

Metan Molekülünün Elektron Etkisiyle İyonlaşma Dinamiğinin Çakışma Tekniği ile İncelenmesi

Nimet Işık^{1,2,3,*}, Semiha Bahçeli², Mevlüt Doğan³

¹Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 15200, Burdur, Türkiye

²Süleyman Demirel Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, 32260, Isparta, Türkiye

³Afyon Kocatepe Üniversitesi, e-COL Laboratuvarı, 03200, Afyonkarahisar, Türkiye

*Yazışılan yazar e-posta: nimetok@hotmail.com

Alınış: 05 Mayıs 2014, Kabul: 11 Temmuz 2014

Özet: Karmaşık moleküllerin elektronlarla etkileşimlerinin ayrıntılı bir biçimde anlaşılmasının atom ve molekül fiziği araştırmalarında, kuramsal modellemelerin gelişmesinde önemli bir yeri vardır. Özellikle moleküllerin dinamik yapılarının anlaşılmasına yönelik deneysel çalışmalar, bu kuramsal modellemelerin test edilmesinde kullanılmaktadır. Bu çalışmada elektronlarla çarpışma laboratuvarında (e-COL) bulunan elektron spektrometresiyle, elektron-elektron çakışma tekniği kullanılarak alınan deneysel CH₄ molekülünün bağlanma enerji spektrumu verileri sunulacaktır.

Anahtar kelimeler: Metan, çarpışma deneyi, iyonlaşma dinamiği, çakışma tekniği

The Investigation of Electron Impact Ionization Dynamics of Methane Molecule with Coincidence Technique

Abstract: The detailed understanding of the interactions with electrons of complex molecules has an important role for the development of theoretical modellings in the atomic and molecular physics' research. Experimental studies devoted to the understanding of dynamic structures of molecules especially are used to test these theoretical modellings. In this study, experimental binding energy spectrum data of the CH₄ molecule obtained by electron-electron coincidence technique using electron spectrometer in the laboratory of collision with electrons (e-COL) will be presented.

Key words: Methane, collision experiment, ionization dynamics, coincidence technique

1. Giriş

Elektronun atom ya da molekül ile çarpışması sonucu hedeften bir veya daha fazla elektronun koparılması sonrası açığa çıkan parçacıkların eş zamanlı olarak ölçümlerinin yapıldığı deneyler (e,2e) deneyleri olarak adlandırılmaktadır. Aynı iyonlaşma olayından gelen elektronlar çakışma tekniği ile ölçülerek, (e,2e) deneylerinden önemli bilgiler elde edilmektedir. Bu deneyler ile moleküllerin iyonlaşma olayındaki dinamik yapıları anlaşılır hale gelmektedir. Ayrıca, teorik olarak hesaplanan verilerle deneysel sonuçlar karşılaştırılarak, teorilerin geliştirilmesi sağlanmaktadır. Kuantum mekaniksel olarak elde edilen dalga fonksiyonlarının içerdiği bilgilerin anlamlı hale getirilebilmesi, hedefin kuantum durumlarındaki değişim olasılıklarının belirlenmesi ile gerçekleştirilebilmektedir.

(e,2e) deneyleri, amaca göre, yapı çalışmaları (EMS; Electron Momentum Spectroscopy) ve çarpışma dinamiği çalışmaları olmak üzere iki kategoride incelenmektedir. Yüksek enerjili (>1 keV) elektron demeti etkisiyle hedef atom ya da molekülün çarpışmasında büyük momentum transferi (>2 a.b.) gerçekleşmektedir. Bu tür deneylerde, atom ya da molekülün elektron momentum olasılık dağılımı hakkında bilgiler elde edilmektedir ve elektron momentum spektroskopisi (EMS) deneyleri olarak

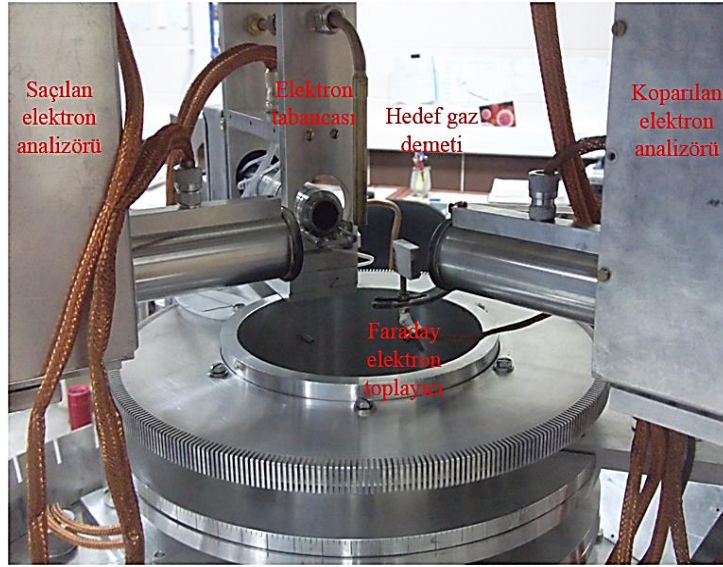
adlandırılmaktadır [1]. Düşük enerjili (1-500 eV) elektron demeti etkisiyle hedefe aktarılan momentum küçük değerler alır. Bu tür deneyler, çarpışma dinamiği hakkında bilgiler vermektedir [2].

Metan molekülünün elektron demetiyle çarpışması sonucu elde edilen ilk bağlanma enerji spektrumu ve büyük momentum transfer değerlerinde, metan molekülünün elektron demetiyle çarpışması sonucu saçılan ve koparılan elektronları 45° açılarda analizörler yardımıyla dedekte ederek alınan bağlanma enerji spektrumu Hood ve ark. tarafından verilmiştir [3,4]. Metan molekülü bağlanma enerji spektrumu, moleküle etki eden elektron demetinin 600 eV ve 1200 eV enerjilerinde Weigold ve ark. tarafından ölçülmüştür [5]. Çarpışmadan sonra, saçılan ve koparılan elektronun eşit enerji ve açıda alınarak bağlanma enerji spektrumu ölçüm sonuçları Clark ve ark. tarafından verilmiştir [6]. Metan molekülü $1t_2$ ve $2a_1$ yörünge elektronları iyonlaşma dinamiği ilk üçlü diferansiyel tesir kesiti verileri, asimetrik düzlemsel geometride, (e,2e) tekniği ile momentum aktarımının 0.6-0.8 a.b. değerleri için Lahmam-Bennani ve ark. tarafından verilmektedir [7]. Çarpışmadan sonra çıkan elektron enerjilerinin simetrik olarak alınmasıyla elde edilen metan molekülünün elektron etkisiyle tekli iyonlaşma verileri, Nixon ve ark. tarafından verilmiştir [8-9]. Ayrıca, 54 eV elektron etkisiyle metan molekülünün $1t_2$ yörünge elektronunun koparılması işlemi, Xu ve ark. tarafından detaylı bir şekilde incelenmiştir [10].

Bu çalışma metan molekülünün elektron ile çarpışması sonucu, elde edilen iyonlaşma dinamiği verileri üzerinedir. En basit hidrokarbon olması dolayısıyla, metan molekülü karmaşık biyolojik moleküllerin modellenmesinde ideal bir moleküldür. Ayrıca metan molekülü iyonlaşma dinamiği üzerine yapılan çalışmalara bakıldığında, literatürde eksiklikler bulunmaktadır. Bu çalışmada, asimetrik düzlemsel geometri kullanılarak, 250 eV elektron demeti etkisiyle metan molekülünün esnek olmayan çarpışma verileri ve elektron-elektron çakışması deneysel sonuçları verilmektedir. Orta derecede momentum aktarımının gerçekleştiği ($K=0.9$ a.b.) deneysel sonuçlarda, koparılan elektron enerjisi 50 eV, saçılan elektron açısı 10° için, moleküle etki ederek saçılan ve molekülden koparılan elektron çakışma tekniği ile ölçülmüştür.

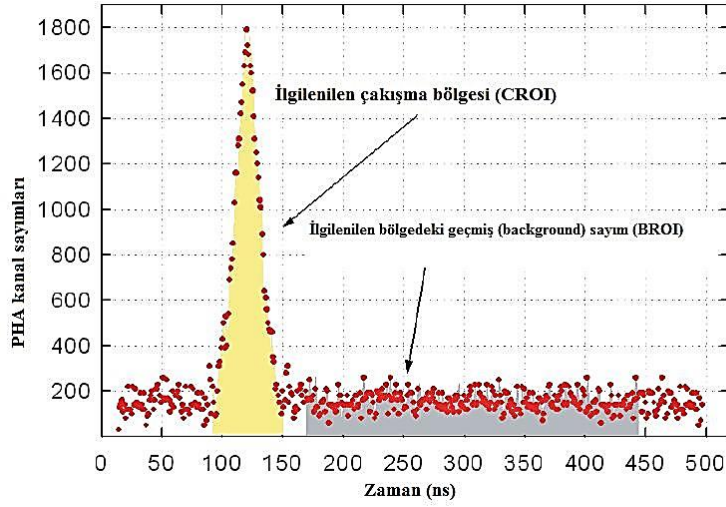
2. Materyal ve Metot

Deneysel veriler, Afyon Kocatepe Üniversitesi e-COL laboratuvarında bulunan (e,2e) elektron spektrometresinde alınmış ve önceki çalışmalarda ayrıntılı olarak açıklanmıştır [11-13]. Kısaca, (e,2e) çakışma deney düzeneğinde, bir elektron tabancası, hedef gaz kaynağı, iki adet enerji analizörü ve Faraday elektron toplayıcısı bulunmaktadır (Şekil 1). Vakum odasında (Vacuum Chamber) gaz yokken basınç $\sim 1 \times 10^{-7}$ mbar civarına düşürülmekte, gaz açırken 6×10^{-6} mbar civarında deneyler yapılmaya başlanmaktadır. 7 elemanlı silindirik lensler kullanılan elektron tabancası, etkileşme bölgesinde, yaklaşık 2 mm çaplı paralel elektron demeti üretmektedir. Hedef metan molekülü, gaz demeti etkileşme bölgesinde elektron demeti ile dik olarak kesişmektedir. Saçılmayan elektronlar Faraday elektron toplayıcısında toplanırken, çarpışmadan sonra saçılan elektronlar 180° yarı küresel elektron enerji analizörleri tarafından sayılmaktadır. Elektron enerji analizörü tarafından enerjilerine göre ayırt edilerek, elektronlar, elektron çoğaltıcı yardımıyla sinyale çevrilmektedir. Sinyal işleme birimlerinde işlenerek, bilgisayar programları sayesinde spektrum elde edilmektedir.



Şekil 1. Elektron-elektron çakışma deney düzeneği

Elektron demeti etkisiyle moleküllerin çarpışması ile birden çok çarpışma olaylarının oluşması, çakışma tekniği ile çözülmeye çalışılmaktadır. Çakışma tekniği, aynı zaman içerisinde detektörlerden gelen iki sinyalin çakıştırılması temeline dayanır [11-14]. Böylece aynı elektron-atom/molekül etkileşmesinden gelen iki elektron, çarpışma hakkında detaylı bilgiler verir. Çakışma tekniğinde, başka çarpışma olayından çıkan elektronlar, rastgele sinyalleri oluşturmaktadır. Aynı olaydan gelen sinyaller ise zaman-genlik dönüştürücü aygıtına (TAC) aynı zaman içerisinde ulaşır ve doğru çakışma sinyalini oluşturmaktadır. TAC aygıtı, çakışma spektrumunun elde edilmesinde kullanılmaktadır. Çarpışmadan sonra, saçılan ve koparılan elektronların dedektörlere ulaşmaları arasında zaman farkı oluşur. Bu durumda, iki elektrondan gelen sinyallerin biri başlatma diğeri durdurma komutu vermektedir. TAC aygıtında yapısal olarak belirli bir ölü zaman bulunmaktadır. Bu ölü zaman içerisinde TAC aygıtı durdurma işlemi yapamaz. İki elektronun çakışma tekniği ile ölçümlerinde, başlatma ve durdurma zamanları arasındaki fark ~ 10 ns kadar daha azdır. Bu nedenle, durdurucu sinyalin tekrar komut verebilmesi için TAC'ın boşta olması gerekmektedir. Durdurucu sinyal uygun bir süre geciktirilerek çakışma spektrumunda doğru sinyal piki gözlenir. Sonuç olarak, aynı çarpışmadaki parçacıkların oluşturduğu dar pik (ilgilenilen çakışma bölgesi), doğru sinyal olarak kaydedilmektedir (Şekil 2).



Şekil 2. Elektron-elektron çakışma spektrumu şematik gösterimi

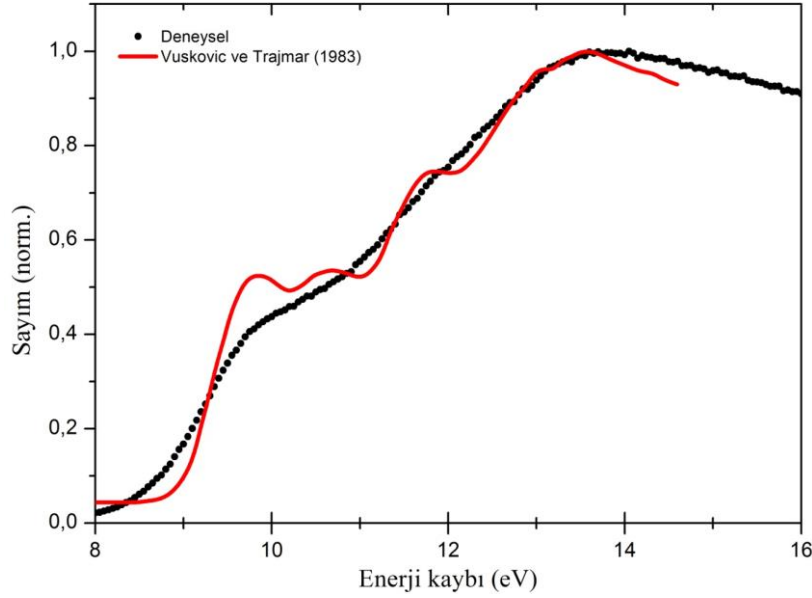
Doğru çakışma sinyalinin çıkarılması, istatistiksel hesaplamalarla ve uygun yazılımlar kullanılarak yapılabilmektedir. N_c ; doğru sinyaller ile rastgele sinyallerin toplam sayısı, N_b ; rastgele sinyallerin sayısı, Δt ; doğru sinyallerin zaman aralığı, $\Delta t'$ ise rastgele sinyallerin zaman aralığı olmak üzere N_t doğru çakışmaların sayısı,

$$N_t = N_c - N_b (\Delta t / \Delta t')$$

ile hesaplanır.

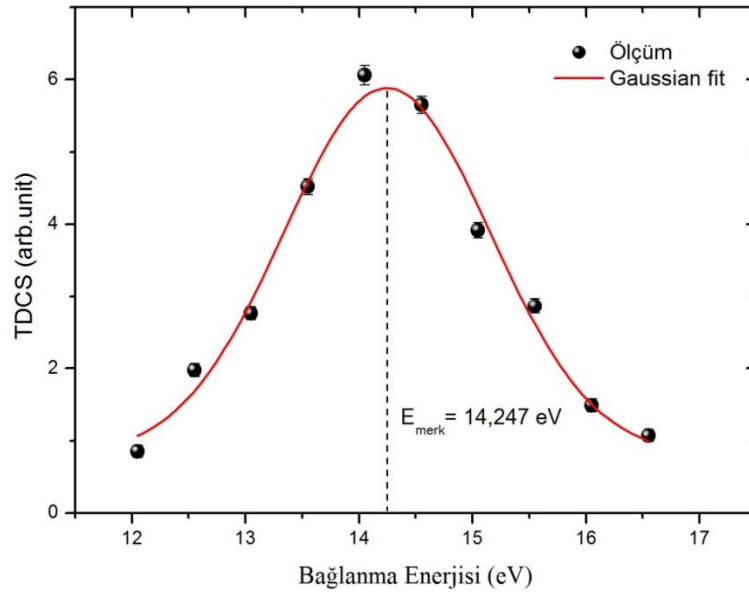
3. Bulgular

Bu çalışmada, elektron demeti ile metan molekülünün çarpışmasında, $1t_2$ yörünge elektronunun bağlanma enerji spektrumu ölçülmüştür. Deneysel sistemin enerji çözünürlüğünü ve güvenilirliğini belirlemek için esnek olmayan çarpışma verileri alınarak, literatürde yer alan çalışmalar ile karşılaştırılmıştır. 200 eV enerjili gelen elektron, enerjisinin bir kısmını moleküle aktardıktan sonra, enerji seviyeleri arasında geçişler oluşmaktadır. Aktarılan enerjiye bağlı olarak, molekülün iyonlaşma potansiyelinden küçük enerjilerde, geçişlerle birlikte enerji kayıp spektrumu oluşmaktadır. Elde edilen enerji-kayıp spektrumu Şekil 3'te verilmiştir. Esnek olmayan saçılma piklerinin ayırt edilmesinde, sistemin enerji çözünürlüğü etkindir. Bir elektron algılayıcısıyla ölçümleri alınan enerji-kayıp spektrumu için, sistemin toplam çözünürlüğü ~ 0.8 V olarak ölçülmüştür. Aynı tür spektrumu Vuskovic ve Trajmar da (1983) almıştır [15]. Çözünürlük arttıkça piklerin belirginliği artmaktadır. Metan molekülü iyonlaşma potansiyeli (14,25 eV) değerinden sonra, iyonlaşma bölgesi spektrumda yer almaktadır.



Şekil 3. 200 eV enerjili elektron ile metan molekülünün esnek olmayan çarpışması sonucu elde edilen enerji-kayıbı spektrumu. İçi dolu yuvarlaklar deneysel verileri, çizgi Vuskovic ve Trajmar (1983) tarafından alınan spektrumu göstermektedir.

Elektron-atom/molekül çarpışmasında aynı olaydan gelen elektronlar (saçılan ve hedeften koparılan) zaman olarak uyumludur. İstatistiksel olarak yapılan hesaplamalarla, aynı olaydan gelen elektronların çakışma sinyali, rastgele olaylardan gelen elektronların oluşturduğu çakışma sinyallerinden ayırt edilebilmektedir. 250 eV enerjili elektron etkisiyle metan molekülü $1t_2$ yörünge elektronu iyonlaşması olayında, açığa çıkan elektronların elektron-elektron çakışma tekniği ile alınan bağlanma enerji spektrumu Şekil 4'te verilmektedir. Deneyde, koparılan elektronu algılayan analizör, $\theta_{kop}=60^0$ açısında ve saçılan elektronu algılayan analizör $\theta_{saç}=15^0$ açısında tutulmuştur.



Şekil 4. Metan molekülünün $1t_2$ değerlik yörüngesine ait, $E_{kop}= 50$ eV, $\theta_{saç}=15^0$, $\theta_{kop}=60^0$ bağlanma enerji spektrumu.

4. Tartışma ve Sonuç

Bu çalışmada, elektron-metan molekülü esnek olmayan çarpışma deneyleri yapılmıştır. Elektron ile CH₄ molekülünün çarpışmasından sonra saçılan ve molekülden koparılan elektron, çakışma tekniği kullanılarak ölçülmüştür. Metan molekülü 1t₂ yörünge elektronunun bağlanma enerji spektrumu verilmiştir. Metan molekülü iyonlaşma potansiyeli 14.247 eV olarak teoriksel değere çok yakın olarak bulunmuştur. Çalışmada sunulan, en küçük hidrokarbon olan metan molekülünün elektron demeti etkisiyle iyonlaşma dinamiği verileri, biyolojik moleküllerin modellenmesi için önemlidir.

Teşekkür

Bu çalışma Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) 109T738 nolu proje ve AKU-BAPK 11.FEN.BİL.07 nolu proje ile desteklenmektedir.

Kaynaklar

- [1] Mc Carthy I. E., Weigold E., 1995. Electron Atom Collisions. *Cambridge University Press*, UK, p 344.
- [2] Lahmam Bennani A., 2002. Thirty years of experimental electron-electron (e,2e) coincidence studies: achievements and perspectives, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 123(2): 365-376.
- [3] Hood S. T., Weigold E., McCarthy I. E., Teubner P. J. O., 1973. Momentum space wave functions and binding energies of the valence electrons in methane measured by the (e,2e) technique, *Nature Physical Science*, 245(144): 65-68.
- [4] Hood S. T., Hamnett A., Brion C. E., 1977. Molecular orbital momentum distributions and binding energies for H₂O using an electron impact coincidence spectrometer, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 11(2): 205-224.
- [5] Weigold E., Dey S., Dixon A. J., McCarthy I. E., Teubner P. J. O., 1990. (e,2e) Spectroscopy of methane, *Physics Letters*, 41(1): 21-24.
- [6] Clark S. A. C., Reddish T. J., Brion C. E., 1990. The valence orbital momentum distributions and binding energy spectra of methane by electron momentum spectroscopy: Quantitative comparisons using near Hartree-Fock limit and correlated wavefunctions, *Chemical Physics*, 143(1): 1-10.
- [7] Lahmam-Bennani A., Naja A., Staicu-Casagrande E. M., Okumus N., Dal Cappello C., Charpentier I., Houamer S., 2009. Dynamics of electron impact ionisation of the outer and inner valence (1t₂ and 2a₁) molecular orbitals of CH₄ at intermediate and large ion recoil momentum, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 42(16): 165201, 1-8.
- [8] Nixon K. L., Murray Andrew J., Chaluvadi Hari, Ning Chuangang, Madison D. H., 2011. Low energy (e,2e) studies from CH₄: Results from symmetric coplanar experiments and molecular three-body distorted wave theory, *The Journal of Chemical Physics*, 134(17): 174304, 1-8.
- [9] Nixon K. L., Murray A. J., Chaluvadi H., Amami S., Madison D. H., Ning Chuangang, 2012. Low energy (e,2e) measurements of CH₄ and neon in the perpendicular plane, *The Journal of Chemical Physics*, 136(9): 094302, 1-8.
- [10] Xu S., Chaluvadi H., Ren X., Pflüger T., Senftleben A., Ning C. G., Yan S., Zhang P., Yang J., Ma X., Ullrich J., Madison D. H., Dorn A., 2012. Low energy (e,2e) study from the 1t₂ orbital of CH₄, *The Journal of Chemical Physics*, 137(2): 024301, 1-11.
- [11] Dogan M., Ulu M., Sise O., 2007. Design, simulation and construction of an electron-electron coincidence spectrometer, *Journal of Electron Spect. and Related Phenomena*, 161: 58-62.
- [12] Dogan M., Ulu M., Ozer Z. N., Yavuz M., Bozkurt G., 2013. Double differential cross-sections for electron impact ionization of atoms and molecules, *Journal of Spectroscopy*, 2013(2013): 192917, 1-16.
- [13] Ozer Z. N., Chaluvadi H., Ulu M., Dogan M., Aktas B., Madison D., 2013. Young's double-slit interference for quantum particles, *Physical Review A*, 87(4): 042704, 1-8.

- [14] Dogan M., 2001. Electron impact double ionization of helium from [e(3-1)e] experiments, *Turkish Journal of Physics*, 25(6): 529-535.
- [15] Vuskovic L., Trajmar S., 1983. Electron impact excitation of methane. *Journal of Chemical Physics*, 78(8): 4947-4953.

Semiha Bahçeli e posta: semihabahceli@sdu.edu.tr

Mevlüt Doğan e-posta: mdogan@aku.edu.tr