

# **Streuung vollständig ionisierter Projektile an lithiumähnlichen Ionen**

Diplomarbeit  
von  
Matthias Keim

vorgelegt beim Fachbereich Physik der  
Johann Wolfgang Goethe-Universität  
in Frankfurt am Main

Frankfurt am Main  
Oktober 1999

Matthias Keim  
Brückenstraße 7  
63526 Erlensee

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>5</b>
2.1	Das effektive Einteilchenbild . . . . .	6
2.2	Lösung der Einteilchengleichungen . . . . .	10
2.2.1	Die Basis Generator Methode (BGM) . . . . .	14
2.2.2	Numerische Umsetzung der BGM . . . . .	18
2.3	Berechnung der Observablen . . . . .	20
2.4	Anwendung der BGM am Beispiel von Einelektronstoßsystemen . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Streuung von <math>\alpha</math>-Teilchen an Li-ähnlichen Ionen</b>	<b>29</b>
3.1	Umladungsprozesse . . . . .	30
3.1.1	$\text{He}^{2+} + \text{B}^{2+}$ . . . . .	30
3.1.2	$\text{He}^{2+} + \text{C}^{3+}$ . . . . .	34
3.1.3	$\text{He}^{2+} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	36
3.1.4	$\text{He}^{2+} + \text{O}^{5+}$ . . . . .	38
3.1.5	Vergleich der Stoßsysteme . . . . .	40
3.2	Untersuchung der 2p-Anregung im Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{O}^{5+}$ . . . . .	42
3.2.1	Verwendete Potentiale . . . . .	42
3.2.2	Ergebnisse im Vergleich . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Stöße vollständig ionisierter Projektilionen mit <math>\text{N}^{4+}</math></b>	<b>45</b>
4.1	$\text{p} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	46
4.2	$\text{Li}^{3+} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	47
4.3	$\text{Be}^{4+} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	48
4.4	$\text{B}^{5+} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	49
4.5	$\text{C}^{6+} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	50
4.6	Vergleich der Stoßsysteme . . . . .	52
4.7	Auswertung von möglichen Vielteilchenprozessen im Stoßsystem $\text{C}^{6+} + \text{N}^{4+}$ . . . . .	54

<b>5</b>	<b>Genauere Betrachtung des Stoßsystems <math>\text{He}^{2+} + \text{C}^{3+}</math></b>	<b>59</b>
5.1	Einfang in das Kontinuum des Projektils . . . . .	62
5.2	Doppelstoß-Szenario . . . . .	64
5.3	Metastabile . . . . .	65
5.4	Hybrid-Hypothese . . . . .	68
5.5	Einfluß der Korrelation . . . . .	69
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>71</b>
<b>A</b>	<b>Details zur praktischen Umsetzung des BGM-Konzepts</b>	<b>75</b>
A.1	Vororthogonalisierung der Basis . . . . .	75
A.2	Berechnung der Matrixelemente . . . . .	76
A.3	Projektion auf bewegte Projektilzustände . . . . .	79
<b>B</b>	<b>Überblick des experimentellen Aufbaus</b>	<b>83</b>
<b>C</b>	<b>Ionisationspotentiale zu verschiedenen Konfigurationen</b>	<b>85</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>87</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Ion-Ion-Stöße sind sowohl in der Natur als auch in der Technik von Bedeutung und stellen an die Durchführung entsprechender Experimente und die Lösung der zugehörigen theoretischen Problemstellung hohe Ansprüche. Die durch Theorie und Experiment gewonnenen Erkenntnisse über mögliche Reaktionsmechanismen in Ion-Ion-Stößen können genutzt werden, um die Prozesse, die diesbezüglich in Natur und Technik auftreten, zu verstehen und zu erklären.

Als natürliche Phänomene treten Ion-Ion-Stöße im Bereich der Astro-, Atmosphären- und Plasmaphysik auf. So wird beispielsweise die Spektrallinie bei  $4686\text{\AA}$  im Emissionsspektrum der Sonnen-Chromosphäre durch das Vorhandensein von ionisiertem Helium erklärt. Da jedoch bei den dort herrschenden Temperaturen Helium nicht ionisiert werden kann, muß die Existenz der Helium-Ionen durch den Prozeß des Elektroneneinfangs von  $\alpha$ -Teilchen, die in den solaren Kernreaktionen entstehen, verstanden werden [SE 90]. Außerdem werden von der Korona der Sonne auch lithiumähnliche Ionen emittiert [FN 75], die mit den  $\alpha$ -Teilchen des Sonnenwindes oder der kosmischen Strahlung in vielfältiger Art und Weise wechselwirken können. Solche Stoßsysteme werden in dieser Arbeit untersucht.

Im Rahmen der technischen Anwendungen sind Informationen über atomare Stoßprozesse in Ion-Ion-Stößen zur Plasmadiagnostik notwendig, die auf dem Gebiet der *kontrollierten Kernfusion* eine entscheidende Rolle spielt [Di 98]. So wird beispielsweise die Plasmatemperatur bei der kontrollierten Kernfusion durch magnetischen Einschluß wegen des Energieverlustes des Fusionsplasmas begrenzt. Ursache hierfür sind die durch die *Plasma-Wand-Wechselwirkung* entstehenden Verunreinigungen und die daraus resultierenden Stoßprozesse mit Brennstoffionen. Im Bereich der *schwerioneninduzierten Kernfusion* können Ion-Ion-Stöße im Speicherring Ladungsänderungen der Ionen durch Ionisation oder Ladungsaustausch hervorrufen und so zu Teilchenverlusten führen. Erst die genaue Kenntnis der Größe von Einfang- und Ionisationsquerschnitten ermöglicht die Minimierung der angesprochenen Verluste. Darüber hinaus darf nicht vergessen werden, daß sowohl Theorie als auch Experiment auf dem Gebiet der Ion-Ion-Stöße in erheblichem Maße zur Grundlagenforschung in der Atomphysik beitragen.

Die in dieser Arbeit erwähnten Streuexperimente wurden alle mit der Gießener *Ion-Ion crossed beams* Apparatur gemacht [RMS 85, RMR 86]. Die besondere Schwierigkeit bei der experimentellen Durchführung besteht darin, daß beide Stoßpartner, Projektil

und Target, in ionisierter Form vorliegen müssen. Um eine Stoßreaktion herbeiführen zu können, sind folglich zwei impulsanalytisierte, definierte Ionenstrahlen zu erzeugen, zu beschleunigen und anschließend unter einem bestimmten Wechselwirkungswinkel zu kreuzen. Da die Teilchendichten der Ionenstrahlen durch Raumladungseffekte begrenzt sind, ergibt sich nur eine sehr kleine Wechselwirkungslänge und damit unmittelbar verbunden nur sehr geringe Reaktionsraten. Diese Problematik wird außerdem noch durch das Auftreten von Ion-Restgas-Stößen verstärkt, weshalb im Ultrahochvakuum gearbeitet werden muß. Nach dem eigentlichen Ion-Ion-Stoß sind dann die wenigen Reaktionsprodukte mit sehr hoher Präzision aus den Ionenstrahlen zu extrahieren und zu detektieren. Die beschriebene Vorgehensweise ist mit erheblichem technischen Aufwand und experimentellem Geschick verbunden.

In der theoretischen Behandlung ist der zentrale Punkt die Diskussion der das jeweilige System beschreibenden Schrödinger- oder Dirac-Gleichung. Da die Lösung dieser Gleichungen nur für wenige Spezialfälle analytisch möglich ist, konzentriert sich das Interesse auf die Entwicklung effizienter numerischer Lösungsmethoden und deren Umsetzung auf leistungsfähigen Rechnern. Die Mechanismen der elementaren inelastischen Prozesse, d.h. Anregung, Ionisation und Elektroneneinfang, sind analog zur Messung im Experiment sehr anspruchsvoll zu handhaben und müssen durch die jeweilige Lösungsmethode entsprechend berücksichtigt werden. Darüber hinaus besteht in der Theorie eine besondere Problematik in der geeigneten quantenmechanischen Beschreibung der eventuell auftretenden Vielelektronendynamik.

Eine exakte Abbildung des wechselwirkenden Vielteilchensystems auf ein effektives Einteilchenbild ist durch die *Dichtefunktionaltheorie* (DFT) gewährleistet. Da jedoch die korrekten Konstruktionsvorschriften für viele interessierende Funktionale nicht bekannt sind, müssen Näherungen gemacht werden. Die resultierenden effektiven Einteilchengleichungen sind dann für jede Anfangsbedingung unter Berücksichtigung der im betrachteten Energiebereich möglichen inelastischen Prozesse zu lösen.

Für hohe Projektilgeschwindigkeiten ist die Ionisation der dominante inelastische Kanal. Man findet hier Elektronen, die in die Umgebung des Targets bzw. des Projektils (ECC<sup>1</sup>) emittiert werden und sogenannte BE<sup>2</sup>-Elektronen, die bei harten Stößen in Vorwärtsrichtung erzeugt werden und die doppelte Projektilgeschwindigkeit besitzen [SDR 97]. Für kleine Stoßenergien wird der Hauptbeitrag zu totalen inelastischen Wirkungsquerschnitten durch den Elektroneneinfang aufgrund des Tunneleffektes bzw. bei nahen Stößen durch 'Overbarrier'-Prozesse gebildet [BM 92]. Der Elektronentransfer ist durch die Kopplung zwischen Zuständen des Quasimoleküls - zusammengesetzt aus Projektil und Target - bestimmt und somit ein eindeutig nichtklassischer Prozeß. Ist der Einfang mit der Emission elektromagnetischer Strahlung verbunden, so wird er als strahlender Elektroneneinfang (REC<sup>3</sup>) bezeichnet [EM 95]. Für hochrelativistische Stöße gewinnt schließlich die Elektron-Positron Paarerzeugung als neuer Effekt an Bedeutung und muß in die Rechnung einbezogen werden [Ei 90].

In dieser Arbeit werden Ion-Ion-Stöße in einem Energiebereich betrachtet, in dem die inelastischen Prozesse Anregung, Ionisation und Einfang gleichermaßen auftreten können

---

<sup>1</sup>ECC: Electron Capture to the Projectile Continuum

<sup>2</sup>BE: Binary Encounter

<sup>3</sup>REC: Radiative Electron Capture

und somit in Konkurrenz zueinander stehen. Verwendet wird zur Lösung der effektiven Einteilchengleichung die *Basis Generator Methode* (BGM) [LHK 96, KLK 99], die eine entsprechende Beschreibung und Handhabung der Endkanäle erlaubt (Kapitel 2). Zunächst soll die Leistungsfähigkeit dieser Methode an zwei elementaren Ion-Ion Einelektron-Stoßsystemen, dem heteronuklearen System  $p + He^+$  und dem homonuklearen System  $He^{2+} + He^+$ , getestet werden. Im nächsten Schritt wird die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Li-ähnlichen Ionen untersucht. Prinzipiell handelt es sich dabei um Dreielektronensysteme, bei denen jedoch die K-Schalen-Elektronen der Targetionen zu stark gebunden sind, um aktiv am Stoß teilzunehmen. Ihr Einfluß muß in Form eines entsprechenden Abschirmpotentials berücksichtigt werden. Die Variation der Targetladung verdeutlicht systemspezifisches Verhalten, dem nur bedingt Systematik zugeordnet werden kann (Kapitel 3). Das System  $He^{2+} + C^{3+}$  dieser Sequenz soll im Detail betrachtet werden (Kapitel 5). Eine Erhöhung der Projektilladung leitet die Aktivierung der K-Schalen-Elektronen ein, was an Stößen zwischen vollständig ionisierten Projektilen und  $N^{4+}$  verdeutlicht werden kann (Kapitel 4). Im Stoßsystem  $C^{6+} + N^{4+}$  sind schließlich Vielelektronenübergänge möglich, die im einzelnen analysiert und untersucht werden sollen.

In der gesamten Arbeit finden durchgehend atomare Einheiten - charakterisiert durch  $\hbar = m_e = e = 1$  - Verwendung.





# Kapitel 2

## Theorie

Das durch die beiden Kerne und deren Elektronenhüllen gebildete quantenmechanische Vielteilchenproblem der in dieser Arbeit behandelten Ion-Ion-Stöße wird in einem Energiebereich betrachtet, in dem relativistische Effekte vernachlässigt werden können, da die Stoßgeschwindigkeiten klein im Vergleich zur Lichtgeschwindigkeit sind. Darüber hinaus sind die untersuchten Kernladungen klein gegen die Inverse der Feinstrukturkonstanten. Außerdem kann die Bewegung der Kerne klassisch beschrieben werden, weil zwischen ihnen und den Elektronen ein erheblicher Massenunterschied ( $m_{Elektron}/M_{Kern} \approx 1/2000$ ) besteht. Diese Behandlung eines Stoßsystems mit quantenmechanisch beschriebenen Elektronen und klassisch betrachteten Kernen wird semiklassische Näherung (SCA) genannt. Im Rahmen dieser semiklassischen und nichtrelativistischen Betrachtung wird das quantenmechanische Vielteilchenproblem für die in den Coulomb-Feldern der klassisch bewegten Kerne quantenmechanisch beschriebenen Elektronen auf eine zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (TDSE<sup>1</sup>)

$$(\hat{H}(t) - i\partial_t)|\Psi(t)\rangle = 0, \quad |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi_0\rangle \quad (2.1)$$

reduziert. Nimmt man an, daß vor dem Stoß keine Elektronen am Projektil gebunden sind, so setzt sich der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  des Systems

$$\hat{H}(t) = \hat{T} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{\text{ext}}(t) \quad (2.2)$$

$$= \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \Delta_i \right) + \sum_{i < j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^N \left( \frac{-Q_T}{r_i} + \frac{-Q_P}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} \right) \quad (2.3)$$

aus der kinetischen Energie  $\hat{T}$  der Elektronen, der Elektron-Elektron-Wechselwirkung  $\hat{V}_{ee}$  und dem äußeren Potential  $\hat{V}_{\text{ext}}(t)$  zusammen, das aufgrund der klassisch bewegten Kerne explizit zeitabhängig ist. In dieser Gleichung bezeichnet  $Q_P$  die Projektilladung,  $Q_T$  die Targetladung,  $\mathbf{r}_i$  die Koordinaten der  $N$  Elektronen bezüglich des Targetzentrums und  $\mathbf{R}$  die klassische Relativkoordinate zwischen den nuklearen Zentren. Die einzige explizit zeitabhängige Größe ist also der Ortsvektor  $\mathbf{R}(t) = (b, 0, vt)$  des Projektils, der durch die konstante Projektilgeschwindigkeit  $v$  und den Stoßparameter  $b$  bestimmt wird. Die Orientierung dieser beiden Größen zueinander definiert die Streuebene, wobei der Hamilton-Operator (2.3) bezüglich Spiegelungen an dieser Ebene invariant ist.

---

<sup>1</sup>TDSE: Time Dependent Schrödinger Equation

In den folgenden Abschnitten soll nun die Abbildung des Vielelektronenproblems im Rahmen der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie (TDDFT<sup>2</sup>) auf ein effektives Einteilchenproblem, die Lösung der resultierenden Einteilchengleichungen sowie die Extraktion experimentell zugänglicher Observablen beschrieben werden.

## 2.1 Das effektive Einteilchenbild

Die Grundlage der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bildet das Hohenberg-Kohn-Theorem [HK 64], demzufolge sich die Observablen eines wechselwirkenden Vielteilchensystems allein durch die Einteilchendichte  $n$  vollständig, und zwar als Funktionale von  $n$ , bestimmen lassen. Dabei ist bemerkenswert, daß es möglich ist, diese Dichte aus einem Satz von Einteilchengleichungen zu berechnen, ohne daß die Lösung der vollen Schrödinger-Gleichung für das wechselwirkende System notwendig ist. In den sich ergebenden Kohn-Sham-Gleichungen (KS) [KS 65] können die Effekte der Elektron-Elektron-Wechselwirkung mit Hilfe eines multiplikativen effektiven Potentials erfaßt werden. In den beiden Büchern [PY 89, DG 90] ist ein allgemeiner Überblick der Dichtefunktionaltheorie und in den Artikeln [JG 89, Na 98] eine Übersicht von Anwendungen auf den Gebieten der Atom-, Molekül- und Festkörperphysik zu finden.

Für explizit zeitabhängige Probleme werden die Grundaussagen der DFT durch das Runge-Gross-Theorem [RG 84] fundiert, das folgendes besagt: Wenn sich ein System für zwei äußere Potentiale zu einem Anfangszeitpunkt  $t_0$  in einem jeweils gemeinsamen Zustand  $|\Psi_0\rangle$  befindet, sich diese Potentiale um mehr als eine rein zeitabhängige Funktion  $c(t)$  unterscheiden und um den Anfangszeitpunkt  $t_0$  in Taylor-Reihen entwickelbar sind, so haben sie für Zeiten  $t > t_0$  voneinander verschiedene Einteilchendichten zur Folge. Auf diese Weise ist eine injektive und somit umkehrbare Abbildung der Potentiale auf die Menge der  $v$ -darstellbaren Dichten<sup>3</sup> gewährleistet. Bis auf die rein zeitabhängige Funktion  $c(t)$  ist folglich das externe Potential ein eindeutiges Funktional der Dichte. Darüber hinaus kann auch die Vielteilchenwellenfunktion  $|\Psi(t)\rangle$  bis auf eine zeitabhängige Phase als Funktional von  $n$  betrachtet werden, wird das externe Potential doch im Rahmen der TDSE auf  $|\Psi(t)\rangle$  abgebildet. Observablen, die als Erwartungswerte von hermiteschen Operatoren berechnet werden, in denen keine Zeitableitung enthalten ist, sind also ebenfalls eindeutige Funktionale der Dichte, weil sich die Phasen im Bra- und Ketvektor gegenseitig aufheben. Für Übergangsamplituden [UG 97], die beispielsweise in Streuproblemen von großem Interesse sind, gilt die gleiche Aussage. Der Beweis ist allerdings nur für einen festen Anfangszustand  $|\Psi_0\rangle$  möglich, so daß alle Größen implizit von diesem Zustand abhängen. Das ist jedoch im Rahmen dieser Arbeit unproblematisch, da lediglich Stoßsysteme untersucht werden, die sich zum Zeitpunkt  $t_0$  im Grundzustand befinden, der gemäß dem Hohenberg-Kohn-Theorem selbst ein Funktional von  $n$  ist.

Das Runge-Gross-Theorem führt so auf die zeitabhängigen Kohn-Sham-Gleichungen

---

<sup>2</sup>TDDFT: Time Dependent Density Functional Theory

<sup>3</sup>Eine Dichte wird dann als  $v$ -darstellbar bezeichnet, wenn ein externes Potential existiert, das über die Lösung der Schrödinger-Gleichung und eine entsprechende Integration auf eben diese Dichte führt. Die Surjektivität der Abbildung wird dabei durch die Einschränkung der Bildmenge auf  $v$ -darstellbare Dichten gesichert.

(TDKS)

$$i\partial_t\psi_i(\mathbf{r}, t) = \hat{h}(t)\psi_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.4)$$

mit dem Einteilchen-Hamilton-Operator

$$\hat{h}(t) = -\frac{1}{2}\Delta + v_{\text{TDKS}}([n]; \mathbf{r}, t), \quad (2.5)$$

der das externe, multiplikative Potential  $v_{\text{TDKS}}(t)$  enthält, welches ein Funktional der exakten Dichte  $n$  ist. Diese ergibt sich aus den Lösungen der TDKS-Gleichungen zu

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (2.6)$$

Für den Anfangszeitpunkt  $t = t_0$  müssen die Orbitale  $\{\psi_i\}$  so gewählt werden, daß Gleichung (2.6) die Dichte des ungestörten Systems ergibt.

Bis zu dieser Stelle der Abbildung des wechselwirkenden zeitabhängigen Vielteilchenproblems auf ein Einteilchenschema wurden keinerlei Näherungen gemacht. Die durch die Gleichungen (2.4), (2.5) und (2.6) definierte Abbildung ist exakt und darum auch dem zeitabhängigen Hartree-Fock-Formalismus (TDHF) überlegen, der von einer Näherung der Lösung der TDSE (2.1) in Form einer einzelnen Slater-Determinante ausgeht. Problematisch ist die Lösung der TDKS-Gleichungen, da die exakte Form des Funktionals  $v_{\text{TDKS}}[n]$  nicht bekannt ist und so Näherungen, die im folgenden vorgestellt werden sollen, unumgänglich sind.

Um das effektive Elektron-Elektron-Potential zu erhalten, wird von  $v_{\text{TDKS}}$  das externe Potential  $v_{\text{ext}}$  der beiden Kerne abgezogen

$$v_{ee}([n]; \mathbf{r}, t) = v_{\text{TDKS}}([n]; \mathbf{r}, t) - v_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) \quad (2.7)$$

$$v_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = \frac{-Q_T}{r} + \frac{-Q_P}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|}. \quad (2.8)$$

$v_{ee}$  kann in einen stationären und einen zeitabhängigen Anteil zerlegt werden. Der stationäre Beitrag beschreibt dabei das ungestörte atomare System vor dem Stoß mit dem Projektil, der zeitabhängige die Veränderung von  $v_{ee}$  aufgrund der Reaktion der elektronischen Dichte auf das Vorhandensein des Projektilfeldes

$$v_{ee}([n]; \mathbf{r}, t) = v_{ee}([n_0]; \mathbf{r}) + \delta v_{ee}([n]; \mathbf{r}, t), \quad (2.9)$$

wobei mit  $n_0$  die Grundzustandsdichte des ungestörten Targetatoms bezeichnet wird. Werden Stoßsysteme betrachtet, bei denen die Geschwindigkeit des Projektils groß im Vergleich zu typischen Orbitalgeschwindigkeiten ist, so kann der Resonanzbeitrag  $\delta v_{ee}$  in  $v_{ee}$  vernachlässigt werden

$$\delta v_{ee}([n]; \mathbf{r}, t) \approx 0. \quad (2.10)$$

Auch für Stöße mit lediglich einem aktiven Elektron ist diese statische Näherung gerechtfertigt, wohingegen durch den Ansatz (2.10) Prozesse, die von einer Änderung der elektronischen Abschirmung während des Stoßes abhängen, nicht erfaßt werden.

Im nächsten Schritt sollen nun zwei Näherungsmöglichkeiten für das Funktional  $v_{\text{KS}}[n]$  im stationären Fall vorgestellt werden. Ausgangspunkt sind die stationären KS-Gleichungen

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta + v_{\text{KS}}([n_0]; \mathbf{r})\right) \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

die das multiplikative KS-Potential

$$v_{\text{KS}}([n_0]; \mathbf{r}) = v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + v_{ee}([n_0]; \mathbf{r}) \quad (2.12)$$

enthalten. Für die hier betrachtete Situation entspricht das Coulomb-Potential des Targetkerns dem äußeren Potential  $v_{\text{ext}}$ . Die Grundzustandsdichte  $n_0$  des Systems ist dabei durch

$$n_0(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.13)$$

gegeben, wobei die Orbitale  $\{\varphi_i\}$  Lösungen von (2.11) sind. Für die selbstkonsistente Lösung dieser Gleichungen besteht die entscheidende Problematik in der geeigneten Konstruktion einer Näherung für das Austausch-Korrelations- (xc) Potential. Dieses ist als Differenz zwischen  $v_{ee}$  und dem Hartree-Potential  $v_H$  gegeben

$$v_{xc}([n_0]; \mathbf{r}) = v_{ee}([n_0]; \mathbf{r}) - v_H([n_0]; \mathbf{r}) \quad (2.14)$$

$$v_H([n_0]; \mathbf{r}) = \int d^3 r' \frac{n_0(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.15)$$

Gemäß dem Rayleigh-Ritzschen-Variationsprinzip ist  $v_{xc}([n_0]; \mathbf{r})$  die Funktionalableitung der Austausch-Korrelationsenergie  $E_{xc}$  nach der Dichte

$$v_{xc}([n_0]; \mathbf{r}) = \left. \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \right|_{n_0=n(\mathbf{r})} \quad (2.16)$$

$$E_{xc} = T - T_s + W - E_H. \quad (2.17)$$

Diese Energie wiederum ergibt sich als Summe zweier Differenzen. Zum einen der Differenz zwischen der kinetischen Energie  $T$  des wechselwirkenden Vielteilchensystems und der durch die KS-Orbitale definierten kinetischen Energie  $T_s$ , gegeben durch

$$T_s = \sum_{i=1}^N \int d^3 r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2}\Delta\right) \varphi_i(\mathbf{r}), \quad (2.18)$$

und zum anderen der Differenz der vollen elektronischen Wechselwirkungsenergie  $W$  und dem klassischen Hartree-Beitrag

$$E_H = \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.19)$$

Das Hartree-Potential (2.15) erhält man analog als Funktionalableitung von  $E_H$  nach der Dichte.

Die Verwendung der Dichteabhängigkeit von  $E_{xc}$  für das homogene Elektronengas (HEG) als lokale Näherung für das zu untersuchende inhomogene System

$$E_{xc}^{\text{LDA}}[n] = \int d^3r e_{xc}^{\text{HEG}}(n(\mathbf{r})), \quad (2.20)$$

wird als Lokaldichtenäherung (LDA) [KS 65] bezeichnet. Der Austausch- (x) Anteil ergibt sich zu

$$E_x^{\text{LDA}}[n] = -\frac{3}{4} \frac{(3\pi^2)^{1/3}}{\pi} \int d^3r [n(\mathbf{r})]^{4/3} \quad (2.21)$$

$$v_x^{\text{LDA}}(n_0) = \left. \frac{\delta E_x^{\text{LDA}}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \right|_{n_0=n(\mathbf{r})} = -\frac{(3\pi^2 n_0)^{1/3}}{\pi}, \quad (2.22)$$

wobei anzumerken ist, daß für den Korrelations- (c) Beitrag lediglich Interpolationsformeln existieren. Problematisch bei dieser Näherung ist die unvollständige Korrektur der Selbstwechselwirkung. Während im HF-Schema die im Hartree-Term enthaltene Selbstwechselwirkung durch die Addition des Fock-Terms genau korrigiert wird, ist dies infolge der groben Näherung des Fock-Potentials durch das LDA-Potential nicht mehr der Fall. Die Ursache hierfür ist der viel zu schnelle exponentielle Abfall des LDA-Potentials im Vergleich zur  $N/r$ -Asymptotik des Hartree-Terms, so daß sich für das Gesamtpotential nicht die korrekte  $-1/r$ -Asymptotik ergibt. Die Asymptotik ist für Streuprobleme sehr wichtig, bestimmt sie doch die Bindung der äußeren Elektronen. Durch das LDA-Potential wird folglich eine zu große Abschirmung simuliert, was zu einer zu geringen Bindung der äußeren Elektronen führt. Um diese Problematik zu umgehen, wird mit Hilfe der sogenannten Latter-Korrektur [LAT 55] nachträglich die Asymptotik der Potentiale angepaßt

$$v_{xc}^{\text{LDA/L}}(n_0) = \begin{cases} v_{xc}^{\text{LDA}}(n_0) & \text{für } v_{xc}^{\text{LDA}}(n_0) < -1/r \\ -1/r & \text{sonst} \end{cases}. \quad (2.23)$$

Das angesprochene Problem der Selbstwechselwirkungskorrektur kann mit Hilfe der Optimierten Potential Methode (OPM) [TS 76] gelöst werden. Dabei wird die Darstellung der Austausch-Korrelationsenergie als explizites Dichtefunktional aufgegeben und statt dessen ein implizites Dichtefunktional

$$E_{xc} = E_{xc}[\boldsymbol{\varphi}] \quad \text{mit } \boldsymbol{\varphi} = \{\varphi_1, \dots\} \quad (2.24)$$

definiert. Hierbei wurde  $E_{xc}$  als Funktional der KS-Orbitale ausgedrückt, die selbst wieder Funktionale der Einteilchendichte  $n$  sind. Dabei soll, um das KS-Schema weiterhin beizubehalten, das Austausch-Korrelationspotential multiplikativ bleiben und nicht wie in der Hartree-Fock-Methode zu einem nichtlokalen oder orbitalabhängigen Operator werden. Es ergibt sich wie vorher als Funktionalableitung von  $E_{xc}$  nach  $n$ , wobei nun die Kettenregel beachtet werden muß

$$v_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\boldsymbol{\varphi}]}{\delta n(\mathbf{r})} = \int d^3r' \frac{\delta v_{\text{KS}}(\mathbf{r}')}{\delta n(\mathbf{r})} \int d^3r'' \sum_{k=1}^N \frac{\delta \varphi_k^*(\mathbf{r}'')}{\delta v_{\text{KS}}(\mathbf{r}')} \frac{\delta E_{xc}[\boldsymbol{\varphi}]}{\delta \varphi_k^*(\mathbf{r}'')} + c.c. . \quad (2.25)$$

Hierbei wurde mit *c.c.* der zum ersten Summanden konjugiert komplexe Term bezeichnet. Multipliziert man diese Gleichung mit der Inversen des ersten Terms und integriert über die Koordinate von  $v_{xc}$ , so erhält man wegen der Relation

$$\int d^3r \frac{\delta v_{KS}(\mathbf{r}')}{\delta n(\mathbf{r})} \frac{\delta n(\mathbf{r})}{v_{KS}(\mathbf{r}''')} = \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''') \quad (2.26)$$

nach einer Umbenennung der Koordinaten die Integralgleichung

$$\int d^3r' \frac{\delta n(\mathbf{r}')}{\delta v_{KS}(\mathbf{r})} v_{xc}(\mathbf{r}') = \sum_{k=1}^N \int d^3r' \frac{\delta \varphi_k^*(\mathbf{r}')}{\delta v_{KS}(\mathbf{r})} \frac{\delta E_{xc}[\boldsymbol{\varphi}]}{\delta \varphi_k^*(\mathbf{r}')} + c.c. \quad (2.27)$$

Mit der Lösung dieser OPM-Integralgleichung wird ein multiplikatives Austausch-Korrelationspotential zu einem vorgegebenen orbitalabhängigen Funktional  $E_{xc}$  gewonnen. Die Selbstwechselwirkung im Hartree-Term kann nun durch die Verwendung des Standard-Fock-Ausdrucks für den Austauschbeitrag

$$E_x = -\frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \sum_{k,l=1}^N \delta_{m_{s_k}, m_{s_l}} \frac{\varphi_k^*(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{r}) \varphi_l^*(\mathbf{r}') \varphi_k(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.28)$$

erreicht werden, wobei KS-Orbitale einzusetzen sind. Die Deltafunktion spiegelt die Tatsache wieder, daß nur bei gleichgerichtetem Spin des  $k$ -ten und  $l$ -ten Orbitals Austauschwirkungen auftreten. Auf diese Weise wird die korrekte Asymptotik von  $v_x$  garantiert.

Die Lösung der Gleichung (2.27) ist numerisch sehr aufwendig und anspruchsvoll, kann jedoch für sphärische Systeme den Fock-Austausch betreffend mit hoher Genauigkeit durchgeführt werden [EV 93]. Bei der Betrachtung komplizierterer Systeme müssen weitere Näherungen gemacht werden (KLI-Näherung: [KLI 90], Anwendung auf atomare Systeme [KLI 92]).

Einen Überblick über die Entwicklung orbitalabhängiger Funktionale für den Korrelationsanteil  $E_c$  geben die Referenzen [CS 75, GL 94, EFK 98].

## 2.2 Lösung der Einteilchengleichungen

Der in den zu lösenden Einteilchengleichungen bei Vernachlässigung der Resonanz im effektiven Elektron-Elektron-Potential  $v_{ee}$  (2.10) vorkommende Einteilchen-Hamilton-Operator (2.5) kann in einen stationären Targetanteil mit sphärischer Symmetrie und ein zeitabhängiges Projektilpotential zerlegt werden

$$\hat{h}(t) = \hat{h}_0 + \hat{v}(t) \quad (2.29)$$

$$\hat{h}_0 = -\frac{1}{2}\Delta + v_0(r) = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Q_T}{r} + v_{ee}([n_0]; r) \quad (2.30)$$

$$\hat{v}(t) = \frac{-Q_P}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|} \quad (2.31)$$

In diesem Abschnitt sollen einige Methoden angesprochen werden, die zur Lösung der Einteilchengleichungen (2.4) entwickelt worden sind. Der kurze Überblick soll sich dabei auf

rein quantenmechanische Lösungsansätze konzentrieren, klassische Lösungsvarianten im Rahmen von CTMC<sup>4</sup>-Rechnungen [OS 77] werden nicht näher besprochen. Ein Überblick über die gängigen Methoden wird in dem Buch [BM 92] sowie dem älteren Übersichtsartikel [BMS 78] gegeben.

Das Ziel der Lösung der Einteilchengleichungen besteht darin, die Streuwellenfunktion  $|\psi_i(t)\rangle$  nach Amplituden

$$c_f^i = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle f(t) | \psi_i(t) \rangle \quad (2.32)$$

für Übergänge in physikalisch interpretierbare Endkanäle  $|f\rangle$  zu analysieren. Dazu können grundsätzlich zwei Ansätze verfolgt werden:

- perturbative Ansätze
- nichtperturbative Ansätze.

Der Ausgangspunkt für perturbative Methoden besteht in der Idee, die Lösung durch Iteration der zur Schrödinger-Gleichung äquivalenten Operator-Integralgleichung im Wechselwirkungsbild, d.h. der zeitgeordneten Reihe

$$\hat{U}(t_f, t_i) = \hat{T} \exp \left[ -i \int_{t_i}^{t_f} \hat{v}_I(t) dt \right] \quad (2.33)$$

für den Zeitentwicklungsoperator des Systems, zu gewinnen. Die Übergangsamplituden zwischen dem Anfangszustand des Systems zum Zeitpunkt  $t = t_i$  und den interessierenden asymptotischen Zuständen zum Zeitpunkt  $t = t_f$  nach dem Stoß sind dann entsprechend als Matrixelemente dieses Ausdrucks zu berechnen. In erster Ordnung ergibt sich die sogenannte erste Bornsche Näherung (B1)

$$c_f^{iB1} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varphi_f(t) | \hat{v}(t) | \varphi_i(t) \rangle dt . \quad (2.34)$$

Details zur zeitabhängigen Störungstheorie können beispielsweise in den Büchern [Jo 75, EM 95] und dem Übersichtsartikel [BGS 79] gefunden werden.

Der nichtperturbative Bereich der Lösungsmethoden läßt sich in zwei prinzipiell verschiedene Ansätze unterteilen. Zum einen kann die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Hilfe einer finiten Differenzenmethode durch die Diskretisierung von Raum und Zeit gewonnen werden und zum anderen durch die Diskussion von gekoppelten Kanalgleichungen im Rahmen von Basisentwicklungen der Wellenfunktion. Die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung durch eine numerische finite Differenzenapproximation kann zum Beispiel mit Hilfe des Crank-Nicholson-Verfahrens [PTV 92] geschehen. Dabei wird die Unitarität der Schrödinger-Gleichung und somit ihre Zeitumkehrinvarianz in das Diskretisierungsschema eingebaut. Solche Verfahren sind in den Referenzen [SWK 97, KPR 98] auf einem dreidimensionalen kartesischen Gitter durchgeführt worden. Problematisch ist dabei die Endlichkeit des durch die Diskretisierung erfaßten Ortsraumes sowie die endliche Gitterweite. Aus diesem Grund können Anteile der Wellenfunktion an den Gitterrand gelangen und unphysikalische Reflektionen hervorrufen.

---

<sup>4</sup>CTMC: Classical Trajectory Monte Carlo Method

Als Alternative hierzu können im nichtperturbativen Bereich Basisentwicklungen der Wellenfunktion vorgenommen werden. Zur Bestimmung der entsprechenden Entwicklungskoeffizienten ist dann ein System gekoppelter Differentialgleichungen zu lösen. Ein Überblick der gebräuchlichen Methoden ist in den Referenzen [FL 91, JP 81, JW 85] und [KLD 99b] zusammengestellt. Traditionell werden Entwicklungen nach molekularen Orbitalen (MO) oder nach atomaren Orbitalen (AO) vorgenommen, wobei sich die MO-Methode recht gut zur Beschreibung adiabatischer Stöße, die AO-Methode zur Beschreibung diabatischer Stöße eignet. Beide Methoden liefern physikalisch interpretierbare Übergangsamplituden, jedoch ist das Kontinuum, d.h. die Ionisationskanäle, nur schwer zu beschreiben. Diese Problematik wird beispielsweise an der Tatsache deutlich, daß die molekularen Orbitale asymptotisch in gebundene atomare Zustände übergehen und so der Ionisationsanteil bei größeren Abständen von Projektil und Target in Transfer- oder angeregte Targetkanäle eingefangen wird. Es wird versucht, diese Problematik durch die Ergänzung der MO-Basis mit Pseudozuständen zwischen Projektil und Target zu umgehen. In analoger Vorgehensweise werden AO-Basisentwicklungen durch Pseudozustände zu positiven Energien auf beiden Zentren ergänzt, um Ionisationsprozesse zu beschreiben.

Dennoch muß eine Basisentwicklung in jeder praktischen Rechnung endlich bleiben, so daß die Zeitentwicklung der anfangs besetzten Orbitale immer auf einen endlichdimensionalen Teilraum  $\mathcal{A}$  des Hilbert-Raumes beschränkt bleibt und die Kopplung dieses Teilraumes an sein Komplement  $\mathcal{B}$  vernachlässigt werden muß. Da auch in dieser Arbeit eine spezielle Basisentwicklung zur Lösung der Einteilchengleichungen verwendet wird, soll nun die angesprochene Kopplung näher beschrieben werden.

Ausgangspunkt hierfür ist die Betrachtung der Zeitentwicklung des Systems im Wechselwirkungsbild, welches durch eine unitäre Transformation bezüglich des ungestörten Hamilton-Operators  $\hat{h}_0$  (2.30)

$$|\psi_I(t)\rangle = \exp[i\hat{h}_0(t - t_0)]|\psi(t)\rangle \quad (2.35)$$

definiert ist und im folgenden durch den Index  $I$  gekennzeichnet wird. Die entsprechende Schrödinger-Gleichung im Wechselwirkungsbild für jede Anfangsbedingung ergibt sich dann durch Einsetzen dieser Transformation in die Einteilchengleichungen (2.4) mit dem Hamilton-Operator (2.29) zu

$$\hat{O}_I(t)|\psi_I(t)\rangle \equiv (\hat{V}_I(t) - i\partial_t)|\psi_I(t)\rangle \quad (2.36)$$

$$\hat{V}_I(t) = \exp[i\hat{h}_0(t - t_0)]\hat{v}(t)\exp[-i\hat{h}_0(t - t_0)]. \quad (2.37)$$

Durch die Einführung der beiden idempotenten, hermiteschen Projektoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ , die zueinander orthogonal sind, wird dann die Abbildung eines beliebigen Zustandsvektors auf die Modellräume  $\mathcal{A}$  und  $\mathcal{B}$  ermöglicht

$$\hat{B} = \hat{1} - \hat{A} \quad \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (2.38)$$

Mit Hilfe dieser Projektoren kann die Schrödinger-Gleichung im Wechselwirkungsbild in zwei gekoppelte Gleichungen für die beiden Teilraumlösungen  $|\psi_I^A\rangle \equiv \hat{A}|\psi_I\rangle$  und



$|\psi_I^B\rangle \equiv \hat{B}|\psi_I\rangle$  aufgespalten werden

$$\hat{A}\hat{O}_I\hat{A}|\psi_I^A\rangle = -\hat{A}\hat{O}_I\hat{B}|\psi_I^B\rangle \quad (2.39)$$

$$\hat{B}\hat{O}_I\hat{B}|\psi_I^B\rangle = -\hat{B}\hat{O}_I\hat{A}|\psi_I^A\rangle. \quad (2.40)$$

Als formale Lösung der Gleichung für den  $\mathcal{B}$ -Raumanteil (2.40) erhält man dann

$$|\psi_I^B(t)\rangle = -i \int_{t_0}^t \hat{B}_I(t, t') \hat{O}_I(t') |\psi_I^A(t')\rangle dt', \quad (2.41)$$

wobei die Definition

$$\hat{B}(t)\hat{O}_I(t)\hat{B}_I(t, t') = 0 \quad \hat{B}_I(t, t) = \hat{B}(t) \quad (2.42)$$

für den Entwicklungsoperator der Zustände in  $\mathcal{B}$  verwendet wurde. Die Beziehung (2.41) kann nun in die Gleichung (2.39) eingesetzt werden, so daß sich für die Darstellung der Lösung im Teilraum  $\mathcal{A}$

$$\hat{A}\hat{O}_I\hat{A}|\psi_I^A\rangle = \hat{V}_{\text{opt}}|\psi_I^A\rangle \quad (2.43)$$

$$\hat{V}_{\text{opt}}|\psi_I^A\rangle = i\hat{A}(t)\hat{O}_I(t) \int_{t_0}^t \hat{B}_I(t, t') \hat{O}_I(t') |\psi_I^A(t')\rangle dt' \quad (2.44)$$

ergibt. Es ist zu erkennen, daß diese Lösung über den nicht-hermiteschen Operator  $\hat{V}_{\text{opt}}$ , das optische Potential, an den Teilraum  $\mathcal{B}$  gekoppelt ist. Wird nun der Projektor  $\hat{A}$  durch ein orthonormales Funktionensystem  $\{|\zeta_j(t)\rangle, j = 1, \dots, N\}$  definiert, so erhält man mit den Entwicklungskoeffizienten  $c_k(t) = \langle \zeta_k(t) | \psi_I^A(t) \rangle$  aus (2.44) die gekoppelten Kanalgleichungen

$$i\dot{c}_k(t) = \sum_{j=1}^N c_j(t) \langle \zeta_k(t) | \hat{O}_I(t) | \zeta_j(t) \rangle - i \sum_{j=1}^N \int_{t_0}^t c_j(t') \langle \zeta_k(t) | \hat{O}_I(t) \hat{B}_I(t, t') \hat{O}_I(t') | \zeta_j(t') \rangle dt', \quad (2.45)$$

die vollkommen äquivalent zur Schrödinger-Gleichung (2.36) sind. In den vorher beschriebenen Lösungsansätzen endlicher Basisentwicklungen wird der Einfluß des optischen Potentials vollständig vernachlässigt und lediglich die Gleichung

$$\hat{A}\hat{O}_I\hat{A}|\psi_I^A\rangle = 0 \quad (2.46)$$

im vorgegebenen endlichen Modellraum  $\mathcal{A}$  gelöst. Durch möglichst vollständige Basisentwicklungen wird dabei versucht, ein Verschwinden des optischen Potentials zu erreichen. In dieser Arbeit soll eine alternative Strategie verfolgt werden, die auf eine Basisentwicklung hinausläuft, die möglichst optimal den eindimensionalen Unterraum des Hilbert-Raumes enthält, in dem die Lösung der Gleichung (2.36) zu einer vorgegebenen Anfangsbedingung liegt.

### 2.2.1 Die Basis Generator Methode (BGM)

Um eine möglichst optimale Darstellung der Lösung der zeitabhängigen Gleichung (2.36) zu erhalten, muß ein entsprechender Modellraum  $\mathcal{A}$  so konstruiert werden, daß die Kopplung an den nicht erfaßten Komplementärraum  $\mathcal{B}$  über das beschriebene optische Potential minimal wird. Ausgangspunkt dafür sind die gebundenen Eigenfunktionen des ungestörten Hamilton-Operators  $\hat{h}_0$ , in denen für die Zeit  $t \rightarrow -\infty$  die physikalische Anfangsbedingung enthalten ist, da dann das Potential  $\hat{v}(t)$  verschwindet

$$\hat{h}_0|\phi_v^0\rangle = \varepsilon_v|\phi_v^0\rangle = -i\partial_t|\phi_v^0\rangle \quad v = 1, \dots, V. \quad (2.47)$$

Die Transformation ins Wechselwirkungsbild erfolgt gemäß der Gleichung (2.35) mit Hilfe einer Energiephase zu

$$|\phi_v^0\rangle = \exp[i\varepsilon_v(t - t_0)]|\varphi_v^0\rangle. \quad (2.48)$$

Aus diesen Funktionen kann durch sukzessive Anwendung des Schrödinger-Operators  $\hat{O}_I$  das nicht orthonormierte Funktionensystem

$$\begin{aligned} |\phi_v^u\rangle &= (\hat{O}_I(t) - \varepsilon_v)|\phi_v^{u-1}\rangle \\ &= (\hat{O}_I(t) - \varepsilon_v)^u|\phi_v^0\rangle, \quad u = 1, \dots, U, \quad v = 1, \dots, V \end{aligned} \quad (2.49)$$

aufgebaut werden, dessen Funktionen linear unabhängig sind [LHK 96]. Die Basis  $\{|\phi_v^u(t)\rangle\}$  ist durch die sukzessive Anwendung des Schrödinger-Operators, der ja die genaue Form der systemspezifischen zeitabhängigen Wechselwirkung enthält, der jeweiligen Problemstellung angepaßt und spannt einen  $(U+1) \times V$  dimensionalen Teilraum  $\mathcal{A}^{UV}$  des Hilbert-Raumes auf. Da die Zustände nicht orthonormiert sind, taucht im Projektor  $\hat{A}^{UV}$  auf diesen Teilraum  $\mathcal{A}^{UV}$  die Inverse der Überlappmatrix  $\langle\phi_v^u|\phi_{v'}^{u'}\rangle^{-1}$  auf

$$\hat{A}^{UV} = \sum_{uu'=0}^U \sum_{vv'=1}^V |\phi_v^u\rangle\langle\phi_{v'}^{u'}|\phi_v^u\rangle^{-1}\langle\phi_{v'}^{u'}|. \quad (2.50)$$

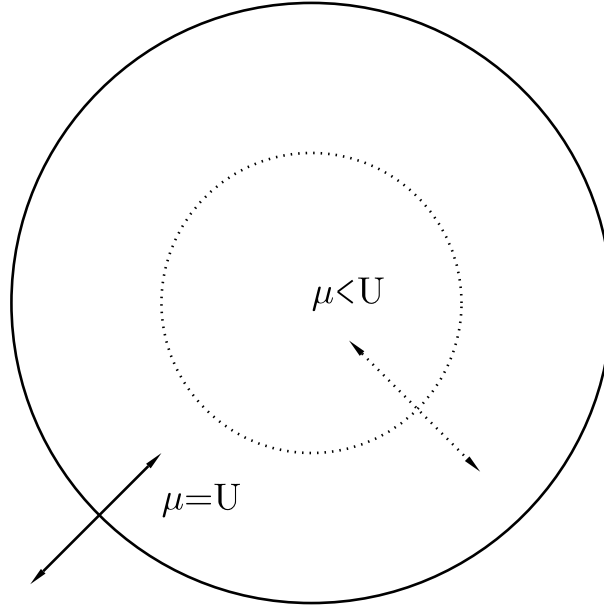
Setzt man den Projektor  $\hat{A}^{UV}$  in die Bewegungsgleichung (2.43) für einen beliebigen Modellraum ein, so nehmen die gekoppelten Kanalgleichungen in  $\mathcal{A}^{UV}$  die Gestalt

$$\begin{aligned} i \sum_{u=0}^U \sum_{v=1}^V \dot{c}_v^u(t)\langle\phi_{v'}^{u'}|\phi_v^u\rangle &= \sum_{u=0}^U \sum_{v=1}^V c_v^u(t)\langle\phi_{v'}^{u'}|\hat{O}_I(t)|\phi_v^u\rangle \\ &\quad - i \sum_{u=0}^U \sum_{v=1}^V \int_{t_0}^t c_v^u(t')\langle\phi_{v'}^{u'+1}(t)|\hat{B}_I^{UV}(t, t')|\phi_v^{u+1}(t')\rangle dt' \end{aligned} \quad (2.51)$$

an. Für die Kopplung eines Basiszustandes an den Komplementärraum  $\mathcal{B}^{UV}$  ist also die Projektion

$$\hat{B}^{UV}|\phi_v^{u+1}\rangle = (\hat{1} - \hat{A}^{UV})|\phi_v^{u+1}\rangle = \begin{cases} 0 & \text{falls } u \leq U-1 \\ |\phi_v^{u+1}\rangle & \text{falls } u \geq U \end{cases} \quad (2.52)$$

ausschlaggebend. Wie in Abbildung 2.1 verdeutlicht wird, können die Zustände mit  $u < U$  nur innerhalb des Modellraumes  $\mathcal{A}^{UV}$  koppeln, wohingegen Kopplungen zwischen  $\mathcal{A}^{UV}$



**Abbildung 2.1:** Darstellung des Kopplungsschemas für den optimierten Darstellungsraum: Der endliche Modellraum  $\mathcal{A}^{UV}$  wird durch den durchgezogenen Kreis symbolisiert, dessen Komplementärraum  $\mathcal{B}^{UV}$  befindet sich außerhalb dieses Kreises. Die Pfeile weisen auf mögliche Kopplungen für die verschiedenen Ordnungen  $u$  hin.

und dem komplementären Raum  $\mathcal{B}^{UV}$  über das optische Potential nur für Zustände der höchsten Ordnung  $u = U$  möglich sind. Werden also während der Zeitentwicklung eines zu betrachtenden Systems diese Zustände nicht besetzt, so verschwindet die Kopplung an  $\mathcal{B}^{UV}$  und die gesamte Lösung der Schrödinger-Gleichung (2.36) ist in  $\mathcal{A}^{UV}$  exakt enthalten. Aus diesem Grund kann die Besetzung der Zustände dieses äußeren Unterraums mit  $u = U$  als Maß für die Konvergenz der Basis angesehen werden.

Um einen Eindruck von der konkreten Struktur der auf diese Weise konstruierten Funktionen zu gewinnen, sollen nun die Konstruktionsvorschriften für die Zustände der ersten Ordnungen  $u = 1, 2, 3$  explizit ausgeschrieben werden. Gemäß der Vorschrift (2.49) ergeben sich diese zu

$$|\phi_v^1\rangle = \hat{V}_I(t)|\phi_v^0\rangle \quad (2.53)$$

$$|\phi_v^2\rangle = (\hat{V}_I(t)^2 - i\partial_t\hat{V}_I(t))|\phi_v^0\rangle \quad (2.54)$$

$$|\phi_v^3\rangle = (\hat{V}_I(t)^3 - 3i\hat{V}_I(t)\partial_t\hat{V}_I(t) - \partial_t^2\hat{V}_I(t))|\phi_v^0\rangle. \quad (2.55)$$

Es ist zu erkennen, daß sie in  $u$ -ter Ordnung durch Anwendung eines Polynoms  $u$ -ten Grades im Operator  $\hat{V}_I$  gebildet werden. Wie in Referenz [LHK 96] für die allgemeine Konstruktion dieser Polynome bewiesen wurde, enthalten die auftretenden Zeitableitungen von  $\hat{V}_I$  im Wechselwirkungsbild Kommutatorterme mit  $\hat{h}_0$

$$\begin{aligned} \partial_t\hat{V}_I(t) &= \partial_t \left( \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \hat{v}(t) \exp[-i\hat{h}_0(t-t_0)] \right) \\ &= \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \left( i[\hat{h}_0, \hat{v}(t)] + \partial_t\hat{v}(t) \right) \exp[-i\hat{h}_0(t-t_0)] \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned}
\partial_t^2 \hat{V}_I(t) &= \partial_t \left( \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \left( i[\hat{h}_0, \hat{v}(t)] + \partial_t \hat{v}(t) \right) \exp[-i\hat{h}_0(t-t_0)] \right) \\
&= \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \left( -[\hat{h}_0, [\hat{h}_0, \hat{v}(t)]] + 2i[\hat{h}_0, \partial_t \hat{v}(t)] + \partial_t^2 \hat{v}(t) \right) \\
&\quad \times \exp[-i\hat{h}_0(t-t_0)].
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Eine explizite Auswertung dieser Vielfachkommutatoren mit dem Einteilchenoperator  $\hat{h}_0 = -\frac{1}{2}\Delta + \hat{v}_0$  und Berücksichtigung der Eigenwertgleichung (2.47) ergibt schließlich

$$|\phi_v^1\rangle = \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \hat{v}(t) |\varphi_v^0\rangle \tag{2.58}$$

$$|\phi_v^2\rangle = \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \left( -\frac{1}{2}\Delta \hat{v}(t) + \hat{v}(t)^2 - i\partial_t \hat{v}(t) - \nabla \hat{v}(t) \cdot \nabla \right) |\varphi_v^0\rangle \tag{2.59}$$

$$\begin{aligned}
|\phi_v^3\rangle &= \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] \left( \frac{1}{4}\Delta^2 \hat{v}(t) - (\nabla \hat{v}(t))^2 - \frac{3}{2}\hat{v}(t)\Delta \hat{v}(t) + i\partial_t \Delta \hat{v}(t) + \hat{v}(t)^3 \right. \\
&\quad - 3\hat{v}(t)i\partial_t \hat{v}(t) - \partial_t^2 \hat{v}(t) + \nabla^3 \hat{v}(t) \cdot \nabla - 3\hat{v}(t)\nabla \hat{v}(t) \cdot \nabla + 2i\partial_t \nabla \hat{v}(t) \cdot \nabla \\
&\quad \left. + \nabla(\nabla \hat{v}(t) \cdot \nabla) \cdot \nabla + \nabla \hat{v}(t) \cdot \nabla \hat{v}_0 \right) |\varphi_v^0\rangle.
\end{aligned} \tag{2.60}$$

Der Übergang ins von nun an verwendete Schrödinger-Bild erfolgt durch die Transformation

$$|\phi_v^u\rangle = \exp[i\hat{h}_0(t-t_0)] |\varphi_v^u\rangle, \quad u = 0, \dots, U. \tag{2.61}$$

Es ist offensichtlich, daß die Struktur dieser Basiszustände  $|\varphi_v^u\rangle$  mit steigender Ordnung  $u$  immer komplizierter wird und eine explizite Konstruktion über die ersten Ordnungen hinaus nicht möglich ist.

Im Rahmen der *Basis Generator Methode* (BGM) wird deshalb versucht, eine einfachere Konstruktionsvorschrift zur Definition eines neuen Modellraumes  $\mathcal{R}^{MN}$  zu finden, in dem der Modellraum  $\mathcal{A}^{UV}$  vollständig enthalten ist und somit auch in diesem Raum die gesamte Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen liegt. Die Konstruktion des neuen Basissatzes  $\{|\chi_\nu^\mu(t)\rangle, \nu = 1, \dots, N, \mu = 0, \dots, M\}$  erfolgt dabei durch eine Abbildung  $X$ , die nur die Potenzen des Potentials  $\hat{v}(t)$  enthält

$$|\chi_\nu^\mu(t)\rangle = X(\hat{v}(t))^\mu |\chi_\nu^0\rangle \tag{2.62}$$

und die schon formulierte Bedingung

$$\mathcal{A}^{UV} \subseteq \mathcal{R}^{MN} \equiv \left[ |\chi_\nu^\mu(t)\rangle, \nu = 1, \dots, N, \mu = 0, \dots, M \right] \tag{2.63}$$

erfüllt. Dabei sind die Entwicklungsgrenzen  $M(U, V)$  und  $N(U, V)$  als Funktion der ursprünglichen Grenzen  $(U, V)$  zu bestimmen. Wie in Referenz [KLG 99] gezeigt wird, sind zur Erfüllung der Bedingung (2.63) zwei Anforderungen an die Basis  $\{|\chi_\nu^\mu(t)\rangle, \nu = 1, \dots, N, \mu = 0, \dots, M\}$  zu stellen. Zum einen müssen die Eigenzustände  $|\varphi_v^0\rangle$ , die ja die physikalische Anfangsbedingung beschreiben, in  $\mathcal{R}^{MN}$  enthalten sein

$$|\Psi_0\rangle = |\Psi(t_0)\rangle \in \mathcal{A}^{0V} \subseteq \mathcal{R}^{0N}, \tag{2.64}$$

zum anderen müssen sich die Zustände  $|\chi_\nu^\mu\rangle$  unter der Abbildung  $\hat{h}(t) - i\partial_t$  strukturell reproduzieren. Damit ist gemeint, daß eine Anwendung von  $\hat{h}(t) - i\partial_t$  auf einen Basiszustand  $|\chi_\nu^\mu\rangle$  wiederum eine endliche Linearkombination  $\mathcal{L}_{\mu\nu}$  von Basiszuständen  $\{|\chi_\lambda^\kappa(t)\rangle\}$

erzeugen muß

$$(\hat{h}(t) - i\partial_t)|\chi_\nu^\mu(t)\rangle = \mathcal{L}_{\mu\nu}(\{|\chi_\lambda^\kappa(t)\rangle\}) \in \left[|\chi_\lambda^\kappa(t)\rangle, \lambda = 1, \dots, L, \kappa = 0, \dots, K\right]. \quad (2.65)$$

Dabei gilt  $L = L(\mu, \nu)$  und  $K = K(\mu, \nu)$  und im allgemeinen auch  $L > \nu$  und  $K > \mu$ . Der Beweis, daß zur Erfüllung der Bedingung (2.63) die Gleichungen (2.64) und (2.65) hinreichend sind, erfolgt induktiv nach dem Schema

$$\begin{aligned} |\varphi_n^0\rangle &\stackrel{(2.64)}{=} \mathcal{L}(|\chi\rangle) \\ |\varphi_n^1\rangle &= (\hat{h}(t) - i\partial_t)|\varphi_n^0\rangle = (\hat{h}(t) - i\partial_t)\mathcal{L}(|\chi\rangle) \\ &= \mathcal{L}\left((\hat{h}(t) - i\partial_t)|\chi\rangle\right) \stackrel{(2.65)}{=} \mathcal{L}(\mathcal{L}(|\chi\rangle)) = \mathcal{L}(|\chi\rangle) \\ &\vdots \\ \mathcal{A}^{UV} &\subseteq \mathcal{R}^{MN}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Die Formulierung dieser Bedingungen für die Auffindung eines neuen Modellraumes  $\mathcal{R}^{MN}$ , der den alten Modellraum  $\mathcal{A}^{UV}$  vollständig enthält, ist unabhängig von der Form der Wechselwirkung in der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.36). Jedoch muß wechselwirkungsspezifisch eine Basis gefunden werden, die die Bedingungen (2.64) und (2.65) erfüllt. Ist dies geschehen, so kann der Indexbereich dieser Basis nach (2.66) so bestimmt werden, daß die vollständige Einbettung von  $\mathcal{A}^{UV}$  in  $\mathcal{R}^{MN}$  gewährleistet ist. In Referenz [KLK 99] wird gezeigt, daß für Streuprobleme, in denen Projektil- und Targetpotential coulombartig sind, eine solche Basis  $\{|\chi_\nu^\mu(t)\rangle\}$  gefunden werden kann. Sie lautet

$$\chi_{nlm}^0(\mathbf{r}, \xi, \epsilon_T) = r_{\epsilon_T}^{n-1} \exp(-\xi r_{\epsilon_T})(r/r_{\epsilon_T})^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2.67)$$

$$\chi_{nlm}^\mu(\mathbf{r}, t, \xi, \epsilon_T, \epsilon_P) = (W_P(t, \epsilon_P))^\mu \chi_{nlm}^0(\mathbf{r}, \xi, \epsilon_T) \quad (2.68)$$

mit der Definition  $r_{\epsilon_T} = [r^2 + \epsilon_T^2]^{1/2}$  und den Indexbereichen

$$\begin{aligned} l, \mu, L, N, M &\in \mathcal{N}_0, & m, n, N_z &\in \mathcal{Z} \\ -l \leq m \leq l \leq L, & & l + N_z < n \leq N \\ N_z \leq 0 \leq L \leq N - 1, & & 0 \leq \mu \leq M. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Hierbei wurden die Coulomb-Potentiale der beiden Zentren durch die regularisierten Ausdrücke

$$\begin{aligned} -\frac{Q_T}{r} &\rightarrow -\frac{Q_T}{[r^2 + \epsilon_T^2]^{1/2}} \equiv -Q_T W_T(\epsilon_T) \\ -\frac{Q_P}{r_P(t)} &\rightarrow -\frac{Q_P}{[r_P^2(t) + \epsilon_P^2]^{1/2}} \equiv -Q_P W_P(t, \epsilon_P) \end{aligned} \quad (2.70)$$

ersetzt. Der Abstand des Elektrons vom Projektil ist mit  $r_P(t) = |\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|$  definiert worden. Die auftretenden endlichen Konstanten  $\epsilon_T$  und  $\epsilon_P$  sind Regularisierungsparameter und können als endliche Kernradien interpretiert werden. Die Regularisierung ist notwendig, um andernfalls auftretende Divergenzen zu vermeiden. Unter Verwendung dieser

Definitionen setzt sich der Hamilton-Operator des coulombartigen Eielektronensystems folgendermaßen zusammen

$$\hat{h}(t) = -\frac{1}{2}\Delta - Q_T W_T(\epsilon_T) - Q_P W_P(t, \epsilon_P) . \quad (2.71)$$

Die so gefundene BGM-Basis für coulombartige Systeme ist unabhängig von der Projektilladung und -geschwindigkeit, hängt aber über die Abschirmkonstante  $\xi$ , die durch die physikalische Anfangsbedingung bestimmt wird, implizit von der Targetladung ab. Per Definition ist dabei sichergestellt, daß diese Basis das Ziel der BGM erfüllt, den eindimensionalen Teilraum des Hilbert-Raums aufzuspannen, der durch die Lösung der Schrödinger-Gleichung zu einer gegebenen Anfangsbedingung definiert wird.

### 2.2.2 Numerische Umsetzung der BGM

Bei der bisherigen Umsetzung des BGM-Konzepts wurden einige Näherungen vorgenommen, die von der im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen exakten Konstruktionsvorschrift für die Basisfunktionen abweichen, um den numerischen Aufwand zu reduzieren. Dabei wurde zunächst die generierende Basis  $\{\chi_{nlm}^0\}$  (Gleichung (2.67)) durch die atomaren Eigenfunktionen des ungestörten Targetatoms  $\{\varphi_{nlm}^0\}$  ersetzt

$$\chi_{nlm}^0(\mathbf{r}, \xi, \epsilon_T) \rightarrow \varphi_{nlm}^0(\mathbf{r}) \quad (2.72)$$

und die Konstruktionsvorschrift (2.68) auf diese Funktionen angewendet

$$\chi_{nlm}^\mu(\mathbf{r}, t, \epsilon_P) = (W_P(t, \epsilon_P))^\mu \varphi_{nlm}^0(\mathbf{r}) . \quad (2.73)$$

Formal werden durch diesen Schritt die Bedingungen (2.63) und (2.65) verletzt, wohingegen die Bedingung (2.64) nun natürlich explizit von der generierenden Basis erfüllt wird. Weiterhin hat sich gezeigt, daß es aufgrund numerischer Anforderungen notwendig ist, den Parameter nicht wie anzunehmen  $\epsilon_P \ll 1$  zu wählen, sondern mit dem Wert  $\epsilon_P \approx 1$  zu arbeiten.

Konvergenzuntersuchungen für diese Basis [LHK 96] haben ergeben, daß sich sowohl mit wachsender Basisgröße (Index  $N$ ) als auch mit der Hinzunahme höherer Potentialpotenzen (Index  $M$ ) ein entsprechendes Konvergenzverhalten einstellt. Allerdings zeigt sich, daß erst die Hinzunahme höherer Potenzen von  $W_P$  die Beschreibung des Zweizentrencharakters eines Systems möglich macht. Diese Konvergenz der genäherten BGM-Basis mit steigender Ordnung  $M$  kann durch eine weitere Modifikation des Ansatzes (2.73) beschleunigt werden

$$\chi_{nlm}^\mu(\mathbf{r}, t, \epsilon_P, \alpha) = (W_P(t, \epsilon_P))^\mu (1 - \exp(-\alpha r_{P\epsilon}))^\mu \varphi_{nlm}^0(\mathbf{r}) , \quad (2.74)$$

der zur Simulation der exponentiellen Asymptotik atomarer Projektilezustände dient und eine verbesserte Darstellung solcher Zustände bewirkt. In dieser Gleichung wurde die Abkürzung  $r_{P\epsilon} = [r_P^2(t) + \epsilon_P^2]^{1/2}$  verwendet. Die Wirkung des Zusatzterms wird offensichtlich, wenn man ihn gemäß dem Binomischen Lehrsatz entwickelt

$$(1 - \exp(-\alpha r_{P\epsilon}))^\mu = \sum_{\lambda=0}^{\mu} \binom{\mu}{\lambda} (-1)^\lambda \exp(-\alpha \lambda r_{P\epsilon}) . \quad (2.75)$$

In der  $u$ -ten Ordnung der Basis werden folglich Exponentialfaktoren zu den Abschirmkonstanten  $\alpha$  bis  $\alpha \cdot \mu$  erzeugt, die die Darstellung der exponentiellen Asymptotik unterstützen und somit eine beschleunigte Darstellung bewirken. Die Verwendung dieses Zusatzterms  $(1 - \exp(-\alpha r_{P_e}))^\mu$  macht es gleichzeitig möglich, den Regularisierungsparameter  $\epsilon_P$  beliebig klein zu wählen, da die auftretenden Divergenzen durch den Zusatzterm selbst beseitigt werden. Der Parameter kann deshalb in der Praxis  $\epsilon_P = 0$  gesetzt werden, so daß für die Konstruktionsvorschrift der Basis schließlich

$$\begin{aligned} \chi_{nlm}^\mu(\mathbf{r}, t, \alpha) &= \left( \frac{1}{r_P} (1 - \exp(-\alpha r_P)) \right)^\mu \varphi_{nlm}^0(\mathbf{r}) \\ &\equiv \left( \tilde{W}_P(t, \alpha) \right)^\mu \varphi_{nlm}^0(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.76)$$

übrigbleibt. Für den in dieser Formulierung auftretenden Parameter  $\alpha$  wurde üblicherweise  $\alpha = 1$  gewählt.

Um den Rechenaufwand bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung in dieser Basis (2.76) weiter zu reduzieren, kann die Invarianz des elektronischen Hamilton-Operators bezüglich Spiegelungen an der Streuebene ausgenutzt werden. Dabei werden statt der üblichen komplexen, symmetrieangepaßte reelle Kugelflächenfunktionen für die Winkelanteile in den Basisfunktionen verwendet

$$\{Y_l^m(\theta, \varphi), -l \leq m \leq l\} \rightarrow \{P_l^m(\cos \theta) \cos(m\varphi), P_l^m(\cos \theta) \sin(m\varphi), 0 \leq m \leq l\}. \quad (2.77)$$

Wegen der angesprochenen Spiegelsymmetrie tritt während der Zeitentwicklung des Systems keine Mischung zwischen den Anteilen der Basis mit  $\cos(m\varphi)$  ('gerader' Anteil) und denen mit  $\sin(m\varphi)$  ('ungerader' Anteil) auf. Für einen Anfangszustand mit gegebener Symmetrie ist es folglich ausreichend, die Zeitentwicklung in dem entsprechenden 'geraden' oder 'ungeraden' Teilraum zu verfolgen<sup>5</sup>.

Zur Stabilisierung der Numerik und einer möglichst direkten Interpretierbarkeit der Ergebnisse werden die Funktionen der Ordnungen  $\mu \geq 1$  in der Basis (2.76) orthogonal zu den atomaren Eigenfunktionen  $\{\varphi_{nlm}^0\}$  konstruiert. Eine solche Orthogonalisierung kann in allgemeiner Form durch den Polynomansatz

$$|\tilde{\chi}_v^\mu\rangle = \sum_{\mu'=0}^{\mu} (\tilde{W}_P)^{\mu'} \sum_{v'=1}^V a_{v'v}^{\mu'\mu} |\varphi_{v'}^0\rangle \quad (2.78)$$

erreicht werden, wobei die Quantenzahlen  $nlm$  wieder durch den Multiindex  $v$  abgekürzt wurden. Für die angesprochene spezielle Orthogonalisierung werden diese Koeffizienten  $a_{v'v}^{\mu'\mu}$  im Anhang A.1 explizit bestimmt.

Die Lösung der Einteilchengleichungen (2.4) mit dem Hamilton-Operator (2.29) erfolgt dann durch Entwicklung der Einteilchenorbitale  $|\psi_i(t)\rangle$  nach der Basis (2.78)

$$|\psi_i(t)\rangle = \sum_{\mu=0}^M \sum_{v=1}^V c_{\mu v}^i(t) |\tilde{\chi}_v^\mu\rangle \quad (2.79)$$

<sup>5</sup>So setzt sich beispielsweise die Wellenfunktion  $\varphi_{2p_{\pm 1}}$  folgendermaßen aus einem 'geraden' Anteil  $\varphi_{2p_{1g}}$  und einem 'ungeraden' Anteil  $\varphi_{2p_{1u}}$  zusammen:  $\varphi_{2p_{\pm 1}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{2p_{1g}} \pm \varphi_{2p_{1u}})$ . Zustände mit  $m = 0$  besitzen lediglich einen 'geraden' Anteil.

und der Lösung der sich daraus ergebenden gekoppelten Kanalgleichungen

$$i \sum_{\mu=0}^M \sum_{\nu=1}^V \dot{c}_{\mu\nu}^i(t) \langle \tilde{\chi}_w^\lambda | \tilde{\chi}_\nu^\mu \rangle = \sum_{\mu=0}^M \sum_{\nu=1}^V c_{\mu\nu}^i(t) \langle \tilde{\chi}_w^\lambda | \hat{h}(t) - i\partial_t | \tilde{\chi}_\nu^\mu \rangle \quad (2.80)$$

für alle anfänglich besetzten Zustände. Da keine vollständige Orthogonalisierung der Basis (2.78) vorgenommen wurde, treten in dieser Gleichung neben den Wechselwirkungsmatrixelementen auf der rechten Seite auch Überlappmatrixelemente auf der linken Seite auf. Alle diese Matrixelemente können aus drei Typen von Grundmatrixelementen aufgebaut werden, die in Anhang A.2 zusammengefaßt sind. Details zur Lösung von (2.80) sind in der Referenz [Ki 99] zu finden.

Die in diesem Abschnitt beschriebene numerische Umsetzung des BGM-Konzeptes wurde bereits auf Ion-Atom-Stöße [KGL 97, KGL 98, KLD 99a] und Ion-Molekül-Stöße [EEG 99] angewendet. In dieser Arbeit sollen mit Hilfe der beschriebenen Methode Ion-Ion-Stöße untersucht werden [KKA 99].

## 2.3 Berechnung der Observablen

Wie schon in Abschnitt 2.2 beschrieben wurde, sind im Rahmen der TDFT auf der Grundlage des Runge-Gross-Theorems alle Observablen allein durch die zeitabhängige Dichte bestimmt. Da der funktionale Zusammenhang zwischen der Dichte und den meisten interessierenden Observablen jedoch nicht bekannt ist, sind weitere vereinfachende Annahmen bei der Auswertung der Einteilchenlösungen und der Interpretation dieser Ergebnisse unumgänglich.

Um Aussagen über die einzelnen elektronischen Prozesse wie Einfang, Ionisation und Verbleib am Target machen zu können, kann man beispielsweise die Entwicklung der Gesamtdichte im Ortsraum betrachten. Ist diese nach dem Stoß klar in Teildichten zerlegbar, die diesen Prozessen zugeordnet werden können, d.h. die Prozesse entsprechen eindeutig voneinander getrennten Raumbereichen, so kann die mittlere Elektronenzahl am Projektil, im Kontinuum und am Target als Integral der Dichte über das jeweilige Gebiet berechnet werden. Diese Aufteilung des Ortsraums ist jedoch in der Praxis nicht möglich, da die Zeitentwicklung bei einer endlichen Zeit nach dem Stoß angehalten werden muß. Ionisation in der Nähe des Targetkerns oder auch im Bereich des Projektilzentrums kann dann noch nicht eindeutig von Anregung oder Einfang unterschieden werden.

Man umgeht diese Problematik, wenn die einzelnen Prozesse hinsichtlich einer Kanaldarstellung der Dichte analysiert werden. Dies ist streng genommen nur dann korrekt, wenn sich das Projektil nach dem Durchdringen der Wechselwirkungszone auf seiner klassischen Bahn wieder vom Targetzentrum entfernt hat ( $t \rightarrow \infty$ ). Wie schon weiter oben erwähnt worden ist, muß in der Praxis jedoch die Propagation der gekoppelten Kanalgleichungen (2.80) bei einer endlichen Zeit  $t = t_f$  gestoppt werden, bis zu der sich die jeweiligen Observablen ausreichend stabilisiert haben. Die zugehörigen Einteilchen-Übergangswahrscheinlichkeiten  $p_f^i$  ergeben sich dann als Betragsquadrat der Projektion der Einteilchenlösung  $\psi_i(t_f)$  auf eine Kanalfunktion  $|f\rangle$ , deren Form von den Randbedingungen des Streuproblems bestimmt wird

$$p_f^i = |c_f^i(t_f)|^2 = |\langle f(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle|^2. \quad (2.81)$$



Um Aussagen über Einfang oder Targetanregungen zu erhalten, sind hierfür die asymptotischen Lösungen der Schrödinger-Gleichung zu verwenden. Dabei ist zu beachten, daß das Coulomb-Potential des jeweils anderen Zentrums aufgrund seiner Langreichweitigkeit die Phasen dieser atomaren Zustände beeinflusst. Betrachtet man die Zeitableitung der Übergangsamplituden und nutzt die Gleichungen (2.4) für  $|\psi_i\rangle$  bzw. (2.29) für  $\hat{h}(t)$  aus, so zeigt sich, daß sie tatsächlich zeitlich konvergieren

$$\begin{aligned} \dot{c}_f^i &= \partial_t \langle f(t) | \psi_i(t) \rangle \\ &= \langle \partial_t f(t) | \psi_i(t) \rangle + \langle f(t) | \partial_t \psi_i(t) \rangle \\ &= -i \underbrace{\langle (\hat{h}(t) - i\partial_t) f(t) | \psi_i(t) \rangle}_{=0 \text{ für } t \rightarrow \infty}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Wie zu erkennen ist, verschwindet der Bravektor in der letzten Zeile von Gleichung (2.82) für  $t \rightarrow \infty$  nur dann, wenn die asymptotischen Lösungen der Schrödinger-Gleichung eingesetzt werden. Folglich werden die Übergangsamplituden nicht stabil, da eine Restwechselwirkung auftritt.

In dieser Arbeit werden dennoch ungestörte atomare Orbitale auf den beiden Zentren zur Auswertung der Einteilchenlösungen verwendet, da im numerischen Sinne eine zeitliche Konvergenz der Amplituden gewährleistet werden kann. Zur Analyse des Targetanteils, d.h. zur Ermittlung von Anregungs-Übergangswahrscheinlichkeiten, werden die Eigenfunktionen des ungestörten Hamilton-Operators  $\{|\varphi_v^0\rangle, v = 1, \dots, V\}$  verwendet, die gleichzeitig als Näherung für die generierende BGM-Basis (siehe Gleichung (2.76)) dienen. Da diese Zustände durch den Polynomansatz (2.78) orthogonal zur restlichen Basis konstruiert wurden, können die Entwicklungskoeffizienten

$$c_{0v}^i(t_f) = \langle \varphi_v^0 | \psi_i(t_f) \rangle \quad (2.83)$$

als Amplituden für elastische Streuung und Einteilchenanregungen interpretiert werden. Zur analogen Ermittlung der zum Elektroneneinfang gehörenden Amplituden ist die Projektion der Einteilchenlösungen auf bewegte Projektilorbitale zu berechnen, die sich wiederum als Lösung der Einteilchengleichungen

$$i\partial_t \varphi_k^P(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Q_P}{r_P} \right) \varphi_k^P(\mathbf{r}, t) \quad (2.84)$$

ergeben. In Anhang A.3 findet man die Einzelheiten zur Durchführung der Integration bei der Berechnung der Übergangsamplituden

$$c_k^{iP}(t_f) = \langle \varphi_k^P(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle. \quad (2.85)$$

Um auch noch den Ionisationsanteil zu erhalten, werden die einzelnen Beiträge der Einteilchenlösungen, d.h. Projektilanteil (Einfang), Kontinuumsanteil (Ionisation) und Targetanteil (elastische Streuung und Anregung), durch die zueinander orthogonalen Projektoren  $\hat{P}$ ,  $\hat{I}$  und  $\hat{T}$  beschrieben

$$\hat{T}\hat{P} = \hat{T}\hat{I} = \hat{P}\hat{I} = 0, \quad (2.86)$$

die auch die Vollständigkeitsrelation im Einteilchen-Hilbert-Raum erfüllen. Gemäß der obigen Beschreibung dienen ungestörte atomare Zustände sowohl auf dem Projektil ( $|\varphi_k^P\rangle$ )

als auch auf dem Target ( $|\varphi_v^0\rangle$ ) der Beschreibung von gebundenen Anteilen auf beiden Zentren. Die Projektoren  $\hat{P}$  und  $\hat{T}$  sind also durch die Beziehungen

$$\hat{P} = \sum_{k=1}^K |\varphi_k^P\rangle \langle \varphi_k^P| \quad (2.87)$$

$$\hat{T} = \sum_{v=1}^V |\varphi_v^0\rangle \langle \varphi_v^0| \quad (2.88)$$

definiert. Unter der Voraussetzung, daß hierbei alle wesentlich beitragenden gebundenen Kanäle durch die endlichen Summen mit den Indices  $K$  und  $V$  erfaßt werden, bleibt für den Kontinuumsanteil der Projektor

$$\hat{I} = \hat{1} - \hat{T} - \hat{P} \quad (2.89)$$

übrig. Die Auftrennung der Einteilchenlösungen in die entsprechenden drei Anteile ist folglich durch

$$\begin{aligned} |\psi_i(t_f)\rangle &= (\hat{T} + \hat{P} + \hat{I}) |\psi_i(t_f)\rangle \\ &\equiv |\psi_i^T\rangle + |\psi_i^P\rangle + |\psi_i^I\rangle \end{aligned} \quad (2.90)$$

gegeben. Für die Ionisationswahrscheinlichkeit  $p_i^{\text{ion}}$  des betrachteten Eielektronensystems findet man den Erwartungswert

$$\begin{aligned} p_i^{\text{ion}} &= \langle \psi_i(t_f) | \hat{1} - \hat{T} - \hat{P} | \psi_i(t_f) \rangle \\ &= 1 - \sum_{v=1}^V |c_{0v}^i(t_f)|^2 - \sum_{k=1}^K |c_k^{iP}(t_f)|^2 . \end{aligned} \quad (2.91)$$

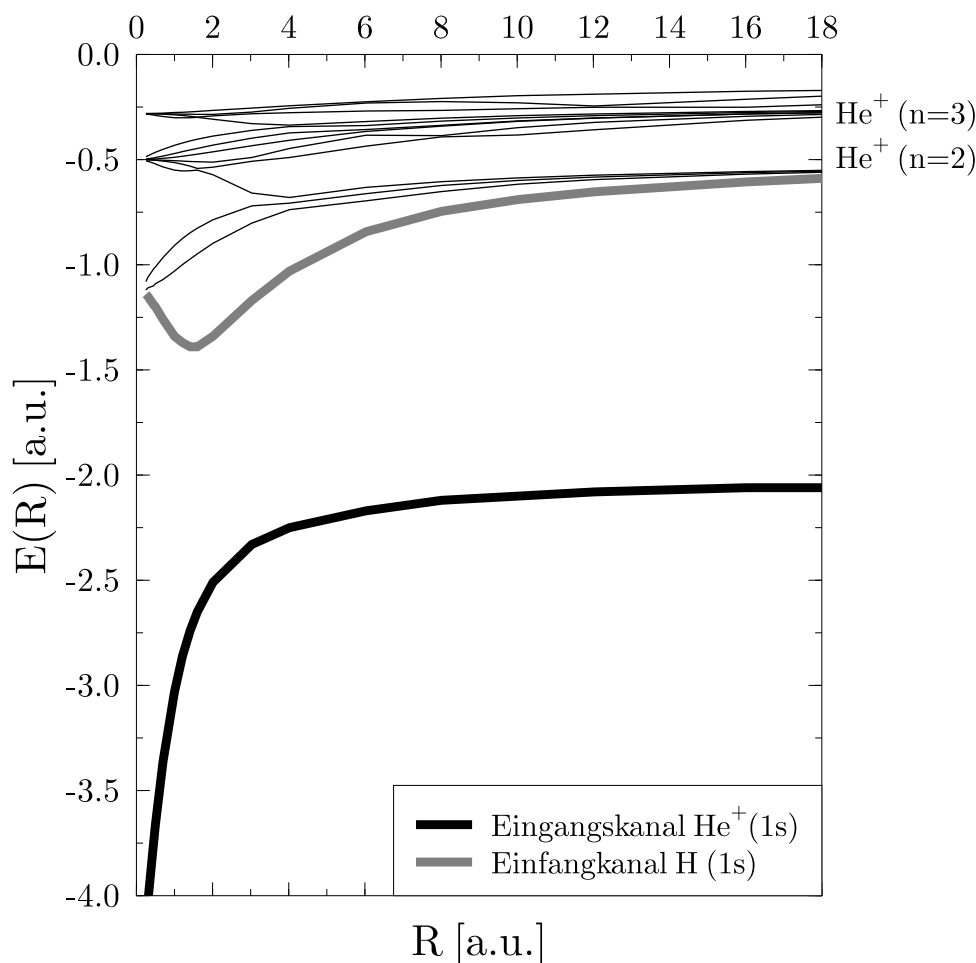
Aus den so erhaltenen Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  für die verschiedenen Prozesse ergeben sich dann im Rahmen der semiklassischen Näherung des Stoßparametermodells durch das Integral

$$\sigma_i = 2\pi \int_0^\infty db b p_i(b) \quad (2.92)$$

die entsprechenden totalen Wirkungsquerschnitte  $\sigma_i$ , die direkt mit den experimentellen Ergebnissen verglichen werden können.

## 2.4 Anwendung der BGM am Beispiel von Einelektronstoßsystemen

Die in den vorhergehenden Abschnitten beschriebene Basis Generator Methode (BGM) soll nun exemplarisch auf zwei einfache Einelektronstoßsysteme angewendet werden. Zuerst wird dabei die Streuung von Protonen an einfach ionisierten Helium-Atomen betrachtet.



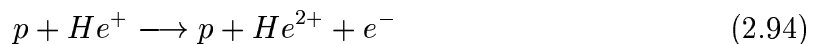
**Abbildung 2.2:** Korrelationsdiagramm für  $(H - He)^{2+}$  als Funktion des internuklearen Abstands  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und mögliche Einfangkanäle.

Einen Anhaltspunkt für mögliche Reaktionsabläufe bei niedrigen Stoßenergien zeigt das in Abbildung 2.2 wiedergegebene Korrelationsdiagramm für ein entsprechendes  $(H - He)^{2+}$ -Quasimolekül. Das Korrelationsdiagramm wurde durch Diagonalisierung des Einteilchen-Hamilton-Operators für verschiedene internukleare Abstände in der BGM-Basis berechnet. Man erkennt deutlich, daß der Eingangskanal energetisch unterhalb des Einfangkanals in den Grundzustand des Protons verläuft und deswegen lediglich Transfer in das 1s-Niveau des Projektilions erwartet werden kann.

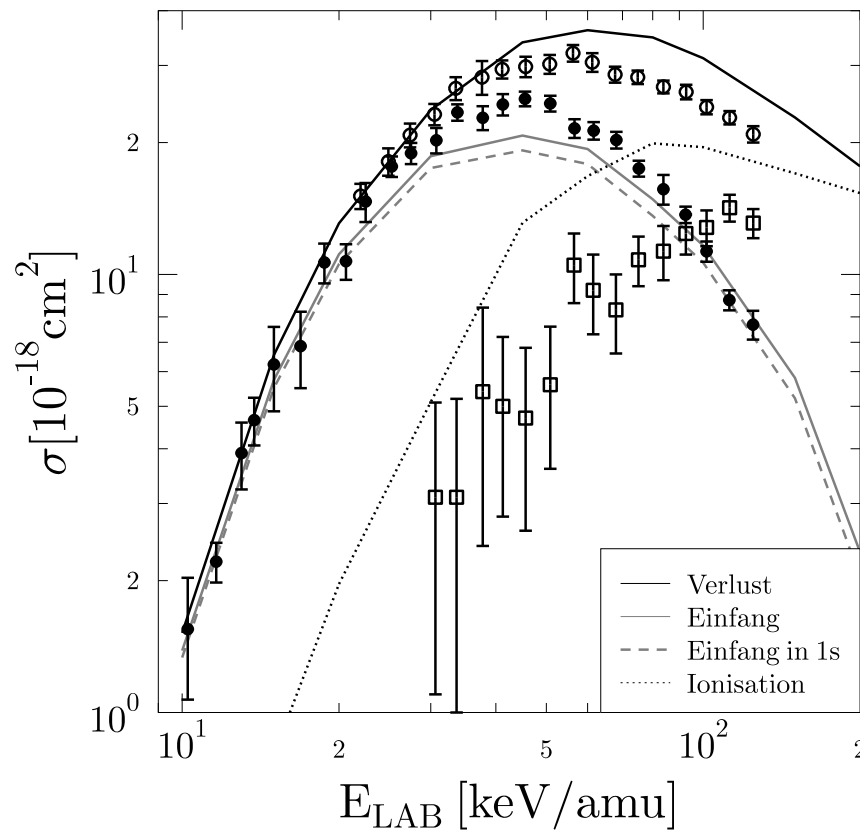
Die entsprechenden totalen Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation sind in Abbildung 2.3 zusammen mit den experimentellen Daten dargestellt. Mit Verlust wird hierbei die Summe der beiden ladungsverändernden Reaktionen, d.h. Einfang



und Ionisation



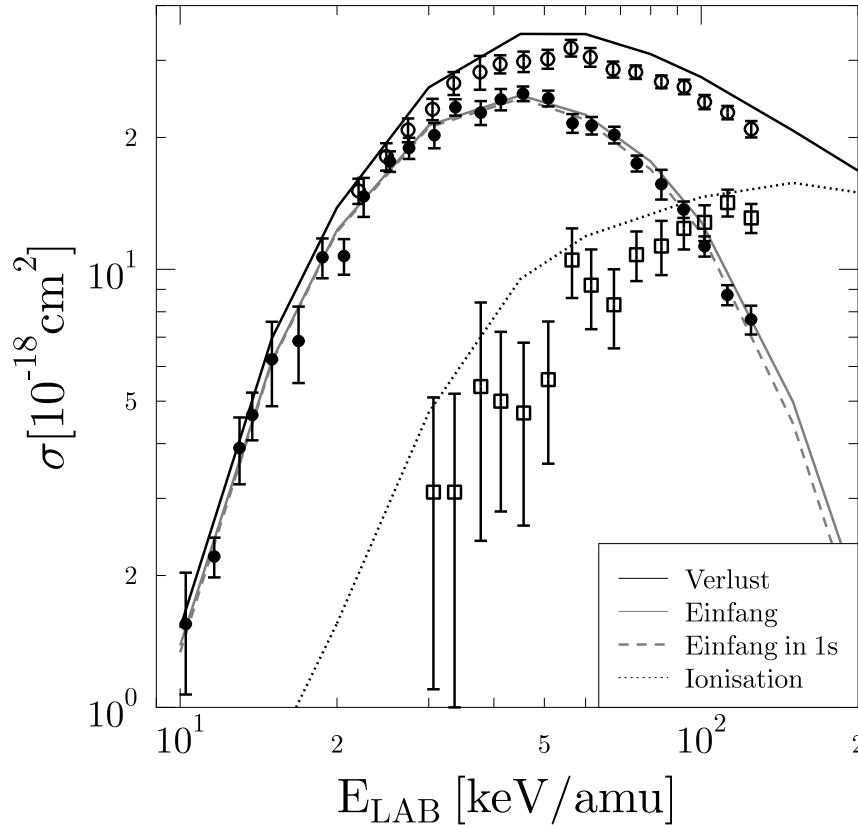
bezeichnet. Die Berechnung des Einfangs erfolgt dabei durch Projektion der durch die Lösung der Einteilchengleichung gefundenen Wellenfunktion auf bewegte, wasserstoffähnliche Orbitale der Kernladung  $Z = 1$ . Die Wirkungsquerschnitte aus Abbildung 2.3 wur-



**Abbildung 2.3:**  $p + He^+$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem, berechnet mit  $N = 10$  generierenden Funktionen und  $M = 6$  Hierarchiestufen; experimentelle Daten für Verlust ( $\circ$ ): [RMR 86], Einfang ( $\bullet$ ): [RMS 85], Ionisation ( $\square$ ): [RMR 86].

den mit Hilfe von 46 BGM-Funktionen, ausgewählt aus einer Basis von  $N = 10$  generierenden Funktionen und  $M = 6$  Hierarchiestufen, berechnet. Dabei kann nicht der gesamte Satz von ursprünglich 70 Funktionen in der praktischen Rechnung eingesetzt werden, da

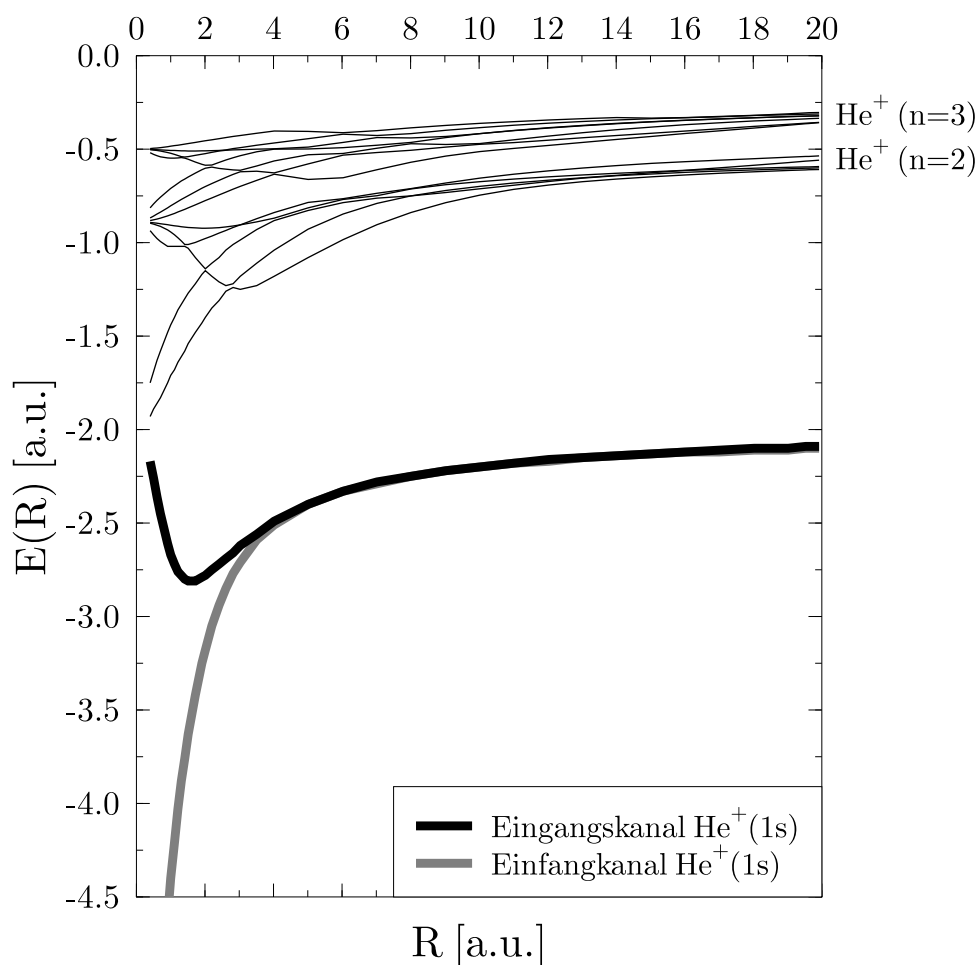
numerische lineare Abhängigkeiten zwischen den nichtorthogonalen Zuständen (2.76) auftreten. Diese resultieren daraus, daß mit steigender Ordnung  $M$  der Zustände die Norm- und Überlappintegrale über einige Größenordnungen hinweg variieren und somit der Orthogonalisierung der Basis aufgrund der endlichen Rechengenauigkeit Grenzen gesetzt sind. Um ein linear unabhängiges Basissystem zu gewährleisten, wurde die Zahl der verwendeten Funktionen wie genannt reduziert. Man erkennt, daß ab 40 keV/amu der berechnete Verlust das Experiment um ungefähr 15% überschätzt. Im mittleren Energiebereich liegt der ermittelte Transferquerschnitt in ähnlicher Weise unter den experimentellen Daten, so daß der gemessene Ionisationsquerschnitt, der sich sowohl in der Theorie als auch im Experiment als Differenz zwischen Verlust und Einfang ergibt, überschätzt wird. Der Transfer erfolgt fast ausschließlich in den Grundzustand des Projektils.



**Abbildung 2.4:**  $p + He^+$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem, berechnet mit  $N = 20$  generierenden Funktionen und  $M = 6$  Hierarchiestufen; experimentelle Daten für Verlust ( $\circ$ ): [RMR 86], Einfang ( $\bullet$ ): [RMS 85], Ionisation ( $\square$ ): [RMR 86].

Um die Konvergenz der Basis zu überprüfen, zeigt Abbildung 2.4 die gleichen Ergebnisse, die jedoch mit Hilfe von 104 BGM-Funktionen, ausgewählt aus einer Basis von  $N = 20$  generierenden Funktionen und  $M = 6$  Hierarchiestufen, berechnet worden sind.

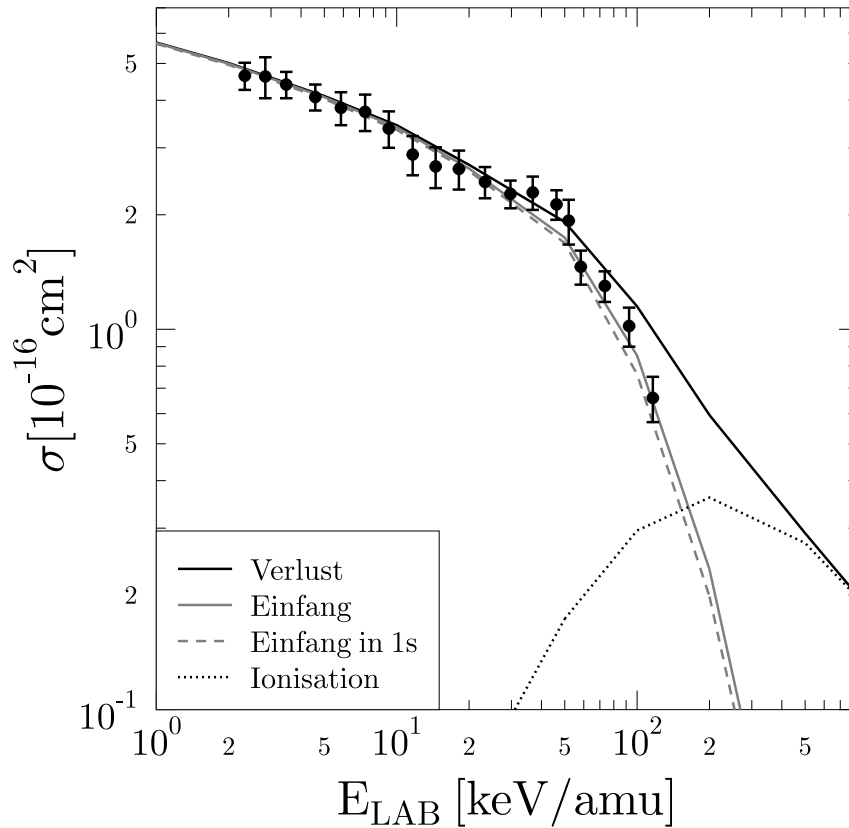
Die geringen Veränderungen der Wirkungsquerschnitte weisen darauf hin, daß die Basisgröße ausreichend ist. Offensichtlich hat die Ausweitung der Basis zu einer verbesserten Darstellung des Einfangkanals geführt, stimmen doch die berechneten Werte nun ausgezeichnet mit den experimentellen Daten überein. Der Verlust wird jetzt ab 40 keV/amu nur noch um rund 9% überschätzt, so daß sich auch der Ionisationsquerschnitt verbessert hat.



**Abbildung 2.5:** Korrelationsdiagramm für  $(\text{He} - \text{He})^{3+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und mögliche Einfangkanäle.

Nun soll das Proton als Projektil durch ein  $\alpha$ -Teilchen ersetzt werden. Das Korrelationsdiagramm für dieses homonukleare Stoßsystem wird in Abbildung 2.5 wiedergegeben und weist sofort auf den resonanten Charakter dieses Systems hin. Mit anderen Worten, das im  $1s$ -Zustand einlaufende Elektron des Targetions sollte resonant, d.h. fast ausschließlich, in das  $1s$ -Niveau des Projektilions eingefangen werden.

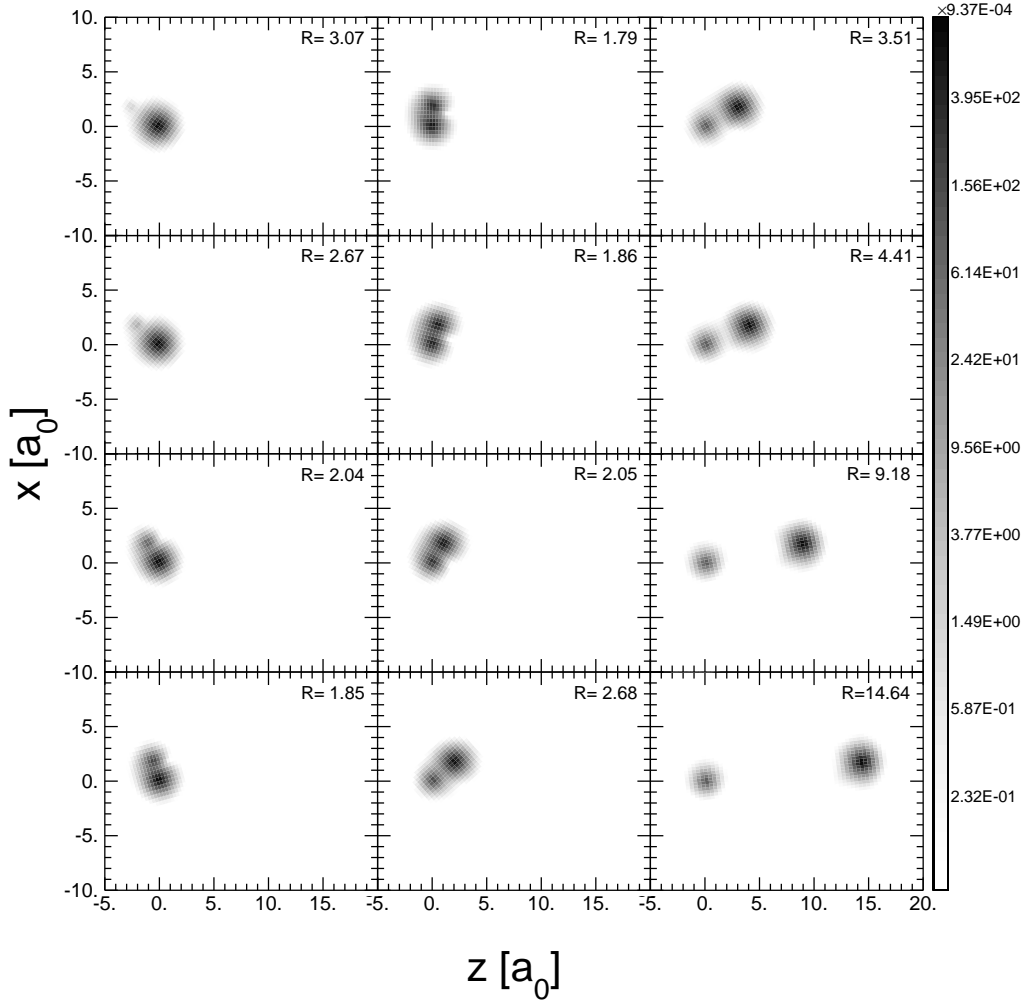
Die entsprechenden totalen Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation werden in Abbildung 2.6 zusammen mit den experimentellen Daten gezeigt. Es wurden hierzu 46 BGM-Funktionen, ausgewählt aus einer Basis von  $N = 10$  generierenden Funk-



**Abbildung 2.6:**  $He^{2+} + He^+$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [MKS 95].

tionen und  $M = 6$  Hierarchiestufen verwendet, die Berechnung des Einfangs erfolgte durch Projektion der durch die Lösung der Einteilchengleichung gefundenen Wellenfunktion auf bewegte, wasserstoffähnliche Orbitale der Kernladung  $Z = 2$ . Man erkennt sofort, daß der Einfangquerschnitt den resonanten Charakter dieses Stoßsystems wiedergibt, stellt doch praktisch der gesamte Transfer Einfang in den Grundzustand des  $\alpha$ -Teilchens dar. Das Experiment ist in sehr guter Übereinstimmung mit den BGM-Daten, fast jeder Datenpunkt liegt auf der Kurve. Ab einer Laborenergie von 150 keV/amu wird der Verlust dann zunehmend durch die Ionisation dominiert, die bei 200 keV/amu maximal ist.

Anhand der in Abbildung 2.7 dargestellten Entwicklung der elektronischen Dichte während des Stoßes für eine Stoßenergie von 10 keV/amu bei einem Stoßparameter  $b=1,8$  a.u. wird der beschriebene Sachverhalt noch einmal verdeutlicht. Die Zeitentwicklung verläuft spaltenweise von links nach rechts und in den Spalten jeweils von oben nach unten. In jedem Segment ist als Positionsangabe der internukleare Abstand  $R$  der beiden Zentren angegeben. Das Projektil fliegt von links nach rechts am Target vorbei, so daß diese Distanz zunächst kleiner und nach dem Erreichen des Punktes der nächsten



**Abbildung 2.7:**  $He^{2+} + He^+$ ,  $E_{LAB} = 10 keV/amu$ ,  $b=1,8$  a.u.: Über die zur Streuebene transversale Richtung integrierte Dichte bei verschiedenen internuklearen Abständen  $R = [b^2 + z^2]^{1/2}$ . Das Targetzentrum liegt im Koordinatenursprung, das Projektilzentrum bei den Koordinaten  $(b, 0, z)$ . Die Zeitentwicklung verläuft spaltenweise, die Graustufen skalieren logarithmisch.

Annäherung wieder größer wird. An diesem Punkt entspricht  $R$  dann dem Stoßparameter  $b$ . Man erkennt eindeutig den Übergang der Dichte vom Grundzustand des Targetions in das 1s-Niveau des Projektilions und somit den resonanten Charakter des Systems, wobei keinerlei Ionisation auftritt.

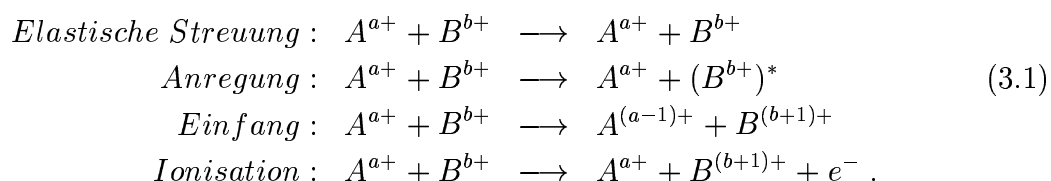
Für zwei echte Einelektronensysteme konnte die BGM also in befriedigender Weise getestet und die Konvergenz der verwendeten Basis überprüft werden. In den nachfolgenden Kapiteln wird diese Methode auf Stöße mit Li-ähnlichen Targetionen angewendet. Hierbei handelt es sich um Dreielektronensysteme, die bei entsprechender Berücksichtigung von Abschirmeffekten als effektive Einteilchenprobleme beschrieben werden können. Dies führt zu komplizierteren Kopplungsmöglichkeiten in den Korrelationsdiagrammen und ist eine anspruchsvollere Aufgabe für die BGM.



## Kapitel 3

# Streuung von $\alpha$ -Teilchen an Li-ähnlichen Ionen

Wie schon in der Einleitung erwähnt, sind Ion-Ion-Stöße sowohl in der Natur als auch in der Technik von Bedeutung. In diesem Kapitel sollen Stöße zwischen  $\alpha$ -Teilchen und Li-ähnlichen Bor-, Kohlenstoff-, Stickstoff- und Sauerstoff-Ionen untersucht werden. Während eines solchen Ion-Ion-Stoßes können dabei grundsätzlich vier die elektronische Konfiguration der Stoßteilnehmer betreffende Prozesse ablaufen:



Dabei werden Anregung, Einfang und Ionisation als inelastische Streuung bezeichnet, Einfang und Ionisation stellen die sogenannten Umladungskanäle dar. Diese vier Prozesse können einzeln, in Kombination und unter Beteiligung mehrerer aktiver Elektronen auftreten, stehen somit in Konkurrenz zueinander.

Im hier betrachteten Fall von Stoßsystemen aus  $\alpha$ -Teilchen (Projektile) und Li-ähnlichen Ionen (Target) besitzt das Projektil keine Elektronen, das Target hingegen drei. Von diesen drei Elektronen des Li-ähnlichen Targetions stellen die beiden inneren 1s-Elektronen lediglich passive Zuschauerelektronen dar, nur das äußere 2s-Leuchtelektron nimmt aktiv am Stoß teil. Aus diesem Grund ist es möglich, das Dreielektronenproblem als effektives Einelektronenproblem zu behandeln und den Einfluß der Elektronen der K-Schale mit Hilfe eines effektiven Abschirmpotentials zu berücksichtigen.

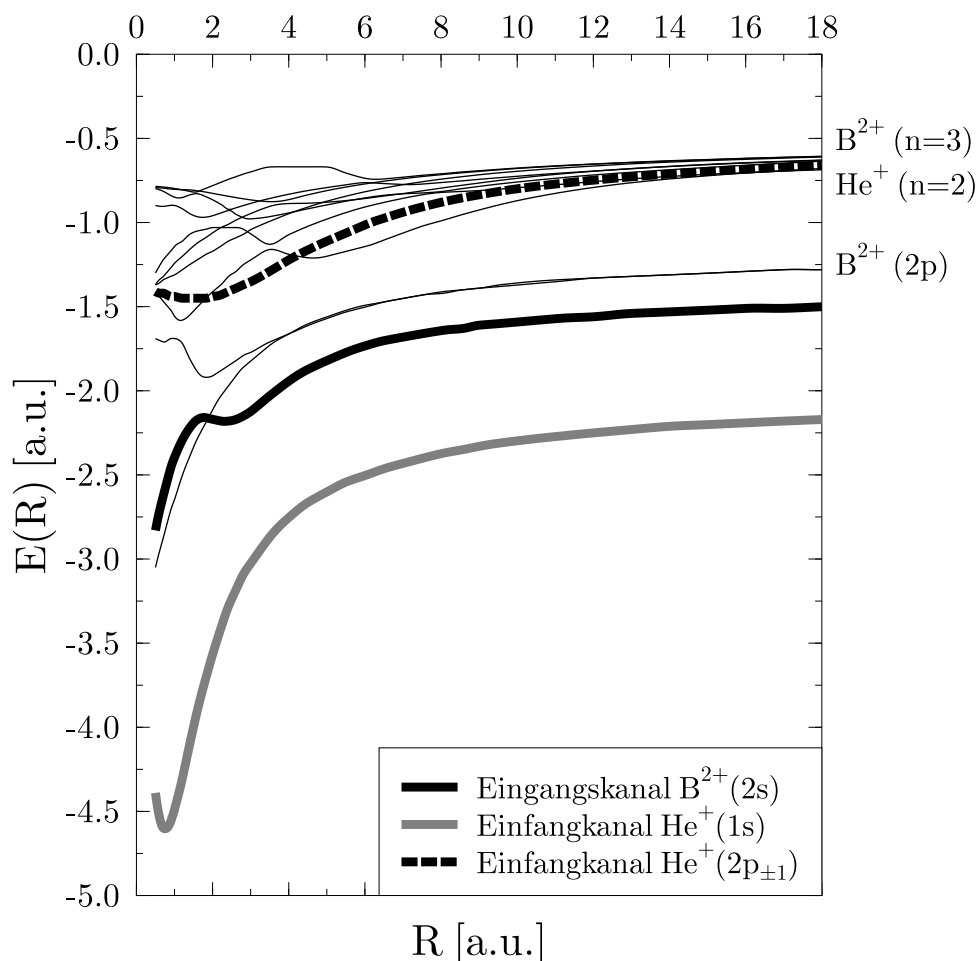
Die Lösung der so entstehenden Einteilchengleichung erfolgt nach der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Basis Generator Methode (BGM) mit einer Basisgröße von  $N = 20$  und einer Hierarchiestufe  $M = 8$  in einem Energiebereich von 1 keV/amu bis 500 keV/amu Projektilenergie im Laborsystem. Das Potential für die Li-ähnlichen Ionen wurde nach der in Abschnitt 2.1 kurz beschriebenen Optimierten Potential Methode (OPM) berechnet. Zur Ermittlung des Einfangs erfolgte eine Projektion der errechneten Wellenfunktion auf den 1s-Zustand und die  $n = 2$  Zustände des Projektils.

### 3.1 Umladungsprozesse

Zunächst sollen in diesem Abschnitt Einfang und Ionisation als Bestandteile des Elektronenverlusts untersucht werden.

Anhaltspunkt für ablaufende Einfangprozesse ist dabei das Korrelationsdiagramm des jeweiligen Quasimoleküls, gebildet aus Projektil und Target (adiabatischer Grenzfall), berechnet durch Diagonalisierung des Einteilchen-Hamilton-Operators in der BGM-Basis. Die darin sichtbaren Kopplungen zwischen Eingangskanal und den Einfangkanälen weisen auf mögliche Einfangreaktionen bei niedrigen Stoßenergien hin.

#### 3.1.1 $\text{He}^{2+} + \text{B}^{2+}$

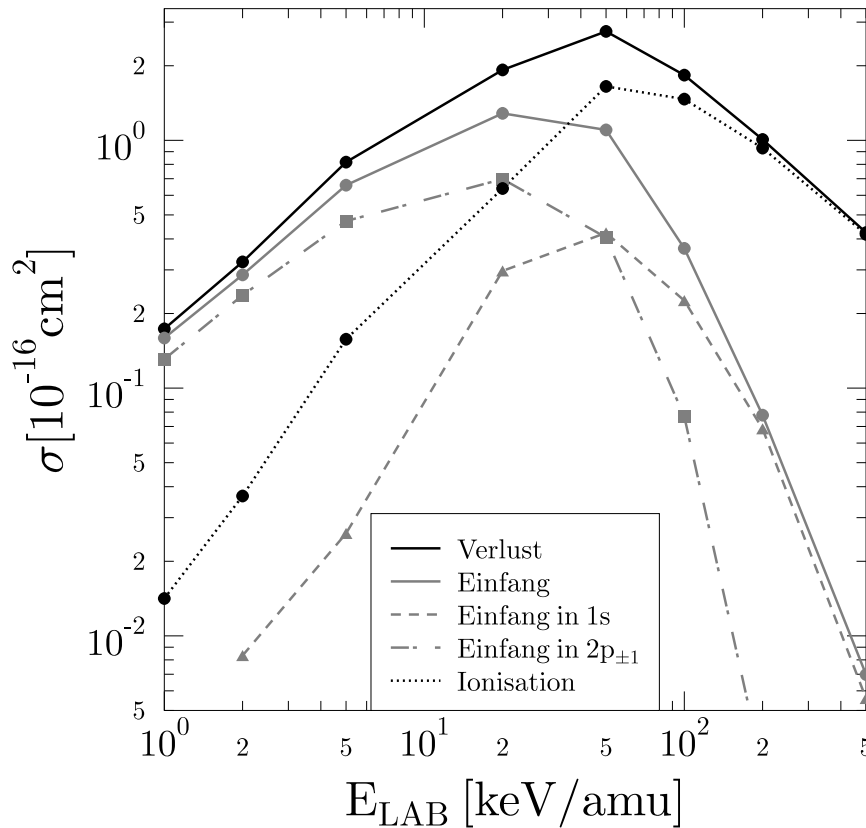


**Abbildung 3.1:** Korrelationsdiagramm für  $(B - He)^{4+}$  als Funktion des internuklearen Abstands  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und mögliche Einfangkanäle.

Zur Lösung der Einteilchengleichung für dieses Stoßsystem wurden 100 BGM-Funktionen verwendet. Aus dem Korrelationsdiagramm in Abbildung 3.1 geht hervor, daß

der Eingangskanal des aktiven 2s-Leuchtelektrons des Bor-Ions energetisch zwischen dem Einfangkanal in den Grundzustand und den Einfangkanälen in die L-Schale ( $n = 2$ ) des Helium-Ions verläuft. Wie zu erkennen ist, werden diese angeregten Projektilezustände recht gut durch die verwendete Basis dargestellt.

Beide Einfangkanäle sind folglich realisierbar, so gestattet beispielsweise eine Rotationskopplung den Einfang des Leuchtelektrons in das  $2p_{\pm 1}$ -Niveau bzw. eine Radialkopplung den Einfang des Leuchtelektrons in den Grundzustand des Helium-Ions.



**Abbildung 3.2:**  $He^{2+} + B^{2+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem.

Es ergeben sich die in Abbildung 3.2 gezeigten totalen Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation. Man erkennt, daß bis zu 30 keV/amu Projektilenergie der Verlust durch den Einfang dargestellt wird. Zu größeren Projektilenergien hin dominiert schließlich die Ionisation, bis bei einer Projektilenergie von 500 keV/amu fast kein Einfang mehr auftritt.

Wie man sieht, setzt sich der Einfang seinerseits aus zwei Bestandteilen zusammen. Bei Projektilenergien bis zu 50 keV/amu wird dominant in das  $2p_{\pm 1}$ -Niveau des Helium-Ions eingefangen, ab 50 keV/amu jedoch erfolgt Transfer hauptsächlich in dessen Grundzustand.

Die beiden Einfangkanäle, die schon anhand des Korrelationsdiagramms vermutet werden konnten, sind also realisiert worden. Aus kinematischen Gründen erfolgt dabei der Transfer bei niedrigen Stoßenergien zunächst in die L-Schale des Projektils. Diese Überlegung ergibt sich unmittelbar aus einer Betrachtung der kinetischen Energieverhältnisse.

Der Transfer in die L-Schale des  $\alpha$ -Teilchens kann durch eine energetische Anhebung der Einfangkanäle infolge der kinetischen Energie des Projektilions plausibel gemacht werden. Auf diese Weise wird die Kopplung in die angeregten Einfangkanäle ( $n = 2$ ) mit steigender Stoßenergie geschwächt, entfernen diese sich doch energetisch immer weiter vom Eingangskanal. Andererseits wird dadurch die Distanz zwischen dem Eingangskanal und dem Einfangkanal in den Grundzustand des  $\alpha$ -Teilchens verringert, was diese Kopplung verstärkt. Für größere Projektilgeschwindigkeiten bricht das hier zugrundegelegte molekulare Bild des Korrelationsdiagramms, das streng nur im adiabatischen Grenzfall Gültigkeit besitzt, zusammen.

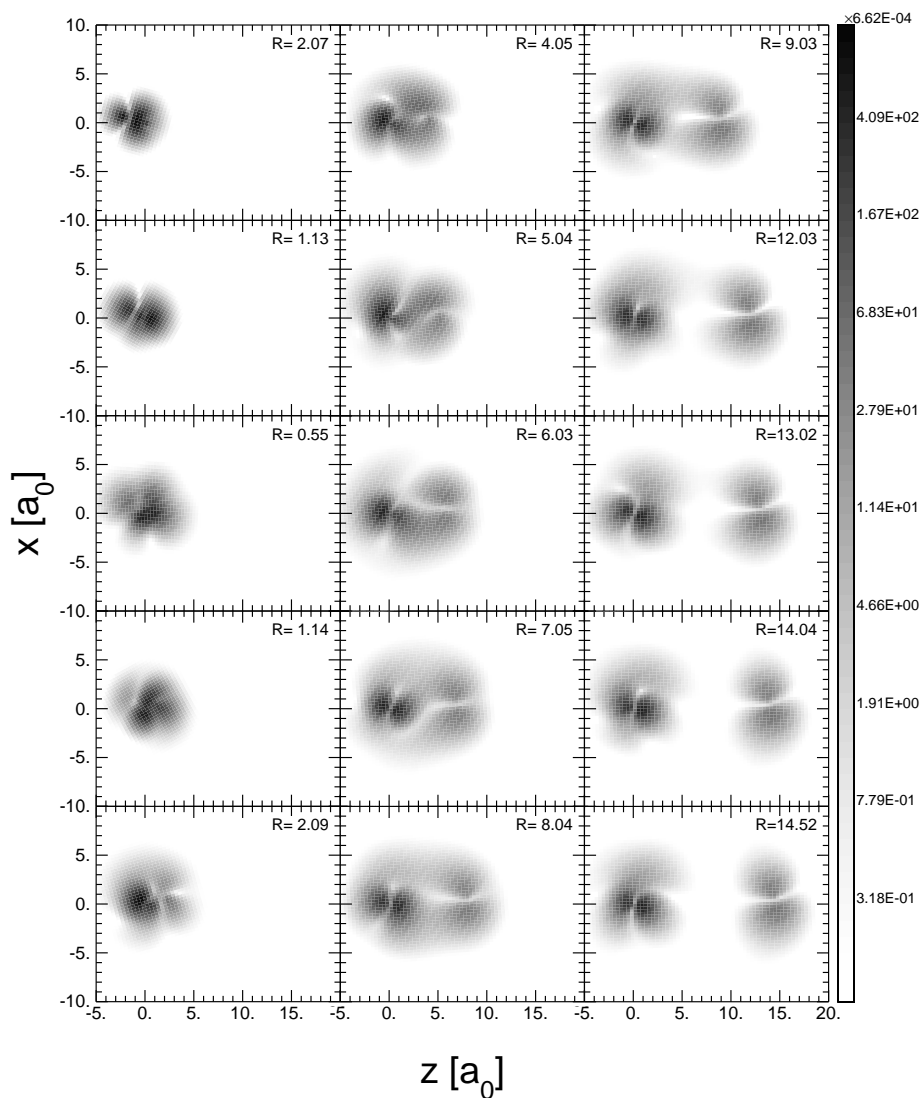
In diesem Energiebereich kann der Wechsel des Transfers von der L-Schale in die K-Schale durch die geringere Differenz der kinetischen Energien des Projektils und des eingefangenen Elektrons im entsprechenden Projektilorbital erklärt werden (*Matching-Geschwindigkeit*). Gemäß dem Bohrschen Atommodell besitzt ein Elektron in der  $n$ -ten Hauptschale eines wasserstoffähnlichen Systems der Kernladung  $Z$  [Ma 94] eine zur Hauptquantenzahl  $n$  umgekehrt proportionale Orbitalgeschwindigkeit  $v_n$  in atomaren Einheiten

$$v_n = \frac{Z}{n} . \quad (3.2)$$

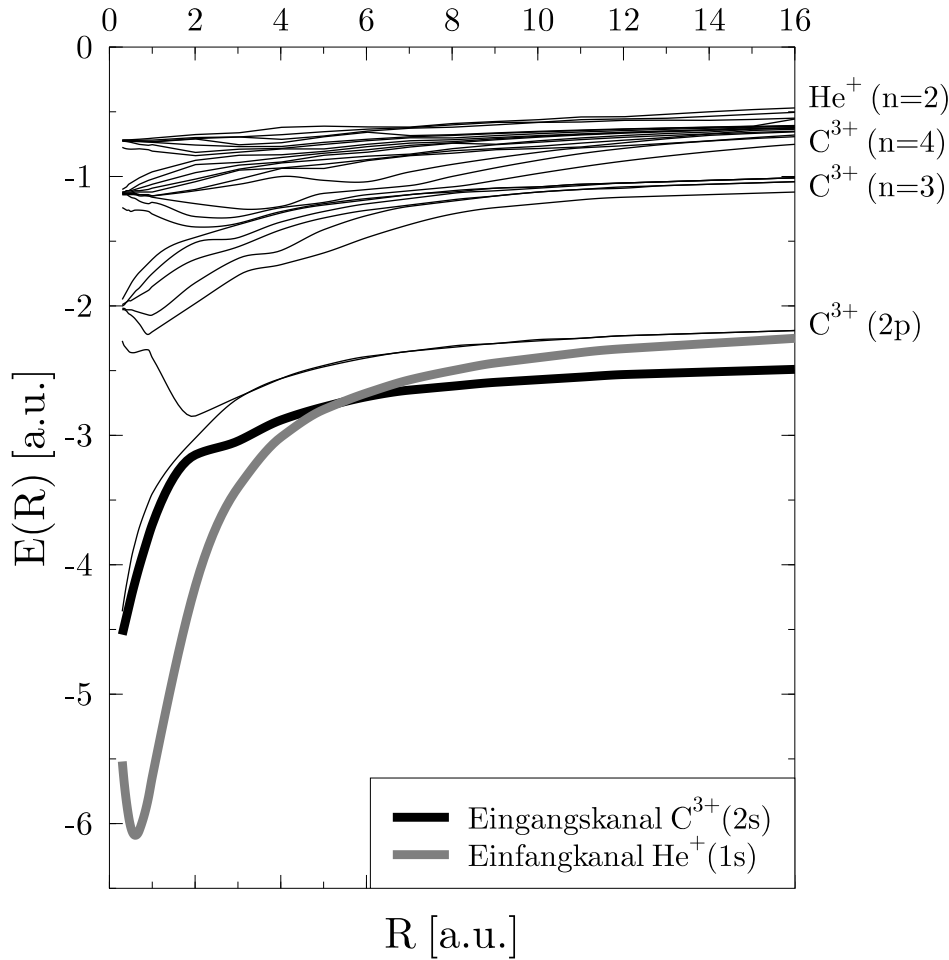
In einem angeregten Niveau  $n > 1$  hat ein Elektron also eine geringere kinetische Energie als im Grundzustand, so daß die angesprochene Energiedifferenz mit wachsender Projektilgeschwindigkeit für immer kleinere  $n$  minimal wird.

Um den Mechanismus dieser Einfangreaktion näher zu untersuchen, zeigt Abbildung 3.3 die Entwicklung der elektronischen Dichte, die über die Achse senkrecht zur Streuebene integriert wurde, für eine Laborenergie von  $E_{LAB} = 1\text{keV}/amu$  und den Stoßparameter  $b=0,55$  a.u. als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Deutlich ist im ersten Sektor des Bildes (links oben) zu erkennen, wie die kugelsymmetrische Dichteverteilung des 2s-Orbitals des Targets durch das sich nähernde Projektil deformiert wird und sich ein antibindender molekularer Zwischenzustand mit einer stabilen Knotenebene ausbildet. Im weiteren Verlauf des Stoßes bleibt diese Knotenebene erhalten und führt beim Projektil zur Ausbildung einer hantelförmigen Verteilung der elektronischen Dichte (Sektor rechts unten). Der Vorgang ist gleichbedeutend mit Transfer in das  $2p_{\pm 1}$ -Niveau des Heliumions, für das die angesprochene Geometrie typisch ist. Auch am Target zeigt sich eine vergleichbare Struktur, die auf große Anteile von 2p-Anregungen hinweist.

Bei dieser Stoßenergie ist keine Ionisation sichtbar, die gesamte vorhandene Dichte konzentriert sich sowohl um das Target als auch um das Projektil, wobei beachtet werden muß, daß die Skalierung der Graustufen logarithmisch ist.



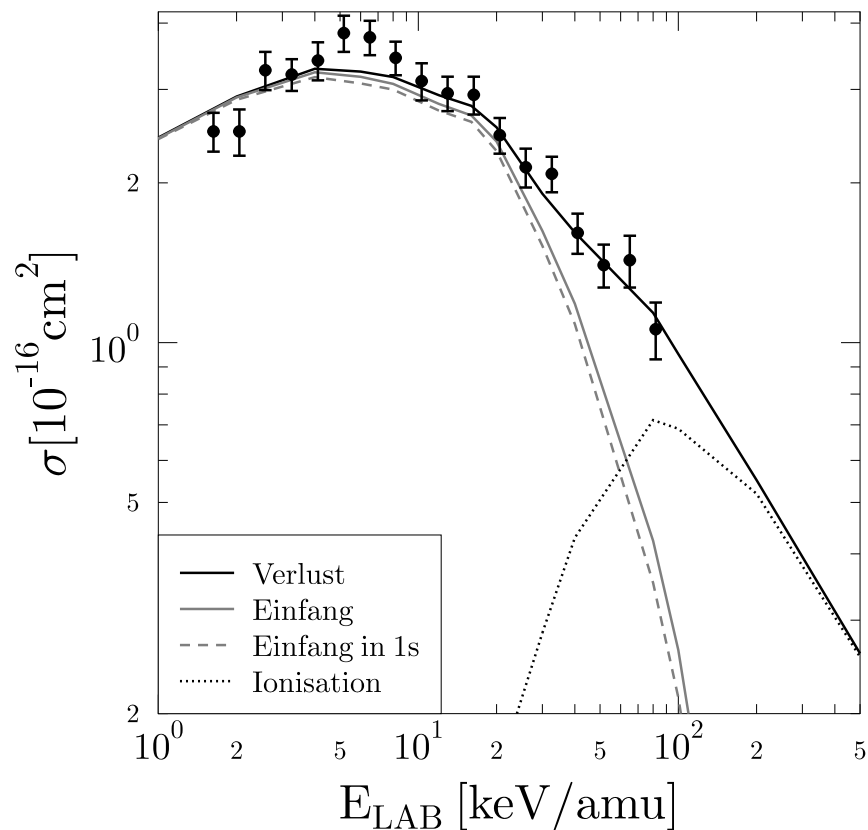
**Abbildung 3.3:**  $He^{2+} + B^{2+}$ ,  $E_{LAB} = 1keV/amu$ ,  $b=0,55$  a.u.: Über die zur Streuebene transversale Richtung integrierte Dichte bei verschiedenen internuklearen Abständen  $R = [b^2 + z^2]^{1/2}$ . Das Targetzentrum liegt im Koordinatenursprung, das Projektilzentrum bei den Koordinaten  $(b, 0, z)$ . Die Zeitentwicklung verläuft spaltenweise, die Graustufen skalieren logarithmisch.

3.1.2  $\text{He}^{2+} + \text{C}^{3+}$ 

**Abbildung 3.4:** Korrelationsdiagramm für  $(C - He)^{5+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

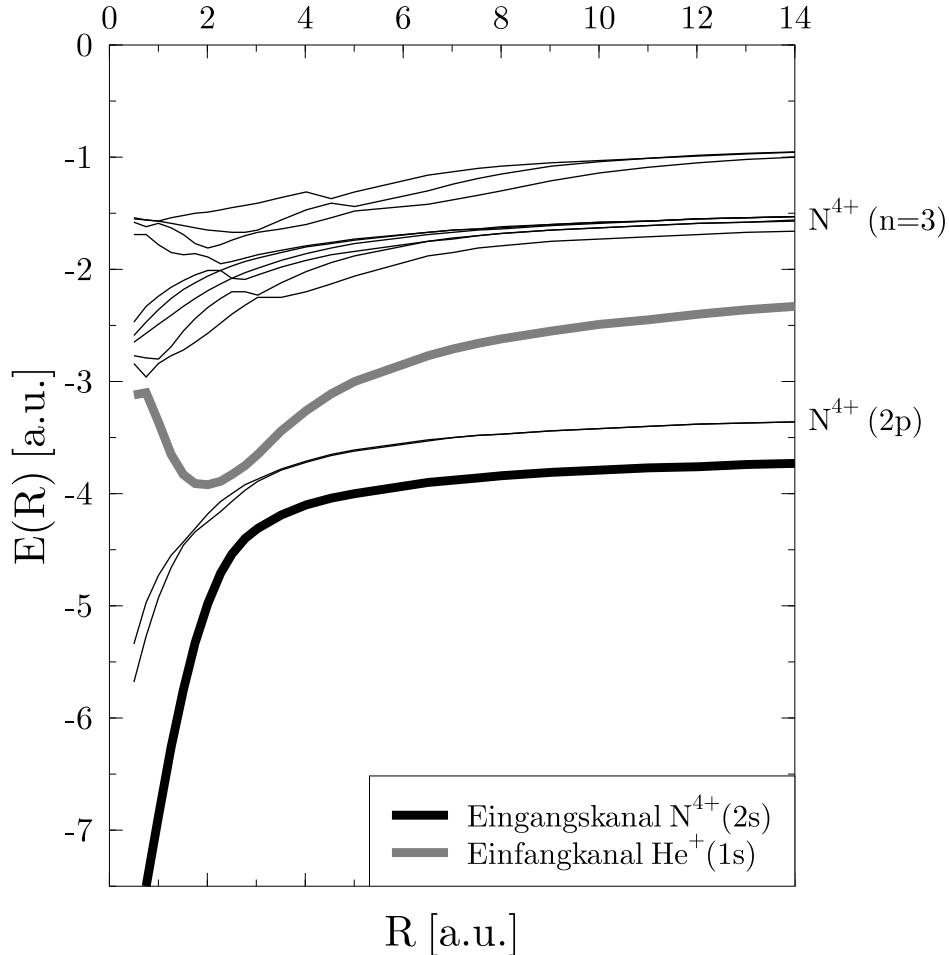
Das dem  $B^{2+}$ -Ion in der Sequenz folgende nächst höher geladene Li-ähnliche Ion ist das  $C^{3+}$ . Bei diesem ist aufgrund der höheren Projektilladung das aktive 2s-Leuchtelektron stärker gebunden. Man erkennt an dem in Abbildung 3.4 dargestellten Korrelationsdiagramm, daß eine starke Radialkopplung zwischen dem Eingangskanal und dem Einfangkanal in den Grundzustand des Helium-Ions vorhanden ist. Einfang in angeregte Projektilezustände ist somit nicht zu erwarten, diese werden jedoch, wie das Korrelationsdiagramm zeigt, von der verwendeten Basis gut dargestellt.

In Abbildung 3.5 sind die mit einem Satz von 99 BGM-Funktionen errechneten Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation zu sehen. Man erkennt, daß bei niedrigen Projektilenergien der Einfang, bei hohen Projektilenergien die Ionisation den Verlust dominieren. Über den gesamten Energiebereich hinweg setzt sich der Einfang zu fast 95% aus Einfang in den Grundzustand des Helium-Ions zusammen, die ab 20 keV/amu einsetzende Ionisation erreicht bei ca. 100 keV/amu ihr Maximum.



**Abbildung 3.5:**  $He^{2+} + C^{3+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [MMK 97].

Die dargestellten experimentellen Werte für den Einfang werden bei niedrigen Energien sehr gut durch den BGM-Querschnitt wiedergegeben, das Maximum wird um ca. 20% unterschätzt und zu höheren Energien hin liegen die berechneten Werte fast um den Faktor zwei unter dem Experiment. Auf diesen Sachverhalt wird in Kapitel 5 näher eingegangen.

3.1.3  $\text{He}^{2+} + \text{N}^{4+}$ 

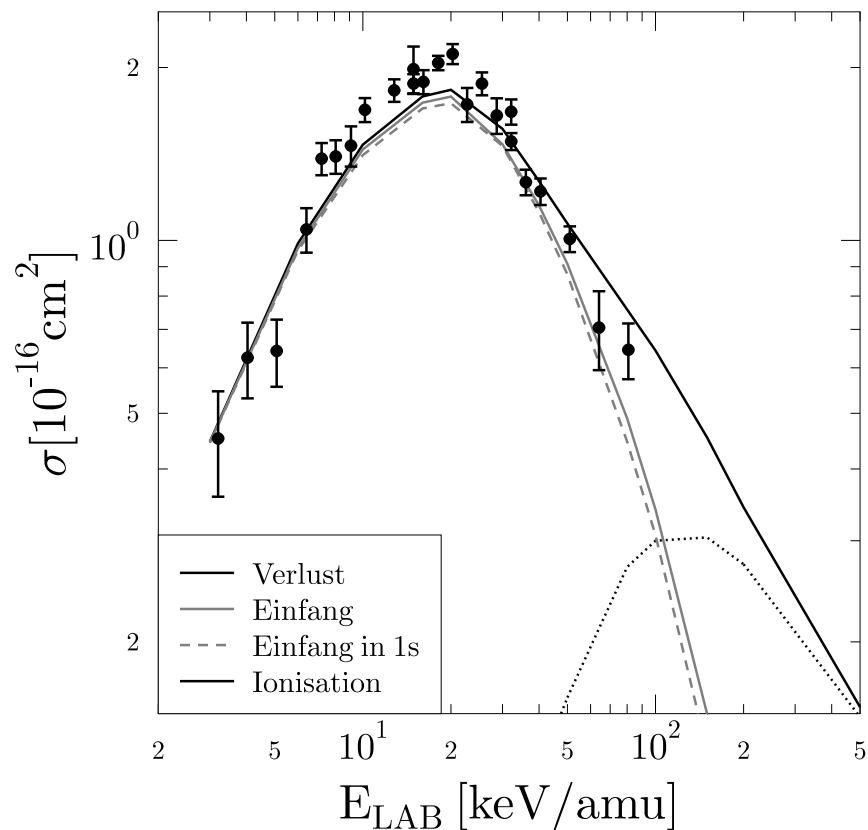
**Abbildung 3.6:** Korrelationsdiagramm für  $(\text{N} - \text{He})^{6+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

Eine weitere Erhöhung der Targetladung führt auf das System  $\text{He}^{2+} + \text{N}^{4+}$ . Wie das Korrelationsdiagramm in Abbildung 3.6 deutlich zeigt, hat die im Vergleich zum  $\text{C}^{3+}$ -Ion erneut stärkere Bindung des 2s-Leuchtelektrons im  $\text{N}^{4+}$ -Ion zu einer weiteren energetischen Trennung von Eingangs- und Einfangkanal in den Grundzustand des  $\alpha$ -Teilchens geführt.

Nun liegt der Eingangskanal energetisch gesehen unterhalb des Einfangkanals, so daß wiederum lediglich Einfang in das 1s-Niveau des Projektils erwartet werden kann.

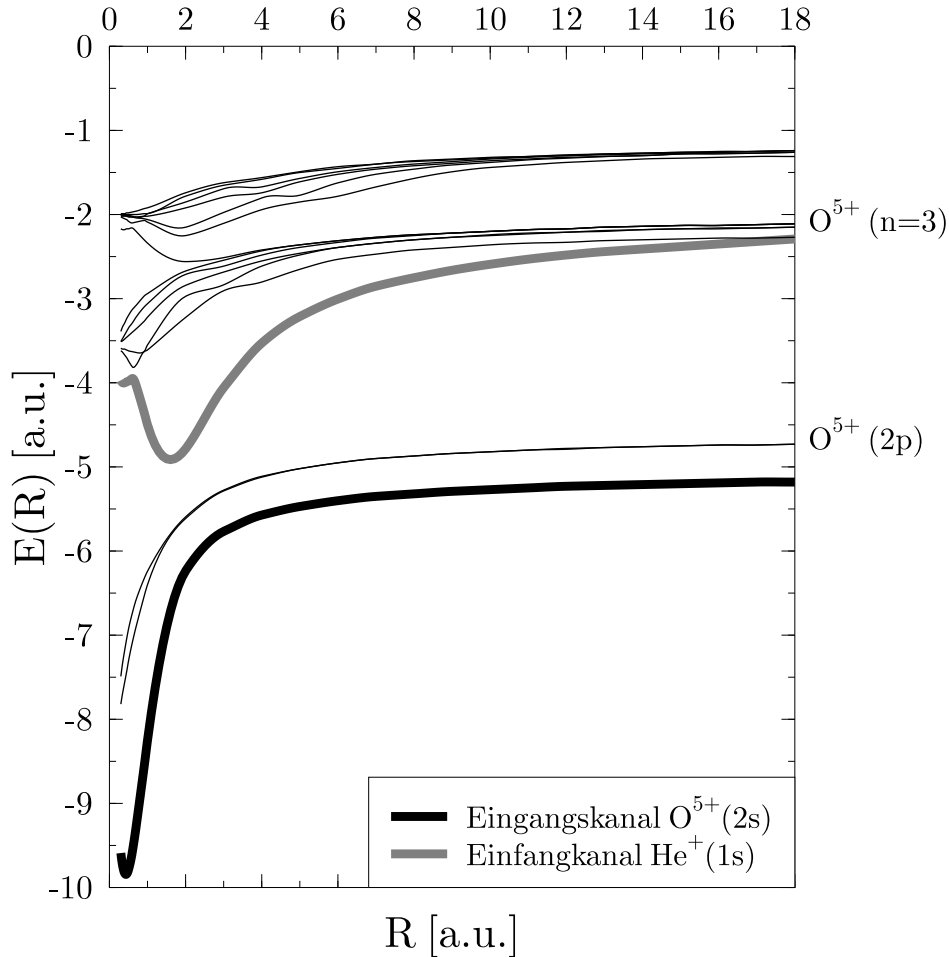
Bei Betrachtung von Abbildung 3.7, welche die mit 101 BGM-Funktionen ermittelten Wirkungsquerschnitte zeigt, bestätigt sich diese Hypothese. Fast der gesamte Elektronentransfer entspricht dem Einfang in den Grundzustand des Projektils und dominiert wiederum den Verlustquerschnitt bei kleinen Stoßenergien. Die bei ca. 150 keV/amu maximale Ionisation übernimmt diese Rolle mit zunehmender Projektilgeschwindigkeit.





**Abbildung 3.7:**  $\text{He}^{2+} + \text{N}^{4+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [DMP 99].

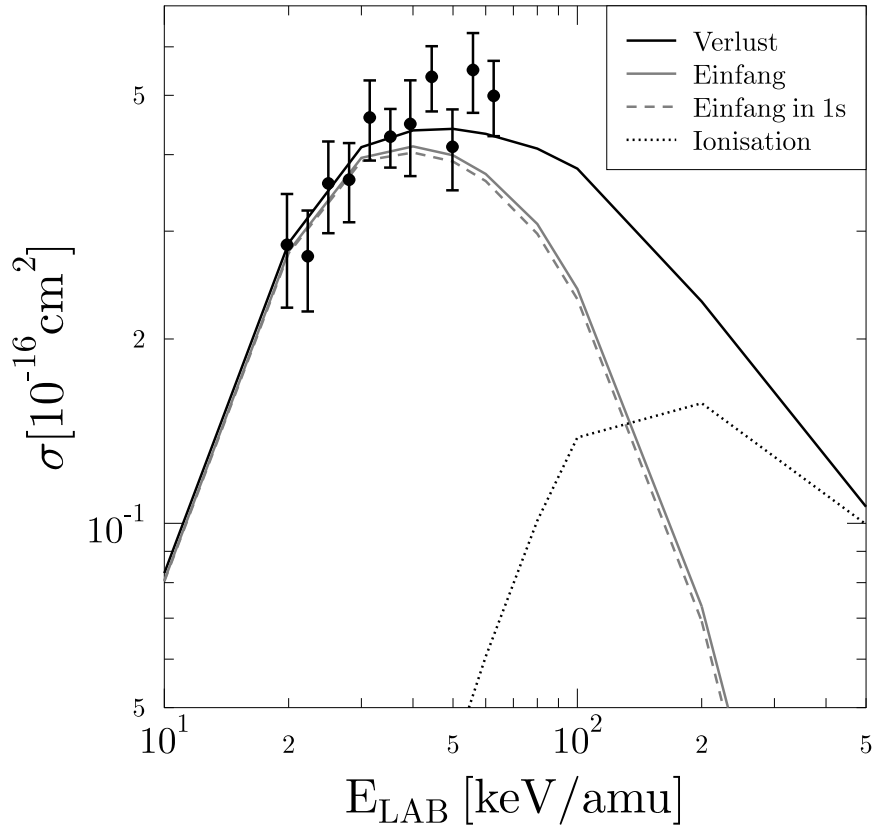
Die berechneten Werte geben fast über den gesamten Energiebereich hinweg die experimentellen Daten wieder. Lediglich das Maximum des gemessenen Wirkungsquerschnitts bei 20  $\text{keV/amu}$  wird ähnlich wie bei dem im vorhergehenden Abschnitt behandelten  $\text{He}^{2+} + \text{C}^{3+}$ -Stoßsystem um ca. 20% unterschätzt.

3.1.4  $\text{He}^{2+} + \text{O}^{5+}$ 

**Abbildung 3.8:** Korrelationsdiagramm für  $(\text{O} - \text{He})^{7+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

Das in diesem Abschnitt untersuchte Stoßsystem mit der höchsten Targetladung ist die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an  $\text{O}^{5+}$ -Ionen. Als Hinweis auf mögliche Einfangreaktionen dient wiederum das in Abbildung 3.8 dargestellte Korrelationsdiagramm. Nun ist der Eingangskanal im Vergleich zum in Abschnitt 3.1.3 behandelten Fall energetisch noch weiter vom Einfangkanal in den Grundzustand des Projektils separiert. Die erhöhte Ladung des Targets hat zu einer erneuten Verstärkung der Bindung des aktiven 2s-Leuchtelektrons geführt. Aus diesem Grund wurde die für den Einfang verantwortliche Radialkopplung zwischen Eingangs- und 1s-Projektilkanal weiter geschwächt, so daß mit einer Verminderung des Einfangquerschnittes bei kleinen Stoßenergien gerechnet werden kann.

Sowohl die theoretischen als auch die experimentellen Ergebnisse sind in Abbildung 3.9 zu finden. Tatsächlich rekrutiert sich der Einfang zu 98% aus Einfang in den Grundzustand des  $\alpha$ -Teilchens. Der Verlust wird bei den niedrigsten Energien wie schon in den vorherigen



**Abbildung 3.9:**  $He^{2+} + O^{5+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [DMP 99].

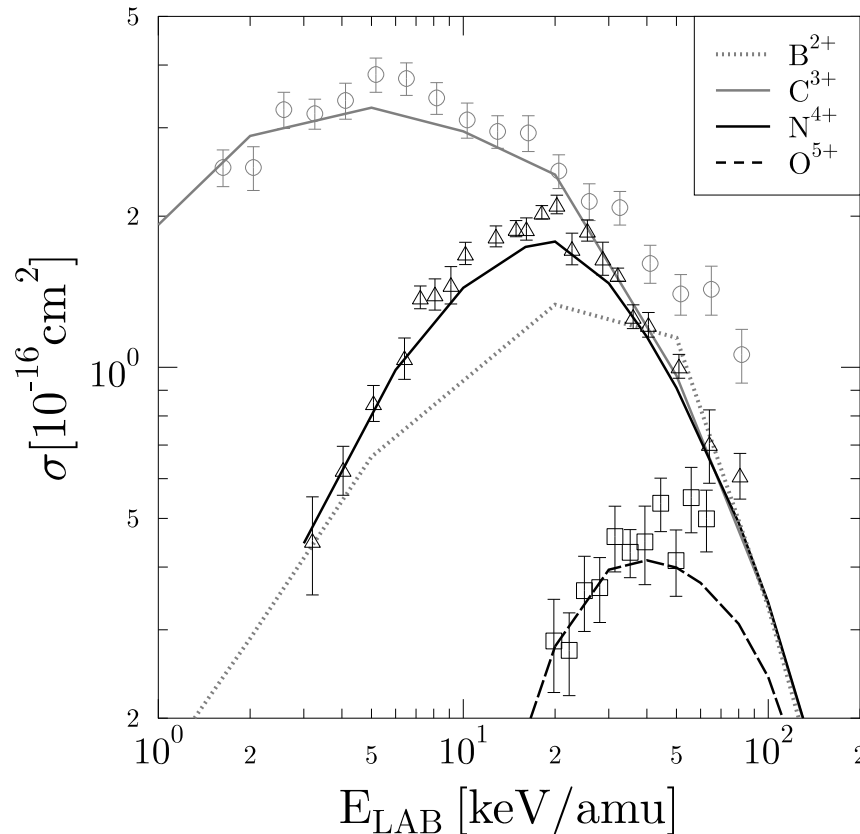
Stoßsystemen vom Einfang und bei den höchsten Stoßenergien von der Ionisation gebildet, welche ihr Maximum bei ca.  $180 \text{ keV/amu}$  erreicht.

Der Vergleich zwischen Theorie und Experiment ergibt eine sehr gute Übereinstimmung bis ca.  $40 \text{ keV/amu}$  Projektilenergie. Zu noch größeren Energien hin scheint die mit 94 BGM-Funktionen durchgeführte Rechnung das Experiment zu unterschätzen, was aber aufgrund der großen Fehlerbalken und Schwankungen der Meßpunkte nur vermutet werden kann.

### 3.1.5 Vergleich der Stoßsysteme

Die bisher untersuchten Stoßsysteme können nun im betrachteten Energiebereich im Hinblick auf Einfang und Ionisation verglichen werden.

In Abbildung 3.10 sind alle berechneten und experimentell gemessenen Einfangquerschnitte für die vier Systeme dargestellt.

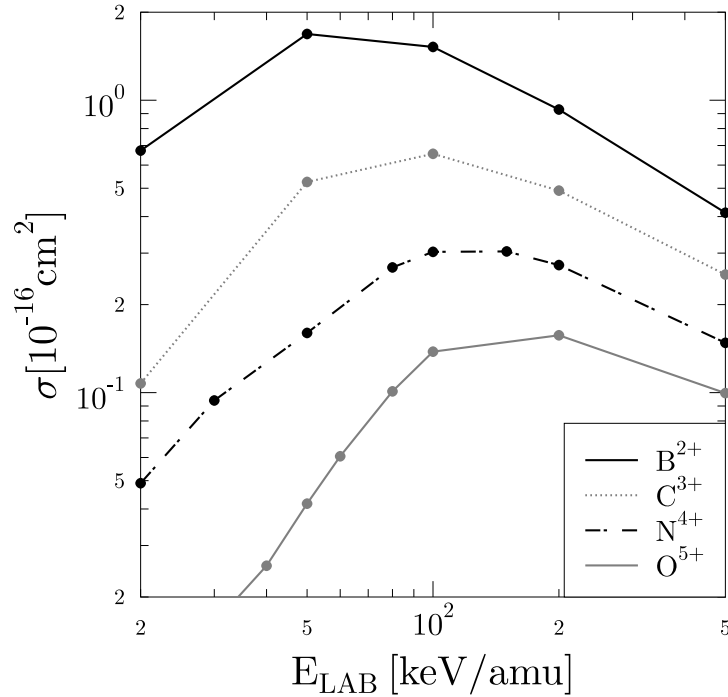


**Abbildung 3.10:** Totale Wirkungsquerschnitte für Einfang als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem; experimentelle Daten für Einfang: Kohlenstoff: (o) [MMK 97], Stickstoff ( $\Delta$ ) [DMP 99], Sauerstoff ( $\square$ ) [DMP 99].

Man kann an diesem Bild keine Systematik, z.B. in Form eines Skalierungsgesetzes, für alle Systeme entdecken.

Die Ursache hierfür wird durch die Betrachtung der Korrelationsdiagramme angedeutet. Während im System  $(B - He)^{5+}$  der Eingangskanal energetisch zwischen den Einfangkanälen in den Grundzustand und in die L-Schale des Projektils verläuft, verschiebt er sich mit zunehmender Targetladung und somit zunehmender Bindungsstärke immer weiter zu kleineren Energien hin. Die Kreuzungssituation zwischen Eingangskanal und Einfangkanal in den Grundzustand des  $\alpha$ -Teilchens wird beim Kohlenstoff erreicht.

Für Stickstoff, Sauerstoff und noch höhere Projektilladungen befindet sich der Eingangskanal energetisch unterhalb des 1s-Projektil-Einfangkanals und entfernt sich immer



**Abbildung 3.11:** Totale Wirkungsquerschnitte für Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem.

weiter. Dieses unterschiedliche Kopplungsverhalten zeigt, daß erst ab dreifach positiver Targetladung eine systematische Abnahme der Einfangquerschnitte auftritt (siehe Abbildung 3.10). Das System  $He^{2+} + B^{2+}$  kann wegen des Einfangs in angeregte Projektilezustände nicht in diese Systematik eingeordnet werden.

Eine andere Situation findet man bei den Ionisationsquerschnitten. Diese sind für alle vier Systeme in Abbildung 3.11 zu sehen. Deutlich erkennbar ist eine systematische Abnahme der Querschnitte mit zunehmender Targetladung.

Der Grund hierfür ist in dem mit größerer Targetladung ansteigenden Ionisationspotential für das aktive 2s-Leuchtelektron des jeweiligen Targetions zu sehen. Die Ioni-

Ion	Ionisationspotential [a.u.]
$B^{2+}$	1,389
$C^{3+}$	2,364
$N^{4+}$	3,591
$O^{5+}$	5,067

**Tabelle 3.1:** Ionisationspotentiale der 2s-Elektronen der Li-ähnlichen Ionen.

sationspotentiale für die vier verwendeten Li-ähnlichen Ionen sind in Tabelle 3.1 zusammengefaßt. Das 2s-Elektron des  $B^{2+}$ -Ions besitzt das kleinste Ionisationspotential und ist somit am schwächsten gebunden, d.h. auch am leichtesten zu entfernen. Die zunehmende elektrostatische Ladung führt zu einer stärkeren Bindung und einer geringeren Ionisationswahrscheinlichkeit für das jeweilige 2s-Elektron. Daraus resultiert unmittelbar, daß die Ionisationsquerschnitte mit zunehmender Targetladung kleiner werden und sich ihre Maxima zu immer größeren Projektilenergien hin verschieben (Abbildung 3.11).

## 3.2 Untersuchung der 2p-Anregung im Stoßsystem $He^{2+} + O^{5+}$

Wie schon in der Einleitung zu diesem Kapitel erwähnt wurde, existiert neben Einfang und Ionisation noch ein dritter inelastischer Prozeß: die Anregung. Betrachtet man die in den vorangegangenen Abschnitten erläuterten Korrelationsdiagramme für Stoßsysteme aus  $\alpha$ -Teilchen und Li-ähnlichen Ionen genauer, so fällt auf, daß die Eingangskanäle für die aktiven 2s-Leuchtelektronen der Targetionen energetisch immer sehr dicht bei den 2p-Anregungskanälen verlaufen. Auf diese Weise ergeben sich starke Kopplungen in die 2p-Niveaus, weswegen auch große 2p-Anregungsquerschnitte erwartet werden können.

In diesem Abschnitt soll betrachtet werden, inwieweit diese großen Querschnitte zur Untersuchung des Abschirmpotentials genutzt werden können, das zur Beschreibung der passiven 1s-Elektronen verwendet wird. Ein effektives Coulomb-Potential mit Kernladung  $Z_{eff}$  wird dabei mit den Ergebnissen des LDA- bzw. OPM-Potentials im Stoßsystem  $He^{2+} + O^{5+}$  verglichen.

### 3.2.1 Verwendete Potentiale

Die wesentlichen Unterschiede des LDA- und des OPM-Potentials wurden schon in Abschnitt 2.1 behandelt. An dieser Stelle sei noch einmal erwähnt, daß wegen der unvollkommenen Korrektur des Selbstwechselwirkungsterms der Austauschanteil des Potentials in der LDA mangelhaft ist<sup>1</sup>. Im Gegensatz dazu ist der exakte Austausch, d.h. dessen optimale lokale Näherung, im OPM-Potential enthalten. Der Vergleich beider Potentiale bietet sich also an, um Austauscheffekte zu untersuchen.

Eine noch einfachere Modellierung der betrachteten Dreielektronen-Situation erhält man durch ein effektives Coulomb-Potential. Es ergibt sich zu

$$V_{eff} = -\frac{Z_{eff}}{r} = -\frac{Z - N_{1s}}{r}, \quad (3.3)$$

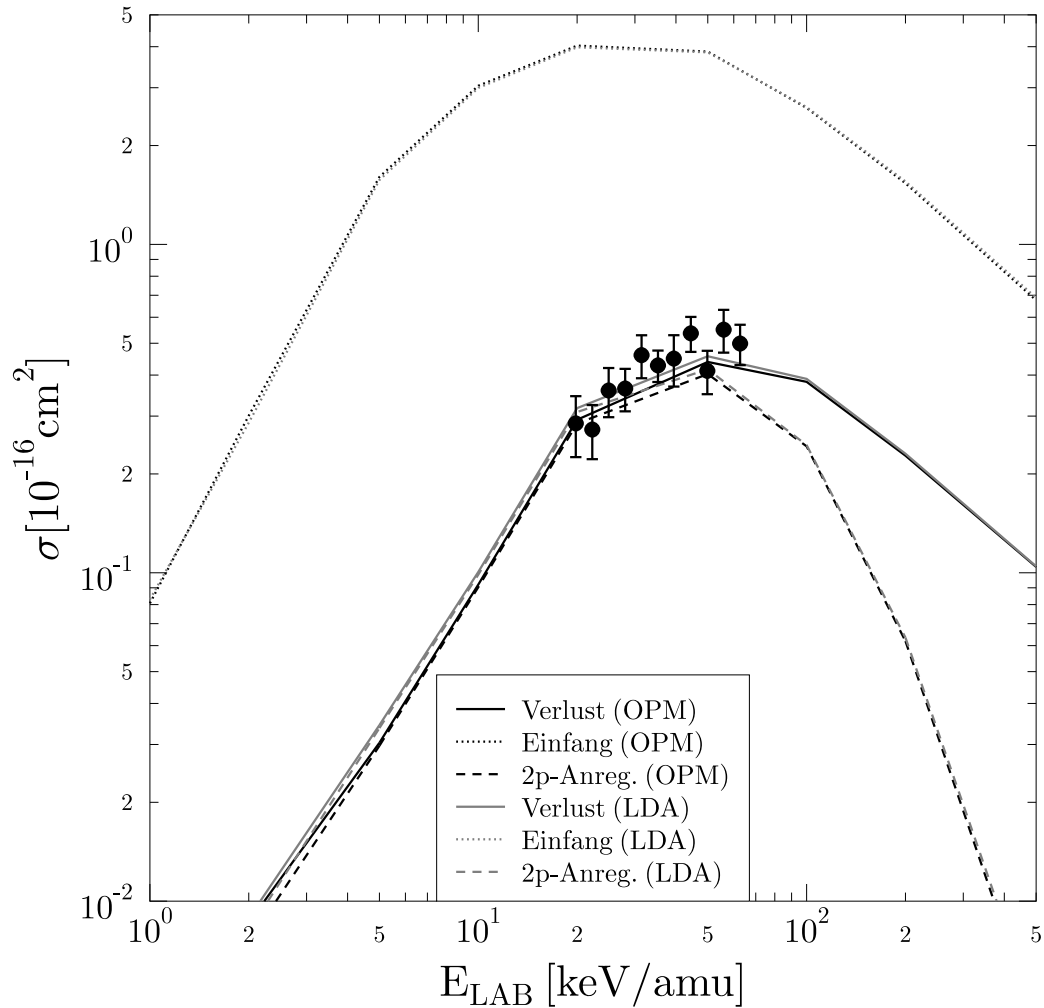
d.h. die wahre Kernladung  $Z$  wird durch Subtraktion der Anzahl der vorhandenen inneren 1s-Elektronen  $N_{1s}$  auf eine effektive Kernladung  $Z_{eff}$  reduziert.

---

<sup>1</sup>Selbstverständlich ist das LDA-Potential Latter-korrigiert, besitzt also die korrekte räumliche Asymptotik. Der exponentielle Abfall wurde einer  $-1/r$ -Asymptotik des Gesamtpotentials angepaßt.

### 3.2.2 Ergebnisse im Vergleich

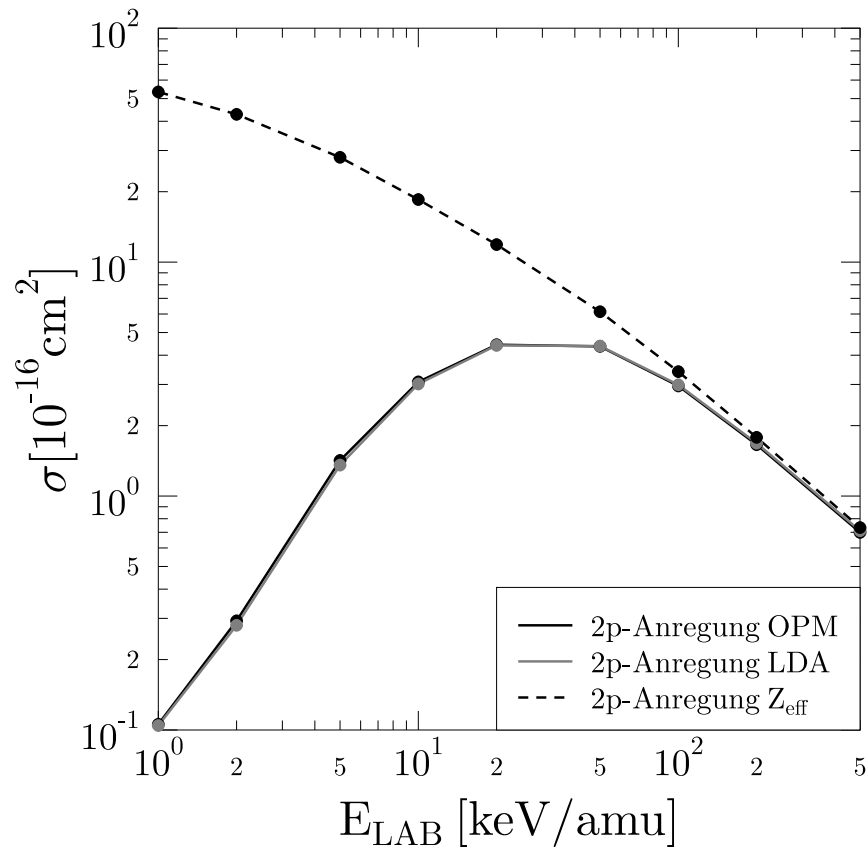
Um zu beurteilen, ob Austauscheffekte beobachtet werden können, zeigt Abbildung 3.12 die totalen Wirkungsquerschnitte von Einfang, Verlust und 2p-Anregung sowohl für das LDA- als auch das OPM-Potential. Es ist leicht zu erkennen, daß die jeweiligen Kurven für beide Potentiale nahezu identisch verlaufen. Das Stoßsystem ist also elektrostatisch dominiert, Austauscheffekte sind von untergeordneter Bedeutung.



**Abbildung 3.12:**  $He^{2+} + O^{5+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und 2p-Anregung als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem für LDA- und OPM-Potential; experimentelle Daten für Einfang (●): [DMP 99].

Wie zu sehen ist, liegen die 2p-Anregungsquerschnitte im gesamten Energiebereich um fast eine Größenordnung über dem Verlustquerschnitt. Dieses Phänomen, die Größe der 2p-Anregungsquerschnitte betreffend, wurde schon in den Korrelationsdiagrammen durch

die unmittelbare Nähe von Einfang- und 2p-Anregungskanälen angedeutet und bestätigt sich in diesem Bild. Vergleicht man die 2p-Anregungsquerschnitte für alle drei Potentiale (Abbildung 3.13), so treten hier doch recht große Abweichungen zwischen dem  $Z_{eff}$ -Potential einerseits und dem LDA- bzw. OPM-Potential andererseits auf. Man kann die starke Erhöhung des mit dem  $Z_{eff}$ -Potential berechneten Wirkungsquerschnittes durch die im Gegensatz zum LDA- bzw. OPM-Potential vorhandene Entartung zwischen den 2p- und den 2s-Niveaus erklären. Diese Entartung der  $n = 2$  Zustände für das  $Z_{eff}$ -Potential wird im Falle des LDA- bzw. OPM-Potentials durch die Abschirmung der beiden inneren 1s-Elektronen aufgehoben, so daß schließlich lediglich die 2p-Niveaus entartet sind. Auf diese Weise kommt der in Abbildung 3.13 am niederenergetischen Ende der Skala die beiden anderen Kurven um fast drei Größenordnungen überwiegende 2p-Anregungsquerschnitt für das effektive Coulomb-Potential zustande.



**Abbildung 3.13:**  $He^{2+} + O^{5+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für 2p-Anregung als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem für LDA-, OPM- und  $Z_{eff}$ -Potential.

Da auch der Einfluß der Korrelation rein elektrostatischer Natur ist, kann darauf gehofft werden, die 2p-Anregung in diesen Systemen zur Untersuchung der, wenn auch recht schwachen, Korrelationseffekte zu verwenden und vielleicht im Wirkungsquerschnitt sichtbar machen zu können.



# Kapitel 4

## Stöße vollständig ionisierter Projektionen mit $N^{4+}$

In der Einleitung zu Kapitel 3 wurde darauf hingewiesen, daß für Stoßsysteme aus  $\alpha$ -Teilchen und Li-ähnlichen Ionen die inneren 1s-Elektronen des Targetions lediglich passive Zuschauerelktronen sind, d.h. sie sind nicht am Stoß beteiligt und können in Form eines effektiven Abschirmpotentials beschrieben werden. Wird jedoch die Projektilladung erhöht, so kommt es zu einer Aktivierung der 1s-Elektronen und für das 2s-Leuchtelektron bieten sich immer höhere Projektilschalen als Einfangkanäle an. Dieser Sachverhalt soll im vorliegenden Kapitel anhand von Stößen vollständig ionisierter Projektionen mit  $N^{4+}$  erläutert werden. Die Energieeigenwerte für die 1s- und 2s-Schale des  $N^{4+}$ -Ions betragen  $N^{4+}(1s)$ : -18,219 a.u. und  $N^{4+}(2s)$ : - 3,591 a.u. .

Vergleicht man diese mit den Energieeigenwerten der n-ten Hauptschalen für wasserstoffähnliche Ionen der Kernladung  $Z$ , die sich gemäß der Formel

$$E = -\frac{Z^2}{2n^2} \text{ a.u.} \quad (4.1)$$

in atomaren Einheiten ergeben (Tabelle 4.1), so wird die angesprochene Verschiebung der Einfangkanäle bzw. die Aktivierung der 1s-Elektronen sichtbar.

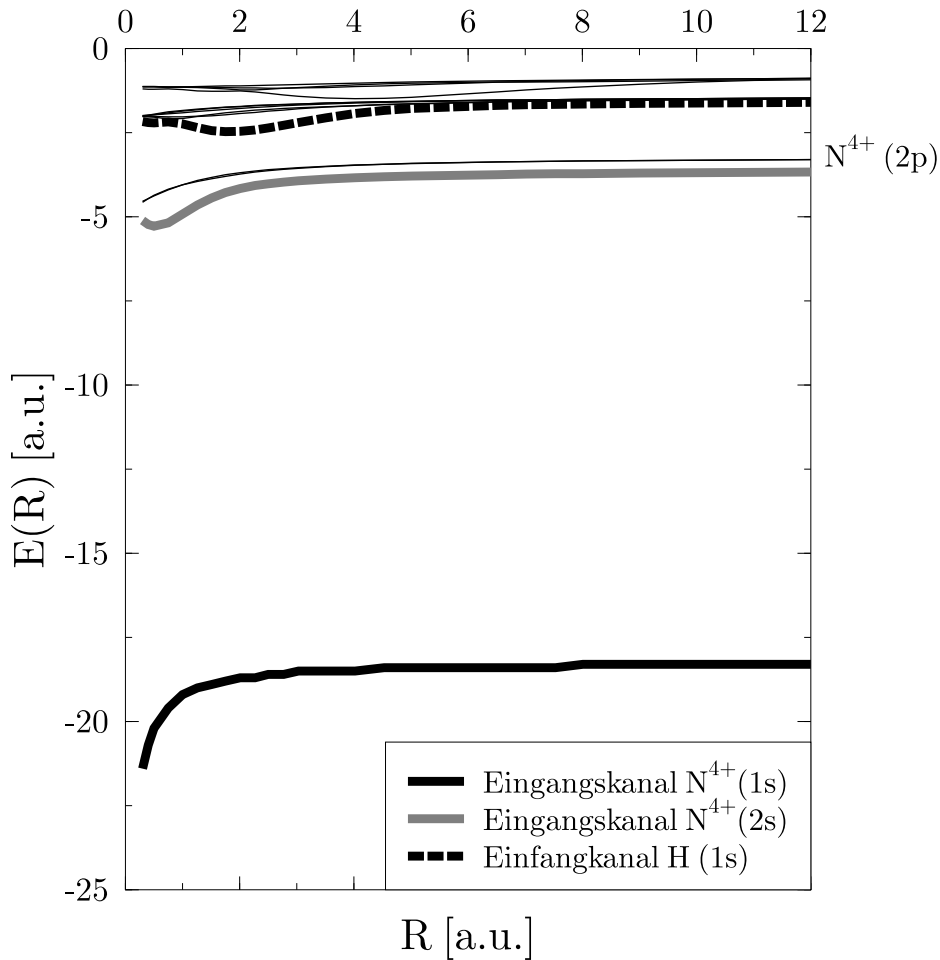
Projektil	Z	n		
		1	2	3
$p$	1	- 0,5	-0,125	-0,055
$He^{2+}$	2	- 2,0	-0,500	-0,220
$Li^{3+}$	3	- 4,5	-1,125	-0,500
$Be^{4+}$	4	- 8,0	-2,000	-0,880
$B^{5+}$	5	-12,5	-3,125	-1,380
$C^{6+}$	6	-18,0	-4,500	-2,000

**Tabelle 4.1:** Energieeigenwerte für wasserstoffähnliche Ionen.

Die Details werden in den nachfolgenden Abschnitten anhand von Korrelationsdiagrammen für die einzelnen Systeme erläutert. Die verwendete BGM-Basis umfaßte 108 Funktionen mit den Parametern  $N = 20$  und  $M = 8$ .

## 4.1 $p + N^{4+}$

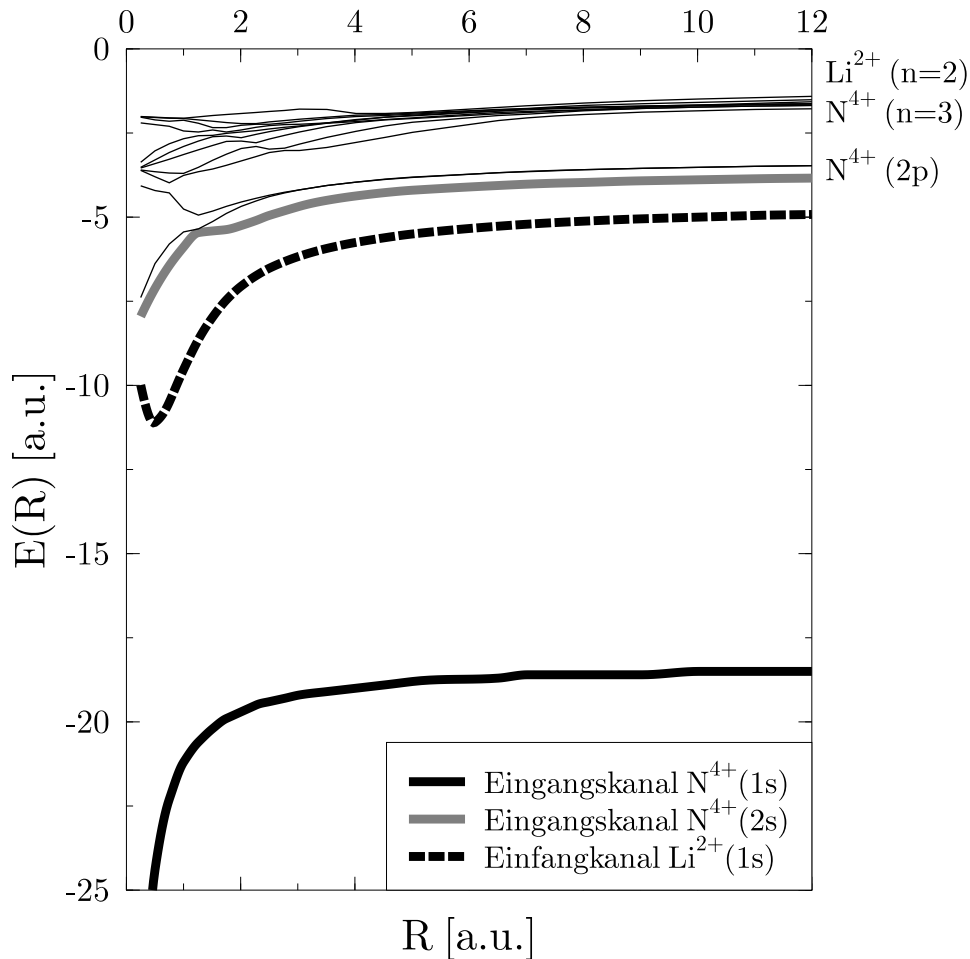
Ausgangspunkt für die betrachtete Sequenz ist das Stoßsystem  $p + N^{4+}$ . Der einzig mögliche Einfangkanal verläuft energetisch gesehen über dem Eingangskanal des 2s-Leuchtelektrons des  $N^{4+}$ -Ions, wie das Korrelationsdiagramm in Abbildung 4.1 zeigt. Somit stellt der Einfang in den Grundzustand des Protons die einzige Möglichkeit für eine Transferreaktion dar.



**Abbildung 4.1:** Korrelationsdiagramm für  $p + N^{4+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

## 4.2 $\text{Li}^{3+} + \text{N}^{4+}$

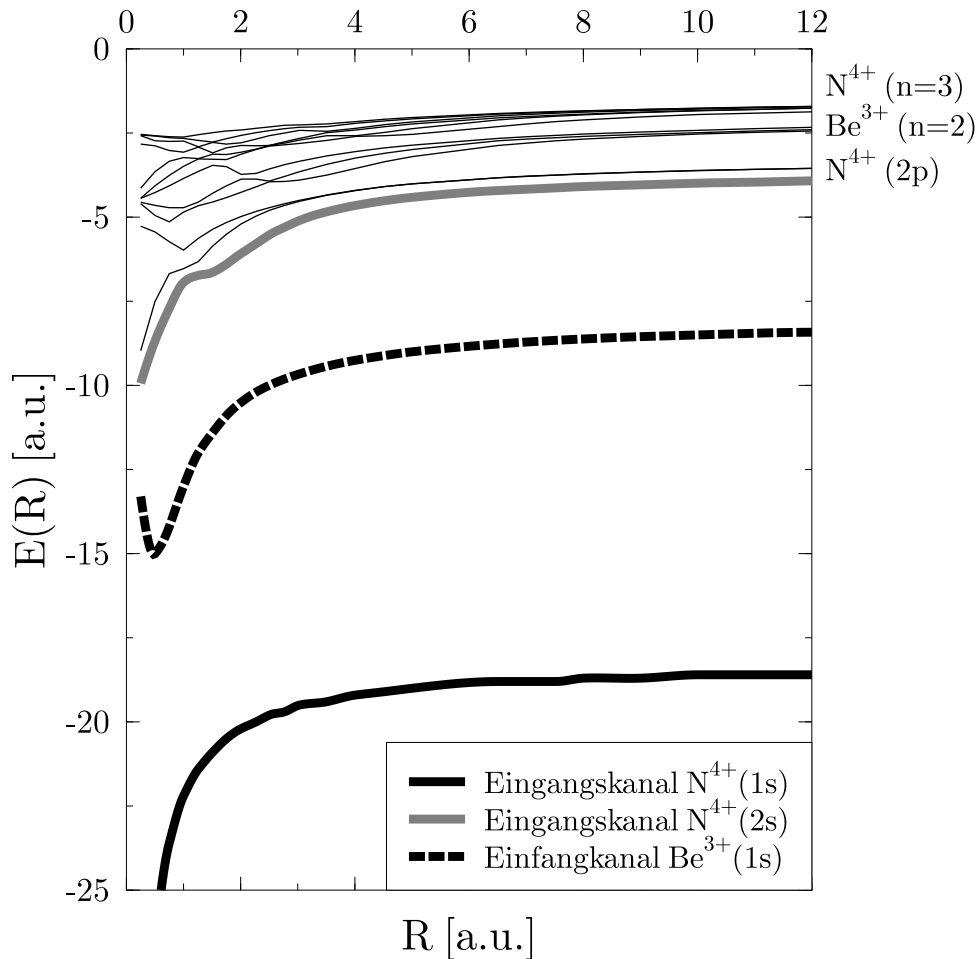
Da das dem Proton folgende nächst höher geladene Projektil, das  $\alpha$ -Teilchen, schon in Abschnitt 3.1.3 behandelt wurde, wird nun als Projektil das  $\text{Li}^{3+}$ -Ion verwendet. Bei diesem System liegt der Eingangskanal des 2s-Leuchtelektrons des  $\text{N}^{4+}$ -Ions energetisch zwischen dem Eingangskanal in den Grundzustand und den Eingangskanälen in die  $n = 2$  Schale des Projektils, was im Korrelationsdiagramm in Abbildung 4.2 zu erkennen ist. Die Situation ist ähnlich der des in Abschnitt 3.1.1 besprochenen Stoßsystems  $\text{He}^{2+} + \text{B}^{2+}$ . Die 1s-Elektronen des Targets bleiben wegen des großen energetischen Abstands zu den Projektilkanälen weiterhin passiv.



**Abbildung 4.2:** Korrelationsdiagramm für  $\text{Li}^{3+} + \text{N}^{4+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

### 4.3 $Be^{4+} + N^{4+}$

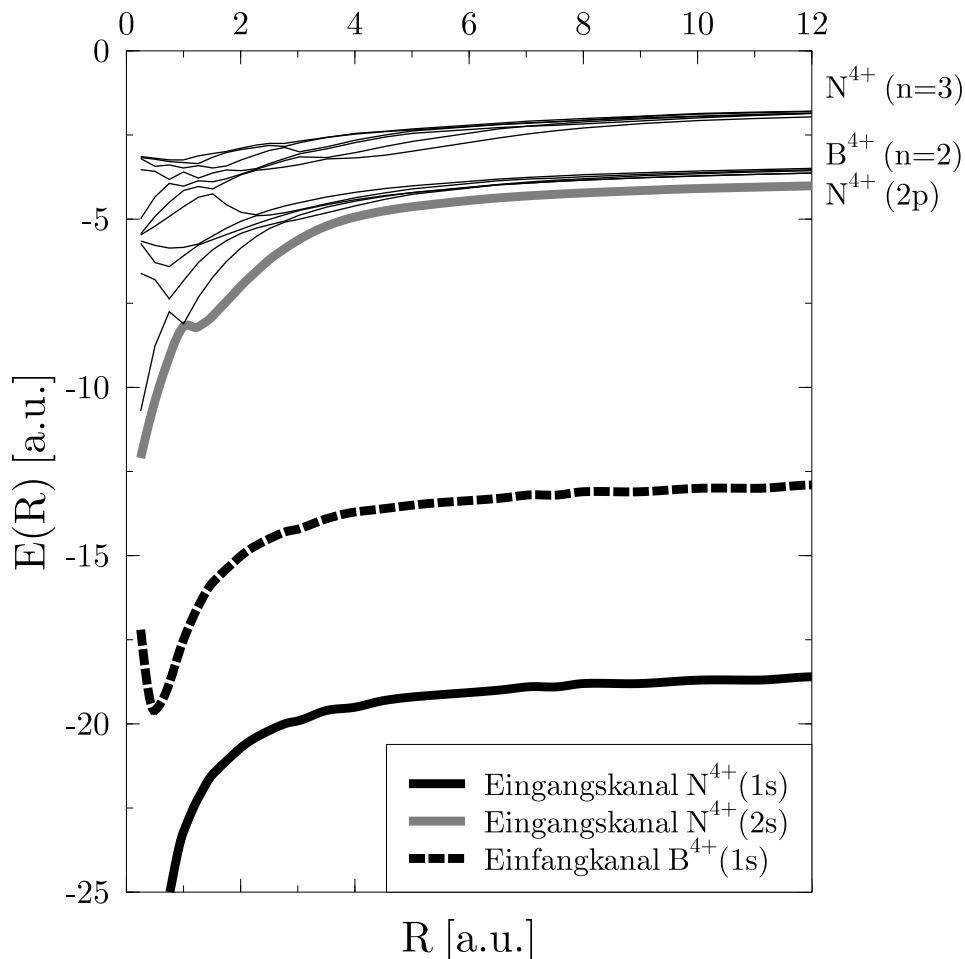
Dem  $Li^{3+}$ -Target folgt in der Sequenz das  $Be^{4+}$ -Ion als Target. Das entsprechende Korrelationsdiagramm für dieses Stoßsystem ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Während der Einfangkanal in den Grundzustand des Projektils sich energetisch immer weiter dem Eingangskanal der 1s-Elektronen des  $N^{4+}$ -Ions nähert, rückt der Eingangskanal des 2s-Leuchtelektrons des Targets immer näher an die Einfangkanäle in die  $n = 2$  Schale des Projektils heran. Er verläuft allerdings immer noch zwischen den Einfangkanälen in das 1s-Orbital bzw. die  $n = 2$  Schale des Projektils. Jedoch wird bei diesem Stoßsystem im Vergleich zum vorhergehenden der Einfang nach  $n = 2$  zunehmend betont.



**Abbildung 4.3:** Korrelationsdiagramm für  $Be^{4+} + N^{4+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

## 4.4 $B^{5+} + N^{4+}$

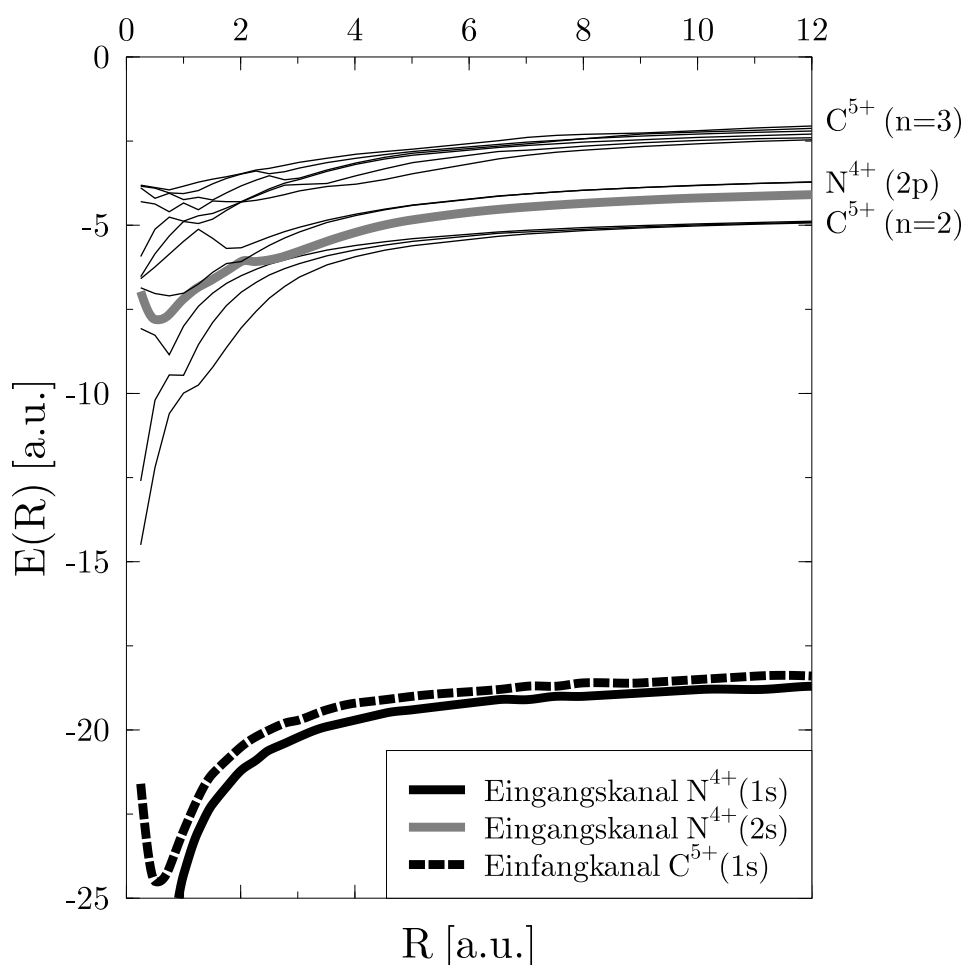
Als vorletztes Projektil wird das  $B^{5+}$ -Ion betrachtet. Man erkennt am Korrelationsdiagramm (Abbildung 4.4), daß sich der Eingangskanal in den Grundzustand des Projektils energetisch noch weiter dem Eingangskanal der 1s-Elektronen des  $N^{4+}$ -Ions genähert hat. Diese inneren Targetelektronen werden also zunehmend aktiviert und nehmen am Stoßgeschehen teil. Der Einfang des 2s-Leuchtelektrons des Targets in den Grundzustand des Projektils wird im Zuge dieser Entwicklung immer mehr unterdrückt. Energetisch verläuft dessen Eingangskanal nun sehr dicht unterhalb der Einfangkanäle in die angeregten Projektilzustände mit  $n = 2$ , welche nun den gesamten Einfang dominieren.



**Abbildung 4.4:** Korrelationsdiagramm für  $B^{5+} + N^{4+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

## 4.5 $C^{6+} + N^{4+}$

Das höchstgeladene Projektil in der Stoßsequenz ist das  $C^{6+}$ -Ion. Am Korrelationsdiagramm in Abbildung 4.5 zeigt sich sofort, daß die 1s-Elektronen des Targets nun erheblichen Einfluß besitzen. Ihr Eingangskanal verläuft energetisch gesehen nur noch knapp oberhalb dem Einfangkanal in den Grundzustand des Projektils. Hier ist eine starke Radialkopplung zu erwarten. Der Eingangskanal des 2s-Leuchtelektrons des Targets ist dagegen energetisch eine Schale aufwärts geschoben worden und verläuft jetzt zwischen den Einfangkanälen in die  $n = 2$  und  $n = 3$  Schalen des Projektils.

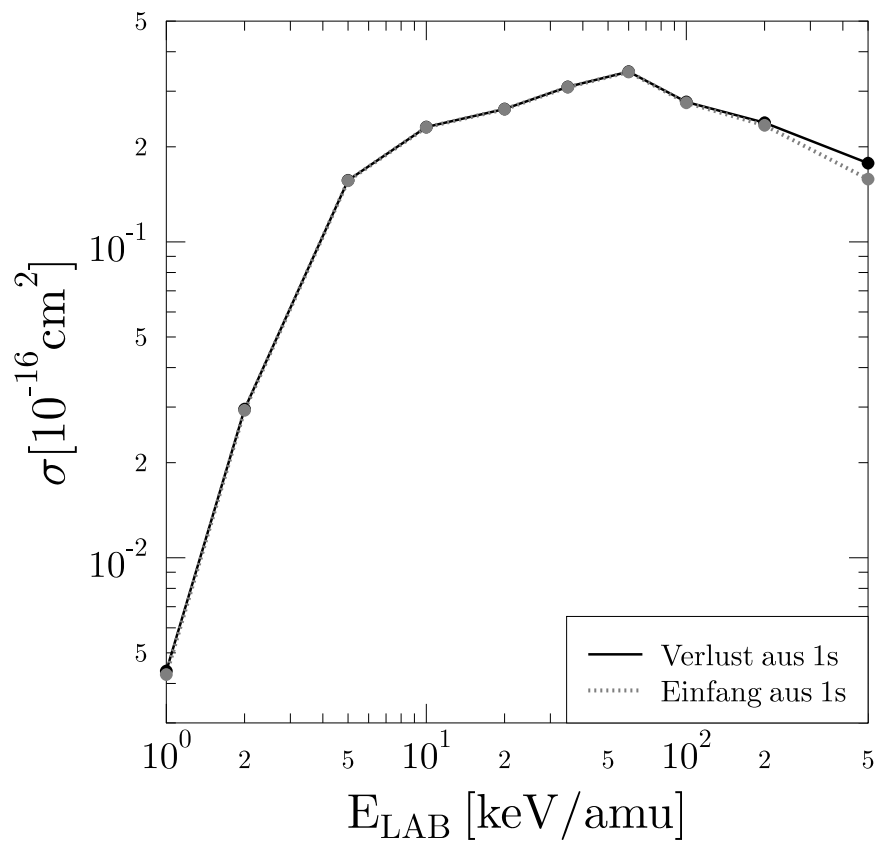


**Abbildung 4.5:** Korrelationsdiagramm für  $C^{6+} + N^{4+}$  als Funktion des internuklearen Abstandes  $R$ . Hervorgehoben sind Eingangskanal und Einfangkanal.

Um die Aktivität der inneren 1s-Elektronen des Targetions zu bestätigen, sind in Abbildung 4.6 die entsprechenden Wirkungsquerschnitte für Verlust und Einfang eines 1s-Elektrons gezeigt.

Sofort wird deutlich, daß fast über den gesamten Energiebereich hinweg der Verlust durch den Einfang dominiert wird. Erst am hochenergetischen Ende der Skala gewinnt die

Ionisation an Bedeutung. Mit anderen Worten, wenn die 1s-Elektronen aktiviert werden, dann in Form einer Einfangreaktion. Die Ionisation eines solchen K-Schalen-Elektrons ist sehr unwahrscheinlich.

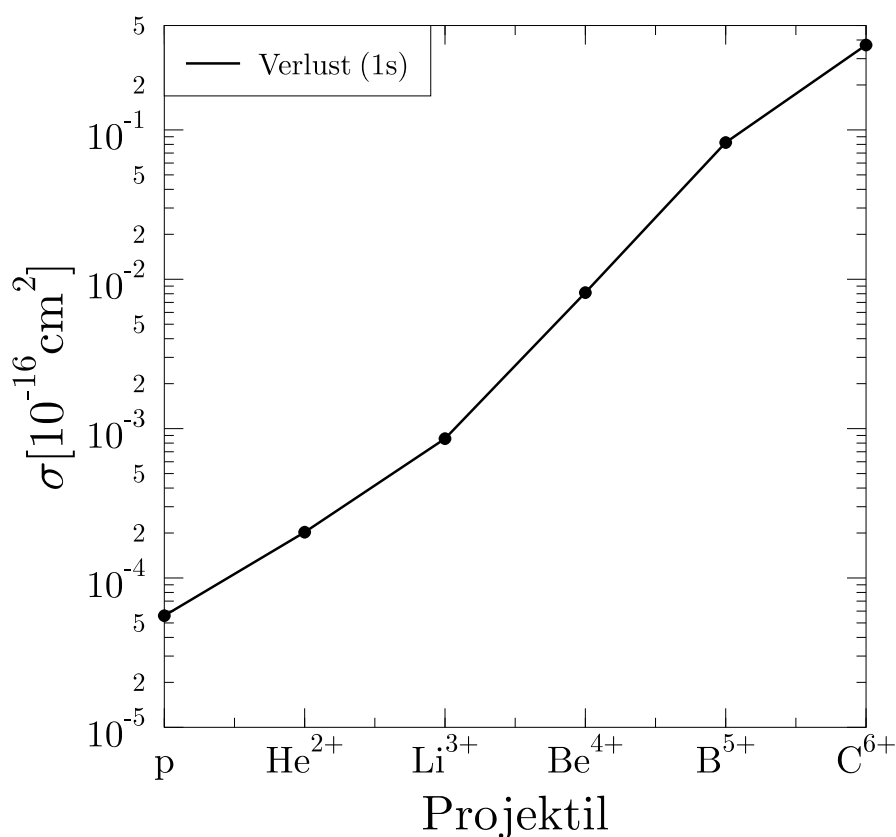


**Abbildung 4.6:**  $C^{6+} + N^{4+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust und Einfang als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem für ein aktives 1s-Elektron.

## 4.6 Vergleich der Stoßsysteme

Die in den vorhergehenden Abschnitten dargestellten Sachverhalte, zum einen die Aktivierung der 1s-Elektronen und zum anderen die Verschiebung der Einfangkanäle für das 2s-Leuchtelektron des Targets, werden in den beiden Abbildungen 4.7 und 4.8 als Funktionen der Projektilladung verdeutlicht.

Abbildung 4.7 zeigt, wie beispielsweise bei einer Projektilenergie von 100 keV/amu im Laborsystem der Verlustquerschnitt für ein 1s-Elektron über drei Größenordnungen hinweg zunimmt. Wie schon zuvor erwähnt, ist der Verlust im Falle der K-Schalen-Elektronen mit dem Einfang gleichzusetzen.

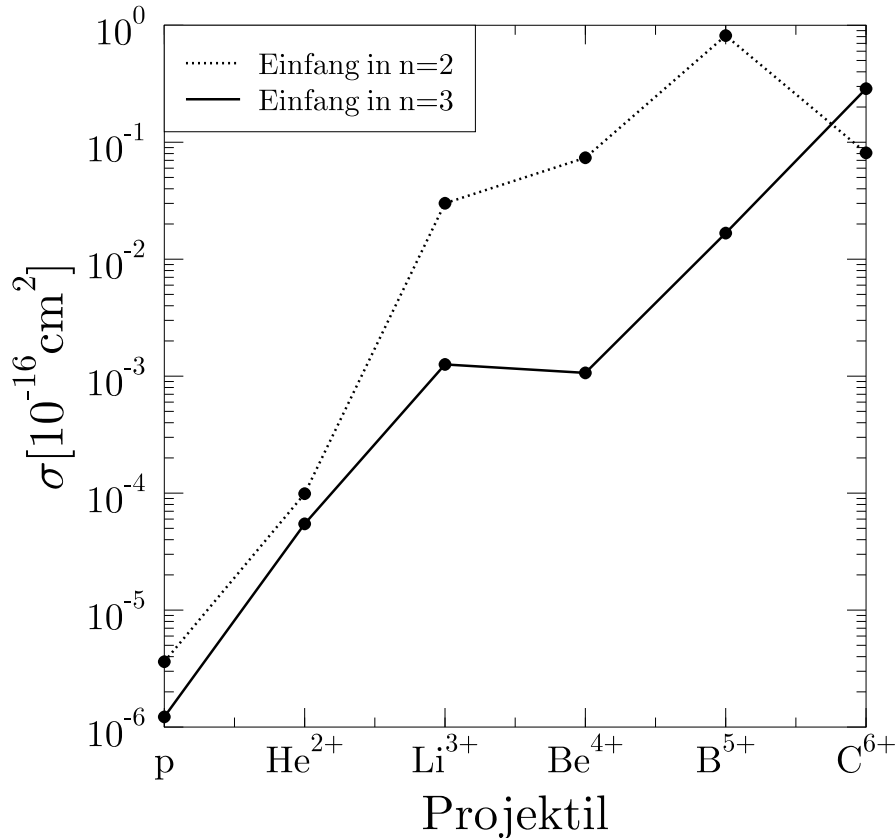


**Abbildung 4.7:** Totaler Wirkungsquerschnitt für den Verlust eines 1s-Elektrons bei 100 keV/amu Projektilenergie im Laborsystem für die verschiedenen vollständig ionisierten Projektile.

In Abbildung 4.8 ist zu sehen, wie z.B. bei einer Energie von 1 keV/amu der Einfang des 2s-Elektrons des  $N^{4+}$ -Ions mit wachsender Projektilladung in höhere Schalen des Projektils stattfindet. Dabei ist beispielsweise am Projektilwechsel von  $B^{5+}$  nach  $C^{6+}$  zu erkennen, daß im Falle zweier Transferkanäle zunächst bei niedrigen Stoßenergien in den höher angeregten Projektilzustand eingefangen wird. So sieht man, daß für die Situation



$C^{6+} + N^{4+}$ , in der sowohl Einfang nach  $n = 2$  als auch nach  $n = 3$  denkbar wäre, zuerst der Einfang in das höher angeregte  $n = 3$  Niveau dominiert. Im Zuge dieser Entwicklung nimmt der Einfangquerschnitt nach  $n = 3$  im Vergleich zum vorhergehenden Projektil zu, wohingegen der nach  $n = 2$  kleiner wird. Dies hat wie schon weiter oben erwähnt wurde (siehe Abschnitt 3.1.1) kinematische Gründe.

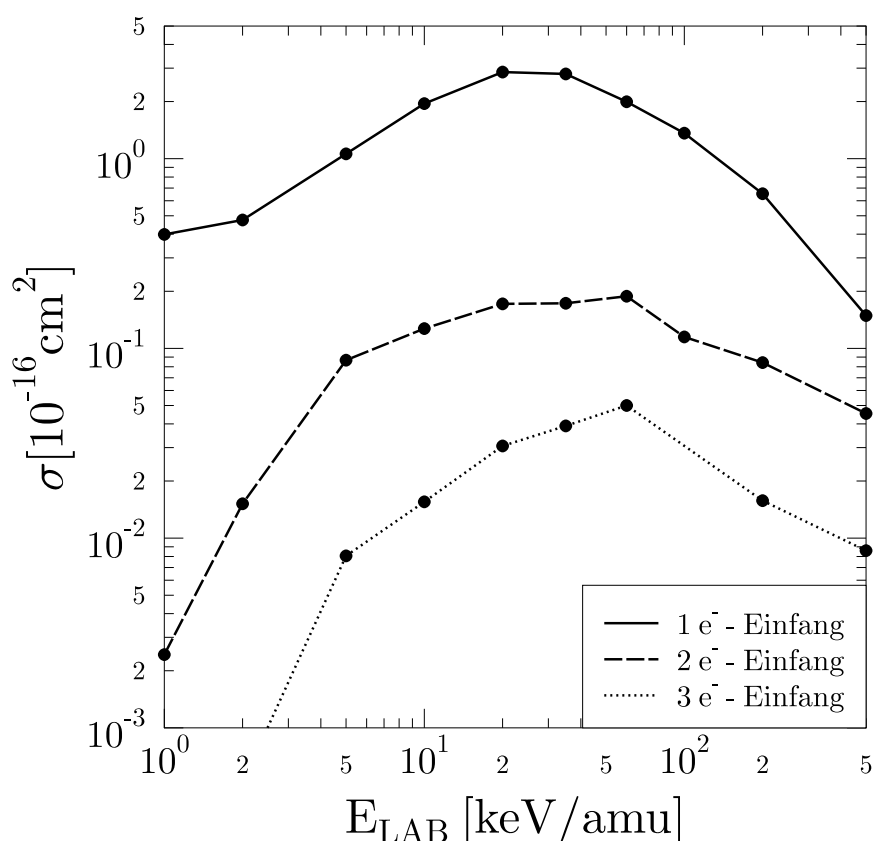


**Abbildung 4.8:** Totale Wirkungsquerschnitte für den Einfang nach  $n = 2$  und  $n = 3$  bei 1 keV/amu Projektilenergie im Laborsystem für die verschiedenen vollständig ionisierten Projektile.

Das unsystematische Verhalten der beiden Kurven für den Einfang nach  $n = 2$  und  $n = 3$  im Bereich der Projektile  $Li^{3+}$  und  $Be^{4+}$  resultiert aus numerischen Problemen bei der Darstellung der entsprechenden bewegten Projektilezustände durch die benutzten BGM-Funktionen.

## 4.7 Auswertung von möglichen Vielteilchenprozessen im Stoßsystem $C^{6+} + N^{4+}$

Die Abschnitte 4.5 und 4.6 haben gezeigt, daß im Stoßsystem  $C^{6+} + N^{4+}$  alle drei Targetelektronen aktiv sind. Damit sind natürlich im Prinzip auch Mehrteilchenreaktionen, wie z.B. Mehrfacheinfang, Mehrfachionisation und Transferionisation, realisierbar und können entsprechend ausgewertet werden.



**Abbildung 4.9:**  $C^{6+} + N^{4+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Vielfacheinfang als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem.

Für die drei Elektronen des Stoßsystems  $C^{6+} + N^{4+}$  sind die verschiedenen aktiven Schalen voneinander separiert, d.h. die inneren 1s-Elektronen des Targetions werden immer in den Grundzustand des Projektils eingefangen, das 2s-Leuchtelektron ausnahmslos in entsprechend höher angeregte Einfangkanäle. Aus diesem Grund ist eine Multinomialauswertung im Rahmen des Modells unabhängiger Teilchen gerechtfertigt, und es kann auf die Komplikationen, die bei Berücksichtigung des Pauli-Prinzips und der Schalenstruktur auftreten [Ki 99], verzichtet werden.

So ergeben sich aus einfachen kombinatorischen Überlegungen für die drei möglichen Einfangreaktionen die Vielfachwahrscheinlichkeiten (4.2), (4.3) und (4.4), wobei mit

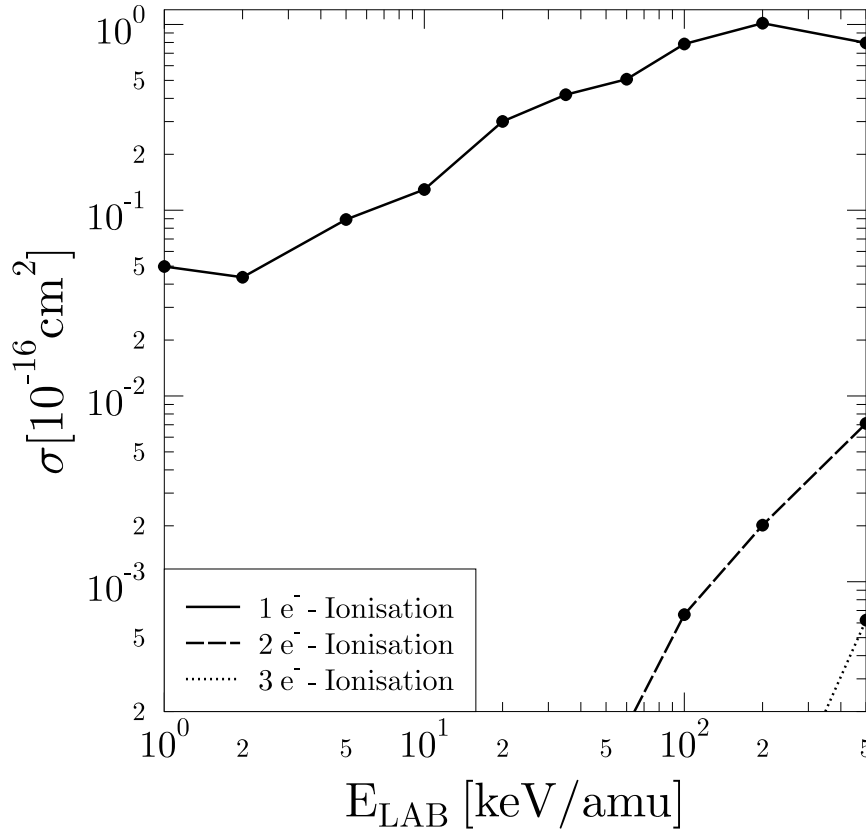
$P_{xy}$  die Wahrscheinlichkeit für den Einfang von  $x$ -Elektronen und die Ionisation von  $y$ -Elektronen bezeichnet wurde. Die so berechneten Wirkungsquerschnitte sind in Abbildung 4.9 zusammengestellt

$$\begin{aligned} \text{Einfach-Einfang: } P_{10} &= 2P_{Ein}^{1s}(1 - P_{Verl}^{1s})(1 - P_{Verl}^{2s}) + \\ &P_{Ein}^{2s}(1 - P_{Verl}^{1s})(1 - P_{Verl}^{1s}) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \text{Zweifach-Einfang: } P_{20} &= 2P_{Ein}^{1s}P_{Ein}^{2s}(1 - P_{Verl}^{1s}) + \\ &P_{Ein}^{1s}P_{Ein}^{1s}(1 - P_{Verl}^{2s}) \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\text{Dreifach-Einfang: } P_{30} = P_{Ein}^{1s}P_{Ein}^{1s}P_{Ein}^{2s} . \quad (4.4)$$

Wie zu erwarten war, werden die Wirkungsquerschnitte mit steigender Zahl der eingefangenen Elektronen kleiner, wobei der Einfacheinfang natürlich durch den Einfang des 2s-Leuchtelektrons des  $C^{6+}$ -Ions dominiert wird.



**Abbildung 4.10:**  $C^{6+} + N^{4+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Vielfachionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem.

Eine analoge Überlegung läßt sich für die Vielfachionisation anstellen. Die Vielfachionisationswahrscheinlichkeiten (4.5), (4.6) und (4.7) führen zu den in Abbildung 4.10 gezeigten Wirkungsquerschnitten

$$\begin{aligned} \text{Einfach-Ionisation:} \quad P_{01} &= 2(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(1 - P_{Verl}^{1s})(1 - P_{Verl}^{2s}) + \\ &\quad (P_{Verl}^{2s} - P_{Ein}^{2s})(1 - P_{Verl}^{1s})(1 - P_{Verl}^{1s}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \text{Zweifach-Ionisation:} \quad P_{02} &= 2(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(P_{Verl}^{2s} - P_{Ein}^{2s})(1 - P_{Verl}^{1s}) + \\ &\quad (P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(1 - P_{Verl}^{2s}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\text{Dreifach-Ionisation:} \quad P_{03} = (P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(P_{Verl}^{2s} - P_{Ein}^{2s}) . \quad (4.7)$$

Auffällig ist der starke Abfall der Wirkungsquerschnitte für Zwei- bzw. Dreifachionisation. Er kann durch die Eigenschaft der 1s-Elektronen des  $C^{6+}$ -Targets erklärt werden, die fast ausschließlich zu Einfangreaktionen beitragen. Erst bei sehr großen Stoßenergien bietet sich die Möglichkeit, diese Elektronen zu ionisieren.

Kombinationen aus Einfang und Ionisation sind ebenfalls denkbar. Wendet man die Trinomialstatistik auf solche Transferreaktionen (4.8), (4.9) und (4.10) an, dann erhält man die Wirkungsquerschnitte für Transferionisation, wie sie in Abbildung 4.11 zu sehen sind

Transferionisation (Einfacheinfang, Einfachionisation):

$$\begin{aligned} P_{11} &= 2P_{Ein}^{1s}(P_{Verl}^{2s} - P_{Ein}^{2s})(1 - P_{Verl}^{1s}) + \\ &\quad 2P_{Ein}^{2s}(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(1 - P_{Verl}^{1s}) + \\ &\quad 2P_{Ein}^{1s}(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(1 - P_{Verl}^{2s}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Mehrfachtransfer I (Zweifacheinfang, Einfachionisation):

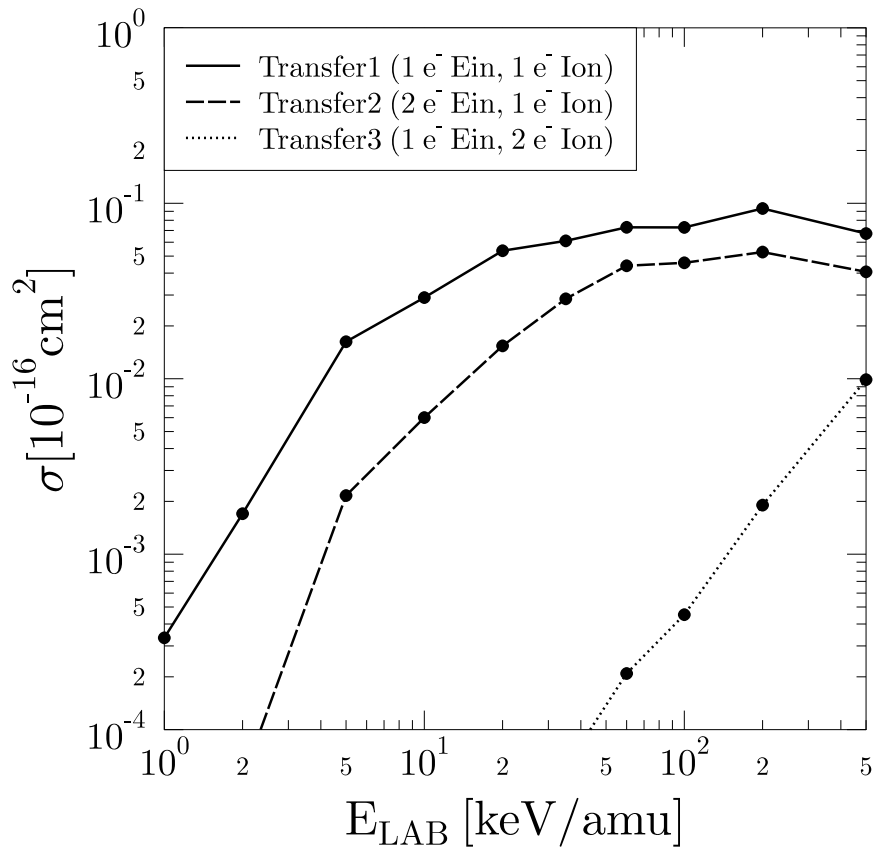
$$\begin{aligned} P_{21} &= 2P_{Ein}^{1s}P_{Ein}^{2s}(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s}) + \\ &\quad P_{Ein}^{1s}P_{Ein}^{1s}(P_{Verl}^{2s} - P_{Ein}^{2s}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Mehrfachtransfer II (Einfacheinfang, Zweifachionisation):

$$\begin{aligned} P_{12} &= 2P_{Ein}^{1s}(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(P_{Verl}^{2s} - P_{Ein}^{2s}) + \\ &\quad P_{Ein}^{2s}(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s})(P_{Verl}^{1s} - P_{Ein}^{1s}) . \end{aligned} \quad (4.10)$$

Den deutlich größten Beitrag liefert die einfache Transferionisation (4.8), gefolgt von den Kombinationen mit höheren Teilchenzahlen. Hierbei ist der Querschnitt für die Transferreaktion, die eine Ionisation zweier Elektronen beinhaltet, wesentlich kleiner als der Querschnitt der beiden anderen, da hier wenigstens ein 1s-Elektron ionisiert werden muß. Diese besondere Eigenschaft der K-Schalen-Elektronen, fast ausschließlich zum Einfang beizutragen, spiegelt sich also auch in der Größe der Transferquerschnitte wieder.

Bei der Betrachtung der Vielteilchenübergänge muß an dieser Stelle noch auf einige grundlegende Schwächen des verwendeten Modells hingewiesen werden. Zum einen wird im Rahmen der statischen Potentialnäherung nicht auf die sich verändernden Poten-



**Abbildung 4.11:**  $C^{6+} + N^{4+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Vielfachtransfer als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem.

tialverhältnisse, z.B. bei Ionisation eines Elektrons, eingegangen. Dies hat zur Folge, daß sich beispielsweise für den Fall der Zweifachionisation das Potential für das zweite zu ionisierende Elektron durch den Verlust des ersten geändert hat. Es befindet sich nun im Feld eines mit  $(n-1)$ -Elektronen umgebenen Targetkerns. Diese Veränderung wird durch das eingefrorene Potential nicht erfaßt.

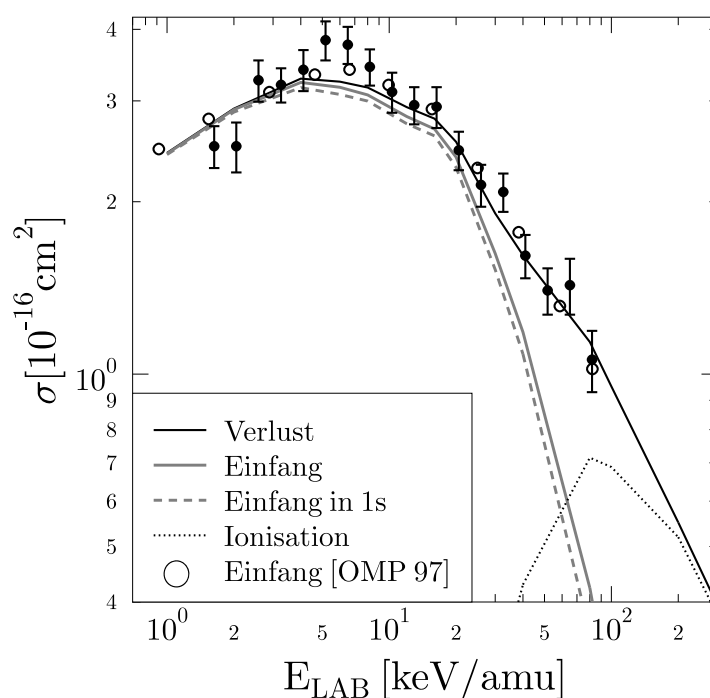
Für Vielfacheinfang überträgt sich diese Problematik ebenso auf das Projektil, weswegen mit einer Überschätzung der Vielfacheinfangquerschnitte zu rechnen ist.



# Kapitel 5

## Genauere Betrachtung des Stoßsystems $He^{2+} + C^{3+}$

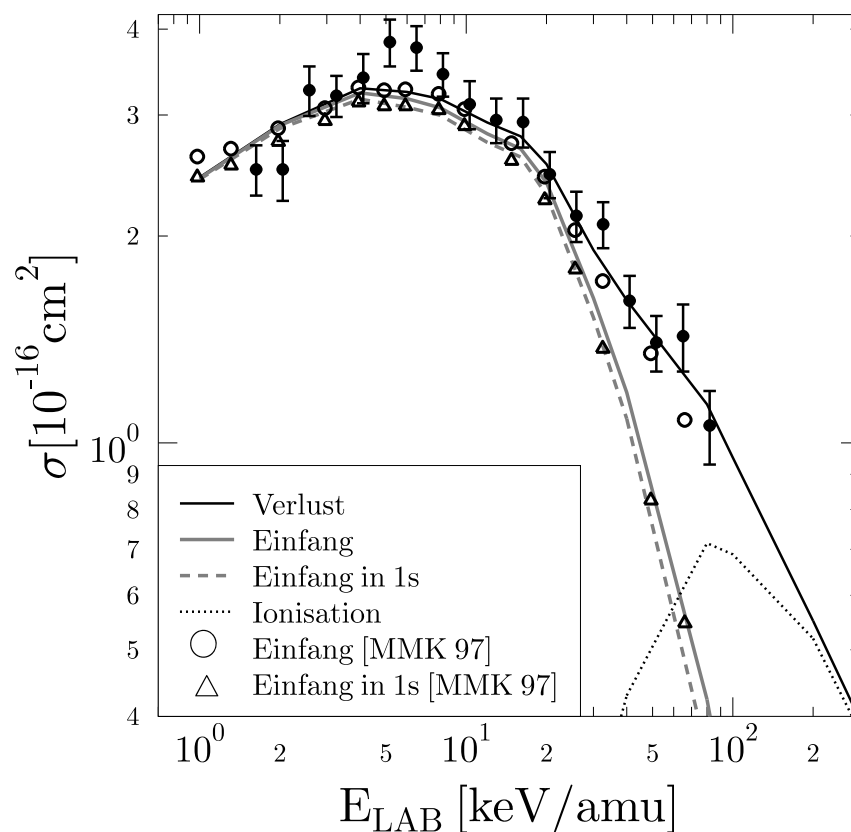
Wie am Ende von Abschnitt 3.1.2 erwähnt worden ist, soll nun auf die Diskrepanzen zwischen den experimentellen Daten und dem mit der Basis Generator Methode berechneten Wirkungsquerschnitt für den Einfang im Stoßsystem  $He^{2+} + C^{3+}$  eingegangen werden. Da für dieses System noch zwei weitere Rechnungen existieren, genauer eine AO- und



**Abbildung 5.1:**  $He^{2+} + C^{3+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem im Vergleich zu einer MO-Theorie [OMP97].

eine MO-Theorie, sollen zunächst einmal die drei Ergebnisse einander gegenübergestellt werden.

Die Ergebnisse der MO-Rechnung und die der BGM sind in Abbildung 5.1 zusammen mit dem Experiment dargestellt. Man erkennt sofort, daß die Datenpunkte der MO-Theorie fast über den gesamten Energiebereich hinweg die experimentellen Punkte wiedergeben, wohingegen die BGM bei einer Laborenergie von ca. 80 keV/amu das Experiment um fast einen Faktor zwei unterschätzt. Da in der MO-Rechnung lediglich der Grundzustand des  $\alpha$ -Teilchens als Einfangkanal angeboten wird, stellt also der gesamte auf diese Weise gewonnene Transferquerschnitt Einfang in den 1s-Zustand des Projektils dar. Im Gegensatz zur BGM wird von der MO-Theorie keine Ionisation in diesem Energiebereich erwartet. Eine völlig andere Situation zeigen die Ergebnisse einer Berechnung mit Hilfe



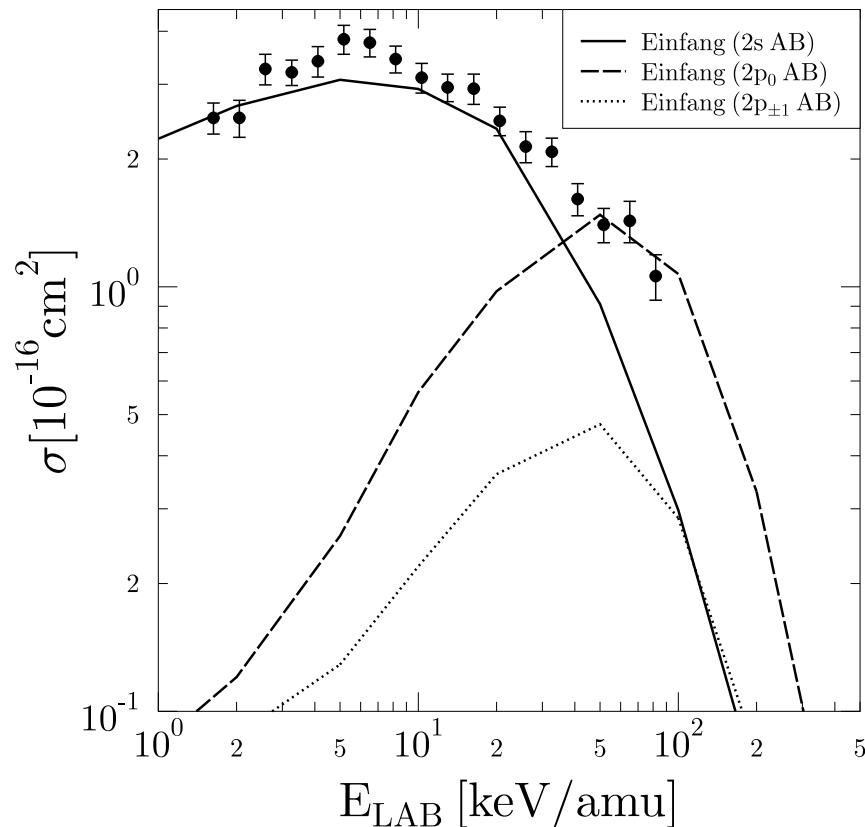
**Abbildung 5.2:**  $\text{He}^{2+} + \text{C}^{3+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Verlust, Einfang und Ionisation als Funktion der Projektilenergie im Laborsystem im Vergleich zu einer AO-Theorie [MMK 97].

einer Zweizentren-AO-Theorie, die zusammen mit den BGM-Ergebnissen und dem Experiment in Abbildung 5.2 zu finden sind. Wie dort zu sehen ist, liegt auch in diesem Fall der von der AO-Theorie gegebene totale Einfangquerschnitt nahezu im ganzen Energiebereich auf dem Experiment. Der Anteil des Einfangs in den Grundzustand des Projektils ist in



guter Übereinstimmung mit den BGM-Daten. In der AO-Rechnung wird die Diskrepanz zwischen dem gesamten Einfang und dem Transfer in den Grundzustand mit Einfang in angeregte Projektilezustände erklärt. Ionisation tritt auch hier im Gegensatz zur BGM nicht auf.

Zusammengefaßt läßt sich sagen, daß die drei Theorien recht unterschiedliche Ergebnisse liefern. Während die MO-Theorie den gesamten experimentell gemessenen Transfer durch Einfang in den Grundzustand erklärt, liefert die AO-Theorie bei Laborenergien ab 50 keV/amu erhebliche Beiträge von Einfang in höhere Schalen des Projektils. Beide Theorien prognostizieren im Gegensatz zur BGM keine Ionisation in diesem Energiebereich. erinnert man sich allerdings an die in Abbildung 3.11 gezeigten Ionisationsquerschnitte für die gesamte Sequenz aus Stößen zwischen  $\alpha$ -Teilchen und Li-ähnlichen Ionen und deren Systematik, so scheint es plausibel zu sein, auch im Stoßsystem  $He^{2+} + C^{3+}$  Ionisation zu erwarten, andernfalls würde die gezeigte Systematik durch einen wesentlich kleineren Ionisationsquerschnitt im Kohlenstoff-System gebrochen.



**Abbildung 5.3:**  $He^{2+} + C^{3+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Einfang aus verschiedenen Anfangsbedingungen; experimentelle Daten für Einfang (●): [MMK 97].

In diesem Kapitel soll nun die angesprochene Diskrepanz im Wirkungsquerschnitt untersucht werden, die offensichtlich von den verschiedenen Theorien in widersprüchli-

cher Weise erklärt wird. Da durch entsprechende Rechnungen in der BGM-Basis für eine 1s-Anfangsbedingung die Beteiligung dieser Elektronen an der Einfangreaktion definitiv ausgeschlossen werden kann und auch eine Verdopplung der Basisgröße von  $N = 10$  auf  $N = 20$  die Konvergenz der Rechnung bestätigt hat, muß die Ursache für die genannten Unstimmigkeiten anderer Natur sein.

Ausgangspunkt für die folgenden Überlegungen sind die in Abbildung 5.3 dargestellten Wirkungsquerschnitte, die zu jeweils anderen Anfangsbedingungen für das einlaufende Elektron gehören. Es fällt auf, daß die Wirkungsquerschnitte für die  $2p_0$ - und die  $2p_{\pm 1}$ -Anfangsbedingungen in dem Energiebereich ihre Maxima aufweisen, in dem der BGM-Wirkungsquerschnitt für die eigentlich relevante 2s-Anfangsbedingung das Experiment erheblich unterschätzt. Jeglicher Einfluß dieser 2p-Anfangsbedingung wäre folglich hilfreich. Die nachfolgenden Abschnitte zeichnen im wesentlichen die Versuche nach, die unternommen werden können, um mit Hilfe dieser Besonderheit der 2p-Anfangsbedingungen den für die 2s-Anfangsbedingung mit der BGM berechneten Wirkungsquerschnitt zu verbessern. Im einzelnen sind dies:

- Einfang in das Kontinuum des Projektils
- Doppelstoß-Szenario
- Metastabile
- Hybrid-Hypothese
- Einfluß der Korrelation

## 5.1 Einfang in das Kontinuum des Projektils

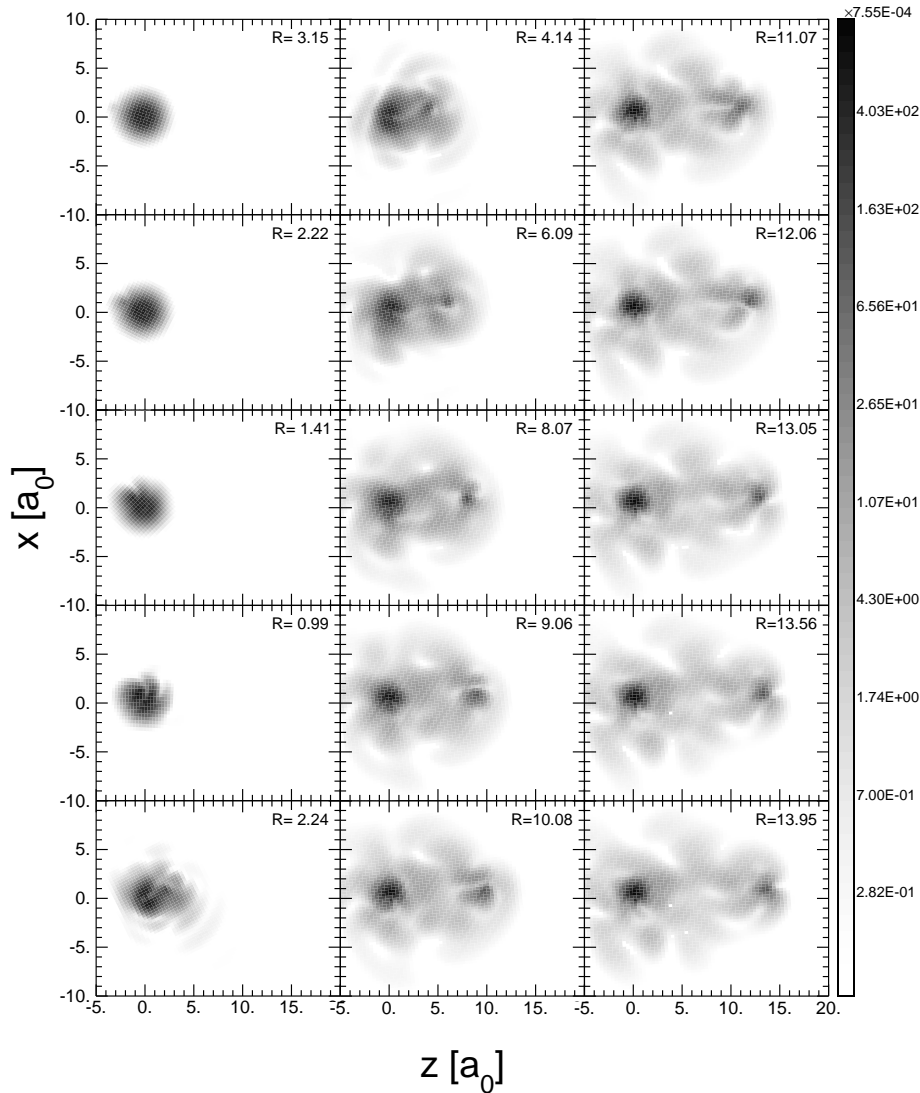
In diesem ersten Diskussionspunkt soll untersucht werden, inwieweit die Überhöhung des experimentellen Einfangs im Vergleich zur vorliegenden Rechnung durch den Einfang in das Kontinuum des Projektils (ECC<sup>1</sup>) erklärt werden kann. Eine solche Transferreaktion müßte aus theoretischer Sicht zur Ionisation gezählt werden, würde aber im Experiment fälschlicher Weise zum Einfang beitragen, falls keine Vorkehrungen zur Ladungstrennung getroffen worden wären. Ein wesentlicher Anteil an Einfang in das Kontinuum des  $\alpha$ -Teilchens würde folglich eine Erklärung für die Unterschätzung des Wirkungsquerschnittes durch die BGM liefern.

Gegen diese Behauptung sprechen zwei Gründe: Einerseits werden im Experiment, wie in Anhang B beschrieben, elektrostatische Sektorfelder zur Ladungstrennung der Reaktionsprodukte verwendet, so daß mit dem Projektil mitfliegende Elektronen im Falle eines ECC-Prozesses entsprechend abgelenkt werden würden. Andererseits kann auch von

---

<sup>1</sup>ECC: Electron Capture to the Projectile Continuum

theoretischer Seite durch Betrachtung der im Stoß auftretenden Dichteverteilung auf die vorkommenden Ionisationsmechanismen geschlossen werden. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 5.4 für eine Laborenergie von 100 keV/amu beim Stoßparameter  $b=1$  a.u., dem Maximum der Ionisation, die über die Achse senkrecht zur Streuebene integrierte Dichteverteilung bei verschiedenen internuklearen Abständen.



**Abbildung 5.4:**  $He^{2+} + C^{3+}$ ,  $E_{LAB} = 100keV/amu$ ,  $b=1$  a.u.: Über die zur Streuebene transversale Richtung integrierte Dichte bei verschiedenen internuklearen Abständen  $R = [b^2 + z^2]^{1/2}$ . Das Targetzentrum liegt im Koordinatenursprung, das Projektilzentrum bei den Koordinaten  $(b, 0, z)$ . Die Zeitentwicklung verläuft spaltenweise, die Graustufen skalieren logarithmisch.

Im Sektor links oben und den folgenden drei Szenen ist zu sehen, wie sich das  $\alpha$ -Teilchen nach und nach der kugelsymmetrischen Dichteverteilung des 2s-Orbitals des aktiven Leuchtelektrons nähert. Der folgende Ausschnitt zeigt, daß schon kurz nach Überschreiten des Punktes der nächsten Annäherung zwischen Projektil und Target sehr

schnelle Elektronen in Vorwärtsrichtung ionisiert werden. Es handelt sich dabei um sogenannte  $\text{BE}^2$ -Elektronen, die vor allem in Vorwärtsrichtung mit doppelter Projektilgeschwindigkeit emittiert werden [SDR 97]. Die beiden rechten Spalten der Abbildung 5.4 stellen den weiteren Verlauf des Stoßes dar. Es bildet sich um beide Zentren eine reichhaltige Struktur aus, die auf Zustände mit hohem Drehimpuls und somit auf das Vorhandensein von Ionisation hindeutet. Auch zwischen Projektil und Target scheint sich Dichte in Form ionisierter Elektronen zu sammeln. Bedenkt man die logarithmische Skalierung der Graustufen in dieser Abbildung und die Tatsache, daß, wie zuvor schon beschrieben, der gesamte Einfang in diesem System durch Transfer in den Grundzustand des Projektils gebildet wird, so ist die verbleibende Dichte, die um das Projektilzentrum konzentriert ist, als ECC zu betrachten und spielt im Vergleich zum Einfang lediglich eine untergeordnete Rolle.

## 5.2 Doppelstoß-Szenario

Die in der gesamten Stoßsequenz - wie schon in Abschnitt 3.2 angesprochen - großen 2p-Anregungsquerschnitte lassen die Überlegung zu, daß das aktive 2s-Leuchtelektron in einem Doppelstoß zunächst in ein 2p-Niveau angeregt (erster Stoß) und dann aus diesem Niveau vom Projektil eingefangen werden könnte (zweiter Stoß). Dabei ist zu beachten, daß dieser Zweistufenprozeß in jeder der beiden Stufen bei verschiedenen Stoßparametern geschehen kann. Die Einfangquerschnitte für die 2s- bzw. 2p-Anfangsbedingungen sind folglich mit einem Gewichtungsfaktor  $\lambda$  zu addieren:

$$\sigma_{Ein} = \sigma_{Ein}^{2s} + \lambda \sigma_{Ein}^{2p} \quad (5.1)$$

$$\sigma_{Ein}^{2p} = \frac{\sigma_{Ein}^{2p_0} + 2\sigma_{Ein}^{2p_{\pm 1}}}{3} . \quad (5.2)$$

Dieser ergibt sich als Quotient aus dem Wirkungsquerschnitt für eine Anregung vom 2s- in einen 2p-Zustand und der Summe über die Wirkungsquerschnitte aller möglichen Prozesse, d.h. elastische Streuung, Verlust und Anregung:

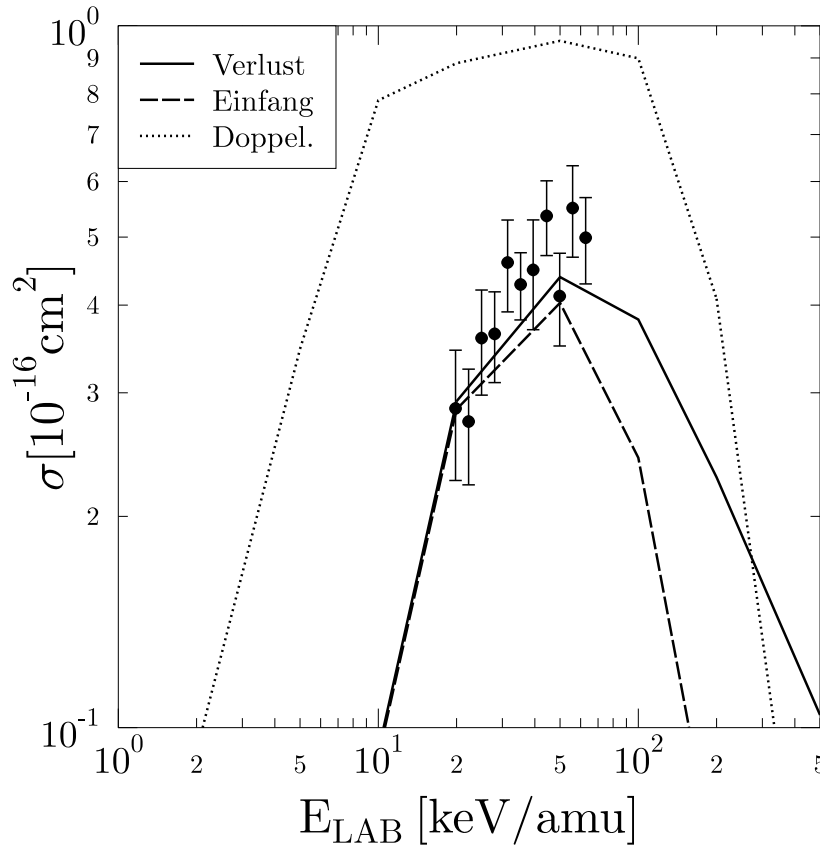
$$\lambda = \frac{\sigma_{Anreg}^{2s \rightarrow 2p}}{\sigma_{Anreg} + \sigma_{Elast} + \sigma_{Verl}} . \quad (5.3)$$

Der Gewichtungsfaktor  $\lambda$  beschreibt also den Bruchteil der 2p-Anregungen im Vergleich zu allen anderen möglichen Reaktionsabläufen.

Soll dieses Doppelstoßszenario als Erklärungsmöglichkeit für die Diskrepanzen im  $\text{He}^{2+} + \text{C}^{3+}$ - Stoßsystem dienen, so muß es in konsistenter Weise auch für die anderen Stoßsysteme der Sequenz gültig sein. In Abbildung 5.5 ist der so ausgewertete Wirkungsquerschnitt für das  $\text{He}^{2+} + \text{O}^{5+}$ -Stoßsystem dargestellt. Es ist offensichtlich, daß auch diese Überlegung als Erklärung ausscheidet.

---

<sup>2</sup>BE: Binary Encounter

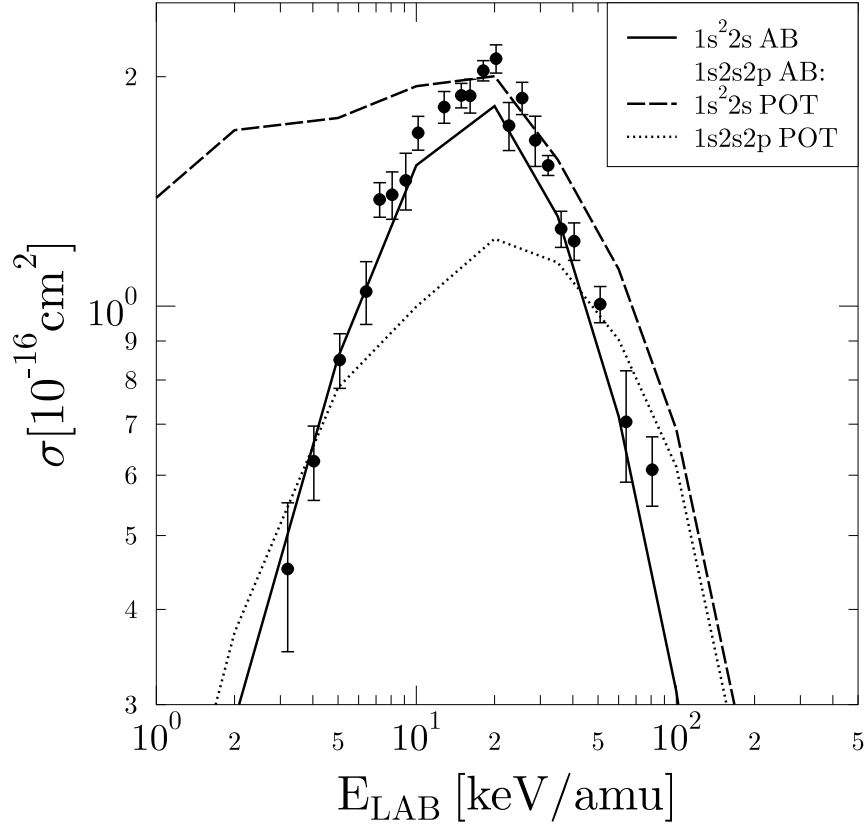


**Abbildung 5.5:**  $\text{He}^{2+} + \text{O}^{5+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Einfang, Verlust und Doppelstoß-Szenario; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [DMP 99].

### 5.3 Metastabile

Da im Experiment (siehe Anhang B) die verwendeten Targetionen lediglich durch einen Umlenkmagneten nach ihrem Ladungs-Masse-Verhältnis analysiert werden, besteht keine Kontrolle über den jeweiligen Zustand, in dem sich diese Ionen befinden. So ist grundsätzlich auch das Vorhandensein sogenannter metastabiler Ionen im Targetstrahl, die bei entsprechend langer Lebenszeit auch in die Reaktionskammer gelangen könnten, möglich. Da dann eine völlig andere Anfangssituation vorliegt, ist die Rechnung für eine  $2s$ -Anfangsbedingung hinfällig.

Als metastabile Zustände kommen dabei Konfigurationen in Frage, die wegen entsprechender Auswahlregeln oder Verbote nicht sofort zerfallen können [St 87]. Im betrachteten Fall von Li-ähnlichen Ionen sind dafür die Konfigurationen  $1s2s^2$  bzw. ein  $1s2s2p$ -Quartett-Zustand denkbar. Während die  $1s2s^2$ -Konfiguration wegen der Auswahlregeln  $\Delta l = \pm 1$  und  $\Delta m = 0, \pm 1$  für Dipolstrahlung in erster Ordnung Störungstheorie nicht zerfallen kann, ist der Zerfall eines  $1s2s2p$ -Quartett-Zustandes zunächst gemäß der Schrödinger-Gleichung Spin-verboden.



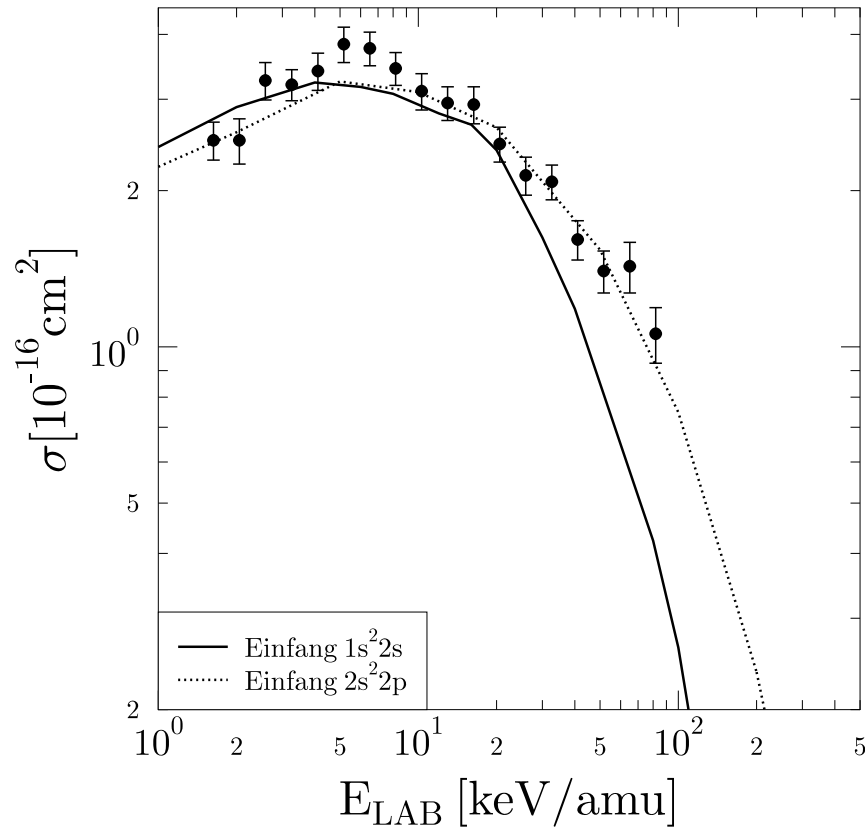
**Abbildung 5.6:**  $He^{2+} + N^{4+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für den Einfang aus der metastabilen Anfangskonfiguration  $1s2s2p$  mit verschiedenen Potentialen; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [DMP 99].

Hier soll zunächst der  $1s2s2p$ -Quartett-Zustand für das Stoßsystem  $He^{2+} + N^{4+}$  untersucht werden, da diese Hypothese für alle Stoßsysteme der Sequenz in gleicher Weise gelten muß. Wie schon in Abschnitt 4.7 festgestellt, wird die Wahrscheinlichkeit für Einfeldereinfang aus einer solchen Anfangskonfiguration im Modell unabhängiger Teilchen gemäß den Regeln der Kombinatorik zu

$$P_{Ein}^{1s2s2p} = \frac{P_{Ein}^{1s2s2p_0} + 2P_{Ein}^{1s2s2p_{\pm 1}}}{3} \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} P_{Ein}^{1s2s2p_x} &= (1 - P_{Verl}^{1s})(1 - P_{Verl}^{2s})P_{Ein}^{2p_x} + \\ &= (1 - P_{Verl}^{1s})(1 - P_{Verl}^{2p_x})P_{Ein}^{2s} + \\ &= (1 - P_{Verl}^{2s})(1 - P_{Verl}^{2p_x})P_{Ein}^{1s} \end{aligned} \quad (5.5)$$

berechnet. Es ist jedoch darauf zu achten, daß für eine  $1s2s2p$ -Konfiguration die Abschirmung eines der beiden  $1s$ -Elektronen im Vergleich zur Grundzustands-Konfiguration ( $1s^2s$ ) entfällt (siehe Anhang C). In Abbildung 5.6 ist zu erkennen, wie stark Konfigurationseffekte den berechneten Einfangquerschnitt beeinflussen. Somit ist es unumgänglich,



**Abbildung 5.7:**  $He^{2+} + C^{3+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Einfang aus den Anfangskonfigurationen  $1s^2 2s$  und  $2s^2 2p$ ; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [MMK 97].

das der entsprechenden Konfiguration zugehörige korrekte Potential zur Auswertung zu verwenden. Außerdem zeigt sich, daß der Wirkungsquerschnitt für den Einelektroneinfang aus einer solchen metastabilen  $1s2s2p$ -Quartett-Konfiguration keinerlei Übereinstimmung mit den experimentellen Daten aufweist.

Betrachtet man die Lebenszeit dieses Zustandes [CLJ 74, GMN 75, SSM 79], so stellt man fest, daß für dessen Zerfall zwei unterschiedliche Zerfallswege, nämlich durch M2-Strahlung bzw. durch Autoionisation, existieren. Beide unterscheiden sich erheblich in den angegebenen Übergangsraten. Da es sich jedoch um statistisch voneinander unabhängige Prozesse handelt, werden die Zerfallskonstanten beider Zerfallswege addiert [Be 96]. Auf diese Weise verbleibt insgesamt lediglich eine Lebensdauer im Bereich von  $10^{-9}$  Sekunden, was im Vergleich zur Flugzeit des Targetions zwischen Ionenquelle und Reaktionskammer von  $10^{-6}$  Sekunden jedoch verschwindend gering ist (siehe Anhang B), d.h. sogar schon vor Erreichen des Analysiermagneten sind die metastabilen Zustände zerfallen und spielen keine Rolle mehr, so daß auch diese Hypothese als Erklärungsversuch entfällt.

Am Ende dieses Abschnitts soll noch kurz auf eine Besonderheit bei dieser Art der Auswertung verschiedener Anfangskonfigurationen für das Stoßsystem  $He^{2+} + C^{3+}$  hingewie-

sen werden. Betrachtet man als Ausgangspunkt eine  $2s^22p$ -Konfiguration und berechnet mit kombinatorischen Mitteln wie oben die Wahrscheinlichkeit für den Einelektroneinfang gemäß

$$P_{Ein}^{2s^22p} = \frac{P_{Ein}^{2s^22p_0} + 2P_{Ein}^{2s^22p_{\pm 1}}}{3} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} P_{Ein}^{2s^22p_x} &= 2(1 - P_{Verl}^{2s})(1 - P_{Verl}^{2p_x})P_{Ein}^{2s} + \\ &= (1 - P_{Verl}^{2s})(1 - P_{Verl}^{2s})P_{Ein}^{2p_x}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

so resultiert als Wirkungsquerschnitt die in Abbildung 5.7 gezeigte Kurve. Diese gibt das Experiment nahezu über den gesamten Energiebereich hinweg wieder, ist aber von den physikalischen Voraussetzungen her nicht begründbar ( $2s^22p$  zerfällt über Dipolstrahlung in  $1s^22s$  [CKD 79]).

## 5.4 Hybrid-Hypothese

Im Experiment sind in vielfältiger Weise elektrische und magnetische Felder vorhanden (siehe Anhang B). Sie treten sowohl bei der Erzeugung der Ionen als auch bei der Präparation der Ionenstrahlen, deren Beschleunigung, Umlenkung und Leitung auf. Da die Ionen also ständig dem Einfluß solcher Felder unterliegen, ist eine Anregung des Grundzustandes in einen Mischzustand  $2s - 2p$  möglich (*Quenching*). Tritt dieser Fall ein, so ist der entstehende Zustand kein Eigenzustand des ungestörten atomaren Target-Hamilton-Operators mehr, sondern zeitabhängig. Bleibt solch ein sogenannter Hybridzustand [Co 78] bestehen, dann ändert sich die Anfangsbedingung drastisch. Zur Ermittlung der Einfangwahrscheinlichkeit muß nun das bewegte Projektilorbital auf einen solchen Hybridzustand projiziert werden

$$P_{Ein}^{Hybrid} = |\langle \chi^{He^{2+}} | \psi_{Hybrid}^{C^{3+}} \rangle|^2 \quad (5.8)$$

Dieser ergibt sich als Linearkombination der atomaren  $2s$ - und  $2p$ -Orbitale

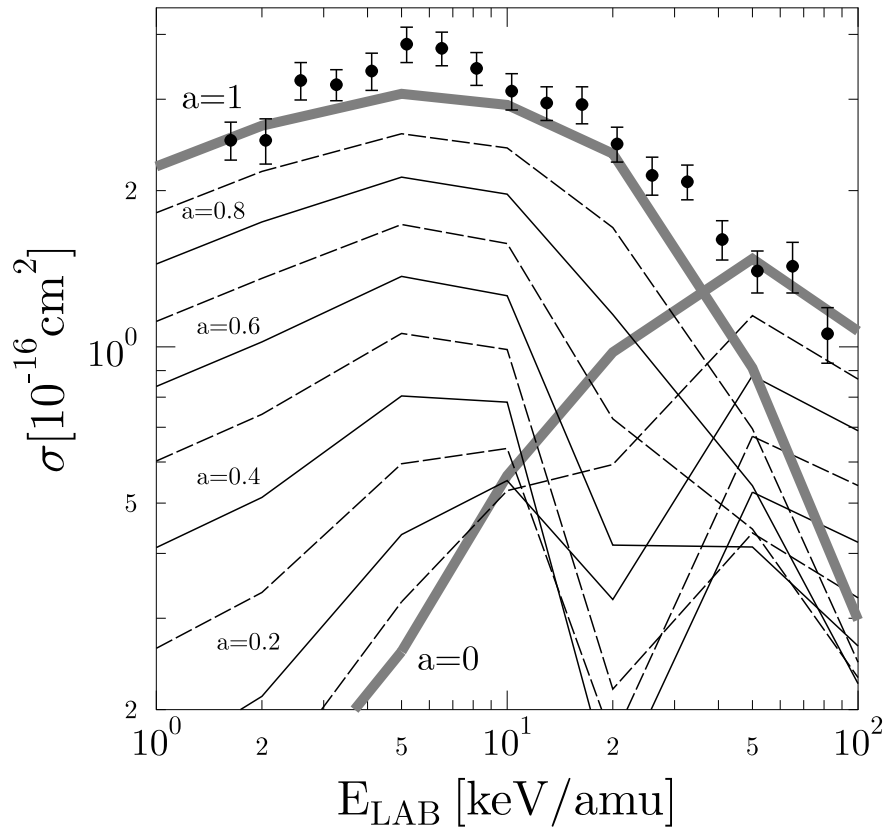
$$|\psi_{Hybrid}^{C^{3+}}\rangle = a |\psi_{2s}^{C^{3+}}\rangle + (1 - a) |\psi_{2p_0}^{C^{3+}}\rangle, \quad (5.9)$$

mit dem Gewichtungsfaktor  $a$  für jedes Orbital, der aus Gründen der Normierung die Bedingung  $0 \leq a \leq 1$  erfüllen muß, was in diesem Fall beispielhaft für einen  $sp_0$ -Hybridzustand angegeben worden ist. Setzt man (5.9) in (5.8) ein, erhält man den Ausdruck

$$P_{Ein}^{Hybrid} = a^2 P_{Ein}^{2s} + (1 - a)^2 P_{Ein}^{2p_0} + 2a(1 - a) \text{Re} \left( \langle \chi^{He^{2+}} | \psi_{2s}^{C^{3+}} \rangle \langle \chi^{He^{2+}} | \psi_{2p_0}^{C^{3+}} \rangle^* \right) \quad (5.10)$$

für die Einfangwahrscheinlichkeit aus diesem Hybridzustand mit dem entsprechend auftretenden Interferenzterm. Der Wirkungsquerschnitt für solch einen  $sp_0$ -Hybridzustand als Anfangsbedingung ist in Abbildung 5.8 für verschiedene Parameter  $a$  zu sehen. Man erkennt deutlich, daß auch diese Überlegung für jegliche Wahl von  $a$  nicht zu einer Übereinstimmung mit dem Experiment im gesamten Energiebereich führt und somit als Alternative ausscheidet.





**Abbildung 5.8:**  $He^{2+} + C^{3+}$ : Totale Wirkungsquerschnitte für Einfang aus dem Hybridzustand in Abhängigkeit von dem Gewichtungsfaktor  $a$ . Der Parameter  $a$  variiert von  $a = 1$ , was dem Einfangquerschnitt der  $2s$ -Anfangsbedingung entspricht, bis  $a = 0$ , woraus sich der Wirkungsquerschnitt für die  $2p_0$ -Anfangsbedingung ergibt. Die Kurven sind für eine Schrittweite von einem Zehntel eingezeichnet,  $a = 0,2 \dots 0,8$  als durchgezogene,  $a = 0,1 \dots 0,9$  als gestrichelte Linien; experimentelle Daten für Einfang ( $\bullet$ ): [MMK 97].

## 5.5 Einfluß der Korrelation

Als letzter Punkt der Liste von Möglichkeiten, um die Diskrepanzen im Wirkungsquerschnitt des Systems  $He^{2+} + C^{3+}$  zu untersuchen, sollen in diesem Abschnitt einige Bemerkungen zum Einfluß der Korrelation in den betrachteten Stoßsystemen gemacht werden.

Bei den verwendeten Li-ähnlichen Targetionen handelt es sich um echte Dreielektrensysteme, die im Rahmen einer Vielteilchenbeschreibung auch durch eine Vielteilchenwellenfunktion dargestellt werden müssen [Hi 75, We 61]. Diese Vielteilchenwellenfunktion kann nun mit Hilfe einer MCHF<sup>3</sup>-Rechnung [Le 99] nach entsprechend beitragenden Konfigurationen untersucht werden. Wie sich zeigt, ist jedoch die Grundzustandskonfiguration ( $1s^22s$ ) für diese Li-ähnlichen Systeme der zu 99% dominierende Anteil, die Mischungs-

<sup>3</sup>MCHF: Multi Configuration Hartree Fock

koeffizienten für andere Konfigurationen, die z.B. die 2p-Niveaus beinhalten, sind um mehr als eine Größenordnung kleiner. Als Beispiel sind in Tabelle 5.1 die Ergebnisse einer solchen Rechnung für atomares Lithium angegeben.

Der Anteil der Korrelationsenergie an der Gesamtenergie eines solchen Systems beträgt weniger als 0,2% [CKE 96]. Aus diesem Grund ist durch den minimalen Einfluß der Korrelation keine Verbesserung der Wirkungsquerschnitte möglich.

Konfiguration	Mischungskoeffizient
<b><math>1s^2 2s</math></b>	<b>0,9962</b>
$2s_1^2 3s''$	0,0012
$3s_1^2 2s'$	$2,550 \cdot 10^{-5}$
$4s_1^2 2s''$	$1,392 \cdot 10^{-6}$
<b><math>2p_1^2 2s</math></b>	<b>0,0017</b>
$3p_1^2 2s$	$6,084 \cdot 10^{-5}$
$4p_1^2 2s$	$3,686 \cdot 10^{-6}$
$3d_1^2 2s$	$8,281 \cdot 10^{-5}$
$4d_1^2 2s$	$6,250 \cdot 10^{-6}$
$4f_1^2 2s$	$8,940 \cdot 10^{-6}$
$5g_1^2 2s$	$1,904 \cdot 10^{-6}$
$1s 3s_2^2$	$6,209 \cdot 10^{-6}$
<b><math>1s 2p_2^2</math></b>	<b>0,0001</b>
$1s 3p_2^2$	$2,143 \cdot 10^{-5}$
$1s 3d_2^2$	$9,985 \cdot 10^{-6}$
$1s 3s'(^3S) \cdot 2s$	$1,849 \cdot 10^{-5}$
$1s \cdot 2p_3 3p_3(^3S)$	0,0002
$1s \cdot 3d_3 4d_3(^3S)$	$7,672 \cdot 10^{-6}$
$1s 2s^2$	$6,724 \cdot 10^{-7}$
$1s 3s'(^1S) \cdot 2s$	$3,169 \cdot 10^{-5}$
$1s^2 3s$	$2,714 \cdot 10^{-5}$

**Tabelle 5.1:** Ergebnisse einer MCHF-Rechnung für atomares Lithium [FrF 77]. Die totale Wellenfunktion für den  $1s^2 2s$ -Grundzustand von Lithium setzt sich aus den entsprechend gewichteten Konfigurationen zusammen.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Stöße zwischen  $\alpha$ -Teilchen und Li-ähnlichen Ionen sowie Stöße zwischen vollständig ionisierten Projektilionen und dem Li-ähnlichen Ion  $N^{4+}$  untersucht. Hierzu wird die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung unter Verwendung einer effektiven Einteilchenbeschreibung im Rahmen der nichtperturbativen *Basis Generator Methode* (BGM) gelöst.

Ausgangspunkt ist die Abbildung des wechselwirkenden Vielelektronensystems auf ein effektives Einteilchenbild auf der Grundlage der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie (DFT), wobei alle elektronischen Wechselwirkungseffekte durch ein multiplikatives effektives Potential berücksichtigt werden und sich prinzipiell alle Observablen eindeutig aus der Einteilchendichte bestimmen lassen. Da die exakten funktionalen Zusammenhänge für das effektive Potential und vieler Observablen nicht bekannt sind, werden Näherungen unumgänglich. Für die betrachteten Stoßsysteme werden in dieser Arbeit folgende Annahmen für das Li-ähnliche Targetpotential vorausgesetzt: (i) Korrelationseffekte für das aktive Leuchtelektron werden vernachlässigt und (ii) die Rückwirkung der zeitabhängigen Dichte auf das effektive Potential (Respons) wird nicht berücksichtigt.

Im Rahmen der Basis Generator Methode werden die effektiven Einteilchengleichungen in einem endlichdimensionalen Modellraum gelöst. Da durch dieses Lösungsschema eine dynamische Anpassung des endlichen Darstellungsraumes an die Zeitentwicklung der Einteilchenprobleme erreicht wird, kann die Ankopplung dieses Modellraumes an sein unendlichdimensionales Komplement im Hilbert-Raum minimiert werden. Eine Vernachlässigung dieser Kopplung ist somit gerechtfertigt. Der durch die einfache Konstruktionsvorschrift der BGM aufgespannte optimierte Modellraum sollte in guter Näherung die gesamte Lösung des Streuproblems enthalten, die dann nach den Streukanälen Anregung, Einfang und Ionisation analysiert werden kann.

Die BGM wird zunächst für zwei echte Einelektronensysteme,  $p + He^+$  und  $He^{2+} + He^+$ , getestet. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell bestimmten totalen Einfangquerschnitten.

Die Streuung von  $\alpha$ -Teilchen an Li-ähnlichen Ionen (Bor, Kohlenstoff, Stickstoff, Sauerstoff) wird unter der Annahme einer statischen Näherung des effektiven Einteilchenpotentials untersucht. Diese Näherung ist für schwach geladene Projektile gerechtfertigt, da die K-Schalen-Elektronen der Targetionen zu stark gebunden sind, um aktiv

am Stoß teilnehmen zu können. Sie verursachen die Abschirmung des Kernpotentials für das aktive Leuchtelektron. Da Korrelation für Li-ähnliche Systeme unbedeutend ist (vergleiche Tabelle 5.1), kann man mit dem verwendeten OPM-Potential eine vernünftige Beschreibung von Umladungs- und Anregungsprozessen in diesen Stoßsystemen erwarten. Es zeigt sich, daß für den Einfangquerschnitt insbesondere bei kleinen Energien keinerlei Skalierungsgesetz gefunden werden kann, da sich z.B. das Quasimolekül  $(He - B)^{4+}$  in seinem Kopplungsschema erheblich von den anderen Systemen unterscheidet. Während für den Fall  $(He - B)^{4+}$  sowohl Einfang in den Grundzustand als auch in die L-Schale des  $\alpha$ -Teilchens gefunden wird, ergibt sich der Transferquerschnitt für die übrigen Li-ähnlichen Targetionen fast ausschließlich aus Einfang in den Grundzustand des Projektils. Der Vergleich zwischen Theorie und Experiment zeigt für die Targetsysteme Kohlenstoff, Stickstoff und Sauerstoff eine recht gute Übereinstimmung bei niedrigen Laborenergien bis zu  $E_{LAB} = 30keV/amu$ . Die Maxima der totalen Einfangquerschnitte werden um ca. 20% in allen Systemen unterschätzt. Für das Kohlenstoff-Target liegen die berechneten Werte für Elektronentransfer ab ca.  $E_{LAB} = 50keV/amu$  um fast einen Faktor 2 unter dem Experiment. Um die Unterschiede zwischen Theorie und Experiment klären zu können, werden verschiedene Stoßszenarien untersucht, die eine angeregte 2p-Konfiguration des  $C^{3+}$ -Targets als Anfangsbedingung erlauben. Es zeigt sich, daß die Einfangquerschnitte für diese Anfangsbedingungen genau in der Energieregion maximal werden, in der die Grundzustandskonfiguration von  $C^{3+}$  den Wirkungsquerschnitt unterschätzt. Alle untersuchten realistischen Szenarien führen jedoch zu keiner befriedigenden Erklärung der beobachteten Diskrepanz. Ein anderes Bild wird bei der Gegenüberstellung der Ionisationsquerschnitte gefunden. Diese verhalten sich dem mit zunehmender Targetladung wachsenden Ionisationspotential des aktiven 2s-Leuchtelektrons entsprechend systematisch und werden in der Sequenz von Bor nach Sauerstoff skalierbar kleiner.

Der weitaus dominierende inelastische Kanal ist die  $2s - 2p$ -Anregung in allen betrachteten Stoßsystemen. Die Anregung ist empfindlich abhängig von der Energiedifferenz zwischen den beteiligten Einteilchenniveaus und deshalb geeignet, verschiedene Ansätze für das effektive Targetpotential zu untersuchen. Insbesondere der Vergleich zwischen einem effektiven Coulomb-Potential, für das die Niveaus 2s und 2p energetisch entartet sind, und dem OPM-Potential zeigt bei kleinen Einschußenergien dramatische Unterschiede in der Anregung. Verschiedene Ansätze für das Austauschpotential (OPM im Vergleich zu LDA) sind in der Anregung nicht sichtbar.

Um die Aktivierung der K-Schalen-Elektronen zu sehen, werden Stöße zwischen vollständig ionisierten Projektilionen und dem Li-ähnlichen Targetion  $N^{4+}$  untersucht. Anhand der verschiedenen Korrelationsdiagramme können die auftretenden Prozesse, insbesondere die zunehmende Aktivierung der 1s-Elektronen mit wachsender Projektilenergie und die Verschiebung der Einfangkanäle relativ zum einlaufenden Kanal des 2s-Leuchtelektrons, verdeutlicht werden.

Darüber hinaus wird das Stoßsystem  $C^{6+} + N^{4+}$  nach Vielelektronenübergängen analysiert. Die Auswertung für die Vielelektronenumladungsprozesse erfolgt unter Vernachlässigung des Pauli-Prinzips durch eine statistische Multinomialformel. Diese Form der Analyse kann im betrachteten Fall durch die starke energetische Separation der Schalen der aktiven Elektronen am Target und der Einfangkanäle am Projektil gerechtfertigt werden.

Allerdings ist beispielsweise für die Vielfachionisation durch die Vernachlässigung von Respons-Effekten im effektiven Elektron-Elektron-Potential und der damit unmittelbar verbundenen Vernachlässigung der Abschirmung der Projektilladung bzw. der erhöhten Attraktivität des Targetpotentials beim Einsetzen der Ionisation mit einer deutlichen Überschätzung der entsprechenden Wirkungsquerschnitte zu rechnen. Es stellt sich heraus, daß die K-Schalen-Elektronen des Li-ähnlichen  $N^{4+}$ -Targetions fast ausschließlich durch Einfang in den Grundzustand des  $C^{6+}$ -Projektilions am Stoß teilnehmen, d.h. nur äußerst schwer ionisiert werden können. Aus diesem Grund sind die entsprechenden Wirkungsquerschnitte für Vielelektronenübergänge mit einem Anteil von mehr als zwei zu ionisierenden Elektronen sehr klein.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß mit Hilfe der BGM inelastische Prozesse für die betrachteten Systeme recht gut beschrieben werden können. Wie genauere Konvergenzuntersuchungen zeigen [Ki 99], werden Schwächen im Bereich der Auftrennung des Verlustes in Einfang und Ionisation bei hohen Stoßenergien sichtbar. Um diese beheben zu können, müssen zunächst die Auswirkungen der Näherungen im BGM-Konzept, wie z.B. für die generierende Basis (2.72), untersucht und durch die exakten BGM-Funktionen (2.68) ersetzt werden. Zur Verbesserung der Darstellbarkeit der Projektilkanäle ist eine explizite Integration von bewegten Projektilfunktionen in die generierende Basis des BGM-Schemas anstelle des hier verwendeten Einzentrenansatzes denkbar. Auf diese Weise wäre keine Projektion zur Ermittlung des Einfangs aus dem Verlust mehr notwendig, die auftretenden numerischen Instabilitäten wären beseitigt und auch die Behandlung aktiver Elektronen am Projektil wäre möglich. Der numerische Aufwand zur Umsetzung eines solchen Konzepts ist jedoch vergleichsweise hoch.

Mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Modell wurden ausschließlich totale Wirkungsquerschnitte für die betrachteten Stoßsysteme berechnet. Eine anspruchsvollere Aufgabe besteht darüber hinaus in der Ermittlung winkeldifferentieller Querschnitte, wie sie auch im Gießener Experiment gemessen worden sind. Aus theoretischer Sicht ergeben diese sich als Bessel-Transformation der Übergangsamplituden (2.85) im Rahmen der semiklassischen Näherung des Stoßparametermodells zu

$$\frac{d\sigma_{ki}}{d\Omega}(\Theta) = \mu^2 v^2 \left| \int_0^\infty db b c_k^{iP} J_{m_k - m_i} \left( 2\mu v \sin \frac{\Theta}{2} b \right) \right|^2, \quad (6.1)$$

wobei mit  $\Theta$  der Streuwinkel,  $\mu$  die reduzierte Masse und  $v$  die Projektilgeschwindigkeit bezeichnet wurden [BM 92]. Eine solche Auswertung ist prinzipiell mit den vorhandenen Daten möglich.

Um die statische Potentialnäherung (2.10) und die damit verbundenen Schwächen des Modells bei der Beschreibung von Vielelektronenübergängen zu beseitigen, können Respons-Effekte modelliert [Ki 99] oder auch eine zeitabhängige Potentialgleichung mitgelöst werden. Eine solche Modifikation der in dieser Arbeit zugrunde gelegten theoretischen Beschreibung ist ähnlich der oben angesprochenen Erweiterung des BGM-Schemas mit erheblichem numerischen Aufwand und außerdem weiteren konzeptuellen Schwierigkeiten verbunden.



# Anhang A

## Details zur praktischen Umsetzung des BGM-Konzepts

### A.1 Vororthogonalisierung der Basis

Die Teilräume zu den Hierarchiestufen  $\mu = 0$  und  $\mu \geq 1$  der durch die Wechselwirkung  $\tilde{W}_P$  generierten Basis (2.76) sollen zueinander orthogonalisiert werden. Hierfür verwendet man den Projektor  $\hat{P}$  auf den durch  $V$  orthonormierte atomare Funktionen aufgespannten Teilraum zur Ordnung  $\mu = 0$

$$\hat{P} = \sum_{v=1}^V |\varphi_v^0\rangle\langle\varphi_v^0|. \quad (\text{A.1})$$

Zu diesem Teilraum orthogonale Zustände der Ordnung  $\mu \geq 1$  ergeben sich über den Ansatz

$$|\tilde{\chi}_v^\mu\rangle = (\hat{1} - \hat{P})(\tilde{W}_P)^\mu |\varphi_v^0\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Nach dem Einsetzen der Definition (A.1) für  $\hat{P}$  in (A.2) und Sortieren nach den auftretenden Potenzen von  $\tilde{W}_P$  erhält man schließlich

$$|\tilde{\chi}_v^\mu\rangle = (\tilde{W}_P)^\mu |\varphi_v^0\rangle + \sum_{v'=1}^V -(W_{v'v})^\mu |\varphi_{v'}^0\rangle, \quad (\text{A.3})$$

wobei die Matrixelemente bezüglich der atomaren Zustände mit

$$(W_{rs})^\mu \equiv \langle\varphi_r^0|(\tilde{W}_P)^\mu|\varphi_s^0\rangle \quad (\text{A.4})$$

abgekürzt wurden. Wie im Anhang der Referenz [LHK 96] wurde gezeigt, daß eine allgemeine Transformation der Basis zur orthogonalen Konstruktion aller Teilräume mit Hilfe des Polynomansatzes

$$|\tilde{\chi}_v^\mu\rangle = \sum_{\mu'=0}^{\mu} (\tilde{W}_P)^{\mu'} \sum_{v'=1}^V a_{v'v}^{\mu'\mu} |\varphi_{v'}^0\rangle \quad (\text{A.5})$$

vorgenommen werden kann. Im Rahmen der hier angestrebten speziellen Orthogonalisierung ergeben sich die nicht verschwindenden Koeffizienten  $a_{v'v}^{\mu'\mu}$  zu

$$a_{v'v}^{\mu'\mu} = \delta_{v'v}$$

$$a_{v'v}^{0\mu} = \sum_{v'=1}^V -(W_{v'v})^\mu. \quad (\text{A.6})$$

Da die Matrixelemente in bezug auf Potenzen der Wechselwirkung  $\tilde{W}_P$  reell sind, sind auch die Koeffizienten  $a_{v'v}^{\mu'\mu}$  reell.

## A.2 Berechnung der Matrixelemente

Unter Verwendung des Polynomansatzes (2.78) für die Basisfunktionen lauten die in den gekoppelten Kanalgleichungen (2.80) vorkommenden Matrixelemente

$$S_{wv}^{\lambda\mu} \equiv \langle \tilde{\chi}_w^\lambda | \tilde{\chi}_v^\mu \rangle = \sum_{\lambda'=0}^{\lambda} \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{w'v'=1}^V a_{w'w}^{\lambda'\lambda} a_{v'v}^{\mu'\mu} \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} M_{wv}^{\lambda\mu} \equiv \langle \tilde{\chi}_w^\lambda | \hat{h}(t) - i\partial_t | \tilde{\chi}_v^\mu \rangle &= \sum_{\lambda'=0}^{\lambda} \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{w'v'=1}^V \left\{ a_{w'w}^{\lambda'\lambda} a_{v'v}^{\mu'\mu} \left( \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'} \hat{h}_0 (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle \right. \right. \\ &+ \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} \hat{v}(t) | \varphi_{v'}^0 \rangle - \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'} i\partial_t (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle \\ &\left. \left. - i a_{w'w}^{\lambda'\lambda} a_{v'v}^{\mu'\mu} \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle \right\}. \quad (\text{A.8}) \end{aligned}$$

Da die Eigenfunktionen  $|\varphi_v^0\rangle$  von  $\hat{h}_0$  zeitunabhängig sind, kann man das in (A.8) auftauchende innere Matrixelement mit dem Zeitableitungsoperator als Kern mit Hilfe der Kettenregel in Zeitableitungen von Potentialmatrixelementen umschreiben

$$\langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'} i\partial_t (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle = \frac{\mu'}{\mu' + \lambda'} i\partial_t \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Für das innere Matrixelement mit dem Operator Kern  $\hat{h}_0$  konnte im Anhang D der Referenz [LHK 96] die Beziehung

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'} \hat{h}_0 (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle &= \langle \varphi_{w'}^0 | \frac{\mu'}{\mu' + \lambda'} \hat{h}_0 (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} + \frac{\lambda'}{\mu' + \lambda'} (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} \hat{h}_0 | \varphi_{v'}^0 \rangle \\ &+ \langle \varphi_{w'}^0 | \frac{1}{2} \lambda' \mu' (\nabla \tilde{W}_P)^2 (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'-2} | \varphi_{v'}^0 \rangle \quad (\text{A.10}) \end{aligned}$$

bewiesen werden. Unter Verwendung der Eigenwertgleichung (2.47) für die atomaren Zustände erhält man

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'} \hat{h}_0 (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle &= \left( \frac{\mu'}{\mu' + \lambda'} \varepsilon_{w'} + \frac{\lambda'}{\mu' + \lambda'} \varepsilon_{v'} \right) \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \lambda' \mu' \langle \varphi_{w'}^0 | (\nabla \tilde{W}_P)^2 (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'-2} | \varphi_{v'}^0 \rangle. \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

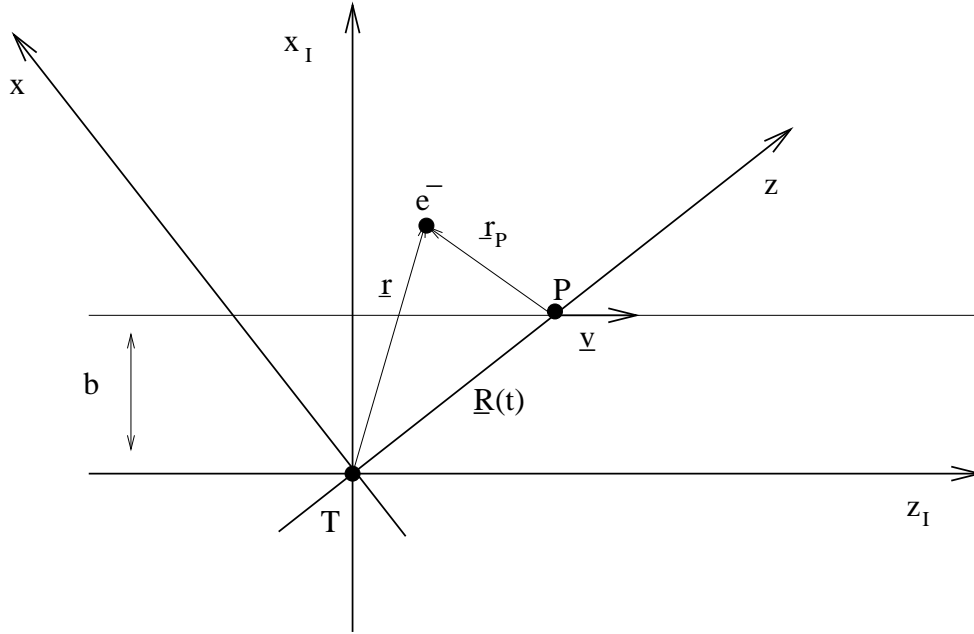
Die inneren Matrixelemente der Überlapp- und Wechselwirkungsmatrix (A.7, A.8) lassen sich auf diese Weise aus drei Typen von Grundmatrixelementen

$$\alpha_{w'v', \lambda'+\mu'} \equiv \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} | \varphi_{v'}^0 \rangle \quad (\text{A.12})$$

$$\beta_{w'v', \lambda'+\mu'} \equiv \langle \varphi_{w'}^0 | (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'} \hat{v}(t) | \varphi_{v'}^0 \rangle \quad (\text{A.13})$$

$$\gamma_{w'v', \lambda'+\mu'} \equiv \langle \varphi_{w'}^0 | (\nabla \tilde{W}_P)^2 (\tilde{W}_P)^{\lambda'+\mu'-2} | \varphi_{v'}^0 \rangle \quad (\text{A.14})$$





**Abbildung A.1:** Geometrie interatomarer Stöße [Ki 99], T: Target, P: Projektil.

berechnen. Dabei wird die Zeitableitung von  $\alpha_{w'v', \lambda'+\mu'}$  für das Matrixelement (A.9) numerisch durch eine Splines-Differentiation berechnet. Auch die Koeffizienten  $a_{v'\nu}^{\mu'\mu}$  lassen sich vollständig auf die Matrixelemente  $\alpha_{w'v', \lambda'+\mu'}$  (vergleiche A.6) zurückführen.

Wie zu erkennen ist, sind alle Grundmatrixelemente Zweizentrenintegrale der Form

$$\langle \varphi_{nlm}^0 | F(r_P) | \varphi_{n'l'm'}^0 \rangle \quad (\text{A.15})$$

mit den in die Quantenzahlen  $(nlm)$  aufgelösten Multiindices, wobei sich die magnetischen Quantenzahlen auf die symmetrisierten Winkelfunktionen  $\cos(m\varphi)$ ,  $\sin(m\varphi)$  (2.77) beziehen. Auf diese Weise zerfallen die Matrixelemente in nicht-mischende Anteile (g)erader und (u)ngerader Symmetrie, deren Berechnung jeweils durch die Ausführung einer dreidimensionalen Integration erfolgt. Durch eine Transformation auf das rotierende Koordinatensystem  $z_I$  kann diese dreidimensionale Integration in einer Dimension analytisch vorgenommen werden (Abbildung A.1).

Dazu werden die Matrixelemente zunächst bezüglich in Richtung der internuklearen Achse quantisierter Basisfunktionen berechnet ( $z$ -Achse). Anschließend werden die Matrixelemente mit Hilfe der Wignerschen  $d$ -Matrizen auf in Richtung der Strahlachse des Inertialsystems  $z_I$  quantisierte Basisfunktionen transformiert. Hierzu schiebt man den Drehoperator  $\hat{R}(\theta)$ , der die Drehung der Quantisierungsachse der Basiszustände von der Strahlachse in die Richtung der internuklearen Achse um den Winkel  $\theta = \arcsin \frac{b}{R}$  beschreibt

$$|\tilde{\varphi}_{nlm}^0\rangle = \hat{R}(\theta) |\varphi_{nlm}^0\rangle = \exp[-i\hat{l}_y\theta] |\varphi_{nlm}^0\rangle, \quad (\text{A.16})$$

auf beiden Seiten von  $F(r_P)$  in (A.15) ein und erhält

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_{nlm}^0 | F(r_P) | \varphi_{n'l'm'}^0 \rangle^{(g/u)} &= \langle \varphi_{nlm}^0 | \hat{R}^{-1}(\theta) \hat{R}(\theta) F(r_P) \hat{R}^{-1}(\theta) \hat{R}(\theta) | \varphi_{n'l'm'}^0 \rangle^{(g/u)} \\
&= \langle \tilde{\varphi}_{nlm}^0 | \hat{R}(\theta) F(r_P) \hat{R}^{-1}(\theta) | \tilde{\varphi}_{n'l'm'}^0 \rangle^{(g/u)} \\
&= \sum_{M=0}^l \sum_{M'=0}^{l'} \tilde{d}_{mM}^{l(g/u)}(\theta) \tilde{d}_{m'M'}^{l(g/u)}(\theta) \langle \tilde{\varphi}_{nlM}^0 | F(r_P) | \tilde{\varphi}_{n'l'M'}^0 \rangle^{(g/u)}.
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Die Koeffizienten  $\tilde{d}_{mM}^{l(g/u)}(\theta)$  bezeichnen die Matrixelemente des Drehoperators (A.16) in bezug auf die symmetrisierten Wellenfunktionen

$$\tilde{d}_{mM}^{l(g/u)}(\theta) = \langle \tilde{\varphi}_{nlm}^0 | \hat{R}(\theta) | \tilde{\varphi}_{nlM}^0 \rangle^{(g/u)}, \tag{A.18}$$

die sich aus den gewöhnlichen Wignerschen d-Matrizen

$$\begin{aligned}
\tilde{d}_{mM}^{l(g)}(\theta) &= \begin{cases} d_{mM}^l(\theta) & \text{falls } m = M = 0 \\ \sqrt{2} d_{mM}^l(\theta) & \text{falls } m = 0 \text{ oder } M = 0 \\ d_{mM}^l(\theta) + (-1)^M d_{m-M}^l(\theta) & \text{sonst} \end{cases} \\
\tilde{d}_{mM}^{l(u)}(\theta) &= \begin{cases} d_{mM}^l(\theta) - (-1)^M d_{m-M}^l(\theta) & \text{falls } m, M > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}
\end{aligned} \tag{A.19}$$

zusammensetzen. In (A.17) wurde die Symmetrierelation

$$\tilde{d}_{Mm}^{l(g/u)}(-\theta) = \tilde{d}_{mM}^{l(g/u)}(\theta) \tag{A.20}$$

benutzt. Um nun das innere Integral in Gleichung (A.17) zu berechnen, werden prolat-elliptische Koordinaten verwendet, die dem Zweizentrencharakter des Integrals angepaßt sind. Diese Koordinaten werden durch die Abstände eines Raumpunktes zu den beiden Zentren (Projektile und Target) definiert

$$\begin{aligned}
\xi &= \frac{r + r_P}{R} & 1 \leq \xi < \infty, & & r &= \frac{R}{2}(\xi + \eta) \\
\eta &= \frac{r - r_P}{R} & -1 \leq \eta \leq 1, & & r_P &= \frac{R}{2}(\xi - \eta).
\end{aligned} \tag{A.21}$$

Dabei stellt der gewöhnliche Azimutwinkel  $0 \leq \varphi < 2\pi$  bezüglich der z-Achse die dritte benötigte Koordinate dar. Die Verknüpfung der prolat-elliptischen Koordinaten mit den kartesischen Koordinaten  $(x, y, z)$  des rotierenden Systems ergibt sich durch die Transformationsgleichungen

$$\begin{aligned}
x &= \frac{R}{2}[(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)]^{\frac{1}{2}} \cos \varphi \\
y &= \frac{R}{2}[(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)]^{\frac{1}{2}} \sin \varphi \\
z &= \frac{R}{2}(\xi\eta + 1).
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Daraus folgen für die Polarwinkel  $\vartheta, \vartheta_P$  bezüglich beider Zentren die Beziehungen

$$\cos \vartheta = \frac{z}{r} = \frac{\xi\eta + 1}{\xi + \eta} \quad (\text{A.23})$$

$$\cos \vartheta_P = \frac{(z - R)}{r_P} = \frac{\xi\eta - 1}{\xi - \eta} . \quad (\text{A.24})$$

Das Volumenelement  $d^3r$  lautet für prolat-elliptische Koordinaten

$$d^3r = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi , \quad (\text{A.25})$$

so daß sich für das Matrixelement (A.15) schließlich

$$\langle \tilde{\varphi}_{nlM}^0 | F(r_P) | \tilde{\varphi}_{n'l'M'}^0 \rangle^{(g/u)} = \frac{R^3}{8} \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) \quad (\text{A.26})$$

$$\begin{aligned} & \times \tilde{\varphi}_{nlM}^{0*}(r(\xi, \eta), \cos \vartheta(\xi, \eta)) F(r_P(\xi, \eta)) \tilde{\varphi}_{n'l'M'}^0(r(\xi, \eta), \cos \vartheta(\xi, \eta)) \\ & \times \int_0^{2\pi} d\varphi \begin{cases} \cos(M\varphi) \cos(M'\varphi) & g \\ \sin(M\varphi) \sin(M'\varphi) & u \end{cases} \\ & = \frac{R^3}{8} I(\xi, \eta) \begin{cases} (1 + \delta_{M0}) \pi \delta_{MM'} & g \\ (1 - \delta_{M0}) \pi \delta_{MM'} & u \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

ergibt, mit den entsprechenden symmetrisierten Wellenfunktionen

$$\tilde{\varphi}_{nlM}^0(\mathbf{r}) = \begin{cases} \tilde{\varphi}_{nlM}^0(r(\xi, \eta), \cos \vartheta(\xi, \eta)) \cos(M\varphi) & g \\ \tilde{\varphi}_{nlM}^0(r(\xi, \eta), \cos \vartheta(\xi, \eta)) \sin(M\varphi) & u \end{cases} . \quad (\text{A.28})$$

Die Berechnung des verbleibenden zweidimensionalen Integrals  $I(\xi, \eta)$  wird numerisch mit Hilfe einer Gauss-Legendre-Quadratur [PTV 92, SH 82] ausgeführt. Die Matrixelemente (A.28) müssen dabei für die drei Typen von Grundmatrixelementen (A.14) als Funktion des internuklearen Abstandes berechnet werden. Da sie weder von der Projektilgeschwindigkeit  $v$  noch vom Stoßparameter  $b$  abhängig sind und die Projektilladung  $Q_P$  lediglich als globaler Vorfaktor im Grundmatrixelement  $\beta_{w'v', \lambda'+\mu'}$  auftritt, können sie für ein gegebenes Targetsystem universell für alle interessierenden Kombinationen von  $v, b$  und  $Q_P$  zur Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen (2.80) eingesetzt werden.

### A.3 Projektion auf bewegte Projektilzustände

Die Berechnung der Übergangsamplituden (2.85) erfolgt wie im vorangegangenen Abschnitt in bezug auf entlang der internuklearen Achse quantisierter Orbitale. Dazu werden wie zuvor Drehoperatoren  $\hat{R}(\theta)$  auf beiden Seiten der Übergangsamplituden eingeschoben und die Definitionen (A.16, A.18) für die gedrehten Zustände und die Matrixelemente des Drehoperators benutzt. Die Übergangsamplituden lassen sich analog den Matrixelementen nach (g)erader und (u)ngerader Symmetrie bezüglich Spiegelungen an der Streuebene

unterscheiden

$$\begin{aligned}
c_{n_k l_k m_k}^{iP}(t_f)^{(g/u)} &= \langle \varphi_{n_k l_k m_k}^P(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle^{(g/u)} \\
&= \langle \varphi_{n_k l_k m_k}^P(t_f) | \hat{R}^{-1}(\theta) \hat{R}(\theta) | \psi_i(t_f) \rangle^{(g/u)} \\
&= \sum_{M_k=0}^{l_k} \langle \tilde{\varphi}_{n_k l_k m_k}^P(t_f) | \hat{R}(\theta) | \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^P(t_f) \rangle \langle \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^P(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle^{(g/u)} \\
&= \sum_{M_k=0}^{l_k} \tilde{d}_{m_k M_k}^{l_k(g/u)}(\theta) \langle \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^P(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle^{(g/u)}. \tag{A.29}
\end{aligned}$$

Um das angegebene Überlappintegral zu berechnen, betrachtet man zunächst die Entwicklung der Orbitale  $|\psi_i\rangle$  nach den nichtorthogonalen Basiszuständen (2.76)

$$|\psi_i(t)\rangle = \sum_{\mu=0}^M \sum_{v=1}^V c_{\mu v}^i(t) |\tilde{\chi}_v^\mu\rangle = \sum_{\mu'=0}^M \sum_{v'=1}^V b_{\mu' v'}^i(t) (\tilde{W}_P)^{\mu'} |\varphi_{v'}^0\rangle, \tag{A.30}$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten durch

$$b_{\mu' v'}^i(t) = \sum_{\mu=\mu'}^M \sum_{v=1}^V c_{\mu v}^i(t) a_{v' v}^{\mu' \mu} \tag{A.31}$$

gegeben sind, mit den Koeffizienten  $a_{v' v}^{\mu' \mu}$  aus dem Ausdruck (A.6). Die Auflösung des Multiindex  $v'$  in die Quantenzahlen  $n' l' m'$  und nochmaliges Einschieben von  $\hat{R}^{-1}(\theta) \hat{R}(\theta)$  in Gleichung (A.29) führt auf

$$\begin{aligned}
c_{n_k l_k m_k}^{iP}(t_f)^{(g/u)} &= \sum_{\mu'=0}^M \sum_{n' l' m'} \sum_{M_k=0}^{l_k} \sum_{M'=0}^{l'} b_{\mu', n' l' m'}^i(t) \tilde{d}_{m_k M_k}^{l_k(g/u)}(\theta) \tilde{d}_{m' M'}^{l'(g/u)}(\theta) \\
&\times \langle \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^P(t_f) | (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \tilde{\varphi}_{n' l' M'}^0 \rangle. \tag{A.32}
\end{aligned}$$

Anders als im Matrixelement (A.27) tragen hier die im Bravektor auftauchenden projektzentrierten Zustände aus der Sicht des inertialen Targetsystems eine Translationsphase. Diese resultiert aus ihrer Bewegung mit der Projektilgeschwindigkeit  $v$  entlang der Strahlachse (vergleiche Abschnitt 3.7 der Referenz [BM 92]). In der hier verwendeten Geometrie einer geraden Projektilbahn ergibt sich für das Integral in Gleichung (A.32)

$$\begin{aligned}
W_{\mu', n_k l_k M_k, n' l' M'} &\equiv \langle \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^P(t_f) | (\tilde{W}_P)^{\mu'} | \tilde{\varphi}_{n' l' M'}^0 \rangle \\
&= \exp \left[ i \left( \frac{v^2}{2} + \varepsilon_k \right) t_f \right] \int d^3 r \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^{*P}(\mathbf{r}_P, t_f) \exp[-i v z_I] (\tilde{W}_P(r_P, t_f))^{\mu'} \tilde{\varphi}_{n' l' M'}^0(\mathbf{r}), \tag{A.33}
\end{aligned}$$

wobei  $z_I$  die z-Koordinate im inertialen Targetsystem bezeichnet, während die anderen Koordinaten auf das rotierende System bezogen sind (siehe Abbildung A.1). Durch die Koordinatentransformation

$$z_I = z \cos \theta - x \sin \theta \tag{A.34}$$

und Verwendung der Beziehung (A.22, A.23, A.24) kann der Integrand in (A.33) vollständig durch die im rotierenden System definierten prolat-elliptischen Koordinaten (A.21) ausgedrückt werden. Mit Hilfe der Definitionen

$$\delta = \frac{R}{2}v \cos \theta \quad (\text{A.35})$$

und

$$\kappa(\xi, \eta) = \frac{R}{2}v \sin \theta [(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.36})$$

sowie dem Volumenelement (A.25) bleibt dann

$$\begin{aligned} W_{\mu', n_k l_k M_k, n' l' M'} &= \exp\left[i\left(\frac{v^2}{2} + \varepsilon_k\right)t_f\right] \frac{R^3}{8} \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta (\xi^2 - \eta^2) \exp[-i\delta(\xi\eta + 1)] \\ &\times \tilde{\varphi}_{n_k l_k M_k}^{*P}(r_P(\xi, \eta), \cos \vartheta_P(\xi, \eta)) (\tilde{W}_P(r_P(\xi, \eta)))^{\mu'} \tilde{\varphi}_{n' l' M'}^0(r(\xi, \eta), \cos \vartheta(\xi, \eta)) \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi \exp[i\kappa(\xi, \eta) \cos \varphi] \begin{cases} \cos(M_k \varphi) \cos(M' \varphi) & g \\ \sin(M_k \varphi) \sin(M' \varphi) & u \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

zu berechnen, wobei die  $\xi\eta$ -Anteile der Projektil- und Targetwellenfunktionen entsprechend Gleichung (A.28) definiert worden sind. Wegen des  $x$ -Anteils der Translationsphase gestaltet sich die  $\varphi$ -Integration hier komplizierter als im Matrixelement (A.27). Es ist jedoch möglich, sowohl für den (g) als auch für den (u) Anteil diese Bestandteile der Integrale auf Kombinationen einer Integraldarstellung der Bessel-Funktionen  $J_m(x)$  zurückzuführen. Gemäß Formel 9.1.41 aus [AS 84] gilt für  $t \neq 0$  die Entwicklung

$$\exp\left[\frac{1}{2}x\left(t - \frac{1}{t}\right)\right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} t^n J_n(x) . \quad (\text{A.38})$$

Nach Durchführung der Substitution  $t = i \exp[i\varphi]$ , Multiplikation mit  $\exp[-im\varphi]$  und Integration über  $\varphi$  erhält man aus (A.38)

$$J_m(x) = \frac{i^{-m}}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \exp[i(x \cos \varphi - m\varphi)] , \quad (\text{A.39})$$

wobei die Relationen

$$J_{-m}(x) = (-1)^m J_m(x) = J_m(-x) \quad (\text{A.40})$$

gelten. Löst man die trigonometrischen Funktionen in (A.37) mit Hilfe der Additionstheoreme in Exponentialfunktionen auf und verwendet die Beziehungen (A.39, A.40), so können die  $\varphi$ -Integrale als

$$\begin{aligned} I_g &= \int_0^{2\pi} d\varphi \exp[i\kappa \cos \varphi] \cos(M_k \varphi) \cos(M' \varphi) \\ &= \pi \left( (i)^{M_k + M'} J_{M_k + M'}(\kappa) + (i)^{|M_k - M'|} J_{|M_k - M'|}(\kappa) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

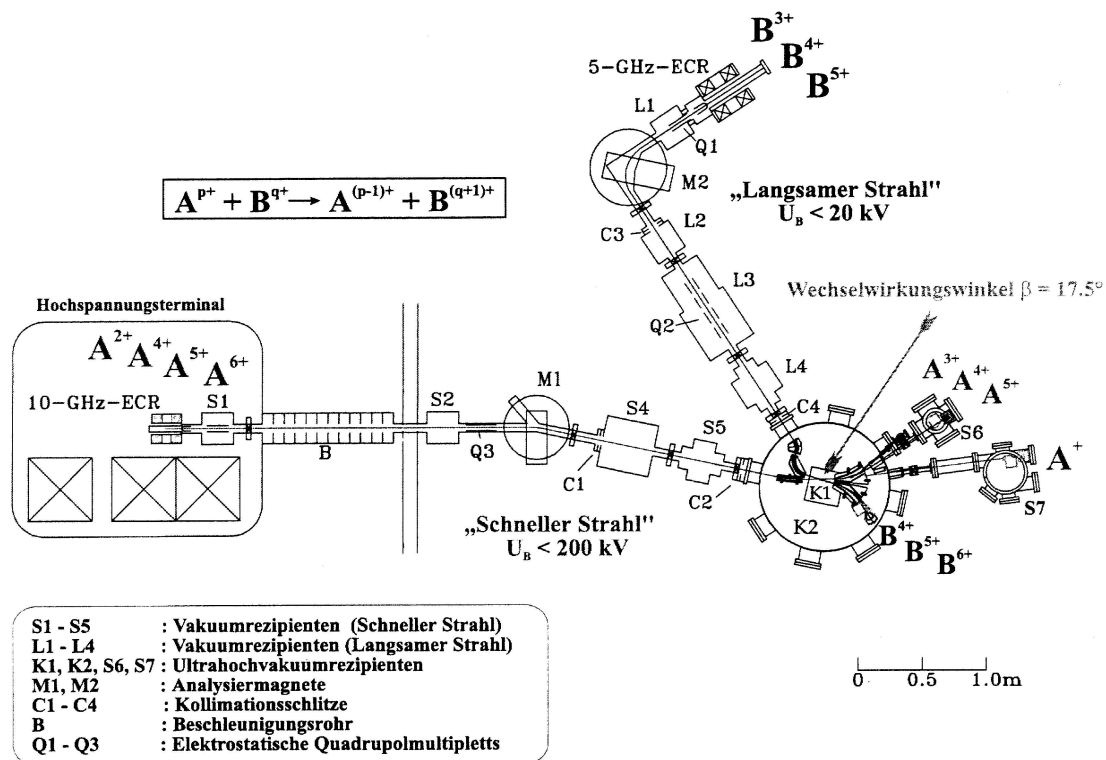
$$\begin{aligned} I_u &= \int_0^{2\pi} d\varphi \exp[i\kappa \cos \varphi] \sin(M_k \varphi) \sin(M' \varphi) \\ &= -\pi \left( (i)^{M_k + M'} J_{M_k + M'}(\kappa) - (i)^{|M_k - M'|} J_{|M_k - M'|}(\kappa) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

geschrieben werden. Die  $(\xi, \eta)$ -Integration in Gleichung (A.37) wird wie bei den Grundmatrixelementen im vorhergehenden Abschnitt numerisch durchgeführt.



# Anhang B

## Überblick des experimentellen Aufbaus



**Abbildung B.1:** Schematische Darstellung des Gesamtaufbaus des Gießener *Ion-Ion crossed beams* Experiments [Di 98].

Alle in dieser Arbeit angesprochenen Experimente wurden mit der Gießener *Ion-Ion crossed beams* Apparatur durchgeführt [Di 98]. Abbildung B.1 zeigt den Gesamtaufbau dieses Experiments, das im wesentlichen aus den Ionenquellen, zwei getrennten Strahlzweigen, der Wechselwirkungszone K1 und den in den Hochvakuumrezipienten S6 und S7 untergebrachten Detektoren besteht.

Die benutzten Projektil- und Targetionen werden mit Hilfe zweier EZR-Ionenquellen (Elektron Zyklotron Resonanz) durch Elektronenstoßionisation entsprechender Atome, die gasförmig in die Ionenquelle eingebracht werden, erzeugt. Der niederenergetische oder langsame Strahlzweig mit Beschleunigungsspannungen bis zu 20kV leitet dabei die Targetionen, der hochenergetische oder schnelle Strahlzweig mit Beschleunigungsspannungen bis zu 200kV die Projektilionen in die Wechselwirkungszone K1, in der sich beide Strahlen unter einem Wechselwirkungswinkel von  $\beta = 17,5^\circ$  kreuzen. Zur Veränderung der Stoßenergie wird hierbei die Energie der Projektilionen im schnellen Strahl mit Hilfe des Beschleunigungsrohres B variiert, die Energie der Targetionen bleibt unverändert.

Die beiden Analysiermagneten M1 und M2 stellen magnetische Sektorfelder zur Impulsselektion der zu untersuchenden Ionensorten dar. Nach der Wechselwirkung beider Strahlen werden die Reaktionsereignisse je nach Ladung durch elektrostatische Sektorfelder getrennt und die Ströme dieser Strahlen in Faraday-Cups, die in den Hochvakuumrezipienten S6 und S7 untergebracht sind, gemessen. Dazu verwendet man bei Ladungsaustauschreaktionen die Koinzidenzmeßmethode zur Bestimmung der Reaktionsrate. Hierbei wird ausgenutzt, daß zwischen den zum selben Zeitpunkt entstandenen Umladungsprodukten des zu untersuchenden Ion-Ion-Stoßsystems eine bestimmte zeitliche Korrelation zwischen dem Verlassen der Wechselwirkungszone und dem Erreichen der Detektoröffnung besteht. Auf diese Weise können Ion-Ion-Ereignisse von Ion-Restgas-Stößen unterschieden werden.

Nun sollen die Flugzeiten der Li-ähnlichen Targetionen im langsamen Strahl zwischen Ionenquelle und Wechselwirkungszone mit einer Beschleunigungsspannung von  $U = 20kV$  abgeschätzt werden. Deren Geschwindigkeiten  $v$  ergeben sich über den Energiesatz gemäß

$$E_{elektrisch} = E_{kinetisch} \quad (\text{B.1})$$

$$qU = \frac{1}{2}mv^2 \quad (\text{B.2})$$

$$v = \sqrt{\frac{2qU}{m}}, \quad (\text{B.3})$$

wobei  $m$  die Masse und  $q$  die Ladung bezeichnen. Setzt man die angegebenen Zahlenwerte ein, so ergeben sich die in Tabelle B.1 aufgelisteten Geschwindigkeiten und die bei einer geschätzten Flugstrecke von 5m ermittelten Flugzeiten  $t$ .

Ion	Ladung q	Masse m [amu]	v [m/s]	t [s]
$B^{2+}$	2	11	$8,53 \cdot 10^5$	$5,86 \cdot 10^{-6}$
$C^{3+}$	3	13	$9,61 \cdot 10^5$	$5,20 \cdot 10^{-6}$
$N^{4+}$	4	14	$1,07 \cdot 10^6$	$4,67 \cdot 10^{-6}$
$O^{5+}$	5	16	$1,11 \cdot 10^6$	$4,50 \cdot 10^{-6}$

**Tabelle B.1:** Flugzeit-Abschätzungen für Li-ähnliche Targetionen im langsamen Strahl.



# Anhang C

## Ionisationspotentiale zu verschiedenen Konfigurationen

Die Tabellen C.1 und C.2 enthalten die mit der Optimierten Potential Methode (OPM) berechneten Ionisationspotentiale in atomaren Einheiten für die 1s-, 2s-, und 2p-Elektronen bei verschiedenen Konfigurationen der Targetionen  $C^{3+}$  und  $N^{4+}$ . Deutlich sind die von den verschiedenen Konfigurationen abhängigen Abschirmeffekte zu erkennen.

Konfiguration	Elektron		
	1s	2s	2p
$1s^22s$	12,682	2,364	2,065
$1s2s^2$	15,831	2,599	2,317
$1s2s2p$	14,946	2,727	2,441
$2s^22p$	15,638	2,909	2,775

**Tabelle C.1:** Ionisationspotentiale in atomaren Einheiten für  $C^{3+}$ .

Konfiguration	Elektron		
	1s	2s	2p
$1s^22s$	18,219	3,591	3,216
$1s2s^2$	22,045	3,876	3,534
$1s2s2p$	20,884	4,033	3,683
$2s^22p$	21,801	4,345	4,189

**Tabelle C.2:** Ionisationspotentiale in atomaren Einheiten für  $N^{4+}$ .



# Literaturverzeichnis

- [AS 84] M. Abramowitz und I.A. Stegun, *Pocketbook of Mathematical Functions*, Verlag Harri Deutsch, Thun/Frankfurt 1984.
- [Be 96] K. Bethge, *Kernphysik*, Springer, Berlin Heidelberg 1996.
- [BGS 79] Dž. Belikić, R. Gayet und A. Salin, Phys. Rep. **56**, 279 (1979).
- [BM 92] B.H. Bransden und M.R.C. McDowell, *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions*, Clarendon, Oxford 1992.
- [BMS 78] D. Basu, S.C. Mukherjee und D.P. Sural, Phys. Rep. **42**, 145 (1978).
- [CKD 79] K.T. Chen, Y.K. Kim und J.P. Desclaux, Atomic Data and Nuclear Data Tables **24**, 111 (1979).
- [CKE 96] J. Chen, J.B. Krieger, R.O. Esquivel, M.J. Stott, G.J. Iafrate, J. Phys. A **54**, 1910 (1996).
- [CLJ 74] Kt. Cheng, Cp. Lin und W.R. Johnson, Phys. Lett. **48A**, 437 (1974).
- [Co 78] J.F. Cordes, *Allgemeine Chemie 2: Struktur und Bindung*, Verlag Chemie, Weinheim 1978.
- [CS 75] R. Colle und O. Salvetti, Theor. Chim. Acta **37**, 329 (1975).
- [DG 90] R.M. Dreizler und E.K.U. Gross, *Density Functional Theory*, Springer, Berlin Heidelberg 1990.
- [Di 98] K. von Diemar, *Dissertation*, Gießen 1998.
- [DMP 99] K. von Diemar, F. Melchert, A. Pfeiffer, K. Bajajova, K. Huber, E. Salzborn, L. Opradolce und R.D. Piacentini, Phys. Scr. **T80B**, 262 (1999).
- [EEG 99] D. Elizaga, L.F. Errea, J.D. Gorfinkiel, C. Illescas, L. Méndez, A. Macías, A. Riera, A. Rojas, O.J. Kroneisen, T. Kirchner, H.J. Lüdde, A. Henne und R.M. Dreizler, J. Phys. B **32**, 857 (1999).
- [EFK 98] E. Engel, A. Facco Bonetti, S. Keller, I. Andrejkovics und R. M. Dreizler, Phys. Rev. A **58** (1998).
- [Ei 90] J. Eichler, Phys. Rep. **193**, 165 (1990).
- [EM 95] J. Eichler und W. E. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Academic Press, San Diego 1995.
- [EV 93] E. Engel und S.H. Vosko, Phys. Rev. A **47**, 2800 (1993).
- [FL 91] W. Fritsch und C.D. Lin, Phys. Rep. **202**, 1 (1991).

- [FN 75] D.R. Flower und H. Nussbaumer, *Astron. Astrophys.* **39**, 295 (1975).
- [FrF 77] C. Froese Fischer, *The Hartree-Fock Method for Atoms*, Wiley, New York London 1977.
- [GL 94] A. Görling und M. Levy, *Phys. Rev. A* **50**, 196 (1994).
- [GMN 75] K.O. Groeneveld, R. Mann, G. Nolte, S. Schumann und R. Spohr, *Phys. Lett.* **54A**, 335 (1975).
- [Hi 75] A. Hibbert, *Rep. Prog. Phys.* **38**, 1217 (1975).
- [HK 64] P. Hohenberg und W. Kohn, *Phys. Rev.* **136 B**, 864 (1964).
- [JG 89] R.O. Jones und O. Gunnarsson, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 689 (1989).
- [Jo 75] C.J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, North-Holland, New York 1975.
- [JP 81] R.K. Janev und L.P. Presnyakov, *Phys. Rep.* **70**, 1 (1981).
- [JW 85] R.K. Janev und H. Winter, *Phys. Rep.* **117**, 265 (1985).
- [KGL 97] T. Kirchner, L. Gulyás, H.J. Lüdde, A. Henne, E. Engel und R.M. Dreizler, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1658 (1997).
- [KGL 98] T. Kirchner, L. Gulyás, H.J. Lüdde, E. Engel und R.M. Dreizler, *Phys. Rev. A* **58**, 2063 (1998).
- [Ki 99] T. Kirchner, *Dissertation*, Frankfurt am Main 1999.
- [KKA 99] T. Kirchner, M. Keim, A. Achenbach, H.J. Lüdde, O.J. Kroneisen und R.M. Dreizler, *Phys. Scr.* **T80B**, 270 (1999).
- [KLD 99a] T. Kirchner, H.J. Lüdde und R.M. Dreizler, *Phys. Scr.* **T80B**, 416 (1999).
- [KLD 99b] T. Kirchner, H.J. Lüdde und R.M. Dreizler, *Nucl. Instr. and Meth. B* **154**, 46 (1999).
- [KLI 90] J. B. Krieger, Y. Li und G. J. Iafrate, *Phys. Lett. A* **146**, 256 (1990).
- [KLI 92] J. B. Krieger, Y. Li und G. J. Iafrate, *Phys. Rev. A* **45**, 101 (1992).
- [KLK 99] O.J. Kroneisen, H.J. Lüdde, T. Kirchner und R.M. Dreizler, *J. Phys. A* **32**, 2141 (1999).
- [KPR 98] A. Kolakowska, M. S. Pindzola, F. Robicheaux, D. R. Schultz und J. C. Wells, *Phys. Rev. A* **58**, 2872 (1998).
- [KS 65] W. Kohn und L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140 A**, 1133 (1965).
- [Lat 55] R. Latter, *Phys. Rev.* **99**, 510 (1955).
- [Le 99] I.N. Levine, *Quantum Chemistry*, Prentice Hall, London <sup>5</sup>1999.
- [LHK 96] H.J. Lüdde, A. Henne, T. Kirchner und R.M. Dreizler, *J. Phys. B* **29**, 4423 (1996).
- [Ma 94] T. Mayer-Kuckuk, *Atomphysik*, B.G. Teubner, Stuttgart <sup>4</sup>1994.
- [MKS 95] F. Melchert, S. Krüdener, R. Schulze, S. Petri, S. Pfaff und E. Salzborn, *J. Phys. B* **28**, L355 (1995).

- [MMK 97] F. Melchert, S. Meuser, S. Krüdener, A. Pfeiffer, K. von Diemar, E. Salzborn, E. Sidky und C.D. Lin, *J. Phys. B* **30**, L697 (1997).
- [Na 98] A. Nagy, *Phys. Rep.* **298**, 1 (1998).
- [OMP 97] L. Opradolce, R. McCarroll und R.C. Piacentini, *Nucl. Instr. and Meth. B* **132**, 302 (1997).
- [OS 77] R.E. Olson und A. Salop, *Phys. Rev. A* **16**, 531 (1977).
- [PTV 92] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling und B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*, Cambridge University Press, Cambridge 1992.
- [PY 89] R.G. Parr und W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, New York 1989.
- [RG 84] E. Runge und E.K.U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997 (1984).
- [RMR 86] K. Rinn, F. Melchert, K. Rink und E. Salzborn, *J. Phys. B* **19**, 3717 (1986).
- [RMS 85] K. Rinn, F. Melchert und E. Salzborn, *J. Phys. B* **18**, 3783 (1985).
- [SDR 97] N. Stolterfoth, R.D. DuBois und R.D. Rivarola, *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions*, Springer Series on Atoms and Plasmas Vol. 20, Berlin, Heidelberg, New York 1997.
- [SE 90] H. Scheffler und H. Elsässer, *Physik der Sterne und der Sonne*, Wissenschaftsverlag, Mannheim <sup>2</sup>1990.
- [SH 82] F. Stummel und K. Hainer, *Praktische Mathematik*, B.G. Teubner, Stuttgart 1982.
- [SSM 79] S. Schumann, I.A. Sellin, R. Mann, H.J. Frischkorn, D. Rosich, Gy. Szabó und K.O. Groeneveld, *Journal de Physique C1* **40**, 221 (1979).
- [St 87] N. Stolterfoth, *Phys. Rep.* **146**, 315 (1987).
- [SWK 97] D. R. Schultz, J. C. Wells, P. S. Krstić und C. O. Reinhold, *Phys. Rev. A* **56**, 3710 (1997).
- [TS 76] J.D. Talmann und W.F. Shadwick, *Phys. Rev. A* **14**, 36 (1976).
- [UG 97] C. A. Ullrich und E. K. U. Gross, *Comments At. Mol. Phys.* **33**, 211 (1997).
- [We 61] A.W. Weiss, *Phys. Rev.* **122**, 1826 (1961).