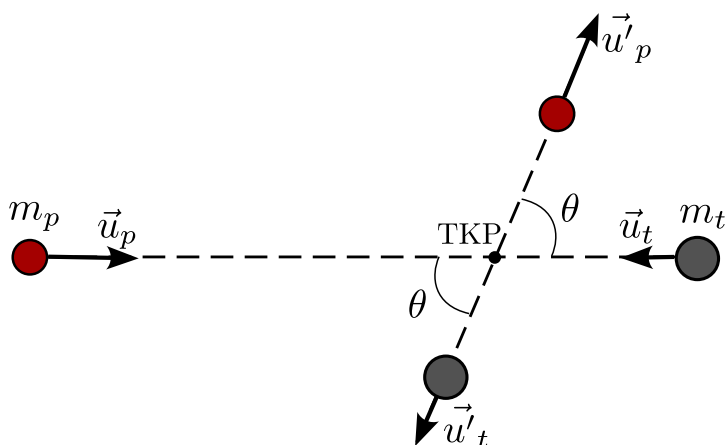
a képlet csak kellően nagy lövedéksebesség esetén alkalmazható.

Nukleáris fékezés

A nukleáris fékezés a lövedék és az atom rugalmas ütközése következtében jelenik meg. Az atomnak átadott energia a lövedék szórási szögétől függ, amint azt alább levezetjük.



1. ábra. Rugalmas ütközés a laboratóriumi koordináta-rendszerben.



2. ábra. Rugalmas ütközés a tömegközépponti koordináta-rendszerben.

A laboratóriumi koordináta-rendszerben a lövedék kezdősebessége $\vec{v}_p$, a célatom kezdetben nyugalomban van $\vec{v}_t = 0$. Az ütközés után a lövedék a beesési irányhoz képest φ szögben szóródik, a sebessége ütközés után $\vec{v}'_p$, míg a célatom sebessége $\vec{v}'_t$ lesz. A tömegközéppont sebessége a laboratóriumi koordináta-rendszerben [5]:

$$\vec{v}_{TKP} = \frac{m_p \cdot \vec{v}_p}{m_p + m_t}. \quad (6)$$

A tömegközépponti rendszerben felírhatjuk az impulzusmegmaradás törvényét a rendszer

ütközés előtti és ütközés utáni teljes impulzusára:

$$0 = m_p \cdot \vec{u}_p + m_t \cdot \vec{u}_t = m_p \cdot \vec{u}'_p + m_t \cdot \vec{u}'_t. \quad (7)$$

Az impulzusmegmaradás tételéből a tömegközépponti koordináta-rendszerben felírt sebességekre a következő összefüggések adódnak:

$$\vec{u}_p = -\frac{m_t}{m_p} \cdot \vec{u}_t \quad (8)$$

$$\vec{u}'_p = -\frac{m_t}{m_p} \cdot \vec{u}'_t. \quad (9)$$

Az energiamegmaradás tétele a tömegközépponti rendszerben a részecskék ütközés előtti és ütközés utáni teljes mozgási energiájára felírható, mint:

$$\frac{1}{2} m_p \cdot u_p^2 + \frac{1}{2} m_t \cdot u_t^2 = \frac{1}{2} m_p \cdot u'^2_p + \frac{1}{2} m_t \cdot u'^2_t. \quad (10)$$

Behelyettesítve a (8) és a (9) összefüggéseket:

$$\frac{m_t}{m_p} \cdot u_t^2 + u_t^2 = \frac{m_t}{m_p} \cdot u'^2_t + u'^2_t,$$

a tömegközépponti rendszerben felírt sebességekre a következő összefüggések adódnak:

$$u_t = u'_t,$$

$$u_p = u'_p.$$

A két részecske relatív sebessége független a vonatkoztatási rendszertől:

$$\vec{v}_p - \vec{v}_t = \vec{u}_p - \vec{u}_t. \quad (11)$$

Mivel $\vec{v}_t = 0$, a (8) összefüggés alapján felírható:

$$\vec{v}_p = \vec{u}_p - \left(-\frac{m_p}{m_t} \right) \vec{u}_p = \frac{m_p + m_t}{m_t} \vec{u}_p.$$

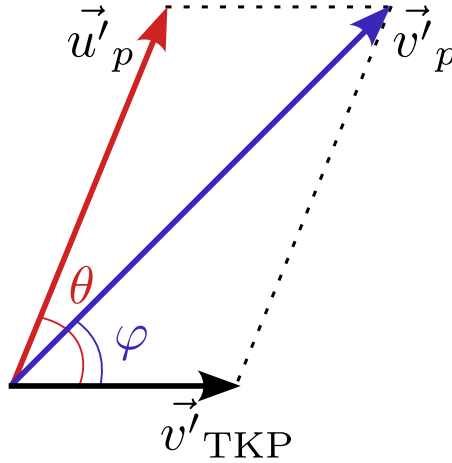
Innen kifejezhetjük a részecskék tömegközépponti sebességeit a laboratóriumi sebességek

segítségével:

$$\vec{u}_p = \frac{m_t}{m_p + m_t} \vec{v}_p = \frac{\mu}{m_p} \vec{v}_p, \quad (12)$$

$$\vec{u}_t = -\frac{m_p}{m_p + m_t} \vec{v}_p = -\frac{\mu}{m_t} \vec{v}_t, \quad (13)$$

ahol $\mu = \frac{m_p \cdot m_t}{m_p + m_t}$ a két részecskéből álló rendszer redukált tömege.



3. ábra

A lövedék laboratóriumi és tömegközépponti rendszerbeli sebességei közötti kapcsolatot a tömegközéppont sebességével adhatjuk meg:

$$\vec{u}'_p = \vec{v}'_p - \vec{v}_{TKP} \longrightarrow \vec{v}'_p = \vec{u}'_p + \vec{v}_{TKP}. \quad (14)$$

A (14) összefüggés a lövedék beesési irányával párhuzamos és az arra merőleges irány szerint két összefüggésre bontható fel:

$$v'_p \cdot \cos \varphi = u'_p \cdot \cos \theta + v_{TKP}, \quad (15)$$

$$v'_p \cdot \sin \varphi = u'_p \cdot \sin \theta. \quad (16)$$

A (15) és (16) egyenletekből kifejezhetjük a lövedék laboratóriumi koordináta-rendszerbeli szórási szögét:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{u'_p \cdot \sin \theta}{u'_p \cdot \cos \theta + v_{TKP}} = \frac{u_p \cdot \sin \theta}{u_p \cdot \cos \theta + v_{TKP}} \quad (17)$$

A (6) és (12) összefüggéseket felhasználva az egyenletből kiküszöbölhető a sebességek

nagysága:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + \frac{m_p}{m_t}}. \quad (18)$$

A (14) alapján felírhatjuk a koszinusztételt:

$$v_p'^2 = u_p'^2 + v_{TKP}^2 + 2 \cdot u_p' \cdot v_{TKP} \cdot \cos \theta. \quad (19)$$

Behelyettesítve az összefüggésbe a (6), (12) kifejezéseket:

$$v_p'^2 = \frac{m_t^2 + m_p^2 + 2 \cdot m_p \cdot m_t \cos \theta}{(m_p + m_t)^2} v_p^2$$

A lövedék energiavesztését kifejezhetjük az ütközés előtti és utáni lövedéksebességek alapján:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{2} m_p \cdot v_p'^2 - \frac{1}{2} m_p \cdot v_p^2 = \frac{1}{2} m_p \cdot v_p^2 \left[\frac{m_t^2 + m_p^2 + 2 \cdot m_p \cdot m_t \cdot \cos \theta}{(m_p + m_t)^2} - 1 \right] = \\ &= -E_0 \frac{2 \cdot m_p \cdot m_t (1 - \cos \theta)}{(m_p + m_t)^2} = -2 \cdot \frac{m_p \cdot m_t}{(m_p + m_t)^2} (1 - \cos \theta) \cdot E_0. \end{aligned}$$

Felhasználva, hogy $1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$:

$$\Delta E = -4 \frac{m_p \cdot m_t}{(m_p + m_t)^2} E_0 \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (20)$$

A szórási szög meghatározásához tekintsük a két részecskét a tömegközépponti koordináta-rendszerben, egymástól r távolságra [6]. A két részecske közötti kölcsönhatást a $V(r)$ potenciál írja le. A rendszer Hamilton-függvénye felírható:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r). \quad (21)$$

Az impulzusvektor felbontható az r , Θ és Φ koordinátákhoz tartozó impulzusok szerint:

$$\vec{p}^2 = p_r^2 + r^{-2} p_\Theta^2 + r^{-2} p_\Phi^2 \csc^2 \Theta,$$

ahol $p_r = \mu \dot{r}$, $p_\Theta = \mu r^2 \dot{\Theta}$ és $p_\Phi = \mu r^2 \dot{\Phi} \sin^2 \Theta$. Felhasználva, hogy a teljes J impulzusnyomaték

megmaradó mennyiség:

$$\vec{p}^2 = p_r^2 + r^{-2} J^2, \quad (22)$$

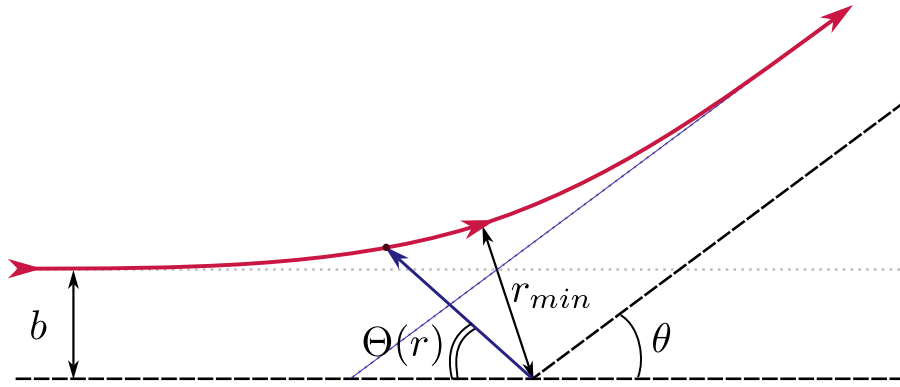
$$J^2 = p_\Theta^2 + p_\Phi^2 \csc^2 \Theta.$$

A Hamilton-függvény radiális komponensére felírhatjuk a Hamilton-Jacobi egyenletet [6]:

$$\frac{1}{2\mu} \left(\frac{dS_r}{dr} \right)^2 + \frac{1}{2\mu r^2} J^2 + V(r) = E, \quad (23)$$

ennélfogva:

$$S(r, \Theta) = \int dr [2\mu(E - V) - r^{-2} J^2]^{1/2} + J\Theta. \quad (24)$$



4. ábra. A lövedék pályája.

A (24) egyenletet J szerint deriválva a pályaegyenlethez jutunk:

$$\Theta = J \int_r^\infty dr r^{-2} (p^2 - 2\mu V - r^{-2} J^2)^{-1/2}, \quad (25)$$

ahol p a részecske aszimptotikus impulzusa. A mozgás szimmetrikus az r_{min} minimális távolságra. A 4. ábra alapján a θ szórási szög megadható, mint:

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_{min}}^\infty dr r^{-2} [(p^2 - 2\mu V) J^{-2} - r^{-2}]^{-1/2}, \quad (26)$$

ahol r_{min} az r legnagyobb értéke, amelyre a gyök alatti mennyiség értéke nulla lesz és a minimális távolság, amire a lövedék megközelíti a céltárgyat. Aszimptotikus esetben felírhatjuk az impulzusnyomatékot a b impaktparaméterrel:

$$J = pb = \sqrt{2\mu E} b. \quad (27)$$

A (27) kifejezést a (26) egyenletbe behelyettesítve a szórási szög kifejezése:

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} dr r^{-2} \left[b^{-2} \left(1 - \frac{V}{E} \right) - r^{-2} \right]^{-1/2}. \quad (28)$$

2. A modell leírása

A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet megadható, mint a céltárgy atomjainak átadott energia integrálja a teljes impaktparaméter intervallumon [4]:

$$S_n = 2\pi \int_0^\infty b T(b) db. \quad (29)$$

Az atomnak átadott energia a (20) összefüggés alapján:

$$T(b) = 4 \frac{m_p \cdot m_t}{(m_p + m_t)^2} E_0 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right). \quad (30)$$

A θ szórási szög a (28) alapján megadható, mint

$$\theta(b) = \pi - 2 \int_{r_{min}}^\infty \frac{b dr}{r^2 \sqrt{1 - V(r)/E_c - b^2/r^2}}, \quad (31)$$

ahol $E_c = \frac{E_0 m_t}{m_p + m_t}$ a tömegközépponti energia, és $V(r)$ az atom és a lövedék közötti potenciál. A legkisebb r_{min} távolságot a nevezőben szereplő gyök alatti mennyiség legnagyobb gyöke adja meg.

A (30) képletben szereplő szórási szöget először megpróbáluk a töltött részecske egyszerű, atommagon való Coulomb-szóródásából kiszámolni, ekkor azonban a fékezési hatáskeresztmetszetre egy divergens integrált kaptunk a Coulomb-potenciál végtelen hatótávolsága miatt. Szükséges volt tehát az atommag potenciálja mellett figyelembe venni az elektronfelhő árnyékoló hatását is.

A szórási szög és ebből következően a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet érzékenyen függ a $V(r)$ potenciáltól, a különböző modellek a használt potenciálban különböznek egymástól. Az egyik módszer szerint az atomi elektronok hullámfüggvényének ismeretében kiszámítjuk a töltéssűrűség térbeli eloszlását, és ebből meghatározzuk az atom által keltett potenciált. Ez a módszer nem veszi figyelembe azt, hogy a lövedék hatása deformálja az elektronfelhőt, módosítva a kölcsönhatást. Ez a befagyott elektronfelhő (frozen core) közelítés. Így számolják pl. az antiproton nukleáris fékeződését héliumban a [4] cikkben.

A másik módszer a lövedék minden egyes helyzetére kiszámolja (sztatikusan) a lövedék-atom-kölcsönhatást, figyelembevéve az elektronfelhő deformálódását. Így számolnak a [3] cikkben pozitív ionok és semleges atomok esetén és a [2] cikkben antiproton lövedék esetén. Alacsonyabb sebességű lövedékeknél ez a modell közelebb áll a valósághoz, mert az

elektronfelhőnek van ideje követni a lövedék mozgását. Nagyobb sebesség esetén azonban az elektronfelhő közelebb marad a befagyott állapothoz, tehát a első módszer állhat közelebb a valósághoz.

A dolgozatban hidrogén esetén összehasonlítjuk a kétféle módon számolt potenciállal kapott eredményeket, hélium esetén csak a befagyott elektronfelhő modellel számoltunk, míg a nagyobb rendszámú elemeknél az antiproton lövedékre számolt potenciált [2] használjuk minden típusú lövedékre.

3. Eredmények

A továbbiakban az általunk kapott eredményeket közöljük, melyeket a befagyott elektronfelhő közelítésből, illetve az antiprotonra számolt potenciálokat [2] felhasználva kaptunk. A felhasznált képleteket atomi egységekben írjuk fel.

3.1. Hélium

A hélium fékezési hatáskeresztmetszetének kiszámításánál a befagyott elektronfelhő közelítést alkalmaztuk. Az innen kapott kölcsönhatási potenciál protonra:

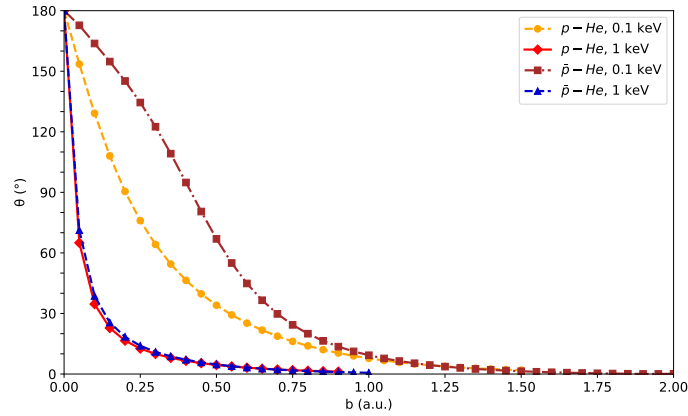
$$V(r) = e^{-2\alpha r} \left(2\alpha + \frac{2}{r} \right),$$

ahol $\alpha = \frac{27}{16} \approx 1,6875$.

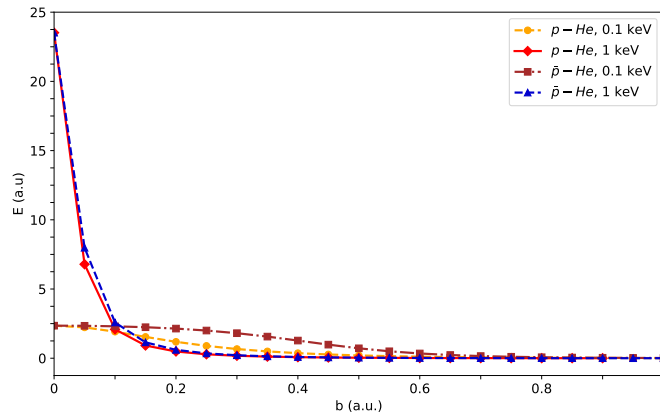
A modell keretein belül megvizsgáltuk a 0,1 keV és 1 keV energiájú protonok, illetve antiprotonok szóródási szögét az impaktparaméter függvényében. A proton és az antiproton az atommag terében ellentétes irányban térül el; emellett azonban alacsony energiájú lövedékeknél a szórási szög nagyságában is eltéréseket tapasztalunk. Az 5. ábrán jól látható, hogy a 0,1 keV energiájú antiprotonok azonos impaktparaméter mellett nagyobb szögben szóródnak (ellentétes irányban) a protonokhoz képest. Ennek oka, hogy az atommag vonzza az antiprotont, így a minimális távolság kisebb lesz, és a lövedék erősebb potenciált érez. Az 1 keV energiájú lövedékek esetén a szórási szög jóval kisebb, és ebben a tartományban már nem látunk lényeges eltérést a protonok és antiprotonok szóródásában.

Megvizsgáltuk az egyes lövedékek energiaveszteségének impaktparamétertől való függését. A 6. ábrán látható, hogy az energiaveszteséget lényegesen befolyásolja a lövedék kezdeti energiája: a gyorsabb 1 keV energiájú lövedékek energiájuk nagy részét a célatom közelében veszítik el egy gyorsan lecsengő függvény szerint, a kisebb energiájú részecskék hosszabb ideig hatnak kölcsön az atommal, és az energiaveszteségük az impaktparaméter szerint egy lassabban lecsengő függvény. A 0,1 keV energiájú proton és antiproton energiaveszteségének impaktparamétertől való függése lényegesen különbözik; az energiaveszteség az impaktparaméter növekedésével a kis energiájú antiprotonok esetén csökken a leglassabban. Ez annak tudható be, hogy az atommag vonzza a negatív töltésű antiprotont.

Numerikusan kiszámoltuk a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet értékét héliumban a 10

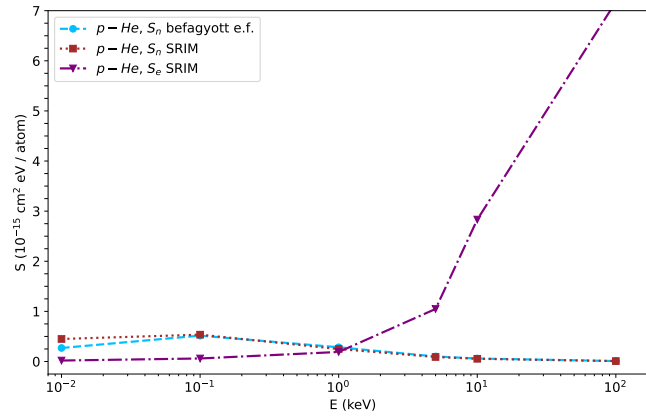


5. ábra. 0.1 keV és 1 keV energiájú protonok, illetve antiprotonok szóródása He célatomról az impaktparaméter függvényében. Megjegyzés: a θ szórási szög ellentétes előjelű pozitívan, illetve negatívan töltött részecskék esetén. Az egyszerűbb összehasonlítás érdekében itt a szórási szög abszolútértékét tüntettük fel.

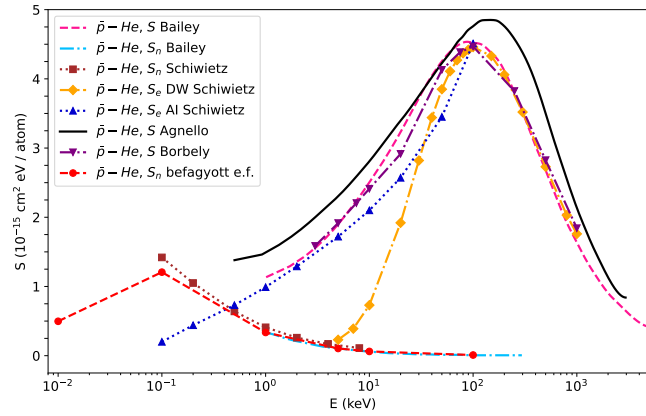


6. ábra. 0.1 keV és 1 keV energiájú protonok, antiprotonok energiavesztése He célatomról való szóródás következtében az impaktparaméter függvényében.

eV, 100 eV, 1 keV, 5 keV, 10 keV és 100 keV energiájú protonokra és antiprotonokra. A 7. ábrán lévő, összehasonlításból látható, hogy az általunk proton lövedékre kapott fékezési hatáskeresztmetszet a legalacsonyabb energiát leszámítva jó egyezést mutat a SRIM program eredményével. Azt is megállapítjuk, hogy az 1 keV-nél kisebb energiájú protonokra számolt nukleáris fékezés nagyobb, mint a SRIM [7] programból kapott elektronfékezés. Ez egy széles körben használt program a pozitív ionok fékezőerejének kiszámítására, félempirikus módszerrel. A 7. ábrán jó egyezést találunk az általunk használt befagyott elektronfelhő modell eredményei és a Bailey, illetve Schiwietz által antiprotonra számolt nukleáris fékezés között. Ebben az esetben is elmondható, hogy a nukleáris fékezés értéke kis energián meghaladja az elektronfékezés értékét.

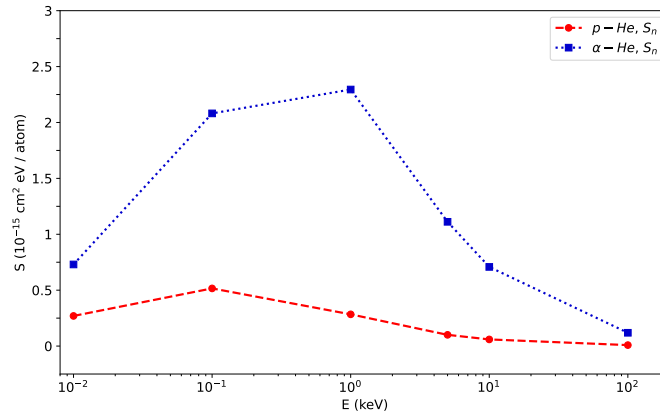


7. ábra. Nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. Az ábrán feltüntettük a SRIM [7] programból kapott értékeket a nukleáris fékezőerőre és az elektronfékezésre.



8. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet esetén a befagyott elektronfelhő modellből kapott eredményeink mellett feltüntettük az ábrán a Bailey [4] és a Schiwietz-féle [8] modellek eredményeit is. Összehasonlítjuk az eredményeket a teljes fékezésre kapott kísérleti eredményekkel [9], illetve a Bailey-féle CCC modell [4] és a Borbély-féle TDCC modell [1] eredményeivel, valamint az elektronfékezésre kapott értékekkel a Schiwietz-féle DW és AI modellekből [8].

Összehasonlítottuk a nukleáris fékezésre kapott eredményeket alfa-részecske és proton esetén, hogy megállapítsuk, hogyan befolyásolja a lövedék rendszáma a nukleáris fékezőerőt, illetve mi történik, ha a lövedék és a célatom tömege összemérhető. A 9. ábra alapján megállapítható, hogy a lövedék rendszámának növelése és a nagyobb tömeg nagyobb fékezési hatáskeresztmetszetet eredményez.



9. ábra. Nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet a kezdeti energiája függvényében proton és alfa-részecske lövedék esetén.

3.2. Hidrogén

Hidrogén esetén a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet kétféle módon számoltuk ki: a befagyott elektronfelhő közelítéssel és a [2] cikkben hidrogénre felírt potenciál képletét felhasználva. A befagyott elektronfelhő közelítésből kapott kölcsönhatási potenciál protonra:

$$V(r) = e^{-2r} \left(1 + \frac{1}{r} \right).$$

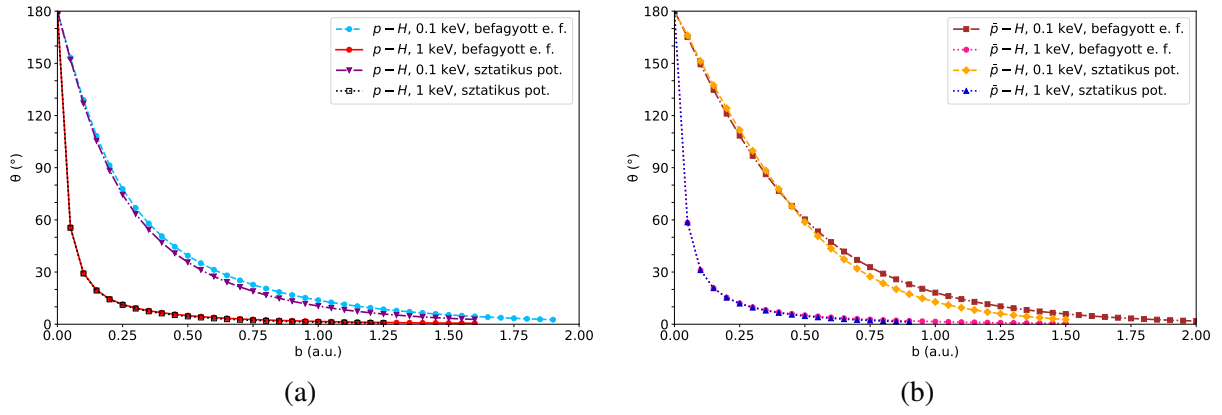
Az antiprotonra felírt potenciál alakja [2]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \phi^{exp}, \quad (32)$$

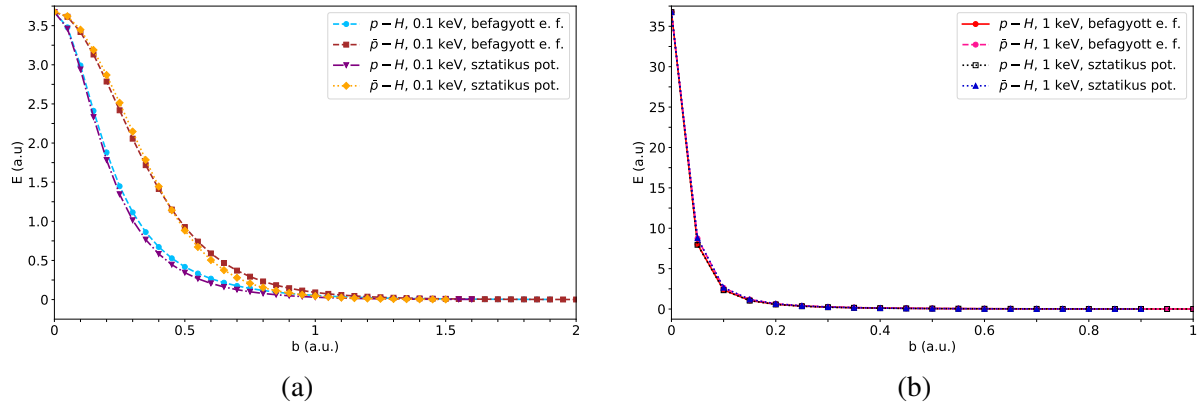
ahol ϕ^{exp} az árnyékolási függvény, ami több exponenciális függvény összegeként írható.

A kétféle módszerrel számolt szórási szögekről a 10. ábra alapján elmondható, hogy mindkét vizsgált energián protonra és antiprotonra is jó egyezést mutatnak, tehát a kétféle módszerrel számolt potenciál nem tér el lényegesen egymástól. A 11. ábra alapján megállapítható, hogy az energiavesztésre 1 keV energián a két módszerrel számolva azonos értékeket kapunk, és 0,1 keV energián is csak apró eltéréseket tapasztalunk. Akárcsak a hélium célatom esetén, itt is nagyobb szögben szóródik a kis energiájú antiproton, mint az azonos energiájú proton lövedék.

Numerikusan kiszámoltuk és összehasonlítottuk a kétféle modellből kapott értékeket a nukleáris fékezésre proton lövedék esetén. A 12. ábráról megállapítjuk, hogy a két modell nagyobb energiákon jó egyezést mutat, de alacsonyabb energiákon eltéréseket tapasztalunk:



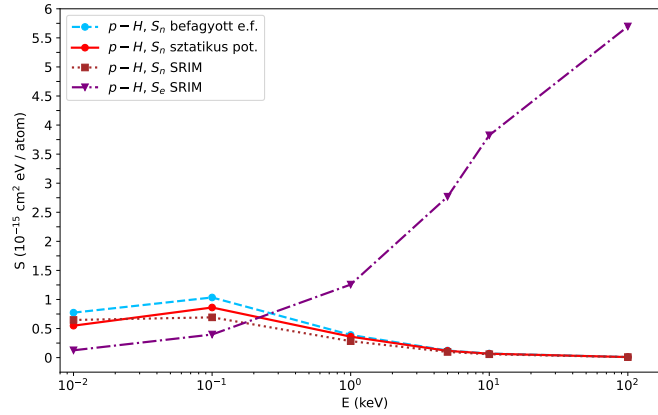
10. ábra. 0.1 keV és 1 keV energiájú protonok, illetve antiprotonok szóródása H célatomról az impaktparaméter függvényében. Az ábrán feltüntettük a befagyott elektronfelhő modellből, valamint a Nordlund-féle sztatikus potenciálokból [2] kapott eredményeinket.



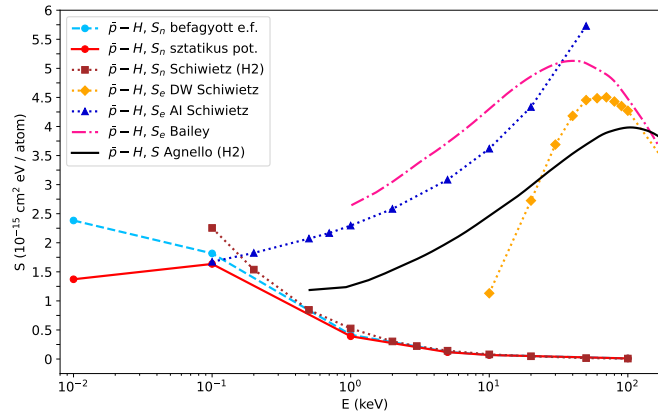
11. ábra. 0.1 keV és 1 keV energiájú protonok, illetve antiprotonok energiavesztesége H célatomról való szóródás következtében az impaktparaméter függvényében. Az ábrán feltüntettük a befagyott elektronfelhő modellből, valamint a Nordlund-féle sztatikus potenciálokból [2] kapott eredményeinket.

a befagyott elektronfelhő modell a sztatikus potenciál alapján számolt értékeknél nagyobb fékezési határkeresztmetszetet eredményez. A sztatikus potenciállal számolt eredmények jó egyezést mutatnak a SRIM programmal számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszettel. Az eredményeket az elektronfékezéssel összehasonlítva megállapítható, hogy 10 és 100 eV energiákon a nukleáris fékezés dominál.

A két modell eredményeit az antiprotonra számolt nukleáris fékezésre is összehasonlítottuk. A 13. ábrán 10 eV energiánál szembetűnő eltérés van a két eredmény között. Mivel a befagyott elektronfelhő modell nem veszi figyelembe az elektronfelhő torzulását a lövedékkel való kölcsönhatás miatt, ezért ebben az esetben a sztatikus potenciállal számolt érték állhat közelebb a valódi nukleáris fékezéshez. Az ábrázolt elektronfékezés modellek antiproton lövedék esetén nagyon eltérnek egymástól.



12. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A befagyott elektronfelhő modellből, valamint a Nordlund-féle sztatikus potenciálból [2] nukleáris fékezésre kapott eredményeink mellett feltüntettük a SRIM [7] programból kapott értékeket a nukleáris fékezőerőre és az elektronfékezésre.

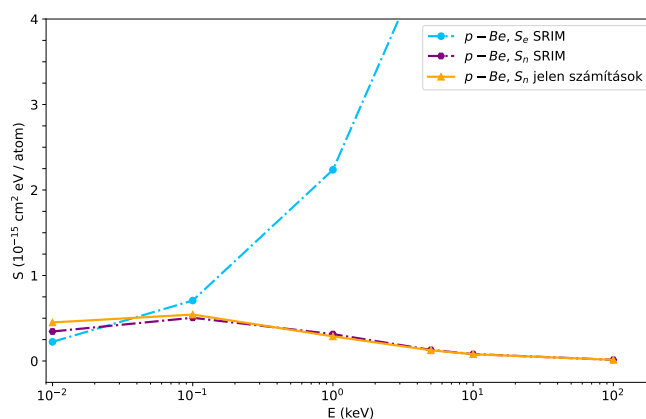


13. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet esetén a befagyott elektronfelhő modellből és a Nordlund-féle sztatikus potenciálokból [2] kapott eredményeink mellett feltüntettük az ábrán a Schiwietz [8] által H_2 molekulára kapott nukleáris fékezést is. Összehasonlítjuk az eredményeket a teljes fékezésre H_2 közegben kapott kísérleti eredményekkel [9], illetve a Bailey-féle CCC modell [4] és a Borbély-féle TDCC modell [1] eredményeivel, valamint az elektronfékezésre kapott értékekkel a Schiwietz-féle DW és AI modellekből [8].

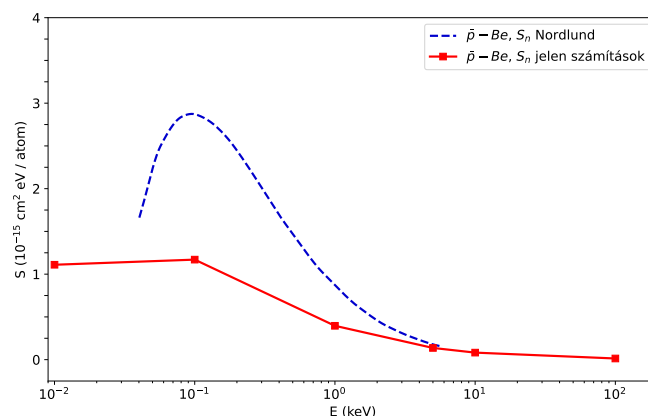
3.3. Nehezebb célatomok esete

Berillium

A 14. ábrán látható, hogy a sztatikus potenciállal általunk kiszámolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet értékei proton lövedék esetén jó egyezést mutatnak az SRIM program eredményeivel, eltérés 10 eV energián látható a két görbe között. Az eredményeket az elektronfékezéssel összehasonlítva megállapítjuk, hogy 10 eV lövedék energián a nukleáris fékezés értéke meghaladja az elektronfékezését. Antiproton esetén a 15. ábrán nagyobb eltérést látunk 1 keV energia alatt az általunk kapott eredmények és a [2] cikk eredményei között. A 14., 15. ábrákat összehasonlítva megállapítható, hogy a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet antiproton esetén nagyobb, mint proton esetén.



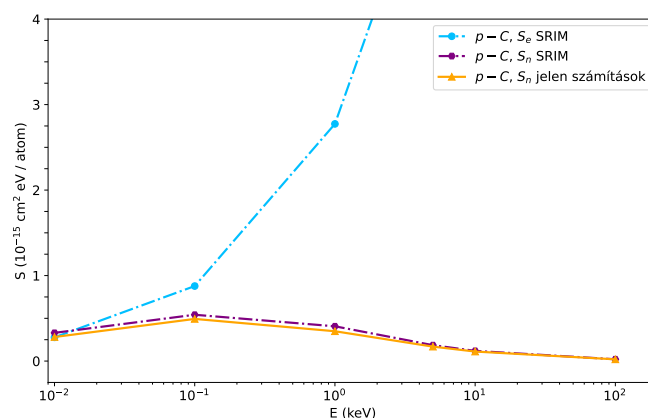
14. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítjuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel.



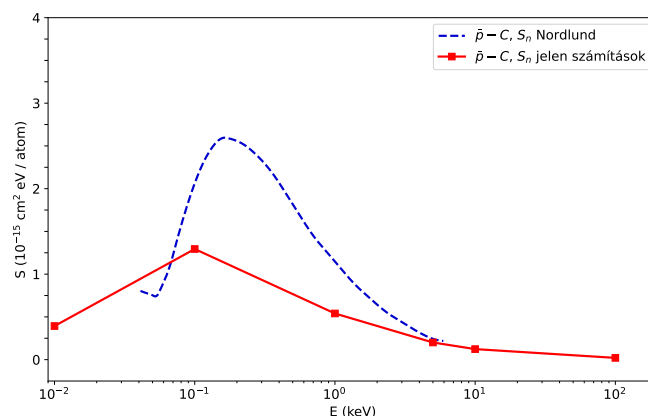
15. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Szén

A 16. ábrán szintén jó egyezést láthatunk proton lövedékre az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet és a SRIM program eredményei között. Az elektronfékezés a vizsgált tartományon nagyobb, mint a nukleáris fékezés. Antiproton esetén a 17. ábrán csak nagyobb energiákon, 5 keV környékén találunk egyezést az általunk kapott nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet értékek és a [2] cikk eredményei között. A 16. ábra értékeihez viszonyítva megállapítható, hogy a 17. ábrán az antiprotonra kapott hatáskeresztmetszet értékek nagyobbak, mint proton esetén.



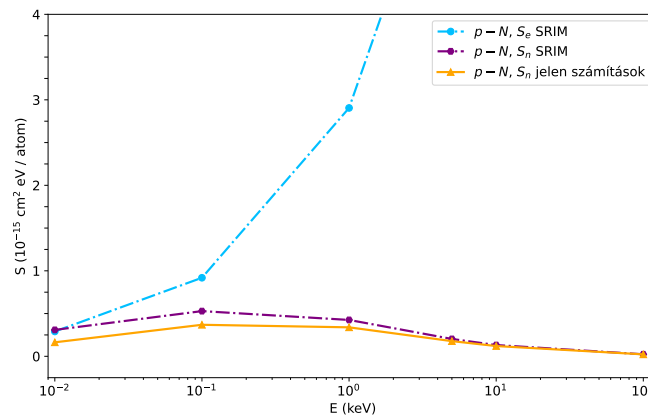
16. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítjuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel.



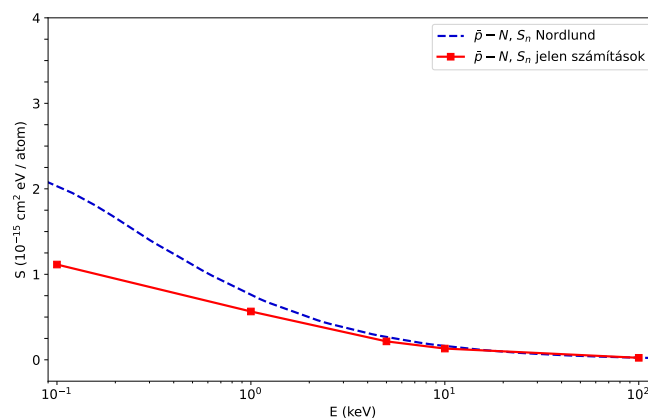
17. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Nitrogén

A 18. ábrán látható, hogy proton esetén az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet nagyobb energián megegyezik a SRIM program eredményével, kisebb energiákon (5 keV alatt) azonban jól látható az eltérés a két görbe között. Az elektronfékezés a vizsgált tartományon nagyobb, mint a nukleáris fékezés. A 18. ábrán az antiprotonra kapott eredményeink és a [2] cikk eredményeinek összehasonlításából kitűnik, hogy a két számítás között kis energiákon, 5 keV energiaérték alatt nincs jó egyezés. Az antiprotonra kapott eredményeket a 18. ábra értékeivel összevetve látható, hogy a vizsgált energiatartományban a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet nagyobb antiprotonra, mint protonra.



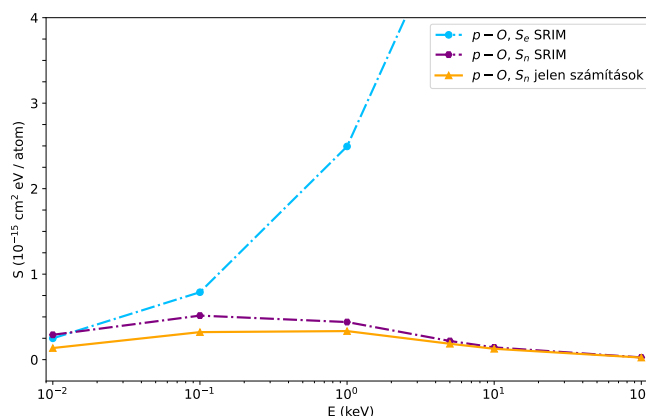
18. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítjuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel.



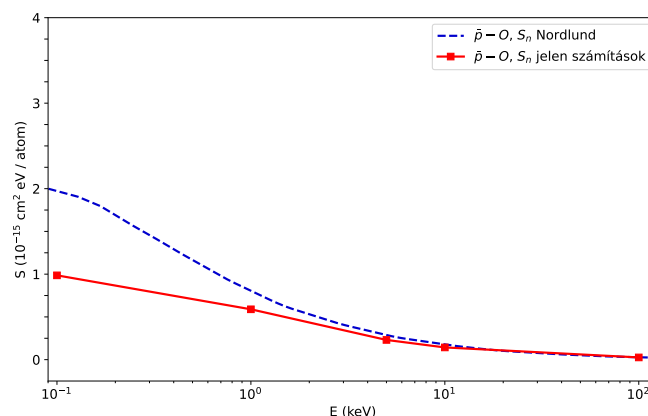
19. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Oxigén

Oxigén célatomok esetén, akár csak nitrogén esetén, az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet proton lövedék esetén 5 keV energiaérték fölött mutat jó egyezést a SRIM program eredményeivel (20. ábra). A vizsgált energiatartományon az elektronfékezés ebben az esetben is nagyobb a nukleáris fékezésnél. Antiproton esetén 21. ábra alapján megállapítható, hogy a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetre vonatkozó számításaink eredményei a [2] cikk eredményeitől 5 keV energiaérték alatt nagy mértékben eltérnek. A protonra és antiprotonra kapott nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet értékeket összehasonlítva látható, hogy antiproton esetén nagyobb nukleáris fékezés tapasztalható.



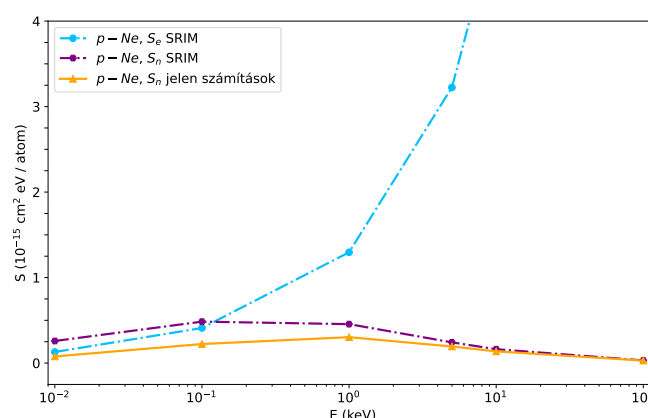
20. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítjuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel.



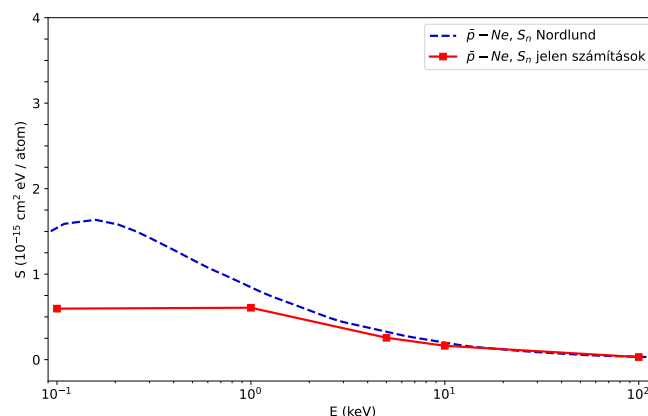
21. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Neon

Neon célatomok esetében a proton lövedékre számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet 5 keV energiaérték alatt a 22. ábra alapján eltérést mutat a SRIM program eredményeihez képest. A vizsgált energiatartományon az elektronfékezés nagyobb, mint az általunk számolt nukleáris fékezés. A 23. ábra alapján megállapítható, hogy az antiprotonra kapott nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet értékek kis energiákon, 5 keV energiaérték alatt eltérnek a mi számításaink és a [2] cikk számításai alapján. A 22. és 23. ábra alapján megállapítható, hogy a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet antiproton esetén nagyobb, mint proton esetén.



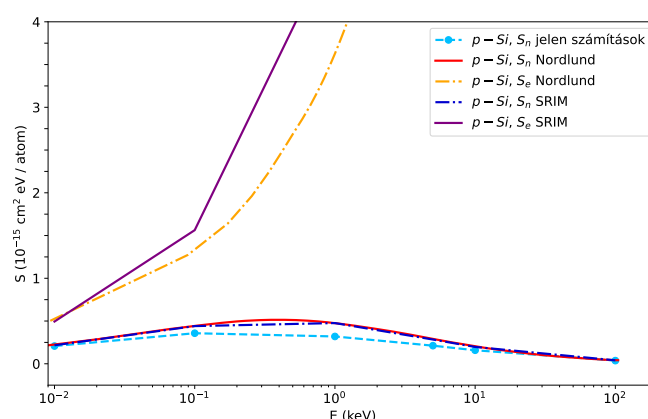
22. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítjuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel.



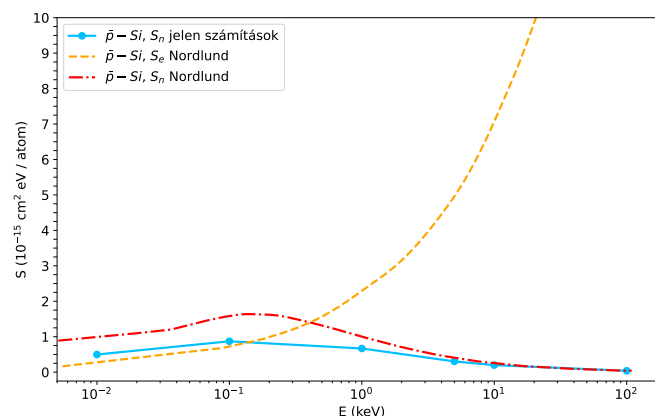
23. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Szilícium

Az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a 24. ábrán összehasonlítottuk az SRIM program eredményeivel és a Nordlund cikkben közölt eredményekkel. Az ábra alapján megállapítható, hogy az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet az 1 keV energia kivételével minden energián jó egyezést mutat a SRIM program és a Nordlund cikk eredményeivel. Antiproton lövedék esetén 25. ábráról megállapítható, hogy csak nagy energián van egyezés a Nordlund-féle eredmények és az általunk számolt hatáskeresztmetszet között. Az elektronfékezés ebben az esetben 100 eV alatt kisebb, mint a nukleáris fékezés.



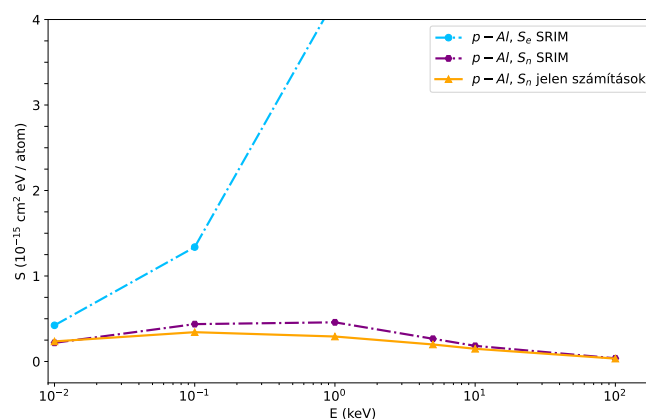
24. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítottuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel, valamint az eredeti cikk eredményeivel.



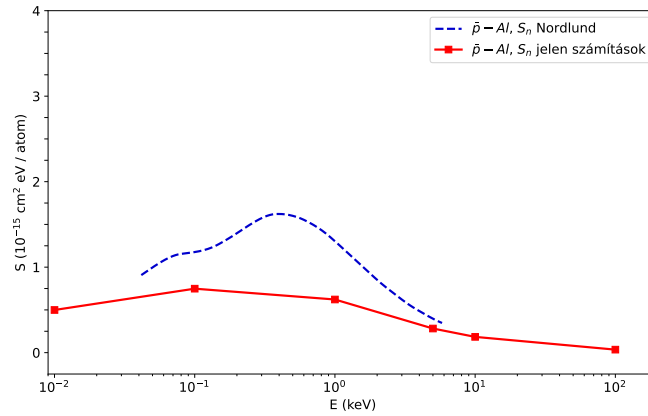
25. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Alumínium

Az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a 26. ábrán összehasonlítottuk az SRIM program eredményeivel és a Nordlund cikkben közölt eredményekkel. Az ábra alapján megállapítható, hogy az általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet az 1 keV energia kivételével minden energián jó egyezést mutat a SRIM program és a Nordlund cikk eredményeivel. Antiproton esetén a 27. ábráról megállapítható, hogy nincs jó egyezés az ábrázolt tartományban a Nordlund-féle eredmények és az általunk számolt hatáskeresztmetszet között.



26. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet a proton lövedék kezdeti energiája függvényében. A nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet a Nordlund-féle sztatikus potenciállal [2] számoltuk ki. Az eredményt összehasonlítottuk a SRIM [7] programból kapott nukleáris fékezőerővel és az elektronfékezéssel.



27. ábra. Fékezési hatáskeresztmetszet az antiproton lövedék kezdeti energiája függvényében. A Nordlund-féle sztatikus potenciállal általunk számolt nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet az eredeti [2] cikk eredményeivel hasonlítjuk össze.

Mivel ugyanannak a potenciálnak a felhasználásával számoltuk a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet, mint a [2] cikkben, az egyes targeteknél észlelt eltérés a numerikus módszerek különbségéből adódhat. Itt az egyik nehézséget az jelenti, hogy a (31) integrálban az integrálandó függvény végtelenből indul, ezért az első kis intervallumra analitikus közelítést alkalmaztunk. A másik a végtelen felső határ, de itt figyelmesen ellenőriztük a konvergenciát.

Következtetések és továbbfejlesztési lehetőségek

Az eredményekből kitűnik a kis energiájú proton és antiproton közötti különbség, antiprotonra minden esetben nagyobb nukleáris fékezést kaptunk, mint az azonos energiájú proton esetén. Azt is láttuk, hogy kis energiákon sok esetben a nukleáris fékezés dominál az elektronfékezéssel szemben.

Hidrogén céltárgy esetében kétféleképpen számoltuk ki a nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetet, a rögzített elektronfelhő által keltett és a lövedék által torzított potenciállal. Megállapítottuk, hogy a kétféle potenciál nem különbözik lényegesen egymástól, hasonló eredményeket adnak.

Nagyobb rendszámú célatomok esetén a Nordlund-féle sztatikus potenciállal kiszámolt eredményeink nem egyeztek meg a [2] cikkben bemutatott eredményekkel. Még nem tisztázott ezen különbségek oka, de még egyszer ellenőrizni fogjuk a (29) és (31) integrálok konvergenciáját.

A jövőben a gyors töltött részecskék elektronrendszerre gyakorolt hatását is részletesen szeretnénk vizsgálni, így gerjesztési és ionizációs hatáskeresztmetszetek számítását tervezzük. Ezzel teljesebbé tehetjük a jelen tanulmányt az elektronikus fékezőerőt is kiszámolva.

Saját eredmények

1. Hélium és hidrogén esetén a kölcsönhatási potenciál kiszámítása a befagyott elektronfelhő közelítés alapján.
2. A numerikus számításokat végző program megírása C++ programozási nyelvben.
3. A numerikus számítások elvégzése (az általunk kapott befagyott elektronfelhő, illetve a [2] cikkből átvett potenciálok alapján), kiértékelése és konvergenciavizsgálat.
4. Grafikonok, ábrák elkészítése. A grafikonok elkészítéséhez a Python programozási nyelvet használtam, az ábrák elkészítésénél pedig az Inkscape szoftvert.
5. Általam kapott eredmények:
 - Nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetek értékei a befagyott elektronfelhő modell alapján **héliumban** proton, antiproton és alfa-részecske lövedékek esetén (7., 8., 9. ábrák).
 - Nukleáris fékezési hatáskeresztmetszetek értékei a befagyott elektronfelhő modell alapján, illetve a [2] cikkből átvett sztatikus potenciállal számolva **hidrogénben** proton és antiproton lövedékek esetén (12., 13. ábrák).
 - Nukleáris fékezési hatáskeresztmetszet értékek **berillium, szén, nitrogén, oxigén, neon, szilícium, alumínium** céltárgyak és proton, illetve antiproton lövedékek esetén a [2] cikkből átvett sztatikus potenciállal számolva (14-27. ábrák).

Hivatkozások

- [1] S. Borbély, X.-M. Tong, S. Nagele, J. Feistezinová, I. Březinová, F. Lackner, L. Nagy, K. Tőkési és J. Burgdörfer. „Electron correlations in the antiproton energy-loss distribution in He”. *Phys. Rev. A* 98 (1 2018. júl.), 12707. oldal. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.012707. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.98.012707>.
- [2] Kai Nordlund, Dage Sundholm, Pekka Pyykkö, Daniel Martinez Zambrano és Flyura Djurabekova. „Nuclear stopping power of antiprotons”. *Phys. Rev. A* 96 (4 2017. okt.), 42717. oldal. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.042717. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.042717>.
- [3] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko és K. Nordlund. „Nuclear stopping powers for DFT potentials”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 508 (2021), 10–18. oldal. ISSN: 0168-583X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2021.10.001>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X2100313X>.
- [4] J. J. Bailey, A. S. Kadyrov, I. B. Abdurakhmanov, D. V. Fursa és I. Bray. „Antiproton stopping in atomic targets”. *Phys. Rev. A* 92 (2 2015. aug.), 22707. oldal. DOI: 10.1103/PhysRevA.92.022707. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.022707>.
- [5] Peter Dourmashkin. *Two-Dimensional Collisions in Center-of-Mass Reference Frame*. URL: <https://phys.libretexts.org/@go/page/28119> (elérés dátuma: 2022. jún. 20.)
- [6] Roger G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles*. Dover Books on Physics. Dover Publications, 2002. ISBN: 9780486425351.
- [7] J.F. Ziegler és J.P. Biersack. *SRIM*. URL: <http://www.srim.org>.
- [8] G Schiwietz, U Wille, R Díez Muiño, P D Fainstein és P L Grande. „Comprehensive analysis of the stopping power of antiprotons and negative muons in He and gas targets”. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 29.2 (1996. jan.), 307. oldal. DOI: 10.1088/0953-4075/29/2/018. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/29/2/018>.
- [9] M. Agnello és mások. „Antiproton Slowing Down in H₂ and He and Evidence of Nuclear Stopping Power”. *Phys. Rev. Lett.* 74 (3 1995. jan.), 371–374. oldal. DOI: 10.1103/PhysRevLett.74.371. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.74.371>.