

DOKTORI ÉRTEKEZÉS

BELSŐ KONVERZIÓS ÉS ELEKTRON-HÍD FOLYAMATOK INTENZÍV LÉZERTEREBEN

írta: **Bükki Tamás**

Témavezető: Dr. Kálmán Péter, egyetemi docens
BME Fizikai Intézet, Kísérleti Fizika Tanszék

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Kísérleti Fizika Tanszék

2002

1. Bevezetés

“— Lehetségesnek tartja, hogy az anyagot a fény kvantumaival bombázva az radioaktivitást váltson ki?

— Mindenekelőtt azt kell mondjam, hogy valószínűleg létezik radioaktivitás, amelyet a fény kvantumai váltanak ki; ilyen jelenség megfigyelése azért nehéz, amennyiben létezik, mert a jelenség kicsi. Egy ilyen effektus létezéséről meggyőződni nehéz ugyan, de nem lehetetlen.”¹

Az atommagok elektromágneses sugárzási terek által történő indukált átmeneteinek vizsgálata a '80-as években kapott lendületet, elsősorban a nagy intenzitású sugárforrások (impulzuslézerek) megjelenésének köszönhetően. Az atommag és a sugárzási tér direkt kölcsönhatását elméleti úton vizsgálva kiderült — összhangban A. Einstein jóslatával —, hogy számottevő effektusra nem számíthatunk. Becker és mtsai. [1984a] például kimutatták, hogy a γ bomlás felgyorsulása még $I = 10^{18} \text{ W/cm}^2$ lézerezintenzitások mellett is jelentéktelen mértékű marad.

¹1925. április 16-án Albert Einstein, az Argentin Nemzeti Tudományos Akadémia tiszteletbeli oklevelét vette át, és egyben válaszolt az Akadémia tagjainak kérdéseire. A fent idézett részlet a négy évvel később nyomtatásban is megjelent interjúból származik: *Annales Sociedad Científica Argentina*, **107** (1929) 337.

Ugyanezen szerzők megvizsgálták a lézer-asszisztált β bomlás lehetőségeit is, ahol a fentiekhez hasonló konklúzióra jutottak [Becker és mtsai., 1984b]. Így tehát már több mint egy évtizeddel ezelőtt kiderült — ami ma is még igaz —, hogy *közvetlen úton*, a ma elérhető intenzitású lézerekkel a magok bomlási folyamatait megfigyelhető mértékben nem lehet befolyásolni.

A hosszú felezési idejű gerjesztett magállapottal rendelkező magok, az ún. izomerek zöménél azonban a bomlási energiát általában az atom egyik elektronja viszi el, azaz a mag főleg *belső konverzióval* bomlik. Az ilyen belső konverziós folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűsége viszont erősen függ a folyamatban résztvevő atomi elektron állapotától, mely elektronállapot viszont külső sugárzási tér bekapcsolásával módosítható. A belső konverzió tehát egy olyan mechanizmus, ahol lehetőségünk nyílik beavatkozni a magfizikai folyamatokba oly módon, hogy a radioaktív atom elektronállapotait változtatjuk meg. A belső konverziós bomlás befolyásolásának egy triviális példája az a folyamat, amikor az elektromágneses tér az atomot ionizált állapotba hozza. Az ionizáció során ugyanis az atom elvesztheti olyan elektronjait, amelyek jelentős részt vállalnak a mag legerjesztődésében, lecsökkentve ezzel magát a bomlás rátáját is [Baldwin és mtsa., 1982]. Ezt a gondolatkört érdemes másik oldalról is megvizsgálni, vagyis azt is kérdezhetjük, hogy létezik-e olyan

lézerrel segített elektron-atommag kombinált folyamat, amelyben az izomérek bomlása, szemben az előző példával, jelentősen felgyorsítható.

Értekezésünk a lézer-indukált belső konverziós és elektron-híd folyamatok jelenségkörével foglalkozik. Az elektron-atommag-lézer kombinált folyamatokat a kvantummechanikai perturbációs számítás segítségével kezeljük. Az értekezés tárgyát képező folyamatok legalább harmadrendű folyamatok, amelyek kezeléséhez és a felmerülő folyamatok időegységre jutó átmeneti valószínűségének (rátájának) kiszámításához számos egyszerűsítéssel kellett élnünk. Így például a folyamatok rátájának kiszámításához használt elektron hullámfüggvényeket nemrelativisztikus, hidrogénszerű hullámfüggvényeknek vettük. Továbbá a dolgozatban nem vizsgáljuk azt, hogy intenzív elektromágneses terek jelenlétekor az atom többszörösen ionizált állapotba kerülhet, ami pedig jelentősen befolyásolhatja a számítások szempontjából érdekes kötött elektron állapotát. Mindezek miatt az átmeneti valószínűségekre közölt számszerű értékek bizonytalanok, és inkább nagyságrendi jelentésük van.

Az elmúlt évek szakirodalma számos olyan elméleti eredményt, modellt közöl, amelyek alapján kiszámolva a vizsgált folyamatok időegységre jutó átmeneti valószínűségét, más és más, egymástól több nagyságrendben eltérő eredmény adódik. Az elvi háttér tisztázatlanságához nagyban hozzájárul az is, hogy a témában az elmúlt években nem történt

kísérleti előrelépés, amely minősíthetné a folyamatok leírására használt modelleket.

Dolgozatunk célja az, hogy átláthatóvá tegye az elektron-atommag-lézer kombinált folyamatok leírására használt különböző elvi megközelítéseket. Az elmúlt évek munkája során sikerült egy olyan modellt kidolgoznunk, amellyel az elektron-atommag-lézer csatolt folyamatok nagy része hatásosan kezelhetővé válik. Modellünkben az eddigi modelleknél világosabban követhető nyomon a vizsgált jelenségek fizikai tartalma is. Bár a közelítések miatt az egyes folyamatok rátájára kiszámolt értékek továbbra is inkább kvalitatív mint kvantitatív eredményekként kezelendők, úgy véljük, hogy a lézer segített elektron-atommag kombinált jelenségek lényeges aspektusaira értekezésünk rámutat. Ezen elméleti tárgyú értekezés jelentőségét pedig abban látjuk, hogy új irányt mutathat a téma kutatóinak, és ezzel talán kísérletek sorozatát inspirálhatja, amelyek elengedhetetlenek ahhoz, hogy az igen összetett elektron-atommag-lézer kombinált folyamatokat jobban megismerhessük.

2. Lézermentes belső konverziós és elektron-híd folyamatok

Ebben a fejezetben a metastabil magok belső konverziós bomlásának illetve az elektron-híd folyamatnak az elméleti alapjaival foglalkozunk. Mivel az értekezésnek nem tárgya a belső konverziós és az elektron-híd folyamatok sokrétű problémájának elemzése, ezért csak olyan mértékig megyünk bele az elméleti háttér ismertetésébe, amely a dolgozat tárgyának, a lézer-indukált belső konverziós és elektron-híd folyamatoknak a megértéséhez nélkülözhetetlen.

2.1 *A metastabil magállapot bomlása: γ -bomlás és belső konverzió*

Metastabilnak nevezzük azokat a gerjesztett magállapotokat, amelyeknek az élettartama a többi magállapot élettartamához (fs ÷ ps) viszonyítva nagy (μs ÷ év). Az ilyen állapotoknak a magfizikai időskálán lassúnak tekinthető bomlása annak köszönhető, hogy a mag nem tud elektromos (ill. mágneses) dipól átmenettel (vagy a magok esetében hatékony elektromos kvadrupól átmenettel) megszabadulni a gerjesztési energiájától. Az L multipolaritású γ átmenet időegységre jutó átmeneti valószínűsége (W_γ) a következő alakban írható fel:

$$W_\gamma = \frac{8\pi (L+1)}{L [(2L+1)!!]^2} \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\omega_{AB}}{c} \right)^{2L+1} B(EL, I_A \rightarrow I_B), \quad (2.1)$$

ahol ω_{AB} az $A \rightarrow B$ magátmenet során kibocsátott sugárzás körfrekvenciája, c a fénysebesség és $B(EL, I_A \rightarrow I_B)$ az EL rendű multipól átmenet redukált átmeneti valószínűségét jelöli [Alder és mtsai., 1956]; I_A és I_B a mag kezdeti- és végállapotának impulzusmomentuma, és a lehetséges multipól rendeket a $|I_A - I_B| \leq L \leq I_A + I_B$ reláció határozza meg. A W_γ időegységre jutó átmeneti valószínűség az átmenet multipolaritásának növekedésével rohamosan csökken. Ez jól látható akkor, ha (2.1)-et a következő közelítő alakban írjuk fel:

$$W_\gamma \propto \left(\frac{\omega_{AB}}{c} d_{mag} \right)^{2L}, \quad (2.2)$$

ahol $d_{mag} \sim 10^{-13} \text{ cm}$ a mag karakterisztikus mérete.

A metastabil magok (tipikusan $E3$, $E4$, $E5$ ill. $M2$, $M3$, $M4$ átmenettel történő) bomlása azonban úgy is végbemehet, hogy a mag gerjesztési energiája közvetlenül átadódik az atom egyik kötött elektronjának. Ekkor mind a mag gerjesztési energiáját, mind az impulzus-momentumot a folyamat végén szabad állapotba kerülő elektron viszi el. Az ilyen bomlást hívjuk belső konverzióknak. A belső konverziós bomlás a direkt γ bomlással versengő, attól függetlenül végbemenő folyamat. Hangsúlyoznunk kell,

hogy a belső konverzió semmiképp sem tekinthető egy olyan kétlépcsős folyamatnak, ahol a mag által emittált valódi γ kvantumot az izomér magot tartalmazó atom egyik kötött elektronja azonnal abszorbeálja. A mag $A \rightarrow B$ bomlásának időegységre jutó átmeneti valószínűsége épp ezért a következő formába írható:

$$W(A \rightarrow B) = W_\gamma + W_{IC}, \quad (2.3)$$

ahol W_{IC} a belső konverzió időegységre jutó átmeneti valószínűsége (rátája). A belső konverzió kvantitatív jellemzésére az α belső konverziós együttható szolgál, amelynek a definíciója a következő:

$$\alpha = W_{IC} / W_\gamma. \quad (2.4a)$$

Ennek segítségével

$$W(A \rightarrow B) = (1 + \alpha) W_\gamma. \quad (2.4b)$$

Mivel elektron kilépés több héjról is történhet, ezért $\alpha = \alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \dots$, ahol α_K a K héj belső konverziós együtthatója, és hasonlóan a többi héjra: $\alpha_L, \alpha_M \dots$. Itt feltételeztük, hogy az $A \rightarrow B$ magátmenet energiája bármelyik kötött elektron kötési energiájánál nagyobb.

2.2 Belső konverzió a Coulomb-modellben

A következőkben csak a K héjról történő belső konverzió időegységre jutó átmeneti valószínűségét vizsgáljuk a következő egyszerűsítések mellett:

- (a) Az elektron-atommag kölcsönhatást egyszerű elektrosztatikus, Coulomb-kölcsönhatásként kezeljük és a kötött atomi elektronok leírására nemrelativisztikus hullámfüggvényt használunk.
- (b) A szabad elektront síkhullám közelítéssel kezeljük, ami akkor tehető meg, ha az átadott magenergia nagy a kilökött elektron kötési energiájához képest.

Ezen közelítések mellett a K héjra W_{IC} a következőképpen írható [Blatt és Weisskopf, 1952]:

$$W_{IC} = 2 \frac{2\pi}{\hbar} z(k) \int |H_{AB}|^2 d\Omega, \quad (2.5)$$

ahol

$$H_{AB} = \langle A | \otimes \langle K | H_{\text{int}} | \mathbf{k} \rangle \otimes | B \rangle, \quad (2.6)$$

és $z(k) = V m \hbar k / (2\pi \hbar)^3$ az elektron végállapotú állapotosság, azaz a kijövő elektron egységnyi energiájára és $d\Omega$ térszögre jutó állapotainak a száma. V a normálási térfogat, és $k = |\mathbf{k}|$, ahol \mathbf{k} a kijövő elektron hullámszáma, m az elektron tömege. A bevezetett $|A\rangle$ és $|B\rangle$ az atommag

gerjesztett kezdeti ill. legerjesztett végállapotát, míg $|K\rangle$ ill. $|\mathbf{k}\rangle$ az elektron kezdetben a K héjon kötött, ill. a folyamat végére szabad állapotát reprezentálja². A mag-elektron kölcsönhatást leíró H_{int} Hamilton-operátor a mag protonjai és a héj elektronjai között ható Coulomb-kölcsönhatás, azaz

$$H_{\text{int}} = \sum_{i=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|}. \quad (2.7)$$

Itt \mathbf{R} az elektron koordinátája, \mathbf{r}_i az i -edik proton koordinátáját jelöli, Z a protonszám, e pedig az elemi töltés. Pontszerű magot feltételezve, azaz feltéve, hogy $R > r_i$ az $1/|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|$ kifejezés a következőképpen fejthető sorba:

$$\frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} \frac{r_i^L}{R^{L+1}} Y_{L,M}(\Theta, \Phi) Y_{L,M}^*(\theta_i, \phi_i), \quad (2.8)$$

ahol $Y_{L,M}$ a gömbfüggvényeket jelöli; Θ és Φ az \mathbf{R} , míg θ_i és ϕ_i az \mathbf{r}_i vektor polárszögei. Ezek után (2.6) a következő formába írható:

$$H_{AB} = \frac{e}{\sqrt{\pi a^3 V}} \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} J_{L,M} \langle A | M(EL, M) | B \rangle, \quad (2.9a)$$

ahol $a = a_0/Z$, és a_0 a Bohr-sugár.

$$\langle A | M(EL, M) | B \rangle = e \sum_{i=1}^Z \int |\mathbf{r}_i|^L Y_{L,M}^*(\theta_i, \phi_i) \varphi_A^*(\mathbf{r}_i) \varphi_B(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i \quad (2.9b)$$

² Az itt szereplő mag- ill. elektronállapotok leírására a Dirac-féle bra-ket szimbólumokat használjuk. A \otimes szimbólum a megfelelő állapotterek direkt szorzatát jelöli.

a mag elektromos multipól-mátrixeleme; φ_A^* ill. φ_B pedig a gerjesztett (kezdeti) ill. legerjesztett (vég) magállapotok hullámfüggvényeit jelöli. A (2.9a)-ban szereplő $J_{L,M}$ mennyiség az elektron hullámfüggvényekre vonatkozó integrál

$$J_{L,M} = \int \exp(-R/a) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) R^{-(L+1)} Y_{L,M}(\Theta, \Phi) d\mathbf{R}. \quad (2.10a)$$

Az $\exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$ tényezőt gömbfüggvények és szférikus Bessel-függvények szerint kifejtve, majd kihasználva a gömbfüggvények ortogonalitását, a fennmaradó radiális integrál egzaktul kiszámítható, és végül (2.10a)-ra

$$J_{L,M} = 4\pi i^{-L} \frac{k^{L-2}}{(2L+1)!!} Y_{L,M}(\theta, \phi) \quad (2.10b)$$

adódik, ahol θ és ϕ a \mathbf{k} vektor irányát jelöli. A fentiek alapján a K héjról történő belső konverziós folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségére

$$W_{IC} = \frac{128\pi m e^2}{\hbar^3 a^3} \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{k^{2L-3}}{[(2L+1)(2L+1)!!]^2} |\langle A | M(EL, M) | B \rangle|^2 \quad (2.11)$$

adódik. A legkisebb lehetséges L -re számolva (ez a domináns), az összes M -re a szummázást elvégezve, valamint a redukált átmeneti valószínűség

$$B(EL, I_A \rightarrow I_B) = \sum_{M_B, M} |\langle A | M(EL, M) | B \rangle|^2 \quad (2.12)$$

definíciós egyenletét kihasználva [Alder és mtsai, 1956], (ahol M_B a mag végállapotának mágneses kvantumszáma) majd végül (2.11)-et W_γ -val elosztva

$$\alpha = \frac{16 L}{(L+1)(2L+1)^2} \frac{Z^3}{a_0^4} k^{2L-3} \left(\frac{\omega_{AB}}{c} \right)^{-2L-1} \quad (2.13)$$

kapunk eredményül³.

Ebből a kifejezésből a következő lényeges megállapításokat szűrhetjük le:

- (i) A belső konverziós együttható — azaz a belső konverziós bomlás szerepe — növekvő rendszámmal rohamosan növekszik. A belső konverziós bomlás tehát a nagy rendszámú elemek jellegzetes bomlásformája.
- (ii) Növekvő multipolaritások mellett a belső konverzió egyre dominánsabb.
- (iii) A belső konverzió szerepe igazán az alacsony mag-gerjesztési energiák (tipikusan $E_\gamma < 10$ keV) esetében jelentős.

A (2.13) összefüggés alapján számolt belső konverziós együttható a mért értékektől jelentősen (esetenként nagyságrendekkel) eltér, tehát egy adott mag tetszőleges multipolaritású és tetszőleges energiájú bomlására,

³ A (2.13) és a Blatt és Weisskopf [1956] által magadott eredmény közti különbség onnan származik, hogy mi a (2.10a) integrál radiális részének számolásakor nem alkalmaztuk az $\exp(-R/a) \cong 1$ közelítést.

ill. az atom összes héjára vonatkozó pontos számítás a fenti modellben nem végezhető el.

2.3 A belső konverziós folyamat általános elmélete

Az előzőekben ismertetett leírás csak olyan esetekben ad jó becslést a folyamat rátájára, ahol az elektron gyengén kötött, ami pedig akkor teljesül, ha fennáll a $Z_{eff}e^2 / \hbar c \ll 1$ reláció, ahol Z_{eff} az adott héjon az elektronok által észlelt effektív magtöltés. Ellenkező esetben a leírásra relativisztikus elektron hullámfüggvényeket kell használni. Pontosabb számolásoknál ezenfelül még figyelembe kell venni a többi elektron árnyékoló hatását ill. a nagy rendszámú magoknál pedig a mag véges méretét is.

A belső konverziót általánosan egy másodrendű kvantum-elektrodinamikai folyamatként kezelhetjük, amelyben a mag és a konverziós elektron között egy fotoncsere történik. A rendszer teljes Hamilton-operátora a következő formába írható:

$$H = H_{nuc} + H_{\gamma} + H_{el} + H_{int}, \quad (2.14a)$$

ahol H_{nuc} a mag Hamilton-operátora, H_{γ} a kvantált sugárzási tér Hamilton-operátora, míg

$$H_{el} = c \boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + mc^2 \beta + V(\mathbf{R}), \quad (2.14b)$$

az elektronok mozgását meghatározó Dirac-Hamilton operátor [Pauli és mtsai., 1975], ahol $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ és β a Dirac-féle mátrixok. Az elektromágneses kölcsönhatást leíró Hamilton-operátort

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{c} \int \mathbf{j}^\mu(\mathbf{R}) \cdot A_\mu(\mathbf{R}, t) dV \quad (2.14c)$$

alakba írhatjuk, ahol $A_\mu(\mathbf{R}, t)$ a kvantált elektromos tér négyes-potenciálja, $\mathbf{j}^\mu(\mathbf{R})$ pedig az elektronoknak és a mag protonjainak négyes-áramsűrűsége.

Egy protonnal történő kölcsönhatásra a folyamat S-mátrix elemét a 2.1. ábra Feynman-gráfjainak megfelelő, a (2.14c) segítségével felírt másodrendű kifejezések szolgáltatják. Felösszegezve az összes lehetséges közbenső állapotra, a rendszer kezdeti $|i\rangle$ és végállapota $|f\rangle$ közötti S-mátrix elemét a következőképpen írhatjuk fel [Rose, 1966]:

$$\text{Hiba!}, \quad (2.15a)$$

ahol \mathbf{j}_N , ρ_N egy proton (nukleon), \mathbf{j} és ρ pedig az elektron átmeneti négyes-áram- és töltéssűrűségei, az integrálás pedig az összes proton (nukleon) illetve elektron koordinátára értendő; \mathbf{r}_N az N-dik proton (nukleon), \mathbf{R} pedig az elektron helyvektorát jelöli, $d\tau_N = d^3\mathbf{r}_N$, $d\tau = d^3\mathbf{R}$, k pedig a magátmenet hullámszáma ($k = E_{AB}/(\hbar c)$); α_f a finomszerkezeti állandó. Az elektron esetében a fenti négyes-áramsűrűség komponensei Dirac-bispinorokkal felírva:

$$\mathbf{j} = \psi_{jf}^* \boldsymbol{\alpha} \psi_i \quad \text{és} \quad \rho = \psi_{jf}^* \psi_i,$$

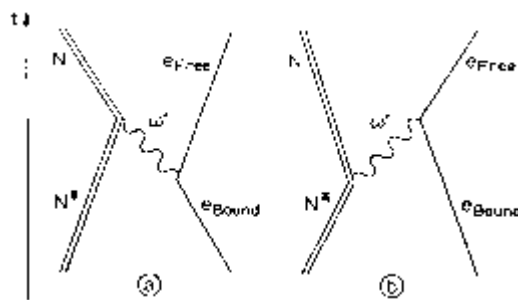
(2.15b)

ahol ψ_i a kezdeti (kötött) állapotában, ψ_f pedig a (szabad) végállapotában az elektron hullámfüggvényét jelöli. A (2.15a) mátrix elemben a $G = \exp(ik|\mathbf{r}_N - \mathbf{R}|)/|\mathbf{r}_N - \mathbf{R}|$ Green-függvényt a következő alakban írhatjuk fel:

$$\text{Hiba!}, \quad (2.15c)$$

ahol j_L az L-ed rendű, elsőfajú szférikus Bessel-, míg h_L az L-ed rendű, elsőfajú szférikus Hankel-függvényt jelöli; $r_< = r_N$, $r_> = R$ ha $r_N < R$ és $r_< = R$, $r_> = r_N$ ha $r_N > R$, továbbá ϑ_N , φ_N egy nukleon, θ és Φ pedig az elektron polárszögei.

Ez utóbbi kifejezéssel az S-mátrix elemünk két tagra esik szét aszerint,



2.1. ábra A belső konverziós folyamatban résztvevő egy nukleon másodrendű Feynman-diagramjai [Pauli és mtsai., 1975]. A dupla vonalak a nukleon állapotot, a szimpla vonalak az elektronállapotot jelölik.

hogy a magon belül vagy kívül vagyunk [lásd: Rose, 1966, 19. old.]. Mindkét esetben a mátrix elemében megjelenő $j_N j_G$ kifejezésünk szétválasztható a multipól átmenet fajtája szerint elektromos, mágneses és longitudinális komponensekre. Ha pontszerű magot feltételezünk, a tagokat külön-külön megvizsgálva azt kapjuk, hogy az egyes mátrixelemek arányosak lesznek a γ átmenet multipól mátrixelemével. Épp ezért a belső konverziós koefficiens egy ilyen modellben érzéketlen a magállapotok struktúrájára. Amennyiben azonban (pl. nagy Z -k esetén) a magot kiterjedtként kell kezelnünk, akkor többé nem igaz az a feltételezés, hogy a mag térfogatában az elektron hullámfüggvények eltűnnek, ami jelentősen elbonyolítja a fenti mátrixelemek számolását, ugyanis az elektron- és magkoordinátákra felírt integrálok többé nem szeparálhatóak.

Az első, a pontszerű magmodellen túllépő relativisztikus számolásokat Rose [1958] végezte. Munkájában már figyelembe vette az elektronok árnyékoló, és a mag véges méretének a hatását is. Ezek a korrekciók a pontszerű modellhez képest jelentős, egyes esetekben 30-50% eltérést is okozhatnak⁴.

⁴ Lásd [O'Connell és Carroll., 1965], akik a véges magméret hatásának elemzése során pl. $M1$ -es átmenetre és $Z=95$ -re számolva 42%-os eltérést (növekedést) prognosztizáltak.

A belső konverziós együttható korrekcióit a következő faktorizált alakban lehet figyelembe venni [Pauli és mtsai., 1975]:

$$\alpha = \alpha_0 f_{SCR} f_{FN}, \quad (2.16)$$

ahol α_0 a pontszerű mag és az árnyékoló hatás nélküli Coulomb-tér esetén számolt belső konverziós együttható, f_{SCR} az árnyékolást figyelembe vevő korrekciós faktor, amit az árnyékolt és árnyékolatlan kötöttelektron-sűrűségek magsugárnál vett arányával definiálnak [Herman és Skillman, 1963], f_{FN} pedig a mag véges méretét figyelembe vevő korrekció [O'Connell és Carroll, 1965].

A jelenleg elérhető táblázatok számításánál [Band és Trzhaskovskaya, 1978a-b; Rösel és mtsai., 1978] olyan elektron hullámfüggvényeket használtak, amelyeket relativisztikus Dirac-Fock-Slater (DFS) önkonzisztens modellben számoltak, és az atomi elektronok kölcsönhatását statisztikus módszerekkel vették figyelembe. Ez a módszer a (2.16) korrekciókat is figyelembe veszi és már igen jó egyezést ad a mért értékekkel. Band és Trzhaskovskaya [1993] rámutattak arra, hogy a DFS módszer kis mag gerjesztési energiák esetén ($E_\gamma < 1 \text{ keV}$) jelentős pontatlanságot (általában $\sim 10\%$) eredményez. Ennek korrigálására kidolgoztak egy másik módszert, melyben az elektron hullámfüggvényeket relativisztikus Dirac-Fock (DF) egyenletekből származtatják.

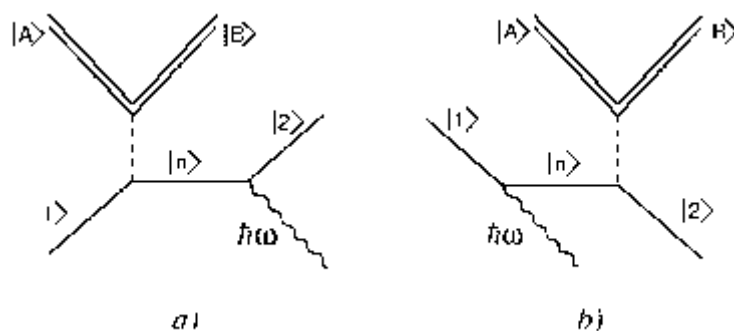
A belső konverziós folyamat rátájának becslését tovább nehezíti néhány olyan effektus, amely a belső konverziós koefficienszt mérhetően képes befolyásolni. Az ionizáció hatása például megváltoztatja az árnyékoló hatást, aminek következtében a héjak belső konverziós együtthatója enyhén megnövekszik. Ez a hatás jól megfigyelhető olyan izomerek esetében, melyek különböző kémiai kötésekben vesznek részt, és ezért a radioaktív atom különböző ionizációs állapotban van. Ennek következtében a különböző molekulákban kötött izomerek felezési ideje kicsit különbözik egymástól. Ez utóbbi hatást kémiai hatásnak nevezik [Pauli és mtsai., 1975].

Láttuk tehát, hogy a belső konverziós folyamat igen érzékeny mind a magállapotok, mind pedig az elektronállapotok struktúrájára. Az tehát, hogy az elektronállapotok lézerrel történő megváltoztatásával a belső konverziós folyamaton keresztül beavatkozhatunk a mag bomlási folyamatába, egy olyan lehetőség, amit mindenképpen érdemes alaposabban megvizsgálni. Előtte azonban foglalkozzunk még a metastabil magok egy másik lehetséges bomlási csatornájával, az elektron-híd folyamattal.

2.4 Az elektron-híd folyamat

Maga az elektron-híd folyamat egy olyan diszkrét-folytonos elektronátmenetet tartalmaz, amelyben a kezdetben kötött elektron szabaddá válik, miközben egy röntgen fotont is kibocsát. A folyamatot kísérletileg először Kekez és mtsai. [1985] mutatták ki. A folyamat harmadrendű folyamat, gráfjait a 2.2 ábra szemlélteti.

Lehetőség van ugyanakkor arra is, hogy a foton emissziója után az



2.2. ábra Az elektron-híd folyamat Feynman-gráfjai. (a) a direkt, (b) a keresztezett gráf. A dupla vonalak a magállapotokat, a szimpla vonalak az elektronállapotokat jelölik, szaggatott vonallal a mag és az elektron közti elektromágneses kölcsönhatást, míg hullámos vonallal a folyamat során emittált fotont jelöltük. $|A\rangle$ a mag kezdeti, $|B\rangle$ a mag végállapotát, $|1\rangle$, $|n\rangle$ és $|2\rangle$ pedig az elektron kezdeti, közbenső és végállapotát jelöli. (Az idő balról jobbra múlik az ábrán.)

elektron újra a kezdeti kötött állapotba kerüljön. Ebben az esetben a teljes folyamat energiamérlege olyan, hogy a mag átmeneti energiáját a folyamat

során emittált foton viszi el. Ennek a folyamatnak egy speciális formája az ún. diszkrét belső konverzió, amelynél az elektron egy kötött-kötött átmenetet végez, a magátmenet és elektronátmenet energiakülönbsége pedig kisugárzódik. Az ilyen átmenet csak olyan magok esetében képzelhető el, melyeknél a magátmenet energiája összemérhető az elektronok kötési energiájával. A diszkrét belső konverzió jelenségével a későbbiekben részletesen fogunk foglalkozni.

3. Belső konverzió és elektron-híd folyamat lézertér jelenlétében

A magok γ bomlásának lézerrel történő közvetlen befolyásolása az ehhez szükséges nagy lézerintenzitások ($I \gg 10^{18} W/cm^2$) miatt jelenleg megvalósíthatatlan [Becker és mtsai, 1984a; Kálmán és Lovas, 1987]. Éppen ezért kerültek a figyelem középpontjába azok a (belső konverziós és elektron-híd) folyamatok, ahol az izomérek legerjesztésének rátáját az elektronállapotok megváltoztatásával befolyásolhatjuk. A szakirodalomból ismert elektron-atommag-lézer kombinált folyamatok összegyűjtve, áttekinthető formában megtalálhatók Matinyan [1998] munkájában. Az alábbiakban a szakirodalom ezen eredményeinek egy — az értekezés eredményeinek megértése végett lényeges — részét kívánjuk összefoglalni.

3.1 Lézerrel segített belső konverzió a Volkov és a Coulomb-Volkov modellben

A belső konverzió vizsgálatát intenzív sugárzási terek jelenlétében elsőként Kálmán P. és Bergou J. végezték el [Kálmán és Bergou, 1986; Kálmán, 1988a; 1989a]. Ezekben a munkákban a belső konverzió leírására egy egyszerű, nemrelativisztikus modellt használtak, amelyben az egy-elektronos rendszer Hamilton-operátora

$$H_0 = -\frac{Z e^2}{R} + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (3.1)$$

alakú. Itt \mathbf{A} a lézerteret klasszikus térként figyelembe vevő vektorpotenciál, a mag-elektron elektromágneses kölcsönhatás pedig egyszerű Coulomb-kölcsönhatás, amelynek Hamilton- operátora

$$H_1 = -\frac{Z e^2}{R} + \sum_{p=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{x}_p|}. \quad (3.2)$$

Az \mathbf{A} vektorpotenciál cirkulárisan ill. lineárisan poláros esetben a következő formába írható:

$$\mathbf{A}_{circ} = a[\hat{\mathbf{e}}_1 \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) + \hat{\mathbf{e}}_2 \sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})] \quad (3.3a)$$

$$\text{ill. } \mathbf{A}_{lin} = a[\hat{\mathbf{e}}_3 \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R})] \quad , \quad (3.3b)$$

ahol a a vektorpotenciál amplitúdóját, \mathbf{k} a sugárzási tér hullám-számvektorát, ω a sugárzási tér körfrekvenciáját jelöli, továbbá $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2 \perp \mathbf{k}$ illetve $\hat{\mathbf{e}}_3 \perp \mathbf{k}$ a polarizációs egységvektorok. A szerzők dipól közelítéssel számolnak, azaz a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} \ll 1$ relációt használják, ami mindaddig megtehető, amíg a sugárzási tér hullámhossza jóval nagyobb az atom karakterisztikus méreténél (optikai, UV és lágy röntgen lézerek esete).

Mivel a (3.1) Hamilton-operátorral a Schrödinger-egyenletnek nincs egzakt megoldása, ezért a végállapotok szabad elektronjainak leírására közelítően nemrelativisztikus Volkov [Bergou és mtsai., 1981] illetve Coulomb-Volkov [Cavaliere és mtsai., 1980] állapotokat használtak:

$$\psi = \exp\left(-i \frac{1}{2m\hbar} \int [\mathbf{p} - e\mathbf{A}(t')/c]^2 dt'\right) u^{(-)}(\mathbf{R}). \quad (3.4)$$

Itt $u^{(-)}$ az elektron stacionárius, lézertér nélküli, perturbálatlan hullámfüggvénye. Ez nagy elektron kinetikus energiák mellett síkhullámokkal [Kálmán és Bergou, 1986] illetve a küszöb körüli folyamatoknál Coulomb-hullámfüggvényekkel [Kálmán, 1988a; 1989b] helyettesíthető.

A tárgyalandó folyamat kezdeti elektron-állapota erősen kötött állapot, amelyet a lézertér első rendben nem befolyásol számottevően. Éppen ezért a kezdeti állapot leírására hidrogénszerű állapotokat vettek.

A (3.4) hullámfüggvények exponensbe írt időfüggő része hordozza a lézer-anyag kölcsönhatást. Ezt megvizsgálva [Kálmán P. és Bükki T., 2001b], cirkulárisan poláros lézertér jelenléte esetén:

$$\psi = u^{(-)}(\mathbf{R}) \sum_{N=-\infty}^{\infty} J_N[b(q) \sin(\vartheta)] \exp(i\varphi N) \times \exp\left[\frac{i(\mathbf{p}^2 / 2m + N \hbar\omega + d_{\text{cirk}} \hbar\omega) t}{\hbar}\right] \quad (3.5)$$

adódik, ahol bevezettük a $b(q) = eE_L q / m\omega^2$ mennyiséget, továbbá $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$ a kijövő elektron impulzusa, és $q = |\mathbf{q}|$, E_L pedig a lézer nyalábban az elektromos térerősség amplitúdója. A ϑ és φ szögek a \mathbf{q} hullámszámvektor polárszögeit jelölik és $d_{\text{cirk}} = e^2 E_L^2 / 2m\omega^3 \hbar$ az ún.

ponderomotoros potenciál. Ha megnézzük ennek a kifejezésnek az utolsó, időfüggő exponensét, akkor láthatjuk, hogy a lézertérbe való kilépéshez az elektronnak $d_{cirk} \hbar \omega$ -val több energiával kell rendelkeznie. Ezen felül a lézertér bekapcsolásával a szabad elektron kinetikus energiája $N \hbar \omega$ energiával megváltozik, úgy mondjuk, hogy a szabad elektron „felöltözködik” a lézertérben; látszólag állandóan felvesz és lead fotonokat a lézertérrel történő kölcsönhatás során. A (3.5) formulához hasonló kifejezés adható lineáris polarizáció esetében is.

Mind Volkov-állapotok [Kálmán és Bergou, 1986; Kálmán, 1988a] (azaz $u^{(-)}$ -t síkhullámokkal közelítve) mind Coulomb-Volkov állapotok esetén [Kálmán, 1988b; 1989a], (azaz $u^{(-)}$ -ra szabad Coulomb-állapotokat használva⁵) a szerzők a (3.2) perturbációval, az elsőrendű időfüggő perturbációs számítás szabályai szerint kiszámolják a lézer-indukált belső konverzió időegységre jutó átmeneti valószínűségét. Ezt elosztva a mag γ átmenetének időegységre jutó átmeneti valószínűségével (W_γ), a lézertér jelenlétében érvényes (röviden indukált) belső konverziós együttthatót (α) kapjuk, ami a Coulomb-Volkov megoldás használatakor a következő formába írható:

⁵ Ez akkor használható, ha fennáll a $\hbar q \gg eE_L / \omega$ feltétel, azaz a kijövő elektron és a lézertér kölcsönhatási energiája messze alatta marad az elektron lézertér mentes kinetikus energiájánál, ami valójában egy intenzitás korlátot jelent.

$$\alpha = \sum_{N > -r} \alpha(q_N) T_{pol}(b_N), \quad (3.6)$$

ahol $pol = (lin \text{ vagy } cirk)$ a lineárisan ill. cirkulárisan poláros eseteknek megfelelően, és

$$T_{lin}(b_N) = \int_0^1 J_N^2(b_N x, -d/4) dx, \quad (3.7)$$

$$T_{cirk}(b_N) = \frac{1}{2b_N} \int_0^{2b_N} J_{2|N|}(x) dx = \int_0^{\pi/2} J_N^2(b_N \sin \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \quad (3.8)$$

Itt a $J_N(a, b) = \sum_{L=-\infty}^{\infty} J_{N-2L}(a) J_L(b)$ az ún. N-ed rendű általánosított Bessel-függvény; $\alpha(q_N)$ a lézermentes belső konverziós koefficiens annak a figyelembe vételével számolva, hogy a kijövő konverziós elektron kinetikus energiája a lézertér jelenlétében a ponderomotoros potenciál és a „felöltözködés” következtében megváltozik. $q_N = [(N+r) \hbar\omega / R_y]^{1/2} / a_0$; $b_N = eE_L q_N / m\omega^2 = b_0(N+r)^{1/2}$ és $r = \Delta / \hbar\omega - d_{pol}$, ahol $\Delta = E_B + \hbar\omega_{AB}$, $\hbar\omega_{AB}$ a magátmenet energiája; d_{pol} pedig a ponderomotoros potenciált jelöli lineárisan ill. cirkulárisan poláros esetben. Ezenkívül $b_0 = 1.07 \times 10^{-6} I^{1/2} (\hbar\omega)^{-3/2}$, ahol I a lézer intenzitása W/cm^2 -ben, és $\hbar\omega$ -át eV-ban kell behelyettesíteni.

Küszöbhez közeli esetben, azaz amikor $|\Delta| \sim \hbar\omega$, (3.6) a következő közelítő formába írható:

$$\alpha = \alpha_{th} T_{pol}, \quad (3.9)$$

ahol

$$T_{pol} = \sum_{N>-r} T_{pol}(b_N). \quad (3.10)$$

Az itt szereplő α_{th} mennyiség az ún. küszöb belső konverziós együttható, ami egy olyan fiktív magnak a belső konverziós együtthatója, melynél a magátmenet energiája éppen elegendő ahhoz, hogy a konverziós elektront szabad állapotba juttassa.

Ez a közelítés különösen akkor jelentős, ha a belső konverzió lézertér nélkül tiltott, azaz a folyamat beindításához feltétlenül szükséges egy vagy több foton abszorpciója. Ekkor ugyanis a folyamatba általunk bevitt energiával a belső konverzió épp ilyen küszöb környéki folyamattá válik.⁶ Megjegyezzük, hogy (3.9)-hez hasonló közelítés nem csak küszöb környéki folyamatoknál képzelhető el, hanem olyan küszöbtől távoli esetekben is, amikor $\alpha(q_N) = \alpha(q_0)$ jó közelítéssel teljesül.⁷ Amennyiben a konverziós

⁶ Ilyen α_{th} küszöb belső konverziós együttható bármely olyan táblázatból vehető [O'Connell, Carroll, 1965; Rösel és mtsai., 1978] amelyekben pontos, relativisztikus modellben, adott rendszám és átmeneti multipolaritás mellett széles magátmeneti energia tartomány esetére számolt elméleti belső konverziós együtthatók találhatók.

⁷ Ez történik az $\omega \rightarrow 0$ ún. alacsony frekvenciás határesetben is, melyre kimutatható, hogy $\lim_{\omega \rightarrow 0} \alpha = \alpha(q_0)$, vagyis alacsony frekvenciás határesetben a lézernak nincs hatása a belső konverzióra.

folyamat lézer jelenléte nélkül is megengedett, akkor $\lim_{I \rightarrow 0} T(b_0) = 1$ ill.

$$\lim_{I \rightarrow 0} T(b_N) = 0 \quad (N \neq 0), \quad \text{azaz eltűnő intenzitás határesetében} \quad (3.6)$$

visszaadja a lézermentes belső konverziós együtthatót. Ha azonban a belső konverzió lézermentes esetben tiltott, akkor nyilván $\lim_{I \rightarrow 0} T = 0$ adódik. A T

mennyiség intenzitás függését cirkulárisan poláros esetben, különböző

$\Delta / \hbar\omega$ paraméterek mellett a 3.1. ábra mutatja. A görbesereg legfelső

görbéjében jelentkező lépcső annak tulajdonítható, hogy a kezdetben

lézertér nélkül is épphogy megengedett folyamat ($\Delta / \hbar\omega = 0.02$) a lézertér

bekapcsolásával, egy adott intenzitásnál első rendben tiltottá válik. Ez az

érdekes jelenség annak köszönhető, hogy a lézerrel való kölcsönhatás miatt

a kilépő, szabad elektron energiája a megjelenő ponderomotoros potenciál

miatt nagyobb kell legyen, mint lézermentes esetben, tehát a

ponderomotoros potenciál megjelenése a kezdetben megengedett

folyamatot tiltottá teszi, s így a konverzió már csakis egy vagy több foton

abszorpciója mellett mehet végbe. Növekvő intenzitással (növekvő b_0 -al)

egyre nagyobb szerepet kapnak a folyamatban a növekvő fotonszámú

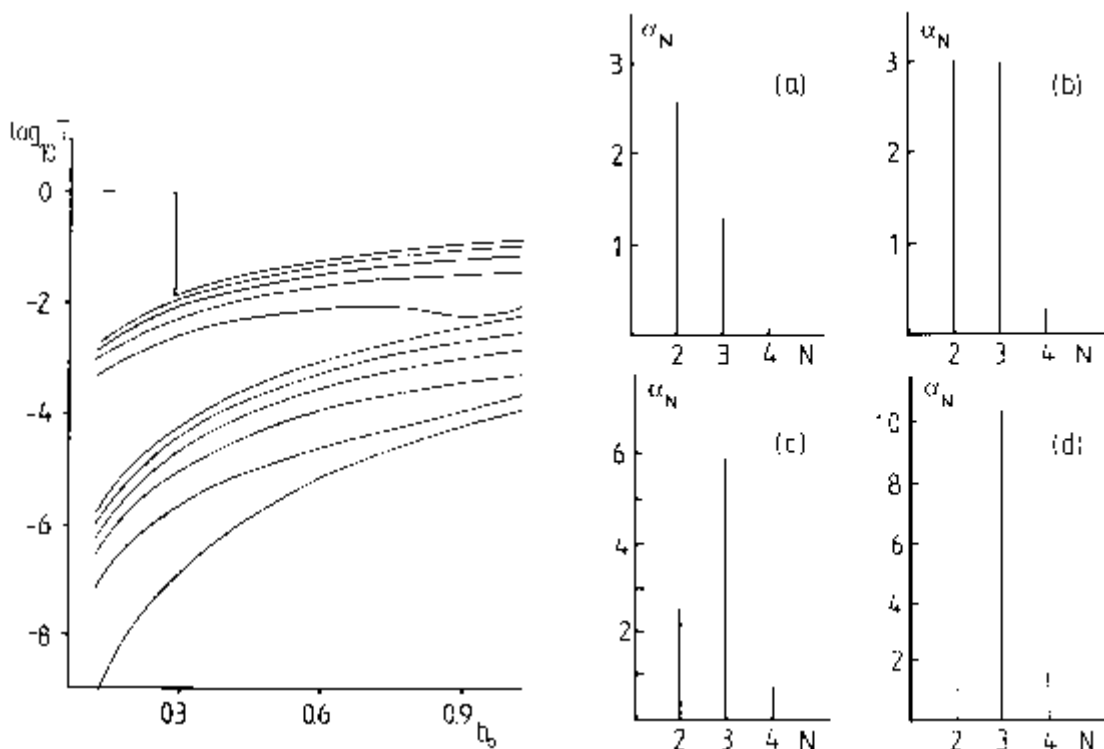
folyamatok. (3.6) alapján bevezethetjük az N foton abszorpciójához tartozó

indukált belső konverziós együtthatót $\alpha_N = \alpha(q_N) T(b_N)$. A különböző

fotonszámú csatornák különböző b_0 értékek melletti járulékait az 3.2. ábra

szemlélteti.

Itt látható, hogy míg alacsonyabb intenzitásoknál inkább a kétfotonos (3.2.a ábra), addig magasabb intenzitásnál már a három fotonos folyamat dominál (3.2.d ábra)⁸. A fent bemutatott modellben célszerű megvizsgálni néhány valós izomért azért, hogy valami képet kaphassunk arról, hogy a belső konverzió felgyorsulása a manapság elérhető maximális lézerintenzitások



3.1. ábra A T mennyiség intenzitás függése $\Delta / \hbar\omega = 0.002, -0.2, -0.4, -0.6, -0.8, -1, -1.2, -1.4, -1.6, -1.8, -2$ (felülről lefelé) paraméterek mellett. $I = 8.73 \times 10^{11} b_0^2 (\hbar\omega)^3$ körkörös poláros lézerre számolva [Kálmán, 1989b].

3.2. ábra N foton abszorpciójával kapott belső konverziós együtthatók $\alpha_N = \alpha(q_N) T(b_N)$. Az α_N értékek $10^{-5} \times \alpha_0$ egységekben vannak megadva. $\Delta / \hbar\omega = -1.8$ és (a) $b_0 = 0.6$, (b) $b_0 = 0.7$, (c) $b_0 = 0.8$ és (d) $b_0 = 0.9$ [Kálmán, 1988b].

⁸ Az egyfotonos folyamatok az 3.2. ábra példájában nem megengedettek.

mellett milyen mértékű is lehet. A számolás némileg egyszerűsíthető, ha a K héjról történő belső konverzió esetét vizsgáljuk, így elsőként numerikus eredmények is erre születtek. A 3.1. táblázatban ezen számítások eredményeit közöljük a vizsgált izomérek egyes magfizikai adataival együtt, ahol a számolások $\hbar\omega = 1.16 \text{ eV}$ és $I = 10^{18} \text{ W/cm}^2$ lézer paraméterek mellett síkhullám-közelítésben történtek. A táblázatban szereplő $\text{Ag}^{105\text{m}}$ izomér esetében sugárzási tér jelenléte nélkül a K héjon a belső konverzió tiltott, míg a többi izomérnél megengedett. Az 3.1. táblázat alapján jól látható, hogy még igen jelentős lézerintenzitások mellett sem jelentkezik számottevő effektus. A jelenség mérhetősége szempontjából érdekes $(\alpha - \alpha_0) / \alpha_0$ hányados mindegyik esetben 5% alatt marad, és a bomlás gyorsulás szempontjából érdekes $(\alpha - \alpha_0) / \alpha_{tot}$ mennyiség mindegyik esetben elhanyagolhatóan piciny (α_{tot} a teljes belső konverziós együttható).

	$E_\gamma [\text{keV}]$	EL	$E_B(K\text{-héj})$ [keV]	$\alpha_0^{K\text{-héj}}$	α_{tot}	α
$\text{Ba}^{135\text{m}}$	47.3	$E5$	37.44	172	1.59×10^6 ^a	0.1
$\text{Pm}^{148\text{m}}$	61.5	$E4$	45.19	33.4	1.64×10^4	0.03
$\text{Ho}^{160\text{m}}$	60	$E3$	55.62	4.41	1.1×10^3	0.2
$\text{Ag}^{105\text{m}}$	25.47	$E3$	25.514	0	3.3×10^4	1.1×10^{-4}

(tiltott)

3.1. táblázat Indukált belső konverziós együttható (α) a K héjon különböző izomérek esetén $\hbar\omega = 1.16 \text{ eV}$ és $I = 10^{18} \text{ W/cm}^2$ mellett számolva [Bergou és Kálmán, 1986]. α_{tot} az összes héj, α_0^{K-hej} pedig a K héj lézermentes belső konverziós együtthatója [Rösel, 1978]. E_γ a magátmenet energiája, EL a magátmenet multipolaritása, E_B pedig a K -héj elektronjának kötési energiája.

^a A K , L , és M héjakra adott α -k összege [Band és mtsai, 1978b], a magas multipolaritású átmenet miatt α_{tot} nem hozzáférhető.

Az effektus kicsinysége energetikailag megengedett esetekben annak tulajdonítható, hogy itt valójában $\omega \rightarrow 0$ határesethez közeli esetről van szó, és ekkor — amint ezt már említettük — a lézer nem befolyásolja számottevően a folyamatot. Ez a formulákban úgy realizálódik, hogy bár a folyamat növekvő intenzitással $T(b_N)$ növekedése miatt erősödne, de egyben az ehhez tartozó $\alpha(q_N)$ értékek a növekvő fotonszámmal szintén növekvő q_N -nel csökkennek. A tiltott átmenet esetében pedig a piciny effektus elsősorban annak tudható be, hogy a folyamat igen sok foton abszorpciójával válik csak megengedetté. Ebben a modellben a fenti számításokat a K héjon kívül más héjakra is kiterjesztve [Kálmán, 1988a] számos izoméért érdemes még megvizsgálni. Mivel a lézer indukált folyamat erőssége arányos a vizsgált héj lézermentes belső konverziós együtthatójával, ami viszont csökkenő maggerjesztési energiák mellett rohamosan növekszik, ezért olyan izoméreket érdemes választani, amelyeknél a maggerjesztési energia kicsiny. Az ilyen izoméreknek az az

előnye is megvan, hogy mivel a mag bomlási energiája azonos nagyságrendben van a külső elektronok kötési energiájával, tiltott átmenetek esetén várhatóan csak kicsiny energia defektust kell a külső sugárzási térnek pótolni, és így nincs szükség igen sok fotonos folyamatokra ill. röntgen forrás alkalmazására. A fenti szempontoknak leginkább eleget tevő izomérek pl. a W^{183m} ($E_\gamma=544$ eV, $E1$), U^{235m} ($E_\gamma=73.5$ eV, $E3$) ill. egy extrémálisan kis maggerjesztési energiával rendelkező izotóp a Th^{229m} ($E_\gamma = 3.5$ eV, $MI+E2$) [Firestone., 1996]. Az első két izomért Kálmán P. [1988a] vizsgálta, amikor is a külső tér bekapcsolásával, U esetében a korábban, azaz lézertér hiányában tiltott O_4 és O_5 héjak, míg W esetén a tiltott N_1 héj beindítását különböző foton energiák és intenzitások mellett számolta, a számolás eredményeit a 3.2. táblázat tartalmazza.

	$E_\gamma - E_B [eV]$	$\hbar\omega [eV]$	$I [W/cm^2]$	T	α_{tot}	α
U(O_4)	-31.5	5.0	2.7×10^{15}	0.27	3.88×10^{20}	2.1×10^{15}
U(O_4)	-31.5	1.16	1.2×10^{14}	6.6×10^{-3}		4.6×10^{12}
U(O_5)	-22.5	5.0	2.7×10^{15}	1.2		2.7×10^{15}
U(O_5)	-22.5	1.16	1.2×10^{14}	1.7		1.5×10^{15}
W(N_1)	-48	5.0	9.9×10^{15}	3.6	2.24×10^3	3.3×10^2

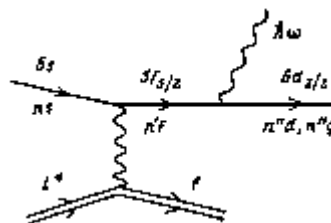
$W(N_1)$	-48	1.16	2.1×10^{14}	8.9×10^{-2}	1.80
----------	-----	------	----------------------	----------------------	------

3.2. táblázat U és W izomerek tiltott belső konverziójának beindítása [Kálmán, 1988a], és α_{tot} értékeik [Band és Trzhaskovskaya, 1993]; $\hbar\omega$ a lézertér fotonjainak energiája, I pedig a lézertér intenzitása.

A táblázatból jól látszik, hogy a modell mindkét izomér esetén — elegendően nagy lézerintenzitás mellett — jelentős effektust jósól. Ez elsősorban annak köszönhető, hogy az energetikailag tiltott folyamatok néhány foton abszorpciójával már megengedetté válnak.

3.2 Kötött-kötött, lézer indukált belső konverziós folyamatok

Idáig az intenzív lézertérbeli kötött-szabad elektron átmenetek belső konverziót módosító hatásával foglalkoztunk. A kötött-szabad átmenetek mellett azonban lehetőség nyílik arra is, hogy a konverziós elektron egy hangolt lézertér segítségével, kötött-kötött átmenettel vigye el a mag gerjesztési energiáját. Ilyen folyamatokra elsősorban akkor van lehetőség, ha a magátmenet energiája az atomi elektronok kötési energiájával összemérhető.



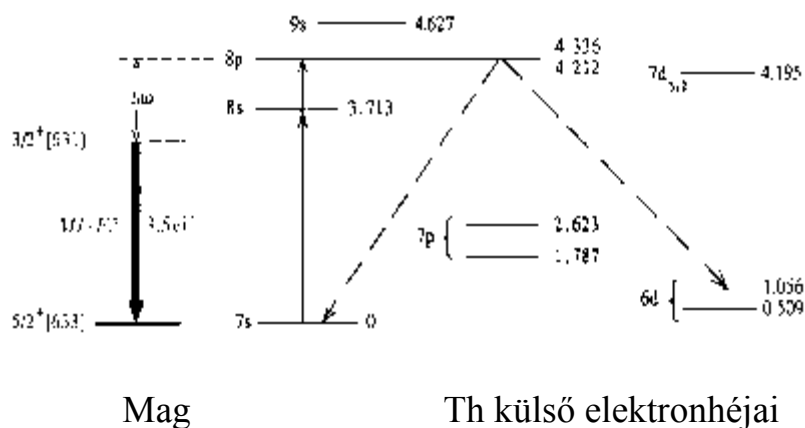
3.3. ábra Diszkrét, lézer módosított belső konverziós folyamat Feynman-gráfja (^{235m}U bomlásának felgyorsítása) [Zon és Karpeshin, 1990]. A dupla vonalak a mag, a szimpla vonalak az elektron állapotokat jelölik.

Ilyen pl. a már említett U^{235m} izomér

is, amelynél Zon és Karpeshin [1990] azt vizsgálta, hogy egy megfelelően hangolt lézertérrel mennyiben lehetséges a mag bomlását az $U\ 6s \rightarrow 6d$ elektron átmenetén keresztül felgyorsítani. Az átmenethez szükséges energiát a mag bomlása szolgáltatja, a rezonancia folyamat pedig indukált emisszió ($\hbar\omega \approx 4\ eV$) keresztül történik. Az így számolt egy-elektronos, az elektron oldalon másodrendű folyamat közbülső elektronállapotaként az $5f_{5/2}$ állapotot választják (3.3. ábra). A végállapot energiaeoszlására Lorentz-görbét használnak. Zon és Karpeshin [1990] $I = 10^{14}\ W / cm^2$ -es intenzitással számolva $\alpha \approx 10^{20}$ kapott eredményül⁹. A 3.2. táblázatban és az itt szereplő indukált belső konverziós koefficiens közötti közel 8 nagyságrendnyi különbség részben a következőnek tudható be. Zon és Karpeshin [1990] által számolt diszkrét folyamat átmeneti valószínűsége rezonancia esetén fordítottan arányos a végállapot szélességével, amit pedig lényegében a $6s$ elektronhéjon keletkező vakancia élettartama határoz meg. Ez a szélesség — mivel külső elektronhéjról van szó — meglehetősen kicsi, így rezonáns esetben ez jelentősen megnöveli a folyamat átmeneti valószínűségét. Másrészt a szerzők cikkükben közel tízszeresen ionizált U-t vizsgálnak, és ebben az esetben a $6s$ vakanciával rendelkező végállapot szélessége — amely főleg az Auger-folyamatoktól származik — drasztikusan lecsökken, tovább növelve ezzel az indukált belső konverzió

⁹ A cikkükben szereplő R mennyiség megfelel az általunk α -val jelölt mennyiségnek.

átmeneti valószínűséget. A szerzők számításait egy másik cikkükben [Karpeshin és mtsai., 1991] gyakorlatilag megismétlik azzal az eltéréssel, hogy a fenti intenzitás mellett $\alpha \approx 10^{22}$ -t prognosztizálnak. Ugyanitt azt is megemlítik, hogy a számolt folyamat feltehetőleg számos más kis energiás izomérnél, többek között Tc^{99m} -nél is működik, azzal a különbséggel, hogy a szükséges foton energia a lágy röntgen tartományba kerül. A diszkrét konverziós folyamatok számolásánál a fenti szerzők rezonancia folyamatokat vélnek felfedezni. Meg kell jegyezzük azonban, hogy cikkeik alapján nehezen érthető meg ezen rezonanciák származása és természete. Mivel úgy tűnik, hogy a rezonanciák kérdése kardinális fontosságú, így a rezonanciák kérdésével külön fejezetben (4.3 fejezet) fogunk foglalkozni.



3.4. ábra A Th^{229} lézer indukált diszkrét belső konverziós bomlása szempontjából lényeges mag- ill. elektronállapotok. Az elektronhéjak energiája eV-ban van feltüntetve a 7s héjhoz viszonyítva. [Karpeshin és mtsai., 1992a].

Ugyanezt a gondolatot járják körül Karpeshin és mtsai. [1992ab] amikor a $\text{Th}^{229\text{m}}$ izomér egzotikus esetét vizsgálják. Ennek az izotópnak ugyanis valószínűleg létezik egy néhány elektronvolttal az alapállapot felett lévő magállapota ($E_\gamma = 3.5 \pm 1 \text{ eV}$), ami az alapállapot mellett az U^{233} α bomlásakor szintén populálódik. A gerjesztett magállapot egy $M1$, $E2$ -es átmenettel, részben belső konverzióval bomlik a mag alapállapotába, amely α bomlással bomlik tovább. Az előző gondolatmenethez hasonlóan a rendkívül alacsony mag-gerjesztési energia miatt itt is elképzelhető egy diszkrét-diszkrét lézer-indukált bomlási folyamat. A szerzők jelen esetben a $7s \rightarrow (8s) \rightarrow 8p_{1/2}$ átmenettel foglalkoznak, ahol $8s$ a számolásban felhasznált közbenső elektronállapot. A magátmenetet ill. a számolt folyamatban részt vevő elektron állapotokat a 3.4. ábra szemlélteti. A $7s \rightarrow 8p$ átmenethez szükséges energiát részben a mag bomlása, részben egy abszorbeált foton biztosítja. Erre a folyamatra $I = 3.6 \times 10^4 \text{ W / cm}^2$ (1 V/cm térerősség) és $\hbar\omega = 1 \text{ eV}$ mellett a szerzők $\alpha \approx 500$ -at jósolnak. Figyelmet érdemel a szerzők azon gondolata, hogy az $M1$ átmenet ily módon történő felgyorsítása egyben magával vonhatja a Th^{229} 7340 éves felezési idejű alfa bomlásának felgyorsulását is. Végezetül megjegyezzük, hogy a Th^{229} -et Kálmán és Keszthelyi [1994] is vizsgálták. Cikkükben elsődlegesen azonban nem a mag bomlásának a felgyorsításával

foglalkoznak, hanem egy inverz, azaz elektron átmenettel indukált maggerjesztési mechanizmust vizsgálnak, amivel egyben egy módszert is javasolnak az alacsony energiás magátmenetek átmeneti energiájának pontos mérésére. A $\text{Th}^{229\text{m}}$ bomlásának kérdésköréről a 4.1.2 fejezetben részletesen szólunk.

3.3 Lézer indukált, kötött állapotokon keresztül történő elektron-híd folyamatok

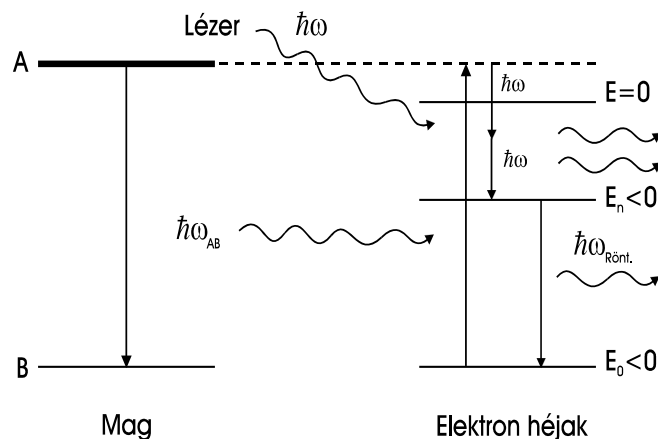
Végezetül egy olyan folyamattal, a lézer asszisztált egy-elektronos elektron-híd folyamattal foglalkozunk, amely szintén fontos szerepet játszik a belső konverziós folyamatok lehetséges felgyorsításában. A folyamat lézerrel történő gyorsítására elvileg úgy van mód, hogy a lézerteret ráhangoljuk egy, a belső konverzió miatt létrejövő szabad elektron állapot kinetikus energiája és az egyik külső, betöltetlen kötött állapot közötti energia különbségre. A folyamatot a 3.5. ábra szemlélteti. A lézer indukált elektron-híd folyamatot tehát úgy tekinthetjük, mint az előbbieken tárgyalt, diszkrét-diszkrét lézer indukált belső konverziós folyamat egy speciális esetét. A különbség csak annyi, hogy itt egy, a belső konverzió számára megengedett állapot bomlását módosítjuk és a folyamat végén az elektronállapot legerjesztésekor egy röntgen foton jelenik meg. A folyamat elméleti hátterét Kálmán P. [1991] vizsgálta, majd később Kálmán P. és Keszthelyi T. [1991] alkalmazta a U^{235m} izomérre, figyelembe véve számos, nagy lézerintenzitásnál jelentkező hátráltató hatást is.

A folyamatban résztvevő kötött elektronállapotok leírására „felöltözködött” kötött hullámfüggvényeket használnak. A szerző(k)

megadják a lézer-indukált elektron-híd folyamat koeficiensét [lsd. Kálmán, 1991, (27) -formula]:

$$\alpha_{ind} = \frac{\kappa}{\Delta^2 + (\hbar\gamma_n / 2)^2} \left(\frac{c}{\omega_{AB}} \right)^{2L-2} . \quad (3.11)$$

Itt L a mag átmenetének multipolaritása, ω_{AB} a magátmenet körfrekvenciája, $\Delta = \hbar (\omega_{AB} - N\omega - \omega_{n0})$ pedig az elhangolság. A (3.11)-ben szereplő κ konstans a különböző atomi és magátmeneti paramétereknek a függvénye. Az energia nevezőben szereplő elhangolságban megjelenő $N\hbar\omega$ -tag a sokfotonos indukált emisszióban a hangolt lézertér által elvitt energiának felel meg; $\omega_{n0} = (E_n - E_0) / \hbar$, ahol E_n a kötött közbenső ill. E_0 a kötött vég és kezdeti állapot energiája. (3.11)-ből látható, hogy olyan izoméreknel várhatunk erős effektust, ahol a mag



3.5.ábra Kötött-kötött, lézer-indukált elektron-híd folyamat sematikus ábrája. [Kálmán és Keszthelyi, 1991]

átmenet nagy multipolaritású és az átmenet energiája csekély. Az U^{235m} esetére számolva ($L=3$ és $\hbar\omega_{AB} = 73.5 \text{ eV}$), a szerzők az elektron-híd folyamatot a $6s_{1/2}$ kezdeti elektronállapot esetére számítják ki, amelynek kötési energiája 71 eV , tehát a belső konverzió ezen a héjon már megengedett. Közbenső kötött állapotként egy $E_n = 2.14 \text{ eV}$ -os nívót véve alapul, kétfotonos esetben a teljes hangoltság biztosításához egy 2.32 eV fotonenergiájú lézerre van szükség. Jól látható, hogy a Δ elhangoltság ekkor nullává tehető, épp ezért a közbenső nívó szélessége fogja dominánsan meghatározni az effektus nagyságát. A szerzők (3.11)-et U esetén $I = 10^{12} \text{ W/cm}^2$ intenzitás mellett számolták ki, és a fent említett kétfotonos, rezonáns folyamat esetén $\alpha = 6.7 \times 10^9$ kaptak eredményül. A cikk [Kálmán és Keszthelyi, 1991] a rezonáns eset részletesebb diskusszióját adja. A szerzők figyelembe veszik, hogy a közbenső kötött állapot bomlásának időegységre jutó átmeneti valószínűségét a lézertér bekapcsolása megnöveli, ami a közbenső állapot kiszélesedését jelenti és ez elegendően nagy lézerintenzitásoknál összemérhetővé válik a nívó természetes vonalszélességével, jelentősen hátráltatva ezzel az indukált elektron-híd folyamatot. Számításaik szerint ez a hátráltató effektus azonban csak 10^{12} W/cm^2 intenzitás felett válik szignifikánssá.

Végezetül ismételten fel kell hogy hívjuk a figyelmet arra, hogy a vizsgált folyamatok közül egyetlen egy sincs, amely általános esetben (azaz tetszőleges maggerjesztési energiáknál és átmeneti multipolaritás mellett) viszonylag moderált ($I < 10^{15} \text{ W / cm}^2$) optikai vagy UV lézerintenzitások esetén jelentős effektust adna. Az itt felsorolt néhány kivétel elsősorban azért ad effektust, mert a mag gerjesztési energia kicsi, valamint összemérhető a belső konverzióban domináns szerepet kapó elektronok kötési energiájával.

4. Saját eredmények

4.1 A Tc^{99m} lézer indukált belső konverziós és a Th^{229m} elektron-híd folyamatának vizsgálata

Az egyes magokra kiszámolt különböző lézer-asszisztált belső konverziós folyamatok illetve elektron-híd folyamatok valójában soha nem keltettek nagy tudományos visszhangot, mivel ezek megvalósításához szükséges eszközök általában igen nagy intenzitású ($I \gg 10^{14} W / cm^2$) lézereket követelnek gyakran az UV vagy a röntgen tartományban; gyakorlati megvalósítás pedig az effektusok kicsinysége folytán nem jöhet szóba. Amint azt az előző fejezetben megmutattuk, léteznek azonban olyan kivételes izomérek mint az U^{235m} és Th^{229m} , amelyeknél már alacsonyabb intenzitások esetén, optikai lézerekkel is jelentős effektus (mérhető bomlási ráta növekedés) prognosztizálható. Ebben a fejezetben olyan izoméereket fogunk elméleti úton megvizsgálni, melyek indukált belső konverziós ill. elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlásával a téma kutatói intenzíven foglalkoztak az elmúlt évek során.

A kísérleti szempontból is érdekes izomérek körét kívánta kibővíteni Zon és Chernov [1996a, 1996b], amikor Tc^{99m} -ben vizsgálni kezdte a lézer-indukált belső konverzió egy speciális válfaját, az energetikailag tiltott *diszkrét* belső konverzió beindításának lehetőségét.

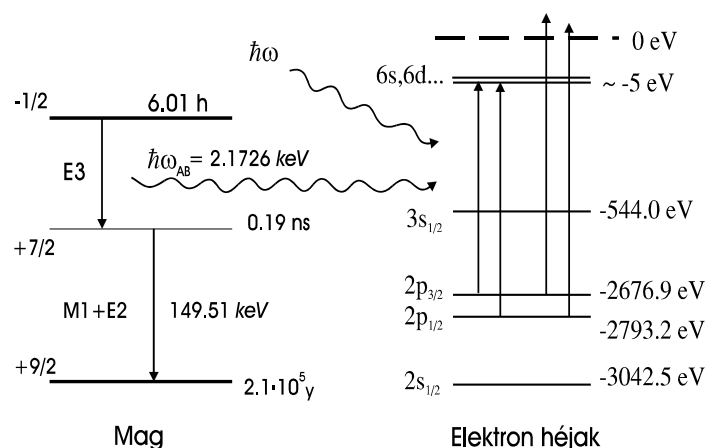
Vizsgálatuk során Zon és Chernov arra a meggyőződésre jutott, hogy a Tc^{99m} esetében jelentős bomlási ráta növekmény várható a ma hozzáférhető szinkrotron sugárzások alkalmazásával. A fent nevezett folyamatot mi is megvizsgáltuk, eredményeink pedig jelentős mértékben ellentmondanak Zon és Chernov által prognosztizáltakkal. [lásd még: Bükki T. és Kálmán P., 1998].

Az elmúlt években egyes kísérletező csoportok nagy figyelmet szenteltek az elektron-híd folyamaton keresztül bomló, igen alacsony maggerjesztési energiával rendelkező Th^{229m} izomérnek. A Physical Review Letters hasábjain megjelent kísérleti és elméleti tanulmányok sorozata látszólag azt mutatta, hogy sikerült kísérletileg kimutatni a Th^{229m} egzotikusnak számító magállapotának létezését. Mint kiderült azonban, hibás kísérleti és elméleti következtetések sorozata félrevezette a kutatókat. A helyzet tisztázása végett a Th^{229m} elektron-híd bomlását mi is megvizsgáltuk, és egy kísérleti javaslatot tettünk ezen izomér egzotikus magállapotának megfigyelésére [lásd még: Kálmán P. és Bükki T., 2001a].

4.1.1 Energetikailag tiltott belső konverzió beindítása Tc^{99m} -ben

Az energetikailag tiltott belső konverziós folyamatok esetén azt várjuk, hogy elegendő energiát vive a rendszerbe — és így az eredetileg tiltott héjakat is bekapcsolva a bomlási folyamatba — azok jelentős szerepet fognak kapni a bomlásban, ami az adott magnál akár jelentős bomlás felgyorsulást is eredményezhet.

Egy ilyen folyamatot számol Zon és Chernov [1996a] Tc^{99m} -ben, melynél a mag a 6 órás felezési idejű metastabil állapotából egy 2.17 keV energiájú $E3$ átmenettel bomlik egy rövid élettartamú nívóba (4.1. ábra). A kicsi magerjesztési energiának köszönhetően, külső sugárzási tér jelenléte



4.1. ábra Folytonos és diszkrét belső konverzió ^{99m}Tc -ben. A belső konverzió külső sugárzási tér hiányában az $1s$, $2s$ ill. $2p$ héjakon tiltott.

nélkül a K és az L héj energetikai okok miatt teljesen kimarad a belső konverzióból. Ahhoz, hogy a bomlást beindítsuk, a $2p_{3/2}$ héj esetén közel 500 eV , a $2p_{1/2}$ héj esetén közel 620 eV energia szükséges, amit egy külső sugárzási térnek kell bevinnie a rendszerbe. Ez egy nagy intenzitású lágy-röntgen forrást feltételez. A fenti szerzők a folyamatot szinkrotron sugárzásban vizsgálták. Tekintve, hogy a szinkrotron sugárzás folytonos spektrumú, így a *folytonos* belső konverzió felül (azaz amikor a konverziós elektron a folyamat végére szabad állapotba kerül) feltétlenül érdemes megvizsgálni azokat a rezonancia folyamatokat is, melyeknél a konverziós elektron kötött-kötött átmenettel viszi el a magenergiát (4.1. ábra). A vizsgált $\text{Tc}^{99\text{m}}$ esetében többek között ilyenek lehetnek a $2p \rightarrow 6s$, $6d$, $7s$, $7d$ folyamatok. Az ilyen kötött-kötött átmeneteket a továbbiakban a fenti szerzők után *diszkrét* belső konverziónak nevezzük. Zon és Chernov [1996a] cikkében a $6s$ és az összes e feletti héjra (azaz minden, alapállapotban betöltetlen héjra) felösszegzett effektust számol, továbbá megadja az adott energiatartományban ($503\text{-}504.5\text{ eV}$ ill. $619.8\text{-}620.5\text{ eV}$) konstansnak feltételezett azon spektrális intenzitást (ill. a szinkrotron sugárzás terminológiájában használt „fényességet”), amelynél a $\text{Tc}^{99\text{m}}$ bomlása kétszeresére gyorsul. Az általuk közölt intenzitások számos nagyságrenddel alatta vannak minden, az eddig megjelent irodalomban közölt értéknek, és azt jósolják, hogy a mai szinkrotronok sugárzási terében

a bomlás jelentősen felgyorsítható. Ezen meglepő eredmények arra inspiráltak bennünket, hogy a fenti folytonos és diszkrét folyamatokat — Zon és Chernov [1996a] cikkétől független utat követve — alaposabban megvizsgáljuk.

4.1.1.1 A folytonos és diszkrét belső konverzió modellje

A fenti, lézer-indukált belső konverzió másodrendű perturbáció számítással számolható, ahol az elektron-mag kölcsönhatást egyszerű Coulomb-kölcsönhatásként [lsd. (3.2)] vesszük figyelembe, és a perturbálatlan elektron rendszert egy-elektronos, hidrogénszerű állapotokként tekintjük. Alkalmazzuk egy korábbi cikk formalizmusát [Kálmán és Keszthelyi, 1994], ahol a szerzők megmutatják, hogy a vizsgálandó, elektron oldalon másodrendű folyamat normál és keresztezett gráfjainak (4.2. ábra) együttes S-mátrix eleme átírható a következő látszólagosan elsőrendű alakba:

$$S_{fi} = \frac{2\pi}{i\hbar^2} \langle f | \mathbf{H}_\alpha | i \rangle \delta(\hbar\omega_{AB} + \hbar\omega - \Delta\varepsilon), \quad (4.1.1)$$

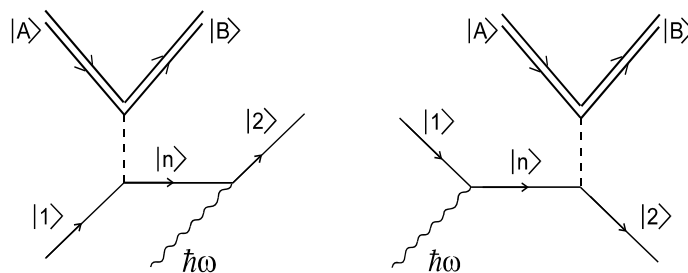
ahol $\hbar\omega_{AB}$ a mag kezdeti és végállapota közötti energia különbség, $\hbar\omega$ a bejövő foton energiája, $\Delta\varepsilon > 0$ pedig a megfelelő atomi elektron állapotok energia sajátértékeinek különbségét jelöli; ez diszkrét esetben $\Delta\varepsilon = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ ahol ε_1 annak a héjnak az energiája, amelyiken a belső konverzió történik, ε_2 pedig annak, amelyikbe a rendszer gerjesztődik, ill. folytonos esetben $\Delta\varepsilon = q^2\hbar^2 / 2m - \varepsilon_1$, ahol m az elektron nyugalmi tömege, q pedig a szabad elektron hullámszáma. Továbbá:

$$\mathbf{H}_\alpha = -\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \sum_{p=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{x}_p|}, \quad (4.1.2a)$$

ahol

$$\mathbf{a} = i \frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}, \nu} \left(\frac{2\pi \hbar \omega}{V} \right)^{1/2} \frac{1}{\omega^2} a_{\mathbf{k}, \nu} \mathbf{e}_\nu. \quad (4.1.2b)$$

Itt e az elektron töltése, V a kvantált elektromágneses tér normálási



4.2. ábra Az indukált diszkrét belső konverzió Feynman-gráfjai. A dupla vonal a magállapotot, a folytonos vonal az elektronállapotot, a szaggatott vonal a Coulomb-kölcsönhatást jelképezi.

térfogata, \mathbf{e}_ν az elektromos tér polarizációs vektora, míg $a_{\mathbf{k},\nu}$ a kvantált elektromágneses tér foton-eltüntető operátora. A 4.2. ábra gráfjainak S-mátrix elemei akkor írhatók fel a (4.1.1) alakban, ha a bejövő sugárzás körfrekvenciája távol van egy atomi átmenet frekvenciájától. A kezdeti- és végállapotokat *folytonos* belső konverzió esetén a következőképpen írhatjuk:

$$|i\rangle = |1\rangle \otimes |A\rangle \otimes |1\omega, \mathbf{k}, \nu\rangle, \quad (4.1.3a)$$

$$\text{ill. } |f\rangle = |\mathbf{q}\rangle \otimes |B\rangle \otimes |0\omega, \mathbf{k}, \nu\rangle, \quad (4.1.3b)$$

ahol $|A\rangle$ és $|B\rangle$ reprezentálja a mag gerjesztett ill. legerjesztett állapotát, $|\mathbf{q}\rangle$ a szabad Coulomb-állapot, $|1\rangle$ pedig az elektron kezdeti kötött állapotát ábrázolja. A többi állapot az ω körfrekvenciájú kvantált elektromágneses tér számsajátállapota, ahol \mathbf{k} a sugárzás hullámszámvektora, ν pedig a két polarizációs állapotot jelöli.

A következőkben H_α gradiens alatti részét (2.8)-nak megfelelően gömbfüggvények szerint kifejtjük, majd az elektron koordináták szerinti rész gradiensét vesszük. A belső konverzió során a konverziós elektron szabad állapotba kerül; ennek leírására szabad Coulomb-állapotot használunk [Sobelman, 1979, 240. old.]:

$$\langle \mathbf{q} | \mathbf{x} \rangle = \sum_{\ell, m} Y_{\ell, m}(\hat{\mathbf{R}}) \mathfrak{R}_{\mathbf{q}, \ell}(R) \frac{Y_{\ell, m}^*(\hat{\mathbf{q}})}{q}, \quad (4.1.4)$$

ahol \hat{q} az elektron hullámszám egységvektora. $\mathfrak{R}_{q,\ell}$ a Coulomb-hullámfüggvény radiális része, amelyet kis elektron kinetikus energiák mellett, azaz amikor a folytonos belső konverzió küszöb-körüli, a következőképpen írhatunk fel [Landau, 1965]:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \mathfrak{R}_{q,\ell} = \sqrt{\frac{4\pi q}{R}} J_{2\ell+1} \left(\sqrt{\frac{8ZR}{a_0}} \right), \quad (4.1.5)$$

ahol $J_{2\ell+1}$ az első fajú, $2\ell+1$ -ed rendű Bessel-függvény. A Coulomb-hullámfüggvény radiális részét hullámszám skálán normáltuk [Landau, 1965]. A folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségét úgy kapjuk, hogy vesszük $|S_{fi}|^2$ -et, majd osztunk $2\pi\delta(0)$ -al és szorozzuk a differenciális fázistér fogattal. Felösszegzünk a végállapot, ill. átlagolunk a kezdeti állapot összes mágneses kvantumszámára, valamint a szabad elektron parciális hullámaira ℓ szerint, és több helyen kihasználjuk a megjelenő 3j-szimbólumok ortogonalitását. Végül a megmaradó energia Dirac-delta segítségével a teljes fázistérre felintegrálhatunk. A lézer-indukált folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségét ismét a természetes bomlási rátához (W_γ — (2.1) összefüggés) kívánjuk viszonyítani. Épp ezért a következő hatáskeresztmetszetszerű mennyiséget vezetjük be:

$$\sigma^* = \frac{W_{fi}}{(c/V) W_\gamma} \quad (4.1.6)$$

Az így definiált mennyiség (σ^*) $cm^2 s$ dimenziójú, és a sugárzási tér foton-fluxusával megszorozva egy dimenzió nélküli mennyiséget ad, ami nem más, mint a folyamatba bekapcsolt elektronhéj lézer indukált belső konverziós együtthatója (α). Folytonos esetben σ^* a következő formában írható fel:

$$\sigma_f^* = \frac{\alpha_f \hbar^2}{3 m^3 a_0} \frac{1}{\omega^3} \frac{L [(2L+1)!!]^2}{2L+1} (2\ell+1) \begin{pmatrix} L+1 & \ell_1 & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left(\frac{\omega_{AB}}{c} \right)^{-(2L+1)} \mathfrak{S}^2 \quad (4.1.7a)$$

$$\text{ahol} \quad \mathfrak{S} = \int_0^\infty R^{3/2} J_{2\ell+1}(\sqrt{8ZR/a_0}) R^{-L-2} \mathfrak{R}_{n_1, \ell_1} dR. \quad (4.1.7b)$$

Itt α_f a finomszerkezeti állandó; a_0 a Bohr-sugár és $\mathfrak{R}_{n_1, \ell_1}$ a kezdetben kötött elektronállapot hidrogén-szerű hullámfüggvényének radiális része. Az itt vázolt modellben a többi elektron árnyékoló hatását úgy vettük figyelembe, hogy Z helyébe annak effektív értékét helyettesítettük, amit a következőképpen definiáltunk: $|\varepsilon_1| = R_y Z_{eff}^2 / n_1^2$, ahol R_y a Rydberg-energia.

A (4.1.7) formulához hasonló összefüggést kaphatunk *diszkrét* esetben is. A gerjesztett elektronállapot (azaz a végállapot) energia eloszlására

Lorentz-vonalalakot használtunk, és (4.1.3b)-ben a $|\mathbf{q}\rangle \rightarrow |2\rangle$ helyettesítést alkalmaztuk, ahol $|2\rangle$ a gerjesztett elektronállapotot reprezentálja ($n_2 \geq 6$).

A fenti gondolatmenetet megismételve végül a következő formulához jutunk:

$$\sigma_d^* = \frac{\pi \alpha_f \hbar^4}{3m^3 a_0} \frac{1}{\omega^3} \frac{L [(2L+1)!!]^2}{2L+1} \begin{pmatrix} L+1 & \ell_1 & \ell_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 (2\ell_2 + 1) \quad (4.1.8a)$$

$$\times \left(\frac{\omega_{AB}}{c} \right)^{-(2L+1)} (\mathfrak{S}_{\ell_1, \ell_2}^{n_1, n_2})^2 \frac{\Gamma}{(\varepsilon_{AB} + \varepsilon_1 + \hbar\omega - \varepsilon_{20})^2 + \Gamma^2 / 4}$$

ahol
$$\mathfrak{S}_{\ell_1, \ell_2}^{n_1, n_2} = \int_0^\infty R^2 \mathfrak{R}_{n_1, \ell_1} R^{-(L+2)} \mathfrak{R}_{n_2, \ell_2} dR. \quad (4.1.8b)$$

Itt ℓ_1 és ℓ_2 az elektronhéjak mellékkvantszámjai, Γ a gerjesztett végállapot szélessége és ε_{20} a végállapot középenergiája; az integrálban megjelenő $\mathfrak{R}_{n_2, \ell_2}$ pedig a $\langle \mathbf{x} | 2 \rangle$ hullámfüggvény radiális részét jelöli.

4.1.1.2 A telítés jelensége

A fent tárgyalt modell alkalmatlan arra, hogy számot adjon a nagy intenzitásoknál mutatkozó telítési effektusról, mivel a kapott indukált belső konverziós koeficiensek az intenzitással lineárisan nőnek. A lézer-indukált belső konverziót egy olyan modellben számolva [Kálmán és Bergou, 1986; Kálmán, 1988a; 1989a], amely a szabad elektron állapotok leírására Volkov- ill. Coulomb-Volkov állapotokat használ, az indukált belső konverziós ráta nem nőhet minden határon felül.

Az alábbiakban szeretnénk a fent tárgyalt modell érvényességét meghatározni. Ehhez meghatározunk egy olyan kritériumot, amely segítségével eldönthetjük, hogy a számolt intenzitásoknál kell-e a telítés jelenségével foglalkoznunk, avagy alkalmazhatjuk az előzőekben tárgyaltakat. Ehhez a 3. fejezet (3.9) összefüggését használjuk. Ott a lézer-indukált folyamat belső konverziós koefficiensét $\alpha = \alpha_{th} T$ formába írtuk fel, ahol α_{th} az ún. küszöb belső konverziós együtthatót jelentette. Jelen esetben az egyszerűség kedvéért csak lineárisan poláros lézertérrel foglalkozunk. Az α_{th} mennyiséget nemrelativisztikus modellben [Kálmán, 1989a] ill. relativisztikus alapokon [O'Connell és Carroll., 1965] egyaránt kiszámolták. Mivel a telítés $T > 1$ tartományban válik szignifikánssá, ezért az előző szakaszban tárgyalt egyszerű modell érvényességére a következő egyszerű kritériumot tesszük: amennyiben a számolt α túllépi a küszöb belső konverziós koefficiensre (α_{th}) számolt értéket, a telítési jelenséggel is számolnunk kell, azaz a (4.1.7) és (4.1.8) formulák a továbbiakban nem alkalmazhatók a lézer-indukált belső konverzió becslésére.

A továbbiakban bevezetjük az I_{th} küszöb intenzitást, aminél $T = 1$. Amennyiben a sugárzási tér intenzitása meghaladja ezt az értéket, úgy az indukált belső konverzió leírására a (3.9)-ben megadott formulát kell használnunk. I_{th} könnyű meghatározása érdekében a következő közelítést

tesszük. Felhasználjuk a Bessel- függvények kis argumentumú közelítését.

Ezzel az egyszerűsítéssel¹⁰

$$T(b_K) = \frac{(b_K / 2)^{2K}}{[(K!)^2(2K + 1)]}, \quad (4.1.9)$$

ahol K a korábban energetikailag tiltott belső konverzió „begyűjtéséhez” minimálisan szükséges fotonoknak a száma. A fentiekben számolt egyfotonos esetre végül kritériumként $T = 1 = 9.54 \times 10^{-14} I (\hbar\omega)^{-3}$ írható.

4.1.1.3 Számolási eredmények és diszkusszió

A következőkben a fenti gondolatmenet alapján megbecsüljük azt az intenzitástartományt, amelynél már mérhető effektus várható, ill. megvizsgáljuk annak lehetőségét, hogy a különböző folytonos és diszkrét folyamatoknál lehetséges-e a ma rendelkezésre álló sugárforrások figyelembevételével olyan effektust elérni, ami jelentősen megváltoztathatja a kis mag-gerjesztési energiával rendelkező Tc^{99m} izomér felezési idejét.

Először a Tc^{99m} folytonos belső konverzióját vizsgáljuk meg a $2p$ héjak belső konverzióba való bekapcsolása esetén. Amint azt már említettük,

¹⁰ Ha $T(b_K)$ pontos meghatározása lenne a célunk, akkor $T=1$ körül a (4.1.9) közelítést nem használhatnánk, hiszen a Bessel-függvények kis argumentumú közelítése megköveteli a $b_0 \ll 1$ feltétel teljesülését. Mivel azonban a (4.1.9) közelítés eredményét

ehhez a $2p_{1/2}$ héj esetén egy 620 eV körüli, a $2p_{3/2}$ héj esetén pedig egy 500 eV körüli fotonenergiájú röntgen forrásra van szükségünk. Elvégezve (4.1.7)-ben a helyettesítéseket a következő eredményekre jutottunk:

$\sigma_f^*(Tc, 2p_{3/2}) = 5.5 \times 10^{-30} \text{ cm}^2 \text{ s}$ ill. $\sigma_f^*(Tc, 2p_{1/2}) = 3.6 \times 10^{-30} \text{ cm}^2 \text{ s}$. Ahhoz, hogy elérjük az $\alpha = 1$ értéket¹¹, $I_{krit}^{(1)}(2p_{3/2}) = 1.5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ ill. $I_{krit}^{(1)}(2p_{1/2}) = 2.8 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ intenzitások szükségesek. Ahhoz pedig, hogy a Tc^{99m} élettartamát felezzük az szükségeltetik, hogy a $2p$ héjon beindított belső konverzió rátája az összes többi héj megengedett belső konverziójának rátájához nőjön fel, azaz $\alpha = \alpha_{tot} = 1.637 \times 10^7$ legyen. Az itt szereplő α_{tot} a teljes belső konverziós együttható, értékét Zon és Chernov [1996a] cikkéből vettük; meg kell jegyezzük azonban, hogy más irodalmi források [Band és Trzhaskovskaya, 1993] ennél a számnál

csak tájékoztató jelleggel, egy másik számolás eredményének ellenőrzésére használjuk, így a T-ben elkövetett hiba a számolásunk végeredményét nem befolyásolja.

¹¹ Ekkor a konverziós folyamatba bekapcsolt „új” héj a közvetlen γ bomlással megegyező járulékot ad a mag bomlásához. Az így definiált indukált bomlási rátát tekinthetjük mérhetőségi kritériumnak. Ez lényegében azért tehető meg, mert az eredetileg tiltott héj beindításával pl. a mért, a belső konverziót követő karakterisztikus röntgen v. Auger-elektron spektrumban olyan vonalak is megjelennek, amelyek a sugárzási tér hiányában nem jelentkeznek. Ezt a mérhetőségi kritériumot nem használhatnánk akkor, ha egy energetikailag megengedett nívó felgyorsítását vizsgálnánk, hiszen akkor inkább az α / α_{tot} arány lenne érdekes a mérhetőség szempontjából.

mintegy három nagyságrenddel nagyobb értéket közölnek, ami öröklődik a megfelelő intenzitás értékekben is. A felezéshez szükséges intenzitások: $I_{1/2}(Tc, 2p_{3/2}) = 2.5 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$ ill. $I_{1/2}(Tc, 2p_{1/2}) = 4.6 \times 10^{20} \text{ W/cm}^2$, ahol Zon és Chernov adatával számoltunk. Ekkora intenzitások mellett azonban meg kell vizsgálnunk, hogy az általunk használt modell nem veszítette-e el az érvényességét. Az előző szakaszban megfogalmazott kritérium küszöb intenzitása 500 eV -nál számolva $I_{th} = 1.3 \times 10^{21} \text{ W/cm}^2$. Mivel $I_{th} > I_{1/2}$, ezért a fenti számításokat elfogadhatjuk. Megjegyezzük azonban, hogyha a Band és Trzhaskovskaya [1993] által adott α_{tot} értéket vesszük alapul, akkor a Tc^{99m} élettartamának felezéséhez $I_{1/2} > 10^{23} \text{ W/cm}^2$ intenzitás szükséges, ahol a telítés már komolyan érezteti a hatását. Számítási eredményeinket összefoglalva a folytonos esetre a 4.1. táblázat tartalmazza. Az eddigiekből úgy tűnhet, mintha a fenti intenzitások alkalmazásával a Tc^{99m} izomér élettartama jelentősen lecsökkenthető lenne.

Elektron átmenet	σ_f^* [cm ² s]	$I_{krit}^{(1)}$ [W/cm ²]	$I_{1/2}$ [W/cm ²]
$2p_{3/2} \rightarrow$	5.5×10^{-30}	1.5×10^{13}	2.5×10^{20}

$$2p_{1/2} \rightarrow \quad 3.6 \times 10^{-30} \quad 2.8 \times 10^{13} \quad 4.6 \times 10^{20}$$

4.1. táblázat A Tc^{99m} energetikailag tiltott *folytonos* belső konverziójának beindítása a $2p$ elektronhéjról. $\alpha_{ind} = \sigma_f^* I/(\hbar\omega)$; $I_{krit, (1)}$ az $\alpha_{ind} = 1$ -hez tartozó intenzitás, $I_{1/2}$ pedig a metastabil mag élettartamának felezéséhez szükséges intenzitás; $\alpha_{tot} = 1.637 \times 10^7$ [Zon és Chernov, 1996a].

Ilyen nagy intenzitások esetén azonban a Tc zömmel elveszti azon külső elektronjait, amelyek tetemes részt adnának a belső konverzióhoz. Így a sugárzási tér jelenléte egyúttal hátráltatja is a mag bomlását. Tehát ha még el is tekintünk attól, hogy az 500 eV -os fotonenergiával rendelkező, ma hozzáférhető röntgenforrások intenzitása sok-sok nagyságrenddel elmarad a fenti intenzitás értékektől, a megjelenő elektron „stripping” miatt lehetetlen pusztán a $2p$ héjak bekapcsolásával tetemes bomlás gyorsulást elérni.

Mivel Zon és Chernov [1996a] állítása az volt, hogy a mai szinkrotronok képesek olyan spektrális intenzitást produkálni, mellyel a Tc^{99m} élettartama felére csökkenthető, így a továbbiakban a fenti modellünkben megvizsgáljuk a *diszkrét* esetet is, majd áttérve a szinkrotronok terminológiájára, összehasonlítjuk eredményeinket a Zon és Chernov [1996a] által publikáltakkal.

Kötött-kötött elektronátmenetre alkalmazva a (4.1.8) összefüggést, továbbá $\Gamma = 6.56 \times 10^{-3} eV$ szélességet és $\varepsilon_{20} = -8.2 eV$ -ot feltételezve: $\sigma_d^*(Tc, 2p_{3/2}) = 5.5 \times 10^{-31} cm^2 s$ ill. $\sigma_d^*(Tc, 2p_{1/2}) = 3.0 \times 10^{-31} cm^2 s$ adódik, és az $\alpha=1$ eléréséhez $I_{krit}^{(1)}(2p_{3/2}) = 1.4 \times 10^{14} W/cm^2$ ill. $I_{krit}^{(1)}(2p_{1/2}) = 3.3 \times 10^{14} W/cm^2$ intenzitások szükségesek. A számokból látható, hogy a folytonos belső konverzió valószínűsége picit nagyobb, mint a diszkrét folyamaté. Megjegyezzük, hogy a felhasznált Γ szélesség szintén Zon és Chernov [1996a] cikkéből származik, és mi Zon és Chernov [1996a] munkájával ellentétben, ahol a szerzők az összes $n_2 \geq 6$ főkvantumszámra felösszegzett eredményt közölnek, a számolást csak az általuk tárgyalt diszkrét átmenetek közül leginkább domináns $n_2 = 6$ főkvantumszámú nívóra végeztük el. Ez azonban legfeljebb azt eredményezheti, hogy a diszkrét belső konverzió valószínűsége felnő a folytonos folyamat valószínűségéhez, lényegi változást azonban nem okozhat. A diszkrét esetre végzett számításaink eredményeit összefoglalva a 4.2. táblázat tartalmazza.

Elektron átmenet	$\sigma_{d_2}^*$ [cm ² s]	$I_{krit}^{(1)}$ [W/cm ²]	$I_{1/2}$ [W/cm ²]
---------------------	---	--	-----------------------------------

$2p_{3/2} \rightarrow$	5.5×10^{-31}	1.4×10^{14}	2.3×10^{21}
$2p_{1/2} \rightarrow$	3.0×10^{-31}	3.3×10^{14}	5.4×10^{21}

4.2. táblázat A Tc^{99m} energetikailag tiltott *diszkrét* belső konverziójának beindítása a 2p elektronhéjról. $\alpha_{ind} = \sigma_f^* I / (\hbar\omega)$; $I_{krit.}^{(1)}$ az $\alpha_{ind} = 1$ -hez tartozó intenzitás, $I_{1/2}$ pedig a metastabil mag élettartamának felezéséhez szükséges intenzitás; $\alpha_{tot} = 1.637 \times 10^7$ [Zon és Chernov, 1996a] .

A következőkben a fenti folyamatot szinkrotron sugárzási tér jelenlétében vizsgáljuk meg, azaz meghatározzuk azt a *foton/(cm²s mrad² 0.1%BW)* egységekben mért sugárzási *fényességet* (angol terminológiában „brilliance”) [Koch és mtsai., 1983], amely megfelel a fent kiszámolt intenzitásoknak. Ehhez (4.1.8) és a $J(\omega)$ spektrális foton-fluxus szorzatát a rezonancia görbe körüli kis frekvencia tartományra felintegráljuk:

$$\alpha_{ind} = \int_{\omega_0 - \Delta\omega}^{\omega_0 + \Delta\omega} \sigma_d^*(\omega) J(\omega) d\omega \quad (4.1.10)$$

ahol $J(\omega)$ -át *foton/(cm²s Hz)* egységekben mérjük, és a $\hbar\Delta\omega = 1 eV$ -al meghatározott tartományra integrálunk. Mivel ilyen intervallumra a szinkrotronok spektruma konstansnak tekinthető, ezért a spektrális intenzitást kiemelhetjük az integrálás alól. Ezzel $2p_{3/2}$ állapotra $\int \sigma_d^*(\omega) d\omega = 8.6 \times 10^{-18} cm^2$ -et kaptunk. Mivel a rezonancia meglehetősen éles, így a fenti integrál valójában nem érzékeny az integrálási határok kis mértékű megváltoztatására. $\alpha = 1$ -re számolva a szükséges fényességet

$F(2p_{3/2}) = 1.5 \times 10^{31}$ *foton / (cm²s 0.1%BW)*-ra becsüljük, ami a térszög-
függő fényesség 4π térszögre vett felintegráltja, és a fenti mennyiség
számításához a $0.1\%BW = 7.66 \times 10^{14}$ Hz relációt használtuk fel. Ahhoz,
hogy felezzük a Tc^{99m} élettartamát, közelítőleg 10^{39} *foton/(cm²s 0.1%BW)*
fényesség szükséges, ami kb. 14 nagyságrenddel nagyobb szám, mint amit
Zon és Chernov [1996a] jósol (ők a $2p_{1/2}$ nívó bekapcsolásával a metastabil
élettartam felezéséhez szükséges $J = 1.2 \times 10^{-6}$ W / (cm² Hz) spektrális
intenzitást és $F = 1.1 \times 10^{25}$ *foton / (cm²s 0.1%BW)* fényességet prognosztí-
zálnak). Itt kell megjegyeznünk, hogy a szinkrotron források nyaláb
divergenciája tipikusan a 10^{-5} rad körüli nagyságrendbe esik;
amennyiben ezt is figyelembe vennénk, az a fentieknél számos
nagyságrenddel nagyobb fényességeket eredményezne.

A fenti számítások, és Zon és Chernov [1996a] eredményei közt
megjelenő 14 nagyságrendnyi különbség semmiképpen sem eredeztethető a
választott modellek pontatlanságából. Mivel arra gyanakodtunk, hogy
valahol egy súlyos számítási hiba történt, ezért a vizsgált folytonos
folyamatot a (4.1.7-8)-tól független, a telítés jelenségével is számoló, a
(3.9)-es formulákban megadott modell alapján ellenőrző jelleggel
kiszámoltuk. Az így kapott eredmények azonos nagyságrendbe estek a
fentebb közölt eredményeinkkel. Zon és Chernov [1996a] cikkét, ill. annak

egy bővebb lélegzetű változatát [Zon és Chernov, 1996b], — melyre mint forrás anyag maguk is hivatkoznak — tüzetesebben átvizsgálva az gyanítható, hogy a fenti szerzők egy \hbar -al elszámolhatták magukat.

Mindezek ellenére a szinkrotron források a közeljövőben képesek lehetnek olyan intenzitásokat produkálni, hogy segítségével a Tc és a hozzá hasonló más kisenergiás izomérek tiltott héjainak beindítása mérhetővé váljon. A belső konverziót követően, a keletkező vakancia betöltődése során emittált karakterisztikus röntgen sugárzás ill. Auger-elektronok spektrumában új vonalak jelentkeznek, melyek szerencsére jól elkülöníthetők magától a bomlást indukáló röntgen „háttértől”; ezért az indukált belső konverziós folyamat megjelenése várhatóan jól megfigyelhető.

4.1.2 Th^{229m} bomlása: elektron-híd folyamat vagy direkt γ bomlás?

Egy évtizeddel ezelőtt elvégzett nagy pontosságú γ mérések arra utaltak, hogy a Th²²⁹ izotópnak valószínűleg létezik egy igen alacsony energiájú metastabil állapota az alapállapot fölött 3.5 ± 1 eV energiával [Reich és Helmer, 1990; Helmer és Reich, 1994] . Az izomérek közt egzotikumnak számító Th^{229m} az elmúlt években nagy kísérleti érdeklődést váltott ki. Így több kutatócsoport megpróbálkozott azzal, hogy kísérletileg

bizonyítsa ennek az igen alacsony maggerjesztési energiával rendelkező magállapotnak a létezését. A következőkben először röviden ismertetjük ezen kísérleteknek a sorozatát. Mindezzel a célunk az, hogy az olvasó előtt világossá tegyük, hogy mi készítetett minket arra, hogy megvizsgáljuk elméleti szempontból a $\text{Th}^{229\text{m}}$ bomlásának lehetőségeit.

4.1.2.1 Kísérleti és elméleti előzmények

Irwin és Kim [1997] optikailag vizsgálta a $\text{Th}^{229\text{m}}$ -et tartalmazó minták spektrumát. Kísérleteikben egyrészt a direkt γ bomlásból származó, másrészt az izomér elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlásából származó, mindkét esetben az optikai frekvencia tartományba eső fotonokat szerették volna regisztrálni. Az izomér elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlása során valamely külső elektron kötött-kötött átmenete (gerjesztése) történik meg, a mag legerjesztődésének energiája és az atomi átmenet energia különbségét pedig egy foton emissziója viszi el. Amennyiben tehát a $\text{Th}^{229\text{m}}$ bomlásában ez a bomlási csatorna szerepet játszik, úgy a bomlás optikai spektrumában a direkt γ bomlásból származó jel mellett ennek az energiában (az atomi átmenet energiájával) eltolt jelnek is meg kell jelennie. Irwin és Kim [1997] kísérleteiben U^{233} -at tartalmazó mintákat használt; az U^{233} α bomlása során ugyanis részben $\text{Th}^{229\text{m}}$ keletkezik. A felvett spektrumok két szignifikáns csúcsot tartalmaztak: 3.5

eV fotonenergia körül (350 nm) és 2.4 eV fotonenergia körül (500 nm). A kísérletek interpretációja pedig a következő volt: A 3.5 eV körüli csúcs valószínűleg az izomér direkt γ bomlásának, míg a 2.4 eV körüli egy $6d_{3/2} \rightarrow 7p_{1/2}$ atomi átmenetet magában foglaló elektron-hídon keresztül történő bomlásnak tulajdonítható.

Richardson és mtsai. [1998] megismételték Irwin és Kim [1997] fenti kísérletét, azzal az ésszerű módosítással, hogy a felvett spektrumokat összehasonlították egy U^{232} minta spektrumával. Eredményeik alátámasztották Irwin és Kim [1997] megfigyeléseit. Másrészt méréseik jobb felbontásának köszönhetően kimutatták, hogy a 3.5 eV körüli csúcs valójában egy multiplett. Richardson és mtsai. [1998] konklúziója óvatosabb volt: elképzelhető, hogy a vonalak a Th^{229m} bomlásából származnak, de erre egyelőre nincs egyértelmű bizonyíték.

Mindezek után Utter és mtsai. [1999] felvetették, hogy az U^{233} (Th^{229m} -et tartalmazó) minták által kibocsátott nagy energiás α részecskék gerjeszthetik a levegő nitrogénjét, és ez a lumineszcencia okozhatja az optikai fénykibocsátás jelentős részét. Kísérletükben egy CCD kamera segítségével vizsgálták egy U^{233} minta emisszióját, és azt tapasztalták, hogy az emisszió mértéke radikálisan lecsökken, ha a mintát vákuumba helyezik. Utter és mtsai. [1999] nem analizálták a kibocsátott sugárzás spektrumát.

Shaw és mtsai. [1999] részletes tanulmányukban azonban az U^{233} spektrumát összehasonlították egy N_2 kisülés spektrumával, és azt találták, hogy a 3.5 eV körüli multipllett nagy valószínűséggel a nitrogén lumineszcenciájának tulajdonítható. A 2.4 eV körüli (500 nm) szélesebb csúcs azonban nem konzisztens a N_2 kisülési spektrummal. Ennek ellenére Shaw és mtsai. [1999] óvatosak a végkövetkeztetéssel: nem állítják, hogy a 2.4 eV körüli csúcs az egzotikus magállapot nyomára utalna.

Mindezen kísérleti indíttatású munkákkal párhuzamosan Karpeshin és mtsai. [1999] egy elméleti munkát közöltek Irwin és Kim [1997] kísérleti konklúzióit kommentálva. Ebben a munkában a Th^{229m} esetén többféle maggerjesztési energiát feltételezve megadnak egy $R^* = W_{EB}/W_\gamma$ viszonyszámot, ahol W_{EB} az elektron-híd folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűsége, W_γ pedig a mag (direkt) γ bomlásának az időegységre jutó átmeneti valószínűsége. Például 3.5 eV maggerjesztési energiánál számításaik alapján $R^* \cong 782$ -t jósolnak, vagyis az elektron-híd folyamat durván 3 nagyságrenddel gyakoribb a direkt γ bomlásnál. Karpeshin és munkatársai interpretációja szerint a kísérletekben 3.5 eV körül a Th^{229m} nyoma várhatóan észrevehetetlen, míg az elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlás nyoma szignifikáns kell legyen. Megjegyzik továbbá, hogy az elektron-hídon keresztül történő bomlás a

felvett spektrumban — mivel a bomlásban résztvevő elektron végállapota $7p_{1/2}$ és $7p_{3/2}$ egyaránt lehet — egy dublettként jelentkeznek. Hallgatólagosan valószínűsítik, hogy az elsőként Irwin és Kim [1997] által megfigyelt, 2.4 eV körüli, széles csúcs a $\text{Th}^{229\text{m}}$ elektron-hídon keresztül történő bomlási csatornának feleltethető meg.

A fenti kísérletsorozat interpretációja Karpeshin és mtsai. [1999] munkájának fényében egyértelműnek tűnik: amíg a megfigyelt 3.5 eV vonalakat a nitrogén lumineszcenciája okozza, addig a 2.4 eV körüli csúcs a mag elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlásának tulajdonítható — a direkt γ bomlásból származó kicsi jel pedig nem szeparálható a spektrumból.

Sajnos azonban Karpeshin és mtsai. [1999] fenti eredménye erősen megkérdőjelezhető. Ennek oka pedig az, hogy ezen szerzők fenti számításait egy előző munkájukra alapozzák [Karpeshin és mtsai., 1996], ami pedig súlyos, koncepcionális elméleti hibákat tartalmaz.

Karpeshin és mtsai. [1996, 1999] számításaik során az elektron-híd folyamat két Feynman-gráfjából (2.2. ábra) csak a direkt gráf (2.2.a ábra.) járulékaival foglalkoznak, ezen felül pedig nem összegeznek fel az összes közbenső állapotra. Ezeket az elhanyagolásokat azzal indokolják, hogy a közbenső állapotnál rezonancia jelensége lép fel. A *vélt rezonanciák* kérdéséről a 4.3 fejezetben részletesen szó lesz. Itt előzetesen csak annyit,

hogy vizsgálataink szerint a fenti elektron-híd folyamatánál semmiféle rezonancia nem jelentkezik; a vélt rezonancia jelensége történetesen pont abból adódhat, hogy a szerzők az egyik gráf járulékát elhanyagolják. Elhanyagolásaik következménye pedig ez esetben az, hogy számítási eredményeik valószínűleg hibásak.

Mindezek arra sarkalltak bennünket, hogy elméletileg megvizsgáljuk a $\text{Th}^{229\text{m}}$ elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlását. Számításaink során mindkét gráf járulékát figyelembe vettük, továbbá összegeztünk az összes közbenső állapotra. Számításaink eredménye ellentétben áll Karpeshin és mtsai. [1999] eredményeivel; számításaink szerint ugyanis a direkt γ bomlás és az elektron-híd folyamat ez esetben egyaránt valószínű, egymással versengő folyamatok. Az alábbiakban számításaink részleteivel kívánunk foglalkozni. A fentiekben leírt kísérletsorozat interpretációjához ez után térünk majd vissza.

4.1.2.2 Az elektron-híd folyamat modellje

Az elektron-híd folyamat leírására használt modell az előző alfejezetben már ismertetett [Kálmán-Keszthelyi, 1994] munka általánosítása. A folyamatban szereplő elektron Hamilton-operátora egy egy-elektronos, hidrogénszerű Hamilton-operátor:
$$H_e = -\hbar^2/2m \nabla^2 - Z_{\text{eff}} e^2 / r,$$
 ahol m az elektron nyugalmi tömege, e az elemi

töltés, Z_{eff} a mag effektív proton száma, r pedig az elektron koordináta (a koordináta-rendszer középpontját az atommag tömegközéppontjához rögzítettük). Jelölje továbbá H_N az atommag Hamilton-operátorát, H_R pedig a szabad, kvantált elektromágneses tér Hamilton-operátorát. A teljes Hamilton-operátor a következőképpen írható: $H = H_0 + H_I$, ahol $H_0 = H_e + H_N + H_R$, és H_I az atommag, a vele kölcsönhatásban álló elektron és az elektromágneses tér kölcsönhatási energia operátora. $H_I = H_1 + H_2$, ahol H_1 az elektron és a szabad elektromágneses tér közti kölcsönhatást, H_2 pedig az elektron és az atommag kölcsönhatását írja le. Az elektromágneses tér és az atommag közvetlen kölcsönhatását elhanyagolhatónak tekintjük. Az elektron és a kvantált elektromágneses tér kölcsönhatása a következőképp írható:

$$H_I = H_{1,+} e^{i \omega t} + H_{1,-} e^{-i \omega t}$$

(4.1.13)

és $H_{1,+} = e \mathbf{r} \mathbf{E}_q^+$, $H_{1,-} = e \mathbf{r} \mathbf{E}_q^-$, és **Hiba!** a kvantált elektromágneses tér térerősségvektora, \mathbf{k} a foton hullámszám vektora, ν a polarizáció állapotát jelöli, ω a foton körfrekvenciája, V a normálási térfogat, $a_{\mathbf{k},\nu}$ a foton eltüntető operátor, $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\nu}$ pedig az transzverzális elektromágneses tér polarizációs vektorát jelöli. A mag és a kötött elektron közti kölcsönhatás operátora a következő alakban írható fel:

$$H_2 = V_M + V_E, \quad (4.1.14)$$

ahol V_E a jól ismert statikus Coulomb-kölcsönhatás energia operátora, V_M pedig a mágneses-mágneses kölcsönhatás energia operátora, ami az elektronállapotok hiperfinom felhasadását is szolgáltatja. A fenti operátor kifejtésénél a retardáció jelenségét elhanyagoltuk, mivel a magátmenet energiája kicsi, azaz összehasonlítható a külső elektronhéjak átmeneti energiáival. Itt meg kell jegyezzük, hogy ez a számítás a Kálmán-Keszthelyi [1994] cikk modelljének kibővítése; jelen munkában ugyanis H_2 -ben a töltésfelhők Coulomb-kölcsönhatását leíró tag mellett figyelembe vesszük az átmeneti áramok okozta mágneses-mágneses kölcsönhatást is. Az újdonságnak számító mágneses-mágneses kölcsönhatás a következő tagokra bontható: $V_M = V_{Ma} + V_{Mb} + V_{Mc}$, ahol is

$$\text{Hiba!}, \quad (4.1.15a)$$

$$V_{Mb} = -2\mu_0 (\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\mu} - 3 s_r \mu_r) / r^3, \quad (4.1.15b)$$

$$V_{Mc} = 2\mu_0 \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\mu} / (\hbar r)^3. \quad (4.1.15c)$$

Itt $\mu_0 = e\hbar/2mc$ a Bohr-magneton, $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$ a Pauli-spin operátor ($\boldsymbol{\sigma}$ a Pauli-spin mátrixokat tartalmazó vektor), $\boldsymbol{\mu}$ az atommag mágneses momentumát jelenti, s_r és μ_r a vektorok r irányú komponenseit jelölik, \mathbf{L} pedig az elektron pálya-impulzusmomentumát jelenti [Bethe, 1957].

Az elektron-híd folyamat S-mátrix elemének vezető tagja két részre bontható: $S_{fi} = S_{fi}^a + S_{fi}^b$, ahol S_{fi}^a és S_{fi}^b a 2.2.a ill 2.2.b ábrának megfelelő, direkt és keresztezett folyamatokat írja le. A Kálmán-Keszthelyi [1994] cikk alapján (lásd még előző fejezet) a teljes S-matrix elem a következő alakban írható fel:

$$\mathbf{Hiba!}, \quad (4.1.16a)$$

$$\text{ahol } H_{EB} = \boldsymbol{\alpha}^+ \cdot \nabla_r H_2, \quad (4.1.16b)$$

$$\mathbf{Hiba!}. \quad (4.1.16c)$$

Itt $\hbar\omega_{AB} = E_A - E_B$ a mag átmeneti energiája, míg $\hbar\omega_{12} = E_1 - E_2$ az elektron átmeneti energiája; E_A a mag gerjesztett, E_B az atommag legerjesztett állapotának sajátenergiáját, E_1 a folyamatban résztvevő elektron kezdeti (kötött állapot) sajátenergiáját, míg E_2 az elektron végállapotbeli (kötött állapot) sajátenergiáját jelöli. A fenti felírás különlegessége az, hogy magába foglalja mindkét gráf járulékát és egyben tartalmazza a szabályok szerinti felösszegzést is a közbenső állapotokra. A folyamatban szereplő állapotok leírása megegyezik az előző fejezetben leírtakkal.

4.1.2.3 Számítási eredmények

A Th atom külső elektronhéjain $7s$ és $6d$ állapotú elektronokat találunk. A fent vázolt számítást $7s$ és $6d$ kezdeti elektronállapotokra és $7p$ elektron

végállapotokra végeztük el, mivel eredményeinket szeretnénk volna összehasonlítani Karpeshin és mtsai. [1999] számításainak eredményeivel, ők pedig cikkükben ezeket az állapotokat veszik figyelembe. A spinnel rendelkező elektron leírására Pauli-állapotokat használtunk [Bethe, 1957]. Mivel a $\text{Th}^{229\text{m}}$ izomér mag egyaránt képes (számottevő valószínűséggel) mágneses dipól (M1) és elektromos quadrupól (E2) módon lebomlani, így számításaink során mindkét lehetséges bomlási csatornát figyelembe vettük.

Számszerű végeredményeink kiértékelésének megkönnyítéséhez vezessük be az R mennyiséget, amely a teljes, azaz minden lehetséges csatornát magába foglaló elektron-híd folyamat rátájának ($W_{\text{EB}} = W_{\text{EB}}(\text{M1}) + W_{\text{EB}}(\text{E2})$) és a direkt γ bomlás teljes rátájának ($W_{\gamma} = W_{\gamma}(\text{M1}) + W_{\gamma}(\text{E2})$) hányadosa: $R = W_{\text{EB}} / W_{\gamma}$. Továbbá bevezetve az $\eta = W_{\gamma}(\text{E2}) / W_{\gamma}(\text{M1})$ arányt, az R mennyiség a következőképpen írható fel:

$$\text{Hiba! ,} \quad (4.1.17)$$

ahol $\alpha(\text{M1}) = W_{\text{EB}}(\text{M1}) / W_{\gamma}(\text{M1})$, $\alpha(\text{E2}) = W_{\text{EB}}(\text{E2}) / W_{\gamma}(\text{E2})$ a mágneses dipól és elektromos quadrupól elektron-híd együtthatók. Az α mennyiségek zárójeleiben szereplő sp ill dp jelölések az atomi elektron $7s_{1/2} \rightarrow 7p$, illetve a $6d_{3/2} \rightarrow 7p$ átmeneteire utalnak. A fenti formulában a p -re való szummázás pedig azt jelenti, hogy végállapotként a $7p_{1/2}$ és a $7p_{3/2}$ elektron

állapotokat egyaránt figyelembe vettük. Itt kell megjegyeznünk azt, hogy E2 magátmenet esetén $7s \rightarrow 7p$ elektron átmenettel a folyamat nem működhet, mivel azt az impulzusmomentum megmaradás törvénye nem engedi meg.

A számítást elvégeztük $E_\gamma = 3.5$ eV és $E_\gamma = 2.4$ eV magátmeneti energiát feltételezve, mivel az előző részben ismertett kísérleti előzmények ezt a két értéket valószínűsítik. Az η mennyiség becsléséhez Weisskopf-közelítést használtunk. Amennyiben $E_\gamma = 3.5$ eV, $\eta = 6.6 \times 10^{-14}$ adódik, míg $E_\gamma = 2.4$ eV esetén $\eta = 3.1 \times 10^{-14}$ -t kaptunk. Az elektromos quadrupól és mágneses dipól folyamatok redukált átmeneti mátrix elemeinek a viszonya $B(E2)/B(M1)$ növekszik a növekvő nukleon számmal [Eisenberg, 1970a]; épp ezért elképzelhető, hogy a fenti, Weisskopf-közelítésből kapott η arányok a valóságos esetben két nagyságrenddel is nagyobbak lehetnek az itt megadott számoknál. A számoláshoz szükségünk volt a Th külső elektronjainak kötési energiáira, melyekhez Karpeshin és mtsai [1996] cikkét vettük alapul.

Eredményinket a 4.3. táblázatban foglaltuk össze. A táblázatból, $E_\gamma = 3.5$ eV magátmeneti energiát feltételezve látható, hogy minden számolt bomlási csatorna esetén a direkt γ bomlás valószínűsége a nagyobb, továbbá az M1 csatorna játszik vezető szerepet a bomlásban. $E_\gamma = 2.4$ eV

esetén az elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlás valószínűsége kb. kétszer akkora, mint a direkt γ bomlás folyamatának a valószínűsége; a vezető bomlási csatorna jelen esetben is a mágneses dipól rész. A táblázatban szereplő $\alpha(M1)$ (illetve az ezzel közel azonos R) mennyiség értékeit a Karpeshin és mtsai. [1999] által számolt R^* mennyiséggel kell összevetni. Az összehasonlításból látható, hogy amíg Karpeshin és mtsai. [1999] jóslatai alapján az elektron-híd folyamat egyértelműen domináns a $\text{Th}^{229\text{m}}$ bomlásában, addig a mi eredményeink azt mutatják, hogy az elektron-híd ill. direkt γ bomlás folyamatai nagyságrendileg azonos valószínűségű, egymással versengő folyamatok.

E_γ [eV]	Elektron átmenet	$\alpha(M1)$	$\alpha(E2) \eta$	R	R^*	$\hbar\omega$ [eV]
	$7s_{1/2} \rightarrow 7p_{1/2}$	0.28			783	1.713
	$7s_{1/2} \rightarrow 7p_{3/2}$	0.59			783	0.877
3.5				0.87		
	$6d_{3/2} \rightarrow 7p_{1/2}$	5.58×10^{-4}	7.97×10^{-5}			2.222
	$6d_{3/2} \rightarrow 7p_{3/2}$	5.91×10^{-4}	4.73×10^{-5}			1.386
	$7s_{1/2} \rightarrow 7p_{1/2}$	2.41			8.35	0.613
	$7s_{1/2} \rightarrow 7p_{3/2}$				0.07	

2.4

2.41

$6d_{3/2} \rightarrow 7p_{1/2}$	3.43×10^{-3}	1.90×10^{-3}	1.122
$6d_{3/2} \rightarrow 7p_{3/2}$	8.92×10^{-3}	1.51×10^{-3}	0.286

4.3. táblázat Az elektron-híd folyamat számított α együtthatói mágneses dipól és elektromos quadropól magátmenet és különböző elektron átmenetek esetén. Az atommag átmeneti energiájára 3.5 eV ill. 2.4 eV energiát tételeztünk fel, a kísérleti előzmények szerint. Az egyes atomi átmenetekhez a folyamat során emittált foton $\hbar\omega$ energiáját is feltüntettük. Az R^* számokat, melyeket Karpeshin és mtsai.[1999] cikkéből vettük, a megfelelő $\alpha(M1)$ értékekkel kell összehasonlítani.

A 4.3. táblázatban az egyes csatornáknál feltüntettük az elektron-híd folyamat során kijövő foton energiáját is. Látható, hogy amennyiben a mag átmeneti energiája 2.4 eV lenne, úgy a kijövő foton energiája az infravörös tartományba esik. Megjegyezzük, hogy az előzményekben tárgyalt kísérletek során egyetlen esetben sem vizsgálták az infravörös tartomány spektrumát.

4.1.2.4 A kísérleti eredmények újraértékelése és egy kísérleti javaslat

Mint kiderült, a 3.5 eV körüli multiplett valójában a N_2 lumineszcenciájának következménye [Shaw és mtsai., 1999], míg a 2.4 eV körüli széles vonal nem volt konzisztens a nitrogén kisülési spektrumával. Karpeshin és mtsai. [1999] hibás kommentje arra enged következtetni, hogy ez a vonal a Th^{229m} elektron-híd bomlásával azonosítható. A mi számításaink szerint viszont, ha a 2.4 eV körüli vonal a Th^{229m} elektron-híd

folyamatából származik, akkor a 3.5 eV körüli vonalak közül néhánynak a direkt γ folyamatra kellene utalnia. A kísérletek ezt nem támasztják alá. A másik lehetőség az, hogy a 2.4 eV-os vonal a direkt γ bomlásból származik; ekkor az energiában eltolt, az elektron-híd folyamatot jelző vonalnak az infravörös tartományban kell esnie, amit pedig a kísérletek során nem vizsgáltak.

Szerencsére mindez a kísérletezőket sem hagyta nyugodni. Young és mtsai. [1999] hamarosan meggyőzően bizonyították, hogy a 2.4 eV-os vonal nagy valószínűséggel az uranil fluoreszcenciájából származik. Tehát — összefoglalva az eddigieket — feltehetően a mérések során nem sikerült a $\text{Th}^{229\text{m}}$ nyomára bukkanni. Mindezek mellett számításaink alapján elképzelhető, hogy a 2.4 eV körüli tartományban az uranil fluoreszcenciája mellett a direkt γ bomlás nyomai is megjelennek. Ennek eldöntéséhez azonban további kísérletek szükségesek, melyeknél az infravörös régió spektrumát is vizsgálni kell.

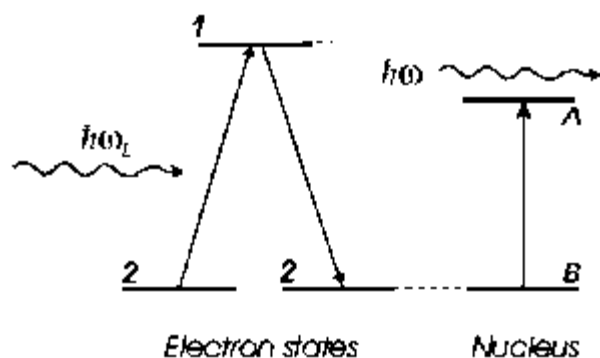
Érdemes elgondolkozni a következőkön: a $\text{Th}^{229\text{m}}$ magátmeneti energiájára adott, kísérleteken alapuló elméleti becslés 3.5 ± 1 eV volt. A kísérletek és hozzá kapcsolódó elméleti diszkussziók során látszólag senkinek nem jutott az eszébe, hogy az 1 eV -os szórást komolyan vegye; Irwin és Kim [1997] hallgatólagosan elkönyvelik, hogy a γ átmenet

energiája 3.5 eV — amit persze hibás elméleti tanulmányok is alátámasztani látszanak. A mérési elrendezésük következtében véletlenül 3.5 eV körüli fotonenergiánál kapnak is jelet, ami történetesen egészen más jelenség (a nitrogén lumineszcencia) következménye.

Mivel a $\text{Th}^{229\text{m}}$ bomlásának jeleit az U^{233} α bomlása következtében fellépő lumineszcencia elfedi, így ennek az egzotikus magállapotnak a kimutatására más, a fentiektől eltérő módszert kell találni. Az alábbiakban egy ilyen módszerre teszünk javaslatot.

Először egy megfelelően hangolt lézer segítségével rezonáns módon gerjesszük a Th valamely külső elektronját; a Th atommagja ekkor legerjesztett, alapállapotban van. (Mivel jelen esetben a Th atommagjának kezdetben alapállapotban kell lennie és nem a gerjesztett, metastabil

4.3. ábra A Th^{229} lézer segített inverz elektron-híd folyamatának sematikus ábrája. Kezdetben az elektron alapállapotban van (2. állapot), ami az elektronátmenetre rezonáns lézertér segítségével gerjesztett állapotba kerül (1. állapot). Az 1.



állapotban, így az U^{233} bomlásából származó Th^{229} magok, szemben a Th^{229m} magokkal, jelentősen fel tudnak dúsulni. A feldúsult Th^{229} magok pedig kémiaiilag már elválaszthatók a zavaró forrásnak számító U^{233} -tól.) Ezek után a gerjesztett elektron visszatér az alapállapotba (legerjesztődik) miközben az atommag felgerjesztődik a metastabil állapotba; a folyamat energiakülönbségét jelen esetben is egy megfelelő frekvenciájú foton emissziója viszi el; $\hbar\omega' = \hbar\omega_L - \hbar\omega_{AB}$. A fenti, ún. inverz elektron-híd folyamatot a 4.3 ábra szemlélteti. Elképzelhető, hogy az 1. állapotban lévő elektron inverz elektron-híd folyamat helyett pl. egy sugárzásos átmenettel egy 3-al jelölt állapotba bomlik, és tételezzük fel, hogy $E_3 - E_2 > \hbar\omega_{AB}$. Az elektronnak ekkor ismét esélye van arra, hogy az atommagot egy inverz elektron-híd folyamaton keresztül gerjessze, a kibocsátott foton energiája pedig $\hbar\omega' = E_3 - E_2 - \hbar\omega_{AB}$ lesz. Úgy véljük, hogy a kijövő optikai jel ($\hbar\omega'$) mérésével a Th^{229m} nyomai könnyebben fellelhetők, mint Kim és Irwin [1997] passzív mérési elrendezésének a segítségével. Amennyiben egy más Th izotópból készült kontroll Th mintát is párhuzamosan besugározzunk a Th^{229} izotóppal, úgy a mért spektrumokat összehasonlítva megtalálhatók azok a vonalak, melyek az inverz elektron-híd folyamatra (azaz az egzotikus magállapot létezésére) utalnak. A módszer további előnye, hogy nem szükséges ismernünk pontosan a Th külső elektronjainak

kötési energiáit (amit egyébként a kémiai környezet is jelentősen befolyásol), hiszen az inverz elektron-híd folyamat következtében megjelenő extra vonalak mindegyike $\hbar\omega_{AB}$ -vel lesz eltolva.

4. 2 Elektron-atommag kölcsönhatás lézerterekben

Az elektron-atommag-lézer csatolt folyamatok eddig ismertetett leírásánál sok fizikai szempontból érdekes és fontos dolog maradt rejtve. A lézertér hatása világos az elektron-energia lézertérbeli módosulásának leírásánál (Volkov- és Coulomb Volkov -megoldások). Az elektron-atommag kölcsönhatást ezekkel a kezdeti- és végállapotokkal (a perturbáció-számítás módszereivel) számolva azonban a lézertérrel való kölcsönhatás mélyebb fizikai tartalma homályos maradt. Így például az eddig ismertetett modellek nem tették lehetővé, hogy nyomon kövessünk egy olyan, fizikai szemléletünk számára fontos dolgot, mint az impulzusmomentum megmaradás törvényének teljesülését egy sokfotonos folyamat során.

Ebben a fejezetben egy olyan, általános modellt ismertetünk, amely az elektron-atommag-lézer folyamatok nagy részét képes leírni. Modellünkben jól nyomon követhető, hogy miképp módosítja a lézertér az elektron-atommag csatolt folyamatokat, és többek között számot ad az impulzusmomentum megmaradásról is. Ezen felül — az itt leírt modellt alkalmazva — ismét megvizsgáljuk a Tc^{99m} energetikailag tiltott belső konverziós folyamatának beindítását azzal a különbséggel, hogy most többfotonos folyamatokat is megvizsgálunk — amire az itt közlendő

modell nyújt lehetőséget —, eredményeinket pedig összehasonlítjuk az előző fejezetben kapottakkal. [Kálmán P. és Bükki T. 2002a, b].

4. 2. 1 Az elektron-atommag-lézer csatolt folyamatok modellje

Az intenzív lézerterek hatása az elektron-atommag kölcsönhatáson alapuló folyamatokra az atommag és elektron közti elektromágneses kölcsönhatás módosulására vezethető vissza. Az alábbiakban először ennek a leírásával foglalkozunk. A lézertérrel való kölcsönhatást úgy vesszük figyelembe, hogy a rendszert egy oszcilláló, új rendszerbe transzformáljuk, amit Henneberger-képnek neveznek. Ezek után az elektron-atommag kölcsönhatást a kvantált elektromágneses téren keresztül történő fotoncserével írjuk le a perturbáció számítás második rendjében.

A modellünk egy elektrontól, A darab, az atommagban kötött nukleonból, továbbá a köztük lévő kölcsönhatást leíró kvantált elektromágneses térből áll, ami pedig longitudinális és skaláris fotonokat egyaránt tartalmaz. Az elektron és atommag rendszer leírásához $A+1$ részecskés relativisztikus kvantummechanikát használunk. A lézerteret pedig úgy modellezzük, hogy az elektromágneses tér egyik transzverzális módusába egy koherens állapotot helyezünk. A rendszer teljes Hamilton-

operátora a következőképpen írható: $H = H_0 + H_I$, ahol

$$H_0 = H_R + H_{De} + H_{Dn}, \text{ és}$$

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.1a)$$

$$H_{De} = c \mathbf{p} \boldsymbol{\alpha} + \beta \kappa c^2, \quad (4.2.1b)$$

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.1c)$$

ahol H_R a kvantált elektromágneses tér energia operátora, ω_{kv} a foton körfrekvenciája, amit a \mathbf{k} hullámszámvektor és v polarizációs állapot indexel; a_{kv}^+ és a_{kv} pedig a foton keltő és eltüntető operátorok. Az elektromágneses tér kvantálását Lorentz-mértékben végeztük el, így transzverzális és longitudinális fotonok egyaránt megjelennek a térben. H_{De} a szabad elektron Dirac-energia operátora. \mathbf{p} az elektron impulzusát, κ a nyugalmi tömegét jelöli, c a fénysebesség, $\boldsymbol{\alpha}$ és β pedig a Dirac-mátrixokat jelöli. Hasonlóan H_{Dn} az atommag Dirac-energia operátora. \mathbf{p}_N az N -edik nukleon impulzusa, M_N annak nyugalmi tömege, \mathbf{y}_N pedig a helyvektora; az U potenciál a nukleonok közötti nem elektromágneses kölcsönhatást hivatott kifejezni. A koordináta rendszer origóját az atommag tömegközéppontjához rögzítettük. H_I operátor az $A+1$ részecskét tartalmazó rendszer és az elektromágneses tér kölcsönhatását írja le, és két részre bontható: $H_I = H_{Ie} + H_{In}$, ahol

$$H_{Ie} = e_e \phi_q(\mathbf{x}) - e_e \boldsymbol{\alpha} \mathbf{A}_q(\mathbf{x}), \quad (4.2.2a)$$

Hiba!.

(4.2.2b)

Itt $e_e = -e$ az elektron töltését (e az elemi töltés) és e_N az N-dik nukleon effektív töltését jelöli. \mathbf{A}_q és ϕ_q a kvantált elektromágneses tér vektor és skalárpotenciálja. A rendszer állapotai pedig a H_0 operátor egyes tagjai sajátállapotainak a direkt szorzata. Az elektromágneses tér j-edik módusa koherens állapotban van, ami a külső, lézertérnek feleltethető meg; ez a módus tehát tisztán transzverzális. Az elektromágneses tér állapota tehát:

$$|\psi\rangle = |0, 0, \dots, \lambda_j, 0, \dots, 0\rangle, \quad (4.2.3)$$

ahol λ_j -t a következő sajátérték egyenlet definiálja: $a_j |\lambda_j\rangle = \lambda_j |\lambda_j\rangle$ és j az összesített módus index, amely \mathbf{k} -t és ν -t egyaránt tartalmazza.

Vezessük be most a következő unitér operátort [Cohen-Tannoudji és mtsai., 1992]:

$$T(t) = \exp \left(\lambda_j^* e^{i\omega_j t} a_j - \lambda_j e^{-i\omega_j t} a_j^+ \right), \quad (4.2.4)$$

ahol t az időt jelenti a koordináta rendszerünkben. A $t = 0$ időpillanatban ennek az operátornak a hatása az elektromágneses tér állapotára a következő: $T(0) |\psi\rangle = |0\rangle$, vagyis azt a $|0\rangle$ vákuum állapotba viszi. Transzformáljuk most a rendszerünket (H-t) T-vel. Az új rendszer Hamilton-operátora ekkor:

Hiba!.

(4.2.5)

Felhasználva ezek után a következő definíciós egyenleteket:

$$\hat{H}_{De} = T H_{De} T^+, \quad (4.2.6a)$$

$$\hat{H}_{Dn} = T H_{Dn} T^+, \quad (4.2.6b)$$

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.6c)$$

megmutatható, hogy $\hat{H}_{De} = H_{De}$, $\hat{H}_{Dn} = H_{Dn}$ és $\hat{H}_R = H_R$, tehát $\hat{H}_0 = H_0$. Megjegyezzük, hogy a T operátor kommutál a \mathbf{p} , \mathbf{x} és $\boldsymbol{\alpha}$ operátorokkal: $[T, \mathbf{p}] = [T, \mathbf{x}] = [T, \boldsymbol{\alpha}] = 0$. A kölcsönhatási operátor H_I transzformációs egyenlete ugyanakkor:

$$\hat{H}_I = T H_I T^+ = \hat{H}_{Ie} + \hat{H}_{In} = T H_{Ie} T^+ + T H_{In} T^+,$$

(4.2.6d)

$$\text{és} \quad \hat{H}_{Ie} = e_e \phi_q(\mathbf{x}) - e_e \boldsymbol{\alpha} \mathbf{A}_q(\mathbf{x}) - e_e \boldsymbol{\alpha} \mathbf{A}_{cl}(\lambda_j; \mathbf{x}, t), \quad (4.2.7a)$$

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.7b)$$

ahol például

$$\text{Hiba!} \quad .$$

$$(4.2.8)$$

Az $\mathbf{A}_{cl}(\lambda_j; \mathbf{y}_N, t)$ úgy kapható, ha $\mathbf{A}_{cl}(\mathbf{x})$ -ben az \mathbf{x} változó helyére \mathbf{y}_N -et írunk. L^3 az elektromágneses tér normálási térfogatát jelenti. Mivel mind az atom-, mind pedig a magsugár sokkal kisebb a lézer hullámhosszánál, így dipól közelítést alkalmazhatunk, azaz (4.2.8) helyett használjuk az

$\mathbf{A}_{cl}(0,t) = \boldsymbol{\varepsilon}_j A_0 \cos(\omega_L t)$ összefüggést, ahol bevezettük a lézer körfrekvenciáját (ω_L); $\omega_L = \omega_j$, és az $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ egységvektor a lézer polarizációs irányába mutat. A (4.2.7a) és (4.2.7b) kifejezések azon tagjaiban, melyek a lézertérrel való kölcsönhatást írják le, nemrelativisztikus közelítést használunk. Ezekkel a közelítésekkel a transzformált kölcsönhatási operátoraink a következő alakba írhatók:

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.9a)$$

Hiba!

$$(4.2.9b)$$

Az \mathbf{A}_{cl}^2 tagok az $i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$ egyenlet megoldásánál unitér operátorok segítségével (mint elektronra például Hiba! operátor) kitranszformálhatók, azaz H_1^\wedge -ből eltüntethetők.

Vezessük most be a B unitér operátort a következőképpen:

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.10a)$$

ahol Hiba!. $(4.2.10b)$

Transzformáljuk most a teljes rendszerünket (H) ezzel a B operátorral. A B operátor csak azokon az operátorokon hat, amelyek x koordináta operátort tartalmaznak. A transzformációs egyenletünk:

$$\text{Hiba!}. \quad (4.2.11)$$

Mivel $[B, \mathbf{p}] = 0$ és H_{De} csak \mathbf{p} operátort tartalmaz, így azt kapjuk, hogy $H'_{De} = B H_{De} B^+ = H_{De}$, illetve $H'_R = H_R$. A kölcsönhatást leíró tagok transzformációjánál ugyanakkor a következőt kapjuk:

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.12)$$

Itt az \mathbf{x}_B vektor az \mathbf{x} vektor B -vel való transzformáltját jelenti, és megmutatható [Cohen-Tannoudji és mtsai., 1989], hogy

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.13a)$$

továbbá

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.13b)$$

A rendszer B -vel való transzformációját Henneberger-transzformációnak nevezzük [Henneberger, 1968]. A kétszeres transzformációnk eredménye tehát szavakkal kifejezve a következő: az elektromágneses tér állapotából eltűnt a lézertér (az adott módus vákuum állapotba került), majd a kölcsönhatás H'_{Ie} operátorában megjelent az elektron koordináta mellett egy oszcilláló tag; olyan, mintha a lézer az elektront a lézer frekvenciájával “megrángatná”. B -hez hasonló unitér operátort gyárthatunk a rendszer mindegyik nukleonjára is, amivel H_{In} -et transzformálva kapjuk a H'_{In} kölcsönhatási operátort. Mivel az atommagban kötött nukleonok a lézerteret az elektronok által leárnyékolva “érik” [Gersten és Mittleman, 1982] , továbbá mivel a nukleonok az elektronhoz képes nagy nyugalmi

tömeggel rendelkeznek, így a fenti vibráció mértéke a nukleon koordinátája mellett elhanyagolhatónak tekinthető. Épp ezért a továbbiakban $H'_{In} = H_{In}$ közelítéssel élünk. Összefoglalva tehát az eddigieket: a lézertér hatása az elektron-atommag rendszerben úgy jelentkezik, hogy az elektron és az atommag elektromágneses kölcsönhatását leíró \mathbf{A}_q és ϕ_q (kvantált) vektor- és skalárpotenciálban az $\exp[\pm i (\mathbf{x} + e_c/\kappa \mathbf{Z}) \mathbf{k}]$ kifejezés jelenik meg, tehát a lézer hatása visszavezethető — ahogy azt a fejezet elején már említettük — az elektron-nukleon és így az elektron-atommag közti elektromágneses kölcsönhatás módosítására.

Az itt következőkben az elektron-atommag szórási folyamatot írjuk le a perturbáció számítás legalacsonyabb rendjében, azaz a kölcsönhatás során egy foton cserét veszünk csak figyelembe az atommag és az elektron között. A Henneberger-transzformáció következménye az volt, hogy az elektron-elektromágneses tér kölcsönhatási operátorban $\mathbf{A}_q(\mathbf{x}_B)$ és $\phi_q(\mathbf{x}_B)$ jelentek meg. A szórási folyamat leírása tehát annyiban különbözik a lézertmentes esettől, hogy most az \mathbf{x} koordináta helyett \mathbf{x}_B -t kell behelyettesítenünk a kölcsönhatást leíró foton propagátorba, a kvantumelektrodinamika többi szabálya pedig változatlanul érvényben marad [Schweber, Bethe és Hoffman, 1955]. A szórási folyamat S-mátrix eleme a következő alakban írható fel:

Hiba!, (4.2.14a)

ahol Hiba!. (4.2.14b)

Az itt bevezetett x' az elektron Henneberger-transzformált négyes-koordinátát jelöli: $x' = \{x_0, \mathbf{x}_B\}$, továbbá $y_N = \{y_0, \mathbf{y}_N\}$; q pedig a belső foton vonal négyes-hullámszám vektora. $J_{,\mu}^{21}(x)$ az elektron átmeneti négyes-áramsűrűségét jelenti, $j_{\alpha\beta}^{\mu}(y_N)$ pedig az atommag átmeneti négyes-áramsűrűsége:

$$J_{,\mu}^{21}(x) = e_e \psi_{,\mu}^{-2}(x) \gamma_{\mu} \psi^1(x) e^{i k_{21} x_0}, \quad (4.2.15a)$$

Hiba! (4.2.15b)

A (4.2.15b) -ben szereplő áramsűrűségek pedig:

Hiba!

$$\times d^3y_1 \dots d^3y_{N-1} d^3y_{N+1} \dots d^3y_Z \quad (4.2.16a)$$

az atommag négyes-áramsűrűség protonoktól származó része, míg

Hiba!

$$\times d^3y_{Z+1} \dots d^3y_{N-1} d^3y_{N+1} \dots d^3y_A \quad (4.2.16b)$$

az atommag négyes-áramsűrűség neutronoktól származó része. Az e_p és e_n jelölések az atommagban kötött proton és neutron effektív töltését jelölik [Eisenberg és Greiner, 1970b], Z pedig a magban lévő protonok száma. A fentiekben szereplő ψ^2 és ψ^1 az elektron bispinorokat jelöli a folyamat vég- és kezdeti állapotában. $\psi_{,\beta}^p$, $\psi_{,\alpha}^p$ és $\psi_{,\beta}^n$, $\psi_{,\alpha}^n$ pedig a magban kötött

proton és neutron Slater-determinánsok a folyamat vég- ill. kezdeti állapotában, amelyeket egyrészesecskes bispinorokból alkottunk meg. A fenti felírásban bevezettük még a következő jelöléseket: $k_{21} = (E_2 - E_1)/(\hbar c)$, ahol E_2 és E_1 az elektron energia sajátértéke a folyamat vég- ill. kezdeti állapotában; továbbá $k_{\beta\alpha} = (E_\beta - E_\alpha)/(\hbar c)$, ahol E_β és E_α az atommag sajátenergiái a vég- ill. kezdeti állapotban.

4.2.1.1 Egyfotonos közelítés

Az itt következőkben megvizsgáljuk a (4.2.14)-es egyenletünket gyenge-tér esetén, azaz a lézertér jelenlétét a legalacsonyabb rendű (egy fotonos) közelítésében vesszük csak figyelembe. A (4.2.14.b) foton propagátorban szereplő x' -t tartalmazó exponens a következő alakban írható fel:

$$\text{Hiba! ,} \quad (4.2.17a)$$

$$\text{ahol } \mathbf{Z} = -i\mathbf{Z}_0 (e^{ik_L x_0} - e^{-ik_L x_0}), \quad (4.2.17b)$$

és $\mathbf{Z}_0 = -[A_0/(2c\omega_L)] \boldsymbol{\epsilon}_j$. A (4.2.17a) sorfejtés első tagjából származó járulék a lézermentes eset S-mátrix elemét szolgáltatja. A másik tag pedig a lézer hatásának első rendben figyelembe vett járulékát adja. A továbbiakban ezzel az utóbbi taggal foglalkozunk és kiszámoljuk ennek az S-mátrix elemét.

Először a (4.2.14a) egyenletben elvégezve az x_0 szerinti integrálást:

Hiba! (4.2.18)

kapunk. Az y_0 szerinti integrálás hasonló módon egy Dirac-deltát eredményez: $2\pi\delta(k_{\alpha\beta} + q_0)$. Ezután elvégezhetjük az integrálást q_0 szerint:

Hiba!

Hiba!. (4.2.19)

A q térre elvégzendő integrálásnál először az Ω_q térszög szerinti integrálást elvégezve:

Hiba!, (4.2.20)

ahol $R_N = | \mathbf{x} - \mathbf{y}_N |$. Ezek után már elvégezhetjük a q szerinti integrálást.

Az integrandus a (4.2.19) kifejezésünk nevezője szerint két pólust tartalmaz a komplex síkon a $q = | k_{\beta\alpha} | + i\varepsilon$ és a $q = - | k_{\beta\alpha} | - i\varepsilon$ helyeken. Kontúr integrálási technikát alkalmazva — az integrálás kontúrjait az exponens előjelétől függően felül ill. alul zárva be — végül a következő eredményre jutunk:

$$S_{fi}^{(\pm)} = K_{fi}^{(\pm)} 2\pi \delta(k_{21} + k_{\beta\alpha} \pm k_L) \quad ,$$

(4.2.21a)

ahol

Hiba!. (4.2.21b)

A folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűsége pedig a következőképpen számítható:

Hiba!, (4.2.22)

ahol $s = \pm 1$, és $\omega_{21} = c k_{21}$, $\omega_{\beta\alpha} = ck_{\beta\alpha}$ illetve $\omega_L = ck_L$.

Fontos kiemelnünk, hogy a (4.2.21) eredményünk formailag hasonló az előző fejezetben a Tc^{99m} és Th^{229m} számolásoknál is használt modell alapformulájához [Kálmán és Keszthelyi, 1994]. Egyik lényeges különbség, hogy a Kálmán-Keszthelyi [1994] cikkben az elektron-mag kölcsönhatás egyszerű Coulomb-potenciál ($1/R_N$), míg a fenti formula figyelembe veszi a retardációt is, és így (4.2.21b)-ben a gradiens alatt $\exp(i |k_{\beta\alpha} | R_N)/R_N$ szerepel. Meg kell még jegyeznünk, hogy a Kálmán-Keszthelyi [1994] munkában a gyakran emlegetett alapformula levezetésekor a szerzők a folyamatot segítő sugárzási teret (lézerteret) kvantált sugárzási térként kezelik (a sugárzási tér számsajátállapotban van), ezzel szemben a fenti modellben a lézertér koherens tulajdonságát kihasználtuk. Továbbá (4.2.21) tartalmazza az elektromos-elektromos kölcsönhatási tag mellett a Th^{229m} vizsgálatánál használt [Kálmán és Bükki, 2001a] mágneses-mágneses kölcsönhatást is.

4.2.1.2 Sokfotonos eset

Az itt következőkben kiterjesztjük számolásunkat és figyelembe vesszünk a (4.2.17a) sorfejtésnél magasabb rendű tagokat is, vagyis a folyamatot segítő lézertér nagyobb intenzitásánál fellépő sokfotonos

abszorpció és emisszió jelenségével fogunk foglalkozni. A (4.2.17a) sorfejtés helyett tekintsük a (4.2.14b) foton propagátorban a következő kifejtést:

$$e^{-iqx'} = e^{-iq_0x_0 + iq \cdot x_B} = e^{-iqx} e^{i(e_e/m)q \cdot Z} = e^{-iqx} e^{i(2e_e/m)q \cdot Z_0 \sin(k_L x_0)}. \quad (4.2.23)$$

Majd felhasználva a Jacobi-Anger formulát:

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.24)$$

ahol J_n az n -ed rendű, elsőfajú Bessel-függvény, a következő kifejezésre jutunk:

$$\text{Hiba!}. \quad (4.2.25)$$

Az y_0 és q_0 szerinti integrálást elvégezve:

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.26)$$

$$\text{ahol Hiba!}. \quad (4.2.27)$$

Ezek után elvégezzük az x_0 szerinti integrálást, amivel végül a következő eredményre jutunk:

$$S_{fi}^{(n)} = K_{fi}^{(n)} 2\pi \delta(k_{21} + k_{\beta\alpha} + n k_L), \quad (4.2.33a)$$

ahol

$$\text{Hiba!}. \quad (4.2.33b)$$

Az időegységre jutó átmeneti valószínűség pedig

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.34)$$

szerint kapható.

4.2.1.3 Az átlagos atommag potenciál

Amennyiben a lézer intenzitása I_L eltűnik, úgy $V_n \rightarrow 0$ ($n \neq 0$), mivel $J_n \propto x^n$ -el kis x -ek esetén, és $Z_0 \propto \sqrt{I_L}$. Ugyanakkor fennáll, hogy $\lim_{x \rightarrow 0} J_0(x) = 1$, amivel $I_L \rightarrow 0$ esetén $V_0(k_{\beta\alpha}) = e^{i|k_{\beta\alpha}|R_N} / R_N$ adódik. Így — eltűnő lézer intenzitás esetén — visszkapjuk a jól ismert, a “tisza” atommag-elektron kölcsönhatás esetében kapott időegységre jutó átmeneti valószínűség formuláját [Eisenberg, 1970b; Rose, 1966] (lásd még 2.15).

Itt jegyezzük meg, hogy a (4.2.34)-es formulánk természetesen leírja azokat a folyamatokat is, ahol az atommag állapota a folyamat során nem változik; az atommag jelenléte csupán asszisztál a folyamathoz. Ebben az esetben tehát $|\beta\rangle = |\alpha\rangle$, azaz $k_{\beta\alpha} = 0$. Lézermentes esetben így $V_0(0) = 1 / |\mathbf{x} - \mathbf{y}_N|$. Most felösszegezve az atommag mindegyik nukleonjára, pontszerű atommag közelítésben az elektrosztatikus potenciál

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.35)$$

alakban lesz felírható, ahol bevezettük a V_0^- átlagos (lézermentes) elektrosztatikus potenciált.

Fontos kiemelnünk, hogy eddig a fenti levezetésben sehol nem használtuk ki a H_{De} ill. H_{Dn} sajátfüggvényeinek alakját — az elektron állapota eddig hallgatólagosan szabad állapotnak volt feltételezve, hiszen H_{De} nem tartalmazott semmiféle külső potenciált, így nem tartalmazta az

atommag által létrehozott potenciált sem. Pont a fenti levezetésünk eredménye az, ami megadja, hogy miképp módosítsuk H_{De} operátorunkat: célszerűnek tűnik, hogy a $V, \bar{0}$ átlagos magpotenciált az eredeti H_{De} Hamilton-operátorhoz adjuk. Az így kapott sajátérték egyenletet megoldva jutunk a jól ismert ψ kötött elektron hullámfüggvényekhez. Ezekkel a kötött hullámfüggvényekkel azután — a (4.2.34) kifejezés szerint — kiszámolhatjuk a vizsgált folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségét lézermentes esetben.

Foglalkozzunk most azzal az esettel, amikor a lézertér jelen van ($I_L \neq 0$). Tételezzük fel továbbra is, hogy az atommag csak asszisztál a folyamathoz, azaz $|\beta\rangle = |\alpha\rangle$. Pontszerű atommag közelítést használva ismét, a $j_{,\beta\alpha}^0$ tag az átlagos, lézer intenzitástól függő elektrosztatikus magpotenciált szolgáltatja¹²:

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.36)$$

Lézer jelenlétében tehát ezt az átlagos potenciált “érzi” az elektron. Így az elektron nemrelativisztikus hullámfüggvényeit ebben az esetben a következő Schrödinger-egyenlet szolgáltatja:

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.37)$$

Megmutatható, hogy nagy frekvenciás közelítés esetén, és a legalacsonyabb rendű közelítésben a lézermentes (perturbálatlan) ψ elektron hullámfüggvényt használhatjuk ψ_L helyett a kötött elektron leírására az oszcilláló (Henneberger-transzformált) rendszerben [Gavrila, 1992b]. Ebben az esetben tehát a (4.2.34) egyenlettel, kötött elektronok sokfotonos folyamatainak időegységre jutó átmeneti valószínűségét számíthatjuk ki a kötött, perturbálatlan elektron állapotokkal.

A lézertér abban az esetben képes hatásosan segíteni az elektron-atommag folyamatokat, ha a frekvenciája közel esik a rendszer valamely karakterisztikus frekvenciájához. Épp ezért — magfolyamatokról lévén szó — arra számítunk, hogy az UV, illetve a lágy vagy kemény röntgen tartományba eső koherens sugárforrások jelenlétében a lézer indukált elektron-atommag folyamat rátája szignifikáns lehet. A fenti diszkusszió értelmében a (4.2.34) egyenletünk használata egyszerűsödik, mivel a nagy frekvenciás közelítés ekkor kielégítően teljesül, azaz a perturbálatlan, kötött elektron hullámfüggvényeivel dolgozhatunk. Ezért alkalmas a lézer segített belső konverziós folyamatok leírására az itt közölt modell. Más szavakkal: ha $|\beta\rangle \neq |\alpha\rangle$, $k_{\beta\alpha} < 0$, akkor a (4.2.34) általános egyenletünk — nagy

¹² Ez világossá válik, ha a (4.2.26) és (4.2.27) egyenleteinket tekintjük, amelyek ekkor azonosak a $V(\mathbf{x} + e\mathbf{Z}/\kappa)$ Henneberger-transzformált potenciál kifejtésével, lásd Cohen-Tannoudji és mtsai. [1989] 37. old. b. gyakorlatát.

frekvenciás esetben — megadja a lézer segített elektron-atommag folyamatok széles seregének, így többek közt a belső konverziós folyamatoknak a rátáját.

4.2.2 A Tc^{99m} izomér lézer indukált belső konverziós bomlása több foton abszorpciója esetén

Ebben a részben a sok lézerfotonnal asszisztált elektron-atommag folyamatokat fogjuk megvizsgálni, azaz a (4.2.27)-(4.2.34) összefüggések kifejtésével és analízisével fogunk foglalkozni. Ehhez megvizsgáljuk a Tc^{99m} izomér lézer indukált belső konverziós folyamatát. Az előző fejezetben már tárgyaltuk a Tc^{99m} energetikailag tiltott belső konverziós folyamatát intenzív sugárzási terekben, egy lézerfoton abszorpcióját figyelembevéve. A fentiekben tárgyalt modell segítségével most lehetőségünk nyílik arra, hogy sok lézer foton abszorpciójával létrejövő folyamatokat is megvizsgáljunk. Számolásunk során fény derül arra, hogy a fenti modellben jól nyomon követhető az impulzusmomentum megmaradásának törvénye — modellünk átláthatóvá és kezelhetővé teszi a lehetséges sokfotonos folyamatokat ebből a szempontból. Végül számszerű eredményeinket összevetve az előző fejezet eredményeivel, további, a fenti modell “lélektanát” megvilágító következtetésekre nyílik majd lehetőségünk.

4.2.2.1 Lézerfüggő belső konverziós együttható

Tekintsük a (4.2.27) összefüggésünkkel megadott potenciált:

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.38)$$

ahol az egyszerűség végett bevezettük a $\xi = e_e A_0 / (\kappa c \omega_L)$ mennyiséget, továbbá a magátmenet legyen $\alpha \rightarrow \beta$ irányú. Fejtsük sorba a (4.2.38)-ban található exponenst gömbfüggvények szerint a következőképpen:

Hiba!

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.39)$$

ahol j_ℓ és j_L az elsőfajú, ℓ ill. L -ed rendű szférikus Bessel-függvények, $Y_{\ell m}$ és Y_{LM} pedig a gömbfüggvényeket jelöli. A kalapos vektorok itt az adott irányba mutató egységvektorokat jelentik. Válasszuk meg úgy a koordináta rendszerünket, hogy $\mathbf{q}_z \parallel \boldsymbol{\varepsilon}_j$, azaz a lézertér legyen z irányban polarizált. Fejtsük ki a d^3q mennyiséget: $d^3q = -q^2 dq d\phi_q du$, ahol $du = \cos \theta_q d\theta_q$, és ϕ_q ill. θ_q a \mathbf{q} vektor polárszögeit jelölik. A (4.2.39) gömbfüggvényeit a

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.40)$$

alakban kifejtve (ahol $P_{\ell, m}$ az asszociált, elsőfajú Legendre-polinómot jelöli) (4.2.38)-ban a térszög szerinti integrálást elvégezhetjük, és a ϕ_q szerinti integrál $\delta_{m,M}$ -et eredményez. Így

Hiba!

$$\text{Hiba!} \quad (4.2.41a)$$

adódik, ahol bevezettük a következő függvényeket:

$$\text{Hiba!}, \quad (4.2.41b)$$

Hiba! (4.2.41c)

Hatványsorba fejtvé a $J_n(u) P_{\ell}^m(u) P_L^M(u)$ kifejezést u szerint, a sor k -adik elemére a következő alakot kapjuk:

$$u^{n+2k} (1-u^2)^M u^{\ell+L-2M} F(a_1, b_1; c_1; 1/u^2) F(a_2, b_2; c_2; 1/u^2), \quad (4.2.42)$$

ahol F a Gauss-féle hipergeometrikus függvényt jelöli [Abramowitz és Stegun, 1964 (9.1.10); Gradshteyn és Ryzhik, 1994 (8.812)]. Amennyiben $n + \ell + L$ páros szám, úgy a fenti kifejezés is páros függvény, és ebben az esetben a (4.2.41a) -ban lévő integrálnál **Hiba!**írható. Abban az esetben, ha $n + \ell + L$ páratlan szám viszont **Hiba!** adódik, amiből $W_{fi}=0$ következik. Tehát a továbbiakban csak azon esetekkel kell foglalkoznunk, ahol $n + \ell + L = 2p$. Ezután vizsgáljuk meg a (4.2.41b) kifejezésünk számlálóját, és fejtsük a Bessel- illetve szférikus Bessel-függvényeket hatványsorba q szerint [Abramowitz és Stegun, 1964 (10.1.2)]. A hatványsor k -adik eleme $q^{\ell+L+n+2k}$ alakú. Így, amennyiben $n + \ell + L$ páros, akkor a q szerinti integrálást átírhatjuk: **Hiba!**.

Ez utóbbi eredményünk segítségével már elvégezhetjük a q szerinti integrálást, ui. a $-\infty$ -tól ∞ -ig számítandó integrált a komplex síkon alul vagy fölül bezárva görbementi integrállá alakíthatjuk. Ehhez mindenekelőtt

tegyük fel azt, hogy $\xi + y_N \ll x$, vagyis az elektron lézer okozta oszcillációjának mértéke jóval kisebb az elektronpálya karakterisztikus méreténél, továbbá az atommagot pontszerűnek tekintjük. Ebben az esetben ugyanis a Bessel-függvények nagy argumentumú kifejezését [Abramowitz és Stegun, 1964 (9.2.5)] illetve a szférikus Bessel-függvények nagy argumentumú kifejezését [Abramowitz és Stegun, 1964 (10.1.8)] felhasználhatjuk (4.2.41b) függvényünk nagy argumentumú kifejtéséhez. A három Bessel-függvény kifejtéséből származó három exponenciális függvény közül ekkor a $j_n(qx)$ -ből származó exponens lesz az, amelyik meghatározza, hogy a felső vagy az alsó komplex félsíkon kell bezárni az integrálás kontúrját. Reziduum tétel segítségével — a megjelenő pólusok ugyan azok, amelyek az egyfotonos eset számolásánál is jelentkeztek — az integrál elvégezhető, és a következő eredményre vezet:

Hiba! , (4.2.43)

ahol $h_{n,\ell}^{(1)}(k_{\alpha\beta} x)$ a szférikus, első fajú, n -ed rendű Hankel-függvény. Itt kell megjegyeznünk, hogy amennyiben nincs jelen lézertér — vagyis, ha a fenti kifejezésbe $J_0(0) = 1$, illetve $J_n(0) = 0$ (ha $n \neq 0$) kerül —, akkor a szórási folyamat potenciáljára (ill S -mátrix elemére) a lézermentes esetnek a 2. fejezetben is ismertetett formuláját kapjuk vissza [Rose, 1966].

Az alábbiakban kiszámoljuk a lézerrel segített belső konverziós folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségét, illetve megadjuk a lézertér függő belső konverziós együtthatót. Ehhez feltételezzük, hogy a metastabil magállapot főleg elektromos multipól átmeneten keresztül bomlik (EL átmenet, ahol L a magátmenet multipolaritása). Ezen felül az elektron állapotainak leírására nemrelativisztikus hullámfüggvényeket használunk, és az áram-áram elektron-mag kölcsönhatás járulékát a következőkben elhanyagoljuk. A számítást leegyszerűsíti a következő feltétel: $|\xi_{k_{\alpha\beta}}| \ll 1$, amelyek segítségével a (4.2.43)-ban megjelenő Bessel-függvények $J_n(-\xi_{k_{\alpha\beta}} u) \cong (-\xi_{k_{\alpha\beta}})^n u^n / (2^n n!)$, $j_L(k_{\alpha\beta} y_N) \cong (k_{\alpha\beta} y_N)^L / (2L + 1)!!$ közelítő alakban írhatók fel. Felösszegezve az összes végállapotbeli mágneses kvantumszámra (m_f, M_f), illetve átlagolva az összes kezdeti állapotbeli mágneses kvantumszámra (m_i, M_i) — itt m_i és m_f a elektron kezdeti- és végállapotbeli mágneses kvantumszámait, M_i és M_f pedig az atommag kezdeti- és végállapotbeli mágneses kvantumszámait jelöli — a folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségére a következő kifejezés adódik:

Hiba!

Hiba!

$$\times \begin{pmatrix} \ell_i & \ell & \ell_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 S_{,\ell L}^n |R_{,\ell}^f|^2 \delta(\omega_{21} - \omega_{\alpha\beta} + n\omega_L) \rho(\omega_2) d\omega_2,$$

(4.2.44a)

ahol bevezettük a következő függvényeket:

$$\text{Hiba!} \quad , \quad (4.2.44b)$$

$$\text{Hiba!} \quad . \quad (4.2.44c)$$

A fenti összefüggésben R_i és R_f a nemrelativisztikus elektron hullámfüggvények radiális részét jelölik, ℓ_i és ℓ_f pedig az elektron impulzus momentum kvantumszáma a kezdeti- és végállapotban. Amennyiben az elektron végállapota egy kötött állapot, úgy $\rho(\omega_2)$ mennyiség a végállapot vonalalak függvényét jelöli, amennyiben pedig a végállapot egy szabad elektron állapot, úgy ρ a kijövő elektron állapotsűrűségével azonosítandó; $\omega_2 = E_2/\hbar$.

Elosztva W_{fi} -t a γ bomlás időegységre jutó átmeneti valószínűségével (W_γ), a lézerfüggő belső konverziós együtthatóhoz jutunk. Kötött-kötött átmenet esetén (diszkrét belső konverziós folyamat)

Hiba!

$$(4.2.45)$$

adódik, ahol α_f a finomszerkezeti állandó, $\omega_2' = \omega_1 + \omega_{\alpha\beta} - n\omega_L$ és a vonalak függvény $\rho(\omega_2') = \gamma/(2\pi) [(\omega_{20} - \omega_2') + \gamma^2/4]^{-1}$; γ az elektron végállapot szélességét, $\hbar\omega_{20}$ pedig az eloszlás középértéket jelöli.

Amennyiben a konverzióban résztvevő elektron végállapota szabad állapot, és feltételezzük, hogy $\omega_2 \rightarrow 0$ — azaz küszöb környéki belső konverziós folyamatról van szó —, úgy a (4.2.45) összefüggésünk annyiban változik, hogy benne az $|R_{,\ell}^{fi}|^2 \rho(\omega_2')$ kifejezés helyett $|R_{,\ell}^{\sim fi}|^2 \hbar/(2Ry)$ -t kell írunk. Itt $R_{,\ell}^{\sim fi} =$ **Hiba! Hiba!**egy dimenziótlan mennyiség, $R_{,i}^{\sim}(y)$ a kezdeti (kötött) elektron hullámfüggvény dimenziótlan radiális része; $R_{,i}^{\sim}(y) = a_0^{3/2} R_i(x)$ és $y = x/a_0$. Továbbá Ry a Rydberg-energiát, $Z_{\text{eff},i}^i$ a kezdeti elektronállapotban az elektron által érzett magtöltést, míg a_0 a Bohr-sugarat jelöli. Itt a szabad, küszöb körüli elektron végállapot leírására a 4.1 fejezetben ismertetett, Coulomb-hullámfüggvény közelítését használtuk.

4.2.2.2 Az impulzusmomentum megmaradása a lézer segített belső konverziós folyamatban

A lézer asszisztált belső konverziós folyamat során az impulzusmomentum megmaradást matematikailag az időegységre jutó átmeneti valószínűség kifejezésében megjelenő $3j$ - szimbólum és az $S_{,\ell L}^n$

mennyiség fejezi ki ($S_{,\ell L}^n = S_{,\ell L}^{-n}$). A megjelenő 3j-szimbólum a kezdeti és végállapot közti ℓ multipolaritású potenciál okozta elektron-átmenet háromszög egyenlőtlenségének matematikai alakja. A teljes folyamat szempontjából sokkal lényegesebb információt azonban az $S_{,\ell L}^n$ mennyiség hordozza; ez azt határozza meg, hogy adott multipolaritású (L) magátmenet és $|n|$ számú lézer fotont magábafoglaló folyamat esetében a mag milyen impulzusmomentumú (ℓ) parciális-potenciálokkal hathat az elektronra. Az itt következőkben $S_{,\ell L}^n$ kiértékelésével foglalkozunk. Az $S_{,\ell L}^n$ mennyiséget kiszámoltuk $L = 3$ magátmenet esetére. Számításaink eredményét pedig a 4.4 táblázat tartalmazza.

Az 4.4. táblázatból jól látszik, hogy egy $L = 3$ magátmenet esetén egy $p \rightarrow p$ elektron átmenet ($\ell_i = \ell_f = 1, \ell = 0$) megengedett, amennyiben $|n| = 3$ lézerfoton vesz részt a folyamatban. Továbbá modellünk $\ell + 3 + n = 2p$ megszorítása megengedne például olyan átmenetet, melynél $\ell = 0$ és $|n| = 1$, de — összhangban elvárásainkkal — $S_{,03}^1 = 0$ miatt ez a csatorna tiltott lesz. Hasonló módon tiltottak lesznek az $\ell > 4$ átmenetek kis $|n|$ -ek esetén. Másrészt például $|n| = 1$ esetében $\ell = 2, 4$ multipolaritású

$\ell = 0$	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$	$\ell = 6$	$\ell = 7$
------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------

$n = 0$	0	0	0	7.0	0	0	0	0
$n = 1$	0	0	1.0	0	1.3333	0	0	0
$n = 2$	0	0.16	0	0.9437	0	0.2963	0	0
$n = 3$	0.0229	0	0.3905	0	0.5174	0	0.0693	0
$n = 4$	0	0.1253	0	0.4093	0	0.2266	0	0.0166

4.4. táblázat Az $S_{,\ell L}^n$ mennyiség számított értékei $L = 3$ magátmenet esetén, különböző ℓ elektron átmenetek és a folyamatban emittált/abszorbeált n számú foton esetén; ($S_{,\ell L}^n = S_{,\ell L}^{-n}$).

potenciált képes érezni az elektron. Természetesen $n = 0$ –ra csak az $L = \ell = 3$ csatorna működik. Összefoglalva: az $S_{,\ell 3}^n$ mennyiség minden olyan csatorna esetben nullát ad eredményül, amely folyamatot az impulzusmomentum megmaradás törvénye tilt. Meg kell jegyezzük, hogy a fenti interpretációban hallgatólagosan feltettük, hogy n az emittált/abszorbeált fotonok számának feleltethető meg, továbbá, hogy az egyes fotonok egységnyi impulzusmomentumot hordoznak. ($n < 0$ esetén foton abszorpció, $n > 0$ esetén pedig lézerefoton emissziós folyamatokat ír le a modellünk.)

Hangsúlyozni szeretnénk, hogy az impulzusmomentum megmaradásról a fentiekhez hasonló módon a korábbi modellek egyike sem tudott számot adni. Modellünk ezen karaktere nagy segítségünkre van abban, hogy a többfotonos belső konverziós folyamatok megengedett csatornáinak teljes,

igen összetett rendszerét átlássuk, és azok időegységre jutó átmeneti valószínűségeit a modell keretein belül megbecsülhessük.

4.2.2.3 Számítási eredmények és diszkusszió

A következőkben — a fenti eredmények fényében — ismét megvizsgáljuk a Tc^{99m} lézer segített belső konverziós bomlásának lehetőségét. A 4.1 fejezettel megegyező módon azt fogjuk megvizsgálni, hogy mennyiben lehetséges a Tc^{99m} mag $2p$ elektronhéjáról energetikailag tiltott belső konverziós folyamatot beindítani, amennyiben a szükséges energiát egy külső sugárzási (lézer) térrel visszük be a rendszerbe. (Számolásunkban a Tc^{99m} mag és atomfizikai adatai tekintetében a 4.1 fejezetben leírtakra támaszkodunk, az ott közöltektől való eltérést a megfelelő helyen közöljük.) Most a számolást csak a $2p_{3/2}$ kezdeti elektron állapotra végeztük el, mivel — amint az a 4.1 fejezet eredményeiből kiderült — lényeges különbség nem várható a $2p_{1/2}$ és $2p_{3/2}$ kezdeti állapotokra számolt folyamatok rátái között. A számolást mind kötött-kötött, mind pedig kötött-szabad elektronátmenet esetére elvégeztük.

A számolás során az $R_{,\ell}^{\ell}$ mátrix elem kiszámításához hidrogénszerű kötött állapotok hullámfüggvényének radiális részét használtuk fel. A konverzióban résztvevő elektronnak az atom többi elektronjával való kölcsönhatását az Z_{eff} effektív magtöltés bevezetésével vettük figyelembe

(ez az $E_b = Ry (Z_{\text{eff}} / n_p)^2$ összefüggésből kapható; E_b az adott elektronállapot kötési energiája, n_p pedig az elektronhéj főkvantumszáma.). A számolás során azt találtuk, hogy az $R_{,\ell}^{fi}$ mennyiség azon csatornáknál ad jelentős járulékot, ahol $\ell = \ell_f + \ell_i$ fennáll, a többi esetben $R_{,\ell}^{fi}$ nagyságrendekkel kisebb értékű. A számolás során a végállapot szélességére — amely a belső konverzió által a 2p állapotban létrehozott vakancia reciprok élettartamával egyezik meg — $\hbar\Gamma = 1.91 \text{ eV}$ -ot tételeztünk fel [Krause, 1979 és Krause és Oliver, 1979]. (Megjegyezzük, hogy a 4.1 fejezetben ugyanez a szélesség $6.6 \times 10^{-3} \text{ eV}$ volt, sokszorosan ionizált Tc-ot feltételezve és összhangban Zon és Chernov [1996a] ott diszkutált munkájával.) Számolásunk eredményét *kötött-kötött elektronátmenet* esetén a következő táblázat foglalja össze (4.5. táblázat). A táblázatban feltüntettük az egyes csatornák α belső konverziós együtthatóját, és mindegyik esetben ez alatt, zárójelben, megadtuk azt az $I_{\text{krit}}^{(1)}$ kritikus intenzitást is (W/cm^2 -ben), amelynél $\alpha = 1$ teljesül. Adott ℓ multipolaritás esetén csak a legnagyobb rátájú elektronátmenetet számoltuk ki és tüntettük fel.

$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$	$\ell = 6$
2p \rightarrow 6s	2p \rightarrow 5p	2p \rightarrow 4d	2p \rightarrow 4f	2p \rightarrow 5g	2p \rightarrow 6h

$n = -1$	0	$5.4 \times 10^{-19} \text{ I}$ (1.9×10^{18})	0	$5.8 \times 10^{-17} \text{ I}$ (1.7×10^{16})	0	0
$n = -2$	$4.9 \times 10^{-43} \text{ I}^2$ (1.4×10^{21})	0	$1.9 \times 10^{-38} \text{ I}^2$ (7.2×10^{18})	0	$4.0 \times 10^{-36} \text{ I}^2$ (1.8×10^{18})	0
$n = -3$	0	$1.5 \times 10^{-60} \text{ I}^3$ (8.7×10^{19})	0	$1.7 \times 10^{-58} \text{ I}^3$ (1.8×10^{19})	0	$6.0 \times 10^{-56} \text{ I}^3$ (2.6×10^{18})

4.5. táblázat A lézer indukált belső konverziós folyamat α együtthatói $\text{Tc}^{99\text{m}}$ esetén, különböző *kötött-kötött* elektronátmenetek, ezek multipolaritásai (ℓ) és abszorbeált fotonszám (n) esetén. I a lézer intenzitását jelöli, W/cm^2 -ben kell behelyettesíteni. Az α értékek alatt, zárójelben az $I_{\text{krit.}}^{(1)}$ kritikus intenzitásokat tüntettük fel, amely intenzitásnál $\alpha = 1$ teljesül.

Hasonló módon, *kötött-szabad* elektronátmenet esetén a számolást elvégezve, a küszöb környéki belső konverziós együtthatókra és $I_{\text{krit.}}^{(1)}$ kritikus intenzitás értékekre a legerősebb csatornában a kapott eredményeket a 4.6. táblázat tartalmazza.

	$\ell = 1$	$\ell = 2$	$\ell = 3$	$\ell = 4$	$\ell = 5$	$\ell = 6$
	$2p \rightarrow \ell_f = 2$	$2p \rightarrow \ell_f = 1$	$2p \rightarrow \ell_f = 2$	$2p \rightarrow \ell_f = 3$	$2p \rightarrow \ell_f = 4$	$2p \rightarrow \ell_f = 5$
$n = -1$	0	$8.4 \times 10^{-17} \text{ I}$ (1.1×10^{16})	0	$1.7 \times 10^{-10} \text{ I}$ (6.0×10^9)	0	0
$n = -2$	$1.2 \times 10^{-42} \text{ I}^2$ (9.1×10^{20})	0	$2.9 \times 10^{-34} \text{ I}^2$ (5.9×10^{16})	0	$1.3 \times 10^{-29} \text{ I}^2$ (2.8×10^{14})	0
$n = -3$	0	$2.6 \times 10^{-58} \text{ I}^3$ (1.6×10^{19})	0	$4.7 \times 10^{-52} \text{ I}^3$ (1.3×10^{17})	0	$2.2 \times 10^{-48} \text{ I}^3$ (7.7×10^{15})

4.6. táblázat A lézer indukált belső konverziós folyamat α együtthatói $\text{Tc}^{99\text{m}}$ esetén, különböző *kötött-szabad* elektronátmenetek és ezek multipolaritásai (ℓ) és abszorbeált fotonszám (n) esetén.

A kötött-kötött és kötött-szabad esetek összehasonlításából kitűnik, hogy a kötött-szabad átmenet minden esetben domináns. Jelentős effektus azonban csak $\ell = 4$ és $n = -1$ esetén várható. Itt kell megjegyeznünk, hogy a 4.1 fejezetben közölt számolásnál az $\alpha = 1$ -hez tartozó kritikus intenzitás $I_{\text{krit}}^{(1)}(2p_{3/2}) = 1.5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ volt, ami több mint 4 nagyságrenddel nagyobb, mint az $\ell = 4$ és $n = -1$ esetén kapott $I_{\text{krit}}^{(1)}$ mennyiség.

Ez a különbség onnan származik, hogy a jelen tárgyalásban szereplő modell figyelembe veszi a sugárzási tér retardációját is. Ennek matematikai következménye az, hogy a (4.2.44c) radiális integrálunkban a $h_{,\ell}^{(1)}(k_{\alpha\beta} x)$ Hankel-függvény jelenik meg. A 4.1 fejezetben leírt, a retardációt elhanyagoló Coulomb-moddal számolva, ugyanezen radiális integrálban a Hankel-függvény helyett $1/(k_{\alpha\beta} x)^{-L-2}$ szerepel. Ha a (4.2.44c) kifejezésünket ezzel a helyettesítéssel kiszámoljuk, az $|R_{,\ell}^f|^2$ -re 4 nagyságrenddel kisebb számot kapunk, ami jól egyezik a két számolás végeredményében tapasztalt numerikus különbséggel. Mindez jól rámutat arra a tényre, hogy az itt tárgyalt (és más lézer segített elektron-atommag) folyamatok, bizonyos csatornák esetén jelentősen függhetnek a korábban

elhanyagoltnak tekintett retardációtól¹³. A teljesség kedvéért meg kell még jegyeznünk, hogy a kötött-kötött esetre számolt folyamat $\ell = 4$ és $n = -1$ esetben jó egyezést mutat a 4.1 fejezet diszkrét belső konverzióra számolt eredményével — a 4.1 fejezetben tárgyaltak ennek a csatornának feleltethetők meg —, amennyiben a számolásunkat a 4.1 fejezetben használt $\hbar\Gamma = 6.6 \times 10^{-3}$ eV szélességgel végezzük.

Modellünk csak abban az esetben írja le jól a lézer asszisztált belső konverzió folyamatát, ha a számolás során kirótt feltételek teljesülnek, vagyis: $\xi_{k_{\alpha\beta}} \ll 1$ és $Z_{\text{eff}}^i \xi / (a_0 n_i) \ll 1$ fennáll. Ezen feltételek valójában egy lézer intenzitás korlátot jelentenek. Bevezetjük a 2. kritikus intenzitást, $I_{\text{krit}}^{(2)}$, amit az $\xi_{k_{\alpha\beta}} = 1$ feltétel határoz meg, illetve a 3. kritikus intenzitást, $I_{\text{krit}}^{(3)}$ melyet a $Z_{\text{eff}}^i \xi / (a_0 n_i) = 1$ feltétel definiál. Amennyiben a lézer intenzitása a 2. és a 3. kritikus intenzitás értéke alatt marad, úgy a modellünk — és ezzel együtt a lézer indukált belső konverziós együtthatóra vonatkozó becsléseink — érvényesnek tekinthetők. Az alábbi táblázatban megadjuk ezeket a kritikus intenzitás értékeket különböző fotonszámú folyamatok esetén.

¹³ Mindez nem érinti a $\text{Th}^{229\text{m}}$ bomlásának rátájára adott becslésünket, ahol a retardációt szintén elhanyagoltuk, ugyanis a $\text{Th}^{229\text{m}}$ magátmeneti energiája extrémisan kicsi, így várhatóan a retardáció figyelembevétele nem hoz szignifikáns járulékot.

	$n = -1$	$n = -2$	$n = -3$
$\hbar\omega_L$ [eV]	496	248	165
$I_{\text{krit}}^{(2)}$ [W/cm ²]	1.1×10^{22}	7.1×10^{20}	1.4×10^{20}
$I_{\text{krit}}^{(3)}$ [W/cm ²]	7.9×10^{19}	4.9×10^{18}	9.6×10^{17}
α_{max}	1.3×10^9	3.1×10^6	1.9×10^3

4.7. táblázat A $\text{Tc}^{99\text{m}}$ $2p_{3/2}$ elektronhéjáról történő belső konverzió beindításához szükséges fotonenergiák ($\hbar\omega_L$) különböző számú abszorbeált lézerefoton esetén. $I_{\text{krit}}^{(2)}$ és $I_{\text{krit}}^{(3)}$ a modell kritikus intenzitárait jelöli [W/cm²]; a modell érvényességéhez a lézer intenzitásának ezen értékek alatt kell maradnia. α_{max} a modellben maximálisan elérhető belső konverziós együtthatót jelenti, $\alpha_{\text{max}} = \alpha(I = I_{\text{krit}}^{(3)}/10)$.

A fenti eredményeink azt mutatják, hogy kötött-szabad átmenet esetén jelentős effektusra számíthatunk, amennyiben megfelelően nagy intenzitású lézert használunk. A 4.7 táblázatban feltüntettük a modellünk által megjósolható maximális α értéket is, amelyet $I = I_{\text{krit}}^{(3)} / 10$ értéknél számoltunk ki, mivel $I_{\text{krit}}^{(3)} < I_{\text{krit}}^{(2)}$ minden esetben. α_{max} kiszámításánál csak a legnagyobb járulékot adó csatornát vettük figyelembe (tehát a legmagasabb ℓ -ű folyamatot). Látható továbbá, hogy $n = -1, -2$ esetén α_{max} összemérhetővé válik az $\alpha_{\text{tot}} \cong 1.6 \times 10^7$ teljes belső konverziós együtthatóval [Zon és Chernov, 1996a]. Fontos megemlítenünk, hogy növekvő $|n|$ -ekkel és növekvő ℓ -el $I_{\text{krit}}^{(1)}$ értéke egy ellaposodó függvényt

követve szintén növekszik, míg $I_{\text{krit.}}^{(3)}$ gyorsan csökken. Ez az oka annak, hogy a fenti táblázatokban csak $|n| < 4$ eseteket tüntettük fel — ugyanis nagyobb fotonszámú folyamatok esetén $\alpha_{\text{max}} < 1$ miatt jelentős effektus nem várható, pontosabban az itt taglalt modell keretein belül nem prognosztizálható.

Azon lézerintenzitás értékek, melyek ahhoz szükségesek, hogy α_{max} értékét elérje az indukált belső konverziós együttható, a közeljövőben előreláthatólag már elérhetőek lesznek. Ebből a célból ígéretesnek tűnnek azok a szabadelektron lézerek (FEL), melyek a röntgen tartományban működnek [Cornacchia és mtsai., 1997; Sandra és mtsai., 2000]. A $\text{Tc}^{99\text{m}}$ esetében a következő mérési elgondolás célravezető lehet: A 2p héjról történő belső konverzió után a 2p héjon maradt elektron vakancia betöltődése karakterisztikus röntgen jelet produkál. A belső konverzió lejátszódása után a Tc atommagja gerjesztett állapotban marad, és a $\tau = 0.19\text{s}$ élettartamú nívó egy $E_\gamma = 149.5 \text{ keV}$ -es γ foton kibocsátásával bomlik a Tc^{99} alapállapotába. Jó megoldásnak tűnik épp ezért egy olyan kísérleti elrendezés, ahol a kijövő röntgen jelet és a Tc kaszkád bomlásából származó γ jelet késleltetett koincidenzában mérik. A kísérletek tervezése szempontjából fontos lenne pontosan megadni, hogy a fenti kísérletben milyen indukált α értékekre számíthatunk és mekkorának kell lennie a lágy

röntgen jel frekvenciájának. A Tc atom az alkalmazandó nagy intenzitásoknál azonban sokszorosan ionizálttá válik, ami pedig megváltoztatja az indukált belső konverziós folyamatban résztvevő elektron állapotok kötési energiáit — épp ezért pontos jóslatok nemigen adhatók. Szerencsére a FEL -ek nagy sáv szélességgel és elegendően nagy intenzitással (fényességgel) rendelkeznek, épp ezért a jövőbeli kísérletek szempontjából ideális eszközöknek látszanak.

4.2.3 Kemény-UV lézer által beindított belső konverziós folyamatok

Az itt következőkben néhány kis energia defektussal rendelkező izomér energetikailag tiltott belső konverziós folyamatát fogjuk vizsgálni. Számításainkat a következő izomérekre végeztük el: $\text{Ag}^{107\text{m}}$, $\text{W}^{183\text{m}}$, $\text{U}^{235\text{m}}$, $\text{Nb}^{90\text{m}}$, $\text{Re}^{188\text{m}}$, $\text{Pb}^{205\text{m}}$. Ezen izomérek közös tulajdonsága, hogy bizonyos elektron héjak belső konverziós folyamatba való bekapcsolásához kicsi, 17 ÷ 84 eV energiát kell a lézertérnek bevinni a rendszerbe. Azt találtuk (lásd 4.2.2 fejezetet), hogy a lézer indukált belső konverzió kötött-szabad elektron átmenet, $\ell = L+1$ és $n = -1$ esetén, azaz egyfotonos abszorpció esetén domináns; ekkor a belső konverziós együttható $\alpha = \beta I$ alakban írható, ahol I a lézer intenzitása. Épp ezért a fenti izomérek energetikailag

tiltott belső konverziós folyamatának beindítását ezen domináns csatornák esetében számoltuk csak ki. A számolás eredményeit a 4.8. táblázat rögzíti. A táblázatban az izomér lényeges atomi- és magátmeneti paraméterein kívül feltüntettük azt a maximális intenzitást is (I_{\max}), ahol modellünk az adott esetben kapható kritikus intenzitásokat tekintve ($I_{\text{krit.}}^{(3)}$) még érvényben marad. Azon intenzitás értékek, melyeknél $\alpha \approx 10^{-4} \alpha_{\text{tot}} \div 10^{-2} \alpha_{\text{tot}}$ teljesül, manapság már elérhetőek pl. szabad elektron lézerek segítségével [Cornacchia és mtsai., 1997; Sandra és mtsai., 2000], szinkrotron források [Koch és mtsai, 1987] vagy a kemény-UV tartományban üzemelő 'table top' lézerek segítségével [pl. Schnürer és mtsai, 1999, 2000]. Az indukált belső konverziós folyamat megjelenése ezen izoméreknél is — a Tc^{99m}-nél leírtakhoz hasonlóan — az elektron vakancia betöltődését kísérő röntgen jel detektálásával nyomon követhető.

Isomér	$\hbar\omega_{\alpha\beta}$ [keV]	EL/héj	E_B [keV]	$\hbar\omega_L$ [eV]	β [cm ² /W]	α_{tot}	I_{\max}
Ag ^{105m}	25.47	E3/K	25.514	44	7.6×10^{-14}	3.6×10^4 (a)	1.3×10^{13}
Nb ^{90m}	2.3	E3/L ₂	2.368	68	1.9×10^{-7}	1.1×10^{10} (b)	8×10^{14}
W ^{183m}	1.79	E2/M ₅	1.807	17	1.2×10^{-7}	6.5×10^7 (b)	4×10^{12}
W ^{183m}	0.544	E1/N ₁	0.592	48	1.1×10^{-14}	2240 (b)	8×10^{14}
Re ^{188m}	2.63	E4/M ₂	2.682	52	5.8×10^{-4}	1.1×10^{15} (b)	2.4×10^{14}

Pb ^{205m}	2.4	E2/M ₅	2.484	84	1.2×10 ⁻¹⁰	3.2×10 ⁷ (b)	1.7×10 ¹⁵
U ^{235m}	0.0735	E3/O ₅	0.096	22.5	433	3.7×10 ²⁰ (b)	2.3×10 ¹⁴
U ^{235m}	0.0735	E3/O ₄	0.105	31.5	161	3.7×10 ²⁰ (b)	8×10 ¹⁴

4.8. táblázat Energetikailag tiltott belső konverziós folyamat beindítása különböző izomérek esetén, a domináns csatornára számolva. A belső konverziós együttható $\alpha = \beta$ I szerint kapható. A táblázatban az egyes izomérekhez feltüntettük a magátmenet energiáját ($\hbar\omega_{\alpha\beta}$), az átmenet multipolaritását (EL), a folyamatban résztvevő elektronhéjat (héj) és annak energiáját (E_B), továbbá a folyamat beindításához szükséges fotonenergiát ($\hbar\omega_L$, egyfotonos abszorpcióval számolva). A teljes belső konverziós együttható (α_{tot}) értékei (a) [Rösel, 1978] és (b) [Band és mtsai., 1993] táblázatokból vettük. A legmagasabb, még alkalmazható intenzitás értéket I_{max} jelöli.

A megjelenő röntgen fluoreszcencia eltűnik, ha a folyamatot segítő lézer fotonenergiája kisebb az energiadefektus mértékénél. Ennek segítségével, hangolva a lézer fotonenergiáját, a magátmenet energiája várhatóan nagy pontossággal mérhetővé válik.

Úgy véljük, hogy érdemes lenne elvégezni ilyen vagy ehhez hasonló kísérleteket a közeljövőben, mert annak eredménye mindenképpen hozzájárulna ahhoz, hogy jobban megérthessük a lézer asszisztált elektron-atommag folyamatok összetett természetét.

4.3. A rezonanciák szerepe a lézer indukált belső konverziós folyamatokban

Saját eredményeink első fejezetében már szó volt arról, hogy az elektromágneses tér -atommag-elektron csatolású folyamatok számolásánál

eredményeink olykor számottevően ellentmondásban állnak a téma egyes elméleti kutatóinak számszerű jóslataival.

Karpeshin és mtsai [1994] ill. Tkalya és mtsai [1996a, 1996b] az elmúlt években megvizsgáltak számos olyan egzotikus magot, ahol egy elektron átmenetre hangolt lézer segítségével a magátmenet rátájába beavatkozhatunk. Karpeshin és mtsai. [1996, 1999b] pedig a legalább kétlépcsős — vagyis elektron-atommag és elektron-lézer kölcsönhatást tartalmazó — folyamatok vizsgálata során a folyamatok leírására egy, a Breit-Wigner formulához igen hasonló leírást adnak, amelyet köztudottan az atommag rezonanciák leírására használnak [Blatt és Weisskopf, 1952]. Ezek a dolgozatok azt jósolják, hogy a lézer-atommag-elektron csatolt folyamatokban a rezonancia effektusoknak vezető szerepe lehet, és ennek folyamányaként azt állítják, hogy a lézer segített belső konverziós folyamatok rátája jelentősen megnövekedhet.

Az itt következőkben ezen rezonanciák szerepével kívánunk foglalkozni. Számításaink alapján kiderül, hogy a *vélt rezonanciáknak* a vizsgált lézer-atommag-elektron folyamatokban nincs szerepük, és elméletileg semmiféle hatással nincsenek ezekre a folyamatokra. Az itt közölt eredményeket szintén publikáltuk [Bükki T., Kálmán P. és Bergou J., 2002].

4.3.1. Lehetséges és “vélt” rezonanciák

A lézer asszisztált elektron-atommag folyamatoknál valójában három fajta rezonancia fordulhat elő:

1. Tekintsünk két elektron állapotot — ahol az egyik betöltött, a másik pedig betöltetlen állapot — melyeket egy megfelelően hangolt lézertér összecsatol, aminek következtében a két állapot között az elektron Rabi-oszcillációja lép fel [Knight és Allen , 1983]. Ezután egy belső konverziós folyamat segítségével valamelyik elektron állapotból az elektron szabad állapotba kerül. Amennyiben a lézerrel összecsatolt két elektron állapot közel van egymáshoz — azaz a két állapotról történő belső konverziós folyamatnál a belső konverziós együttható egyformának tekinthető — úgy az elektron rezonancia hatása a belső konverziós folyamat rátájában nem jelentkezik. Tehát az ilyen, a rezonanciát a belső konverzió *kezdeti állapotában* tartalmazó folyamatoknál nem indokolt, hogy a rezonancia jellegnek különösebb szerepet tulajdonítsunk.
2. Legalább másodrendű folyamatok esetén elképzelhető, hogy a hangolt lézertér rezonáns jelleget mutat a folyamat valamely közbenső állapotával. Matematikailag kifejezve ekkor az időegységre jutó átmeneti valószínűség energia nevezőjében pólusok

lépnek fel. Ezek a pólusok a lézer mentes belső konverziós folyamatok számításánál is megjelennek, de mint kiderül, kompenzálják egymást, vagyis a folyamat rátájában végül rezonancia karakter nem jelentkezik [Eisenberg és Greiner, 1970b]. Lézer jelenlétében azonban az abszorbeált fotonok következtében felléphet egy aszimmetria — ahogy azt Karpeshin és munkatársai is vélik — aminek következménye az lehet, hogy a folyamat rátájában is megjelenik a rezonáns jelleg. A 4.2 fejezet számolásában azonban jól végigkövethető a lézer hatása az atommag-elektron csatolt folyamatokra. A számolásból egyértelműen kiderül, hogy — a lézermentes esethez hasonlóan — a számolás során megjelenő pólusok ebben az esetben is kompenzálják egymást, és akárhány foton abszorpciójával vagy emissziójával végbemenő atommag-elektron folyamatot tekintünk is, a folyamat rátájában végül semmiféle rezonancia karakter nem jelentkezik. Tehát *a közbenső állapotoknál* jelentkező rezonancia karakter nem eredményezheti a belső konverziós folyamat rátájának megnövekedését.

3. Tekintsük most azt a folyamatot, amelynél a belső konverzió már végbement, aminek következtében egy elektronhiány keletkezett az egyik elektron héjon. Egy megfelelően hangolt lézertér segítségével elérhető, hogy valamely másik kötött elektron ebbe az üres

elektronállapotba átugorjon, illetve a két elektron állapot között Rabi-oszcillációt végezzen. Ha ezt a folyamatot a belső konverziós folyamattól független folyamatként vizsgáljuk — egymásutáni folyamatokat számolunk — akkor egy ilyen elektron folyamatnak a belső konverzióra nyilvánvalóan semmiféle hatása nincsen. A kvantummechanika szerint azonban tekinthetjük és számíthatjuk a belső konverziós folyamatot és az azt követő Rabi-oszcillációt egyetlen — magasabb rendű — folyamatként. Ez utóbbi esetben az elektron oszcillációja a két állapot között okozhatja a belső konverziós folyamat rátájának megváltozását. Tehát a *végállapotban* jelentkező rezonancia okozhatja a lézer asszisztált folyamat rezonáns jellegét, és hozzájárulhat a belső konverziós folyamat rátájának akár jelentős megváltozásához.

Az alábbiakban ezen utóbbi (3.) esetet fogjuk elméletileg megvizsgálni. Számolásunk általános jellegű, tehát nem specifikáljuk a belső konverziós folyamatot, csupán azt kötjük ki, hogy a belső konverzió során az elektron szabad állapotba kerül, azaz folytonos belső konverziós folyamatot tekintünk. Számolásunk jellegéből azonban következik, hogy az alábbi modell diszkrét belső konverziós folyamatokra is alkalmazható.

Számolásunk bebizonyítja, hogy a *végállapotbeli rezonancia nem okozhatja* a belső konverziós folyamat rátájának növekedését.

4.3.2. A lézer-csatolt végállapotok modellje

A lézerrel segített atommag-elektron folyamatok leírására most tekintsünk egy olyan rendszert, amely két elektront és a velük kölcsönhatásban álló atommagot tartalmazza, továbbá jelen van egy lézertér, amely az elektronok állapotát befolyásolni képes, de nem képes befolyásolni az atommag állapotát. Tegyük fel, hogy kezdetben mindkét elektron kötött, alapállapotban van, az atommag pedig egy gerjesztett, metastabil állapotban. Az atommag legerjesztődésével az egyik kötött elektron szabad állapotba kerül — azaz megtörténik a belső konverzió — az atom pedig ionizált lesz. Az atomi átmenetre hangolt lézertér ezek után a másik elektronnak a két kötött elektronállapot közti oszcillációjához vezethet. A folyamatot a perturbáció számítás második rendjében tudjuk kezelni, az alábbiak szerint.

A perturbálatlan rendszer Hamilton-operátora a következő mátrix alakban írható fel:

$$H_0 = \hbar \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 \end{pmatrix}, \quad (4.3.1)$$

ahol $\omega_1 = E_1/\hbar$, $\omega_2 = E_2/\hbar$ és $\omega_3 = E_3/\hbar$, és E_1 , E_2 és E_3 az elektronrendszer sajátenergiái. Az “1”-es index arra az állapotra utal, amikor mindkét elektron kötött állapotban van, a “2”-es és “3”-as index pedig azon elektronkonfigurációt jelenti, amelynél az egyik elektron szabad állapotban van, míg a másik a két kötött, lézerrel összecsatolt elektronállapot valamelyikében található. Az elektronállapotok bomlásának figyelembevételére bevezetjük a következő komplex energia operátort:

$$i\hbar\Gamma = i\hbar \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_3 \end{pmatrix}, \quad (4.3.2)$$

ahol γ_1 , γ_2 és γ_3 az “1”-es, “2”-es illetve “3”-as elektronkonfigurációk bomlásának rátáját jelentik.

A kötött elektron és a lézertér közti kölcsönhatás energia operátora ebben a mátrix-reprezentációban a következőképpen írható fel:

$$H_1 = -2\hbar\Omega_z \cos(\omega t) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3.3)$$

ahol $\Omega_z = p_z E_z$, és E_z a lézer térerősségének az amplitúdója (a lézer a koordinátarendszer z tengelye irányában polarizált), p_z pedig a $2 \rightarrow 3$ elektronátmenet dipól momentumának z komponense; ω a lézer körfrekvenciája t pedig az időt jelenti a koordinátarendszerben. Az

atommaggal való kölcsönhatás leírására tekintjük ugyanakkor a következő

Hamilton-operátort:

$$H_2 = V e^{-i\omega_\gamma t} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3.4)$$

ahol V az a potenciál, melyet az atommag átmeneti négyes áramai okoznak és amit az elektron “érez”. Ennek a potenciálnak a konkrét alakját nem használjuk fel az alábbi számításokban. $\omega_\gamma = E_\gamma / \hbar$, és E_γ a magátmenet energiáját jelöli — azt az energiát, ami a folyamat első lépésében az egyik elektronnak adódik át. A H_2 operátor aszimmetrikus alakja annak a következménye, hogy a számítások folyamán elhanyagoljuk az atommag újragégerjesztésének folyamatát. Épp ezért a fenti H_2 operátor csak $1 \rightarrow 2$ elektronátmenetet tud indukálni.

Transzformáljuk most a rendszerünket az $U_1 = e^{iH_0 t/\hbar}$ unitér operátorral.

Az így létrejött kölcsönhatási képben a lézertérrel való kölcsönhatást leíró mátrix

$$H_1 = -\hbar\Omega_z (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\omega_{23}t} \\ 0 & e^{i\omega_{32}t} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3.5)$$

lesz. itt $\omega_{23} = \omega_2 - \omega_3$, $\omega_{32} = \omega_3 - \omega_2$. Alkalmazzuk most az ún. forgóhullám közelítést (rotating wave approximation), azaz hanyagoljuk el azokat a tagokat, melyek nagyon gyors oszcillációt írnak le. Ezzel

$$H_1 = -\hbar\Omega_z \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\Delta_0 t} \\ 0 & e^{-i\Delta_0 t} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3.6)$$

adódik, ahol $\Delta_0 = \omega_{23} - \omega$. (és elhanyagoltuk az $\omega_{23} + \omega \gg 1$ –et tartalmazó tagokat.) A fentiekhez hasonlóan az atommag-elektron kölcsönhatást reprezentáló mátrix-operátor ebben a kölcsönhatási képben

$$H_2 = V e^{i\Delta t} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3.7)$$

alakban írható fel, ahol $\Delta = \omega_{12} - \omega_\gamma$, és $\omega_{12} = \omega_1 - \omega_2$.

Ezek után transzformáljuk a rendszerünket ismét egy olyan új kölcsönhatási képbe, melyet H_1 operátorunk határoz meg [Bergou és Bogár, 1991; Bogár és Bergou, 1997]. Ennek a transzformációnak az U_2 unitér operátorát az

$$\mathbf{Hiba!} \quad (4.3.8a)$$

egyenlet szolgáltatja. Amennyiben $\Delta_0 = 0$, azaz a lézertér rezonanciában van a 2 és 3 állapotokkal, úgy a (4.3.8a) egyenlet megoldására az

$$U_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\Omega_z t) & i \sin(\Omega_z t) \\ 0 & i \sin(\Omega_z t) & \cos(\Omega_z t) \end{pmatrix} \quad (4.3.8b)$$

mátrix adódik. Az elektron-atommag kölcsönhatás ebben az új képen pedig

$$\hat{H}_2 = U_2^\dagger H_2 U_2 = V e^{i\Delta t} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \cos(\Omega_z t) & 0 & 0 \\ -i \sin(\Omega_z t) & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.3.9)$$

Hasonlóan kapjuk a transzformált Γ mátrixot:

$$\hat{\Gamma} = U_2^\dagger \Gamma U_2 = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_2 \cos^2(\Omega_z t) + \gamma_3 \sin^2(\Omega_z t) & i(\gamma_2 - \gamma_3) \sin(2\Omega_z t) / 2 \\ 0 & -i(\gamma_2 - \gamma_3) \sin(2\Omega_z t) / 2 & \gamma_2 \sin^2(\Omega_z t) + \gamma_3 \cos^2(\Omega_z t) \end{pmatrix} \quad (4.3.10a)$$

A fenti mátrix diagonálissá válik, amennyiben feltesszük, hogy $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma$:

$$\hat{\Gamma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}. \quad (4.3.10b)$$

Vezessük be a következő időfüggő együtthatókat: $c_1 = \langle \phi | 1 \rangle$, $c_2 = \langle \phi | 2 \rangle$ és $c_3 = \langle \phi | 3 \rangle$, ahol $|1\rangle$, $|2\rangle$ és $|3\rangle$ “1, 2 és 3” állapot ket vektorai, továbbá $\langle \phi |$ pedig a két elektronos rendszer mindenkori bra

állapotát reprezentálja. A duplán transzformált rendszer Schrödinger-egyenlete a következőképp írható fel:

$$\text{Hiba!}, \quad n = 1, 2, 3, \quad (4.3.11)$$

amelyben — a kétszeres transzformációnak köszönhetően — c_2 és c_3 nincs már összezsátolva. A fenti egyenletrendszert kiírva:

$$\text{Hiba!} \quad (4.3.12a)$$

$$\text{Hiba!} \quad (4.3.12b)$$

$$\text{Hiba!}. \quad (4.3.12c)$$

Behelyettesítve (4.3.12a) megoldását, azaz $c_1 = c_1(0) \exp(-\gamma_1 t/2)$ -t a c_2 és c_3 -ra felírt egyenleteinkbe, továbbá feltételezve, hogy $\gamma_1 \ll \gamma^{14}$, a fenti egyenletek kiintegrálhatóak lesznek. A (4.3.12) egyenletek megoldásához tekintsük a következő kezdetiérték feltételeket: $c_2(t = 0) = c_3(t = 0) = 0$ és $c_1(t = 0) = 1$; továbbá legyen $\gamma_1 = 0$. Ezek a kezdeti értékek annak az esetnek feleltethetők meg, amikor a metastabil magállapot létrejötte és a lézertér bekapcsolása azonos idejű eseményeknek tekinthetők. Az időfüggő megoldások ekkor a következők lesznek:

Hiba!

$$\text{Hiba!}, \quad (4.3.13a)$$

Hiba!

Hiba! (4.3.13b)

4.3.3 A lézer asszisztált, rezonáns belső konverzió rátája

A lézer segített belső konverzió valószínűségét úgy kapjuk meg, hogy a $|c_2|^2 + |c_3|^2$ mennyiséget felintegráljuk a teljes állapotterre, azaz

Hiba! (4.3.14)

Itt k a kijövő, szabad elektron hullámszám vektorának nagysága, $k = \sqrt{2mE_2}/\hbar$, és E_2 a kijövő elektron energiája, m pedig az elektron nyugalmi tömege. Ω_k a k tér térszögét jelöli, L^3 a normálási térfogat. Felhasználva a $k dk = (m/\hbar) d\Delta$ összefüggést az integrálást elvégezhetjük a Δ változók szerint. Mivel azonban $|c_2|^2 + |c_3|^2$ járulékot csak $\Delta = 0$ körül ad, ezért a fenti integrálba $k = \sqrt{2m(E_1 + E_\gamma)}/\hbar$ -t helyettesíthetünk (k -t $\Delta = 0$ -nál véve). Továbbá az integrálási határ $-\infty$ -től ∞ -ig kiterjeszthető, mivel a $|c_2|^2 + |c_3|^2$ mennyiség szimmetrikusan eltűnik, ha $|\Delta| \rightarrow \infty$.

Amennyiben $\Omega_z \rightarrow 0$, vagyis nincs lézertér jelen, akkor $|c_3|^2 = 0$ lesz és

Hiba! (4.3.15)

¹⁴ Ezt a közelítést az indokolja, hogy a metastabil magállapot élettartama általában jóval nagyobb, mint valamelyik belső elektronhéjon keltett vakancia élettartama. (Lásd még a

adódik. A teljes állapotterre felintegrálva pedig a következőt kapjuk:

$$\text{Hiba!}, \quad (4.3.16)$$

ahol $K = L^3 / (2\pi)^2 \sqrt{2(mc^2)(E_1 + E_\gamma)/(\hbar^2 c^3)}$; itt c a fénysebességet jelöli. A lézermentes belső konverziós folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűsége pedig $W = N_0 \gamma$ -ként számítható.

Amennyiben a lézer tér jelen van, úgy a következő formulához jutunk:

Hiba!

$$+ e^{-\gamma t} (16\Delta^2 + 4\gamma^2 + 16\Omega_z^2) - 8 e^{-\gamma t/2} (4\Delta^2 + \gamma^2 + 4\Omega_z^2) \cos(\Omega_z t) \cos(\Delta t) - \\ - 64 e^{-\gamma t/2} \Delta \Omega_z \sin(\Omega_z t) \sin(\Delta t)] . \quad (4.3.17)$$

A (4.3.16)-hoz hasonlóan a teljes állapotterre kiintegrálva, azaz Δ -szerint integrálva a fenti kifejezést

Hiba!

$$\text{Hiba!} \quad (4.3.18)$$

adódik. A lézerfüggő, rezonáns folyamat rátáját most is $W = N \gamma$ szerint számíthatjuk.

4.3.4 Konklúzió és egy kísérleti javaslat

Látható, hogy a lézermentes esetben kapott $N_0(t)$ megegyezik a lézer jelenlétében kapott $N(t)$ függvénnyel. Ezek szerint tehát: a *végállapotban* megjelenő rezonancia jelleg nem jelentkezik a belső konverziós folyamat

fejezet végén tárgyalt lehetséges realizációt.)

rátájában. Mi több, — ahogy azt már a fentiekben részleteztük — elméletileg semelyik fajta rezonancia folyamat nem vezethet a lézerrel segített belső konverziós folyamat rátájának megnövekedéséhez.

A következőkben egy kísérleti javaslatot teszünk az itt leírt szituáció ellenőrzésére. Tekintsük a Zr^{90m} izomért, melynek élettartama $\tau = 61\text{ns}$. Ez az élettartam lényegesen nagyobb, mint a Zr atom egyik belső héján (mondjuk a K héjon) keltett vakancia élettartama [Krause, 1979; Krause és Oliver, 1979]. Ez a metastabil állapot a Zr^{90} egy másik metastabil állapotából jön létre, amely sokkal hosszabb élettartamú (809ms), és ami β - bomláson keresztül populálódik a Nb^{90} -ből [Firestone, 1996]. Amikor a 61ns élettartamú metastabil állapot létrejön, a mag egy 425.5 keV energiájú γ fotont bocsát ki (egy közbenső magállapoton keresztül, aminek élettartama igen rövid, 93fs). Ez az emittált γ foton jelzi számunkra a mag létrejöttét és indítja el egyben a mérő berendezésünket. Ezután a metastabil állapot egy E0 átmenettel elbomlik, tisztán belső konverziós folyamaton keresztül. A kijövő konverziós elektront szintén regisztráljuk. Mérve a kijövő elektronok időbeli spektrumát, számításaink szerint az $N_0(t)$ illetve $N(t)$ függvényeket kapjuk aszerint, hogy a folyamat során a lézertér ki, vagy pedig be volt kapcsolva.

Mindaddig, amíg a fent vázolt, vagy hasonló kísérletek kielégítő módon nem bizonyítják az ellenkezőjét, azt kell hogy mondjuk — szemben Karpeshin és mtsai. elméleti eredményeivel — , hogy a lézer asszisztált belső konverziós folyamatok rátájában jósolható növekmény nem tulajdonítható a folyamatban előforduló rezonancia karakternek.

5. A dolgozat tézisei

A munka során elért új eredményeket az alábbi tézispontokban foglalom össze:

- 1) Megvizsgáltam Tc^{99m} -ben az energetikailag tiltott belső konverziós folyamat beindításának lehetőségét. A Tc^{99m} belső konverzió szempontjából tiltott $2p$ héjainak a bekapcsolását Zon és Chernov [1996a] már korábban vizsgálták. A bomlási csatorna bekapcsolása ~ 0.5 ill. 0.62 keV fotonenergiás röntgen forrást igényel (egyfotonos folyamat esetén). Számításom szerint (amelyet mind kötött-szabad ill. kötött-kötött folyamatokra elvégeztem) a metastabil mag élettartamának felezéséhez a Zon és Chernov által prognosztizált intenzitás értéknél 14 nagyságrenddel nagyobb intenzitás szükséges.
- 2) Elméleti úton megvizsgáltam a Th^{229m} egzotikusnak számító, igen alacsony ($E_\gamma = 3.5 \pm 1$ eV) mag-gerjesztési energiával rendelkező magállapotának elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlását. Az elmúlt években jelentős cikksorozatot váltott ki Irwin és Kim [1997] kísérleti munkája, akik Th^{229m} elektron-híd folyamaton keresztül történő bomlását vélték megfigyelni. A témához elméleti szakemberek is hozzászóltak [Karpeshin és mtsai, 1999a]. Kimutattam, hogy a

munkájukban közölt elméleti jóslatok hibásak. Egy ismertett modell kiterjesztésével [Kálmán és Keszthelyi, 1994] kiszámoltam a $\text{Th}^{229\text{m}}$ elektron-hídon keresztül történő bomlásának a rátáját. Számszerű eredményeim fényében újra értelmeztem a kísérleti eredményeket, mely szerint a kísérletek során a $\text{Th}^{229\text{m}}$ egzotikus magállapotát valószínűleg nem sikerült megfigyelni. Javaslatot tettem egy olyan kísérleti elrendezésre, amely segítségével a $\text{Th}^{229\text{m}}$ egzotikus magállapota várhatóan eredményesebben megfigyelhető.

- 3) Kidolgoztam egy általános modellt az elektron-atommag-lézer csatolt folyamatok leírására. A dolgozatban részletezett modellben — szemben egyéb, az elektron-atommag-sugárzási tér kölcsönhatást kezelő modellekkel — jobban nyomon követhető az a mechanizmus, ahogy a lézertér módosítja az elektron-atommag folyamatot. A kidolgozott modell gyenge terek esetén — azaz a lézertérrel való kölcsönhatást a legalacsonyabb rendű közelítéssel figyelembe véve — egy előző modell [Kálmán és Keszthelyi, 1994] alapformulájával formailag teljesen azonos kifejezést ad, azzal a különbséggel, hogy az itt levezetett összefüggés figyelembe veszi a sugárzási tér retardációját is és inherens módon számot ad a mágneses-mágneses kölcsönhatásról. A kidolgozott modell ugyanakkor kezelni képes sok foton abszorpciójával illetve

emissziójával lejátszódó folyamatokat is, melynek formalizmusát dolgozatomban szintén közöltem.

- 4) Modellem segítségével újra megvizsgáltam a Tc^{99m} energetikailag tiltott belső konverziós folyamatát, sok foton abszorpcióját is figyelembe véve. Modellem szépsége, hogy képes számot adni az impulzusmomentum megmaradásról a vizsgált elektron-atommag-lézer kombinált folyamatokban. Modellemnek ez a karaktere lehetőséget nyújt arra, hogy rendszerezhessük és átláthassuk a lehetséges bomlási csatornákat.
- 5) A Tc^{99m} -re elvégzett számolás alapján — melyet mind kötött-szabad, mind pedig kötött-kötött folyamatokra elvégeztem — eredményeimet összevetve a dolgozat előző fejezetében ismertetett eredményekkel, a következő mondható: bizonyos bomlási csatornák esetén (folytonos esetben) a retardáció jelentős szerepet játszik a folyamatra számolt bomlási rátában. A prognosztizálható bomlás felgyorsulás pedig a közeljövőben hozzáférhető, lágy röntgen tartományban üzemelő szabad elektron lézerek segítségével akár jelentős is lehet, a természetes belső konverziós bomlás rátáját elérő effektusra is számíthatunk.

6) Megvizsgáltam, hogy a lézer segített elektron-atommag folyamatokban milyen szerepet játszhatnak a rezonancia folyamatok. Megvizsgáltam a kezdeti, közbenső és a folyamat végállapotánál szóba jöhető rezonanciák hatását a folyamat rátájára. Kimutattam, hogy a kezdeti és közbenső állapotot magában foglaló rezonanciák esetén a folyamat rátájában nem jelentkezik a rezonancia jelleg. Részletesen foglalkoztam a végállapotnál jelentkező rezonancia hatásával, és általánosan beláttam, hogy a folyamat időegységre jutó átmeneti valószínűségében nem öröklődik a rezonancia karakter. Végül arra a konklúzióra jutottam, hogy amennyiben a lézer indukált belső konverziós folyamat rátája a lézer hatására megnövekszik, az elsődlegesen nem tulajdonítható a folyamatban jelenlevő rezonanciák hatásának.

6. Irodalom

Abramowitz M. és Stegun I.A. (szerkesztők), 1964, *Handbook of Mathematical Functions* (U.S. Government Printing Office, Washington).

Alder K., Bohr A., Huus T., Mottelson B. és Winter, 1956, A., *Rev. Mod. Phys.* **28** No. 4., 432.

Baldwin G. C. és Wender S. A., 1982, *Phys. Rev. Lett.* **48** 1461.

Band I. M. és Trzhaskovskaya M. B., 1978a, Tables of Gamma-Ray Internal conversion Coefficients for the *K*-, *L*-, and *M*-shells, $10 \leq Z \leq 104$, *Leningrad Nucl. Phys. Inst. Report*.

Band I. M., Trzhaskovskaya M. B. és Listengarten M. A., 1978b, Internal Conversion Coefficients for *E5* and *M5* Nuclear transitions, $30 \leq Z \leq 104$, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **21**, 1.

Band I. M. és Trzhaskovskaya M. B., 1993, Internal Conversion Coefficients for Low-energy Nuclear Transitions, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **55** 43.

Becker W, Schlicher R. R., és Scully M. O., 1984a, *Phys. Lett. A* **106** 441.

Becker W, Schlicher R. R., és Scully M. O., 1984b, *Nucl. Phys. A* **426** 125.

Bergou J. és Bogár P., 1991, *Phys. Rev. A* **43** 4889.

Bergou J., Varró S. és Fedorov M. V., 1981, *J. Phys. A* **14** 2305.

Bethe H. A. és Salpeter E. E., 1957, *Quantum Mechanics of One- and Two-electron Atoms* (Springer, Berlin).

Blatt J. M. és Weisskopf V. F., 1952, *Theoretical Nuclear Physics*, (Wiley, New York).

Bogár P. és Bergou J., 1997, *Phys. Rev. A* **56** 1012.

- Bükki T. és Kálmán P., 1998, *Phys. Rev. C* **57** 3480.
- Bükki T., Kálmán P. és Bergou J., 2002, *Phys. Rev. A* . **65** 045402.
- Cavaliere P., Ferrante G. és Leone C., 1980, *J. Phys. B* **13** 4495.
- Cohen-Tannoudji C. és mtsai, 1989, *Photons and Atoms* (Wiley, New York).
- Cohen-Tannoudji C. és mtsai, 1992, *Atom-Photon Interactions* (Wiley, New York).
- Cornacchia M. és mtsai, 1997, *Performance and Design Concepts of a free Electron Laser Operating in the X-Ray Region*, Photonic West '97 Conference (San Jose, California).
- Eisenberg J. M. és Greiner W., 1970a, *Nuclear Theory*, Vol. 1. (North-Holland, Amsterdam).
- Eisenberg J. M. és Greiner W., 1970b, Excitation Mechanisms of the Nucleus, in *Nuclear Theory*, Vol. 2. (North-Holland, Amsterdam).
- Erdélyi A., 1953, (editor) *Higher Transcendental Functions*, Vol. 2. (Mc Graw-Hill, New York).
- Firestone R. B. and Shirley V. S. S., 1996, *Tables of Isotopes*, (8th edition, Wiley, New York).
- Gavrila M. (szerkesztő), 1992a, *Atoms in Intense Laser Fields* (Academic Press, Boston).
- Gavrila M., 1992b, *Atomic Structure and Decays in High-Frequency Fields*, [Gavrila, 1992a] 435. old.
- Gersten J.I. és Mittleman M.H., 1982, *Phys. Rev. Lett.* **48** 651.
- Gradshteyn I.S. és Ryzhik I.M., 1994, *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York)
- Helmer R.G. és Reich C.W., 1994, *Phys. Rev. C* **49** 1845.

Henneberger, W. C., *Phys. Rev. Lett.* **21** 838.

Herman F. és Skillman S., 1963, *Atomic Structure Calculations*, (Prentice-Hall, Engwood Cliffs, N.J.).

Irwin G.M. és Kim K.H., 1997, *Phys. Rev. Lett.* **79** 990.

Karpeshin F.F., Band I.M., Trzhaskowskaya M.B. és Zon B.A., 1992, *Phys. Lett. B* **282** 267.

Karpeshin F.F., Listengarten M. A., Zon B. A., Band I.M., Trzhaskowskaya M.B., 1992, *Can. J. Phys.* **70** 623.

Karpeshin F.F. és mtsai., 1994, *Bull. Rus. Acad. Sci. Phys.* **58** 41.

Karpeshin F.F. és mtsai., 1996, *Phys. Lett. B.* **372** 1.

Karpeshin F.F. és mtsai., 1999a, *Phys. Rev. Lett.* **83** 1072.

Karpeshin F.F. és mtsai., 1999b, *Nuclear Phys. A* **654** 579.

Kálmán P., 1988a, *Phys. Rev. C* **37** 2676.

Kálmán P., 1988b, *Phys. Rev. A* **38** 5258.

Kálmán P., 1989a, *Phys. Rev. C* **39** 2452.

Kálmán P., 1989b, *Phys. Rev. A* **39** 3200.

Kálmán P., 1991, *Phys. Rev. A* **43** 2603.

Kálmán P. és Bergou J., 1986, *Phys. Rev. C* **34** (1986) 1024.

Kálmán P. és Bükki T., 2001a, *Phys. Rev. C* **63** 027601+.

Kálmán P. és Bükki T., 2001b, *Elektromágneses sugárzás és anyag kölcsönhatása*, Bevezetés a Modern Optikába sorozat, 5. Kötet (szerk.: Richter Péter), (Budapest, Műegyetemi Kiadó).

Kálmán P. és Bükki T., 2002a, *Phys. Rev. A.* **65** 053414.

- Kálmán P. és Bükki T., 2002b *Can. J. Phys.* **80** 1115.
- Kálmán P. és Keszthelyi T., 1991, *Phys. Rev. A* **44** 4761.
- Kálmán P. és Keszthelyi T., 1994, *Phys. Rev. C* **49** 324.
- Kálmán P. és Lovas I., 1987, *J. Phys. G.* **13** 495.
- Kekez D., Ljubicic A., Pisk K. és Logan B. A., 1985, *Phys. Rev. Lett.* **55** 1366.
- Knight P.L. és Allen L., 1983, *Concepts of Quantum Optics* (Pergamon Press, Oxford).
- Koch E. E. (editor) és mtsai., 1983, *Handbook of Synchrotron radiation Vol. 2.*, (North-Holland, Amsterdam).
- Krause M. O., 1979, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 307.
- Krause M.O. és Oliver J.H., 1979, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 329.
- Landau L. D. és Lifsic E. M., 1965, Vol. 3. *Quantum Mechanics*, (2nd edition, Pergamon).
- Matinyan S., 1998, *Phys. Rep.* **298** 199.
- O'Connell R. F. és Carroll C. O., 1965, *Phys. Rev. B* **138** 1042.
- Pauli H. C., Alder K., Steffen R.M., 1975, *The Theory of Internal Conversion* (in *The Electromagnetic Interaction in Nuclear Spectroscopy*, ed. by Hamilton W. D.).
- Reich C.W. és Helmer R.G., 1990, *Phys. Rev. Lett.* **64** 271.
- Richardson D.S. és mtsai, 1998, *Phys. Rev. Lett.* **80** 3206.
- Rose M. E., 1958, *Internal Conversion Coefficients* (North-Holland, Amsterdam).

Rose M.E., 1966, *Internal Conversion Theory, az Internal Conversion Processes* című könyvből, szerkesztő: Hamilton, J.H. (Academic Press, New York).

Rösel, F., Fries H. M., Alder K. és Pauli H. C., 1978, Tables of Internal Conversion Coefficients for All Atomic Shells, *Atomic Data and Nuclear Data Tablas* **21** No.2-3 91., No. 4-5 291.

Sandra G.B. és mtsai., 2000, *High-Gain Free-Electron Lasers and Harmonic Generation*, Proc. 19th ICFA, Adv. Beam Dyn. Wsh. on Future Light Sources (Arcidosso, Italy).

Schweber S.S., Bethe H.A. és Hoffman F. de, 1955, *Mesons and Fields*, Vol I. (Row & Peterson, Illinois).

Shaw R.W. és mtsai., 1999, *Phys. Rev. Lett.* **82** 1109.

Schnürer M. és mtsai., 1999, *Phys. Rev. Lett.* **83** 722; 2000, *Phys. Rev. Lett.* **85** 3392.

Sobelman I. I., 1979, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, (Springer Series in Chemical Physics, Springer, New York).

Tkalya E.V. és mtsai., 1996a *Phys. Atomic Nuclei* **59** 779.

Tkalya E.V. és mtsai., 1996b *Phys. Scr.* **53** 296.

Utter S.B. és mtsai, 1999, *Phys. Rev. Lett.* **82** 505.

Young J.P. és mtsai., 1999, *Inorg. Chem.* **38** 5192.

Zon B. A. és Karpeshin F. F., 1990, *Sov. Phys. JETP* **70** (2) 224.

Zon B. A. és Chernov V. E., 1996a, *Phys. Lett. B* **383** 367.

Zon B. és Chernov V. E., 1996b, *Izv. RAN (Ser. Phys.)* **60** 205.

7. Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani a Kísérleti Fizika Tanszék mindazon dolgozóinak, akik munkámat közvetve vagy közvetlenül elősegítették.

Szeretném megköszönni témavezetőmnek, Dr. Kálmán Péternek, hogy szeretettel tanított és nevelt, és hogy nem csak fizikára tanított, hanem arra is, amiről a fizika szól: a Világról és benne magunkról, és a viszonyról, ami a Világhoz fűz minket. Örülök, hogy olyan emberrel dolgozhattam együtt az évek során, aki az Embert fontosabbnak tartja, mint a tudományt — mert tudós, aki a törvények bonyolult rendszerét nem csak érti, hanem látja is a lényegét.

Köszönöm szüleimnek, hogy munkájukkal és szerető gondoskodásukkal lehetővé tették számomra, hogy tanulhassak és azzal foglalkozhassam, amivel szeretnék. Köszönöm nekik, hogy annyira szerettek, hogy semmit nem kényszerítettek rám; ha olykor összehúzott szemöldökkel is, de hagyták, hogy magam találjam meg az utam, amelyet járnom kell.

S végül, de nem utolsó sorban, köszönöm drága páromnak, hogy fogja a kezem. Jó, hogy együtt, egymást segítve küzdhetünk, fejlődhetünk — hogy jobb emberré válhassunk.

TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS	2
2. LÉZERMENTES BELSŐ KONVERZIÓS ÉS ELEKTRON-HÍD FOLYAMATOK	6
2.1 A metastabil magállapot bomlása: γ -bomlás és belső konverzió	6
2.2 Belső konverzió a Coulomb-modellben	8
2.3 A belső konverziós folyamat általános elmélete	13
2.4 Az elektron-híd folyamat	19
3. BELSŐ KONVERZIÓ ÉS ELEKTRON-HÍD FOLYAMAT LÉZERTÉR JELENLÉTÉBEN	21
3.1 Lézerrel segített belső konverzió a Volkov és a Coulomb-Volkov modellben	21
3.2 Kötött-kötött, lézer indukált belső konverziós folyamatok	32
3.3 Lézer indukált, kötött állapotokon keresztül történő elektron-híd folyamatok	37
4. SAJÁT EREDMÉNYEK	41
4.1 A Tc^{99m} lézer indukált belső konverziós és a Th^{229m} elektron-híd folyamatának vizsgálata	41
4.1.1 Energetikailag tiltott belső konverzió beindítása Tc^{99m} -ben	43
4.1.1.1 A folytonos és diszkrét belső konverzió modellje	45
4.1.1.2 A telítés jelensége	50
4.1.1.3 Számolási eredmények és diszkusszió	52
4.1.2 Th^{229m} bomlása: elektron-híd folyamat vagy direkt γ bomlás?	59
4.1.2.1 Kísérleti és elméleti előzmények	60

4.1.2.2	Az elektron-híd folyamat modellje _____	64
4.1.2.3	Számítási eredmények _____	67
4.1.2.4	A kísérleti eredmények újraértékelése és egy kísérleti javaslat 71	
4. 2	Elektron-atommag kölcsönhatás lézerterekben _____	76
4. 2. 1	Az elektron-atommag-lézer csatolt folyamatok modellje _____	77
4.2.1.1	Egyfotonos közelítés _____	85
4.2.1.2	Sokfotonos eset _____	87
4.2.1.3	Az átlagos atommag potenciál _____	89
4.2.2	A Tc^{99m} izomér lézer indukált belső konverziós bomlása több foton abszorpciója esetén _____	92
4.2.2.1	Lézerfüggő belső konverziós együttható _____	93
4.2.2.2	Az impulzusmomentum megmaradása a lézer segített belső konverziós folyamatban _____	98
4.2.2.3	Számítási eredmények és diszkusszió _____	101
4.2.3	Kemény-UV lézer által beindított belső konverziós folyamatok	108
4.3.	A rezonanciák szerepe a lézer indukált belső konverziós folyamatokban _____	110
4.3.1.	Lehetséges és “vélt” rezonanciák _____	112
4.3.2.	A lézer-csatolt végállapotok modellje _____	115
4.3.3	A lézer asszisztált, rezonáns belső konverzió rátája _____	121
4.3.4	Konklúzió és egy kísérleti javaslat _____	122
5.	A DOLGOZAT TÉZISEI _____	125
6.	IRODALOM _____	129
7.	KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS _____	134