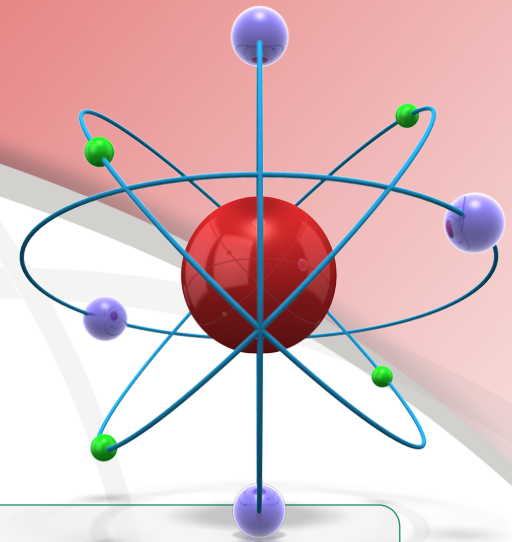




Ion - atom ütközések klasszikus és kvázi-klasszikus vizsgálata

Statisztikus Fizika Szeminárium
2014. március 19.
Lohner Roland

• Áttekintés



1. fejezet

Az atom története
Daltontól Schrödingerig

2. fejezet

Klasszikus pályaszámításon alapuló atomfizikai
módszerek

3. fejezet

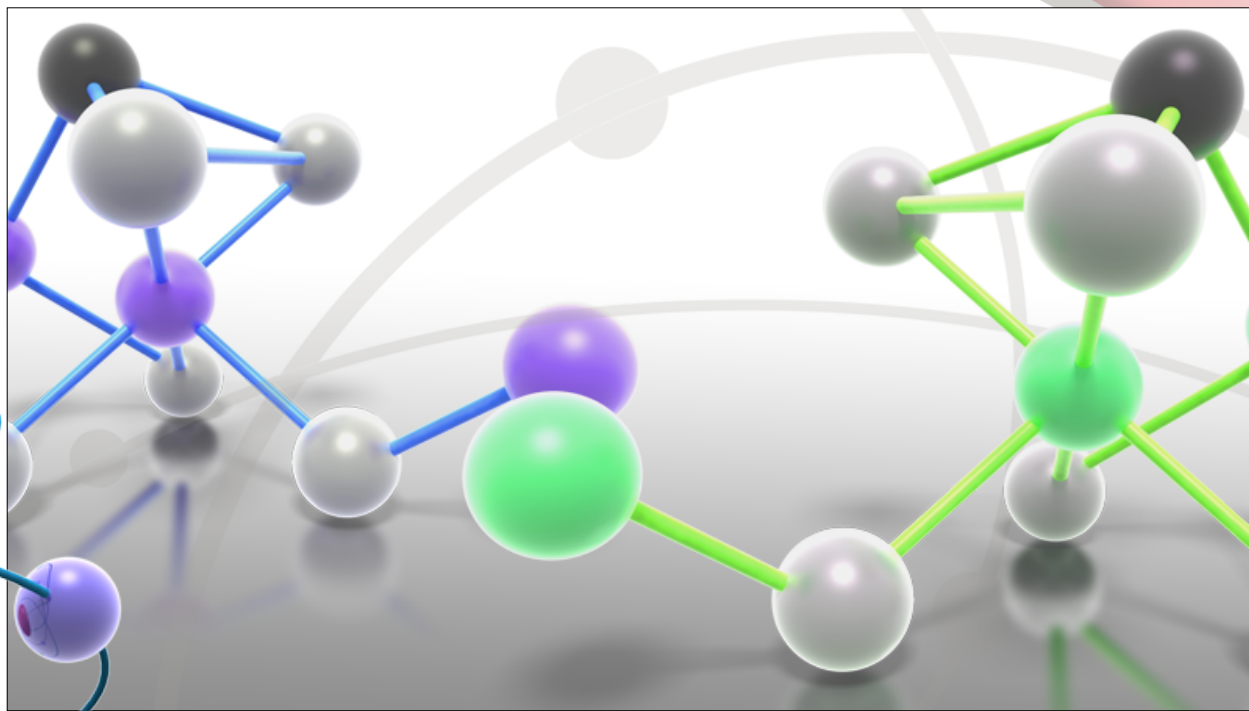
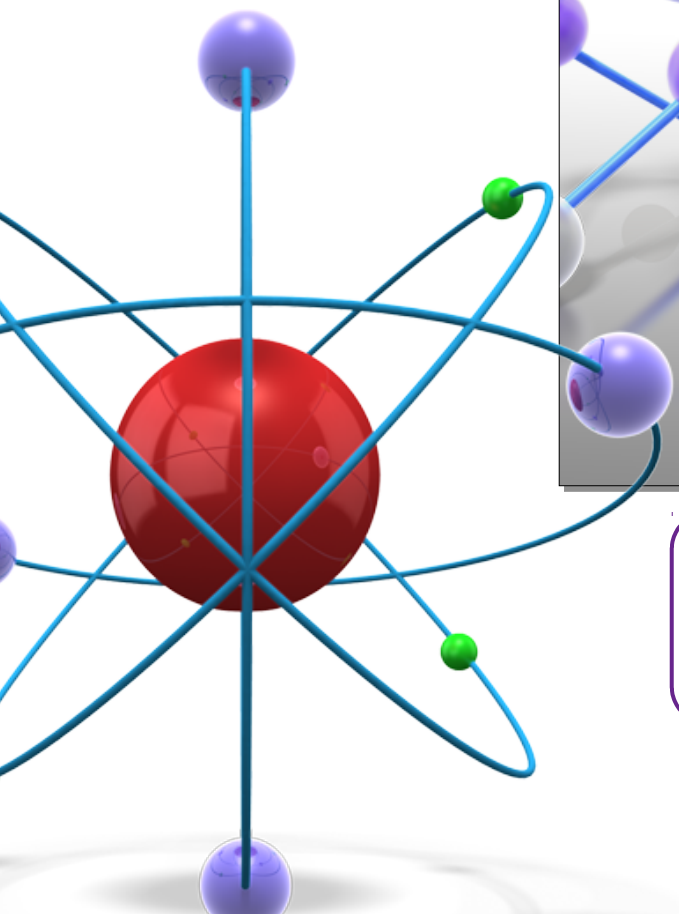
A szimulátor program
Felépítés, működés

4. fejezet

Proton → hidrogén ütközés számítása

5. fejezet

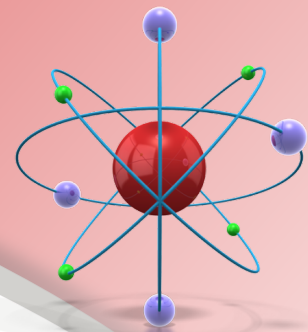
Proton → hélium ütközés számítása



- **Az atom története**

Daltonól Schrödingerig

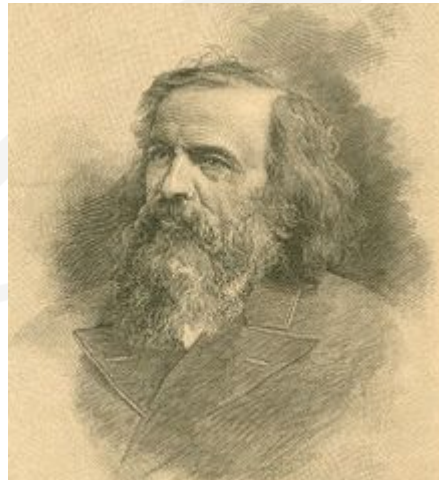
• 19. század



1805, John Dalton

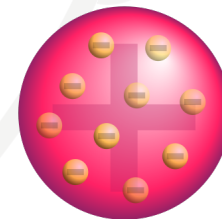
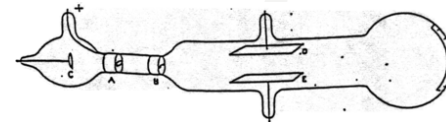
1869, Mengyelejev

1897, Thomson

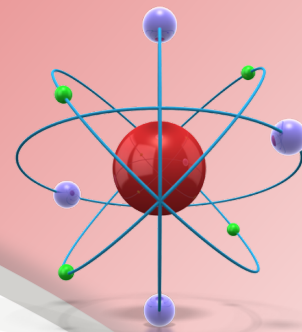


ELEMENTS. Plate I

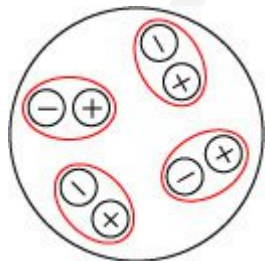
Rank	Gruppo I. R ⁰	Gruppo II. R ⁰	Gruppo III. R ⁰	Gruppo IV. R ⁰	Gruppo V. R ⁰	Gruppo VI. R ⁰	Gruppo VII. R ⁰	Gruppo VIII. R ⁰
1	Li=7	II=1						
2	Na=23	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	K=39	Mg=24	Al=27,8	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4		Ca=40	—=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59, Ni=59, Cu=63.
5	(Cu=65)	Zn=65	—=68	—=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=86	Sr=87	Y=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	—=100	Ru=104, Rh=104, Pt=106, Ag=108.
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Ta=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	Pb=188	?Ce=140	—	—	—	
9	(—)	—	?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	
10			?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184	—	Os=195, Ir=197, Pt=198, Au=199.
11	(Au=199)	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208	—	—	
12			Th=231	—	—	U=240	—	



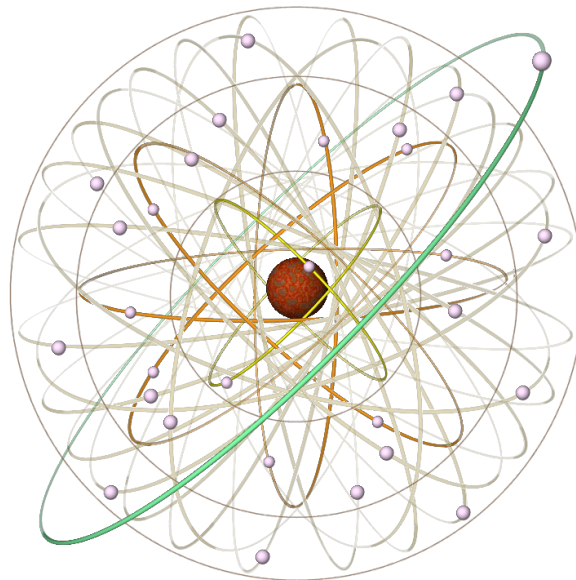
• 20. század



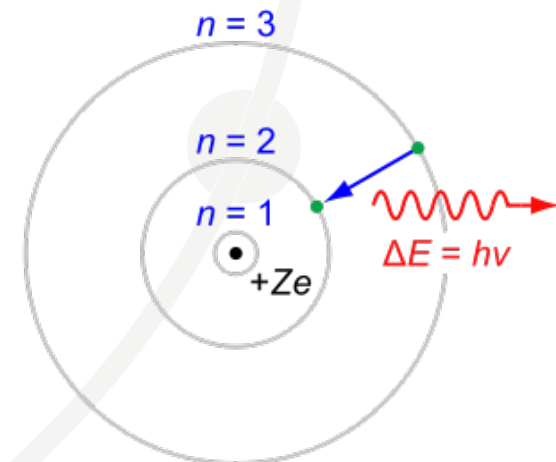
1905, Lénárd Fülöp



1911, Rutherford

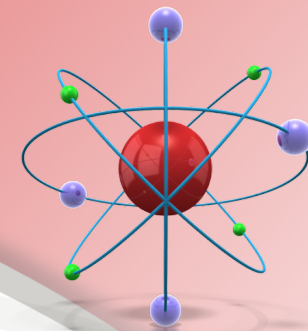


1913, Bohr

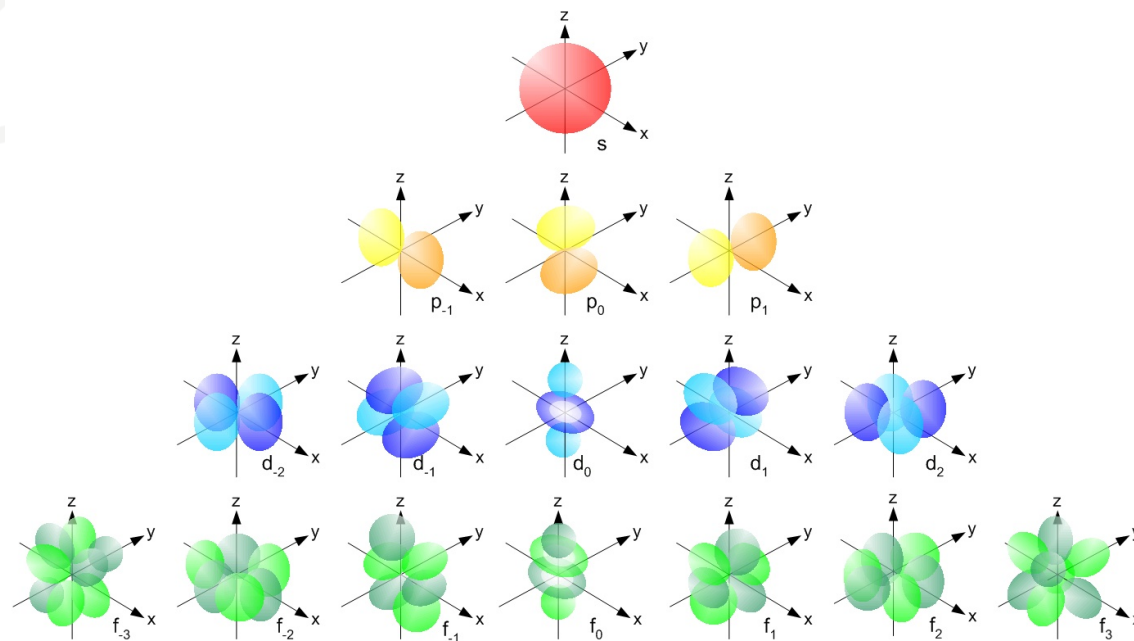


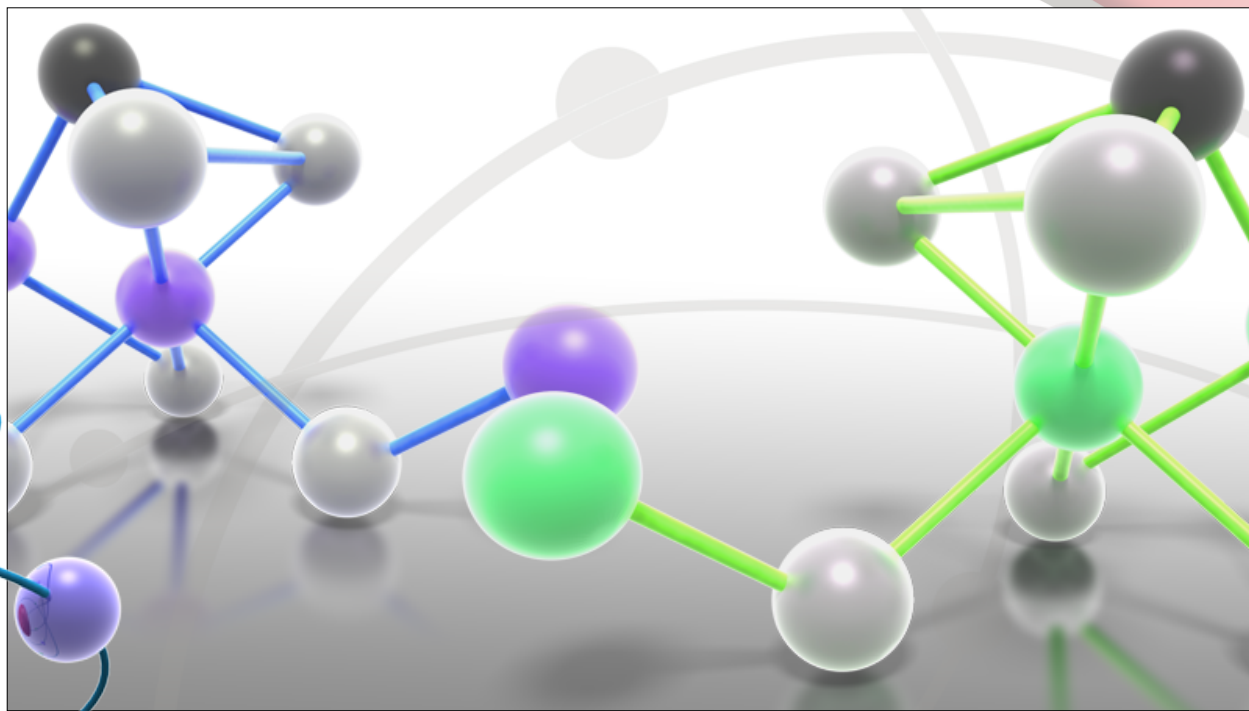
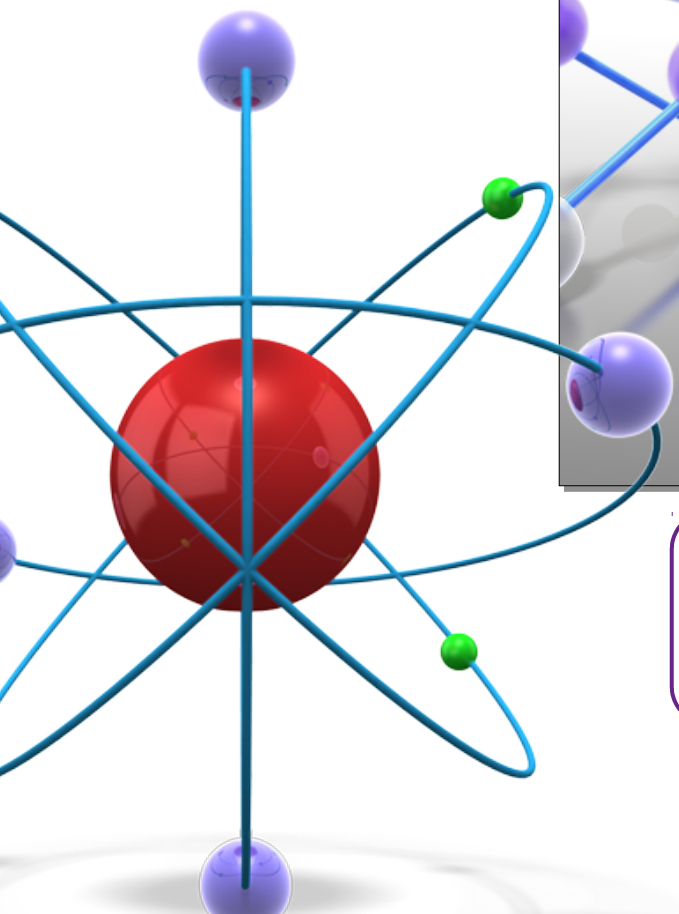
• Atomok a hullámmechanikában

1925, Schrödinger



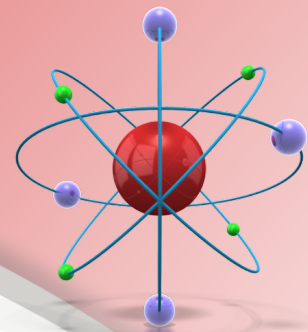
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$



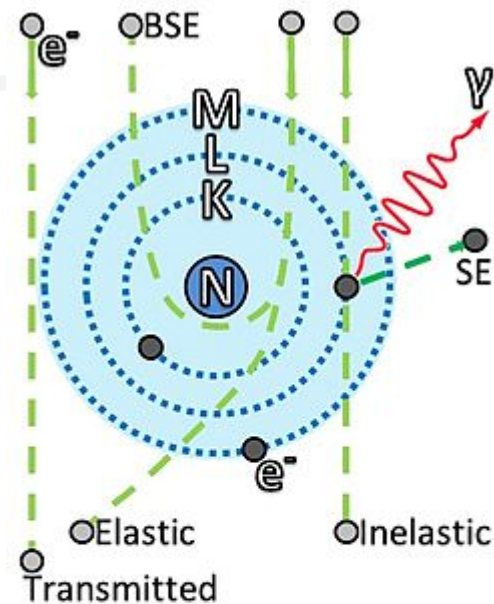


- **Klasszikus pályaszámításon alapuló atomfizikai módszerek**

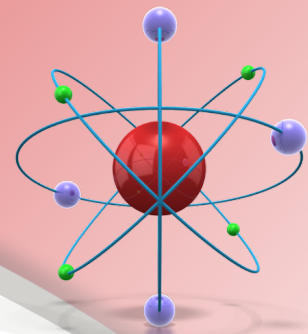
- **Atomi szórási folyamat hatáskeresztmetszetének kísérleti meghatározása**



1912, Thomson

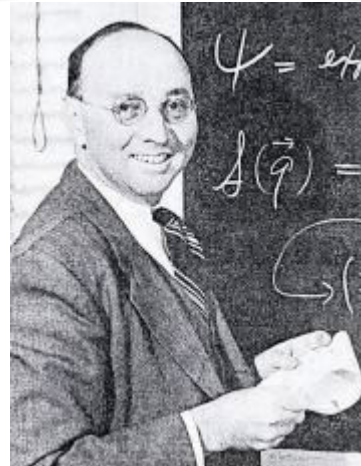


• A klasszikus pályaszámítás úttörői az atomfizikában

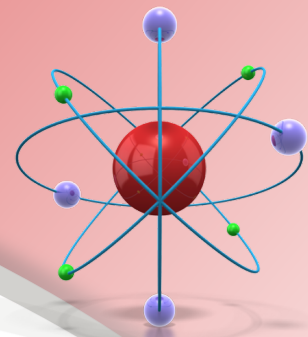


1936, Hirschfelder

A 20-as évek végétől a klasszikus módszerek háttérbe szorulnak



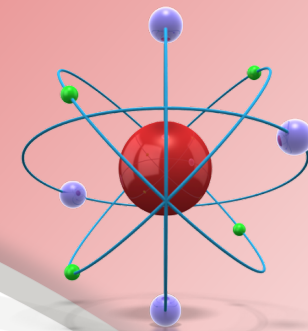
reakciót vizsgált
klasszikus fizikai
pálya számítással



• A klasszikus pályaszámítás úttörői az atomfizikában

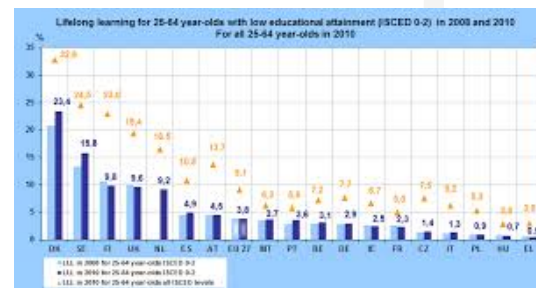
- Nehézségek a rugalmatlan atomi ütközések kvantumos tárgyalásban
- Gryzinsky és Burgess elméleti munkája (1963)
- Számítógépek elterjedése
- A klasszikus pályaszámítás reneszánsza a 60-as évektől
- Monte-Carlo módszerek
- Kémiai reakciók hatáskeresztmetszetének sikeres meghatározása

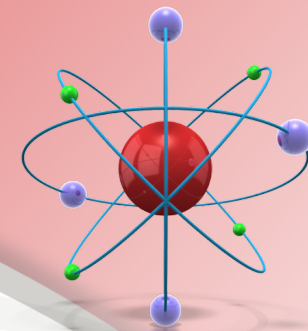




• A klasszikus pályájú Monte-Carlo módszer (CTMC)

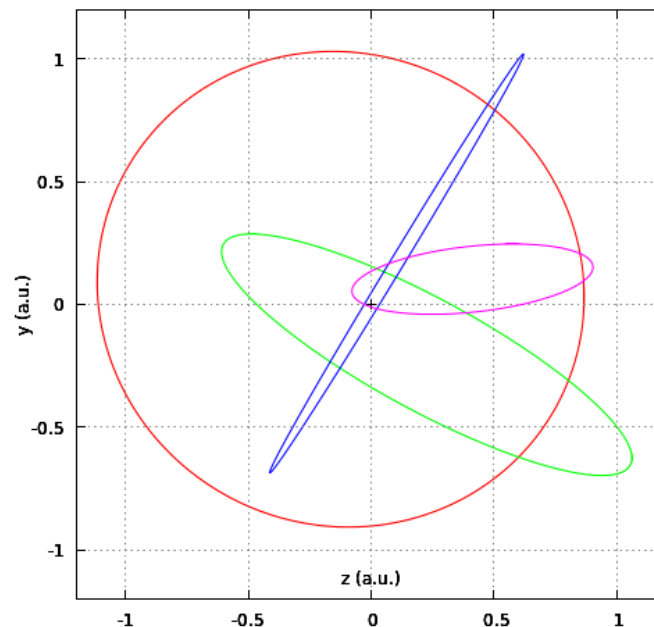
- 1) A kvantumrendszert egy klasszikus makroszkopikus modellel reprezentáljuk.
- 2) Nagyszámú egyedi pálya meghatározásával statisztikai módon számítjuk ki a folyamatok jellemző paramétereit.
- 3) Az egyedi pályákat véletlenszerűen megválasztott kezdőfeltételekből indítjuk.

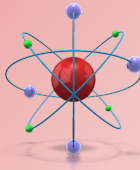




• **Abrines és Percival hidrogén modellje (1966)**

- Külön meghatározta a mag és az elektron pályáját is.
- Az elektron a Coulomb-erő hatására Kepler-pályán kering az atommag körül.
- A hidrogén atomot síkbeli elliptikus Kepler-pályák sokaságával reprezentálták





• Abrines és Percival számítása

Hidrogén + proton ütközés

1

Kezdőfeltételek alkalmazása

Kepler-pálya beállítása, lövedék elhelyezése

2

Integrálás

Amíg a lövedék-mag távolság el nem ér egy határt

3

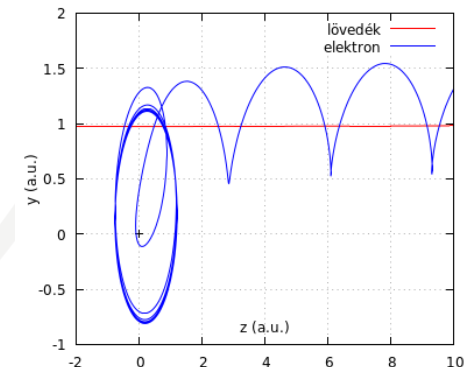
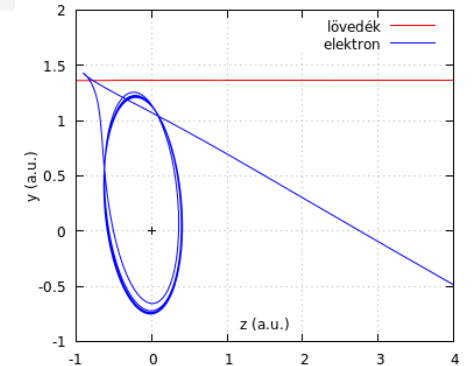
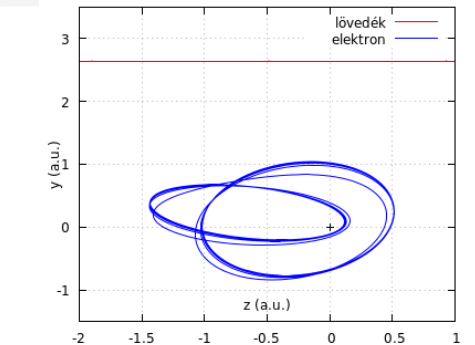
A végbement folyamat azonosítása

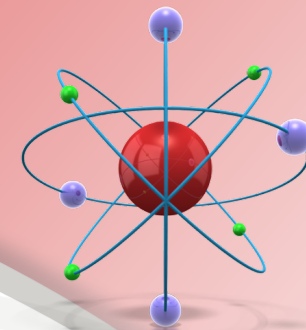
A relatív párpotenciálok kiszámításával

4

Hatáskeresztmetszet módosítása

Az aktuális impact paraméter alapján

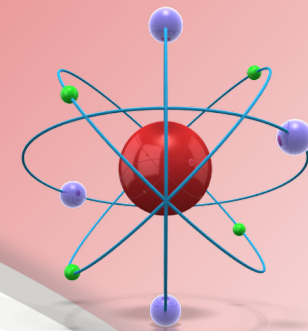




• **Abrines és Percival eredménye**

- Úgy vélték, hogy a korrespondencia-elvnek megfelelően klasszikus modelljük csak a jelentősen gerjesztett atomállapotokat fogja helyesen jellemezni.
- Kiderült, hogy módszerük meglepő pontossággal írja le az alapállapotú atomot is a $v \sim v_e$ sebességtartományban.
- Az eredmény lendületet adott a CTMC módszerek fejlődésének, a következő évtizedekben számos kutató ért el sikereket ezen a területen.
- 1977-ben Olson és Salop hidrogénnel és teljesen ionizált lövedékekkel végzett számításokat a Kr^{+36} ionig bezárólag, eredményeik a 37-200 keV energiatartományban jól használhatónak bizonyultak.



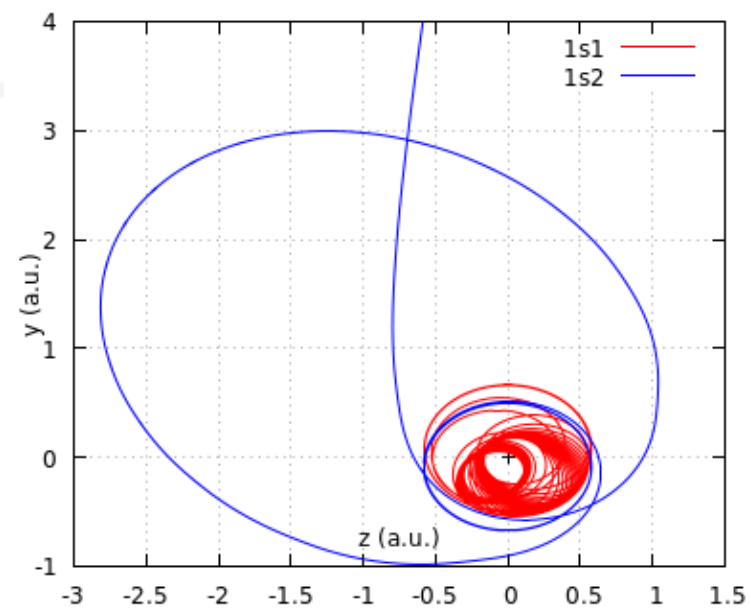


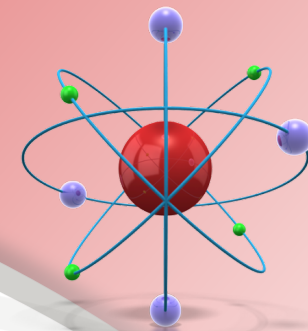
• A modell általánosítása még várat magára a 70-es években

- Pfeifer és Olson számításaiban hélium atomot bombázott különböző ionokkal.
- Becker és MacKellar hidrogén atom ütközését vizsgálta hidrogén atommal (1979).
- Az autóionizáció elkerülése érdekében bevezetett független-elektron közelítéssel a modell veszített pontosságából.



- Valótlan autoionizáció lép fel



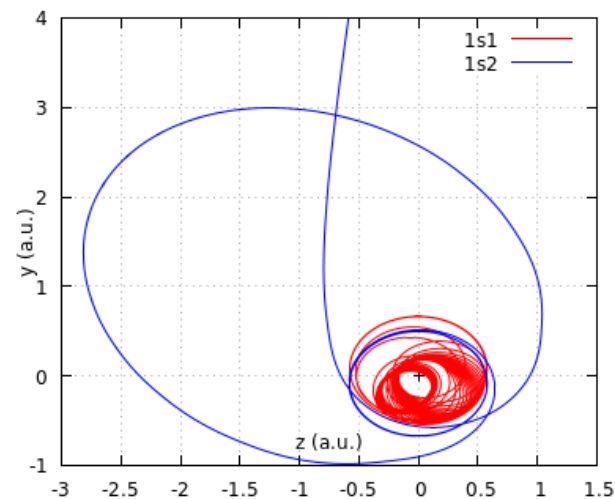
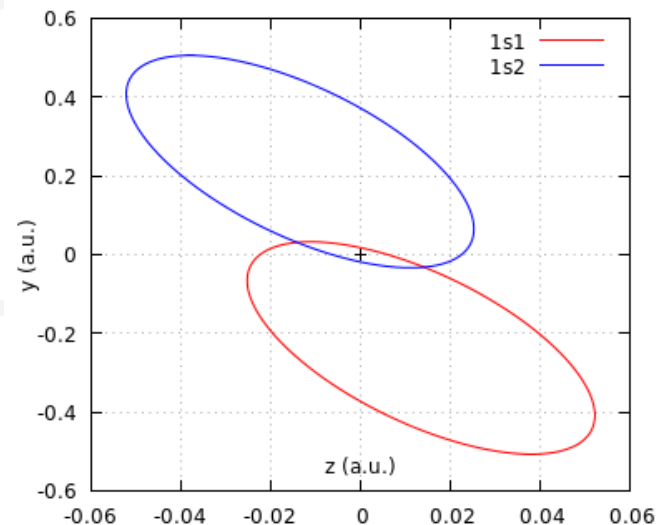


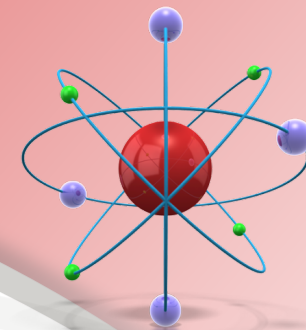
• Autoionizáció hélium atomban

- A hélium három-test rendszer fázistere $3 \cdot 6 = 18$ dimenziós.
- Tömegközéppont “megmaradás”
- Impulzus megmaradás
- Impulzus momentum megmaradás
- Energiamegmaradás
- A mozgás valójában egy 8 dimenziós altérben zajlik
- Nemlineáris rendszer



- Kaotikus konzervatív, zárt rendszer
 - Periodikus pálya
 - Kváziperiodikus pálya
 - Kaotikus pálya





- **A hidrogén ütközési folyamatainak feltárása fontossá válik a fúziós reaktorok szempontjából**

1

Hidrogén vagy deutérium atomokat injektálnak a plazmába

2

Ezek szennyező ionokkal ütközve elveszíthetik elektronjukat

C, N, O, Si, Fe, Mo, és W ionok

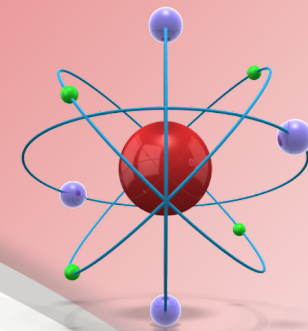
3

Az így megnövekvő mágneses eltérítés hatására a konténer falának ütközhetnek

4

A fal rongálódása nyomán további szennyező ionok kerülnek a plazmába





• Az AP modell általánosítása többelelektronos rendszerekre

A Kirschbaum-Wilets modell (1980)

- Heisenberg-féle határozatlansági reláció

$$r_i p_i \geq \xi_H \hbar$$



- Heisenberg-potenciál

$$V_H(r_i, p_i) = \frac{(\xi_H \hbar)^2}{4\alpha\mu r_i^2} \exp\left(\alpha\left[1 - \left(\frac{r_i p_i}{\xi_H \hbar}\right)^4\right]\right)$$

$$\xi_H = r_0 p_0 / \hbar$$

- Pauli-féle kizárási elv

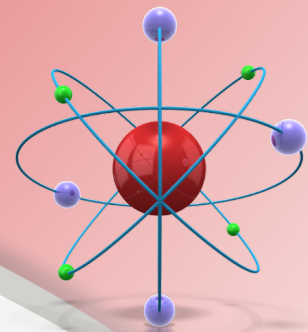
$$r_{ij} p_{ij} \geq \xi_P \hbar$$



- Pauli-potenciál

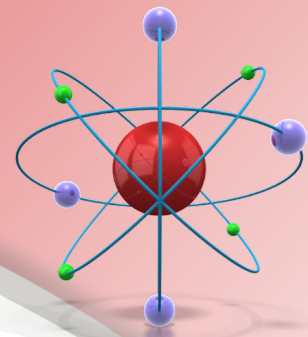
$$V_P(r_{ij}, p_{ij}) = \frac{(\xi_P \hbar)^2}{4\alpha\mu r_{ij}^2} \exp\left(\alpha\left[1 - \left(\frac{r_{ij} p_{ij}}{\xi_P \hbar}\right)^4\right]\right)$$

Azonos spinek esetén



• A Pauli és a Heisenberg potenciál

- Kvázi-klasszikus megközelítés
- Impulzuszfüggő
- Taszító potenciál
- Biztosítja az alapállapot energiát
- Biztosítja a stabilitást
- A keménység paraméternek nincs hatása, ha $40 < \alpha < 100$
- Más formulák is beválnak
- A Hamilton-függvény így:
$$H_{KW} = H_0 + V_H + V_P$$
$$H_0 = T + V_{Coul}$$
- Az extra potenciálok nem okoznak problémát, mert
 - a rendszer velük együtt is konzervatív
 - szerepük kizárólag az, hogy a rendszer elkerülje a fázistér kvantummechanikailag tiltott régióit
 - gyorsan lecsengenek, így az idő legnagyobb részében a tömegpontok mozgására csak minimálisan hatnak



• A Heisenberg-potenciál

A Heisenberg-potenciál távolságfüggése hélium atomban

$$V_H(r_i, p_i) = \frac{(\xi_H \hbar)^2}{4\alpha\mu r_i^2} \exp\left(\alpha\left[1 - \left(\frac{r_i p_i}{\xi_H \hbar}\right)^4\right]\right)$$

$$\xi_H = r_0 \cdot p_0 / \hbar = 0.84$$

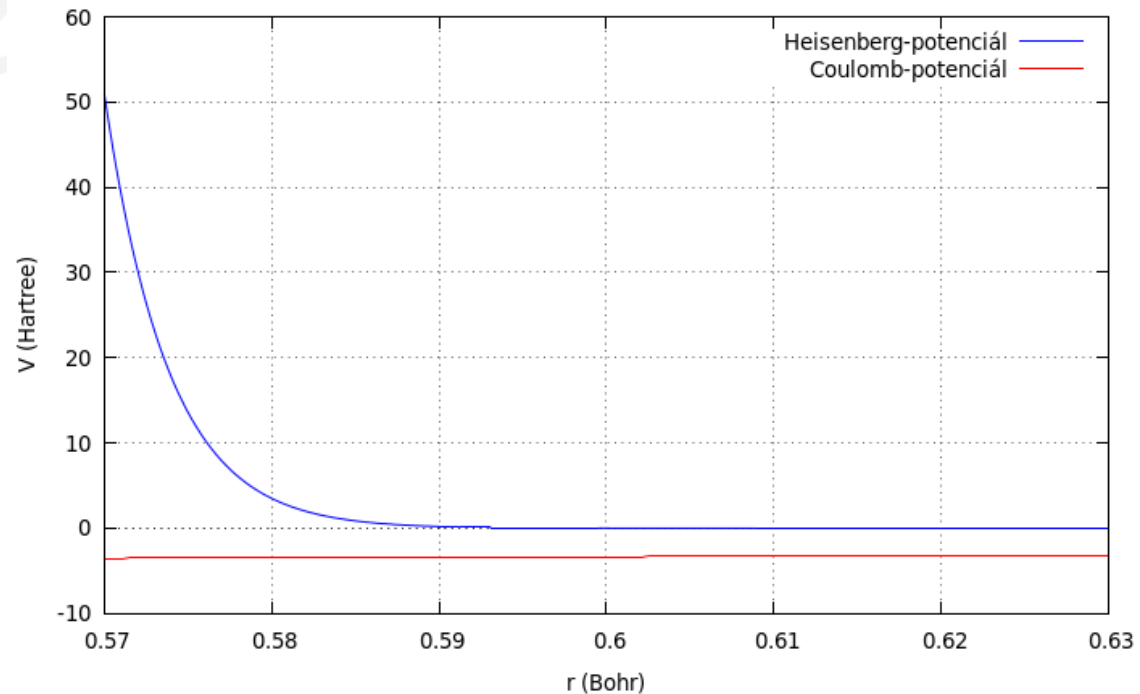
$$r_0 = 0.6 \text{ a.u.}$$

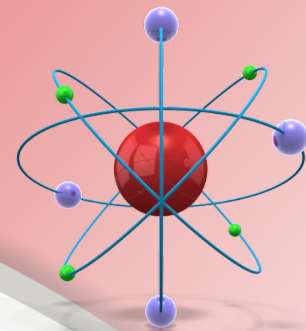
$$p_0 = 1.4 \text{ a.u.}$$

$$\mu \approx 1 \text{ a.u.}$$

$$\hbar = 1$$

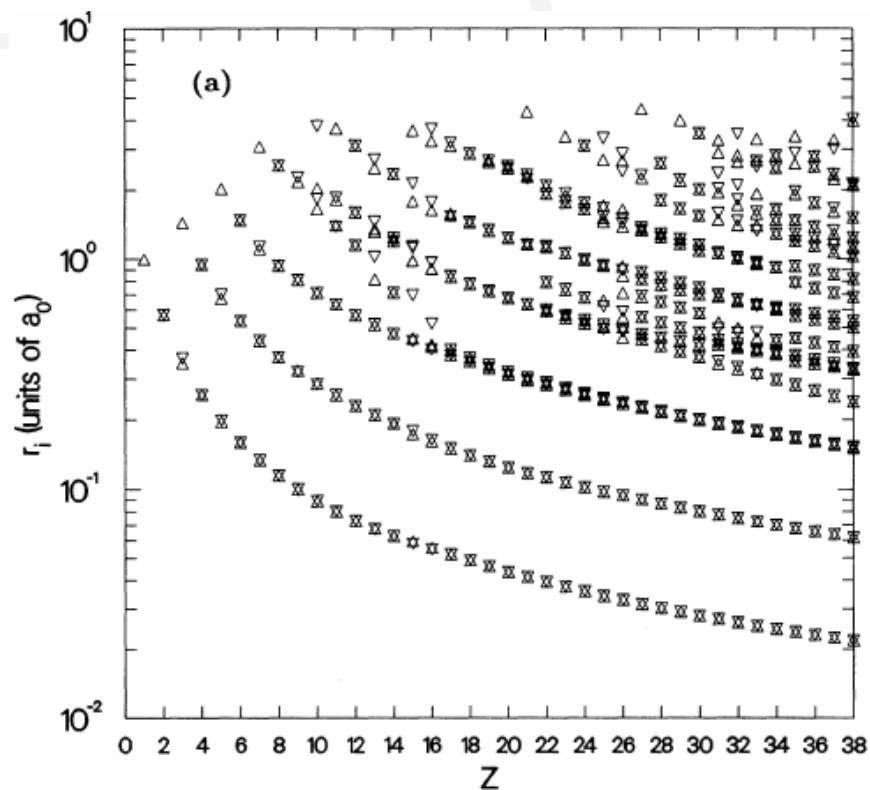
$$\alpha = 45$$

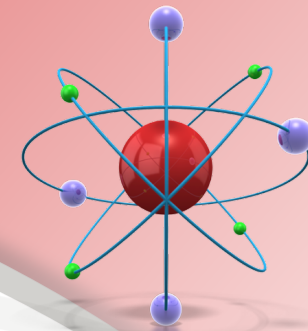




• James Cohen munkássága

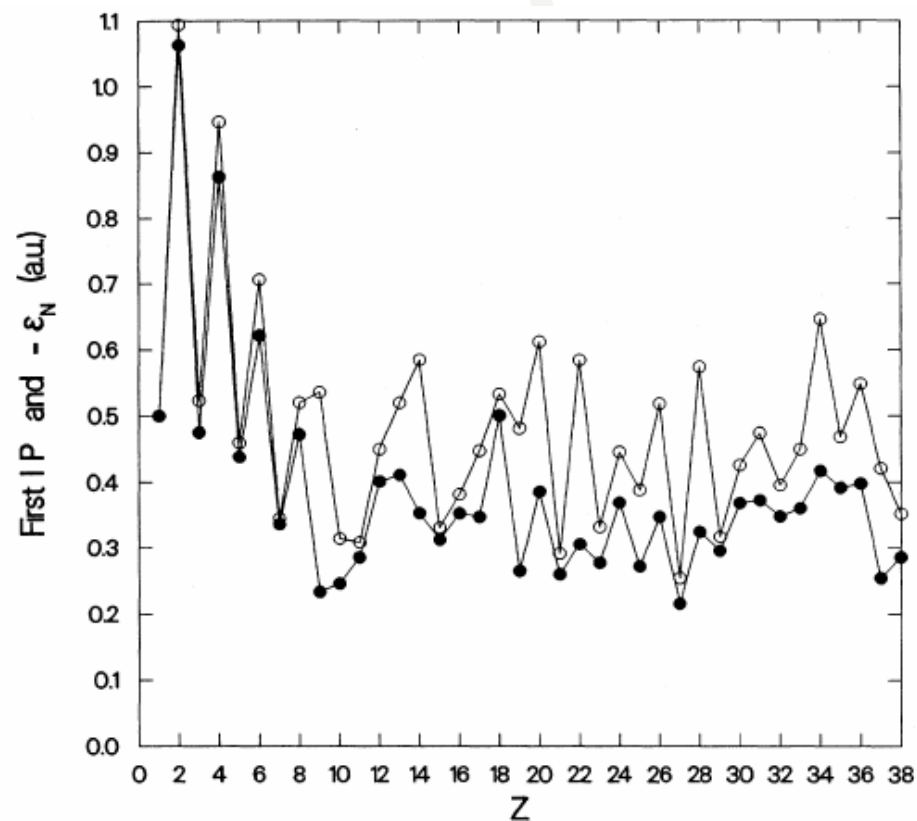
- Cohen 1998-ban energiainimalizációs eljárásával a plutóniumig ($Z=94$) bezárólag az összes elemre meghatározta a Kirschbaum-Wilets modellben reprezentált atomok alapállapotát.
- Kiszámította az alapállapot energiákat, az első és második ionizációs energiákat, melyek jó egyezést mutattak a kvantumelméleti és a mérési értékekkel.
- Cohen eredményeiben megjelentek az elemek periodikus tulajdonságai, és az elektronrendszer héjstruktúráját alkotott.

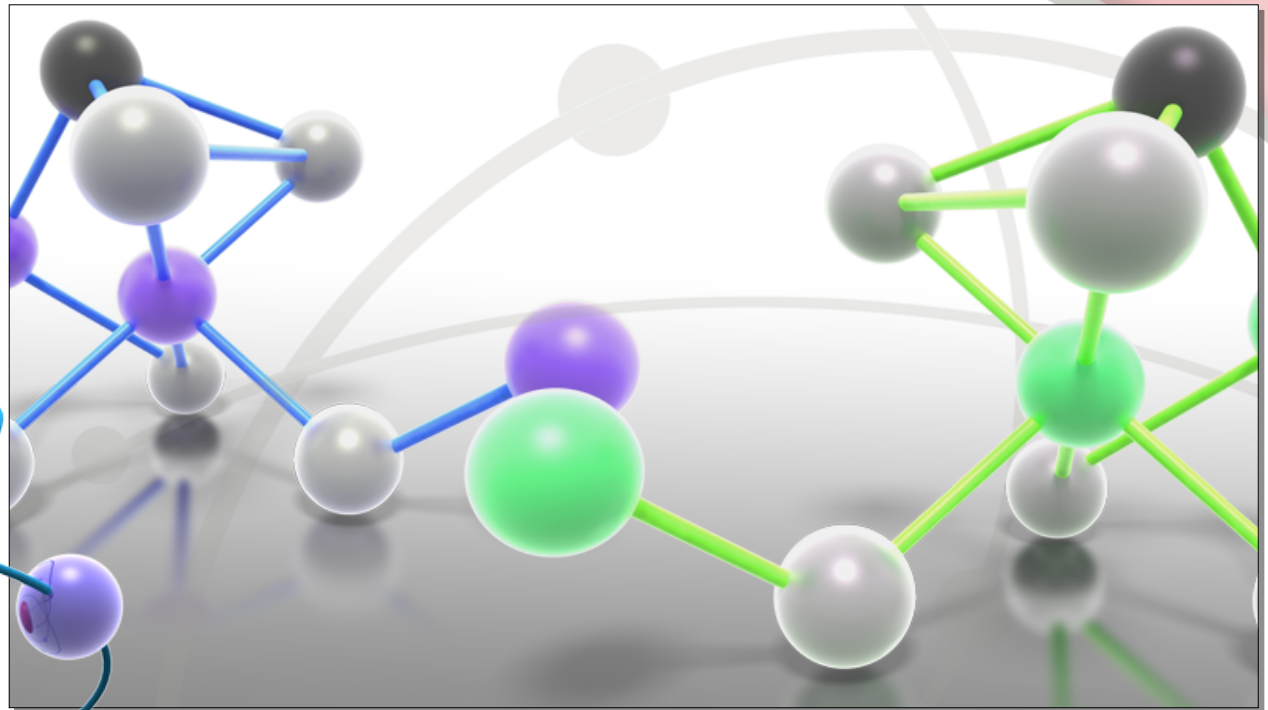
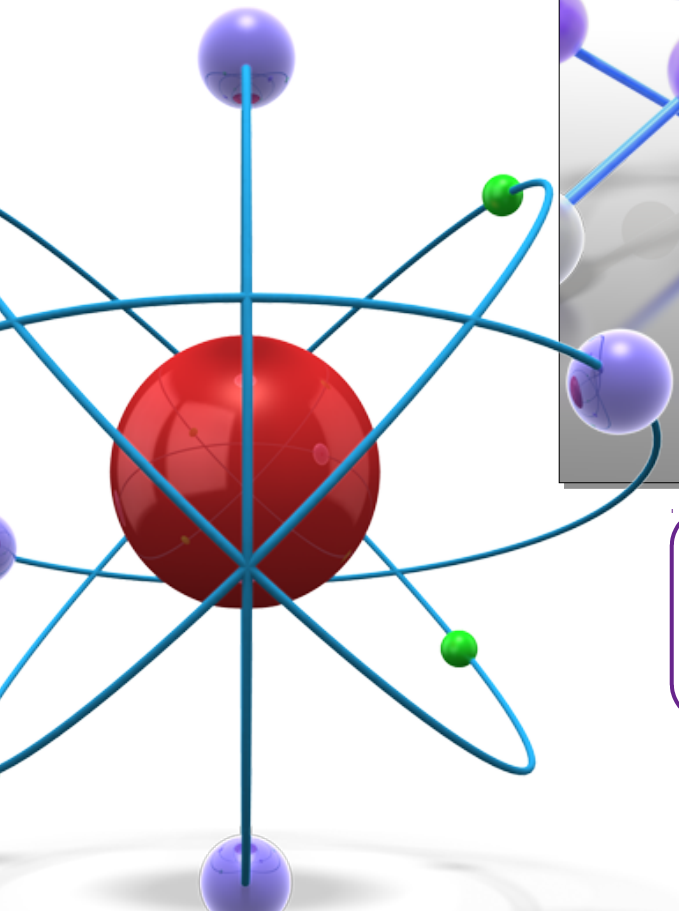




• A Kirschbaum-Wilets modell sikerei

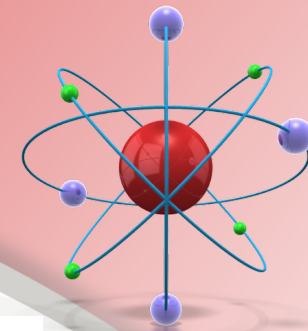
- Stabilizálta az összes kvázi klasszikus atomot.
- Helyesen írja le az alapállapotot.
- Jól becsüli az atomok teljes és ionizációs energia értékeit.
- Számos molekula is stabilnak mutatkozott a modellben.
- A 80-as években a módszer a „Fermi molekula dinamika” nevet kapta és sok számítás alapjául szolgált. Ezek főképp:
 - Atomi ütközések
 - Atomok erős mezőkben





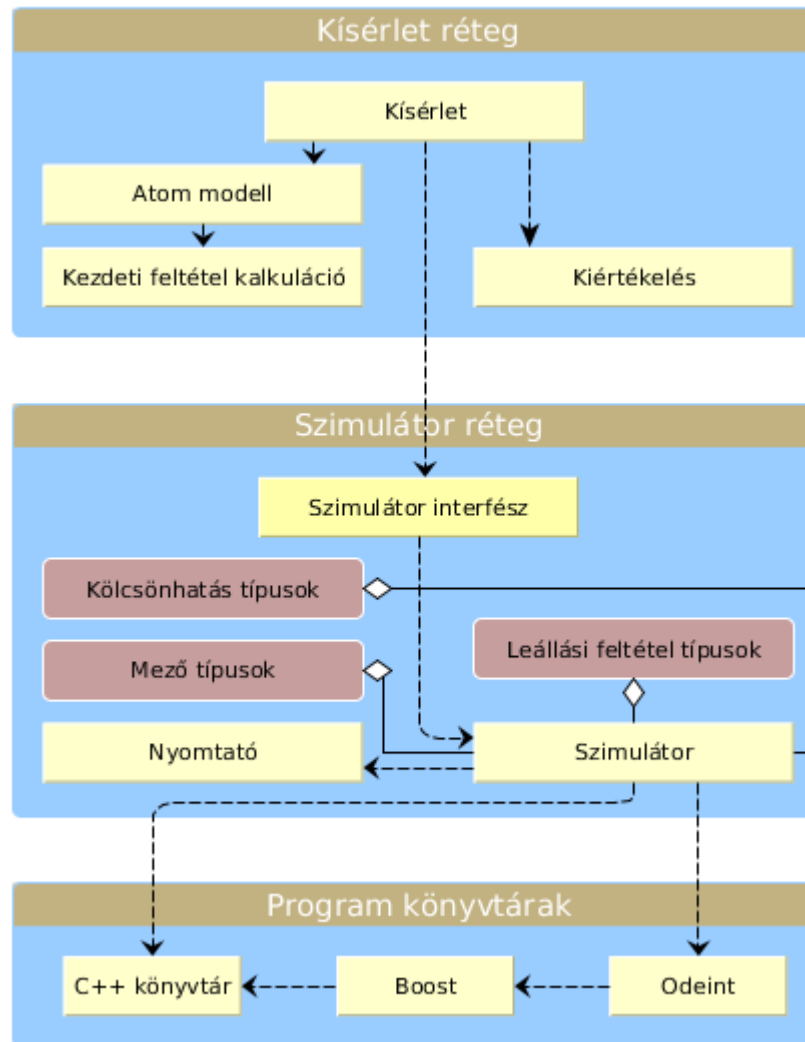
- **A szimulátor program**

Felépítés, működés

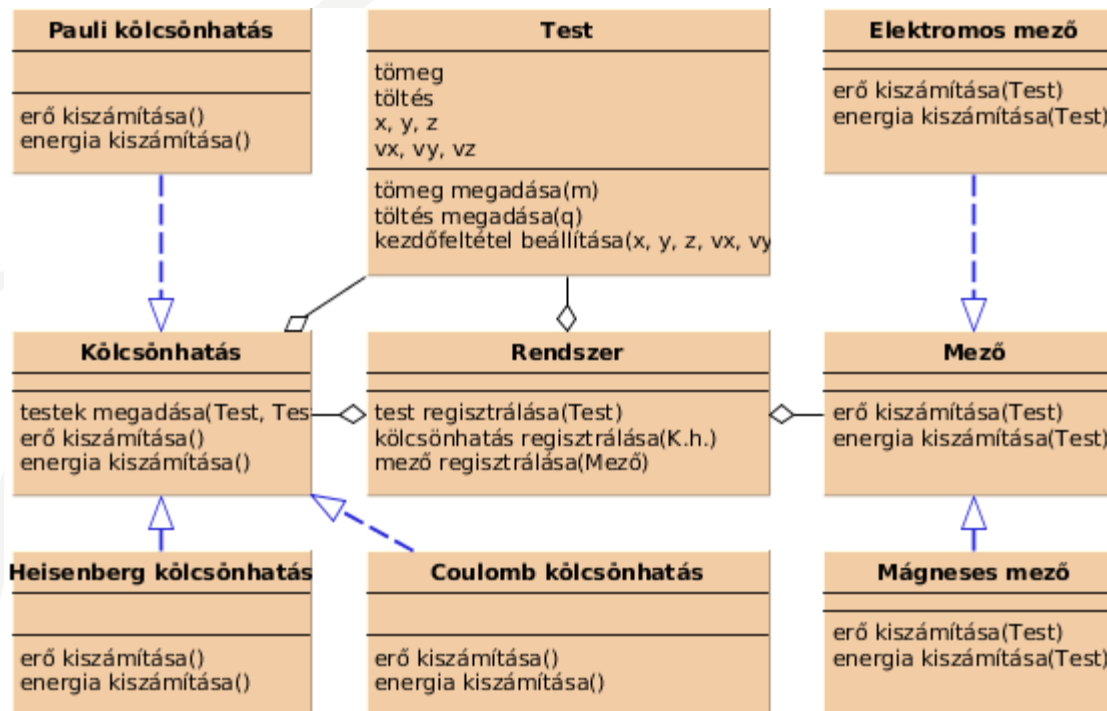
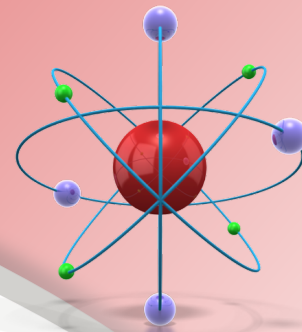


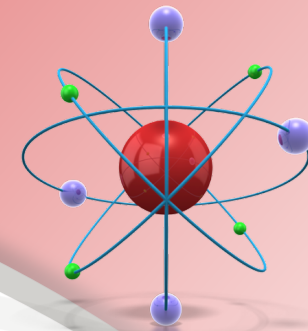
• Szoftver architektúra

- C++
- Programkönyvtár
- Magas, atomfizika-specifikus absztrakciós szint
- Rugalmas programozói felület
- Gyors futás
- Számos integráló algoritmus
- Egyszerű bővíthetőség



• A soktest-probléma számítógépes modellje





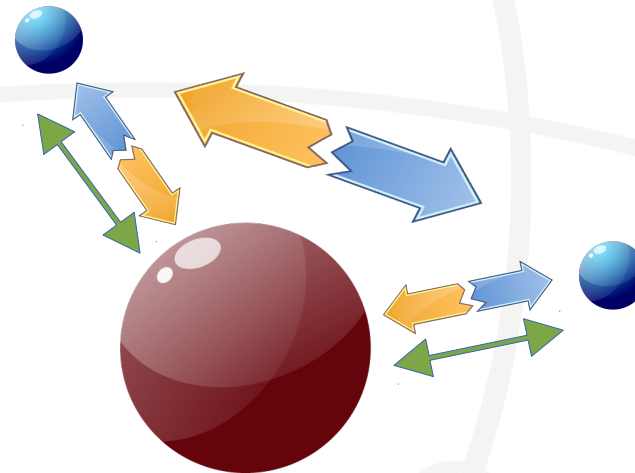
• Szimulátor interfész példa

Hélium atom létrehozása

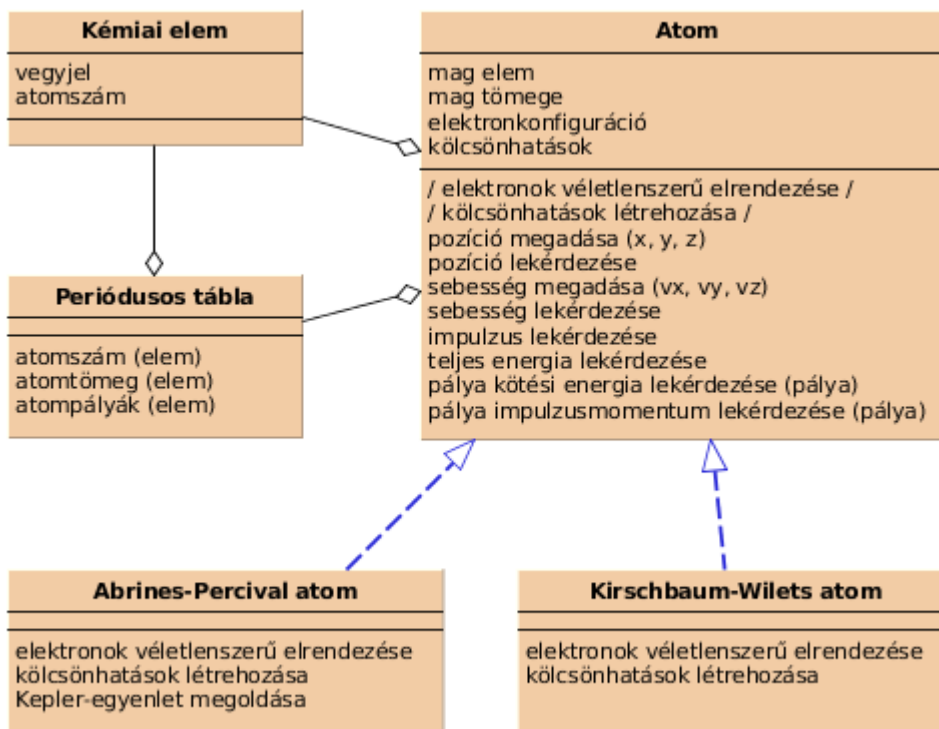
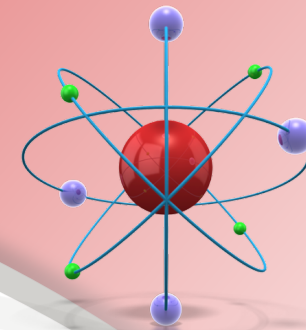
- Tömegpont (mag)
- Tömegpont (elektron)
- Tömegpont (elektron)
- Coulomb kölcsönhatás
- Coulomb kölcsönhatás
- Coulomb kölcsönhatás
- Heisenberg kölcsönhatás
- Heisenberg kölcsönhatás



- Szükségtelen deklarálni a mozgásegyenletek matematikai formuláit



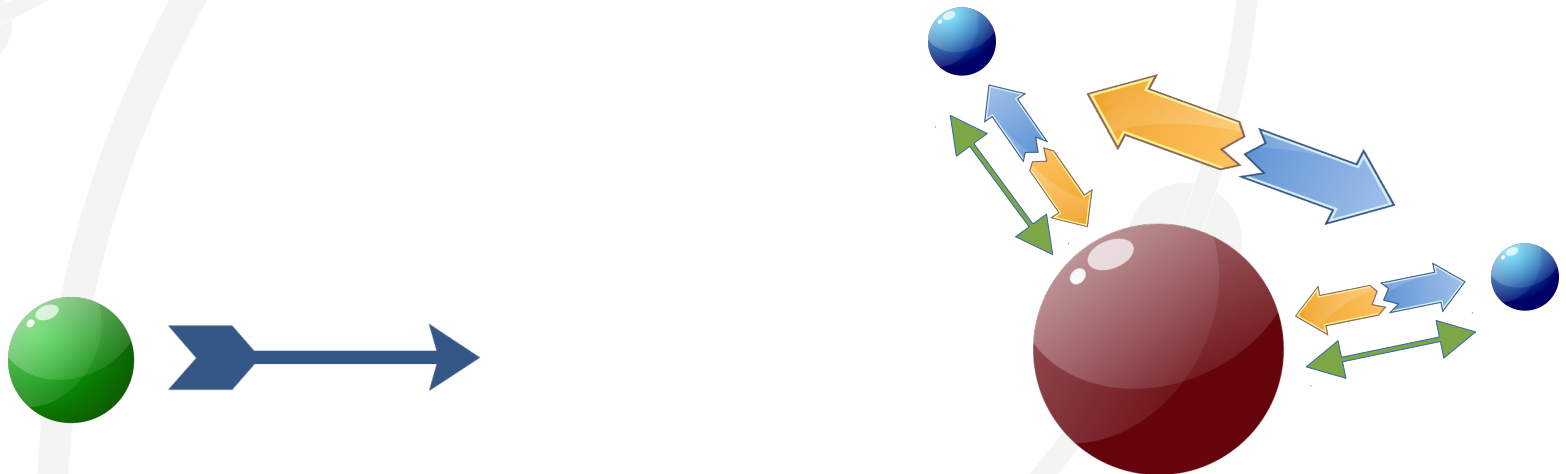
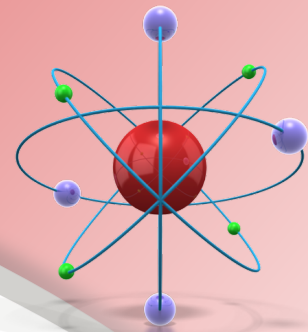
• Az atom számítógépes modellje

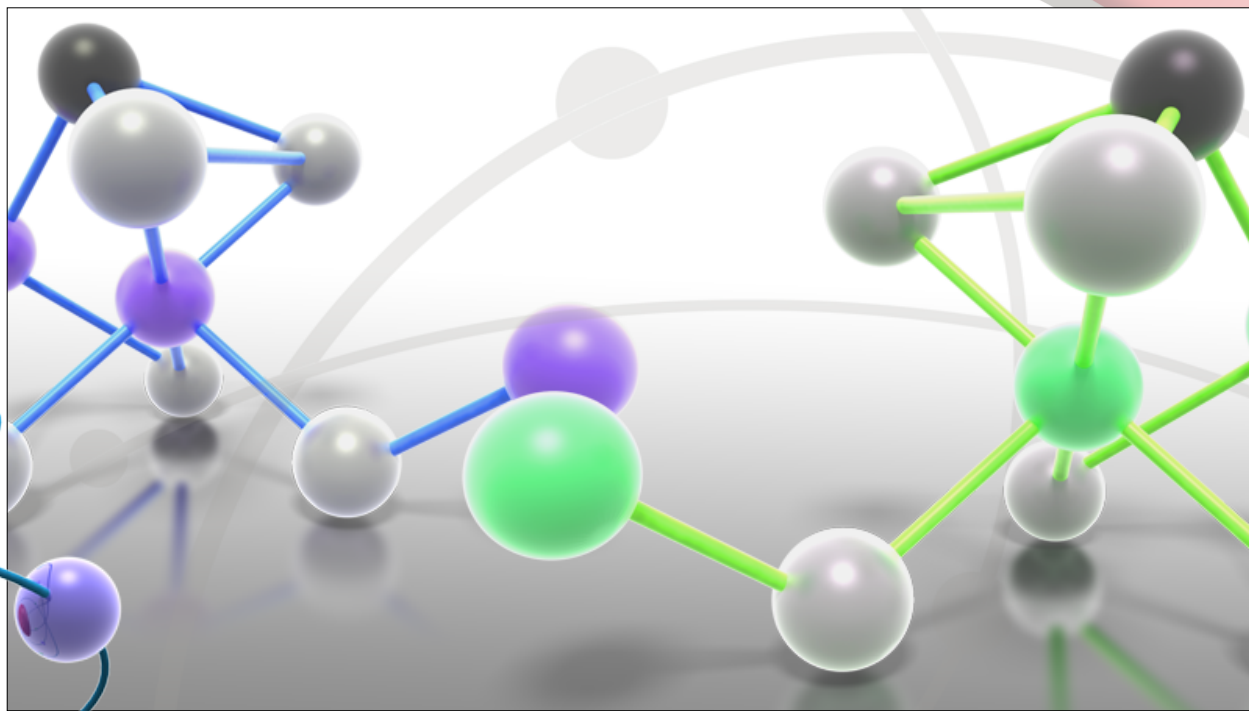
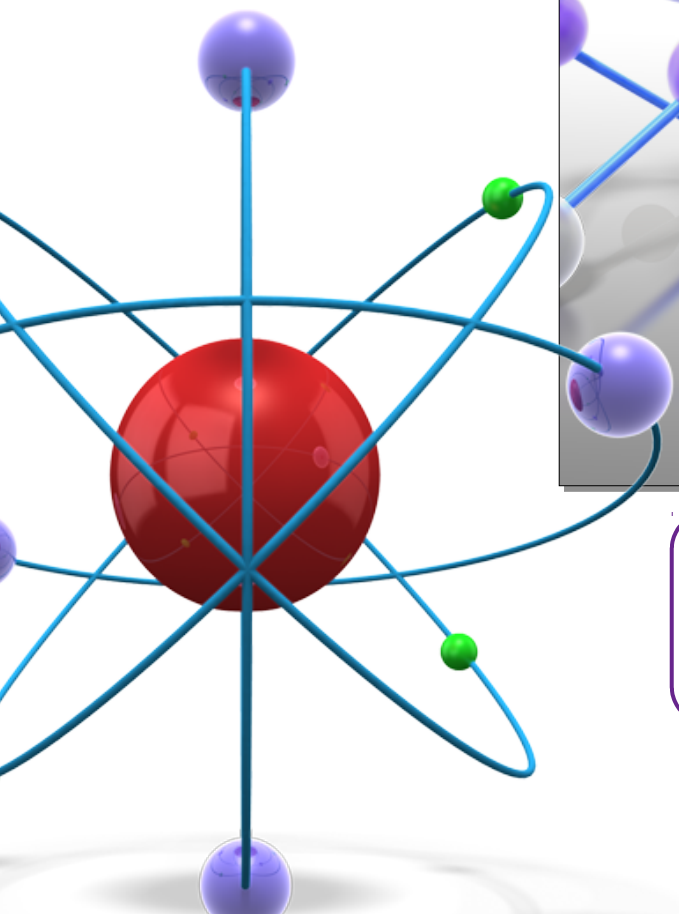


• Atom interfész példa

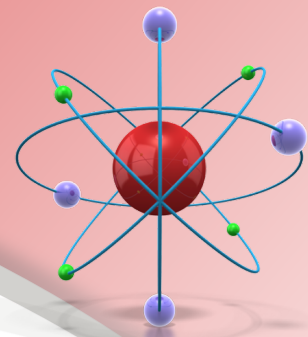
Ütközési elrendezés definiálása

- Hélium atom létrehozása
- Atom pozicionálása
- Lövedék létrehozása
- Lövedék pozicionálása
- Lövedék sebesség beállítása



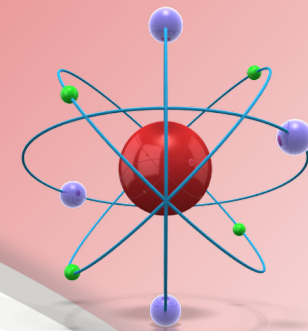


- Proton \rightarrow hidrogén ütközés számítása



• A mérés összefoglalása

- Hidrogén ütközik célatom proton lövedékkel
- Abrines-Percival modell
- CTMC módszer
- Hatáskeresztmetszet számítás az ionizációra és az elektronbefogásra vonatkozóan
- Lövedék energia 20keV és 600keV között
- A cél a szimulátor program helyes működésének bizonyítása



• Az ütközési rendszer

- Potenciális energia:

$$V = \frac{Z}{r_{PT}} - \frac{1}{r_{P1}} - \frac{Z}{r_{T1}}$$

- Mozgásegyenletek:

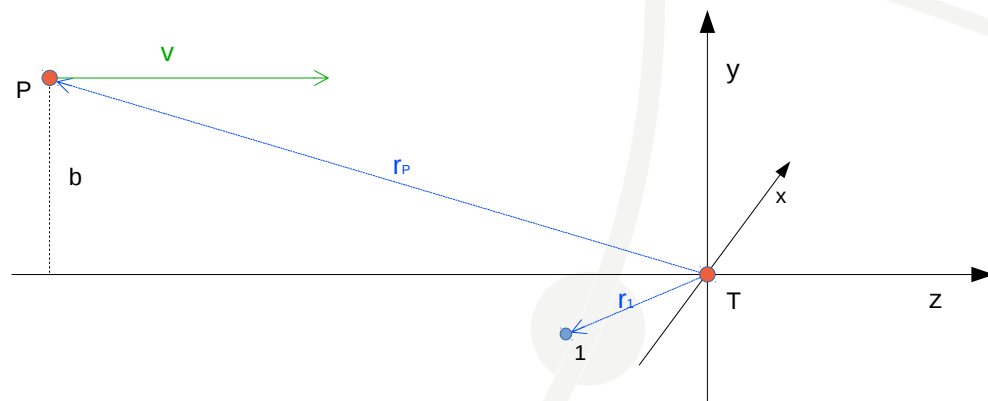
$$\dot{\vec{r}}_T = \frac{\vec{p}_T}{m_T} \quad \dot{\vec{r}}_P = \frac{\vec{p}_P}{m_P} \quad \dot{\vec{r}}_1 = \frac{\vec{p}_1}{m_1}$$

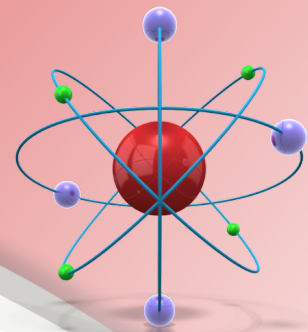
$$\dot{\vec{p}}_T = Z \frac{\vec{r}_T - \vec{r}_P}{|\vec{r}_T - \vec{r}_P|^3} - Z \frac{\vec{r}_T - \vec{r}_1}{|\vec{r}_T - \vec{r}_1|^3}$$

$$\dot{\vec{p}}_P = Z \frac{\vec{r}_P - \vec{r}_T}{|\vec{r}_P - \vec{r}_T|^3} - \frac{\vec{r}_P - \vec{r}_1}{|\vec{r}_P - \vec{r}_1|^3}$$

$$\dot{\vec{p}}_1 = Z \frac{\vec{r}_T - \vec{r}_1}{|\vec{r}_T - \vec{r}_1|^3} - \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_P}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_P|^3}$$

- Ütközési elrendezés:





- **Kezdeti feltételek**

- Egyenletes eloszlás szerint válasszuk meg véletlenszerűen

- az ellipszispálya excentricitásának négyzetét

$$0 \leq \epsilon^2 \leq 1$$

- az ellipszispálya idővel arányos paraméterét

$$0 \leq \theta_n \leq 2\pi$$

- a pálya térbeli elforgatásának három Euler-szögét

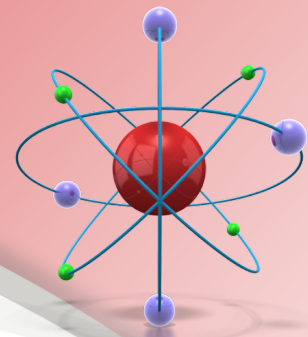
$$-\pi \leq \varphi \leq \pi \quad -1 \leq \cos(\theta) \leq 1 \quad -\pi \leq \eta \leq \pi$$

- az impact paramétert

$$0 \leq y_0^2 \leq b_{max}^2 \quad y_0 = b$$

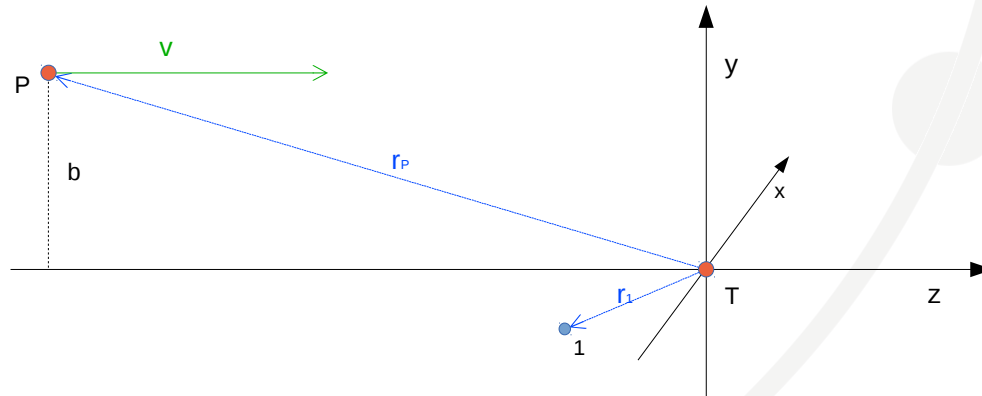
- Oldjuk meg a Kepler-egyenletet (u : excentricitás szöge)

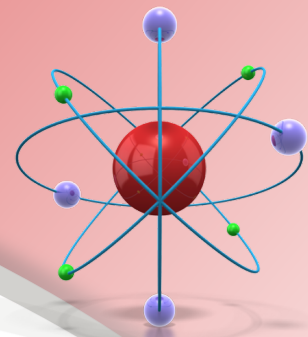
$$\theta_n = u - \epsilon \sin(u)$$



• A kezdeti feltételek beállítása

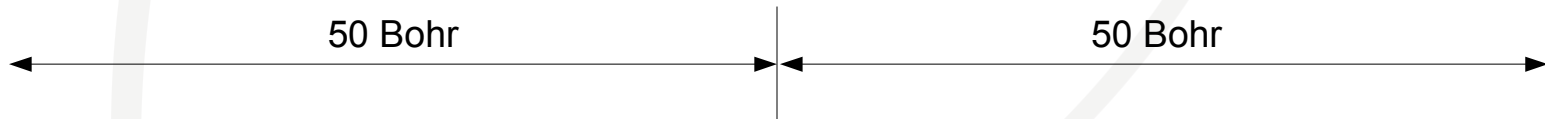
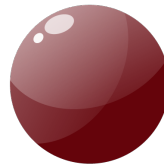
- 1) Helyezzük a magot az origóba.
- 2) Helyezzük az ε excentricitású Kepler-pályát az y - z síkba úgy, hogy egyik gyújtópontjában a mag legyen, és a pálya nagy tengelye a z irányba mutasson.
- 3) Helyezzük az elektront a pálya u excentricitás szögű pontjába.
- 4) Végezzük el az Euler-elforgatást a mag körül.
- 5) Helyezzük a lövedéket $(0, b, -50)$ pozícióba
- 6) Állítsuk be a lövedék z irányú sebességét az ütközési energiának megfelelően





• Integrálás

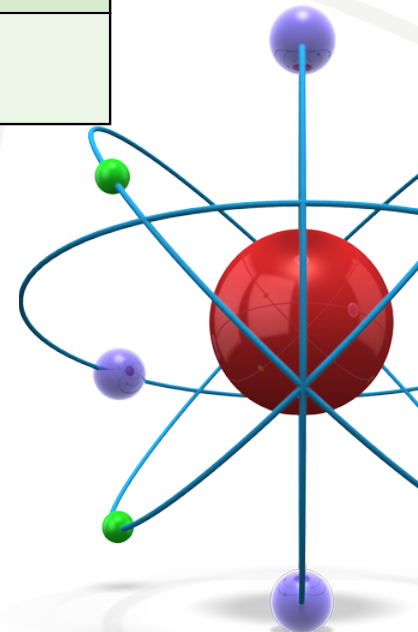
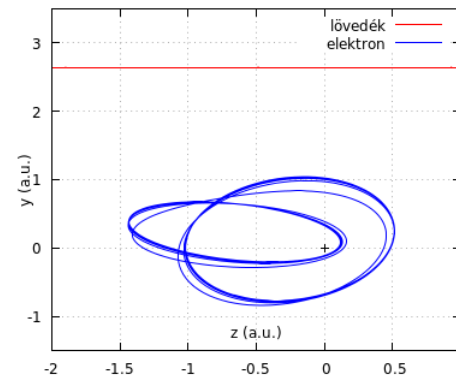
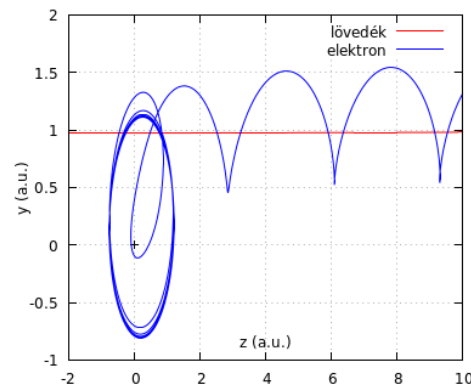
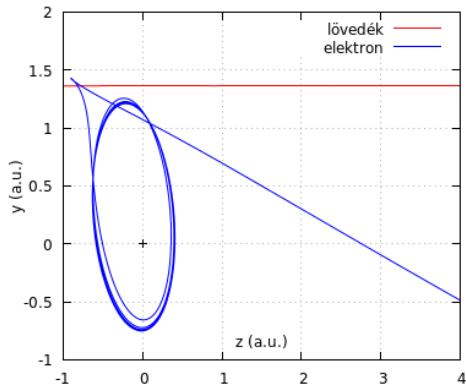
- A célmag és a lövedék közti 50 Bohr távolság eléréséig
- Runge-Kutta Dormand-Prince módszerrel
 - Ötöd rendű
 - Adaptív
 - $\left| \frac{\Delta E_{total}}{E} \right| < 10^{-6}$
- Energiánként 1.000.000 pályát számítottunk ki

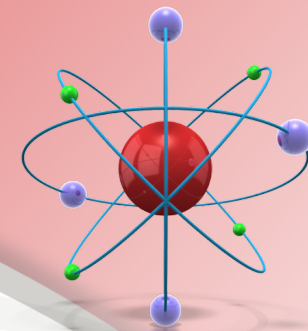


• Kimenő csatornák

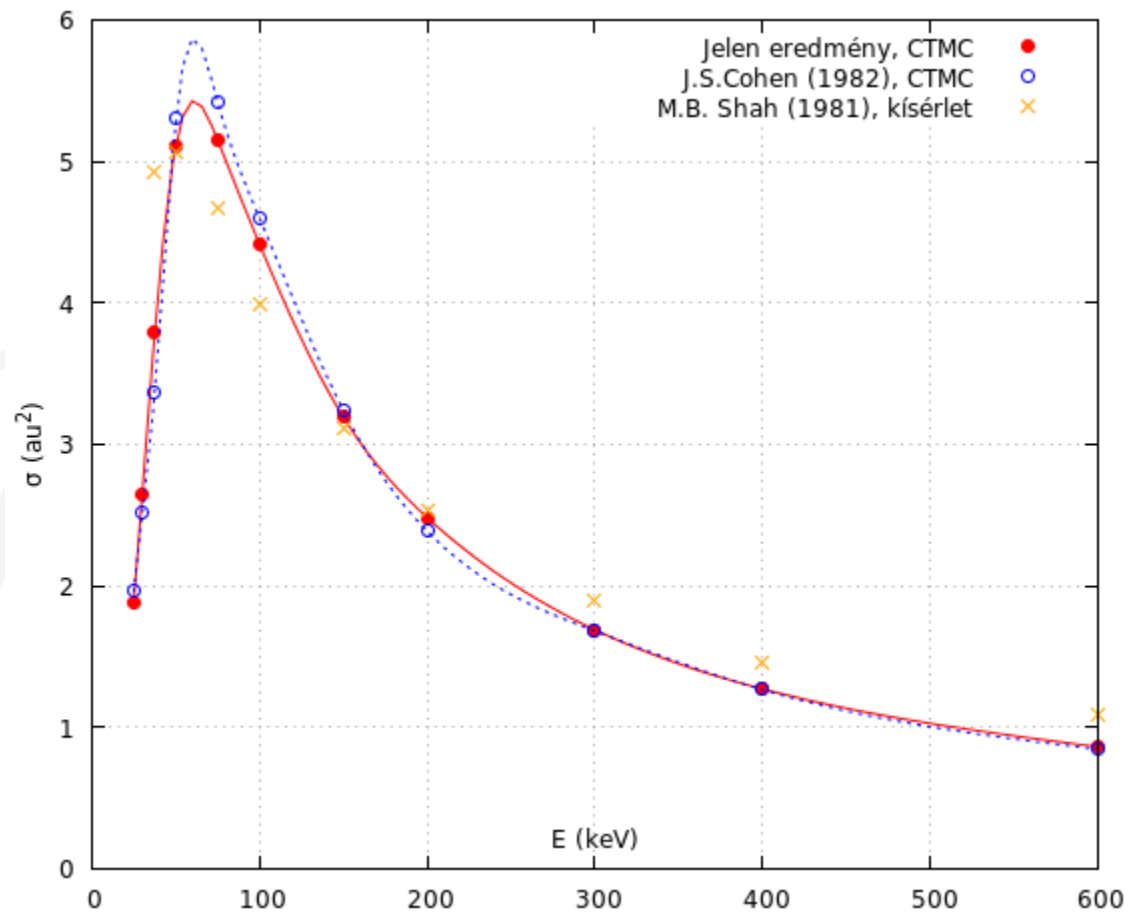
A lejátszódott folyamat beazonosítása a relatív két-részecske energiák polaritásának meghatározásával történik a rendszer végállapotú fázisában.

Mag-elektron	Lövedék-elektron	Folyamat
+	+	Ionizáció
+	-	Befogás
-	+	Direkt folyamat
-	-	„döntetlen”

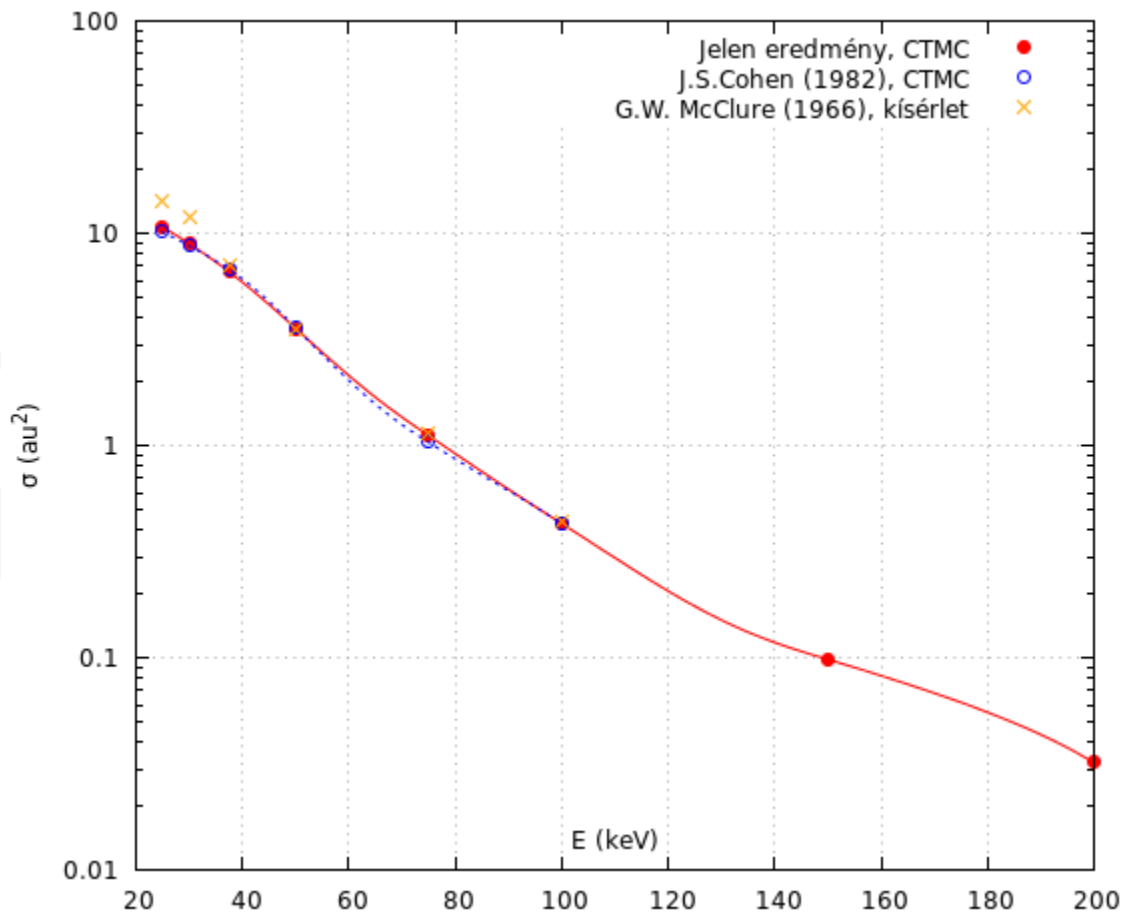
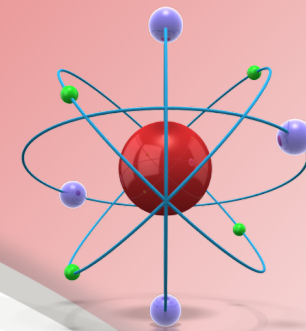


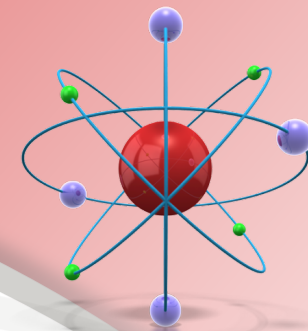


• Ionizáció hatáskeresztmetszete



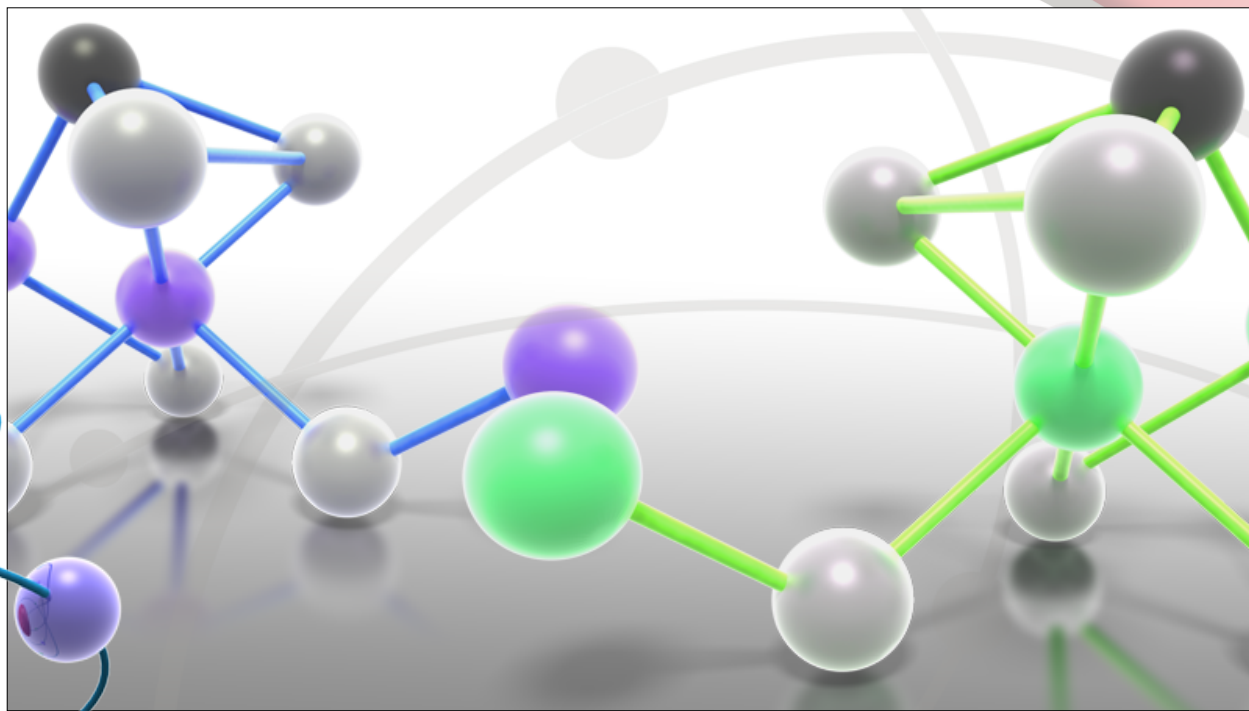
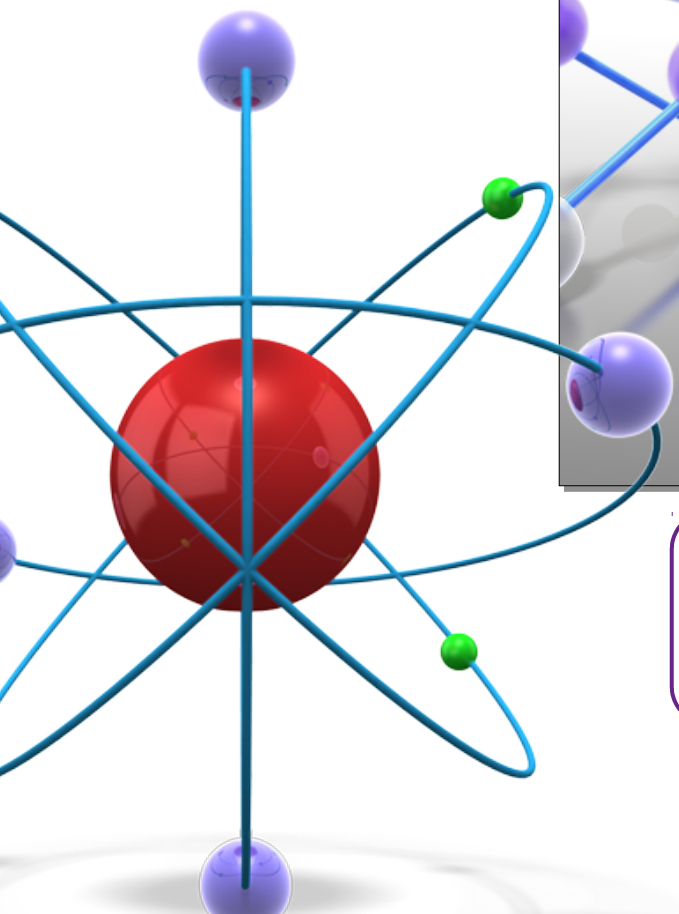
• Elektronbefogás hatáskeresztmetszete



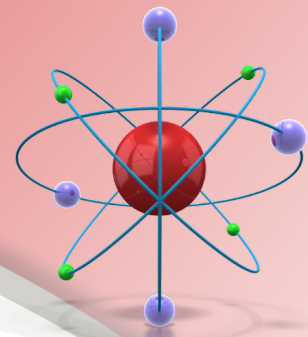


- **A hatáskeresztmetszetek statisztikus hibája**

<i>Lövedék energia [keV]</i>	<i>Ionizációs hatáskeresztmetszet [au²]</i>	<i>Elektronbefogási hatáskeresztmetszet [au²]</i>
25	1.89 ± 0.57 %	10.7 ± 0.22 %
30	2.65 ± 0.48 %	8.95 ± 0.25 %
37.5	3.79 ± 0.39 %	6.59 ± 0.29 %
50	5.11 ± 0.34 %	3.57 ± 0.41 %
75	5.15 ± 0.33 %	1.11 ± 0.74 %
100	4.42 ± 0.36 %	0.43 ± 1.2 %
150	3.19 ± 0.43 %	9.8e-2 ± 2.5 %
200	2.48 ± 0.49 %	3.2e-2 ± 4.4 %
300	1.69 ± 0.60 %	6.0e-3 ± 10 %
400	1.27 ± 0.70 %	1.3e-3 ± 21 %
600	0.86 ± 0.85 %	5.6e-4 ± 33 %

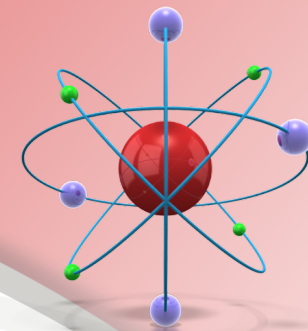


- Proton \rightarrow hélium ütközés számítása



• A mérés összefoglalása

- Hélium célatom ütközik proton lövedékkel
- Kirschbaum-Wilets modell
 - Heisenberg-potenciál
 - Pauli-potenciál nincs (\uparrow, \downarrow)
- QCTMC módszer
- Hatáskeresztmetszet számítás
 - egyszeres ionizációra
 - egyszeres elektronbefogásra
- Lövedék energia 20keV és 600keV között



• Hélium atom a Kirschbaum-Wilets modellben

- Hamilton függvényy:

$$H = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{p_1^2}{2m_e} + \frac{p_2^2}{2m_e} - \frac{Z}{r_{n1}} - \frac{Z}{r_{n2}} + \frac{1}{r_{12}} + V_H(r_{n1}, p_{n1}) + V_H(r_{n2}, p_{n2})$$

$$r_{ni} = |\vec{r}_i - \vec{r}_n| \quad p_{ni} = \frac{|m_n \vec{p}_i - m_e \vec{p}_n|}{m_n + m_e} \quad i=1,2$$

„ \vec{p}_α vektor” ($\alpha = n, 1, 2$) nem azonos a szokásos kinetikus impulzussal.

$$\vec{p}_\alpha \neq m_\alpha \dot{\vec{r}}_\alpha$$

- Mozgásegyenletek:

$$\dot{\vec{r}}_1 = \frac{\vec{p}_1}{m_1} + \frac{m_n}{m_n + m_e} \frac{\partial V_H(r_{n1}, p_{n1})}{\partial p_{n1}} \frac{(m_n \vec{p}_1 - m_e \vec{p}_n)}{|m_n \vec{p}_1 - m_e \vec{p}_n|}$$

$$\dot{\vec{p}}_1 = -\frac{Z}{r_{n1}^2} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|} + \frac{1}{r_{12}^2} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{\partial V_H(r_{n1}, p_{n1})}{\partial r_{n1}} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|}$$

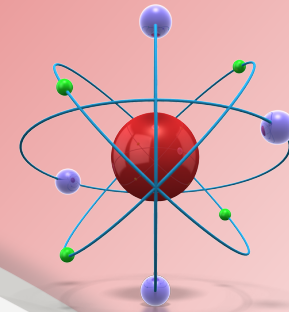
$$\dot{\vec{r}}_2 = \frac{\vec{p}_2}{m_2} + \frac{m_n}{m_n + m_e} \frac{\partial V_H(r_{n2}, p_{n2})}{\partial p_{n2}} \frac{(m_n \vec{p}_2 - m_e \vec{p}_n)}{|m_n \vec{p}_2 - m_e \vec{p}_n|}$$

$$\dot{\vec{p}}_2 = -\frac{Z}{r_{n2}^2} \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_n|} - \frac{1}{r_{12}^2} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{\partial V_H(r_{n2}, p_{n2})}{\partial r_{n2}} \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_n|}$$

$$\dot{\vec{r}}_n = \frac{\vec{p}_n}{m_n} - \frac{m_e}{m_n + m_e} \frac{\partial V_H(r_{n1}, p_{n1})}{\partial p_{n1}} \frac{(m_n \vec{p}_1 - m_e \vec{p}_n)}{|m_n \vec{p}_1 - m_e \vec{p}_n|} - \frac{m_e}{m_n + m_e} \frac{\partial V_H(r_{n2}, p_{n2})}{\partial p_{n2}} \frac{(m_n \vec{p}_2 - m_e \vec{p}_n)}{|m_n \vec{p}_2 - m_e \vec{p}_n|}$$

$$\dot{\vec{p}}_n = \frac{Z}{r_{n1}^2} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|} + \frac{Z}{r_{n2}^2} \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_n|} + \frac{\partial V_H(r_{n1}, p_{n1})}{\partial r_{n1}} \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|} + \frac{\partial V_H(r_{n2}, p_{n2})}{\partial r_{n2}} \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_n)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_n|}$$

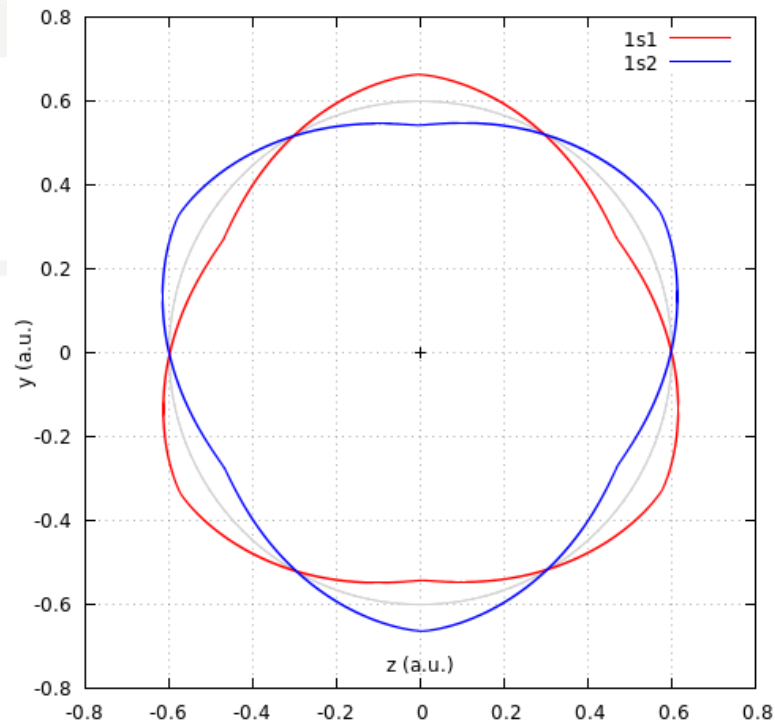


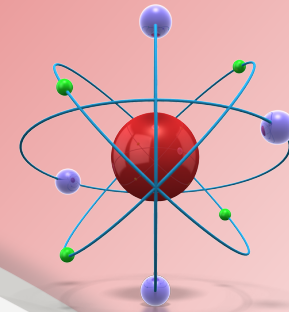


• Az elektronpályák kezdeti feltételei

- Szimmetrikus
- Érintő irányú sebesség
- A pályasugarat a kötési energia irodalmi értékhez való illesztésével hangoltuk
- Véletlen Euler-elforgatás

Fizikai tulajdonság	Jelen modell	Irodalmi érték
Kötési energia	2.903 Ha	2.903 Ha
Első ionizációs energia	0.991 Ha	0.903 Ha
Átlagos atomsugár	0.6 Bohr	0.6 Bohr
Pálya „impulzus”	1.8 a.u.	1.4 a.u.





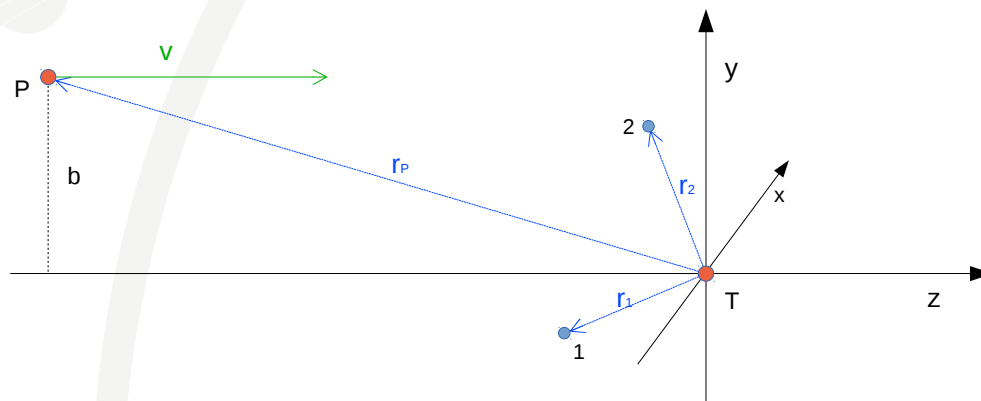
• Az ütközési rendszer

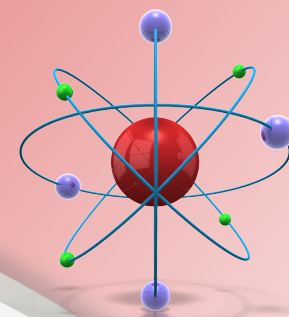
- Hamiltoni:

$$H = H_0 + V_H(r_{n1}, p_{n1}) + V_H(r_{n2}, p_{n2})$$

$$H_0 = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{p_t^2}{2m_t} + \frac{p_1^2}{2m_e} + \frac{p_2^2}{2m_e} - \frac{2}{r_{n1}} - \frac{2}{r_{n2}} - \frac{1}{r_{t1}} - \frac{1}{r_{t2}} + \frac{2}{r_{nt}} + \frac{1}{r_{12}}$$

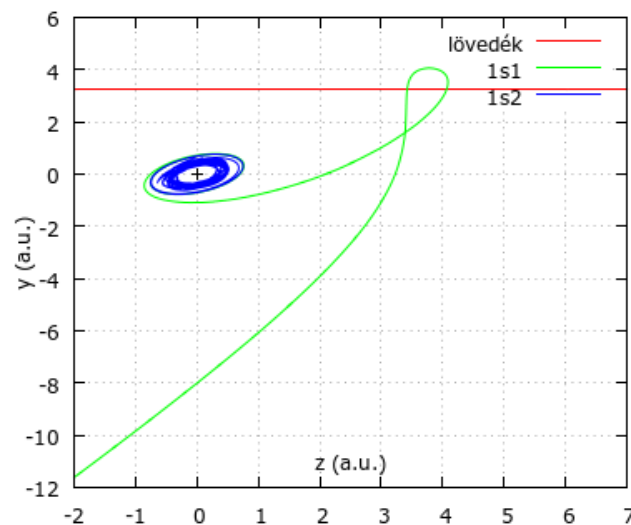
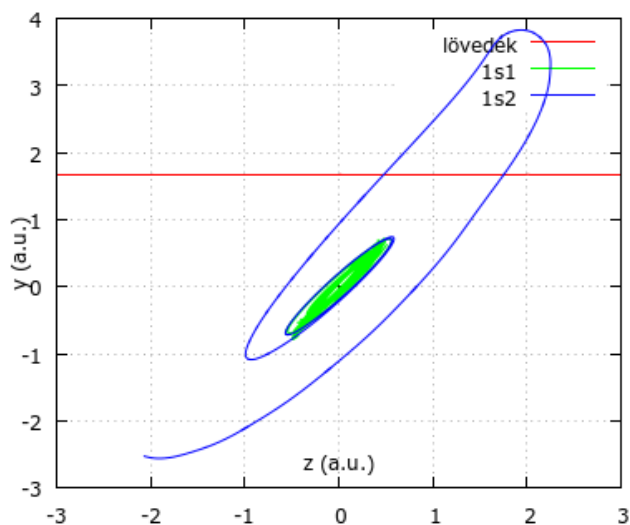
- Ütközési geometria:

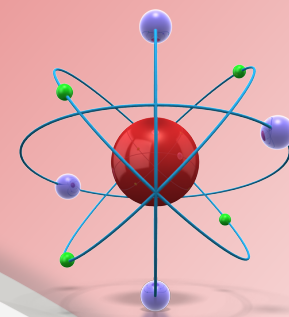




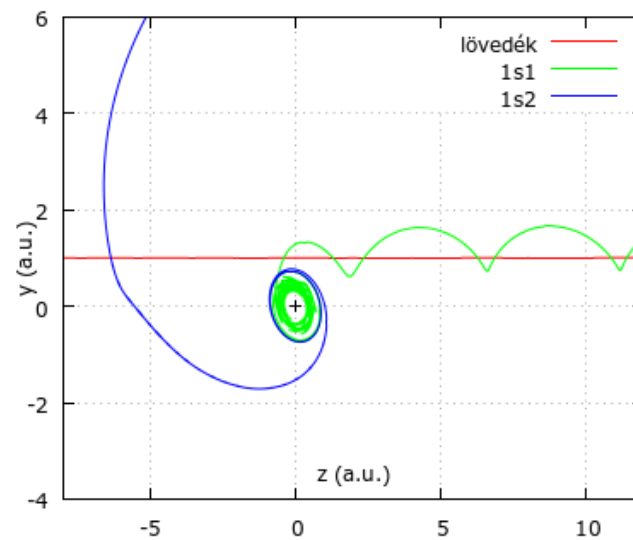
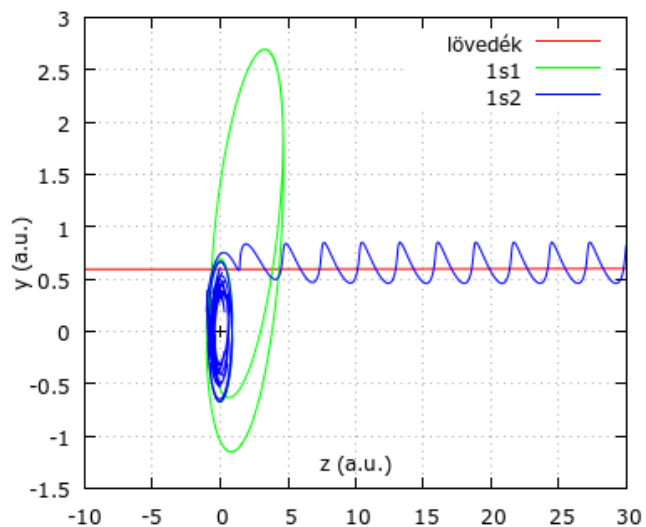
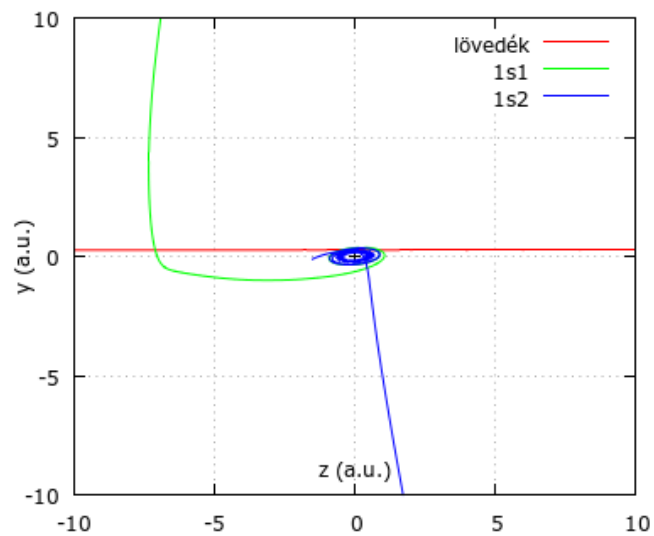
• Kimenő csatornák

<i>Folyamat</i>	E_{i1}	E_{i2}	E_{p1}	E_{p2}
Direkt folyamat	-	-	+	+
Egyszeres ionizáció	+ (-)	- (+)	+	+
Kétszeres ionizáció	+	+	+	+
Egyszeres befogás	+ (-)	- (+)	- (+)	+ (-)
Kétszeres befogás	+	+	-	-
Befogás és ionizáció	+	+	- (+)	+ (-)

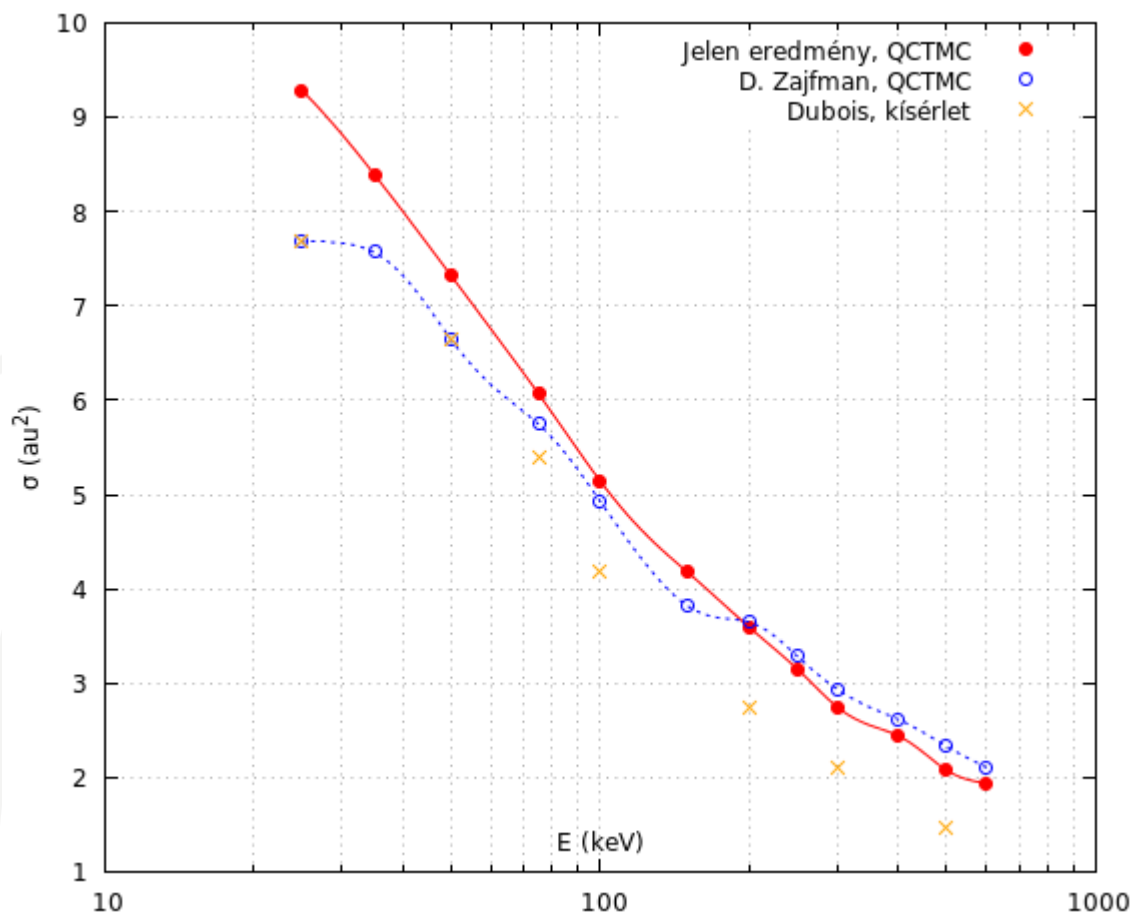
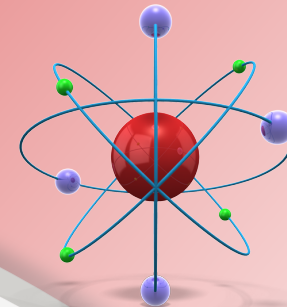


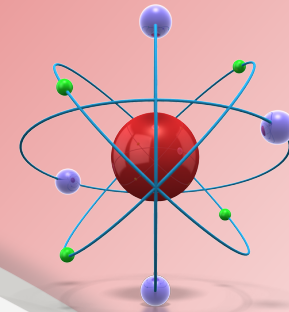


• Kimenő csatornák

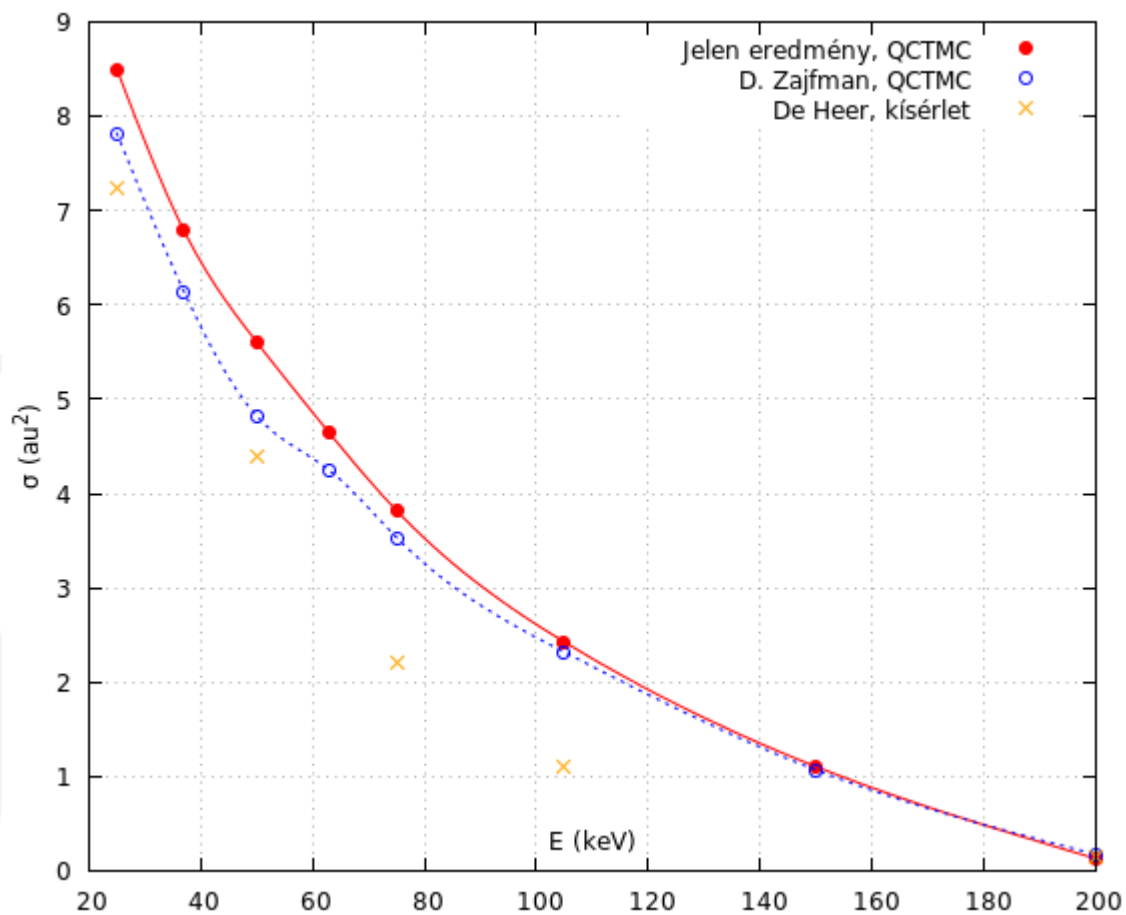


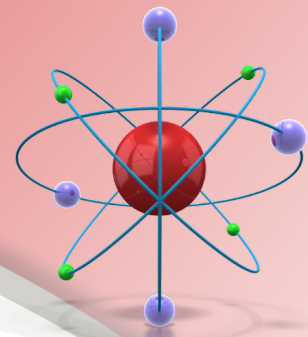
• Egyszeres ionizáció hatáskeresztmetszete





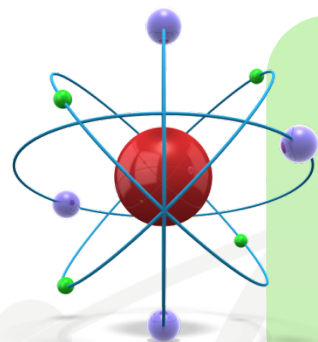
• Egyszeres elektronbefogás hatáskeresztmetszete





• Továbbfejlesztési ötletek

- Mezők kezelése
 - Elektromos
 - Mágneses
 - Elektromágneses hullám
- Elektron-elektron és az elektron-mag közti mágneses kölcsönhatások figyelembe vétele
- A Pauli-potenciálba vonjunk be más konjugált párokat is
 - Pl. impulzus momentum(különbség) * orientáció(különbség)
- Volfrám számítására van igény



Köszönöm a figyelmet!

