

PHD TÉZISEK

VARGA ZSUZSANNA
JATE ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

I. TUDOMÁNYOS ELŐZMÉNYEK

A többelektronos rendszerek kvantummechanikai tárgyalásánál nagy jelentőségük van az ún. egy-elektron közelítéseknek, mert viszonylag kis erőfeszítéssel elég pontos eredményeket szolgáltatnak, és mert a magasabb rendű közelítésekhez kiindulásul szolgálnak.

Magyarországon GOMBÁS PÁL és iskolája ért el nemzetközileg kiemelkedő eredményeket az atomok statisztikus elméletében, majd a molekulák és kondenzált anyagok elméletében. GÁSPÁR REZSŐ 1954-ben bevezette a róla elnevezett lokális kicserélődési potenciált, amely a Slater-féle kicserélődési potenciáltól egy lényeges szorzótényezőben különbözik, és amelyet mintegy tíz évvel később KOHN és SHAM „újra fölfedezett”.

1964-ben HOHENBERG és KOHN bebizonyította, hogy a többelektronos rendszerek alapállapotú energiája az elektronsűrűség egyértelmű funkcionáljának minimumaként származtatható. Ezt követően számos, sikerrel használható közelítést dolgoztak ki a kicserélődési és korrelációs energia lokális közelítéséhez. Ennek egyik legkézenfekvőbb változata a Slater-Gáspár-Kohn-Sham féle $X\alpha$ potenciál.

A számítástechnika gyors fejlődése lehetővé tette, hogy a 70-es évektől kezdve az atomok, molekulák, klaszterek elektronszerkezetét a kidolgozott elméleti módszerek alapján kvantitatíve helyesen meg lehessen határozni.



Bekapcsolódva a sűrűségfukcionál, illetve $X\alpha$ -módszeres kutatásokba, munkám célja volt:

- A) A többszórásos szórt hullám módszeren alapuló programrendszer kifejlesztése, amelyekkel önkonzisztens számolások végezhetők atomokra, molekulákra és klaszterekre.
- B) A programrendszer alkalmazása törzsnívó eltolódás meghatározására klaszterekben.
- C) A többszórásos módszer azon változata és a megfelelő programrendszer, amelyekkel a szórt elektron folytonos energiájú állapotai határozhatók meg (az ún. CMSM módszer).
 - A kicserélődési-korrelációs potenciál különböző közelítéseinek vizsgálata, mind a törzsnívó eltolódás, mind a rugalmas elektronszórás esetében.
 - A szórásszámításoknál a polarizáció figyelembe vétele és szerepe, ami szintén a korrelációval kapcsolatos.

II. MÓDSZEREK

A. A TÖBBSZÓRÁSOS VAGY SZÓRT HULLÁM MÓDSZER KÖTÖTT ÁLLAPOTOKRA. AZ $X\alpha$ -MÓDSZER [1]

A többszórásos módszer a szilárdtestek sávmélettében alkalmazott Green-függvényes vagy KKR (KORRINGA, KOHN, ROSTOCKER) módszeren alapul [D10, D11]¹, amelyet elektronszerkezetek meghatározására SLATER javasolt [D3], majd JOHNSON és munkatársai [D4-7] fejlesztettek ki.

1. A KOHN-SHAM-EGYENLETEK, A KICSERÉLŐDÉSI-KORRELÁCIÓS POTENCIÁL KÖZELÍTÉSE

Tekintsünk egy N elektronból álló rendszert alapállapotban, legyen $v(\mathbf{r})$ a külső tér potenciálja. A magokat nyugalomban lévőknek tekintjük, $v(\mathbf{r})$ esetünkben most az összes mag pozitív töltésétől származó egyelektron potenciál az \mathbf{r} helyen. A rendszer kvantummechanikai tulajdonságai a Ψ hullámfüggvénnyel írhatók le, alapállapotban szokásos módon az $E[\Psi]$ energiefunkcionál minimalizálása vezet célhoz.

A Hohenberg-Kohn-tétel szerint egyetlen háromváltozós függvény, a $\rho(\mathbf{r})$ elektronsűrűség segítségével az alapállapot valamennyi tulajdonsága

¹ A [D11], ... jelölés az [1] doktori értekezésben szereplő irodalomjegyzékre utal.

számolható: $\rho(\mathbf{r})$ egy additív állandó erejéig egyértelműen meghatározza $v(\mathbf{r})$ -t és így a H Hamilton-oprátort is.

A Hohenberg-Kohn féle variációs elv a következőképpen írható:

$$F[\rho(\mathbf{r})] \equiv \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle,$$

$$E_v[\rho'(\mathbf{r})] \equiv \int v(\mathbf{r})\rho'(\mathbf{r})d\mathbf{r} + F[\rho'(\mathbf{r})],$$

$$E_0 = \min_{\rho'} E[\rho(\mathbf{r})]. \quad (\text{A1})$$

Így adott $v(\mathbf{r})$ -nél $E[\rho(\mathbf{r})]$ -t minimalizáljuk a $\rho(\mathbf{r})$ alapállapotú sűrűséggel, E_0 az alapállapotú energia. Ezt a variációs elvet egy általánosított Hartree-egyenlet levezetésére lehet felhasználni (a variálást nem $\rho(\mathbf{r})$, hanem az $u_i(\mathbf{r})$ egyrészecske függvények szerint kell elvégezni), amelyet Kohn-Sham-egyenletnek neveznek és tartalmilag egzakt (önkonzisztens) egyrészecske-egyenlet.

Bontsuk az $F[\rho(\mathbf{r})]$ funkcionált három részre (atomi egységekben):

$$F[\rho(\mathbf{r})] = T_0[\rho(\mathbf{r})] + 2 \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + E_{xc}[\rho(\mathbf{r})].$$

Az első tag a $\rho(\mathbf{r})$ sűrűségű, $v(\mathbf{r})$ potenciáltérben mozgó, nem-kölcsönható elektronok kinetikus energiája. A második tag az elektron-elektron Coulomb-kölcsönhatás, a harmadik tag a maradék (minden más kölcsönhatás), amelyet kicserélődési-korrelációs energiának neveznek.

A Kohn-Sham-egyenlet a következő lesz:

$$[-\nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r})] u_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i u_i(\mathbf{r}), \quad (\text{A2})$$

és $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |u_i(\mathbf{r})|^2$ az egzakt alapállapotú sűrűség. A Kohn-Sham-egyenletek segítségével a kölcsönható rendszert, mint független egyrészesecske rendszert tekinthetjük; az egyes elektronok a $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ effektív potenciáltérben mozognak:

$$v_{\text{eff}} = v(\mathbf{r}) + 2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + v_{\text{xc}}(\mathbf{r}).$$

A $v_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\partial E_{\text{xc}}[\rho]}{\partial \rho(\mathbf{r})}$ kicserélődési-korrelációs potenciál közvetlenül nem

határozható meg. Az egyik lehetőség a SLATER által javasolt $X\alpha$ -közelítés:

$$v_{\text{xa}}(\mathbf{r}) = -6\alpha \left[\frac{3}{4\pi} \rho(\mathbf{r}) \right]^{1/3}, \quad (\text{A3})$$

amely $\alpha=1$ esetén a SLATER [D14], $\alpha=2/3$ esetén a GÁSPÁR [15] által javasolt kicserélődési potenciállal egyezik meg.

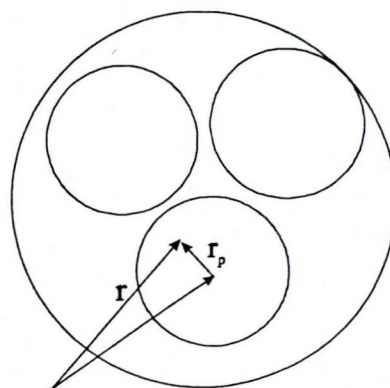
2. A TÖBBSZÓRÁSOS MÓDSZER

Az (A2) egy-elektron egyenlet megoldására használatos módszerek közül az ún. többszórásos módszert alkalmaztuk.

Egy N atomos molekula $V(\mathbf{r}) = V_C(\mathbf{r}) + V_{x\alpha}(\mathbf{r})$ molekula potenciáljára muffin tin közelítést használunk, ami azt jelenti, hogy az \mathbf{r} teret háromféle tartományra osztjuk:

I. Atomi tartományok: N darab b_p sugarú gömb, centrumában a p -ik atommag.

III. Külső tartomány: az atomi gömböket magába foglaló b_0 sugarú gömbön kívüli rész.



II. Atomközi tartomány: a térnek az atomi és a külső tartományokhoz nem tartozó része.

Az I. és III. tartományokban a potenciálok gömbszimmetrikusak, ($V_p(\mathbf{r})$, illetve $V_0(\mathbf{r})$), a II. tartományban konstans (\bar{v}).

A klaszter ψ egyelektron hullámfüggvényei a

$$[\Delta + k^2 - V(\mathbf{r})]\psi = 0$$

Schrödinger-egyenlet megoldásai ($k^2 = E$), illetve a gömbök határainál.

A p -ik atomi gömbben a megoldás a gömbfüggvények szerint sorba fejthető:

$$\psi^p(\mathbf{r}_p) = \sum_L C_L^p R_L^p(k, r_p) Y_L(\hat{r}_p),$$

ahol $L=(l, m)$ és R_l^p a következő, ún. radiális egyenlet megoldása:

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V^p(r) - k^2 \right] R_l^p(k, r) = 0. \quad (\text{A4})$$

Feltéve, hogy a megoldás reguláris $r = 0$ -nál, az (A4) egyenletet numerikus kifelé integrálással oldjuk meg.

A külső tartományban a hullámfüggvény sorfejtése az I. tartománybelihez hasonló:

$$\psi^0(\mathbf{r}_0) = \sum_L D_L^0 R_l^0(k, r_0) Y_L(\hat{\mathbf{r}}_0),$$

ahol R_l^0 egy (A4)-gyel azonos egyenletet elégít ki, amelyben V^p helyett V^0 szerepel. Kötött állapotokra a hullámfüggvény nagy távolságban exponenciálisan csökken, ezt a határfeltételt kihasználva R_l^0 numerikus befelé integrálással kapható meg.

A II. tartományban ($\bar{V} = \text{konst.}$) a szabad elektron Green-függvényének többcentrumú kifejtését használva adódik a hullámfüggvény:

$$\psi_{II}(\mathbf{r}) = \sum_p \sum_L A_L^p F_l(\kappa r_p) Y_L(\hat{\mathbf{r}}_p) + \sum_L B_L^0 J_l(\kappa r_0) Y_L(\hat{\mathbf{r}}_0),$$

$$\text{ahol } \kappa = \sqrt{|E - \bar{V}|}, \text{ és } F_l = \begin{cases} k_l^{(1)} & \text{ha } E < \bar{V} \\ n_l & \text{ha } E > \bar{V} \end{cases}, \quad J_l = \begin{cases} i_l & \text{ha } E < \bar{V} \\ j_l & \text{ha } E > \bar{V} \end{cases},$$

ahol $j_l, n_l, i_l, k_l^{(1)}$ Bessel-függvények.

Megkövetelve a hullámfüggvények és deriváltjaik folytonosságát a gömbök határánál, a kifejtési együtthatókra az alábbi lineáris egyenlet-rendszer adódik:

$$\sum_{p'} \sum_{L'} [T^{-1}(E)]_{LL'}^{pp'} A_{L'}^{p'} + \sum_{L'} S_{LL'}^{p0}(E) B_{L'}^0 = 0$$

$$\sum_{p'} \sum_{L'} S_{LL'}^{0p'}(E) A_{L'}^{p'} + \sum_{L'} \delta_{LL'} [g_i^0(E)^{-1}] B_{L'}^0 = 0, \quad (\text{A5})$$

$$\text{ahol } [T^{-1}(E)]_{LL'}^{pp'} = \delta_{pp'} \delta_{LL'} [t_L^p(E)]^{-1} + (1 - \delta_{pp'}) G_{LL'}^{pp'}(E).$$

Az egy-elektron energiákat az együtthatók determinánsának zérushelyei szolgáltatják. Csak a diagonális elemek (t és g mátrix) függenek a radiális függvényről (azaz a potenciáltól). A nem-diagonális elemeket (G , illetve S mátrix) „struktúra-konstansok”-nak lehet tekinteni, mivel az energián kívül csak a klaszter geometriájától függenek.

3. AZ MSX α MÓDSZER ALKALMAZÁSA ELEKTRONSZERKEZET MEGHATÁROZÁSÁRA

A Kohn-Sham-egyenleteket iterációs eljárással megoldva (SCF eljárás) meghatározzuk az $\varepsilon_{i\alpha}$ Kohn-Sham-egyelektron energiákat és az $u_{i\alpha}$ egyelektron pályákat, az elektronsűrűséget, majd az (A1) energiafukcionállal az $E[\rho]$ teljes energiát.

Az $\varepsilon_{i\alpha}$ energiák nincsenek közvetlen kapcsolatban a gerjesztési energiákkal (nem érvényes a Koopmans-tétel), ezért pl. egy gerjesztés energiáját a kezdeti és végállapotnak megfelelően kiszámolt totális energiák különbsége adja. Megmutatható azonban, hogy a totális energiák különbsége jól közelíthető az ún. Slater-féle átmeneti állapot (STS) egyelektron pályae energiájával [D14].

B. TÖRZSNÍVÓ ELTOLÓDÁS MEGHATÁROZÁSA A TÖBBSZÓRÁSOS MÓDSZER ALKALMAZÁSÁVAL

A többszórásos $X\alpha$ módszert az irodalomban először alkalmaztuk klaszterek törzsnívó (1s, 2s, 2p) elektronjaira az atom/klaszter kötési energia eltolódásának számítására [4-6].

Régóta ismert, hogy a törzsnívó energiák az atom kémiai környezetétől függenek és szisztematikusan néhány eV-tal alacsonyabbak vezető szilárd testekben, mint atomokban. Az atom/molekula kötési energiák eltolódásának mérési és számítási eredményei azt mutatták, hogy a kötési energia eltolódások nemcsak a molekula alap-állapotú töltés eloszlását tükrözik, hanem kapcsolatban vannak a passzív elektronok átrendeződésével a végső állapotban, és az eredmények szerint a végső állapot effektusok nélkül az 1s kötési energiának magasabbnak kell lennie a molekulában, mint az atomban.

Definíció szerint a törzsnívó kötési energia:

$$E_c = E_f(n_c - 1) - E_i(n_c), \quad (\text{B1})$$

ahol n_c az elektronok száma kezdő (i) állapotban a c törzsnívón, E_f és E_i a totális energia a végső és a kezdeti állapotban. Az atom/klaszter törzsnívó eltolódás definíció szerint:

$$\Delta = E_{c, \text{atom}} - E_{c, \text{klaszter}}, \quad (\text{B2})$$

ahol $E_{c, \text{atom}}$ és $E_{c, \text{klaszter}}$ a törzsnívó kötési energia az atomra, illetve a klaszterre, és (B1) szerint a totális energiák (SCF számolások!) különbségeként számolhatók. Felhasználva a Slater-féle átmeneti állapot fogalmát, az atom/klaszter eltolódási energia STS egyelektron energiákkal is számolható:

$$\delta = |\epsilon_{c, \text{atom}}| - |\epsilon_{c, \text{klaszter}}|. \quad (\text{B3})$$

C. A TÖBBSZÓRÁSOS MÓDSZER KITERJESZTÉSE SZÓRT ÁLLAPOTOKRA

Az A.2. pontban ismertetett módszer GYÉMÁNT I. és BENEDICT M. által javasolt továbbfejlesztése lehetővé teszi elektron-molekula ütközések kvantitatíve helyes elektronszórási hatáskeresztmetszetének meghatározását. A kapott formulák a nem-gömboszimmetrikus - de muffin-tin - potenciáltérben mozgó elektron szórt állapotait az ún. általánosított fáziseltolásokkal írják le. Ezt a módszert az irodalomban először alkalmaztuk elektron-molekula ütközésekre [2-3, 7-9].

A $k = \sqrt{E}$ hullámszámú, $V(\mathbf{r})$ - nem feltétlen gömboszimmetrikus - potenciálon szóródó elektron Schrödinger-egyenlete:

$$(\Delta + k^2 - V(\mathbf{r})) \psi = 0. \quad (C1)$$

Ennek megoldása szórt állapotokra:

$$\psi \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{m}, \mathbf{n}) \frac{e^{ikr}}{kr}, \quad (C2)$$

ahol $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, \mathbf{m} a beeső hullám iránya, $f(\mathbf{m}, \mathbf{n})$ a szórási amplitúdó. A ψ hullámot az unitér szórás mátrix (S mátrix) sajátfüggvényei szerint parciális hullámokra lehet bontani. Bármely parciális hullámban (ψ_λ) a szórt hullám

amplitúdója csak egy egységnyi abszolút értékű szorzótényezőben különbözhet a beeső hullám amplitúdójának abszolút értékétől:

$$\psi_\lambda = -\frac{1}{2ikr} (A_\lambda(\mathbf{n})e^{ikr+i\delta_\lambda} - A_\lambda^*(\mathbf{n})e^{-ikr-i\delta_\lambda}). \quad (\text{C3})$$

Az (C1) egyenletet és a (C3) feltételt kielégítő ψ -k teljes ortonormált függvényrendszert alkotnak (a kötött állapotokkal együtt) minden k -ra:

$$\psi = 4\pi \sum_\lambda e^{i\delta_\lambda} A_\lambda^*(\mathbf{m}), \quad (\text{C4})$$

és

$$f(\mathbf{m}, \mathbf{n}) = \frac{4\pi}{2i} \sum_\lambda (e^{2i\delta_\lambda} - 1) A_\lambda^*(\mathbf{m}) A_\lambda(\mathbf{n}). \quad (\text{C5})$$

A (C3) parciális hullámot felírhatjuk

$$\psi_\lambda \approx \sum_L D_{L\lambda}^0 [j_l(kr) - \text{tg } \delta_\lambda n_l(kr)] Y_L(\hat{\mathbf{n}}) \quad (\text{C6})$$

alakban, ahol felhasználtuk j_l és n_l aszimptotikus alakját, és az alábbi felbontást

$$A_\lambda(\mathbf{n}) = \sum_L \frac{(-i)^l}{\cos \delta_\lambda} D_{L\lambda}^0 Y_L(\hat{\mathbf{n}}). \quad (\text{C7})$$



A kötött állapotokra érvényes többszórásos módszer könnyen átalakítható a δ_λ általánosított fáziseltolások kiszámítására, csak a klasztertől nagy távolságban érvényes határfeltételt kell kicserélni.

Tegyük fel, hogy a klasztertől nagy távolságban a potenciál eltűnik: $V_0 = 0$, ha (ahol $r_0 > b_0$). Ebben a tartományban (A4) megoldásai j_l és n_l , így a (C6) aszimptotikus viselkedést mutató megoldáshoz tartozó radiális függvény az $r > r_0$ tartományban a következő lesz:

$$R_l^0 = j_l(kr) - \text{tg } \delta_\lambda n_l(kr). \quad (\text{C8.a.})$$

Az $r_0 \geq r \geq b_0$ tartományban pedig

$$R_l^0 = u_l(r) - \text{tg } \delta_\lambda v_l(r), \quad (\text{C8.b.})$$

ahol $u_l(r)$ és $v_l(r)$ numerikus befelé integrálással kapható meg az (A4) radiális egyenletből az $r = r_0$ helyen vett alábbi kezdő értékek felhasználásával:

$$u_l(r_0) = j_l(kr_0), \quad v_l(r_0) = n_l(kr_0),$$

$$\frac{du_l}{dr}(r_0) = \left. \frac{dj_l(kr)}{dr} \right|_{r=r_0}, \quad \frac{dv_l}{dr}(r_0) = \left. \frac{dn_l(kr)}{dr} \right|_{r=r_0}. \quad (\text{C9})$$

Figyelembe véve a radiális függvény (C8) alakját, a g_l^0 mátrixban - és így az (A5) egyenletrendszerben - megjelenik a δ_λ fáziseltolás:

$$g_i^0(E, \delta_\lambda) = \frac{[n_i, u_i]_{b_0} - \operatorname{tg} \delta_\lambda [n_i, v_i]_{b_0}}{[j_i, u_i]_{b_0} - \operatorname{tg} \delta_\lambda [j_i, v_i]_{b_0}}.$$

Az $E > 0$ energiát rögzítve, az egyenletrendszer determinánsa csak meghatározott $\delta_\lambda(E)$ fáziseltolás értékekre tűnik el. Ezek után minden δ_λ -hoz megkaphatjuk a $\{A_\lambda^0, B_\lambda^p\}$ együtthatókat, és ψ_λ előállítható. (C7) szerint az egységgömbön definiált $A_\lambda(\mathbf{n})$ függvények teljes ortonormált függvényrendszert alkotnak, amelyben az S szórásoperátor mátrixa diagonális:

$$S_{\lambda\lambda'} = e^{2i\delta_\lambda} \delta_{\lambda\lambda'}.$$

A teljes szórási hatáskeresztmetszet - ha pl. az elektron gázmolekulákon szóródik, és minden irány egyformán valószínű - a szórási hatáskeresztmetszet teljes térszögre vett átlaga:

$$\begin{aligned} \sigma(E) &= \frac{1}{4\pi} \int \sigma(\mathbf{m}) d\Omega = \\ &= \frac{1}{4\pi k^2} \int |f(\mathbf{m}, \mathbf{n})|^2 d\Omega d\Omega' = \frac{4\pi}{E} \sum_\lambda \sin^2 \delta_\lambda(E) \end{aligned} \tag{C10}$$

III. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

A. RUGALMAS ELEKTRON-MOLEKULA SZÓRÁS

1) Kifejlesztettem egy FORTRAN nyelvű programrendszert, amely a következő főbb részekből áll:

- A molekula/klaszter szimmetriabázisát előállító program (HARMY). Adott szimmetriára, adott l -ig (max. 6), adott klaszter-elrendezésre (max. 48 atom) projekciós operátorok segítségével megadja a bázisként szolgáló gömbfüggvényeket a többi program számára alkalmas formátumban.
- Atomi potenciálokat, töltéssűrűséget, totális energiát önkonzisztens módon előállító program (HS). Tetszőleges lokális kicserélődési potenciál választható.
- A molekula vagy klaszter geometriájának megfelelően az egyes tartományokban (l. A.2. pont) a szférikusan átlagolt potenciálokat előállító program (MOLPOT).
- Egy ön-konzisztens eljárást tartalmazó program (SCF), amely

- a) megoldja az (A4) radiális egyenletet numerikus kifelé, illetve befelé integrálással,
- b) a megoldások illesztési feltételeit használva, elkészíti az (A5) determinánst,
- c) megkeresi az (A5) determináns zérushelyeit (egy-elektron energiák),
- d) elkészíti a molekula/klaszter töltéssűrűségét, abból a következő iteráció potenciálját, megadja a totális energiát;

a folyamat a)-d) lépései ismétlődnek a megadott pontosság eléréséig.

Megjegyzés. Az SCF programban a hullámfüggvénynek a molekula szimmetriabázisa szerinti kifejtését használjuk.

- Az általánosított fáziseltolásokat meghatározó program (DELTA), amely a következő lépéseket hajtja végre:
 - a) elkészíti a szóró potenciált a levágási paraméter, és a polarizáció figyelembevételével,
 - b) megoldja az (A4) radiális egyenletet numerikus befelé, illetve kifelé integrálással,
 - c) a megoldások illesztési feltételeit (C9) használva elkészíti az (A5) determinánst,

d) megkeresi a determináns zérushelyeit, azaz az általánosított fáziseltolásokat.

Az elektronenergiát léptetve az a)-d) lépések ismételhetők. A program megadja (C10) a teljes hatáskeresztmetszetet is.

- A programrendszert egyszerű molekulák elektronszerkezetének kiszámításával ellenőriztük (CH_4 , SF_6 , H_2O). [1]

3) Meghatároztuk az SF_6 molekulára a rugalmas elektron-szórás hatáskeresztmetszet energia függését.

- Pontosabb számolással ismételten megmutattuk, hogy a rugalmas elektron- SF_6 molekula szórásban három rezonancia van jelen [3], amelyet a később BONHAM és munkatársai által elvégzett kísérletek igazoltak.
- Megmutattuk, hogy a három rezonancia közül kettő atomi eredetű, a harmadik a többszörös szórás következménye. A kísérletileg mért rezonanciák helye kis mértékben eltért az általunk számítottól [3].
- Megmutattuk, hogy az $e\text{-SF}_6$ ütközésben a Ramsauer-Townsend minimumot egy megfelelő polarizáció figyelembe vételével lehet megkapni. Ugyancsak, megfelelő polarizációt használva a rezonanciák helye megegyező lesz a kísérleti adatokkal [3, 7, 8].

- 4) Meghatároztuk a rugalmas $e\text{-CH}_4$ molekula szórás hatáskeresztmetszetének energiafüggését többféle polarizáció figyelembevételével. A polarizáció alkalmas közelítésével
- a Ramsauer-Townsend minimum helyére jó közelítést kaptunk,
 - reprodukálni tudtuk a széles E_g rezonancia kvalitatív viselkedését is. [2, 7, 8]
- 5) Meghatároztuk a rugalmas $e\text{-GeH}_4$, $e\text{-SiH}_4$ molekula szórás hatáskeresztmetszetének energiafüggését figyelembe véve különböző polarizációkat. [9]

B. TÖRZSNÍVÓ ELTOLÓDÁSOK SZÁMÍTÁSA

Az A.2. pontban leírt programrendszer segítségével a belső héjak eltolódási energiáit az A.3. pontban vázolt módszerrel határoztuk meg.

1) Kiszámoltuk az Al 1s, 2s, 2p törzsnívó eltolódásait növekvő méretű (13, illetve 19 atom) Al klaszterekben. [5, 6]

- Azt találtuk, hogy a Slater-féle átmeneti állapottal való meghatározás jó közelítést ad a törzsnívó eltolódásra.
- A nagyobb méretű klasztereknél a muffin-tin közelítés korrekcióját átfedő gömbökkel vettük figyelembe. Meghatároztuk a törzsnívó eltolódás függését az átfedés mértékétől.
- Megállapítottuk, hogy a törzsnívó eltolódás nem monoton függvénye a klaszter méretének.

2) Meghatároztuk az Ar 1s törzsnívó eltolódását növekvő méretű Al klaszterekben [5, 6].

- Megállapítottuk, hogy muffin tin közelítésben még az eltolódás előjele sem adódik helyesen. A nem-muffin tin

korrekciókat átfedő gömbök használatával figyelembe véve az eltolódás helyes előjelű lesz.

- Az eltolódás a kicserélődési potenciál közelítésére meglehetősen érzéketlen.
- 3) Meghatároztuk az A1 törzsnívó eltolódását növekvő méretű A1 klaszterekben különböző lokális kicserélődési-korrelációs potenciál közelítésekkel. [10, 11]



IV. AZ EREDMÉNYEK HASZNOSÍTÁSA

Az ismertett főbb eredmények alapkutatás jellegűek, ugyanakkor elméleti háttérrel adnak fontos, a gyakorlattal szoros kapcsolatban álló kísérleti kutatásokhoz. Például az e -SF₆ molekula szórási hatáskeresztmetszetéről publikált eredmények (a rezonanciák) ösztönözték a pontosabb mérések elvégzését.

A törzsnívó eltolódás meghatározása a kidolgozott klaszteres modell alapján a fémfelületeken lejátszódó kémiai reakciók ESCA és Auger vizsgálatához kapcsolódik.

V. PUBLIKÁCIÓK

A. A TÉZISEKHEZ KAPCSOLÓDÓ PUBLIKÁCIÓK

- 1) VARGA ZS., A többszórásos $X\alpha$ -módszer és alkalmazása néhány egyszerű molekulára, Doktori értekezés, Szeged, 1977.
- 2) ZS. VARGA, I. Gyémánt, G. Benedict, Electron Scattering Cross Section of CH_4 ; a Multiple Scattering Calculation, Acta Phys. et Chem. Szeged, **25**, 85-88, (1979)
- 3) I. Gyémánt, ZS. VARGA, M. G. Benedict, Resonances in the Elastic Electron- SF_6 Molecule Scattering, Int. J. Quantum Chem., **17**, 255-263 (1980)
- 4) I. Gyémánt, ZS. VARGA, 1s Core-Level Shifts in Al Clusters of Increasing Size, Acta Phys. et Chem. Szeged **32**, 3-8, (1986)
- 5) ZS. VARGA, I. K. Gyémánt, 1s Core-Level Shifts of Al and Ar Atoms in Aluminium Clusters, Symposium on Quantum Chemistry, Tatranska Lomnica, Czechoslovakia, 1988, poster
- 6) ZS. VARGA, I. K. Gyémánt, 1s Core-Level Shifts of Al and Ar Atoms in Aluminium Clusters, Int. J. Quantum Chem., **38**, 351-356 (1990)

- 7) I. K. Gyémánt, ZS. VARGA, Resonances in the Elastic Electron Scattering from SF₆ and CH₄, International Conference on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Whistler, Canada, 1995., Abstracts of Contributed Papers ICPEAC XIX, 5. (1995)
- 8) I. K. Gyémánt, ZS. VARGA, Elastic Cross Sections for Electron Collisions with SF₆ and CH₄, Molecular Quantum Mechanics: Methods and Applications, International Conference in Memory of S. F. Boys, Cambridge, 1995., Abstracts of Contributed Papers, 204 (1995)
- 9) Gyémánt and ZS. VARGA, Continuum Multiple Scattering Calculations for the Collisions of Electrons with CH₄, SiH₄ and GeH₄, Second Europhysics Study Conference on Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules, Belfast, 1996., Abstracts of Contributed Papers, Belfast, 103, (1996)
- 10) G. Paragi, I. K. Gyémánt, ZS. VARGA, Core-electronic binding energy shifts in aluminium, Workshop on Electronic Structure of Complex Systems, Budapest, 1996. Abstracts of Contributed Papers, Budapest, 24 (1996)
- 11) G. Paragi, I. K. Gyémánt, ZS. VARGA, Core-level shifts of Al in clusters, First International Workshop on DV-X α Method, Debrecen, 1996. Abstracts of Contributed Papers, Debrecen, 23 (1996)

- 12) G. Paragi, I. K. Gyémánt, ZS. VARGA, Core-electron binding energy shifts in aluminium, *Advances in Quantum Chemistry* (1997), (accepted for publication)

B. EGYÉB PUBLIKÁCIÓK

- 1) L. Michailovits, I. Hevesi, Liem Phan, ZS. VARGA, Determination of the Optical Constants and Thickness of Amorphous V_2O_5 Thin Films, *Thin Solid Films, Electronics and Optics*, **102**, 71-76, (1983)
- 2) VARGA ZS., Budó Ágoston Fizikaverseny, *KöMaL*, 1991. 1. szám
- 3) Molnár M., VARGA ZS., Beszámoló az 1992. évi Budó Ágoston Fizikai Feladatmegoldó Versenyről, *A fizika tanítása*, 1993. 1. szám
- 4) VARGA ZS., Beszámoló az 1993. évi Budó Ágoston Fizikai Feladatmegoldó Versenyről, *A fizika tanítása*, 1993. 2. szám
- 5) Hilbert M., VARGA ZS., Beszámoló az 1994. évi és az 1995. évi Budó Ágoston Fizikai Feladatmegoldó Versenyről, *A fizika tanítása*, 1995. 5. Szám
- 6) Sisák Z., VARGA ZS., Speciális relativitáselmélet számítógépen, *Fizikai Szemle*, XIV. 1995. 7. Szám

- 7) Hilbert M., VARGA ZS., Varjú K., Budó Ágoston Fizikai Feladatmegoldó Verseny 1996., A fizika tanítása, 1996. 2. Szám

- 8) VARGA ZSUZSA: Multipólus-sugárzások, Elméleti Fizikai Füzetek II./3., Szeged, 1996. JATE Elméleti Fizikai Tanszék [házi sokszorosítás]

C. KÖNYV

A Budó Ágoston fizikaversenyek feladatai és megoldásai (1979-1990), Mozaik Oktatási Stúdió, Szeged, 1991. (társszerző)