### Grundzustandskorrelationen und dynamische Prozesse untersucht in Ion-Helium-Stößen

Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

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

von

### Markus S. Schöffler

aus Offenbach am Main

Frankfurt am Main, Mai 2006 (DF1)

Dekan: Professor W. Aßmus

- 1. Gutachter: Professor R. Dörner
- 2. Gutachter: Professor H. Schmidt-Böcking

Meiner Familie

### Zusammenfassung

In der hier vorliegenden Arbeit wurden Fragen der atomaren Korrelation sowie Verschränkung untersucht und ein Beobachtungsfenster geöffnet, durch welches es möglich ist, Einblick in die Grundzustandswellenfunktion von Helium zu erhalten.

Der Elektronentransfer (P<sup>q+</sup>+He $\rightarrow$ P<sup>(q-1)+</sup>+He<sup>+</sup>) in schnellen Ion-Atom-Stößen findet im Bereich des Überlapps der Wellenfunktionen des gebundenen Anfangs- und Endzustandes statt [JOpp28a, MMcD70]. Daher kann diese Reaktion besonders selektiv an der Grundzustandswellenfunktion angreifen. Die bei der Transferionisation (P<sup>q+</sup>+He $\rightarrow$ P<sup>(q-1)+</sup>+He<sup>2+</sup>+e<sup>-</sup>) zusätzlich stattfindende Ionisation involviert auch das zweite Elektron. Dadurch ist es möglich die komplexe Vielteilchendynamik zu untersuchen und wie später in dieser Arbeit gezeigt wird, unter bestimmten Bedingungen auch sensitiv auf die Anfangszustandskorrelation zu sein!

Die Messungen wurden mit H<sup>+</sup>-, He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektilen bei Einschussenergien von 40 - 630 keV/u (1,25 <  $v_P$  < 5,02 a. u.) durchgeführt. Durch den Elektronentransferprozess wird auch die Vermessung des Endzustandes, den Impulsen, aller drei Teilchen (Projektil, Elektron und He<sup>2+</sup>-Rückstoßion) erleichtert. Durch das umgeladene, dann neutrale, Projektil werden zusätzlich die Post-Collision-Effekte minimiert.

Zur experimentellen Untersuchung kommt die seit Jahren etablierte Technologie des Reaktionsmikroskops (COLTRIMS, **COLd T**arget **R**ecoil **I**on **M**omentum **S**pectroscopy) zum Einsatz [HSch89, RDoe00a, JUll03], die sich durch eine  $4\pi$ -Impulsakzeptanz für alle emittierten Teilchen auszeichnet. Nach Kreuzung der Projektilionen mit einem kalten und wohl lokalisierten Gasstrahl werden die umgeladenen Projektile detektiert. Die im Überlappbereich entstehenden Elektronen und Ionen werden mittels elektrischer und magnetischer Felder ebenfalls auf orts- und zeitauflösenden Detektoren projiziert. Anhand des Auftreffortes und der Flugzeit können die dreidimensionalen Impulsvektoren eindeutig rekonstruiert werden.

Je nach Energie Projektile dominieren unterschiedliche atomare Reaktionsmechanismen. Entsprechend sind es zwei Fragenkomplexe, denen sich diese Arbeit hauptsächlich widmet:

- Was ist die Reaktionsdynamik? Welche Mechanismen tragen zur Reaktion bei und wie hängen diese von Projektilladung und -energie ab?
- Lässt sich die Grundzustandswellenfkt. mit dieser Technik abbilden?

Die erzielten Ergebnisse sehen wie folgt aus:

- Im Bereich langsamer Stöße ( $v_P \leq v_{B,e}$ ) wird der Stoßprozess in einem quasimolekularen Bild beschrieben (*Sattelpunktionisation*). Hier konnten im Wesentlichen die experimentellen Ergebnisse von Schmidt zum symmetrischen Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He [LSch00] bestätigt und zu höheren Projektilgeschwindigkeiten fortgeschrieben werden (60 keV/u). Für die Stoßsysteme He<sup>+</sup>/He und H<sup>+</sup>/He wurden sehr ähnliche Emissionsstrukturen im Impulsraum gefunden.
- Bei allen untersuchten Projektilenergien und Stoßsystemen wurde eine vom Elektroneneinfang unabhängige Stoßionisation durch Wechselwirkung mit dem Projektil (*Binary Encounter, BE*) gefunden. Die Erwartung, dass der Targetkern nur Beobachter der Ionisation ist, wurden eindeutig widerlegt und die Abweichungen als Folge von Korrelationseffekten gedeutet.
- Speziell für das Stoßsystem He<sup>+</sup>/He bei 60 keV/u wurden sehr viele im Geschwindigkeitsraum um  $v_P$  verteilte Elektronen beobachtet und einem Dreistufenprozess zugeschrieben: Zuerst erfolgt die Ionisation des Projektils und anschließend ein resonanter Zweielektroneneinfang.
- Wird ein Elektron sehr schnell entfernt, wie durch den Elektroneneinfang bei hohen Projektilgeschwindigkeiten ( $v_P \ge 3$  a. u.) findet die Ionisation sehr häufig durch *Shake-off* [TAbe67] statt. Die Elektronen wurden entgegen der Strahlrichtung emittiert, zu negativen Longitudinalimpulsen. Darüberhinaus wurde kein Unterschied zwischen den verschiedenen Projektilen beobachtet.

Da für den Shake-off-Prozess unter den hier realisierten Bedingungen das Projektil nicht mit dem emittierten Elektron wechselwirkte, spiegelt die Elektronenimpulsverteilung direkt den, durch den Elektroneneinfang präparierten Anteil, der Grundzustandswellenfunktion wider [AGod04, MSch05]. Theoretische Rechnungen bestätigen, dass die rückwärtige Elektronenemission nur durch die stark korrelierten *nicht-s*<sup>2</sup>-Anteile im Heliumgrundzustand zu erklären ist. Diese Beimischungen höherer Drehimpulse von weniger als 2 % konnten entgegen der verbreiteten Lehrmeinung zum ersten Mal experimentell nachgewiesen und vermessen werden.

# Inhaltsverzeichnis

1	g	3					
2	Aufbau des Experiments						
	2.1	Messp	orinzip	14			
	2.2 Strahlpräparation						
	2.3	B Das Vakuumsystem					
	2.4	Gastarget					
	2.5	Spektrometer					
		2.5.1	Der Rückstoßionenzweig	26			
		2.5.2	Elektronenzweig	31			
		2.5.3	Realisierung	34			
		2.5.4	Magnetfeld	39			
	2.6	Ejekti	ile	41			
	2.7	7 Detektoren					
		2.7.1	Micro Channel Plates (MCP)	43			
		2.7.2	Ortsauflösende Anode	46			
	2.8	Elekti	ronik und Datenaufnahme	48			
3	Kin	ematil	k inelastischer Ion-Atom-Stöße	55			
	3.1	Impuls des Projektils					
	3.2	Impuls des Rückstoßions					
		3.2.1	Elektronentransfer in das Projektil	65			
		3.2.2	Ionisation des Targets	66			
		3.2.3	Ionisation des Projektils (loss)	67			
		3.2.4	Transferionisation	68			
4	Phy	sikali	scher Hintergrund	71			
	4.1	Theor	etische Grundlagen	72			
		4.1.1	Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC)	73			
		4.1.2	Störungstheoretische Beschreibung	77			
			4.1.2.1 Bornsche Näherung	79			

			4.1.2.2 Rechnungen mit gestörten Wellen	84
		4.1.3	Gekoppelte-Kanäle-Rechnungen	87
		4.1.4	Das quasimolekulare Bild	89
		4.1.5	Der Anfangszustand	95
	4.2	Elektı	roneneinfang	97
		4.2.1	Quantenmechanische Näherungsmethoden	99
		4.2.2	Shake over	103
		4.2.3	Thomas-Prozesse	103
	4.3	Ionisa	tionsprozesse	107
		4.3.1	Ionisation im molekularen Bild	110
		4.3.2	Einfang in Projektilkontinuumszustände (ECC)	113
		4.3.3	Binärer Stoß	117
		4.3.4	"Photoionisation"	120
		4.3.5	Abregung durch Elektronenemission	122
		4.3.6	Shake off	123
	4.4	Trans	ferionisation	126
		4.4.1	Two Step 2 (unabhängige Prozesse)	128
		4.4.2	Abhängige Prozesse (TS1)	130
		4.4.3	Korrelierte Prozesse (SO)	131
5	Kali	ibratio	on und Datenauswertung	135
5	<b>Kal</b> i 5.1	<b>ibratic</b> Kalibi	on und Datenauswertung	<b>135</b> 135
5	<b>Kal</b> i 5.1	<b>ibratic</b> Kalibi 5.1.1	on und Datenauswertung ration	<b>135</b> 135 137
5	<b>Kal</b> i 5.1	<b>ibratic</b> Kalibi 5.1.1 5.1.2	on und Datenauswertung ration	<b>135</b> 135 137 142
5	<b>Kal</b> i 5.1	<b>ibratic</b> Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3	on und Datenauswertung         cation	<ul> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> </ul>
5	<b>Kal</b> i 5.1 5.2	ibratio Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti	on und Datenauswertung         ration       Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung       Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse       Image: Ima	<ul> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> </ul>
5	<b>Kal</b> i 5.1 5.2 5.3	ibratio Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp	on und Datenauswertung         cation         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte	<ul> <li><b>135</b></li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>153</li> </ul>
5	<b>Kal</b> i 5.1 5.2 5.3 5.4	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös	on und Datenauswertung         cation	<ul> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>153</li> <li>155</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter	on und Datenauswertung         ration	<ol> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>153</li> <li>155</li> <li>157</li> </ol>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1	on und Datenauswertung         ration       Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung	<ol> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>153</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> </ol>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1 5.5.2	on und Datenauswertung         cation         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze	<ul> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>153</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darst	on und Datenauswertung         cation         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen	<ul> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darste 5.6.1	on und Datenauswertung         cation         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen         Projektilstreusystem	<ul> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> <li>165</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darst 5.6.1 5.6.2	on und Datenauswertung         ration         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen         Projektilstreusystem         Rückstoßionenstreusystem	<ul> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> <li>165</li> <li>166</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6 5.6	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darst 5.6.1 5.6.2 Wirku	on und Datenauswertung         ration         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen         Projektilstreusystem         Rückstoßionenstreusystem	<ul> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>153</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> <li>165</li> <li>166</li> <li>167</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6 5.7	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullpr Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darst 5.6.1 5.6.2 Wirku 5.7.1	on und Datenauswertung         ration         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen         Projektilstreusystem         Rückstoßionenstreusystem         ungsquerschnitte         Totale Wirkungsquerschnitte	<ul> <li>135</li> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> <li>165</li> <li>166</li> <li>167</li> <li>167</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6 5.7	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullpr Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darsta 5.6.1 5.6.2 Wirku 5.7.1 5.7.2	on und Datenauswertung         ration         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen         Projektilstreusystem         Rückstoßionenstreusystem         Ingsquerschnitte         Differenzielle Wirkungsquerschnitte	<ul> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> <li>165</li> <li>166</li> <li>167</li> <li>167</li> <li>169</li> </ul>
5	Kali 5.1 5.2 5.3 5.4 5.5 5.6 5.6 5.7	ibratic Kalibr 5.1.1 5.1.2 5.1.3 Ejekti Nullp Auflös Unter 5.5.1 5.5.2 Darsta 5.6.1 5.6.2 Wirku 5.7.1 5.7.2 Elekta	on und Datenauswertung         ration         Rückstoßionenimpulse         Rückstoßionenablenkung         Elektronenimpulse         1         unkte         sung         grundereignisse         Untergrund in der Flugzeit         Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze         ellung in verschiedenen Streusystemen         Projektilstreusystem         Rückstoßionenstreusystem         Ingsquerschnitte         Differenzielle Wirkungsquerschnitte         conenimpulsrekonstruktion aus Projektil und Rückstoßion	<ul> <li>135</li> <li>137</li> <li>142</li> <li>144</li> <li>151</li> <li>155</li> <li>157</li> <li>159</li> <li>160</li> <li>163</li> <li>165</li> <li>166</li> <li>167</li> <li>167</li> <li>169</li> <li>169</li> </ul>

		5.8.2	Elektronenlongitudinalimpuls	170		
		5.8.3	Berechnung und Ergebnisse	171		
6	Ergebnisse und Diskussion 17					
	6.1	6.1 Totale Wirkungsquerschnitte				
	6.2	Streu	winkel-differenzielle Daten ( $d\sigma/d\theta_P$ )	181		
		6.2.1	Elektronentransfers (SC und DC)	181		
		6.2.2	Transferionisation (TI)	186		
		6.2.3	Quotienten aus Transferionisation und Elektronenein- fang $(\sigma_{\pi\pi}/(\sigma_{\pi\pi} + \sigma_{\pi\pi}))$	188		
	63	Longi	tudinale Rückstoßionenimpulsverteilung $(d\sigma/dn_{-p})$	191		
	6.4	Sattel	$p_{\text{unifield}}$ $p_{z,Rec}$ $p_{z,Rec}$ $p_{z,Rec}$	199		
	0.1	6 4 1	Vergleich zur TI2	203		
		642	Einfluss des Projektilstreuwinkels	200		
		643	Unterschiedliche Stoßsysteme	209		
	6.5	Two-S	Step-2-Prozesse (TS2)	216		
		6.5.1	Electron Capture to Continuum - CUSP	216		
		6.5.2	Binary Encounter - BE	218		
			6.5.2.1 Binary Encounter mit Energieverlust	219		
			6.5.2.2 Bilanz der Transversalimpulse	225		
	6.6	Two-S	Step-1-Prozess (TS1)	230		
	6.7	Shake	e-off und Korrelationseffekte	233		
		6.7.1	Andere Stoßsysteme	239		
	6.8	Relati	ive Prozessanteile	244		
7	Zus	amme	nfassung und Ausblick	249		
	7.1	Zusan	nmenfassung	249		
	7.2	Ausbl	ick	255		
A	A Atomare Einheiten					
B	Ver	wende	ete Zeichen und Symbole	263		
С	typi	ische I	Experimentelle Parameter	265		
D	Diff	erenzi	ielle Wirkungsquerschnitte	267		
	D.1	H <sup>+</sup> Pr	rojektile	269		
	D.2	He <sup>+</sup> F	Projektile	289		
	D.3	$\mathrm{He}^{2+}$	Projektile	308		
Li	tera	turver	zeichnis	347		

"Ich fürchte mich vor der Weltanschauung der Menschen, die die Welt nicht angeschaut haben."

(Alexander von Humboldt)

## 1. Einleitung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Untersuchung verschränkter und korrelierter Bewegung im einfachsten Mehrelektronensystem, dem Heliumatom.

Empedokles, griechischer Philosoph sowie Lehrer Platons und Aristotels', formulierte vor 2500 Jahren als erster überhaupt die Idee, dass die physische Welt aus einer beschränkten Anzahl verschiedener Elemente besteht: Erde, Feuer, Wasser und Luft. Diesem Grundgedanken folgend, postulierte Demokrit, wie auch sein Lehrer Leukippos, dass die gesamte Materie aus kleinsten, unteilbaren Teilchen zusammengesetzt ist, den Atomen. Entsprechend leitet sich das Wort vom griechischen *atomos* für unteilbar ab. Die Atome seien danach massiv aber unterschiedlich in der Form. Demokrit einer der bekanntesten griechischen Philosophen gilt als der Urvater der Atomtheorie.

Die Theorie der 4 Grundelemente galt lange Zeit als korrekt und setzte sich gegenüber Demokrits Atomtheorie durch. Mitte des 18. Jahrhunderts formulierte der französische Chemiker Lavoisier das Gesetz der Erhaltung der Masse und kannte bereits 23 verschiedene Elemente. Mit dieser und weiteren Erkenntnissen u. a. von Sennert (Gesetz der Erhaltung der Elemente), Boyle und Richter (Gesetz der äquivalenten Proportionen) [Wiki06] kam es Anfang des 19. Jahrhunderts zur Wende. John Dalton griff Demokrits Idee wieder auf. Er nahm an, dass kleinste, massive, kugelförmige Teilchen - die Atome existieren, die weder erschaffen noch zerstört oder geteilt werden können. Alle Atome eines chemischen Elements sind gleich und können zusammen mit anderen Atomen chemische Verbindungen eingehen, wobei stets die gleiche Anzahl an Atomen eine Verbindung bildet. Zu Beginn des 20. Jahrhunderts, nach der Entdeckung des Elektrons durch Thomson, gab es erstmals Modelle, die dem Atom eine innere Struktur zuschrieben. Thomson verteilte in seinem Rosinenkuchenmodell (1903) positive und negative Ladungen gleichmäßig über die Größe des Atoms. Rutherford erkannte nach seinen Streuexperimenten, dass die Atome aus einem winzigen positvgeladenen Kern bestehen, der nahezu die gesamte Masse enthält (1911). Zwischen den negativgeladenen Elektronen der Atomhülle und dem -kern befindet sich Vakuum. Hauptproblem dieses Modells war, dass die sich bewegenden Elektronen Strahlung emittieren und in letzter Konsequenz nach wenigen Nanosekunden in den Kern stürzen müssten.

Soweit waren alle Atommodelle noch klassische, anschauliche Gebilde. Bohrs Atommodell (1913) dessen Schlüssel in einer Energiequantisierung bestand, war die erste quantenmechanische Beschreibung: Das Atom besitzt stationäre Zustände mit diskreten Energieniveaus und die Elektronen bewegten sich auf ebenso diskreten Kreisbahnen um den Kern. Mit diesem Modell war es erstmals möglich, die Spektrallinien des Wasserstoffs zu erklären. An allen schwereren Elementen, also den restlichen 99 %, scheiterte jedoch das Modell. Eine Verbesserung durch weitere Quantisierungsbedingungen kam durch Sommerfeld zustande (1915). Erhaltungsgrößen der Bewegung, wie z. B. der Drehimpuls konnte nur noch diskrete Werte annehmen. Das Bohrsche, wie auch das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell waren nur semiklassische Modelle, da die Elektronen weiterhin als klassische Teilchen behandelt wurden. Eine vollquantenmechanische Beschreibung auf Basis der Schrödingergleichung folgte erst 1928 mit dem Orbitalmodell.

Bis heute ist keine Theorie in der Lage mehr als das Wasserstoffatom analytisch zu lösen. Bereits das Heliumatom erfordert komplexe numerische Lösungsverfahren, was möglicherweise an dem tieferen Problem der Mehrteilchendynamik liegt. Die Kinoshita-Wellenfunktion (1957) für den Heliumgrundzustand berechnet nach einem numerischen Variationsverfahren die Lösung der Schrödingergleichung. Das Ergebnis, dargestellt in Abbildung 1.1, ist ein großer Satz an Parametern.

Bei aller Korrektheit dieser Lösung - was bringt sie für unser Verständnis? Jegliche Anschaulichkeit ist hier verlorengegangen. Auf der einen Seite wird an der "Schönheit" sowie der Zurückführung auf wenige Grundgleichungen gearbeitet. Und dann soll dies die Antwort sein? Wo liegen die Probleme? Ist es tatsächlich der Übergang von einem 2- zu einem 3- bzw. Mehrkörpersystem, dass all die Probleme aufwirft? Ab wann beginnt also Komplexität schon ab 3 Teilchen? Ist hier mehr vorhanden, als es den Anschein hat? Ist

No. of parameters	10	18	22	34	38	39
$egin{array}{c} -ar{\lambda} & k \ L & M \ N \end{array}$	2.9036261 3.4591498 77.5338944 11.2070737 46.1838658	$\begin{array}{c} 2.9037150\\ 3.8892119\\ 70.8204634\\ 9.1047319\\ 47.4281727\end{array}$	$\begin{array}{c} 2.9037142\\ 3.7078208\\ 55.4500389\\ 7.4774433\\ 35.4027276\end{array}$	$\begin{array}{c} 2.9037223\\ 3.7133871\\ 55.7506367\\ 7.5067096\\ 35.6479843\end{array}$	$\begin{array}{c} 2.9037225\\ 3.7204746\\ 56.2837996\\ 7.5640619\\ 36.0575857\end{array}$	$\begin{array}{c} 2.9037225\\ 3.7211124\\ 56.3337661\\ 7.5694792\\ 36.0957835\end{array}$
(100) (110) (120)	-0.520987 1.212836 -0.237663	0.061877 1.066306	-0.221064 1.266177 -0.201470	-0.242959 1.258703 -0.133887	-0.234487 1.256856 -0.132299	-0.233872 1.256979 -0.132234
(112) (122)	$\begin{array}{c} 0.057465 \\ 0.074288 \end{array}$		$0.024224 \\ 0.117951$	0.087396	0.003643 0.081032	$\begin{array}{c} 0.003471 \\ 0.080887 \end{array}$
(200) (210) (220) (230) (240)	$0.227098 \\ -0.314547$	0.201815 0.586598 -1.034044	$\begin{array}{c} 0.328272 \\ -0.222515 \\ -0.202738 \\ -0.078207 \\ 0.114848 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.415123\\ 0.056239\\ -1.173334\\ 0.557818\\ -0.092967\end{array}$	$\begin{array}{c} 0.417629\\ 0.057689\\ -1.159792\\ 0.553048\\ -0.095915\end{array}$	$\begin{array}{c} 0.418083\\ 0.058346\\ -1.159635\\ 0.553037\\ -0.096000\end{array}$
(212) (222) (232) (242)	0.118920 0.548619	1.418009	$\begin{array}{c} 0.090652\\ 0.689095\\ -0.146695\\ -0.107252\end{array}$	$\begin{array}{r} 1.671338 \\ -1.146609 \\ 0.286687 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.014641 \\ 1.636562 \\ -1.121680 \\ 0.286673 \end{array}$	$\begin{array}{r} 0.014958 \\ 1.636927 \\ -1.121438 \\ 0.286830 \end{array}$
(300) (310) (320) (330) (340)		0.042460 0.818139	-0.114389 0.237343 -0.005333	-0.225558 0.047030 0.560729 0.282002 -0.244042	-0.226038 0.041420 0.559791 0.282496 -0.247148	$     \begin{array}{r}       -0.226212 \\       0.041297 \\       0.559480 \\       0.282068 \\       -0.247617     \end{array} $
(322) (332) (342)		0.531984 - 2.236430	0.246469	$-0.421915 \\ 0.085977 \\ 0.072563$	$-0.430056 \\ 0.101488 \\ 0.070063$	$-0.429969 \\ 0.101338 \\ 0.069747$
(400) (410) (420) (430)		0.026402	0.007215 - 0.014174	$0.053802 \\ 0.010048 \\ -0.133344$	0.053455 0.013036 -0.121417 -0.005797	0.053479 0.013121 -0.121398 -0.005826
(440) (450)		-0.445197		-0.425197 0.302063	-0.417059 0.294998	-0.417101 0.294975
(422) (442) (444)		0.157459 1.991624	0.077528	$\begin{array}{c} 0.309865 \\ 0.161768 \\ 0.028853 \end{array}$	0.305348 0.165892 0.029019	$\begin{array}{c} 0.305219 \\ 0.165445 \\ 0.028951 \end{array}$
(540) (550) (560)		0.099651		$0.170186 \\ -0.134784$	-0.019751 0.185206 -0.132279	$ \begin{array}{r} -0.019203 \\ 0.185827 \\ -0.131580 \end{array} $
(522) (552)		0.896542		$-0.034092 \\ -0.140588$	-0.028227 -0.149057	$-0.027977 \\ -0.148548$
(662) (660)		0.159351		0.037981	0.039775	$0.039703 \\ -0.000861$

TABLE I. The constants of various ground state wave functions of helium containing negative-power terms. The only exception is the 18-parameter case which is obtained from the function of Chandrasekhar and Herzberg by applying our relaxation method. Expansion coefficients listed are  $10^{l}c_{l,m,n}$  and  $c_{0,0,0}$  is normalized to 1.

**Abbildung 1.1:** Numerische Lösung der Grundzustandswellenfunktion von Helium. Dargestellt sind die einzelnen erforderlichen Parameter der Lösung der so genannten Kinoshita-Wellenfunktion [TKin57].

Ξ

das Ganze mehr als die Summe seiner Teile? Sind Mehrteilchensysteme der Schlüssel zur Beantwortung grundlegender Fragen, z. B. weshalb für uns eine ausgezeichnete Zeitrichtung existiert? Auch makroskopische 3- und Mehrkörpersysteme wie Sonne-Erde-Mond sind nicht mehr analytisch lösbar sind. Numerische Lösungen hingegen z. B. die Verschmelzung ganzer Galaxien sind sehr exakt. Liegen die Probleme also in der Quantenmechanik selbst?

Abgesehen von der Energiequantisierung, was sind die Besonderheiten der Quanten- gegenüber der klassischen Mechanik? Es sind vor allem der Wellencharakter von Teilchen sowie die Unschärferelation. Die Schrödingerglei-

chung beschreibt den Zustand eines quantenmechanischen Systems und die Wahrscheinlichkeit für den Übergang in einen anderen (statischen) Zustand. Teilchen wie z. B. das Elektronen sind nicht mehr im Raum lokalisierte Punkte, sondern werden als Wellen beschrieben. Über ihren Ort lässt sich nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage machen. Das Elektron ist verschmiert, man spricht von Nichtlokalität. Der klassische Determinismus verliert seine Gültigkeit; erst im Moment der Messung wird der Wert der Observablen (Messgröße) festgelegt. Es ist ähnlich wie beim Memory-Spiel. Solange die Karten verdeckt sind ist alles möglich. Aber sobald aufgedeckt wird, die Messung vorgenommen wurde, steht die Antwort, der Messwert, fest. Die Unschärferelation besagt, dass zwei nicht miteinander kommutierende Observablen nicht gleichzeitig beliebig genau messbar sind. Je genauer beispielsweise der Ort eines Teilchens bestimmt wird, desto ungenauer wird sein Impuls und natürlich umgekehrt. Allerdings gelten all diese Aussagen über den quantenmechanischen Messprozess nur für ein statistisches Ensemble. Wie sieht es theoretisch mit dem Einzelsystem aus?

Was also wissen wir heute, 80 Jahre nach Einführung der Quantenmechanik und den Umwälzungen der Relativitätstheorie, tatsächlich über Atome? Im Wesentlichen sind uns statische Eigenschaften bekannt wie Masse, Ladung oder Größe der beteiligen Teilchen. Diese Eigenschaften sind auch mit der Zeit nicht veränderlich. Ebenso scheint im Atom alleine die Coulombkraft zu herrschen. Ort und Impuls, mit der Zeit veränderliche, also dynamische Größen besitzen kontinuierliche Werte. Über die Werte ihrer Observablen können lediglich Wahrscheinlichkeitsaussagen gemacht werden. Aber: Impuls bzw. Drehimpuls kompensieren sich jederzeit perfekt. Ansonsten müsste das Atom durch den Raum wackeln. Diese koordinierte Bewegung verlangt Wechselwirkungen in Form von Kräften, was wiederum nichts anderes als Austausch von Informationen ist. Molekülbindung, Cooperpaare oder der fraktionierte Quantenhalleffekt sind nur einige wenige weitere Beispiele von koordinierter, des perfekt synchronisierten Elektronentanzes.

Wie wichtig Informationen nicht nur für uns im alltäglichen Leben sind, zeigte Steven Hawking vor mehr als 30 Jahren in folgender Gleichung [SHaw01]:  $S = \frac{Akc^3}{4\hbar G}$ <sup>1</sup>. Bezogen auf die Entropie eines Schwarzen Loches lässt sich allgemein daraus folgern, dass Information nicht vernichtet werden kann. Damit stellt sie, neben den zuvorgenannten dynamischen Größen Impuls und Drehimpuls, eine weitere Erhaltungsgröße dar. Die grundsätzliche Bedeutung von Erhaltungssätzen in der Physik zeigt auch das Noethersche Theorem: Zu

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>S=Entropie, A=Fläche des Ereignishorizonts des Schwarzen Lochs,  $k_B$ =Boltzmann-Konstante, c=Lichtgeschwindigkeit und G=Gravitationskonstante

jeder Erhaltungsgröße existiert eine kontinuierliche Symmetrie und umgekehrt. Beispielsweise folgt aus der Translationsinvarianz die Impulserhaltung.

Abgesehen von der Coulombkraft, in welcher Form zeigt sich Information bzw. Informationsaustausch noch in atomaren Systemen? Welche Effekte sind es, die ein Mehrteilchensystemen von einem Zweiteilchensystem unterscheiden? Ein Beispiel ist das Pauli-Prinzip, welches Ordnung in fermionische Systeme bringt und dadurch die Eigenwerte beeinflusst. Ein Informationsaustausch ohne Kräfte, aber auch ohne Wechselwirkung? Schon die Elektron-Elektron-Abstoßung verlangt, dass sich die Elektronen innerhalb des Atoms nicht vollends unabhängig voneinander bewegen können. Mittlerweile scheint, belegt durch zahlreiche Experimente [NBer93, RMos96b, HSch03a, HSch03b, TWeb04a], festzustehen, dass mehr Ordnung im Atom herrscht, als es Pauli-Prinzip und Elektron-Elektron-Abstoßung erwarten lassen.

Der häufig verwendete Begriff der Korrelation bezeichnet gemäß einer gängigen Definition streng genommen alles, was von einem Einteilchenbild mit passendem Modellpotenzial abweicht. Dazu zählt bereits die durch die Coulombkraft hervorgerufene Elektron-Elektron-Abstoßung, da das Modellpotenzial die Koordinaten weiterer Elektronen nicht mehr enthält. Ein paar kurze Worte zur Begrifflichkeit: Mit Verschränkung ist die direkte Verknüpfung von Zuständen zwei oder mehrerer Teilchen gemeint. Beispiele hierfür sind die Bildung von Cooperpaaren oder das Einstein-Rosen-Podolski-Paradoxon, worauf Einstein die Quantenverschränkung als "spukhafte Fernwirkung" bezeichnete. Sehr häufig, obwohl falsch, werden beide Begriffe gleichbedeutend benutzt.

Nicht nur in der Atom-/Molekülphysik, sondern in vielen weiteren Bereichen wie Festkörper- oder Kernphysik, ist die Erforschung von Verschränkung und Korrelationseffekten, statischen oder dynamischen, aktueller denn je [LChu97, HSim99, BJon04]. In der Kernphysik wird Vielteilchendynamik etwa an so genannten Halo-Kernen studiert. Dies sind besonders neutronenreiche Atomkerne, wie <sup>6</sup>He, <sup>11</sup>Li oder <sup>14</sup>Be [DBoa90, LChu93, FMar01, DCor05, LChu05]. Für das Bild der Verschränkung werden häufig die Borromäischen Ringe herangezogen. Dabei handelt es sich um eine spezielle Anordnung von mindestens drei Ringen. Wird einer der Ringe entfernt, so sind auch alle anderen frei. Die grundlegende Frage hier ist ebenso zentrale Motivation dieser Arbeit: Wie sieht der ungestörte, korrelierte Anfangszustand aus? Wie bewegen sich Elektronen in einem Atom und wie kann dies untersucht werden? Die einfache Lehr-/Schulbuchmeinung über den Helium-Grundzustand besagt, dass beide Elektronen im  $1s^2$ -Zustand vorliegen. Multikonfigurationsrechnungen für den Grundzustand wie beispielsweise die Kinoshita-Wellenfunktion [TKin57] bestehen aus sehr vielen Parametern (siehe Abbildung 1.1). Entwickelt man eine solche numerische Lösung in einer Drehimpulsbasis so zeigt sich, dass der bekannte s<sup>2</sup>-Anteil mit etwa 98 % den Grundzustand dominiert. Die fehlenden 2 % sind die sog. nicht-s<sup>2</sup>-Beiträge, bestehend aus höheren Drehimpulszuständen wie p<sup>2</sup>, d<sup>2</sup>, f<sup>2</sup>... Nach Rechnungen von Kheifets et al. halten sich Elektronen der nicht-s<sup>2</sup>-Zustände wesentlich weiter vom Kern entfernt auf und besitzen zudem höhere Geschwindigkeiten [AKhe05]. Uneinigkeit herrscht in der Forschergemeinde, ob diese Zustände real existent und somit nachweisbar sind oder ein rein mathematisches Konstrukt darstellen, um die korrekte Bindungsenergie zu erhalten.

Sofern diese seltenen Zustände tatsächlich existieren, wie können sie überhaupt gemessen werden? Um die Bewegung der Elektronen im Anfangszustand zu studieren, etwas über Korrelationseffekte, Verschränkung und Vielteilchendynamik in atomaren Systemen zu erfahren, muss das System zunächst gestört werden. Die hierzu eingebrachte Störung kann durch Photoabsorption (Ein- oder Multiphotonenabsorption) oder durch Wechselwirkung mit neutralen oder geladenen Teilchen (Ionen bzw. Elektronen) zustande kommen. Jede der genannten Messsonden hat ihre Vor- und Nachteile, sei es in der bekannten kurzen/langen Wechselwirkungszeit, der exakten Kenntnis von der eingebrachten Energie oder des übertragenen Impulses. Genau hier liegt das eigentliche Problem. Nicht direkt die Bewegung der Elektronen kann vermessen werden, sondern wie das atomare System auf die Störung reagiert hat. Dieser Endzustand wird durch Messung der Impulse aller Fragmente bestimmt. Sollen hieraus Rückschlüsse auf den Grundzustand des Atoms gezogen werden, muss absolute Klarheit über die eingebrachte Störung, über den Ionisationsprozess und die Dynamik jedes freien Teilchens im Endzustand herrschen. Erst wenn klar ist, welche Impulsbeiträge den einzelnen Anteilen der Stoßdynamik zuzuschreiben sind, können Rückschlüsse auf den Anfangszustand gezogen werden.

Die Untersuchung des Anfangszustandes erfolgte am einfachsten atomaren Mehrkörperproblem Helium. Als Messsonden wurden positiv geladene Ionen gewählt. Der Vorteil geladener Projektile besteht darin, dass durch Variation ihrer Geschwindigkeit (in den vorliegenden Experimenten:  $1,26 \le v_P \le$ 5,02 a. u.) die Zeit der Wechselwirkung sehr gut kontrolliert und über einen weiten Bereich variiert werden kann. Zum genauen Studium des Einflusses der Ionen (Potenzialtiefe und -form) auf den Stoßprozess wurden drei verschiedene ausgewählt, nämlich H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>. Bei Ion-Atom-Stößen tritt neben Anregung und Ionisation, wie bei der Wechselwirkung mit Photonen, zusätzlich noch der Elektronentransfer auf. In diesem Falle wird ein Elektron aus einem gebundenen Zustand des Targets in einen gebundenen Zustand des Projektils transferiert.

Der Schwerpunkt der Messungen lag auf einem kombinierten Prozess aus Elektronentransfer und Ionisation, der sog. Transferionisation (TI) - ein Elektron wird in einen gebundenen Zustand des Projektils transferiert und gleichzeitig wird das zweite im Target befindliche Elektron ins Kontinuum emittiert. Da in diesen speziellen Prozess beide Targetelektronen involviert sind, besteht ein hervorragender Zugang zum Studium korrelierter und verschränkter Bewegung. Drei weitere, besonders wichtige Punkte sprechen für die Transferionisation als Mittel der Wahl. Erstens wird durch Variation der Projektilgeschwindigkeit das Elektron aus verschiedenen Teilen der Grundzustandswellenfunktion entfernt (eingefangen). Im Gegensatz zu herkömmlichen Doppelionisationsexperimenten ist zweitens der Zustand des in einen gebundenen Zustand transferierten Elektrons sehr gut bekannt. Außerdem kann drittens das im Ausgangskanal hauptsächlich neutrale Projektil (H<sup>0</sup>, He<sup>0</sup> oder He<sup>+</sup>) überhaupt nicht oder nur geringfügig mit dem Kontinuumselektron in Wechselwirkung treten. Um Rückschlüsse auf den Anfangszustand ziehen zu können ist die exakte Kenntnis der Stoßdynamik unerlässlich, da andernfalls keine korrekte Abbildung möglich ist. Der Stoßprozess, die Vielteilchendynamik, ist aber nicht bloßes Mittel zum Zweck sondern steht ebenso im Blickpunkt der Untersuchungen.

In einem ersten vorbereitenden Schritt wird der Elektroneneinfang als Einzelprozess experimentell untersucht. Dabei wird stets der Vergleich zwischen unterschiedlichen Stoßgeschwindigkeiten und den verschiedenen Projektilen gezogen. Vor allem für Vergleiche mit dem kombinierten Prozess der Transferionisation ist dies von Bedeutung. Im nächsten Schritt wird die Elektronenemission aus der Transferionisation untersucht. Für die Ionisation können sehr viele verschiedene Mechanismen verantwortlich sein. Sie unterscheiden sich in der Anzahl notwendiger Wechselwirkungen, den beteiligten Stoßpartnern, aber auch der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens.

So tritt bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten vor allem die Sattelpunktionisation auf [ROls87a, VIrb88, GBer89, RDuB93, MPie94b, RDoe96b, MAbd97, LSch00]. Die Impulsverteilung des Elektrons spiegelt im Wesentlichen die Eigenschaften des quasimolekularen Zwischenzustandes aus Target und Projektil wider. Mit steigender Projektilgeschwindigkeit treten andere Prozesse in den Vordergrund. Besonders im Hinblick auf die Untersuchung des Anfangszustandes ist der als *Shake-off*-Prozess [TAbe67, TCar67, TAbe70, TAbe76, JMcG82b, ITol98, AKna02a, MSch05] bekannte Ionisationsmechanismus von zentraler Bedeutung. Sobald ein Elektron sehr schnell aus dem Target entfernt wird, befindet sich das verbliebene Elektron nicht mehr im Eigenzustand seines He<sup>+</sup>-Ionenrumpfes; Teile der Wellenfunktion des Elektrons besitzen einen Überlapp mit dem Kontinuum. Oder anders ausgedrückt: Kann sich das Elektron nicht schnell genug an die geänderte Umgebung anpassen, wird es abgeschüttelt.

Die sog. Thomas-Prozesse tragen erst bei hohen Projektilgeschwindigkeiten deutlich zum Wirkungsquerschnitt bei. Bei ihnen stößt das Projektil mit einem Elektron, welches wiederum mit dem Targetkern (Elektron-Kern-) oder einem weiteren Elektron (Elektron-Elektron-Thomas-Mechanismus) wechselwirkt [LTho27, JBri79, EHor83, EHor86, JPal89, VMer96, VMer97, STol00]. Unter ganz speziellen kinematischen Bedingungen wird dann das zuerst gestoßene Elektron auf Projektilgeschwindigkeit beschleunigt und kann von diesem eingefangen werden. Der Elektron-Elektron-Thomas-Mechanismus zeichnet sich dadurch aus, dass zusätzlich das zweite Elektron emittiert wird; es findet automatisch eine Transferionisation statt. Parallel zu den bisher genannten Prozessen kann die Ionisation auch als vom Elektroneneinfang unabhängiger Prozess auftreten. Die Ionisation beruht dann in den meisten Fällen auf einer binären Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron. In der einfachsten so genannten Binary Encounter-Näherung (BE) wird das Elektron als frei angenommen. Erst ab einer Projektilgeschwindigkeit von 0,7 a. u. ist die durch den Billardstoß übertragene Energie ausreichend groß, sodass das Elektron das Coulombpotenzial des Targets überwinden kann.

Das zur Messung der Impulse aller emittierten Teilchen erforderliche "Reaktionsmikroskop" auf Basis der COLTRIMS-Technologie (COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy) wird im nächsten Kapitel (2) erläutert. Vor allem die Besonderheiten dieses Aufbaus gegenüber den "Standard-Reaktionsmikroskopen" und die Schwierigkeiten im Zusammenhang mit den geplanten Experimenten werden hervorgehoben. Anschließend in Kapitel 3 werden die kinematischen Grundlagen von Ion-Atom-Stößen, wie sie für die gewählte Messmethode relevant sind, erklärt. Kapitel 4 befasst sich mit dem physikalischen Hintergrund. Zunächst werden einige ausgewählte Theorien, die Ion-Atom-Stöße beschreiben können, erläutert. Danach wird die Dynamik der einzelnen Transfer- sowie Ionisationsmechanismen anschaulich dargelegt und eingehend diskutiert. In Kapitel 5 wird sich Details der Auswertung und Kalibration gewidmet. Ebenso werden die erreichbare Auflösung und der Einfluss des Untergrundes näher beleuchtet. Trotz des enormen Umfangs dieser Arbeit wird in Kapitel 6 nur ein kleiner ausgewählter Anteil der gesamten Datenmenge vorgestellt und diskutiert. Zusammengefasst und gleichzeitig mit einem Ausblick verbunden werden die Ergebnisse dieser Arbeit in Kapitel 7. Die für alle Stoßsysteme gemessenen Impulsverteilungen, vor allem die vielen zuvor nicht gezeigten Daten, sind im Anhang (Kapitel D) auf 80 Seiten zusammengestellt. "Brauchbar ist eine Maschine erst, wenn sie frei von der Erkenntnis ist, die zu ihrer Erfindung führte."

(Friedrich Dürrenmatt, Die Physiker)

### 2. Aufbau des Experiments

Ziel der Experimente ist die Untersuchung der

 $\label{eq:Transferior} {\rm Transferior} {\rm isations reaktion} \ ({\rm TI}): \ \ {\rm P}^{q+} \ {\rm + He} \rightarrow {\rm P}^{(q-1)+} \ {\rm + He}^{2+} \ {\rm + e}^{-} \qquad q \geq 1$ 

und zwar in kinematisch vollständiger Weise. Neben der eigentlichen Reaktion wurden auch noch zwei weitere ebenfalls vollständig vermessen:

$$\begin{split} & \text{Einfachelektroneneinfang (SC):} \quad \mathbf{P}^{q+} + \text{He} \to \mathbf{P}^{(q-1)+} + \text{He}^+ \qquad q \geq 1 \\ & \text{Doppelelektroneneinfang (DC):} \quad \mathbf{P}^{q+} + \text{He} \to \mathbf{P}^{(q-2)+} + \text{He}^{2+} \qquad q \geq 2 \end{split}$$

Außer diesen Reaktionen, die aufgrund einer Projektilumladung leicht zu identifizieren sind, gibt es weitere Reaktionen, die den Hauptteil der Ereignisse und den späteren Untergrund darstellen, nämlich die Targeteinfachbzw. -doppelionisation.

Die Experimente wurden am Kanal 7 des 2,5 MeV Van-de-Graaff-Beschleunigers im Institut für Kernphysik der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt/Main aufgebaut [MSch02]. Zur Durchführung des Experiments waren zahlreiche Probleme zu überwinden: Das Helium-Target muss intern kalt sein, da die in der Reaktion übertragenen Impulse sehr gering sind. Ebenso muss es lokalisiert sein und über eine hohe Dichte verfügen, da die totalen Wirkungsquerschnitte im Bereich  $10^{-21}$  cm<sup>2</sup> liegen. Der erwähnte Untergrund aus der Targetionisation in diesem Regime ist rund 5 Größenordnungen stärker. Zur eindeutigen Unterscheidung zwischen Elektronen aus der Ionisation und Transferionisation ist eine Messmethode erforderlich, die eine 3-Teilchen-Koinzidenz (P<sup>q-1</sup>+, He<sup>2+</sup> und e<sup>-</sup>) überhaupt erst möglich macht. Eine ausreichend gute Koinzidenzwahrscheinlichkeit mit mehreren Teilchen wiederum erfordert eine hohe (möglichst 4 $\pi$ -) Raumwinkelakzeptanz für alle Teilchen. Traditionelle Methoden wie die Verwendung von Flugzeitspektrometern und dispersiven Elektronenspektrometern, die nur über eine geringe Raumwinkelakzeptanz ( $\approx 10^{-3}$ ) verfügen, besitzen um viele Größenordnungen niedrigere Koinzidenzwahrscheinlichkeiten.

In diesem Kapitel wird das als COLTRIMS (COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy) [HSch89, JUll97, RDoe00a, JUll03] bekannte Messprinzip erläutert und im Detail auf einige Komponenten der Apparatur eingegangen. Neben dem eigentlichen Messprinzip werden auch die Präparation des Targets (Helium) sowie der "Messsonde" - in diesem Fall der Projektilionen - beschrieben. Zu Beginn von COLTRIMS, vor rund 15 Jahren, wurden ausschließlich die Ionenfragmente einer Reaktion gemessen. Dieses "Rückstoßion" (Recoil Ion) kompensiert den Impuls bzw. Rückstoß eines emittierten Elektrons. Somit war es möglich, aus dem Rückstoß des Ions auf den Impuls des Elektrons eindeutig zu schließen [RDoe94, LSpi95, VMer95b, RDoe95a, RDoe96a]. Solange nur ein Elektron und Ion beteiligt sind, waren diese Experimente auch kinematisch vollständig. Kompliziertere Stoßsysteme wie beispielsweise die Fragmentation von Molekülen oder Mehrfachionisation waren allerdings nicht vollständig zugänglich. Im Laufe der Zeit wurde durch den koinzidenten Nachweis von Elektronen und die Verwendung von Detektoren, die mehrere Teilchen nahezu gleichzeitig nachweisen können (multihit-fähige Detektoren), das Tor zu einem neuen Bereich der Physik geöffnet [MWec04, TJah04a, TJah04b, AKna05a, AKna05b, AKna05c]. Treffender ist deshalb heute der Begriff Reaktionsmikroskop [JUll03].

#### 2.1 Messprinzip

Die Projektile H<sup>+</sup>-, He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Ionen werden mit einem 1,5 mm breiten Heliumgasstrahl unter 90° gekreuzt (siehe Abbildung 2.1). Der verwendete Heliumgasstrahl entsteht in einer Überschallexpansion, bei der das Gas unter hohem Druck (mehrere bar) durch eine kleine Düse (einige 10  $\mu$ m Durchmesser) gepresst wird. Bei dieser Expansion kühlt das Gas in Ausbreitungsrichtung intern auf einige Zehntel Kelvin ab. Mittels eines Skimmers (eine Art Hohlkegel) und einer Lochblende wird der Strahl in zwei Stufen geometrisch kollimiert. Anschließend tritt der Gasstrahl in die Hauptkammer, den Ort der Kollision mit den Projektilen, ein (siehe Unterkapitel 2.4). Auf diese Weise liegt ein räumlich wohl lokalisiertes und intern sehr kaltes Target vor, ohne dass das Vakuum der Hauptkammer nennenswert verschlechtert wird.



**Abbildung 2.1:** Skizze des Aufbaus: Der Projektilstrahl (z-Achse) wird durch die Kollimatoren (1) beschnitten und mittels einer elektrostatischen Quadrupoldublett-Linse auf den Projektildetektor fokussiert. Der Beamcleaner, ein Paar elektrostatischer Deflektorplatten, (3) trennt den Projektilstrahl von Umladungen im Strahlrohr. Ein weiteres Deflektorplattenpaar (4), der Analysator, separiert nach der Reaktion umgeladene Projektile im Target vom Primärstrahl. Die y-Achse entspricht der Ausbreitungsrichtung des Gasjets und die x-Achse ist die elektrische und magnetische Feldrichtung innerhalb des Spektrometers.

Der Überlappbereich der Projektilionen mit dem Gasstrahl wird als Reaktionsvolumen oder Targetzone bezeichnet. Dort entstehende Elektronen und Ionen werden mittels eines elektrostatischen Feldes entsprechend ihrer Ladung getrennt und auf jeweils einen orts- und zeitauflösenden Detektor projiziert. Das größtenteils homogene elektrische Feld wird innerhalb des *Spektrometers* erzeugt. Zur Kompensation der Targetausdehnung in allen drei Dimensionen werden darüber hinaus inhomogene Feldbereiche sowie feldfreie Driftstrecken  $x_d$  eingesetzt (siehe Unterkapitel 2.5).

Da Elektronen im Vergleich zu den ionisierten Fragmenten deutlich leichter sind und somit bei gleichem Impuls eine wesentlich höhere Geschwindigkeit aufweisen, können sie leicht aus dem Spektrometer entweichen und wären somit für die Messung verloren. Man könnte das elektrische Feld derart erhöhen, dass alle Elektronen nachgewiesen werden können. Allerdings hätte dies eine unzureichende Auflösung der Rückstoßionen zur Folge und wäre wenig sinnvoll. Stattdessen wird dem gesamten Experiment ein homogenes magnetisches Führungsfeld überlagert, welches die Elektronen gemäß der Lorentz-Kraft auf Kreisbahnen zwingt [RMos96a]. Eine Impulskomponente (x) ist mit der Flugzeitverteilung verknüpft. Hier kommt die "Time-Of-Flight" (TOF)-Technik zum Einsatz. Die Fragmente werden im elektrischen Feld entsprechend ihrem Masse/Ladung-Verhältnis separiert, sodass gleichzeitig verschiedenste Ladungszustände und Ionen untersucht werden können. Die zwei verbleibenden Impulskomponenten erhält man aus der Auslenkung der Fragmente gegenüber der Spektrometerachse (y/z) (siehe Unterkapitel 2.5).

Die umgeladenen Projektile, auch Ejektile<sup>1</sup> genannt, werden nach dem Verlassen des Spektrometers von dem Primärstrahl mittels eines elektrostatischen Deflektorplattenpaares getrennt und auf einem dritten orts- und zeitsensitiven Detektor nachgewiesen. Da bei dieser Technik alle entstehenden Fragmente mit nahezu vollem Raumwinkel ( $4\pi$ ) nachgewiesen werden können, wird eine Mehr-Teilchen-Koinzidenz als Trigger für ein echtes Ereignis angewandt (siehe Unterkapitel 2.8).

Das Laborsystem - in Abbildung 2.1 skizziert - ist wie folgt definiert: Es handelt sich um ein rechtshändiges kartesisches Koordinatensystem, welches durch die Spektrometerachse (x) - in Richtung des Rückstoßionendetektors -, der Ausbreitungsrichtung des Gasjets (y) und der Projektilstrahlrichtung (z) aufgespannt wird. Neben diesem Laborsystem wird später zur Diskussion der Physik noch der Übergang zu stoßinternen Koordinatensystemen vollzogen (siehe Unterkapitel 5.6).

### 2.2 Strahlpräparation

Eine Hochfrequenzionenquelle innerhalb des Van-de-Graaff-Beschleunigers erzeugt einfach positiv geladene Ionen, welche anschließend aus dieser extrahiert werden. Die Quelle kann normalerweise auf ein Potenzial von +250 kV bis +2,5 MV gelegt werden; mit einigen Umbaumaßnahmen waren auch +100 kV möglich. Nach der Extraktion und Beschleunigung auf die gewünschte Energie fliegen die Ionen etwa 1 m, bevor sie von einem Analysiermagneten entsprechend ihrem Masse-/Ladungs-Verhältnis (m/q) separiert und in den Kanal 7 (30° Ablenkung) gelenkt werden.

Da in der Ionenquelle praktisch keine doppelt geladenen Ionen (He<sup>2+</sup>) erzeugt werden können, wird zwischen Beschleuniger und Umlenkmagnet ein Gasstripper eingesetzt. In einer kleinen Kammer wird das Vakuum von normalerweise  $10^{-7}$  mbar auf  $10^{-4}$  mbar verschlechtert. Ein Teil der einfach geladenen He<sup>+</sup>-Ionen verliert durch Stöße mit dem Restgas ihr verbleibendes

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Ejektile aus dem Englischen von eject: ausstoßen



**Abbildung 2.2:** Strahlführung am 2,5 MV Van-de-Graaff-Beschleuniger. Die beschleunigten Ionen durchfliegen zunächst einen Gasstripper und werden anschließend im Magneten analysiert und in den  $30^{\circ}$ -Kanal abgelenkt. (Weitere Details siehe Bildunterschrift von Abbildung 2.1.)

zweites Elektron. Bei diesem Prozess muss allerdings ein erheblicher Verlust an Strahlintensität (1:100 bis 1:1000) und -qualität in Kauf genommen werden. Durch den deutlich größeren Wirkungsquerschnitt der Reaktion wird dies teilweise wieder ausgeglichen. Die mit 30° sehr geringe Ablenkung macht in einigen Fällen eine gute Separation schwierig. Gestrippte <sup>4</sup>He<sup>2+</sup> Ionen und Protonen aus der Quelle werden im Analysiermagneten gleichermaßen abgelenkt. Zur besseren Unterscheidung fand aus diesem Grunde <sup>3</sup>He<sup>+</sup> Verwendung, da dies ein unverkennbares m/q-Verhältnis aufweist und aufgrund der geringeren Masse eine bessere Streuwinkelauflösung besitzt.

Im Anschluss an den Umlenkmagneten befindet sich die erste Gruppe Kollimatoren, gefolgt von 3 m freier Strecke und einer zweiten Kollimatorengruppe. Die Öffnungen der Kollimatoren wurden so eingestellt, dass die maximale Ereignisrate auf dem Elektronendetektor 150 kHz (dieser wies i. A. die höchste Rate auf) bzw. die Datenaufnahmerate des PCs 350 Hz nicht überstieg. Je nach Energie und Projektil betrug der Strom des Primärstrahls zwischen 10 pA und 10 nA. Während die ersten beiden Kollimatoranordnungen zur Definition der Strahlachse eingesetzt wurden, wurde ein drittes Quartett dazu verwendet, Sekundärelektronen und schlitzgestreute Projektile am Eintritt in die Targetkammer zu hindern (siehe Abbildung 2.2).

Aufgrund der niedrigen Impulsüberträge auf das Projektil, die sich in zwei Raumrichtungen in Form des Streuwinkels darstellen, ist eine starke Kollimation des Strahls erforderlich. Hierfür hinreichend geschlossene Blenden führen jedoch zu einem dramatischen Verlust an Strahlintensität (ungefähr Faktor 10). Eine größere Lumineszenz bei gleicher Streuwinkelauflösung konnte durch den Einsatz eines elektrostatischen Quadrupoldubletts (siehe hierzu [JTit04]) erreicht werden. Durch dessen Einsatz war es möglich, die erste Kollimatorengruppe direkt auf dem Projektildetektor abzubilden und gleichzeitig das zweite und dritte Kollimatorenquartett erheblich weiter zu öffnen. Bei gleicher Kollimatorenöffnung wird die Streuwinkelauflösung etwa um einen Faktor 2,5 verbessert [JTit04].



**Abbildung 2.3:** Darstellung der Strahldivergenz der Projektilionen. Rot skizziert ist der nicht abgelenkte Projektilstrahl und grau dargestellt sind Ereignisse, die eine Ablenkung gegenüber der Nulllage erfahren haben. a) Bei der ausschließlichen Verwendung von Blenden ist die erreichbare Projektilstreuwinkelauflösung sehr begrenzt. b) Das eingesetzte Quadrupoldublett-Linsensystem fokussiert den Projektilstrahl auf den Detektor und verbessert bei gleicher Strahlluminosität die Auflösung um den Faktor 3.

Unmittelbar vor dem Spektrometer befindet sich der Beamcleaner, ein elektrostatisches Deflektorplattenpaar, welches die Projektile in vertikaler Richtung ablenkt und die bereits im Strahlrohr umgeladenen neutralen Projektile vom eigentlichen Strahl trennt - diese Strahlverunreinungen landen später unterhalb des Detektors. Ein weiteres elektrostatisches Deflektorplattenpaar hinter dem Spektrometer analysiert erneut den Ladungszustand der Ejektile und lenkt in horizontaler Richtung ab, sodass die neutralen Ejektile geradewegs auf dem Detektor landen, während der Primärstrahl in einem 0,5 m langen Rohr - dem Beamdump - aufgefangen und sein Strom gemessen wird (siehe Unterkapitel 2.6). Der Zustand der "nackten" Ionen, wie H<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>, ist eindeutig definiert, da keine Elektronen vorhanden sind, die angeregt sein könnten. He<sup>+</sup>-Ionen, die in der Quelle angeregt wurden, sind nach einer Flugstrecke von mehr als 5 m, respektive 0,5  $\mu$ s Flugzeit (für eine Beschleunigungsspannung  $U_B$  von 630 keV/u), bereits in den Grundzustand übergegangen.

#### 2.3 Das Vakuumsystem

Das gesamte Experiment samt Spektrometer, Detektoren und Strahlführung befindet sich im Hoch- bzw. Ultrahochvakuum (UHV). Zum einen würden die Projektilionen in schlechtem Vakuum, noch bevor sie das eigentliche Target erreichen, Elektronen einfangen oder verlieren, sodass ein nicht klar definierter Ladungszustand die Folge wäre. Zum anderen muss auch innerhalb des Versuchsaufbaus das Vakuum ausreichend gut sein. Die freie Weglänge der erzeugten Elektronen und Rückstoßionen muss genügend groß sein, damit sie die Detektoren erreichen und auf ihnen ein Signal auslösen. Des Weiteren ist die Erzeugung des Überschallgasjets nur ab Drücken von  $10^{-2}$  mbar möglich. Darüber hinaus können die verwendeten Detektoren erst ab einem Druck unter  $10^{-5}$  mbar betrieben werden. Abgesehen von rein technischen Gründen ist die Frage eines guten Vakuums verbunden mit dem Verhältnis von Targetdichte zu Restgasdruck. Je niedriger der Restgasdruck in der Kammer ist, desto wahrscheinlicher ist es, dass die Projektile mit Atomen aus dem eigentlichen Target wechselwirken und nicht schon früher.

Insgesamt besteht das Vakuumsystem aus sechs einzelnen - meist nur durch kleine Blenden - miteinander verbundenen Kammern, die differenziell gepumpt werden:

- Strahlrohr vor der Kammer,
- Hauptkammer (Spektrometer und Detektoren),
- Expansionskammer (Gasstrahl wird erzeugt),
- 2. Jetstufe (Gasstrahl wird weiter kollimiert),
- Jetdump (Gasstrahl wird abgepumpt) und
- Strahlrohr nach der Kammer inklusive Beamdump und Ejektildetektor.

Die Hauptkammer selbst misst 60 cm im Durchmesser und besteht aus Edelstahl. Ihre Oberfläche wurde durch Elektropolieren besonders veredelt. In Flugrichtung der Projektile befinden sich zwei Flansche der Größe CF 100 (ConFlat<sup>®</sup>), in Spektrometerrichtung CF 150, im Kammerboden für den Aufbau des Gastargets ein CF 200-Flansch, sowie weitere CF 100-Flansche an den Seiten und dem Deckel zum Anschluss weiterer Pumpen, Vakuummesszellen etc., welche abgesehen von wenigen Ausnahmen mit Kupferdichtungen gedichtet wurden. Der Deckel wird auf einen 10 mm dicken Viton-O-Ring gesetzt und dichtet durch sein Eigengewicht sowie den Atmosphärendruck. Seitlich an der Experimentierkammer - in Richtung der beiden Spektrometerarme - gehen CF 200-Rohre ab, in denen sich die Driftröhren und Detektoren des Spektrometers befinden. Die Haupt-/Targetkammer wird mit zwei Turbomolekularpumpen evakuiert, die eine Gesamtsaugleistung von 440 l/s aufweisen. Eine Woche nach dem letzten Belüften und ohne Ausheizen der Kammer stellte sich ein Restgasdruck von etwa  $2 \times 10^{-8}$  mbar ein. Durch Einsatz einer mit flüssiger Luft gefüllten Kühlfalle konnte der Druck auf  $8 \times 10^{-9}$  mbar gesenkt werden.

Das Strahlrohr vor der Kammer wurde ebenfalls mit Turbomolekularpumpen evakuiert. Der Restgasdruck hier betrug  $1 \times 10^{-7}$  mbar. Hinter der Kammer, im dem Bereich der Ejektile, kam zusätzlich zu einer Turbomolekularpumpe noch eine Kryopumpe zum Einsatz, welche das Vakuum auf knapp  $3 \times 10^{-8}$  mbar reduzierte. Blenden mit einem Öffnungsdurchmesser von 10 mm vor bzw. hinter der Kammer begrenzen das in die Hauptkammer einströmende Restgas aus dem Strahlrohr. Sämtliche Turbomolekularpumpen werden mit Drehschieberpumpen auf  $10^{-3}$  mbar vorevakuiert.

Die erste Stufe, die eigentliche Expansions- oder auch Quellkammer, wird von einer Turbomolekularpumpe mit einer Saugleistung von 500 l/s evakuiert, welche wiederum von einer Drehschieberpumpe mit 220 m<sup>3</sup>/h vorgepumpt wird. Die zweite Stufe, durch den Skimmer (Öffnungsdurchmesser 0,3 mm) mit der ersten Stufe verbunden, wird ebenfalls mit einer Turbomolekularpumpe evakuiert. Hauptkammer und 2. Jetstufe sind nur durch eine Blende mit 0,5 mm Durchmesser miteinander verbunden. Nach Durchquerung der Hauptkammer wird der Gasstrahl im Jetdump wieder differenziell abgepumpt. Dieser ist mit der Hauptkammer durch ein 25 mm langes Röhrchen (Durchmesser 12 mm) verbunden. Weitere Details zu den Vakua bei eingeschaltetem Jet sind im nächsten Unterkapitel 2.4 beschrieben.

#### 2.4 Gastarget

Die für das Experiment erwarteten Impulsüberträge betragen nur wenige atomare Einheiten Impuls. Außerdem muss das Target in Projektilstrahlrichtung wohl lokalisiert sein, um den Ort der Reaktion eingrenzen zu können<sup>2</sup>, was später für die Berechnung der Impulse von essenzieller Bedeutung ist. Bei Raumtemperatur (300 K) beträgt die mittlere thermische Energie  $E_T$  freier Gasatome

$$E_T = \frac{3}{2}kT \tag{2.1}$$

38 meV beziehungsweise für Helium 4,5 a. u. Impuls, mit k der Boltzmann-Konstante und T der Gastemperatur. Die erwarteten Rückstoßionenimpulse müssten bei dieser Temperatur sehr viel größer sein (min. den Faktor 2), um überhaupt Aussagen über die Reaktion treffen zu können. Da der Impulsaustausch ein Fingerabdruck der Reaktion ist und sich nicht vergrößern lässt, muss die interne Temperatur des Targets deutlich abgesenkt werden. Ein Überschallgasjet (supersonic gas jet) stellt eine gute Realisierung der zuvor genannten Anforderungen (intern kalt und lokalisiert) dar.

Dargestellt ist in Abbildung 2.4 eine Skizze des verwendeten 2-stufigen Jetsystems. Unter hohem Druck (mehrere bar) gelangt das Gas durch eine etwa 30  $\mu$ m große Düse in die Expansionskammer<sup>3</sup>. Damit sich keine Verunreinigungen in der winzigen Düse festsetzen und sie nach und nach verstopft, wurde die Gaszuleitung - direkt unterhalb der Düse - mit engmaschigem Edelstahlgitter gefüllt, das als einfacher Filter dient. Ist der Vordruck an der Düse  $p_D$  sehr viel größer als der Gleichgewichtsdruck innerhalb der Expansionskammer  $p_E$ , expandiert das Gas adiabatisch, also bei konstanter Wärmemenge. Der Druck in der Expansionskammer liegt bei der gegebenen Pumpleistung im Bereich von  $10^{-3}$  mbar, abhängig vom gewählten Vordruck. Durch den niedrigen Druck in der Expansionskammer muss keine Arbeit geleistet werden und nahezu die gesamte freie Enthalpie wird bei diesem Expansionsprozess in eine gerichtete Bewegung umgewandelt [AKan51]. Dadurch wird das Gas in Ausbreitungsrichtung (y) sehr effektiv gekühlt.

Die Restgasatome/-moleküle in der 1. Jetstufe wechselwirken mit dem aus der Düse expandierenden Gas. Dies begrenzt den Bereich der ungestörten Expansion, und es bildet sich ein gut lokalisierter Bereich mit besonderen physikalischen Eigenschaften (siehe Abbildung 2.5). Innerhalb der "zone of silence" - einer Zone umgeben von Kompressions- und Schockwellen - bewegen sich die Gasatome stoßfrei. Ihre Form kann in erster Näherung durch eine  $\cos^4$ -Verteilung beschrieben werden.

 $<sup>^2</sup>$  In x- und y-Richtung wird der Ort durch die Ausdehnung des Projektilstrahls begrenzt.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die Expansionskammer wird auch als Quellkammer oder 1. Jetstufe bezeichnet.



**Abbildung 2.4:** Skizze des aufgebauten Jetsystems mit den verschiedenen differenziellen Pumpstufen, Expansionskammer 1, Expansionskammer 2, Targetkammer und Jetdump. Die angegebenen Drücke entsprechen den abgelesenen Messzellenwerten und müssen für Helium mit einem Faktor von 5,9 multipliziert werden.

Den Bereich, in welchem sich die Gasatome stoßfrei und deutlich schneller als mit Überschallgeschwindigkeit bewegen, nennt man *zone of silence*. Ihre Größe  $l_z$ , d. h. der Abstand von der Düse zur Machschen Scheibe berechnet sich nach [HAsh66]:

$$l_z = \frac{2}{3} d_D \sqrt{\frac{p_D}{p_E}} \quad . \tag{2.2}$$

Dabei ist  $d_D$  der Düsendurchmesser und  $p_D/p_E$  der Druck vor der Düse bzw. der Gleichgewichtsdruck in der 1. Expansionskammer. Gleichung 2.2 zeigt deutlich, dass mit steigendem Umgebungsdruck in der Expansionskammer die "zone of silence" schrumpft, was mit häufigeren Stößen zwischen dem expandierenden Gas und dem warmen Restgas zu erklären ist. Die Geschwin-



**Abbildung 2.5:** a) Schematische Darstellung der Überschallexpansion in Form einer cos<sup>4</sup>-Verteilung [DMil88a]. b) Fotographie eines Überschallgasjets [MSch02].

digkeit  $v_{Jet}$ , auf die die Gasatome durch den Expansionsprozess in Ausbreitungsrichtung beschleunigt werden, berechnet sich nach [DMil88a, MWut88]:

$$v_{Jet} = \sqrt{\frac{5kT_D}{m}} \quad . \tag{2.3}$$

Bei einer Düsentemperatur  $T_D$ =300 K (Raumtemperatur) ergibt sich für Helium (m=4 amu) eine Geschwindigkeit von 1759 m/s, was einem Impuls von  $p_{Jet}$ =5,9 a. u. entspricht. Das Speedratio S beschreibt das Verhältnis aus der mittleren Endgeschwindigkeit  $v_{Jet}$  und der Breite der Geschwindigkeitsverteilung. Ausgehend von einer Boltzmann-Verteilung der Geschwindigkeit der Atome berechnet sich die Temperatur des Jets [JToe77] mit:

$$\frac{T_D}{T_{Jet}} = \frac{2}{5}S^2$$
 (2.4)

$$S = \frac{v_{Jet}}{\sqrt{\frac{2kT_{Jet}}{m}}} \quad . \tag{2.5}$$

Da weder die Temperatur des Jets noch das Speedratio bekannt sind und eine exakte thermodynamische Berechnung äußerst komplex ist, wird auf Messwerte zurückgegriffen (Abbildung 2.6). Die genauen thermodynamischen Erklärungen zur Theorie der Überschallexpansion und des freien Jets sind in [GSco88, OJag94, TWeb03] zu finden.

Die experimentellen Parameter, 25 bar Düsenvordruck und eine 30  $\mu$ m große Düse, ergeben nach Abbildung 2.6 ein Speedratio von S=85. Dies entspricht nach Gleichung 2.4 einer Jettemperatur (in Ausbreitungsrichtung) von  $T_{Jet}$ =200 mK. In die "zone of silence" taucht eine Art kleiner Hohlzylin-



**Abbildung 2.6:** Experimentell ermittelte Speedratiokurve für einen Helium-Überschallgasjet in Abhängigkeit vom Produkt aus Vordruck  $p_D$  und Düsendurchmesser  $d_D$ für verschiedene Düsen- bzw. Gastemperaturen  $T_D$  [GBru89]. Das Sternchen skizziert das für die Experimente vorliegende Produkt  $p_D \cdot d_D$ .

der ein. Die Spitze dieses Skimmers verfügt über eine sehr dünne (wenige  $\mu$ m) Kante, um Verwirbelungen, die die Expansion negativ beeinflussen würden, zu minimieren. Auf diese Weise wird ein in zwei Raumrichtungen wohl lokalisierter Atomstrahl herausgeschält, der sich entsprechend seiner Divergenz (Verhältnis der Durchmesser von Skimmer  $d_S$  und Düse  $d_D$  sowie des Abstandes Düse-Skimmer l) weiter aufweitet. Die dementsprechend gegebene Divergenz ist es, die die Temperatur in transversaler Richtung bestimmt. Oder anders ausgedrückt: Atome mit zu hohem Impuls in senkrechter Richtung kommen nicht durch den Skimmer.

Zur Vermeidung einer Rückströmung warmem Restgases durch den Skimmer in die Targetkammer befindet sich etwa 20 mm oberhalb der 1. Expansionskammer eine zweite Vakuumkammer. Die zweite Stufe, in welcher der Druck verglichen mit der ersten Stufe, normalerweise etwa um den Faktor 100 geringer ist, ist nur durch eine kleine Blende (Ø=0,5 mm) mit der Targetkammer verbunden. An der Blende wird der Strahl in transversaler Richtung weiter beschnitten - und somit auch gekühlt. Vor allem aber wird der Druckanstieg in der Targetkammer minimiert. Das dreidimensionale Impulsprofil  $\Delta \vec{p}_{Jet}$  des Gasjets beträgt nach [VMer94]:

$$\Delta \vec{p}_{Jet} = \sqrt{5mkT_D} \begin{pmatrix} (d_D + d_S) / l \\ (2\sqrt{ln(2)}) / S \\ (d_D + d_S) / l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,078 \text{ a. u.} \\ 0,114 \text{ a. u.} \\ 0,078 \text{ a. u.} \end{pmatrix} (FWHM) \quad (2.6)$$

Daraus lässt sich eine über alle drei Raumrichtungen gemittelte Temperatur von 0,35 K berechnen. Auf Höhe des Projektilstrahls besitzt der Jet einen Durchmesser von 1,5 mm. Nur ein verschwindend geringer Anteil (in etwa jedes millionste Targetatom) des Gasjets wechselwirkt überhaupt mit den Projektilionen. Um größeren Gasanfall diffusen warmen Restgases in der Hauptkammer zu vermeiden, wird der Gasstrahl in einer differenziellen Pumpstufe, dem Jetdump abgepumpt. Zur Verringerung des Leitwertes ist dieser nur durch ein langes dünnes Röhrchen mit der Hauptkammer verbunden, so dass der schmale Gasstrahl zwar ungehindert in den Jetdump gelangen kann, jedoch nur wenig warmes Gas von dort in die Hauptkammer zurückströmt. Weitere Details zu den verschiedenen Kammern sind ebenfalls in Unterkapitel 2.3 zu finden. Auf der Rotorachse besitzen die Turbomolekularpumpen keine Saugleistung. Deshalb wurde die Pumpe des Jetdumps etwas von der Strahlmitte versetzt, sodass der Atomgasstrahl direkt auf die Rotorblätter trifft (siehe [TWeb97]) und effizienter abgepumpt werden kann.



**Abbildung 2.7:** Für Helium korrigierte Druckanstiege in den einzelnen Teilkammern als Funktion des Vordruckes  $p_D$ .  $\blacksquare$  Expansionsstufe 1,  $\bullet$  Expansionsstufe 2,  $\blacktriangle$  Targetkammer und  $\checkmark$  Jetdump.

In Abbildung 2.7 ist eine Druckkurve dargestellt, anhand derer man die Anstiege in den verschiedenen Teilkammern in Abhängigkeit vom Düsenvordruck ablesen kann. Mit steigendem Vordruck geht der Anstieg im Jetdump langsam in Sättigung über. Ursache hierfür ist die Verkleinerung der "zone of silence" im Verhältnis zum Abstand zwischen Düse und Skimmer. Aus den ermittelten Druckanstiegen ergibt sich für 25 bar Vordruck eine Targetflächendichte von  $4 \cdot 10^{11}$  Atomen/cm<sup>2</sup>. Dies entspricht einem lokalen Druck in der Targetzone von etwa  $1 \cdot 10^{-4}$  mbar. Bei diesem Druck beträgt die mittlere freie Weglänge innerhalb des Targets rund 60 cm. Insgesamt kann daher von Einzelstoßbedingungen während der Kollision mit den Projektilen ausgegangen werden.

Setzt man den lokalen Druck im Target und den Restgasdruck in der Targetkammer bzw. die Gasflächendichten in Relation zur Targetgröße (1,5 mm) und zum Durchmesser des Spektrometers (130 mm), so beträgt das Verhältnis Jet/Untergrund etwa 10:1. Etwa jede zehnte Reaktion stammt also nicht aus einer Wechselwirkung mit dem Target, sondern fand mit dem Restgas statt.

#### 2.5 Spektrometer

Das Spektrometer [JUll88, JUll89, RDoe89, JUll91, RDoe95b, RDoe00a] erzeugt ein elektrisches Feld und projiziert die Elektronen sowie das ionisierte Target auf die Detektoren. Anhand des Auftreffortes auf dem Detektor und der Flugzeit können die Impulskomponenten zum Zeitpunkt der Reaktion eindeutig rekonstruiert werden. Eine Kombination von homogenem und inhomogenem elektrischem Feld in Verbindung mit einem feldfreien Bereich sorgen dafür, dass die Ausdehnung des Reaktionsvolumens keinen negativen Einfluss auf die erreichbare Auflösung hat. Im Gegensatz zu dispersiven Elektronenspektrometern oder Flugzeitspektrometern können durch das Projizieren der Impulse auf Detektoren die vollen  $4\pi$  Raumwinkel nachgewiesen werden. In diesem Abschnitt werden die Trajektorien von geladenen Teilchen unter dem Einfluss elektrischer und magnetischer Felder näher beschrieben.

#### 2.5.1 Der Rückstoßionenzweig

In elektrischen Feldern wirkt auf geladene Teilchen die Coulombkraft. Für die Beschleunigung  $\vec{a}$  gilt dann:

$$\vec{a} = \frac{\vec{E}q}{m} \tag{2.7}$$

mit der elektrischen Feldstärke  $\vec{E}$ , der Ladung q und der Masse m. Die geladenen Teilchen werden im elektrischen Feld gleichförmig gleichmäßig beschleunigt. In der verwendeten Geometrie (siehe Abbildung 2.8) steht das Feld parallel zur Spektrometerachse (x), weswegen der Einfachheit halber anstatt  $\vec{a}$ nur noch a geschrieben wird. Es gilt:

$$x_a = \frac{1}{2} a t_a^2 + v_x^i t_a$$
 (2.8)

mit der Länge der Beschleunigungsstrecke  $x_a$ , der Zeit der Beschleunigung  $t_a$ und der Anfangsgeschwindigkeit in x-Richtung  $v_x^i$  (i = initial; engl: Anfang).



Abbildung 2.8: Schematische Darstellung eines Impulsspektrometers in zeitfokussierender Geometrie mit einer Beispieltrajektorie.

Für eine flugzeitfokussierende Geometrie [WWil55] schließt sich an die Beschleunigungsstrecke eine feldfreie Driftstrecke an. Flugzeitfokussierung bedeutet, dass der Einfluss der Targetausdehnung auf die erreichbare Auflösung in Flugzeitrichtung (hier x) minimiert wird. Teilchen, die innerhalb des Targets in größerer Entfernung vom Detektor starten, nehmen bis zum Erreichen der Driftstrecke etwas mehr Energie im Feld auf, sind also schneller als solche, die näher am Detektor starten<sup>4</sup>. Die etwas schnelleren Teilchen holen die langsameren nach und nach ein, bis sie sie erreichen bzw. später sogar überholen.

Insgesamt erhält man für die Gesamtflugzeit  $t_{ges}$ :

$$t_{ges} = -\frac{v_x^i}{a} + \sqrt{\frac{v_x^{i^2} + 2x_a a}{a^2}} + \frac{x_d}{\sqrt{v_x^{i^2} + 2x_a a}} = -\frac{v_x^i}{a} + \sqrt{\frac{x_d}{a}} \cdot \left(g + g^{-1}\right)$$
(2.9)

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Beim Driftvorgang handelt es sich um eine kräftefreie Bewegung der Teilchen.

mit der Substitution:

$$g = \sqrt{\frac{v_x^{i^2} + 2x_a a}{a x_d}} \quad . \tag{2.10}$$

Die Zeitfokusebene liegt dort, wo in erster Näherung die Flugzeit unabhängig von der exakten Beschleunigungsstrecke ist. Unter der Annahme:

$$v_x^{i^2} \ll 2x_a a \quad bzw. \quad E^i \ll \vec{E}qx_a , \qquad (2.11)$$

also dass die im elektrischen Feld aufgenommene Energie groß gegenüber der Anfangsenergie ist, lässt sich zeigen [MSch02, LSch00, WWil55], dass für die Driftstrecke gilt:

$$x_d = 2x_a \quad . \tag{2.12}$$

Dieser Zusammenhang wird als "Wiley McLaren Bedingung" bezeichnet. Ausgehend von diesem Resultat und der Näherung kleiner Geschwindigkeiten bzw. Energien (Gleichung 2.11), die hier zumindest für die Rückstoßionen gegeben ist ( $E^i:\vec{E}=1:1000$ ), gilt für die Gesamtflugzeit:

$$t_{ges} = -\frac{p_x^i}{q\vec{E}} + 2\sqrt{\frac{dm}{q\vec{E}}} \quad . \tag{2.13}$$

Sind die Näherungen 2.11 nicht erfüllt, z. B. aufgrund sehr hoher Ionenenergien, wie sie in Experimenten mit Coulombexplosionen von Molekülen [TJah02, TWeb04a, TWeb04b] oder sehr schnellen Elektronen [MHat04, AKna02a, AKna02b] auftreten, muss die kubische Gleichung 2.9 selbst gelöst werden (siehe [LFou03, MSmo04, TJah05]).

Senkrecht zur Flugzeitrichtung wirken keine Kräfte. Die Auslenkung gegenüber der Nulllage hängt ausschließlich von der Gesamtflugzeit und der Anfangsgeschwindigkeit ab. Zusammenfassend gilt für alle drei Raumrichtungen:

$$p_{x,rec}^{i} = 2\sqrt{\vec{E}qx_{d}m} - \vec{E}qt_{ges}$$
(2.14)

$$p_{y,rec}^{i} = \frac{m \cdot y}{t_{ges}} \tag{2.15}$$
$$p_{z,rec}^{i} = \frac{m \cdot z}{t_{ges}} \quad . \tag{2.16}$$

Aufgrund der Rotationssymmetrie des Experiments um die Strahlachse ist die Flugzeitverteilung ebenfalls spiegelsymmetrisch um die Flugzeit zum Impuls  $p_x^i$ =0. Gleichung 2.14 kann mit dieser Voraussetzung umgeformt werden in:

$$\Delta p_x \ [\mathbf{a}, \mathbf{u}.] = \frac{E \cdot q \cdot \Delta t}{124, 38} \ \left[ \frac{\mathbf{V}}{\mathbf{cm}} \cdot \mathbf{a}, \mathbf{u}. \cdot \mathbf{ns} \right] \quad . \tag{2.17}$$

Bisher war nur von der Kompensation der Targetausdehnung in Flugzeitrichtung die Rede. Aber auch in den beiden hierzu senkrechten Richtungen (y und z) ist das Target ausgedehnt und reduziert dadurch die erreichbare Auflösung. Die Lösung dieses Problems ist einfach wie wirkungsvoll. Eine elektrostatische Beschleunigungslinse - realisiert durch einen Feldsprung zwischen zwei Feldplatten - sorgt dafür, dass alle Rückstoßionen, welche im ausgedehnten Targetvolumen entstehen und den gleichen Anfangsimpuls besitzen, auch auf den gleichen Ort auf dem Detektor abgebildet werden [MAch99]. Somit kann die zur Verfügung stehende Ortsauflösung des Detektors (250  $\mu$ m) voll ausgenutzt werden; eine Verbesserung um den Faktor 6 (bei einem 1,5 mm großen Target).

Die durch die Linse verursachte zusätzliche Beschleunigung der Ionen erhöht deren Geschwindigkeit in der Driftstrecke und sorgt dafür, dass Gleichung 2.12 nicht mehr gültig ist. Gegenüber vorher muss die Driftstrecke entsprechend angepasst, genauer gesagt, verlängert werden. Nach [VMer96] gilt bei gegebener Linsenspannung  $U_L$  für die Länge der Driftstrecke  $x_d$  nun folgender Zusammenhang:

$$x_{d} = 2\left(x_{a_{1}} + x_{a_{2}} + x_{a_{L}}\right) \cdot \left(1 + \sqrt{\frac{x_{a_{1}} + x_{a_{2}} + x_{a_{L}}}{x_{a_{1}}}} - \sqrt{\frac{2x_{a_{1}} + x_{a_{L}}}{x_{a_{1}} + x_{a_{L}}}}\right)$$
(2.18)

mit

$$x_{a_L} = \frac{U_L}{\vec{E}} \tag{2.19}$$

wobei  $x_{a_1}$  und  $x_{a_2}$  die Längen der Absaugstrecke vor (1) und nach (2) der Linse sind, und *E* die elektrische Feldstärke in  $x_{a_1}$ . Abbildung 2.9 zeigt das Ergebnis einer Simulation, die mit dem Programm SIMION3D 7.0 gemacht wurde [Simi00]. Die Positionierung  $(x_{a_1} / x_{a_2})$  der Recoillinse stellt einen Kompromiss dar. Sie darf nicht zu dicht am Targetort sein, da das Feld hier homogen sein muss. Eine eineindeutige Rekonstruktion der Anfangsimpulse ist zwar für die Rückstoßionen auch im inhomogenen Feld möglich. Die Trajektorien von Elektronen, die sich in einem magnetischen Führungsfeld bewegen und gleichzeitig inhomogene elektrische Feldbereiche passieren, führen jedoch zu Uneindeutigkeiten bei der Rekonstruktion der Anfangsimpulse. Aus diesem Grunde muss die Linse mindestens so weit vom Target entfernt sein, dass auf den Rückstoßionendetektor zufliegende Elektronen im elektrischen Feld bereits die Richtung gedreht haben. Die Linse noch weiter weg zu setzen ist ebenfalls problematisch, da die Trajektorien schon viel zu stark aufgeweitet wären und die Rückstoßionen sie im äußeren nichtlinearen Bereich passierten, was die Wirksamkeit der Linse beeinträchtigt und darüber hinaus zu Verzerrungen der Abbildungseigenschaften führt.



**Abbildung 2.9:** Simulationsergebnisse des realisierten Spektrometers für <sup>4</sup>He<sup>+</sup>-Ionen mit Impulsen von -4, 0, 4 a. u. in Flugzeit- und Ortsrichtung. Als Startort wurde die exakte Position  $\Box$  sowie ein um +2 mm + bzw. -2 mm × verschobener Startort in beide Richtungen (x und y) gewählt. Die elektrische Feldstärke beträgt 5 V/cm und die magnetische 20 Gauss.

Durch den Einsatz der Linse gelten die Zusammenhänge 2.15 und 2.16 natürlich nicht mehr. Die Kalibrierung der Impulse (Zuordnungsvorschrift:  $p_{yz} = f(yz)$ ) erfolgt im Experiment anhand gemessener Größen und wird näher in Unterkapitel 5.1.1 erläutert. Die erzielte Auflösung wird in Kapitel 5.4 näher diskutiert und der realisierte Aufbau des Spektrometers ist in Kapitel 2.5.3 zu finden. Dort wird u. a. auf Besonderheiten des Aufbaus eingegangen. In Abbildung 2.9 sind für das verwendete Spektrometer die Auftrefforte auf dem Detektor und die Flugzeit für verschiedene Startorte dargestellt. Ausgehend von einem mit 4x4 mm sehr großen Target, wird dies im Durchschnitt auf 1,0 mm und 0,8 ns verkleinert. Allerdings variieren diese Werte je nach anfänglichem Impuls bis maximal 2,2 mm und 1,5 ns. Ohne dreidimensionale Fokussierung (Linse und Drift) betrügen die Unsicherheit 4 mm bzw. 35,5 ns. Grund für die nicht optimale Funktionsweise der Linse ist starke, für die Elektronen jedoch erforderliche, Magnetfeld [MSch02]. Allerdings ist bereits eine Reduktion von einem Faktor 3 für das reale Experiment, mit einem lediglich 1,5 mm breiten Gastarget, ausreichend.

#### 2.5.2 Elektronenzweig

Während die Rückstoßionen für dieses Experiment aufgrund der niedrigen Energien ( $\leq 0,2$  eV) problemlos abgebildet werden können, ist es mit den Elektronen nicht so einfach. Wegen ihrer wesentlich geringeren Masse ( $m_{He}:m_e \approx 7400:1$ ) besitzen die Elektronen schon bei geringen Impulsüberträgen eine deutlich höhere Geschwindigkeit und Energie.

Wie in Abbildung 2.10 zu erkennen ist, hat die hohe Energie (bis mehrere 100 eV) zur Folge, dass der lineare Zusammenhang (Gleichung 2.17) zwischen Flugzeit und Impuls nur noch in sehr begrenztem Umfang gilt. Die Näherungen nach Gleichung 2.11 sind somit nicht mehr gültig. Bei einem Feld von 5 V/cm nehmen die Elektronen innerhalb der 20 cm langen Beschleunigungsstrecke bis zum Eintritt in die Driftregion gerade einmal 100 eV kinetische Energie auf.

Kritischer erweist sich die hohe Geschwindigkeit der Elektronen jedoch in den beiden Richtungen senkrecht zur Flugzeitrichtung (y und z). Um schnelle Elektronen in diesen Raumrichtungen mit vollem Raumwinkel auf den Detektor abbilden zu können, wären sehr hohe elektrische Felder erforderlich. Dies hätte zur Folge, dass sich die Auflösung in Flugzeitrichtung und ebenso die der Rückstoßionen in allen drei Raumrichtungen verschlechterte. Erst mit Hilfe größerer Detektoren und des Einsatzes magnetischer Führungsfelder [RMos96a, RMos96b, RDoe98a, TVog96, JUll97, WSch99] ist der direkte, impulsaufgelöste Nachweis der Elektronen seit einigen Jahren möglich geworden [TJah04c, RDoe04a].

Die Bahn eines Teilchens im reinen elektrischen Feld ist zwar unabhängig von seiner Masse, jedoch nicht von der Geschwindigkeit. Anders ist der Sachverhalt bei geladenen Teilchen in einem Magnetfeld; die Trajektorien sind in diesem Falle von deren Masse und Geschwindigkeit abhängig. Einzelheiten



**Abbildung 2.10:** Für das verwendete Spektrometer ( $x_d$ =40 cm,  $x_a$ =20 cm und  $\vec{E}$ =5 V/cm) nach Gleichung 2.17 berechnete Flugzeiten  $\blacksquare$  ( $t_e$ ) und daraus nach der linearen Approximation (Gleichung 2.9) zurückgerechnete Elektronenimpulse  $\bullet$ .

zu den folgenden Berechnungen sind wieder in [MSch02, TWeb03] zu finden. Dem elektrischen Feld wird parallel ein homogenes magnetisches Führungsfeld  $\vec{B}$  überlagert. Dieses übt auf elektrisch geladene Teilchen die Lorentzkraft [CGer97] aus:

$$\vec{F_L} = q\vec{v} \times \vec{B} \quad . \tag{2.20}$$

Da die Lorentzkraft wegen des Kreuzproduktes nur auf die Komponenten senkrecht zum Magnetfeld wirkt, entkoppelt die Flugzeitrichtung (x) von den beiden transversalen Raumrichtungen (y und z). Die Elektronen werden durch das Magnetfeld auf eine Kreisbahn gezwungen, deren Radius  $r_{Gyr}$ bei gegebener Magnetfeldstärke ein Maß für den Impuls ist. Durch das elektrische Feld  $\vec{E}$  werden die Elektronen zusätzlich in Richtung des Detektors beschleunigt, sodass die Trajektorie einer Schraubenbahn mit zunehmender Steigung gleicht. Aus dem Kräftegleichgewicht von Lorentz- und Zentripetalkraft gelten für den Impuls und die Gyrationsperiode  $T_{Gyr}$  folgende Zusammenhänge:

$$mv_{yz} = qBr_{Gyr}$$
 bzw.  $\frac{B [\mathbf{G}] \cdot r_{Gyr} [\mathbf{mm}]}{124, 38} = p_{yz} [\mathbf{a. u.}]$  (2.21)



**Abbildung 2.11:** Vier verschiedene Trajektorien (a, b, c und d) eines negativ geladenen Teilchens im homogenen Magnetfeld *B* bei schiefem Einfall in die z-y-Ebene. Am Startort (0,0,0) hatten die Teilchen folgende Geschwindigkeiten: a)  $v_a = (0, u, v_0)$ , b)  $v_b = (-u, 0, v_0)$ , c)  $v_c = (0, -u, v_0)$  und d)  $v_d = (u, 0, v_0)$ . [KBet90]

$$T_{Gyr} = \frac{2\pi m}{qB} \quad bzw. \quad \frac{357, 22}{B \ [G]} = T_{Gyr} \ [ns] \quad .$$
 (2.22)

Die jeweils rechts stehende Gleichung gilt für Elektronen und in den üblich verwendeten Einheiten. In der yz-Ebene (Ebene des Elektronendetektors) kehrt das Elektron nach jeder abgeschlossenen Gyration ( $T_{Gyr}$ ) zum Startpunkt zurück, vorausgesetzt, dass elektrisches und magnetisches Feld exakt parallel zueinander sind. Andernfalls driften die Elektronen gegen das E-Feld (sog. EB-Drift), da sie an die Magnetfeldlinien gebunden sind (siehe Unterkapitel 5.1.3)..

Einige einfache geometrische Betrachtungen anhand Abbildung 2.12 ergeben folgenden Zusammenhang zwischen dem Gyrationsradius  $r_{Gyr}$  und dem Abstand zur Spektrometerachse R:

$$r_{Gyr} = \frac{R}{\sqrt{2 - 2\cos(\alpha)}} = \sqrt{\frac{z^2 + y^2}{2 - 2\cos(\alpha)}} \quad .$$
 (2.23)

Der Winkel  $\alpha$  ist proportional zur Flugzeit und berücksichtigt das zyklische Zurückkehren des Elektrons zur Spektrometerachse nach jeder vollen Gyration bzw. nach N Gyrationsperioden entsprechend der absoluten Flugzeit des Elektrons. Abgesehen vom Betrag des Impulses, der sich auf diese Weise errechnen lässt, ist vor allem die Emissionsrichtung von Bedeutung. Die einzelnen Richtungskomponenten ergeben sich durch eine Projektion auf die Tangente der Kreisbahn, welche durch den Startpunkt der Gyration (z) führt. Die zweite Komponente ist die Projektion senkrecht zu dieser Achse (y).



**Abbildung 2.12:** Skizze einer einzelnen Elektronentrajektorie im magnetischen Feld, projiziert auf die Ebene des Detektors (yz). Elektrisches und magnetisches Feld weisen in die Zeichenebene hinein und stehen senkrecht zum Detektor.

Abhängig von der exakten Emissionsrichtung, dem relativen Anteil des yund z-Impulses, ist dieses Koordinatensystem um den Winkel  $\phi = 2\alpha$  (mit  $\alpha \in [0, 2\pi]$ ) gegenüber dem Laborsystem gedreht. Eine einfache Drehmatrix [HSto98] sorgt für den Übergang in das Laborsystem und ermöglicht die Berechnung der Impulse aus den Messgrößen:

$$\begin{pmatrix} p_{z,e} \\ p_{y,e} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} & -\sin\frac{\alpha}{2} \\ \sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ y \end{pmatrix} \cdot \frac{qB}{\sqrt{2 - 2\cos(\alpha)}} \quad .$$
(2.24)

Je weiter sich das Elektron während seiner Gyrationsbewegung dem Startpunkt in der Detektorebene nähert, desto größer ist der Fehler bei der Rekonstruktion von Impuls und Richtung. Anschaulich besteht das Problem darin, dass durch zwei Punkte (Startpunkt und Ort auf dem Detektor) ein Kreis gelegt werden muss, dessen Radius dem Impulsbetrag entspricht. Mit zunehmender Annäherung dieser beiden Punkte gibt es immer mehr Kreise, die im Rahmen der Auflösung möglich sind. Zum Schluss liegen beide Punkte übereinander und es ist unmöglich den Impulsbetrag oder die Emissionsrichtung anhand der Messgrößen zu bestimmen.

#### 2.5.3 Realisierung

Kupferplatten in der Größe 160 x 160 x 1 mm mit einem Loch von 130 mm in der Mitte werden, mit keramischen Abstandshaltern in Abständen von jeweils 5 mm isoliert auf Keramikstangen aufgefädelt. Verbunden sind die Platten untereinander mit 300 k $\Omega$  Widerständen. Der Linseneffekt zur Ortsfokussierung wird durch einen Feldsprung zwischen zwei nebeneinanderliegenden Kupferplatten erreicht. Der dazu erforderliche große Widerstand (6 -11 M $\Omega$ ) befindet sich außerhalb der Kammer, sodass er während des Experiments nachjustiert werden kann. Hierzu verwendet man möglichst langsame Projektile und kalibriert das Spektrometer durch Messung des Elektroneneinfangs. Auf dem Rückstoßionendetektor werden senkrechte Linien - die sog. Capture-Linien - (siehe Kapitel 5.1.1 und 3.2.1) deutlich sichtbar. Ihre Breite spiegelt die Auflösung des Spektrometers gefaltet mit der Targettemperatur wider. Perfekte Ortsfokussierung ist erreicht, sobald die Linien minimale Breite erreicht haben.



**Abbildung 2.13:** Blick in die Targetkammer mit Spektrometer, Projektillinse, Beamcleaner und Projektilanalysator. Der Jet passiert das Spektrometer durch das Loch in der Mitte (siehe Abbildung 2.14).

An die 200 mm Beschleunigungsstrecke schließt sich im Elektronenzweig ein Gitter (Maschenweite 250  $\mu$ m) an. Dieses stellt den Übergang zur exakt doppelt so langen (400 mm) feldfreien Driftröhre (Ø=140 mm) dar. Das Ende der Driftstrecke ist ebenfalls mit einem Gitter bespannt. Daran schließt sich der 120 mm MCP-Detektor an. Zur Vermeidung von Aufladungen wurden die Keramikabstandshalter mit einigen 1000 Å Germanium bedampft. Das Aluminium der Driftröhre kann an der Luft zu Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxidieren. Da es sich dabei um einem Isolator handelt, wurden die Driftröhren zur Vermeidung von Aufladungen von Aufladungen an der Innenseite mit Gold bedampft. Zur Maximierung der Jetdichte

wurde die Targetzone möglichst eng an die letzte Blende des Jets herangebracht. Die mittleren 16 Feldplatten sind dafür an der Unterkante um 5 mm gekürzt worden. Da dies im sensiblen Bereich des Reaktionsvolumens und damit einhergehender kleiner Teilchenenergien zu unerwünschten Feldeingriffen führen kann, wurde das Spektrometer symmetrisch um 0 V gefahren (+100 V auf der Elektronen- und -200 V auf der Rückstoßionenseite). Daraus ergibt sich unter Berücksichtigung des zusätzlichen Spannungsabfalls an der Linse eine mittlere elektrische Feldstärke von etwa 5 V/cm. Um ein zeitlich stabiles elektrisches Feld im Spektrometer sicherzustellen, wird die zugeführte Versorgungsspannung mit RC-Gliedern mit besonders großer Kapazität (100  $\mu$ F) geglättet.



**Abbildung 2.14:** Zeichnung des gesamten Experimentaufbaus mit detailgetreuer Skizze des Spektrometers. In der oberen Bildhälfte sind einige Beispieltrajektorien aus einer Simulation dargestellt. Für die Rückstoßionen wurden Impulse von 10 a. u. mit Emissionswinkeln 0°, 90°, 180° und 270°, für die Elektronen Impulse von 3 a. u. mit Emissionswinkeln 0°, 30°, ... 360° gewählt.

Gemessen ab der Targetzone verkleinert sich im Rückstoßionenzweig nach 117 mm der Durchmesser der Öffnungen in den Spektrometerplatten auf 28 mm. Damit soll der Felddurchgriff, insbesondere der Recoillinse, in den Elektronenzweig des Spektrometers minimiert werden. Nach drei dieser Platten vergrößert sich der Durchmesser wieder auf 70 mm, zum einen um den sich aufweitenden Trajektorien gerecht zu werden, zum anderen sollen die Ionen beim Flug durch die Linse den Bereich der linearen Abbildungseigenschaften innerhalb der Linse nicht verlassen. Die Linse befindet sich im Abstand von 168 mm vom Target. Der Übergang in den Driftbereich, 267 mm entfernt von der Targetzone, gestaltet sich hier ohne Gitter. Dadurch wird die Koinzidenzwahrscheinlichkeit - entsprechend des Wegfalls eines Gitters mit 80 % Transmission - gesteigert.

Obwohl die Trajektorien mit und ohne Gitter nicht exakt gleich sind, sind sie dennoch weiterhin eineindeutig. Die Eichung der Rückstoßionenimpulse muss ohnehin direkt aus Messwerten (Capture-Linien, siehe Unterkapitel 5.1.1) erfolgen, da der Einsatz der Linse den sonst üblichen Zusammenhang zwischen Flugzeit und transversaler Auslenkung zunichte macht. Während die Elektronen rund 150 ns von der Targetzone bis zum Detektor fliegen, sind es für He<sup>+</sup>-Ionen ca. 19  $\mu$ s und für He<sup>2+</sup>-Ionen 14  $\mu$ s.

Die Driftröhre ( $\emptyset$ =120 mm) selbst ist 1112 mm lang. Wiederum stellt ein Gitter den Übergang zum 80 mm MCP-Detektor dar. Auf einer Gesamtlänge von knapp 1,5 m stellt die geringste Verkippung durch nicht perfekt senkrecht angeschweißte Flansche einen riesigen Hebel dar. Darüber hinaus spielt das Erdmagnetfeld (typischerweise 0,6 Gauß) eine nicht vernachlässigbare Rolle. Dies hatte zur Folge, dass die Rückstoßionen am äußersten Rand des Detektors landeten und größtenteils für die Messung verloren waren. Ein dicker Viton-O-Ring, mit dessen Hilfe die CF 200 Vakuumröhre gegenüber dem Flansch verkippt werden kann, war die erste Möglichkeit dieses Problem in den Griff zu bekommen. Jedoch hatte die notwendige Verkippung eine deutliche Verschlechterung des Vakuums zur Folge, sodass ein alternativer neuer Weg beschritten werden musste - die Entwicklung eines 2-dimensionalen Rückstoßionensteerers [MSch03a].

Die einfachste Realisierung bestünde in der Verwendung zweier Deflektorplattenpaare, welche um 90° gegeneinander verdreht und hintereinander geschaltet wären. Der große Nachteil dieser Methode ist, dass das Feld im Randbereich - oben/unten bzw. rechts/links und zusätzlich am Ein- und Austritt stark inhomogen wäre und zu zahlreichen Verzerrungen führen würde.

Vier Glasplatten (150 x 77,3 x 2 mm) wurden nahezu homogen mit Germanium ( $\approx 5000$  Å) bedampft. Hierdurch bildet sich ein gleichmäßiger Widerstandsgradient auf der gesamten Oberfläche der Glasplatte aus. Der Widerstand der einzelnen Platten variiert zwischen 4,5 und 8,6 M $\Omega$ . Die vier Glasplatten sind in Form eines Quadrats angeordnet, sodass immer zwei Platten sich parallel gegenüberstehen. Die Platten sind innerhalb der Driftröhre mit



**Abbildung 2.15:** Simulationsergebnis des realisierten Spektrometers für <sup>4</sup>He<sup>+</sup>-Ionen mit Impulsen von -10, -5, 0, 5, 10 a. u. in Flugzeit- und Ortsrichtung.  $\blacksquare$  mit Abschlussgitter zwischen Beschleunigung und Driftstrecke. • ohne Abschlussgitter.

Winkeln über die gesamte Länge von 150 mm isoliert gegen das Potenzial der Driftröhre verschraubt. An den Elektroden (Winkeln) wird die gewünschte Spannung angelegt. Aufgrund der dünnen Germaniumbeschichtung und winziger Unebenheiten in der Oberflächenbeschaffenheit wurden die Winkel auf die gesamte Länge der Glasplatten ausgedehnt, um eine möglichst gleichmäßige Kontaktierung zu gewährleisten. 8 cm nach dem Ende des Absaugfeldes beginnen die Glasplatten.

Für den in Abbildung 2.16 a skizzierten Fall  $U_1=U_2$  und  $U_3=U_4$  sind die linke obere und rechte untere Platten (rechte und linke) auf gleichem Potenzial. Die beiden anderen Platten formen aufgrund ihres gleichmäßigen Widerstandsgradienten ein nahezu perfekt homogenes Feld. Umgekehrt gilt dies auch für den Fall  $U_1=U_4$  und  $U_2=U_3$ . Das Superpositionsprinzip verlangt, dass auch Kombinationen möglich sind und die Rückstoßionen beispielsweise nach unten rechts abgelenkt werden können.

In Abbildung 2.16 b ist dargestellt, wie die zur gewünschten Ablenkung erforderliche Spannung an die einzelnen Elektroden angelegt wird. Die Potenzialdifferenz (relativ zum Driftröhrenpotenzial) wird von handelsüblichen potenzialfreien (!) Netzgeräten (bis  $\pm 30$  V) erzeugt. Die angelegten Spannungen sind im Vergleich zur kinetischen Energie (einige 100 eV) der Rückstoßionen sehr gering (typischerweise  $\pm 3$  % der angelegten Absaugspannung). Feldein-



**Abbildung 2.16:** a) Skizzierte Funktionsweise samt elektrischer Verschaltung und b) Fotografie des eingebauten Rückstoßionensteerers. Die einzelnen einseitig mit Germanium bedampften Glasplatten werden mittels der dreieckigen Elektroden symmetrisch um das Potenzial der Driftröhre gesetzt.

griffe und -verzerrungen, die die Auflösung negativ beeinflusst hätten, konnten nicht beobachtet werden. Details zur Güte der Rückstoßionenauflösung mit und ohne Rückstoßionensteerer sind in Kapitel 5.1.2 zu finden.

Neben seiner eigentlichen Funktion, für die der Rückstoßionensteerer konstruiert und eingesetzt wurde, ist eine weitere Verwendung denkbar. Ist die Rückstoßionenauflösung nur noch durch die Auslenkung auf dem Detektor begrenzt und gleichzeitig die relevante Messgröße in einer Raumrichtung enthalten (z. B. in Projektilstrahlrichtung, der Abstand der Capture-Linien), bietet sich an, den Rückstoßionensteerer als Quadrupolsingulett zu betreiben. Dadurch werden die Ionen in einer Raumrichtung fokussiert und in der dazu senkrechten defokussiert. Auf diese Weise könnte die zu betrachtende Raumrichtung vergrößert werden, wenn auch auf Kosten der zu ihr orthogonalen Richtung.

#### 2.5.4 Magnetfeld

Das Magnetfeld, welches die Elektronen zum Detektor führt, muss von der Targetzone bis hin zum Elektronendetektor möglichst homogen sein, also über eine Distanz von 60 cm gemessen ab der Kammermitte. Das Magnetfeld eines Helmholtz-Spulenpaares [LBer87a] ist gegeben durch:

$$B = \mu_0 N I_N \left(\frac{4}{5}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{R_S}$$
(2.25)

mit der Influenzkonstante  $\mu_0$ , dem Strom pro Windung  $I_N$ , der Windungsanzahl N und dem Spulenradius  $R_S$ .

Nach konventioneller Konstruktion betrüge der Durchmesser mindestens 2,4 m und ein Strom von  $I = N \cdot I_N$ =3500 A wäre nötig. Da die geforderte Größe den zur Verfügung stehenden Platz bei weitem überschritt, wurde eine 4-Spulen-Anordnung<sup>5</sup> verwendet. Die genaue Spulenanordnung wurde mit den Computerprogrammen "Automesh" und "Poisson Superfish" [HBil00] simuliert. Das Ergebnis dieser Simulation ist in Abbildung 2.17 zu sehen. Die Feldstärke schwankt innerhalb des für die Elektronen relevanten Bereichs lediglich um ±0,6 %.



**Abbildung 2.17:** Simulierte Magnetfeldstärke *B* in Abhängigkeit des Abstandes vom Mittelpunkt *x*. Skizziert sind die beiden großen und kleinen Spulenpaare. Bei x=0 cm befindet sich das Target, bei x=-60 cm der Elektronendetektor. Der untere (rote) Graph stellt eine 10-fache Vergrößerung des oberen Graphen dar und bezieht sich auf die rechte Skala.

#### Die beiden inneren großen Spulen sind aus handelsüblichem wärme isoliertem - und somit auch elektrisch isoliertem - Kupferrohr (WICU®) hergestellt,

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Ein perfekt homogenes Magnetfeld wird im Inneren einer rotierenden und elektrisch homogen geladenen Kugel erreicht. Die 2 Spulen der Helmholtz-Anordnung bilden in erster Näherung einen Teil dieser Kugel nach. Weitere Annäherungen an die "rotierende Kugel" werden durch die Verwendung zusätzlicher Spulenpaare erreicht.

sodass sie von durchfließendem Wasser gekühlt werden können. Der benötigte Strom wird von einem leistungsstarken stromstabilisierten Netzgerät (12 kW bei 300 A) geliefert. Solche Netzgeräte werden im Allgemeinen für Umlenkmagnete an Beschleunigeranlagen eingesetzt. Kaptonisolierter Kupferdraht wurde für die beiden äußeren kleinen Spulen verwendet. Labornetzgeräte (5 A bei max. 30 V) sorgen hier für den erforderlichen Strom.

Entgegen der Simulation wurde nicht immer bei 25 Gauß Magnetfeld gemessen. Vielmehr wurde die Stärke des Feldes variabel dem jeweiligen Stoßsystem und den erwarteten Elektronenimpulsen angepasst. Das Verhältnis des Stromes, der durch die kleinen und die großen Spulen fließt, betrug:  $I_1=I_4=37,3\cdot I_2=37,3\cdot I_3$ .

Nr.	$R_S$ [cm]	$x_S$ [cm]	N <b>[Wdg.]</b>	$I_N$ [A]
1	25,0	-69,0	60	4,0
2	76,0	-38,0	14	149,3
4	76,0	+38,0	14	149,3
4	25,0	+69,0	60	4,0

**Tabelle 2.1:** Realisierte 4-Spulen-Konfiguration mit Radien  $R_S$ , Abständen ab Mittelpunkt  $x_s$ , Windungsanzahl N und dem erforderlichen Strom pro Windung  $I_N$ , um ein Magnetfeld von 25 Gauß zu erhalten.

# 2.6 Ejektile

Nach Passage der Targetzone und Verlassen des Spektrometers wird der Primärstrahl mittels elektrostatischer Ablenkung von den umgeladenen, im Wesentlichen neutralen, Ejektilen separiert. Der Primärstrahl wird in ein langes Rohr - den Beamdump - gelenkt (siehe Unterkapitel 2.4), um Untergrundereignisse auf dem Ejektildetektor zu vermeiden. Darüber hinaus konnte in diesem Rohr der Strahlstrom gemessen werden. Die Ejektile (H<sup>0</sup>, He<sup>0</sup> und He<sup>+</sup>) landen geradewegs auf einem zeit- und zweidimensional ortsauflösenden MCP-Detektor mit Delayline-Anode (50 mm Durchmesser).

Zur Ermittlung der Flugzeit von Elektron und Rückstoßion muss deren Auftreffen auf dem Detektor in Bezug auf ein Referenzsignal gemessen werden, das in direktem Zusammenhang zum tatsächlichen Zeitpunkt der Reaktion steht. Das Signal stammt vom Ejektildetektor. Nur etwa jedes millionste Projektil führt tatsächlich zu einer Reaktion und noch weniger haben einen Umladungsprozess (in der Regel einen Elektroneneinfang) erfahren. Da die Flugzeit zwischen tatsächlichem Reaktionszeitpunkt und Auftreffen auf dem Detektor nahezu konstant ist, wird dieses Ereignis als Referenzsignal genommen und bildet die Grundlage zur Flugzeitmessung von Rückstoßionen und Elektronen. Die Flugzeit durch das Target (1,5 mm) beträgt je nach Beschleunigungsspannung  $U_B$  zwischen 580 und 145 ps. Vor allem diese Zeitunsicherheit, aber auch der unterschiedlich große Energieverlust und die damit verbundene Geschwindigkeitsänderung des Projektils bei der Reaktion gehen als Fehler in die Messung der Flugzeiten ein. Der ungünstigste Fall mit minimaler Projektilgeschwindigkeit und maximalem Energieverlust sind, <sup>3</sup>He<sup>2+</sup>-Projektile bei  $U_B$ =120 keV (dies entspricht einer Geschwindigkeit von 1,26 a. u.). Die maximal mögliche Differenz der Bindungsenergien (Q-Wert) für einen Einfachelektroneneinfang (SC) beträgt etwa 108 eV<sup>6</sup>. Daraus ergibt sich für die Flugstrecke zwischen Targetzone und Ejektildetektor (rund 3,5 m) ein maximaler Zeitunterschied von 570 ps. Für die weitaus interessanteren Transferionisationsreaktionen beträgt die Differenz bei 60 keV/u Protonen lediglich 60 ps, was hauptsächlich an den geringeren Q-Werten liegt. Aus diesem Grunde konnte auf eine Q-Wert-abhängige Flugzeitkorrektur verzichtet werden.

Aus dem Auftreffort des Ejektils bzw. seiner Auslenkung aus der Nulllage (Streuwinkel)  $\theta_P$  lässt sich der auf das Ejektil übertragene Impuls in x/y-Richtung ableiten. Die senkrecht zur Flugrichtung übertragenen Impulse sind im Vergleich zum Impuls in Strahlrichtung (1:1000) sehr gering. Daher beträgt die typische Auslenkung in der Regel nur wenige mrad. Sollen hieraus brauchbare Informationen gezogen werden, muss die Strahldivergenz deutlich geringer sein [JTit04] (siehe auch Unterkapitel 5.2).

## 2.7 Detektoren

Das vorliegende Experiment stellt ebenso hohe Anforderungen an die Detektoren wie bereits zuvor an den Aufbau des Spektrometers, die Strahlführung und das Gastarget. Nicht nur der Zeitpunkt des Auftreffens auf dem Detektor, sondern auch die Position muss mit höchster Präzision bestimmbar sein. Die besonders auf dem Elektronendetektor zu erwartende bzw. angestrebte hohe Ereignisrate macht eine kurze Auslesezeit unabdingbar.

Die drei für Elektronen, Rückstoßionen und Ejektile verwendeten Detektoren funktionieren nach demselben Prinzip und unterscheiden sich nur in ihrer jeweiligen Größe. Sie bestehen im Wesentlichen aus zwei Teilen, dem **M**icro Channel **P**late (MCP) zur Teilchenkonvertierung und -verstärkung sowie einer zweidimensional ortsauflösenden Anode.

 $<sup>^6</sup>$ Befinden sich sowohl Target wie auch Ejektil im Grundzustand (1s) beträgt  $Q{=}{-}1{,}1$  a. u. Wurden hingegen die Elektronen der beiden He<sup>+</sup>-Atome in hohe Zustände (>4s) angeregt, so beträgt der Q-Wert dieser Reaktion +2,9 a. u. Dementsprechend ist eine maximale Differenz von 4 a. u. oder 108 eV im Q-Wert möglich.

#### 2.7.1 Micro Channel Plates (MCP)

Micro Channel Plates (Vielkanalplatten) sind Verstärker aus der Klasse der Sekundärelektronenvervielfacher. Im Gegensatz zu den bekannten Sekundärelektronenvervielfachern wie den Channeltrons oder Photomultipliern geht bei MCPs die Ortsinformation nicht verloren. MCPs werden rechteckiger Bauform auch in Oszilloskopen zur Verstärkung des dargestellten Bildes eingesetzt; in runder Bauform finden sie vor allem in Nachtsichtgeräten (Restlichtverstärkern) [Kore04] Anwendung. Wie bereits in Unterkapitel 2.5 beschrieben, ist die erreichbare Auflösung natürlich von der zur Verfügung stehenden Detektorgröße abhängig. Um den Anforderungen im Einzelnen gerecht zu werden, wurden folgende Detektoren eingesetzt:

- Projektildetektor mit 50 mm Durchmesser,
- Elektronendetektor mit 125 mm Durchmesser und
- Rückstoßionendetektor mit 80 mm Durchmesser

jeweils mit 2 MCPs (in Chevron-Anordnung) in Verbindung mit einer 2dimensionalen Delayline-Anode. Bei einem MCP handelt es sich um eine 1,5 mm dicke Glasscheibe, welche viele Millionen kleiner ( $\emptyset = 25 \ \mu$ m) Kanäle enthält [JWiz79, Hama94]. Aufgrund dieser Bauform beträgt die maximal offene Fläche der Kanäle etwa 60 %. Die Kanaloberfläche ist durch den besonderen Herstellungsprozess so behandelt worden, dass die Auslösearbeit von Elektronen besonders niedrig ist. Verantwortlich dafür sind Versetzungen im Festkörper und die ohnehin schon geringen Bindungsenergien von Alkaliund Erdalkalimetallen [LLim97]. Jeder einzelne Kanal arbeitet unabhängig als Verstärker [IAli99].

Die Glaskapillaren sind um einige Grad (etwa 13°) gegenüber der Oberflächennormalen verkippt. Dadurch wird nicht nur die Einzelteilcheneffizienz vergrößert. Vor allem die Zeitauflösung verbessert sich erheblich, da das Teilchen früher auf die Kanalwand trifft und nicht mehrere Zehntel Millimeter in die Kapillare fliegen kann ohne mit ihr in Wechselwirkung zu treten.

Zwischen der Vorder- und Rückseite des MCPs wird eine Spannungsdifferenz von  $U_{MCP}$ =800 bis 1200 V angelegt. Abhängig vom Hersteller und Durchmesser beträgt der typische Widerstand zwischen 10 M $\Omega$  und einigen 100 M $\Omega$ . Die Spannung wird über einen hochohmigen Widerstand ( $\geq$  10 k $\Omega$ ) angelegt und kapazitiv ausgekoppelt (siehe Abbildung 2.18). Trifft ein Atom, Ion, Elektron oder Photon auf die Kanalinnenwand, so kann (siehe Tabelle 2.7.1) es dort



**Abbildung 2.18:** a) Skizze eines Micro Channel Plates (entnommen aus [ASta01]), b) Schematische Darstellung der Elektronenvervielfachung innerhalb eines Kanals eines Micro Channel Plates sowie die zugehörige Spannung und Signalauskopplung.

ein oder mehrere Elektronen auslösen. Diese werden im starken elektrischen Feld von  $\approx 1000$  V/mm beschleunigt, stoßen erneut mit der Wand zusammen, lösen weitere Elektronen aus und so weiter. Dadurch wird eine Verstärkung von etwa  $10^4$  erreicht. Allerdings ist das nicht ausreichend. Deshalb werden normalerweise zwei MCPs aufeinandergelegt. Das zweite ist um 180° gegenüber dem ersten verdreht, sodass eine Verkippung der Kanäle beider MCPs erzielt wird. Man spricht hier von der Chevron-Anordnung.

Hierdurch soll das Driften von Ionen in entgegengesetzter Richtung verhindert werden, die dann wiederum ein "Primärereignis" auslösen könnten [USpi01]. Diese Ionenrückkopplung tritt bei schlechtem Vakuum entsprechend häufiger auf, da mehr ionisierbare Restgasatome zur Verfügung stehen. Ab  $1 \times 10^{-5}$  mbar können die MCPs gefahrlos betrieben werden. Beim Verlassen des ersten Micro Channel Plates teilt sich die Elektronenladungswolke auf mehrere Kanäle im zweiten MCP auf. Die aus dem zweiten MCP austretende Ladungswolke ist mehrere Kanaldurchmesser und nach der Drift zur Anode einige Millimeter groß.

Ob ein Teilchen die Elektronenlawine startet oder nicht, hängt im Wesentlichen von der Quanteneffizienz [MGal71] ab. Diese ist nicht nur abhängig vom auftreffenden Partikel (Elektron, Ion oder Photon), sondern ebenso von dessen Geschwindigkeit. Einige typische Effizienzen sind in Tabelle 2.7.1 und



**Abbildung 2.19:** a) Nachweiseffizienz des verwendeten 80 mm MCP-Detektors (Chevron-Anordnung) für He<sup>+</sup>-Ionen als Funktion der Nachbeschleunigung der Ionen, normiert bei  $U_{Det}$ =+2 kV auf 100 %. Die durchgezogene Linie entspricht dem Fit einer Exponential-funktion. b) Absolute Nachweiseffizienz eines MCP-Detektors in Chevron-Anordnung bei  $U_{MCP}$ =+2 kV für verschiedene Ionen, dargestellt in Abhängigkeit von der Ionenenergie dividiert durch die Wurzel der Ionenmasse [MKre05].

[KTob87, RGao87, RDuB89, BPek00, SYag01] zu finden. Neue Untersuchungen mit positiv geladenen Ionen ergaben, dass die MCP-Effizienz eine Funktion von  $E/M^{0.5}$  ist und bei etwa 58 % maximal wird [MKre05]. Dieser Wert entspricht in etwa der offenen Fläche des MCPs. Für schwere und hochgeladene Ionen ist dieser Zusammenhang in Abbildung 2.19 b dargestellt. Die Diskrepanz zwischen den tabellierten und den neuen von Krems et al. ermittelten Werten lässt sich nicht zweifelsfrei klären. Bekannt ist allerdings, dass die Auslöseeffizienz vom Auftreffwinkel des Teilchens auf die Kanaloberfläche abhängt, und zumindest in Krems Experimenten war dieser nahezu konstant. Abgesehen von den Projektilen verfügt keines der Fragmente im Spektrometer (Elektronen oder Rückstoßionen) über eine ausreichend hohe Energie, weshalb sie kurz vor dem Erreichen des Detektors nachbeschleunigt werden. Dieser Potenzialsprung (bis zu einigen 1000 V) wird durch die Verwendung eines engmaschigen Edelstahlgitters erreicht (250  $\mu$ m). Die Nachbeschleunigung erfolgt zwischen diesem und der MCP-Vorderseite. Gemessen ab der Targetzone betrug die kinetische Energie - inklusive der Nachbeschleunigung - für die Elektronen 300 eV und im Falle der Rückstoßionen 2 keV/q.

Das stark inhomogene Feld in unmittelbarer Nähe des Gitters fokussiert gleich einer elektrooptischen Linse die Ionen/Elektronen. Diese Effekte verschlechtern nicht nur die Orts-, sondern auch die Zeitauflösung. Als Faustregel ist der Ort nur in der Größe der Maschenweite genau bestimmbar. Gitter mit geringeren Maschenweiten verbessern zwar die Auflösung, verringern jedoch auf der anderen Seite die Transmission und somit die Nachweiseffizienz.

Partikel	Energie/Wellenlänge	Effizienz [%]
Elektronen	0.2 - 2 keV	50 - 85
	2 - 50  keV	10 - 60
positive Ionen	0.5 - 2 keV	5 - 85
$({ m H^+}, { m He^+})$	2 - 50  keV	60 - 85
	50 - 200  keV	4 - 60
Photonen (UV)	300 - $1100$ Å	5 - 15
	$1100$ - $1500~{ m \AA}$	1 - 5
Photonen (X-Ray)	2 - $0.5$ Å	5 - 15
	0.2 - $0.12$ Å	pprox 1

**Tabelle 2.2:** Relative Effizienz verglichen mit der offenen Fläche eines Micro Channel Plates für verschiedene Teilchen und Energiebereiche [PSch74].

Eine eingehende Erörterung dieser Effekte und Fehlerabschätzungen sind in [MSch02] zu finden.

Ein weiteres Problem, welches nur den Elektronendetektor betrifft, ist, dass beim Auftreffen des Elektrons auf dem Gitter selbst wiederum freie Elektronen erzeugt werden können. Diese werden mit einer sehr niedrigen kinetischen Energie "geboren", sind also verglichen mit dem echten Elektron wesentlich langsamer. Zwar können auch diese falschen Elektronen ein Signal auf dem MCP auslösen, allerdings mit einigen Nanosekunden Verspätung, abhängig von der Nachbeschleunigung sowie dem Abstand zwischen MCP und Gitter. In der Flugzeitverteilung kann sich dies als Ausläufer, hin zu langen Flugzeiten, bemerkbar machen [TJal01]. Aus diesem Grunde wird der Abstand zwischen Gitter und MCP möglichst gering und die Nachbeschleunigung hoch gewählt.

#### 2.7.2 Ortsauflösende Anode

Die aus dem MCP austretende im Durchmesser mehrere Millimeter große Elektronenwolke wird mit einigen 100 V auf die Anode beschleunigt; dort erfolgt letztendlich die Ortsbestimmung. Es wird eine Laufzeit-Anode (Delayline-Anode) verwendet, die nach dem Prinzip der Messung von Signallaufzeiten arbeitet [VMer98a, SNue94, OJag94, OJag96, LLim96]. Signale ganz gleich welcher Art können sich nur mit endlicher Geschwindigkeit, maximal der Lichtgeschwindigkeit, ausbreiten.

Delayline-Anoden sind so aufgebaut, dass in engem Abstand (1 mm) um eine Trägerplatte (Holder) ein langer Draht gewickelt ist. Zur Isolation ist der Draht über eine Keramikgewindestange gewickelt. Trifft nun die Elektronenwolke auf den Draht, so induziert sie dort einen Spannungspuls, welcher in



**Abbildung 2.20:** Skizze eines MCP-Detektors mit MCP und Anode zur eindimensionalen Ortsauslese. Eine zweidimensionale Ortsauslese wird durch eine zweite um 90° gedrehte Drahtebene erreicht [LSch00].

beide Richtungen entlang des Drahtes propagiert. Die Differenz der Signale an beiden Enden des Drahtes ergibt in einer Dimension die Position, während die Summe der Laufzeiten in beide Richtungen konstant ist (Zeitsumme). Bei bekannter Zeitsumme kann dadurch später auch aus dem Signal von nur einem Anodenende der Ort rekonstruiert werden. Wie schon gesagt, beträgt der Abstand der Drähte 1 mm, die Ladungswolke selbst ist noch größer. Sie trifft also nicht nur einen Draht, sondern landet gleichzeitig auf mehreren, sodass mehrere Signale hintereinander her propagieren. Die Dispersion des Signals führt zu einer Verbreitung der einzelnen Pulse und zusammen mit Verstärkern geeigneter Integrationsdauer verschmelzen die einzelnen Pulse zu einem einzigen, was einer Schwerpunktbildung gleichkommt. Der Ort ist dadurch genauer als 100  $\mu$ m bestimmbar.

Üblicherweise wird allerdings nicht nur ein Draht gewickelt, sondern gleich zwei parallel. Eine Drahtanordnung in dieser Form (zwei parallele Drähte) wird Lecherleitung genannt und zeichnet sich durch dispersionsarme Hochfrequenzeigenschaften aus. Signale laufen hierbei nicht auf, sondern vielmehr zwischen den Drähten [CGer97]. Einer der beiden Drähte, der Signaldraht, wird etwas attraktiver für die Elektronen gemacht (typischerweise +30 V). Die Elektronenwolke trifft dann vornehmlich diesen Draht anstatt beide gleichermaßen. Ebenfalls zur Verbesserung der Hochfrequenzeigenschaften werden die Signale der Anodenenden mit "twisted-pair" Leitungen<sup>7</sup> zur Vakuumdurchführung geführt. Durch das miteinander verdrehen der Kabel wird ein gleichmäßiger Abstand der Kabel zueinander erreicht und die Impedanz verbessert. Genau wie zuvor schon das MCP-Signal werden auch die Anodensignale mit RC-Gliedern ausgekoppelt und anschließend mit Differenzverstärkern verstärkt. Der Einsatz von Differenzverstärkern bietet den Vorteil, dass Störsignale, welche vielfach vorhanden sind und sich auf Signal- und Referenzdraht gleichermaßen befinden, durch die Differenzbildung nahezu vollständig eliminiert werden. Das echte Signal propagiert quasi nur auf dem attraktiveren Signaldraht, welches nach der Differenzbildung übrig bleibt und verstärkt wird. Die zweite räumliche Dimension erhält man aus einer weiteren Drahtebene, die gegenüber der ersten um 90° verkippt ist.

Delayline-Anoden zeichnen sich vor allem durch ihre kompakte Bauform und die gute Ortsauflösung aus. Ebenso besteht durch die Verwendung einer dritten Drahtebene die Möglichkeit, auch nahezu gleichzeitige Ereignisse (Multihit-Ereignisse [TWeb03]) voneinander trennen zu können. Die typischerweise an den Detektoren angelegten Spannungen sind im Anhang C zu finden.

## 2.8 Elektronik und Datenaufnahme

Bei Ereignisraten auf den einzelnen Detektoren, die im Limit 150 kHz betragen, ist es nicht möglich sämtliche Ereignisse zu speichern. Stattdessen müssen die wenigen Ereignisse aus einer echten Transferionisation gefunden und gespeichert werden. Eine ausgefeilte Logik, die "gute" Ereignisse (primär Transferionisation und sekundär Elektroneneinfang) vom Rest trennt, bevor die Daten aufgezeichnet werden, ist daher unbedingt erforderlich. Die Signalauf- und verarbeitung erfolgt mit Standard NIM-Elektronik (Nuclear Instrument Module). Die Daten selbst werden mit Standard CAMAC-Modulen (Computer Aid Measurement And Control) digitalisiert und auf einen handelsüblichen Personal Computer transferiert.

Im Detail (siehe Blockschaltbild 2.21) funktioniert das folgendermaßen: Die mit RC-Gliedern vom Gleichspannungspotenzial ausgekoppelten (siehe Unterkapitel 2.7), nur wenige Millivolt großen Spannungspulse von MCP und Anode werden mittels schneller Vorverstärker (FA = Fast Amplifier) bzw. Differenzverstärker (DA = Differential Amplifier) um etwa einen Faktor 100

 $<sup>^7</sup>$ Bei einer twisted-pair Leitung handelt es sich um zwei Drähte, die beide miteinander verdreht sind.

verstärkt, sodass sie danach mit speziellen Pulsformern (CFD = Constant Fraction Discriminator) in Standard NIM-Signale umgewandelt werden können.

Die MCP-Signale - die auch als Zeitsignale bezeichnet werden, da sie den Zeitpunkt des Auftreffens des Teilchens auf dem MCP und somit die Flugzeit widerspiegeln - werden für die weiter erforderliche Logik mit Logical Fans (LF) vervielfacht.

Für die verschiedenen interessanten Reaktionskanäle

- TI = Projektil MCP + Elektron MCP +  $He^{2+}$ -Rückstoßion
- SC = Projektil MCP + He<sup>+</sup>-Rückstoßion
- DC = Projektil MCP +  $He^{2+}$ -Rückstoßion

wird jeweils eine separate Logik aufgebaut und alle drei hinterher mit einem logischen Oder (OR) verknüpft. In Abbildung 2.22 ist der zeitliche Verlauf der Flugzeitkoinzidenz für eine Transferionisationsreaktion dargestellt.

Aufgrund der kurzen Flugzeit ist das zeitlich erste Signal das des Elektron-MCPs. Dieses wird mit einem Gate- und Delay-Generator (GD) zeitlich verzögert und öffnet ein etwa 300 ns breites Zeitfenster. Die Verzögerung entspricht der Differenz der Elektronen- und Projektilflugzeit, also zwischen 200 und 1100 ns. Das nun zeitlich verzögerte Signal wird zusammen mit dem Projektil-MCP-Signal in einem UND-Logikglied (AND) verknüpft. Dieses Koinzidenzsignal wird erneut zeitlich verzögert -  $\approx 13 \ \mu$ s, also etwas weniger als die He<sup>2+</sup>-Flugzeit - und auf circa 1  $\mu$ s verbreitert. Zusammen mit dem MCP-Signal des Rückstoßionendetektors werden beide Signale wiederum mittels eines logischen UNDs verknüpft.

Der zuvor skizzierte Weg der Koinzidenzschaltung wird gleichermaßen für die beiden anderen Reaktionen, den SC und DC, beschritten, nur dass auf die Koinzidenz mit dem Elektron verzichtet wird und im Falle des SC die Verzögerung 18  $\mu$ s statt der bisherigen 13  $\mu$ s beträgt. Alle drei Koinzidenzsignale werden in der GSI-Triggerbox weiterverarbeitet. Für jeden einzelnen Kanal kann eine Untersetzung 1:2<sup>n</sup> n [0,15] eingestellt werden. Die nun teilweise untersetzten Signale werden mit einem ODER-Glied (bis zu 8-fach) wieder zusammengeführt. Während jedes die Koinzidenz erfüllende Ereignis der Transferionisation verwendet wurde, wurde - abhängig von den Koinzidenzraten - zwischen jedes bis lediglich 2<sup>8</sup>-te Ereignis aus den Elektronentransferreaktionen (SC bzw. DC) weiter verarbeitet.



**Abbildung 2.21:** Blockschaltbild der verwendeten Koinzidenzlogik zur Datenaufnahme. Die Abkürzungen und Funktionsweisen der einzelnen Elektronikmodule sind im Text erläutert.

Das daraus resultierende Signal, das Event-In-Signal, wird in der MPDAS-Box weiterverarbeitet. Dieses Modul synchronisiert die Datenaufnahme, den Datentransfer zum PC und den anschließenden reset aller CAMAC-Module. Das Event-Out-Signal wird erneut vervielfacht (LF), steuert den ADC (**A**nalog to **D**igital Converter) an und gibt das Common-Stop-Signal für den LeCroy Multihit-TDC. Darüber hinaus wird es zusammen mit dem MCP-Signal des Rückstoßionendetektors mittels eines logischen UND-Gliedes verknüpft und startet den Singlehit-TDC. Dies ist erforderlich, damit die zeitlich leicht verschiedenen Event-Out-Signale (abhängig von der Kabellänge der einzelnen Logikschaltungen) immer zum gleichen Referenzzeitpunkt den Singlehit-TDC starten. Der Multihit-TDC arbeitet mit einer Abtastrate von 2 GHz, also einer Zeitauflösung von 500 ps pro Kanal, und kann bis zu 16 Ereignisse in jedem der 32 Kanäle speichern.



**Abbildung 2.22:** Zeitlicher Verlauf der Flugzeitkoinzidenzlogik für eine Transferionisationsreaktion. Das zeitlich erste Signal, das des Elektronendetektors, wird verzögert (250 bis 1200 ns) und mit dem verbreiterten Signal des Projektildetektors überlagert. Das daraus resultierende Signal (&) wird seinerseits etwa 13  $\mu$ s verzögert, verbreitert und mit dem zeitlich letzten Signal, dem des Rückstoßionendetektors, überlagert. Daraus ergibt sich schließlich das Event-In-Signal.

Die Anodensignale von Projektil- und Elektronendetektor, die die Ortsinformation enthalten, werden mit einem Zeit-Digital-Konverter (TDC = Time to Digital Converter), der mehrere Ereignisse aufzeichnen kann (Multihit) und im Common-Stop-Modus<sup>8</sup> betrieben wurde, aufgezeichnet. Da die Zeitauflösung des TDCs nur 0,5 ns beträgt, was im Falle des Projektildetektors einer Ortsauflösung von 0,4 mm entspricht, wird dessen Ortsinformation auf eine weitere Art aufgezeichnet. Ein Anodenende (x1) wird um die Signallaufzeit auf der Anode (100 ns) verzögert und auf den Stopp-Eingang eines TACs

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Common-Stop bedeutet, dass solange Daten aufgezeichnet werden, bis ein Stopp-Signal kommt (Trigger) und die gespeicherten Zeiten an den PC übertragen werden.

(Time to Amplitude Converter) gegeben. Das korrespondierende Anodensignal (x2) wird zum Starten des TACs verwendet. Er erzeugt ein Ausgangssignal, dessen Pulshöhe proportional zur Zeit (Differenz zwischen Start und Stopp) ist. In einem LGS (Linear Gate and Stretcher) wird der Puls auf 30  $\mu$ s verbreitert und in einem Spannung-Digital-Converter (ADC) aufgezeichnet. Mit Hilfe dieses relativ aufwändigen Verfahrens kann eine Ortsauflösung von 50  $\mu$ m erzielt werden. Zur Verbesserung der Elektronenflugzeitmessung wird der gleiche Weg beschritten, nur dass zum Starten das MCP-Signal des Projektildetektors verwendet wurde und zum Stoppen das verzögerte Elektron-MCP-Signal.

Als Letztes erreicht das Rückstoßion den Detektor. Falls dessen Signal die Trigger-Logik erfüllt - es sich demnach um ein gutes Ereignis handelt -, startet das koinzidente Signal aus Event-Out und Rückstoßionen-MCP den Singlehit-TDC. Da dieser TDC nur ein einziges Signal aufzeichnen kann und erst nach Erfüllung der Trigger-Logik gestartet wird, reduziert sich die Menge an Daten erheblich. Neben den Orts- und Flugzeitinformationen wurde darüber hinaus der Strahlstrom mit einem Pico-Amperemeter gemessen, in eine dem Strom proportionale Spannung umgewandelt und diese im ADC aufgezeichnet. Des Weiteren wurden sämtliche MCP-Signale, die Koinzidenz-Signale (TI, SC und DC) sowie zur Normierung ein 4 MHz- und ein 1 kHz-Pulser-Signal in einem Zähler (Scaler) aufgezeichnet. Dies soll in der späteren Datenanalyse ermöglichen, Ereignisse zu verwerfen, die in Momenten kurzzeitig sehr hoher Raten - hervorgerufen durch Schwankungen im Projektilstrahl - entstanden waren und mit größter Wahrscheinlichkeit Untergrund darstellen.

Die Daten jedes einzelnen Ereignisses werden mittels CAMAC-Computer-Interface auf einen PC übertragen und dort Ereignis für Ereignis (List-Mode-Verfahren) gespeichert. Gesteuert wird das Interface mit dem Computerprogramm CoboldPC [KUll04], welches auch gleichzeitig zur Rohanalyse und Erzeugung einfacher Spektren (Ortsbilder und Flugzeiten) eingesetzt wurde. Nach Abschluss der Messung können die Daten kalibriert, analysiert und ausgewertet werden (siehe Kapitel 5).

"Le mouvement fait partie de notre nature. La tranquillité absolue est la mort."

"Zu unserer Natur gehört die Bewegung. Die vollkommene Ruhe ist der Tod."

(Blaise Pascal)

# 3. Kinematik inelastischer Ion-Atom-Stöße

Die Schwierigkeit, Dynamik in atomphysikalischen Prozessen direkt zu vermessen, war lange Zeit durch die Messmethoden begründet. Beispielsweise wurde zur Bestimmung von Anregungsenergien der Energieverlust des Projektils spektroskopiert. Dass bei Projektilen mit kinetischen Energien im MeV-Bereich die Messung von wenigen eV Energieänderung äußerst schwierig ist, liegt auf der Hand. Anstatt eine winzige Impulsänderung des Projektils zu vermessen, ist es sehr viel einfacher ein im Laborsystem ruhendes Teilchen zu spektroskopieren und aufgrund kinematischer Betrachtungen, wie der Impuls- oder Energieerhaltung, Rückschlüsse auf das Projektil zu ziehen. Eine Steigerung von mehreren Größenordnungen ist dadurch leicht zu erreichen. Betrachtet man die miteinander stoßenden Ionen und Atome als ein den Regeln der klassischen Mechanik und Atomphysik unterworfenes Gebilde und nicht als ein hoch komplexes quantenmechanisches Vielteilchensystem, so lassen sich hieraus bereits einige - vom genauen Stoßsystem unabhängige -Aussagen über die zu erwartenden Impulse im Endzustand machen. Viele Reaktionen verfügen über einen ihnen eigenen Impulstransfer, anhand dessen sie identifiziert werden können.

# 3.1 Impuls des Projektils

Da typische Impulsüberträge in schnellen Stößen zwischen 10<sup>-4</sup> und 10<sup>-9</sup> des Projektilimpulses liegen, ist es nur sehr schwer möglich, die Änderung des Projektilimpulses direkt zu vermessen. Bei der dazu eingesetzten Translationsspektroskopie [RSch88, MBar92] wird die Impulsänderung eines sehr schnellen Projektils im Laborsystem gemessen; erreichbar sind Auflösungen von  $\Delta p/p=10^{-5}$ . Spektroskopiert man stattdessen ein im Laborsystem ruhendes Teilchen mittels der Rückstoßionenimpulsspektroskopie und vermisst die Impulsänderung eines im Laborsystem ruhenden Teilchens, kann die Auflösung um viele Größenordnungen (bis  $\Delta p/p=10^{-10}$ ) [VMer95a, RMos96a] gesteigert werden. In diesen winzigen Impulsüberträgen zwischen den einzelnen Stoßpartnern spiegelt sich die vollständige Dynamik der Reaktion wider. Unter Vernachlässigung des Spins, der hier weder präpariert werden kann noch eine Observable ist, besitzt das System 3m-Freiheitsgrade; die Impulse in 3 Raumrichtungen pro freiem Teilchen  $m^1$ . Die Erhaltungssätze (Impulsund Energieerhaltung) reduzieren die Anzahl der linear unabhängigen Größen auf 3m-(3+1). Aus der genauen Kenntnis des Anfangszustandes lassen sich also einige Vorhersagen über den Endzustand bzw. die zu erwartenden Impulse der beteiligten Stoßpartner machen.

Ist für die kinematischen Berechnungen der untersuchten Stoßsysteme klassische oder relativistische Mechanik erforderlich? Nach [USch94] bestimmt der Faktor f in erster Näherung die Abweichung der klassischen Mechanik zu den Berechnungen der speziellen Relativitätstheorie, dabei sind  $v_P^i$  die Projektilgeschwindigkeit und c die Lichtgeschwindigkeit.

$$f = \sqrt{1 - \frac{v_P^{i^2}}{c^2}} \quad . \tag{3.1}$$

Erst ab einer Energie von 90 MeV/u bzw.  $v_P^i$ =60 a. u. beträgt die Abweichung nach Gleichung 3.1 mehr als 10 %. Aus diesem Grunde beschränken werden die folgenden Betrachtungen in einer nichtrelativistischen Formulierung gemacht. Bei den untersuchten Stoßgeschwindigkeiten bis 5 a. u. Projektilgeschwindigkeit beträgt die Abweichung zwischen klassischer Mechanik und Berechnungen auf der Grundlage der speziellen Relativitätstheorie 0,06 %. Alternativ zu der folgenden klassischen Formulierung sei auf die relativistische Formulierung in [VMer96] verwiesen.

Drei grundsätzlich verschiedene Reaktionsprozesse sind möglich: Elektronentransfer, Elektronenemission sowie Elektronenanregung. Ausgehend von einem positiv geladenen Projektil (P vor der Reaktion und E nach der Reaktion), einem neutralen Target (T vor der Reaktion bzw. Rec nach der Reak-

 $<sup>^1</sup>$  Weitere 3m-Freiheitsgrade, die in der klassischen Physik der Position zuzuschreiben sind, entfallen hier, da in einem quantenmechanischen System entweder Ort oder Impuls gemessen werden können.

tion) und N gebundenen Elektronen (e) in Projektil und Target sind folgende Reaktionen von Relevanz:

- 1. Transfer von  $n_c$  Targetelektronen in gebundene Zustände des Projektils (capture, englisch: Einfang)
- 2. Emission von  $n_T$  Targetelektronen in Kontinuumszustände
- 3. Emission von  $n_P$  Projektilelektronen in Kontinuumszustände
- 4. Anregung von  $n_{T*}$  Targetelektronen in gebundenen Zuständen
- 5. Anregung von  $n_{P*}$  Projektilelektronen in gebundenen Zuständen.

Die Anregungsprozesse  $n_{T*}$  und  $n_{P*}$  stellen eine Besonderheit dar. Im Gegensatz zu den anderen drei Prozessen führen sie zu keiner Änderung des Ladungszustandes der beteiligten Teilchen, sondern entziehen dem Gesamtsystem nur etwas Energie. Der Energieerhaltungssatz besagt, dass die Energie eines abgeschlossenen Systems vor und nach dem Stoß gleich ist:

$$E^i = E^f \quad . \tag{3.2}$$

 $E^i$  und  $E^f$  sind die Energien im Eingangs- (i=inital) bzw. Ausgangskanal (f=final); genauer gesagt die Summe aus kinetischer Energie ( $E_{kin}$ ) und Bindungsenergie ( $E_{Bdg}$ ) der beteiligten Stoßpartner, im Einzelnen:

$$E^{i} = E^{i}_{kin,P} + E^{i}_{Bdg,P} + E^{i}_{kin,T} + E^{i}_{Bdg,T}$$
(3.3)

$$E^{f} = E^{f}_{kin,E} + E^{f}_{Bdg,E} + E^{f}_{kin,Rec} + E^{f}_{Bdg,Rec} + \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} E^{f}_{kin,e_{j}} \quad .$$
(3.4)

Die Differenz der Bindungsenergien bzw. der kinetischen Energien, der Q-Wert (bekannt aus der physikalischen Chemie als Reaktionsenthalpie [CMor96]), wird wie folgt definiert:

$$Q = \left(E^{i}_{Bdg,P} + E^{i}_{Bdg,T}\right) - \left(E^{f}_{Bdg,E} + E^{f}_{Bdg,Rec}\right)$$
(3.5)

bzw. wie sich mit den Gleichungen 3.2, 3.3 und 3.4 zeigen lässt ebenso:

$$Q = \left(E_{kin,P}^{i} + E_{kin,T}^{i}\right) - \left(E_{kin,E}^{f} + E_{kin,Rec}^{f} + \sum_{j=1}^{n_{Rec}+n_{P}} E_{kin,e_{j}}^{f}\right) \quad .$$
(3.6)

Wiederum analog gilt für Q > 0, dass es sich um eine *exotherme* Reaktion handelt. Da keine Wärme frei werden kann, müssen die freien Teilchen nach der Reaktion mehr kinetische Energie besitzen als vorher; Q < 0wird als *endotherme* Reaktion bezeichnet. Physikalisch ist eine Aufteilung des Q-Wertes auf die einzelnen Teilprozesse aufgrund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung zwar nicht möglich, dennoch bringt sie mehr Anschaulichkeit. Zu unterscheiden sind die Energieanteile des Elektronentransfers  $Q_c$ , der Targetionisation  $Q_T$ , der Projektilionisation (*loss*)  $Q_P$  und der Elektronenanregung  $Q_*$ :

$$Q = Q_c + Q_T + Q_P + Q_* \quad . \tag{3.7}$$

Für die einzelnen Anteile gilt:

$$Q_{c} = \sum_{j=1}^{n_{c}} \left( E_{Bdg,P_{j}}^{i} + E_{Bdg,T_{j}}^{i} \right) - \left( E_{Bdg,E_{j}}^{f} + E_{Bdg,Rec_{j}}^{f} \right)$$
(3.8)

$$Q_T = \sum_{j=1}^{n_T} E^i_{Bdg,T_j}$$
(3.9)

$$Q_P = \sum_{j=1}^{n_P} E^i_{Bdg, P_j} \quad . \tag{3.10}$$

Im Folgenden wird weiterhin von *Q*, der Summe der einzelnen Anteile, die Rede sein. Allgemein gilt darüber hinaus noch die Impulserhaltung (ebenfalls in drei Raumrichtungen):

$$\vec{p^i} = \vec{p^f} \tag{3.11}$$

mit

$$\vec{p^i} = \vec{p^i}_P + \vec{p^i}_T$$
 (3.12)

$$\vec{p^f} = \vec{p^f}_E + \vec{p^f}_{Rec} + \sum_{j=1}^{n_T + n_P} \vec{p^f}_{e_j}$$
 . (3.13)

 $\vec{p^i}$  und  $\vec{p^f}$  sind die Impulsvektoren im Anfangs- bzw. Endzustand. Im Eingangskanal bewegt sich das Projektil entlang der z-Achse (siehe Definition des Koordinatensystems in Abbildung 2.1 bzw. 3.1):

$$E_{kin,P}^{i} = \frac{p_{z,P}^{i^{2}}}{2m_{P}} \quad . \tag{3.14}$$

Aufgrund der speziellen Präparation des Targetatoms (T) mittels Überschallgasjet ist es intern nur wenige meV kalt, sodass seine Energie vernachlässigt werden kann.

$$E_{kin,T}^i \approx 0 \quad . \tag{3.15}$$

Für das Projektil im Ausgangskanal, das Ejektil, gilt:

$$E_{kin_E}^f = \frac{p_E^{f^2}}{2m_E^f} = \frac{p_{x,E}^{f^2} + p_{y,E}^{f^2} + p_{z,E}^{f^2}}{2m_E^f}$$
(3.16)

bzw. umgeformt und nach  $p_{z,E}^{f}$ aufgelöst:

$$p_{z,E}^{f} = \sqrt{2m_{E}^{f}E_{kin,E}^{f} - p_{x,E}^{f^{2}} - p_{y,E}^{f^{2}}} \quad .$$
(3.17)

Zusammen mit Gleichung 3.6 und 3.15 gilt für den Ejektilimpuls in Strahlrichtung im Ausgangskanal:

$$p_{z,E}^{f} = \sqrt{2m_{E}^{f} \left( E_{kin,P}^{i} + Q - \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} E_{kin,e_{j}}^{f} - E_{kin,Rec}^{f} \right) - p_{x,E}^{f^{2}} - p_{y,E}^{f^{2}}} \quad .$$
(3.18)

Während der Reaktion können Elektronen vom Target ins Projektil transferiert werden, sodass sich die Massen von Projektil und Rückstoßion im Ausgangskanal  $m_P^f$  leicht ändern:

$$m_E^f = m_P^i + (n_c - n_P) m_e (3.19)$$

$$m_{Rec}^{f} = m_{T}^{i} - (n_{c} + n_{T}) m_{e}$$
(3.20)

Dies in Gleichung 3.18 eingesetzt und vereinfacht gilt für  $p_{z,E}^{f}$ :



**Abbildung 3.1:** Skizziertes Koordinatensystem mit Relativkoordinaten bezüglich einer vom Projektiltransversalimpuls und der Strahlachse aufgespannten Ebene (Projektilstreuebene).

 $p_{x,E}^{f^2}$  und  $p_{y,E}^{f^2}$  spiegeln den Impulsübertrag auf das Projektil in transversaler Richtung wider. Dieser wird als Streuwinkel des Projektils  $\theta_P$  bezeichnet und ist definiert als das Verhältnis aus Transversal- und Longitudinalimpuls. Es gilt:

$$\theta_P = \tan \frac{\sqrt{p_{x,E}^{f^2} + p_{y,E}^{f^2}}}{p_{z,P}^i} \quad . \tag{3.22}$$

Da die transversalen Impulse klein gegen den Longitudinalimpuls sind (kleine Projektilstreuwinkel),

$$p_{x,E}^f, p_{y,E}^f \ll p_{z,E}^f$$
 (3.23)

können diese Terme bei der Betrachtung der Projektilgesamtenergie vernachlässigt werden<sup>2</sup>, eine Näherung, die für die vorliegenden Experimente gegeben ist. Gleichung 3.21 kann man dann in einzelne Terme zerlegen:

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Man spricht hier auch vom Eikonal-Limit.

$$p_{z,E}^{f} = \sqrt{2m_{P}^{i}E_{kin,P}^{i}} \cdot \sqrt{1 + \frac{Q - \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}}E_{kin,e_{j}}^{f} - E_{kin,Rec}^{f}}{E_{kin,P}^{i}}} \cdot \sqrt{1 + \frac{(n_{c} - n_{P})m_{e}}{m_{P}^{i}}} \quad .$$
(3.24)

Anschließend werden die Wurzeln in einer Reihe entwickelt, wobei alle Glieder quadratischer oder höherer Ordnung vernachlässigt werden. Somit gilt:

$$p_{z,E}^{f} = p_{z,P}^{i} \left( \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{Q - \sum_{j=1}^{n_{T} + n_{P}} E_{kin,e_{j}}^{f} - E_{kin,Rec}^{f}}{E_{kin,P}^{i}} + \frac{(n_{c} - n_{P}) m_{e}}{m_{P}^{i}} \right) + 1 \right) \quad . \tag{3.25}$$

Für die Änderung des Projektilimpulses in Strahlrichtung  $\Delta p_{z,P}$  gilt:

$$\Delta p_{z,P} = p_{z,E}^f - p_{z,P}^i \quad . \tag{3.26}$$

Zusammen mit den Gleichungen 3.25 sowie den Energie-, Geschwindigkeitsund Impulsrelationen gilt:

$$\Delta p_{z,P} = \frac{Q - \sum_{j=1}^{n_T + n_P} E^f_{kin,e_j} - E^f_{kin,Rec}}{v^i_P} + \frac{(n_c - n_P) m_e}{2} v^i_P \quad . \tag{3.27}$$

Im Falle der größten gemessenen Rückstoßionenimpulse ist die kinetische Energie  $E_{kin,Rec}^{f}$ <0,1 eV. Der Q-Wert beträgt mehrere 10 eV und selbst der Unterschied zwischen der M- und N-Schale im He<sup>+</sup>-Ion - der experimentell nicht aufgelöst werden kann - beträgt immer noch rund 2,6 eV. Daher kann die kinetische Energie des Rückstoßions im Ausgangskanal vernachlässigt werden.

$$\Delta p_{z,P} = \frac{Q - \sum_{j=1}^{n_T + n_P} E_{kin,e_j}^f}{v_P^i} + \frac{(n_c - n_P) m_e}{2} v_P^i \quad . \tag{3.28}$$

In der nun vorliegenden Form ist diese Gleichung in den meisten einschlägigen Werken zur Ion-Atom-Stoßphysik [RDoe00a] zu finden. Außerdem ist leicht zu erkennen, dass die gesamte Energie, die in Q benötigt bzw. freigesetzt wird, der Energie des Projektils entzogen bzw. zugeführt werden muss. Die gesamte Energie, die das Projektil besitzt, steckt in der Projektilgeschwindigkeit  $v_P$ , welche gleichzeitig die z-Achse definiert ( $v_P=v_{z,P}$ ). Als Folge dessen wird das Projektil entweder beschleunigt oder abgebremst.

#### 3.2 Impuls des Rückstoßions

Die Messung der Anderung des Projektilimpulses ist eine schwer zugängliche Observable. Mit Hilfe der Impulserhaltung können aus der Änderung des Projektilimpulses in Strahlrichtung wichtige Informationen über das Verhalten des Rückstoßions gewonnen werden. Es gilt:

$$\begin{pmatrix} p_x^i \\ p_y^i \\ p_z^i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{x,P}^i \\ p_{y,P}^i \\ p_{z,P}^i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_{x,T}^i \\ p_{y,T}^i \\ p_{z,T}^i \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} p_{x,E}^f \\ p_{y,E}^f \\ p_{z,E}^f \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_{x,Rec}^f \\ p_{y,Rec}^f \\ p_{z,Rec}^f \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n_T+n_P} p_{x,e_j}^f \\ \sum_{j=1}^{n_T+n_P} p_{y,e_j}^f \\ \sum_{j=1}^{n_T+n_P} p_{z,e_j}^f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_x^f \\ p_y^f \\ p_z^f \end{pmatrix} \quad . \tag{3.29}$$

Der Anfangszustand des Targetatoms sieht nach der bereits in Unterkapitel 2.4 beschriebenen Präparierung in vektorieller Form wie folgt aus:

$$\vec{p_{T}} = \begin{pmatrix} 0\\ m_{T}v_{Jet}\\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{3.30}$$

Aus der Impulserhaltung (3.29) sowie der Longitudinalimpulsverteilung des Projektils (3.28) gilt für den Impuls des Rückstoßions in Strahlrichtung zunächst:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q}{v_{P}^{i}} + \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} \left(\frac{E_{kin,e_{j}}^{f}}{v_{P}^{i}} - p_{z,e_{j}}^{f}\right) + \frac{(n_{P}-n_{c})m_{e}}{2}v_{P}^{i}$$
(3.31)

Aufgrund der vorherrschenden Rotationssymmetrie um die Strahlachse bieten sich sphärische Koordinaten an.  $\phi_{z,P}$  ist der Azimutalwinkel und  $\theta_{z,P}$  der Polarwinkel gemessen zur z-Achse. Dieser spezielle Polarwinkel wird als *Projektilstreuwinkel*  $\theta_P$  bezeichnet (siehe Abbildung 3.1). Zusammen mit der Initialisierung des Targets (3.30) gilt für die Impulskomponenten des Rückstoßions senkrecht zur Strahlachse  $p_{x,Rec}^f$  und  $p_{y,Rec}^f$ :

$$p_{x,Rec}^{f} = -\left(p_{x,E}^{f} + \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} p_{x,e_{j}}^{f}\right)$$
$$= -\left(m_{P}v_{P}^{i}\sin\theta_{z,P}\cos\phi_{z,P} + \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} p_{x,e_{j}}^{f}\right)$$
(3.32)

$$p_{y,Rec}^{f} = -\left(p_{y,E}^{f} + \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} p_{y,e_{j}+p_{Jet}}^{f}\right)$$
$$= -\left(m_{T}v_{Jet} + m_{P}v_{P}^{i}\sin\theta_{z,P}\sin\phi_{z,P} + \sum_{j=1}^{n_{T}+n_{P}} p_{y,e_{j}}^{f}\right) \quad .$$
(3.33)

Gut zu erkennen ist in Gleichung 3.31, dass das Rückstoßion in z-Richtung seinen Impuls allein aus der Änderung der kinetischen Energie des Projektils erhält; sie spiegelt die Inelastizität des Systems wider. Die Änderung der kinetischen Energie des Projektils resultiert wiederum aus dem Q-Wert sowie aus der Energie emittierter Elektronen.

Da die Änderung der kinetischen Energie ebenfalls zu einer Impulsänderung führt und dieser Impuls ausgeglichen werden muss, ist das *Rückstoß*ion das einzig mögliche Teilchen, das diesen kompensieren kann. Die Longitudinalund die Transversalkomponenten entkoppeln vollständig voneinander, sowohl für das Rückstoßion wie auch schon zuvor für das Projektil. Während die Longitudinalkomponente (z) die Gesamtenergiebilanz darstellt, sind die Transversalkomponenten ein Maß für den Stoßparameter (den minimalen Abstand zwischen Projektil und Rückstoßion während der Kollision).

Den Term der kinetischen Elektronenenergie ausgeschrieben, ergibt sich aus Gleichung 3.31:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q}{v_{P}^{i}} - \frac{(n_{c} + n_{P}) m_{e} v_{P}^{i}}{2} + \sum_{j=1}^{n_{T} + n_{P}} \left( \frac{m_{e} v_{x,e_{j}}^{f^{2}} + m_{e} v_{y,e_{j}}^{f^{2}} + m_{e} v_{z,e_{j}}^{f^{2}}}{2v_{P}^{i}} - m_{e} v_{z,e_{j}}^{f}} \right) \quad .$$
(3.34)

Erweitert man nun noch den Term  $m_e v_{z,e_j}^f$  um  $2v_P^i$  und führt eine quadratische Ergänzung durch, so kann Gleichung 3.34 folgendermaßen geschrieben werden:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q}{v_{P}^{i}} - \frac{(n_{c} + n_{P}) m_{e} v_{P}^{i}}{2} + \sum_{j=1}^{n_{T+n_{P}}} \left( m_{e} v_{x,e_{j}}^{f^{2}} + m_{e} v_{y,e_{j}}^{f^{2}} + m_{e} \left( v_{z,e_{j}}^{f} - v_{P}^{i} \right)^{2} \right) + \frac{m_{e} v_{P}^{i}}{2} \quad . \quad (3.35)$$

Der Summenterm entspricht der kinetischen Energie des Elektrons im Projektilsystem  $E_{kin,e_i}^{f,\Sigma'}$ .

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q}{v_{P}^{i}} - \frac{(n_{c} + n_{P} + 1)m_{e}v_{P}^{i}}{2} + \sum_{j=1}^{n_{T+n_{P}}} E_{kin,e_{j}}^{f,\Sigma'} \quad .$$
(3.36)

Alternativ kann Gleichung 3.31 noch in einer anderen Form dargestellt werden. Wie zuvor schon erläutert, kann der Q-Wert in seine verschiedenen Beiträge  $Q_c$ ,  $Q_{Rec}$  und  $Q_P$  aufgeteilt werden (3.7). Zweckmäßig ist es außerdem, die Ionisation des Projektils nicht wie bisher im Labor-, sondern in einem mit dem Projektil mitbewegten System  $\Sigma'$  zu betrachten. Es gilt:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q_{c}}{v_{P}^{i}} - \frac{n_{c}m_{e}v_{P}^{i}}{2} + \sum_{j=1}^{n_{T}} \left(\frac{E_{kin,e_{j}}^{f} - E_{Bdg,e_{j}}^{i}}{v_{P}^{i}} - p_{z,e_{j}}^{f}\right) + \sum_{j=1}^{n_{P}} \left(\frac{E_{kin,e_{j}}^{f,\Sigma'} - E_{Bdg,e_{j}}^{i}}{v_{P}^{i}}\right)$$

Die ersten beiden Terme entsprechen der für den Elektronentransfer erforderlichen Impulsänderung, die das Rückstoßion kompensieren muss. Der erste beschreibt den Energieverlust des Projektils, um die Bindungsenergiedifferenzen zu kompensieren, während der zweite Term die Elektronen auf Projektilgeschwindigkeit beschleunigt. Der dritte Term entspricht der Target- und der vierte der Projektilionisation. In dieser Form ist diese Gleichung in zahlreichen Veröffentlichungen zu finden [TWeb97, VMer97, KKha98, FAfa01]. Einige interessante Spezialfälle werden im Folgenden kurz erläutert und ihre Auswirkungen diskutiert.
# 3.2.1 Elektronentransfer in das Projektil

Der Elektroneneinfang<sup>3</sup> stellt eine wichtige Reaktion dar. Nicht nur weil ein großer Teil der Rückstoßioneneichung darauf beruht, sondern auch weil es sich um einen grundlegenden Prozess handelt (siehe Unterkapitel 5.1). Im Ausgangskanal der Reaktion P<sup>q+</sup> + T  $\rightarrow E^{(q-n_c)+}$  + Rec<sup> $n_c+$ </sup> liegen lediglich zwei freie Teilchen, Ejektil und Rückstoßion, vor:

$$\vec{p}_{Rec}^{f} = \begin{pmatrix} p_{x,Rec}^{f} \\ p_{y,Rec}^{f} \\ p_{z,Rec}^{f} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} p_{x,E}^{f} \\ p_{y,E}^{f} \\ p_{z,E}^{f} \end{pmatrix} = -\vec{p}_{E}^{f} \quad .$$
(3.37)

Spätestens an dieser Stelle wird deutlich, dass das Projektil zwar insgesamt abgebremst wird, jedoch durch die zusätzliche Masse des eingefangenen Elektrons sein Gesamtimpuls vergrößert wird. Der Impuls des Rückstoßions reflektiert diese Impulsänderung des Projektils. Energieverlustmessungen des Projektils selbst sind aus diesem Grunde nicht mehr erforderlich. Stattdessen können die Energieeigenwerte von Projektil und Target aus der Kinematik des Rückstoßions bestimmt werden - besonders bei relativistischen Schwerionenstößen mit sehr viel höherer Auflösung. Für den n-fachen Elektroneneinfang gilt nach Gleichung 3.37, 3.33 und 3.32 für den Endzustand des Rückstoßions (siehe auch Abbildung 3.1):

$$\vec{p}_{Rec}^{f} = \begin{pmatrix} p_{x,Rec}^{f} \\ p_{y,Rec}^{f} \\ p_{z,Rec}^{f} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -m_{P}v_{P}^{i}\theta_{z,P}\cos\phi_{z,P} \\ -m_{Rec}v_{Jet} + m_{P}v_{P}^{i}\theta_{z,P}\sin\phi_{z,P} \\ -\frac{Q_{c}}{v_{P}^{i}} - \frac{n_{c}m_{e}v_{P}^{i}}{2} \end{pmatrix}$$

$$(3.38)$$

Das transferierte Elektron kann in den Grund- oder einen angeregten Zustand eingefangen werden. Gleichzeitig können während des Stoßprozesses weitere Target- bzw. Projektilelektronen in höhere Schalen angeregt werden. Genau wie  $Q_c$ , welcher die Energieeigenwerte von Projektil und Target beinhaltet und nur diskrete Werte annehmen kann, ist auch der damit verknüpfte Rückstoßionenlongitudinalimpuls ( $p_{z,Rec}$ ) diskretisiert.

Anhand des Abstands der Linien kann eine lineare Impulseichung vorgenommen werden. Der Abstand der Linien in Millimetern bzw. Kanälen auf dem Detektor wird direkt einem nach der Energiebilanz  $Q_c$  berechneten Impulsabstand  $\Delta p_{z,Rec}$  zugeordnet. Für den Fall, dass kein weiteres Elektron angeregt

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Der Elektroneneinfang, englisch: Capture wird auch als Elektronentransfer bezeichnet, da Elektronen von einem Atom/Ion zu einem anderen transferiert werden. Entsprechend wird der Ein-Elektronentransfer als Single Capture (SC) und der Transfer zweier Elektronen als Double Capture (DC) bezeichnet.

wird, und nur eine einzige Linie zur Kalibrierung zur Verfügung steht, hilft auch die Verwendung eines anderen Projektils oder eine deutliche Variation der Einschussenergie. Die Breite der Linien ist ein Maß für das Auflösungsvermögen des Spektrometers. Die beiden transversalen Komponenten (x/y) stehen für den Stoßparameter und reflektieren u. a. das nukleare Streuverhalten von Projektil und Target.

# **3.2.2** Ionisation des Targets

Gleichung 3.37 vereinfacht sich für die reine  $n_{Rec}$ -fache Ionisation des Targets zu:

$$p_{z,Rec}^{f} = \sum_{j=1}^{n_{T}} \left( \frac{E_{kin,e_{j}}^{f} - E_{Bdg,e_{j}}^{i}}{v_{P}^{i}} - p_{z,e_{j}}^{f} \right) \quad .$$
(3.39)

Im Grenzfall niedriger Elektronenbindungsenergien und hoher Einschussgeschwindigkeiten kompensiert die Longitudinalkomponente des Rückstoßionenimpulses die Summe der Elektronenlongitudinalimpulse und ist daher ein gutes Maß für die Bestimmung deren Energie. Es gilt:

$$p_{z,Rec}^f = -\sum_{j=1}^{n_T} p_{z,e_j}^f$$
 (3.40)

In der gerade skizzierten Näherung erlitte das Projektil nahezu keinen Impulsverlust in seiner Longitudinalkomponente. Die Fragmente (Elektron und Rückstoßion) würden - ähnlich der Photoionisation - in entgegengesetzte Richtungen emittiert [LSpi95, RDoe96a, MAch99, ACza04a]. Hierbei besitzt das das Rückstoßion exakt den inversen Impuls des emittierten Elektrons, da das Photon zwar Energie, aber einen vernachlässigbar geringen Impuls transportiert. Bei sehr schnellen Stößen mit hochgeladenen Ionen konnte dieser Befund experimentell bestätigt werden [RMos94, JUll95, RMos96c]. Mehr zu diesem Punkt später in Unterkapitel 4.3.4.

Im Gegensatz zur Photoionisation, bei der die Elektronen entlang der Polarisationsrichtung emittiert werden und eine Spiegelsymmetrie vorliegt, werden bei schnellen Schwerionenstößen die meisten Elektronen in Vorwärtsrichtung emittiert. Hauptgrund hierfür sind sog. "Post Collision Interaction" (PCI) Effekte. Das weiterhin (hoch)geladene Projektil zieht mit seinem positiven (für Elektronen attraktiven) Potenzial die Elektronen hinter sich her. Je größer die Ladung und/oder geringer die Geschwindigkeit des Projektils sind, desto stärker sind diese Störeffekte. Einen Sonderfall stellt der Einfang eines Elektrons in einen Kontinuumszustand (ECC = Electron Capture to the Continuum) des Projektils dar. Während auf der einen Seite ein freies Elektron entsteht, besitzt das Elektron aber eine diskrete Geschwindigkeit, nämlich die des Projektils. Dieser Prozess wird auch als  $Cusp^4$  bezeichnet und die Elektronen als Konvoi-Elektronen (siehe Unterkapitel 4.3.2). Da das Elektron ähnlich dem direkten Einfang in einem gebundenen Zustand mit dem Projektil fliegt, sind dessen transversale Komponenten zu vernachlässigen. Gleichung 3.37 vereinfacht sich dann zu:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q_{c}}{v_{P}^{i}} + \frac{p_{z,e}^{f^{2}}}{2v_{P}^{i}} - p_{z,e}^{f} \quad .$$
(3.41)

Ein in einem Kontinuumszustand gebundenes Elektron bewegt sich mit demselben Geschwindigkeitsvektor wie das Projektil fort. Für  $p_{z,e}^f = v_P^i$  wird dann der Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}^f$  darüber hinaus minimal. Im Projektilsystem gemessen besitzt das Elektron die kinetische Energie Null. Diese scharfe kinematische Grenzlinie wird als Cusp-Kante bezeichnet. Rückstoßionen, die in einer Ionisation entstehen, können keinen kleineren Impuls in Projektilstrahlrichtung besitzen, als es durch den Cusp möglich wäre. Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens dieses Prozesses ist sehr stark von der Projektilgeschwindigkeit sowie dem Targetpotenzial abhängig und dominiert bei niedrigen Geschwindigkeiten.

# 3.2.3 Ionisation des Projektils (loss)

Im Falle einer ausschließlich  $n_P$ -fachen Ionisation des Projektils vereinfacht sich Gleichung 3.37 zu:

$$p_{z,Rec}^{f} = \sum_{j=1}^{n_{P}} \left( \frac{E_{kin,e_{j}}^{f,\Sigma'} - E_{Bdg,e_{j}}^{i}}{v_{P}^{i}} \right) \quad .$$
(3.42)

Ahnlich der Targetionisation ist es auch bei der Projektilionisation aus der Kenntnis der Bindungsenergien und des gemessenen Rückstoßionenlongitudinalimpulses möglich auf die Summenenergien aller emittierten Elektronen rückzuschließen, bzw. im Umkehrschluss kann durch Messung der Elektronenenergien wiederum der Q-Wert bestimmt werden.

 $<sup>^4</sup>$  Cusp aus dem englischen für Horn, nach der charakteristischen Form der Elektronenengieverteilung.

# 3.2.4 Transferionisation

Die Transferionisation (TI) ist Hauptuntersuchungsgegenstand der durchgeführten Experimente, obgleich sie eine Kombination zweier zuvor schon erläuterter Prozesse darstellt. Es gilt allgemein:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q_{c}}{v_{P}^{i}} - \frac{n_{c}m_{e}v_{P}^{i}}{2} + \sum_{j=1}^{n_{T}} \left(\frac{E_{kin,e_{j}}^{f} - E_{Bdg,e_{j}}^{i}}{v_{P}^{i}} - p_{z,e_{j}}^{f}\right) \quad .$$
(3.43)

Im Spezialfall eines Zweielektronenatoms, wie des Heliums, bei dem ein Elektron eingefangen ( $n_c$ =1) und das zweite emittiert wird ( $n_T$ =1,  $n_P$ =0), gilt:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q}{v_{P}^{i}} - m_{e}v_{P}^{i} + \frac{E_{kin,e}^{f,\Sigma'}}{v_{P}^{i}} \quad .$$
(3.44)

Diese Gleichung beschreibt eine Parabel, welche ähnlich des Cusps eine kinematische Grenze darstellt. In diesem Falle bilden Elektronen- und Rückstoßionen-z-Impuls gemeinsam diese Grenze aus. Weiteres zu den einzelnen Prozessen und deren Konsequenzen wird im nächsten Kapitel (4) genauer beleuchtet. Zusammenfassend soll jedoch festgehalten werden, dass allein aus der Messung des Rückstoßionenlongitudinalimpulses  $p_{z,Rec}^{f}$  sehr viele Aussagen über die Art der Reaktion und die Energieeigenwerte gemacht werden können.

"Eine innere Stimme sagt mir, dass das doch nicht der wahre Jakob ist. Die Theorie liefert viel, aber dem Geheimnis des Alten bringt sie uns kaum näher."

(Albert Einstein - in einem Brief an Max Born)

# 4. Physikalischer Hintergrund

Im ersten Teil dieses Kapitels wird sich vor allem der Frage gewidmet, wie der Stoßprozess theoretisch beschrieben werden kann. Der zweite Teil beschäftigt sich mit der Frage, wie der Stoßprozess anschaulich abläuft. Dabei stehen die zwei wichtigsten atomphysikalischen Prozesse für Ion-Atom-Stöße im Vordergrund. Wie wird ein Elektron von einem Atom zu einem geladenen Teilchen transferiert? Was sind die Mechanismen, die ein gebundenes Elektron ins Kontinuum befördern?

In der allgemeinen atomphysikalischen Terminologie haben sich die Begriffe "schnelle und langsame Stöße" bzw. "niedrige und hohe Stoßgeschwindigkeiten" etabliert. Mittlere Stoßgeschwindigkeiten liegen vor, wenn die Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  gleich der klassischen Elektronenorbitalgeschwindigkeit  $v_{B,e}$  des Targets ist [HMas74, DBat78]. Fliegt das Projektil langsamer als  $v_{B,e}$ , handelt es sich um einen langsamen Stoß und umgekehrt bei  $v_P \gg v_B$ , e liegt ein schneller Stoß vor.

Die untersuchten Stoßsysteme erstrecken sich mit einer Projektilenergie von 40 keV/u bis 630 keV/u über einen weiten Energiebereich. Damit gehen stark unterschiedliche Wechselwirkungszeiten und Störungen des Projektil- und Targetsystems einher. Mit H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> wurden die drei einfachsten Projektile gewählt. Dennoch stellt das im He<sup>+</sup> befindliche Elektron ein weiteres zu berücksichtigendes, fünftes Teilchen dar. Schon das Dreikörperproblem ist weder klassisch noch in der Quantenmechanik analytisch lösbar. Zu dessen Lösung müssen stets Näherungsverfahren angewandt werden. Jedes weitere am Stoßprozess beteiligte Teilchen Theorien zu bevorzugen. Durch den Vergleich zwischen einer auf der Quantenmechanik basierenden Theorie und einer klassischen Theorie können weitere grundlegende Fragen beantwortet werden.

Zum einen gibt es Prozesse, die nur bei langsamen oder nur bei schnellen Stößen auftreten. Zum anderen existieren einige Mechanismen, die unabhängig von den Stoßpartnern oder der Geschwindigkeit zu gleichen oder zumindest ähnlichen Strukturen führen. Einige der noch zu beschreibenden Prozesse sind in ihrer Grundsätzlichkeit nicht auf die Atomphysik beschränkt. So ist der Einfang-Prozess auch für die Kernphysik, die Astronomie oder die Chemie von hochgradigem Interesse. Die Entstehung des astronomischen Systems "Erde-Mond" kann verglichen werden mit dem Elektronentransfer in gebundene Projektilzustände [RSha79]. In Kapitel 4.1 werden zunächst die drei theoretischen Ansätze näher erläutert:

- 1. Der klassische Ansatz im Rahmen der CTMC-Theorie (siehe Unterkapitel 4.1.1).
- 2. Die störungstheoretische Beschreibung des quantenmechanischen Stoßes in Unterkapitel 4.1.2.
- 3. Die exakte Lösung der elektronischen Schrödingergleichung durch gekoppelte Kanalrechnungen (siehe Unterkapitel 4.1.3).

# 4.1 Theoretische Grundlagen

Die Anregung von Target- und Projektilelektronen, die Ionisation und der Elektronentransfer sind Prozesse, die ausschließlich durch Coulombwechselwirkung zwischen Projektil- und Targetsystem verursacht werden. Von einer guten Theorie wird nicht nur erwartet, dass sie die totalen Wirkungsquerschnitte korrekt widerspiegelt; auch differenzielle Wirkungsquerschnitte wie beispielsweise der Streuwinkel des Projektils oder Energie- und Winkelverteilungen emittierter Elektronen sollten mit experimentellen Daten übereinstimmen. Vor allem die Frage, wie exakt der Wechselwirkungsprozess selbst beschrieben wird, unterscheidet die Theorien. Die klassische CTMC-Theorie (Classical Trajectory Monte Carlo) enthält weder Tunnel- noch Interferenzeffekte, dafür beliebig viele Wechselwirkungen. Bei den quantenmechanischen Theorien hängt die verwandte Näherung in erster Linie von der Ladung  $Z_P$ und der Geschwindigkeit  $v_P$  des Projektils ab. Zwar ist die Art der Wechselwirkung (elektromagnetisch) exakt bekannt, jedoch nicht, wie häufig die beteiligten Teilchen miteinander in Wechselwirkung treten. Beispielsweise kann sich das Elektron nach der Ionisation nicht kräftefrei bewegen, sondern spürt weiterhin das langreichweitige Coulombpotenzial der Ionenrümpfe von Projektil und Target. Vor allem bei langsamen Stößen ist dies von entscheidender Bedeutung. Ein grober Überblick, welches Näherungsverfahren die wahrscheinlich beste Beschreibungsmöglichkeit darstellt, ist in Abbildung 4.1 skizziert. Entsprechend dieser Abbildung ändert sich auch die Art der Dynamik des Stoßes selbst. Bei langsamen Stößen liegen im wesentlichen adiabatische (molekulare) Prozesse vor. Umgekehrt sind schnelle Prozesse generell diabatischer Natur.



**Abbildung 4.1:** Gültigkeitsbereich verschiedener theoretischer Beschreibungsmöglichkeiten in Abhängigkeit von Projektil-/Targetkernladung und Stoß-/klassischer Elektronengeschwindigkeit (in der K-Schale)  $v_B$  nach [DMad75]. MO: Molekül-Orbital-Theorie; SCA: Semi Classical Approximation; PWBA: Plane Wave Born Approximation.

Schon bei der Untersuchung von Helium, dem einfachsten atomaren Mehrteilchensystem, muss der Anfangszustand genähert werden. Bei Prozessen, die nur einen Einteilchenübergang (z. B. Einfachionisation) erfordern, wird häufig nur ein Elektron in einem effektiven Zentralpotenzial berücksichtigt. Entsprechend unterscheiden sich viele Theorien in der Beschreibung des Anfangszustandes, wie genau Mehrelektronensysteme modelliert werden und Korrelationseffekte eine Rolle spielen. Speziell auf diesen Punkt wird in Unterkapitel 4.1.5 kurz eingegangen.

# 4.1.1 Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC)

Klassische Rechnungen atomphysikalischer Streuexperimente, wie z. B. des Thomas-Prozesses [LTho27] oder allgemeiner der Ionisation, des Transfers und der Anregung von Elektronen [JTho12], existieren teilweise länger als die Quantenmechanik selbst. Aber im Gegensatz zu diesen Theorien basiert die CTMC-Methode [MGry65a, MGry65b, JGar68b] - wie der Name schon sagt - auf der Berechnung der Teilchenbahnen nach den Gesetzen der klassischen Physik (Newtonsche Mechanik, Elektrodynamik) mit einer genäherten quantenmechanischen Anfangszustandsverteilung. Zwei Näherungen liegen der CTMC-Theorie zugrunde. Die "klassische Näherung" besagt, dass alle Teilchen während des Stoßprozesses ausschließlich der Newtonschen Mechanik und der Coulombkraft unterliegen. Quantenmechanische Prozesse wie z. B. der Tunnel-Effekt, der Shake-off oder alle Interferenzeffekte können von der CTMC-Theorie nicht reproduziert werden. Während gekoppelte Kanal-Rechnungen bei größeren Störungen immer mehr Kanäle hinzunehmen müssen, um gute Resultate zu liefern und störungstheoretische Ansätze noch nicht gültig sind, kann diese Lücke bei gleichbleibendem Rechenaufwand durch Monte Carlo Rechnungen gut gefüllt werden [ROls83].

Die CTMC-Methode ist so allgemein gültig, dass sich mit ihr Ionisations-, Elektronentransfer- und Anregungsprozesse [RAbr66, AWet86, LMen89] simultan beschreiben lassen. Auch die Wechselwirkung von Atomen mit Lichtfeldern [ASta05], chemische Reaktionen [FWal61, DBun71], vom Prinzip her auch astronomische Probleme wie die Entwicklung der Milchstraße und vieles mehr lässt sich mit diesen Grundlagen beschreiben. Um der quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Teilchen Rechnung zu tragen, wird eine große Anzahl zufällig ausgewählter Anfangszustände (Startort und -impuls) verwendet [ROls87b, DSch92]. Eine Erweiterung der CTMC-Theorie ist die für Mehrelektronensysteme geeignete nCTMC- oder auch nbody-CTMC-Theorie [ROls77, ROls97]. In der Regel werden die Elektronen als unabhängige, nicht miteinander wechselwirkende Teilchen angenommen (IEA = Independent Electron Approximation) [JHan72, JMcG77] oder es wird sogar nur ein aktives Elektron herausgegriffen.

Die anfängliche Phasenraumverteilung wird quantenmechanischen Rechnungen entnommen. Die Elektronen bewegen sich auf klassischen Keplerellipsen um den Atomkern. Zu jeder einzelnen Anfangsbedingung wird die zeitliche Entwicklung des Systems nach den Gesetzen der klassischen Mechanik numerisch berechnet. Die Beschreibung erfolgt in der Regel in Hamiltonscher Formulierung [CLun94], nach welcher der Zustand durch den 6dimensionalen Phasentrajektorie<sup>1</sup>:

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Die Punkte des Phasenraumes werden als Phasenpunkte oder Phasen des Systems bezeichnet. Die Bewegung des Systems wird durch die Phasenraumtrajektorie/-vektor beschrieben.



**Abbildung 4.2:** Anfangszustandsverteilung der Elektronen im Heliumatom im Orts- (links) bzw. Impulsraum (rechts) [CRei86]

$$\vec{\pi}(t) = (x(t), y(t), z(t), p_x(t), p_y(t), p_z(t))$$
(4.1)

zu einem beliebigen Zeitpunkt vollständig charakterisiert ist [RJel95], hier in kanonisch konjugierter Darstellung. Ein weiteres Problem ist die klassisch nichtexistente Grundzustandsenergie. Elektronenanfangszustände mit mehreren Elektronen, die aus Experimenten oder aus quantenmechanischen Rechnungen bestimmt wurden, können bei Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung zur Autoionisation führen. Darauf muss insbesondere bei der Initialisierung besonders geachtet werden. Das Problem der autoionisierenden Zustände kann z. B. durch die Einführung eines abgeschirmten Kernpotenzials gelöst werden [HFol94]. In der dCTMC-Methode, wobei das **d** für *dynamical screening* steht, wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt. Die attraktive Kraft des Kernpotenzials wird durch ein abgeschirmtes Potenzial  $(1/r_{12}$ -Potenzial) ersetzt, welches von der gegebenen Position der Elektronen abhängt (Radialkorrelation) [VMon89]. Die zeitliche Konstanz der Phasenraumdichte (statisches Ensemble), welche für den Anfangszustand benötigt wird, erhält man durch die Bedingung:

$$\hat{H}(\vec{\pi}) = E_0 \tag{4.2}$$

und bezeichnet sie als mikrokanonische Verteilung<sup>2</sup>. Ebenfalls zu berücksichtigen ist, dass die "generierte" Elektronenanfangszustandsverteilung sphärisch symmetrisch ist. Die zeitliche Entwicklung des Systems nach den Gesetzen der klassischen Newtonschen Mechanik lässt sich mit Hilfe der Evolu-

 $<sup>^2</sup>$  Ein mikrokanonisches Ensemble für einen konstanten Hamiltonian ist ebenfalls stationär in der Zeit.

tionsgleichung und dem bereits in Gleichung 4.1 definierten Phasenraumvektor  $\vec{\pi}$ , beschreiben [RJel93]. In kanonisch konjugierter Form lautet diese:

$$\dot{\vec{\pi}} = -\{H, \vec{\pi}\}$$
 . (4.3)

Für das Stoßsystem He<sup>2+</sup>+He ist die Hamiltonfunktion gegeben durch:

$$H = \frac{Z_T Z_P}{|r_P - r_T|} - \frac{Z_P}{|r_{e1} - r_P|} - \frac{Z_P}{|r_{e2} - r_P|} - \frac{Z_T}{|r_{e1} - r_T|} - \frac{Z_T}{|r_{e2} - r_T|} + V_{e12} (r_{e1}, r_{e2}) + \frac{p_T^2}{2m_T} + \frac{p_P^2}{2m_P} + \frac{p_{e1}^2 + p_{e2}^2}{2m_e}$$
(4.4)

mit Z der Kernladungszahl von Projektil  $_P$  und Target  $_T$ , p den Impulsen und r den Koordinaten von Projektil, Target, Elektron 1 und Elektron 2,  $m_{P,T}$ der Masse von Projektil/Target und V dem abgeschirmten Coulombpotenzial zwischen den beiden Elektronen [HFol94].

Das Projektil startet in ausreichend großem Abstand zum Target und fixem Stoßparameter b, sodass die Wechselwirkung zwischen ihnen vernachlässigbar klein ist. Die Bewegungsgleichungen werden numerisch nach verschiedenen Näherungsverfahren gelöst und erst unter bestimmten Bedingungen abgebrochen, beispielsweise, falls der Beitrag zur Wechselwirkung eine gewisse Grenze unterschreitet oder der Abstand zwischen Projektil und aller Fragmente mehr als 1000.b beträgt. Eingefangen wurde ein Elektron z. B., sobald es über einen Zeitraum von vielen Iterationsschritten noch das attraktive Potenzial des Projektils spürt und sich die ausgeübte Kraft nicht ändert [RAbr66]. Das im Endzustand im Projektil gebundene Elektron muss dann noch diskretisiert werden; gewählt wird der quantenmechanisch nächste zulässige Energieeigenwert. Hinzu kommen weitere Abbruchvorschriften wie beispielsweise, dass sich die Numerik innerhalb eines festgesetzten Fehlerrahmens befindet. In den Anfängen der CTMC-Rechnungen, als die Computerleistungen sehr begrenzt waren, wurden nur sehr wenige Stoßparameter berechnet und dann zwischen ihnen interpoliert. Heutzutage jedoch kann darauf verzichtet werden und der Stoß wird für sehr viele Stoßparameter b berechnet. Neben totalen Wirkungsquerschnitten können bei ausreichender Statistik von der CTMC-Theorie auch multi differenzielle Ergebnisse sehr leicht erzeugt werden [TBon71, GSch87].

Da in CTMC-Theorien nahezu beliebig viele Wechselwirkungen betrachtet werden, unterscheiden sie sich meistens vor allem im Anfangszustand des Targets. Besonders wichtig ist dies bei Mehrelektronensystemen und deren Näherung. Die absoluten Wirkungsquerschnitte für die wichtigsten Reaktionen, Elektroneneinfang und Ionisation im Proton-Helium-Stoßsystem vor allem im mittleren Energiebereich konnten gut reproduziert werden [DSch88]. Gleiches gilt auch für den resonanten Zweielektronentransfer im He<sup>2+</sup>-He-Stoß [LMen87, KTok96]. Der totale Wirkungsquerschnitt für den Elektroneneinfang aus atomarem Wasserstoff in nackte Projektilionen skaliert nach [KBer78, RPha78, KBer81] über einen großen Energiebereich mit:

$$\sigma_{Capture,H} \propto \frac{q^3}{E^{4,5}} \quad . \tag{4.5}$$

Die modernsten heute zur Verfügung stehenden CTMC-Theorien beinhalten ein zeitabhängiges, abgeschirmtes Hartree Fock Potenzial, welches die Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigt und sich dynamisch während des Stoßes ändert, um Mehrelektronenprozesse sowie Postcollision-Effekte gut zu beschreiben [VMon89, CWoo97].

# 4.1.2 Störungstheoretische Beschreibung

Störungstheoretische Beschreibungen sind um so erfolgreicher, je kleiner die Störung des Gesamtsystems durch das Projektil ist. In diesen Fällen zeigt sich der Anfangszustand des Systems besonders deutlich in den Observablen. Der Folgende Formulierung der Störungstheorie nicht auf einen Spezialfall wie beispielsweise Ionisation oder Elektroneneinfang fixiert, sondern allgemein gültigem Charakter. Weitere Details sind z. B. in [MMcD70, RJel84, RJel93, DFis03, WNol03] zu finden. Die Schrödingergleichung - Ausgangspunkt einer nichtrelativischen, quantenmechanischen Beschreibung mit vernachlässigtem Spin - legt die Eigenzustände des Systems fest. Daraus lässt sich die Übergangswahrscheinlichkeit vom Anfangs- in den Endzustand berechnen. Der Hamiltonoperator H des vollständigen Systems wird aufgespalten in:

$$H = H_0 + V \tag{4.6}$$

einen ungestörten Anteil  $H_0$  und eine Störung V. Im Endzustand gilt:  $H = H'_0 + V'$ . Für den Spezialfall einer reinen Ionisation besteht ist der ungestörte Anteil des Hamiltonoperators und der Störung gleich:

$$H'_0 = H_0$$
 bzw.  $V' = V$  . (4.7)

Der Hamiltonoperator des ungestörten Systems  $H_0$  entspricht dann der Summe der Hamiltonoperatoren des Projektils und des ungestörten Targets. Bei Elektronentransferprozessen gilt der Zusammenhang nach Gleichung 4.7 jedoch nicht mehr, sondern vielmehr  $H'_0 \neq H_0$  bzw.  $V' \neq V$ . Die Eigenzustände Esind gegeben durch die Schrödingergleichung mit den jeweiligen Eigenfunktionen  $|\psi\rangle$ ,  $|\phi\rangle$  und  $|\phi'\rangle$ :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{4.8}$$

$$H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{4.9}$$

$$H_0'|\phi'\rangle = E|\phi'\rangle$$
 . (4.10)

Die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung sind dann gegeben durch:

$$|\Psi\rangle = e^{-iEt}|\psi\rangle \tag{4.11}$$

$$|\Phi\rangle = e^{-iEt}|\phi\rangle \tag{4.12}$$

$$|\Phi'\rangle = e^{-iEt}|\phi'\rangle \quad . \tag{4.13}$$

Vor dem Stoß befindet sich das System im Anfangszustand  $|\Phi^i\rangle$  und ändert sich durch das einlaufende Projektil in den Zustand  $|\Psi^i(t)\rangle$ . Während des Stoßes kann die Störung V nicht vernachlässigt werden, weshalb  $|\Psi^i(t)\rangle$  nun Eigenzustand von H, dem vollständigen System, ist.  $|\Psi^i(t)\rangle$  ist dann eine Superposition aus Eigenzuständen des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$  bzw.  $H'_0$ . Projiziert man  $\lim_{t\to\infty} |\Psi^i(t)\rangle$  auf diesen Endzustand, erhält man die Wahrscheinlichkeit das System nach dem Stoß ( $t \to \infty$ ) im Endzustand  $|\Psi'^f\rangle$  zu finden. Der Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  dieser Reaktion ist proportional zum Quadrat des Übergangsmatrixelements  $A^{f,i}$ :

$$\sigma \propto \left(A^{f,i}\right)^2$$
 (4.14)

mit

$$A^{f,i} = \lim_{t \to \infty} \langle \Phi'^f | \Psi^i \rangle \quad . \tag{4.15}$$

Allerdings kann hieraus das Übergangsmatrixelement nicht berechnet werden, da die Phasen der Zustände (siehe die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung) ein nicht konvergierendes (oszillierendes) Integral enthalten. Gleichung 4.15 lässt sich unter der Bedingung, dass  $|\Psi'^{f}\rangle$  und  $|\Phi^{i}\rangle$ für  $t \to -\infty$  orthogonal sind, umformen in:

$$A^{f,i} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi'^f | \Psi^i \rangle \quad .$$
(4.16)

Daraus ergibt sich mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung das exakte Übergangsmatrixelement:

$$A^{f,i} = -2\pi i T^{f,i} \delta \left( E^f - E^i \right)$$
(4.17)

mit der post-Form:

$$T^{f,i} = \langle \phi'^f | V' | \psi^i_+ \rangle \quad . \tag{4.18}$$

Dabei bedeutet  $|\psi_{+}^{i}\rangle$ , dass dieser Zustand die Randbedingungen für die auslaufende Welle erfüllt bzw. sich aus dem Zustand  $|\phi^{i}\rangle$  entwickelt hat.  $T^{f,i}$  wird als T-Matrix oder Transfermatrix bezeichnet. Diese Herleitung lässt sich auch in zeitumgekehrter Form schreiben. Allerdings muss die zugehörige T-Matrix (4.18) dann in der *prior*-Form geschrieben werden:

$$T^{f,i} = \langle \psi^f_- | V | \phi^i \rangle \quad . \tag{4.19}$$

Hier muss  $\psi_{-}^{f}$  diesmal der Randbedingung der einlaufenden Welle genügen. Bei den Gleichungen 4.17 mit 4.18 und 4.19 handelt es sich um die **exakte** Lösung des Streuproblems. Allerdings können die Eigenzustände  $\psi_{+}^{i}$  und  $\psi_{-}^{f}$  des vollständigen Hamilton-Operators H nur mittels Näherungsverfahren bestimmt werden. Das bekannteste und älteste Näherungsverfahren, die Bornsche Näherung, wird im nächsten Abschnitt vorgestellt.

#### 4.1.2.1 Bornsche Näherung

Das nach Max Born benannte und von H. Bethe erweiterte Näherungsverfahren ist rund 80 Jahre alt und ist heute noch Grundlage der allermeisten Theorien zur atomaren Stoßphysik [MBor26, HBet30]. Obwohl nach Max Born benannt und scheinbar entwickelt, wurde das als 'Bornsche Näherung' bekannte Verfahren bereits 1881 von Lord Rayleigh eingeführt, damals als Näherungsverfahren für die Streuung elektromagnetischer Wellen [KMue02]. Voraussetzung für ihre gültige Anwendung ist, dass nur kleine Störungen betrachtet werden. Es handelt es sich dabei um eine stationäre Störungsrechnung. Das Stoßsystem kann dann in zwei Teilsysteme, das Projektil- und das Targetsystem, aufgeteilt werden, die beide vor und nach dem Stoß unabhängig voneinander sind. Der Hamiltonoperator lässt sich schreiben als:

$$H = H_P + H_T + V \tag{4.20}$$

mit dem Hamiltonoperator des freien Projektils  $H_P$ , dem ungestörten Target  $H_T$  sowie der Wechselwirkung zwischen Projektil und Target V, die gegeben ist durch:

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_{j} \frac{Z_P}{|\vec{r}_P - \vec{r}_{e_j}|}$$
(4.21)

mit den Kernladungszahlen von Projektil  $Z_P$  und Target  $Z_T$  und den Vektoren zum Projektil  $\vec{r}_P$  und den Elektronen  $\vec{r}_{e_j}$ . Betrachtet man das Projektil als ebene Welle, folgt, zusammen mit  $|\varphi\rangle$  dem Zustand des Targetelektrons, für die Eigenzustände des ungestörten Systems  $|\phi\rangle$ :

$$|\phi\rangle = |\varphi, \vec{p}_P\rangle = (2\pi)^{-3/2} \cdot e^{i\vec{p}_P \cdot \vec{r}_P} |\varphi\rangle \quad . \tag{4.22}$$

In der Bornschen Näherung wird zur Bestimmung des Zustandes  $|\psi_{\pm}\rangle$  eine Reihenentwicklung angewandt. Die Schrödingergleichung kann beispielsweise durch die Lippmann-Schwinger-Gleichung exakt gelöst werden:

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_{\pm}V|\psi_{\pm}\rangle \tag{4.23}$$

mit  $G_{\pm}$  dem freien Greenschen Operator [RJel84]:

$$G_{\pm} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \quad . \tag{4.24}$$

Verwendet man diesen Ausdruck als exakte Lösung der Schrödingergleichung, so lässt sie sich iterativ lösen. Aus Gleichung 4.24 lässt sich nun der Zustand  $\psi^i_{\pm}$  bestimmen bzw. in Form einer unendlichen Reihe darstellen:

$$|\psi_{\pm}^{i}\rangle = |\phi^{i}\rangle + G_{\pm}V|\phi^{i}\rangle + G_{\pm}VG_{\pm}V|\phi^{i}\rangle + G_{\pm}VG_{\pm}VG_{\pm}V|\phi^{i}\rangle \quad .$$
(4.25)

Setzt man diesen Ausdruck in die Transfermatrix (Gleichung 4.18 bzw. 4.19) ein, so erhält man die Bornsche Reihe:

$$T^{f,i} = \langle \phi^f | V | \phi^i \rangle + \langle \phi^f | V G_{\pm} V | \phi^i \rangle + \langle \phi^f | V G_{\pm} V G_{\pm} V | \phi^i \rangle + \dots \quad (4.26)$$

Anschaulich kann jeder Term einer weiteren Wechselwirkung (dem Austausch eines "virtuellen" Photons) zugerechnet werden. Diese Reihe entspricht einer Entwicklung nach den Potenzen der Störung  $\eta = Z_P/v_P$ . Sofern für die Störung  $\eta \ll 1$  gilt, konvergiert diese Reihe. Die Propagation zwischen den einzelnen Zwischenzuständen stellt der freie Greensche Operator  $G_{\pm}$  dar.

In vielen Fällen bricht man die Reihenentwicklung bereits nach dem ersten Term ab. Man spricht dann von der Bornschen Reihe in 1. Ordnung (FBA = **F**irst **B**orn **A**pproximation). Die Berücksichtigung nur des ersten Terms kann anschaulich als eine einzige Wechselwirkung zwischen Projektil und Target verstanden werden, beispielsweise dem direkten Elektronentransfer oder der Ionisation eines Targetelektrons durch ausschließliche Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron. Der Thomas-Prozess beispielsweise ist ein Prozess, der einer störungstheoretischen Beschreibung 2. Ordnung bedarf. Auch Prozesse, die einen oder mehrere Zwischenzustände erfordern, können auf diese Weise berücksichtigt werden. Wie viele Glieder hinzugenommen werden müssen, um das Experiment adäquat beschreiben zu können, hängt von den einzelnen Bedingungen (Stoßpartner und -geschwindigkeit) ab. Jedoch werden in der Regel nur Terme bis zur 2. Ordnung verwendet und auch hier treten bereits Probleme auf, die weitere Näherungen erfordern.

Der totale Wirkungsquerschnitt der meisten Reaktionen wird bereits durch eine Beschreibung in erster Ordnung gut wiedergegeben, während die Übereinstimmung in multi-differenziellen Daten häufig unzureichend ist. Allgemein lässt sich jedoch sagen: Je kleiner die Störung ist, desto weniger Ordnungen der Bornschen Reihe sind für eine gute theoretische Beschreibung notwendig. Die Bornsche Reihe gilt in ihrer oben beschriebenen Form sowohl für Elektronentransfer-, Anregungs- und Ionisationsprozesse bzw. Kombinationen daraus. Allerdings unterscheidet sich je nach Fragestellung der Hamiltonoperator und es muss gegebenenfalls das auslaufende Elektron berücksichtigt werden.

Das Übergangsmatrixelement eines Ionisationsprozesses, beschrieben in erster Ordnung, ist gemeinsam mit dem Wechselwirkungspotenzial V aus Glei-

chung 4.21 sowie der Beschreibung des Eigenzustandes aus Gleichung 4.22 gegeben durch:

$$T_{FBA}^{f,i} = \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi^f \left| Z_T - \sum_j e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{e_j}} \right| \varphi^i \right\rangle$$
(4.27)

mit q bzw.  $\vec{q}$  dem Impulsübertrag vom Projektil auf das Target. Der Term  $Z_T$  entspricht dem 1/R-Anteil des Störoperators bzw. der Kern-Kern-Wechselwirkung. Wie man leicht sieht, sind Anfangs-  $|\varphi^i\rangle$  und Endzustand  $|\varphi^f\rangle$  Eigenzustände desselben Hamiltonoperators  $H_T$  und in Ionisationsprozessen orthogonal. Daher verschwindet der erste Term im Wechselwirkungspotenzial, die Kern-Kern-Wechselwirkung  $Z_T$ . Zur expliziten Berechnung der Übergangsamplitude müssen nur noch die gebundenen  $|\varphi^i\rangle$  und die Kontinuumszustände  $|\varphi^f\rangle$  bestimmt werden. Für das einfachste System, den Wasserstoff, ist dies sogar exakt möglich.  $|\varphi^i\rangle$  entspricht normalerweise dem 1s-Grundzustand des Wasserstoffs und  $|\varphi^f\rangle$  einer Coulombwelle<sup>3</sup>. Aus Gleichung 4.27 folgt, dass der totale Wirkungsquerschnitt proportional zum Quadrat des Projektilladungszustandes ist:

$$\sigma \propto |T_{FBA}^{f,i}|^2 = \lambda Z_P^2 \tag{4.28}$$

mit  $\lambda$  einem Koeffizienten, der sich bei der Berechnung der Übergangsamplitude ergibt. Wird statt des einfachsten noch lösbaren Atoms, des Wasserstoffs, ein Mehrelektronentarget verwendet, ist die exakte Wellenfunktion nur unzureichend bekannt. Die Bestimmung der Eigenzustände ist nur numerisch und mit großem Rechenaufwand möglich. Dies ist unter anderem in der Tatsache begründet, dass bereits das klassische Dreikörperproblem nicht mehr analytisch lösbar ist. Aus diesem Grunde wird in vielen Rechnungen ein wasserstoffähnliches Target mit einer effektiven Kernladung  $Z_{T,eff}$  angenommen. Wechselwirken die Elektronen nicht untereinander und wird ausschließlich die Einfachionisation (Single Ionization, SI) bzw. der Einelektronentransfer (Single Capture, SC) betrachtet, ist diese Näherung auch gerechtfertigt. Bei der Berechnung von einfach-differenziellen Wirkungsquerschnitten stimmen Theorie und Experimente gut überein. Je höher differenziell die Daten untersucht werden, desto gravierender treten die Unterschiede hervor und den gemachten Näherungen ist Tribut zu zollen.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die Coulombwelle ist die exakte Lösung eines Elektrons im Kontinuum eines Coulomb-Zentralpotenzials.

Wird zusätzlich die 2. Ordnung der Bornschen Näherung (Second Born Approximation, SBA) berücksichtigt, gilt für die Übergangsmatrix:

$$T^{f,i} = T^{f,i}_{SBA} + T^{f,i}_{FBA}$$
(4.29)

mit

$$T_{SBA}^{f,i} = \langle \Phi^f | VG_{\pm} V | \Phi^i \rangle = \lim_{\varepsilon \to 0} \left\langle \phi^i \left| V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V \right| \phi^f \right\rangle \quad .$$
(4.30)

Als problematisch erweist sich hier, dass im Nenner des Operators der ungestörte Hamiltonoperator  $H_0$  auftritt. Teilweise kann dieses Problem gelöst werden, sofern  $\varphi_n, \vec{p}_P$  der vollständige Satz von Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator  $H_0$  ist. Allerdings tritt dann eine unendliche Summe auf, welche wiederum genähert werden muss. Die "closure approximation" verwendet hierzu für den Zwischenzustand des Targets eine gemittelte Energie  $\bar{E}_n$ . Ausgeschrieben lautet die Übergangsamplitude schließlich:

$$T_{SBA}^{f,i} = \left(\frac{Z_P}{2\pi^2}\right)^2 \lim_{\varepsilon \to 0} \int d^3 \vec{p}_P \frac{\left\langle \phi^f \left| Z_T^2 - Z_T \sum_j (e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_{e_j}} + e^{i\vec{q}_2 \cdot \vec{r}_{e_j}}) + \sum_{i,j} (e^{i\vec{q}_2 \cdot \vec{r}_{e_i}} + e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_{e_j}}) \right| \phi^i \right\rangle}{q_1^2 q_2^2 \left(E - \bar{E}_n - E'_P + i\varepsilon\right)}$$
(4.31)

mit  $E'_P$  der Energie des Projektils im Zwischenzustand,  $(\vec{q_1} = p_P^i - p_P)$  dem Impuls, der in der ersten Wechselwirkung auf das Target übertragen wird, und  $\vec{q_2}$  dem in der zweiten Wechselwirkung übertragenen Impuls ( $\vec{q_2} = p_P - p_P^f$ ). Der erste Term in der Übergangsmatrix  $Z_T^2$  beschreibt die Doppelstreuung des Projektils am Targetkern, der für inelastische Stöße verschwindet. Der Term ( $e^{i\vec{q_1}\cdot\vec{r_{e_j}}} + e^{i\vec{q_2}\cdot\vec{r_{e_j}}}$ ) in der Übergangsmatrix stellt Stöße des Projektils mit dem j-ten Targetelektron sowie des Projektils mit dem Targetnukleus dar. Der dritte Term ( $e^{i\vec{q_2}\cdot\vec{r_{e_i}}} + e^{i\vec{q_1}\cdot\vec{r_{e_j}}}$ ) beschreibt die Wechselwirkung des Projektils mit dem i-ten Elektron und der Wechselwirkung des Projektils mit dem j-ten Elektron. Durch die letzten beiden Terme ist auch die Kern-Kern-Wechselwirkung in einem inelastischen Stoß berücksichtigt. PCI-Effekte (Post Collision Interaction) sind zum Teil berücksichtigt, nämlich für den Fall i=j, in dem das Projektil zweimal mit dem gleichen Elektron wechselwirkt. Der totale Wirkungsquerschnitt ergibt sich insgesamt zu:

$$\sigma \propto \left| T_{FBA}^{f,i} + T_{SBA}^{f,i} \right|^2 = \lambda_1 Z_P^2 + \lambda_2 Z_P^3 + \lambda_3 Z_P^4 \quad .$$
 (4.32)

Durch Quadrieren der Summe aus 1. und 2. Ordnung ergibt sich ein zusätzlicher Interferenzterm zwischen Projektil und Target. Während der erste Term dem Prozess mit einer einzigen Wechselwirkung entspricht und der letzte zwei Wechselwirkungen, stellt der mittlere Term Interferenzen zwischen beiden Ordnungen dar.

Bis jetzt wurde nur nach ungestörten Projektilaus- und Targeteingangszuständen entwickelt. Das einlaufende Projektilion sowie der verbleibende Heliumionenrumpf stören allerdings aufgrund der langreichweitigen Coulombkraft die elektronischen Wellenfunktionen. Methoden mit gestörten Wellenfunktionen (**D**istorted **W**aves, DW) erzielen sehr viel bessere Übereinstimmung mit den Experimenten und werden im nächsten Abschnitt kurz erläutert.

### 4.1.2.2 Rechnungen mit gestörten Wellen

Eine der Grundlagen der Bornschen Näherung war, dass sich Projektil- und Targetsystem im Anfangs- und Endzustand nicht beeinflussen ( $\eta \ll 1$ ), sondern nur für den kurzen Moment während der unmittelbaren Wechselwirkung. Nicht nur für größere Störungen, bei denen die Bornsche Reihe nicht konvergiert, sondern auch zur Berücksichtigung von PCI (Post Collision Interaction) werden dann gestörte Wellenfunktionen angesetzt, da das langreichweitige Coulombpotenzial des Projektils auch im Anfangs- und Endzustand die Targetwellenfunktion beeinflusst. Der Extremfall großer Störungen und niedriger Projektilgeschwindigkeiten wurde bereits in Unterkapitel 4.1.4 über quasimolekulare Stöße beschrieben. In beiden Fällen "sieht" das Elektron nicht nur ein Potenzial, sondern bewegt sich vielmehr in einem Zwei-Zentren-Potenzial, gebildet von Projektilion und verbleibendem Targetnukleus [AMar88, HBus97, PAbu04]. Im ersten Schritt wird der Gesamthamiltonoperator H wieder in einen ungestörten Anteil  $H_0$  bzw.  $H'_0$  und in eine Störung aufgeteilt:

$$H = H_0 + V = H_0 + U + W \qquad (An fangszustand) \tag{4.33}$$

$$H = H'_0 + V' = H'_0 + U' + W'$$
 (Endzustand) . (4.34)

Die aus der Bornschen Näherung bekannte Störung allerdings wird ebenfalls aufteilt in U bzw. U' (die so genannten Distortion-Potenziale) welche das langreichweitige Coulombpotenzial enthalten sowie die zugehörigen Störpotenzialen W und W'. Im Gegensatz zur Bornschen Näherung sind die Störpotenziale jedoch schwächer. In diesem Ansatz wird ein Teil der eigentlichen Wechselwirkung zwischen Projektil und Target in der Endzustandswellenfunktion berücksichtigt und damit die Stärke des Störoperators reduziert. Die gestörten Eigenfunktionen  $|\chi_{\pm}\rangle$  sind gegeben durch die Schrödingergleichung:

$$(H_0 + U)|\chi_+\rangle = E|\chi_+\rangle \tag{4.35}$$

und

$$(H'_0 + U')|\chi_-\rangle = E|\chi_-\rangle$$
 . (4.36)

Daraus ergibt sich das T-Matrix-Element zu folgendem Ausdruck:

$$T^{f,i} = \left\langle \chi_{-}^{f} |W'| \psi_{+}^{i} \right\rangle + \left\langle \chi_{+}^{f} |V - W'| \phi^{i} \right\rangle \quad .$$
(4.37)

Der zweite Term stellt nur einen geringen Beitrag dar und wird deswegen häufig vernachlässigt. Ganz verschwindet er jedoch nicht, da W' im Allgemeinen nicht hermitesch bezüglich des Zustandes  $|\chi_{-}^{f}\rangle$  ist. Die Unterschiede in den zahlreichen theoretischen Näherungen liegen vor allem in der unterschiedlich großen Aufspaltung der Potenziale und damit einhergehend der gestörten Zustände  $|\chi\rangle$ . Vom Prinzip her gibt es dann noch zwei mögliche Lösungswege. Entweder werden zuerst die gestörten Zustände  $|\chi\rangle$  gewählt und daraus bestimmt man mittels der Gleichungen 4.35 und 4.36 das Potenzial U. Oder man beschreitet den umgekehrten Weg, wählt zunächst das Potenzial und bestimmt daraus die gestörten Zustände. Wie zuvor schon die Bornsche Reihe nur eine Näherung des exakten Problems war, so gibt es auch für den Ansatz mit gestörten Wellen einige Näherungsverfahren, die im Folgenden kurz erwähnt werden.

Als besonders erfolgreiches Verfahren hat sich CDW-Näherung (Continuum Distorted Wwave) nach einer Idee von Cheshire [IChe64] erwiesen. Mit  $|\phi^{i,f}\rangle$ , den ungestörten Zuständen des Targetelektrons, wird  $|\chi\rangle$  im Anfangs- und Endzustand folgendermaßen gewählt:

$$|\chi_{\pm,CDW}^{i,f}\rangle = |\phi^{i,f}\rangle|CW\rangle \quad . \tag{4.38}$$

Die Coulombwelle  $|CW\rangle$  stellt die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron dar und verzerrt dessen ungestörte Zustände vor und nach dem Stoß. Speziell in Ionisationsexperimenten zeigte sich, dass gravierende Differenzen zwischen der CDW- und der ersten Bornschen Näherung auftraten, und zwar zu Ungunsten des CDW-Ansatzes. Ursache hierfür waren Normierungsprobleme der Zustände  $|\chi\rangle$ , insbesondere des Anfangszustandes [DBel79, DCro82]. In einer weiteren Näherung, der CDW-EIS (Continuum Distorted Waves-Eikonal Initial State), wird der Anfangszustand durch die Eikonalphase  $|EP\rangle$  erweitert; der Endzustand bleibt unverändert. Für beide Zustände gilt:

$$|\chi^{f}_{-,CDW}\rangle = |\phi^{f}\rangle|CW\rangle \tag{4.39}$$

und

$$|\chi^i_{+,EIS}\rangle = |\phi^i\rangle|EP\rangle$$
 . (4.40)

Die Eikonalphase beschreibt die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron (im Anfangszustand) und lässt sich im Gegensatz zur Coulombwelle leicht normieren. In vielen Fällen wird auch hier ein Mehrelektronentarget durch ein Dreiteilchenproblem und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch ein effektives Potenzial approximiert [RMcC68, RGay72, RRiv80, RRiv82]. Des Weiteren wird häufig zur Berechnung die semiklassische Näherung oder auch Stoßparametermethode (Impact Parameter Method, IPM) angewandt. Die Trajektorie des Projektils  $r_P$  ist dann durch eine klassische gerade Bahn gegeben:

$$r = b + v_P t \tag{4.41}$$

mit *b* dem Stoßparameter, dem Abstand zwischen Projektil (*P*) und Targetkern (*T*). Dadurch beschränkt man sich automatisch auf kleine Streuwinkel, was wiederum dem sog. Eikonal-Limit entspricht. Oder anders ausgedrückt: Das Störpotenzial ändert sich nur langsam, verglichen mit der Wellenlänge der ebenen einlaufenden Wellen. Nur in Reichweite des Potenzials erhält die ebene Welle eine ortsabhängige Phasenverschiebung, während im Grenzfall großer Entfernung die Welle unverändert bleibt (man spricht hier auch von der Eikonal-Distorted-Wave-Näherung, EDW). Um die Gültigkeit der Eikonalnäherung zu gewährleisten müssen außerdem die Masse des Projektils sowie dessen Geschwindigkeit erheblich größer als die des Elektrons sein. Der Anfangszustand wird beispielsweise durch eine Roothaan-Hartree-Fock-Wellenfunktion dargestellt oder ein Hartree-Fock-Slater-Potenzial [LGul02]. Die DW-Theorien sind nicht auf einen Prozess beschränkt. So können neben Ionisations- auch Elektronentransfervorgänge beschrieben werden [DCro83, PFai89, SOro97, AHas04]. Im Falle der Untersuchung von mehreren an der Reaktion beteiligter Elektronen - z. B. der Transferionisation - wird häufig von zwei unabhängigen Reaktionen ausgegangen. Die Gesamtwahrscheinlichkeit entspricht dann dem Produkt der Einteilchenübergangswahrscheinlichkeiten. Man spricht hier vom Independent Event Modell (IEM), einer Erweiterung des Modells unabhängiger Elektronen (IPM). Die letzten 30 Jahre haben eine Vielzahl verschiedenster Varianten der CDW-Theorie hervorgebracht. Für einfache Systeme existieren auch Varianten, welche die vollständige 4-Teilchen-Wechselwirkung (CDW-4B) berücksichtigen [DBel97a]. In dieser Näherung wird von zwei aktiven Elektronen ausgegangen und die Elektron-Elektron-Korrelation kann dadurch eingebunden werden. Die absoluten Wirkungsquerschnitte können sehr gut reproduziert werden und auch bei der Berechnung streuwinkel-differenzieller Wirkungsquerschnitte gibt es abgesehen von kleinen Unstimmigkeiten zwischen Theorie und Experiment - die auf Fehler im Targetgrundzustand zurückzuführen sind - mittlerweile überraschend gute Übereinstimmung. Weitere Verbesserungen werden durch Hinzunahme höherer Glieder der Störungsreihe, insbesondere der Berücksichtigung von Doppelstreuprozessen, erzielt [PVin05]. Weitere Näherungen, wie das OBK-, das SPB-, das PWBA- oder das DWBA-Verfahren, die nur auf Elektroneneinfang bzw. Ionisation spezialisiert sind, werden in den entsprechenden Kapiteln noch erläutert. Auch einige Resultate der schon erwähnten CDW-Näherung im Zusammenhang mit Elektronentransferprozessen werden dargelegt. Alle bisherigen Näherungsverfahren basierten auf einer störungstheoretischen (perturbativen) Beschreibung des Stoßprozesses.

# 4.1.3 Gekoppelte-Kanäle-Rechnungen

Bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten ist die Wechselwirkungszeit zwischen Projektil und Targetsystem entsprechend länger. Zur Beschreibung dieser Kollisionen müssten nach den bisherigen Erläuterungen viele Glieder der Störungsreihe mitgenommen werden, um das Experiment theoretisch adäquat zu beschreiben. Darüber hinaus konvergiert die Bornsche Reihe bei großen Störungen nicht mehr, sodass nicht-perturbative Methoden, wie die "Exterior Complex Scaling" (ECS) [TRes99] oder "gekoppelte-Kanäle"-Rechnungen wie die "Convergent Close Coupling" (CCC) [PMar81, HSli91b] entwickelt wurden. Ursprünglich wurde das "close coupling"-Verfahren zur Beschreibung der Elektronenstreuung am Wasserstoffatom entwickelt [HMas32, HMas56]. Im Gegensatz zur störungstheoretischen Beschreibung wird die zeitunabhängige Schrödingergleichung 4.9 mittels numerischer Verfahren gelöst. Zunächst wird eine Basisentwicklung des Zustandes  $\Psi(\vec{r}_{CM}, \vec{r}_{e,CM}, t)$  durchgeführt. Der Zustand des Gesamtsystems ist eine Superposition aller möglichen Zustände und beschreibt das System um so besser, je mehr Kanalfunktionen verwendet werden<sup>4</sup>:

$$\Psi(\vec{r}_{CM}, \vec{r}_{e,CM}, t) = \sum_{n} \int f_n(t) \varphi_n(\vec{r}_{CM}, \vec{r}_{e,CM})$$
(4.42)

mit  $\vec{r}_{CM}$  dem Abstand der Atomkerne (Projektil und Target) vom Schwerpunkt und  $\vec{r}_{e,CM}(t)$  dem Abstand des Elektrons von der internuklearen Achse, die beide explizit von der Zeit abhängig sind. Zusammen mit der zeitabhängigen Schrödingergleichung ergibt sich daraus die sog. gekoppelte Kanal-Gleichung:

$$i\frac{\partial}{\partial t}f_m = \sum_n \int \left\langle \varphi_m \left| H - i\frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_n \right\rangle f_n(t) \quad . \tag{4.43}$$

Da sowohl die gebundenen als auch die ungebundenen Zustände in dieser Basis enthalten sind, muss über die gebundenen summiert (da sie diskret sind) und über die Kontinuumszustände integriert (da diese kontinuierlich sind) werden. Der mittlere Term  $\langle \varphi_m | H - i \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_n \rangle$  beschreibt die dynamische Kopplung. Die Entwicklung der Wellenfunktion erfolgt in einer zeitabhängigen Basis mit ebenfalls zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten  $f_n(t)$ . Versucht man diese Gleichung numerisch zu lösen, treten Schwierigkeiten mit der Unendlichkeit der Eigenzustände und den nicht diskretisierbaren freien Zuständen auf. Sofern nur Elektronentransfer und -anregung beschrieben werden sollen, können die Kontinuumszustände vernachlässigt werden. Mit zunehmender Rechenleistung der Computer konnte die Basis immer weiter vergrößert werden, sodass die Übereinstimmung mit den Experimenten immer besser wurde. Moderne Rechnungen berücksichtigen mittlerweile sogar das Kontinuum durch die Verwendung von diskreten Pseudozuständen [IBra92, KBar96] und sind in der Lage auch Ionisationsprozesse mittels der R-Matrix-Methode [KBar02] oder der Convergent-Close-Coupling-Methode (CCC) zu beschreiben.

Der CCC-Formalismus beschreibt eines der Elektronen als Coulombwelle. Zur Behandlung der unendlich vielen Kontinuumszustände wird dieses zu-

 $<sup>^4</sup>$  Die Basiszustände werden von verschiedenen Autoren auch als Kanäle oder Kanalfunktionen bezeichnet

nächst diskretisiert und anschließend mit einer Basis von Pseudozuständen aufgespannt. Die Zustände  $|\varphi_n\rangle$  werden durch eine Laguerre-Basis behandelt. Da eigentlich über den gesamten Basisraum summiert werden muss, jedoch nur endlich viele Zustände berücksichtigt wurden, kann es zu Problemen mit der Konvergenz kommen. Außerdem bedingt die Auswahl der Zustände die berechneten Wirkungsquerschnitte erheblich, weshalb auch versucht wird, möglichst viele Zustände zu verwenden. Zur eigentlichen Berechnung in Ion-Atom-Stoß-Experimenten wird der Projektilimpuls mittels Partialwellenentwicklung genähert. Dadurch ist die CCC-Methode auf niedrige Projektilgeschwindigkeiten und -massen begrenzt.

Auf der einen Seite kann das numerische Lösen der Schrödingergleichung die Ergebnisse teilweise gut reproduzieren. Andererseits ist es - verglichen mit einem störungstheoretischen Ansatz - schwieriger aus den Rechnungen Einsichten in die relevanten physikalischen Prozesse zu gewinnen. Bessere Ergebnisse erhält man bei gekoppelten Kanäle-Rechnungen durch eine möglichst große Basis, nach der entwickelt wird. Hingegen benötigen störungstheoretische Ansätze mehr Wechselwirkungen, um das Experiment gut beschreiben zu können.

# 4.1.4 Das quasimolekulare Bild

Aus mehreren Atomen können sich Moleküle bilden, sofern dieser Zustand energetisch günstiger ist. Die Bildung von Molekülen, Forschungsgegenstand der Chemie, findet gewöhnlich bei Temperaturen unterhalb 1000 Kelvin, entsprechend einer Energie von 0,1 eV, statt. In atomphysikalischen Stoßexperimenten betragen die Energien in der Regel mindestens das 10 000-fache, wobei nach oben hin keine Grenzen gesetzt sind. Bei so hohen Energien können sich natürlich keine langzeitstabilen Moleküle mehr bilden. Für einen unter atomphysikalischen Gesichtspunkten langen Zeitraum kann sich während des Stoßes ein Quasimolekül, bestehend aus geladenem Projektilion und Targetatom, bilden.

Die theoretische Behandlung solcher langsamen Stöße setzt voraus, dass die Relativgeschwindigkeit der stoßenden Atome kleiner oder bestenfalls gleich der Elektronenbewegung ist ( $v_P \leq v_{B,e}$ ). Das Elektron sieht ein sich langsam änderndes Coulombpotenzial, welches von Targetatom und Projektilion generiert wird. Außerdem handelt es sich nicht nur um eine Wechselwirkung, sondern um Mehrfachstreuprozesse, an der alle Teilchen (Targetelektronen, Projektilelektronen, Target- und Projektilkern) beteiligt sind. Solange die beiden Atomkerne hinreichend nahe sind, bildet sich ein Quasimolekül aus, welches sich die verbleibenden Elektronen teilt [WLic63, WLic75, VNik78] und seinen Zustand adiabatisch ändert. Die Kerne des "zerreißenden Moleküls" sind beim Auseinanderfliegen gleichberechtigt.

Die Entwicklung des elektronischen Zustandes wird oft in einer kleinen unvollständigen - zeitabhängigen Basis [WFri91a, NTos97] beschrieben. Die Relativbewegung der Kerne wird als kleine Störung angenommen. Je größer der verwendete Satz an Basiszuständen ist, desto exakter können totale und differenzielle Wirkungsquerschnitte berechnet werden. Man bezeichnet die Basiszustände auch als Kanäle. Ein kleiner Basissatz kann für die Berechnung totaler Wirkungsquerschnitte bereits ausreichend sein. Mit zunehmender Vergrößerung der Basis ist eine immer genauere Berechnung differenzieller Wirkungsquerschnitte [FKoi78, CHar80, MKim88, WFri94] möglich.

Die Kerne werden rein klassisch behandelt (dies entspricht der semiklassischen Näherung - Semi Classical Approximation, SCA), während das Elektronensystem quantenmechanisch behandelt wird (mittels einer gekoppelten Kanäle-Rechnung - siehe Unterkapitel 4.1.3) [JHan73, PAmu75, PAmu76]. Man spricht auch von der Molekül-Orbital-Theorie oder Hund-Mulliken-Näherung [WLic63, RPia76]). Jeder Trajektorie ist ein Stoßparameter b zugeordnet. Der Stoß selbst ist als dynamischer Prozess zu betrachten, bei dem zwei Atome mit - anfangs noch - unabhängigen Elektronensystemen während des Stoßes ein Quasimolekül bilden. Im Limit geringer Kernabstände (united atom) entsprechen die Potenzialkurven der Elektronenzustände denen der Molekülorbitale, sprich: Die molekularen Orbitale des He<sup>2+</sup><sub>2</sub>-Moleküls entsprechen den atomaren Orbitalen des Tochterkerns Be<sup>2+</sup>.

Der Übergang zur SCA, der Behandlung der Kerntrajektorien als klassische Bahnen, ist immer dann eine gute Näherung, wenn ein eindeutiger Zusammenhang zwischen dem Projektilstreuwinkel  $\theta_P$  und dem Drehimpulsaustausch der Kerne besteht [NMot65]. Dies ist gleichbedeutend damit, dass die de Broglie-Wellenlänge des Projektils kürzer ist, als der Stoßparameter b [LBer87b, PAmu75]. Nach der Rutherfordschen Streuformel gilt zunächst:

$$b \cdot p_{\perp,P} = \frac{2}{v_P} Z_P Z_T \quad . \tag{4.44}$$

Zwischen Stoßparameter und transversalem Impulsaustausch ( $p_{\perp,P} \simeq p_{\perp,Rec}$ ) gilt nach der Heisenbergschen Unschärferelation:

$$\Delta b \cdot \Delta p_{\perp,P} \Longrightarrow 2 \ a. \ u. \quad . \tag{4.45}$$

Die Kerntrajektorien als klassisch zu beschreiben, ist nur eine gute Näherung, wenn zunächst der Impulsaustausch und der Stoßparameter größer ist als die Unsicherheit in diesen Messgrößen ( $b \cdot p_{\perp,Rec} > \Delta b \cdot \Delta p_{\perp,Rec} > 2 \ a. u.$ ). Mit Gleichung 4.44 folgt, dass eine Beschreibung mittels semiklassischer Näherung bis zu einer Geschwindigkeit  $v_P$  von:

$$Z_P \cdot Z_T > v_P \tag{4.46}$$

möglich ist. Für H<sup>+</sup>-Projektile ist die SCA bis zu einer Projektilgeschwindigkeit kleiner 2 a. u. und für He<sup>+,2+</sup>  $v_P$ <4 a. u. eine brauchbare Näherung.

Die verwendeten Basiszustände sind Eigenfunktionen des Quasimoleküls oder können durch solche genähert werden. Abhängig von den beteiligten Stoßpartnern sind verschiedene Basen besonders vorteilhaft. Wir nehmen als Beispiel den Zweifachelektronentransfer im He<sup>2+</sup> +He-Stoßsystem. Im Limit separierter Kerne ( $\vec{R} \approx \infty$ ) kann das Potenzial eines der beiden Kerne (He) im Raum vernachlässigt werden. Diese Näherung gilt vor und nach dem Stoß. Die gebundenen Zustände des Heliumatoms sind ebenfalls Eigenzustände des Gesamtsystems und können durch atomare Orbitale, kurz AO, welche gleichzeitig Basisfunktionen sind, dargestellt werden, auch Heitler-London-Näherung genannt. Der molekulare Hamiltonoperator ist aufgrund der im Quasimolekül herrschenden Symmetrie invariant gegenüber Raumspiegelungen, während die atomaren Orbitale diese Symmetrie nicht besitzen. Aus diesem Grunde werden atomare Orbitale je einer geraden und einer ungeraden Symmetrie miteinander linear kombiniert (Linear Combination of Atomic **O**rbitals, LCAO).

Das 1s-Orbital im vereinigten Kern ist in beiden Basen eine Linearkombination des  $1s\sigma_g$ - und des  $2p\sigma_u$ -Zustandes. In Abbildung 4.3 ist die Potenzialkurve für das  $\text{He}_2^{2+}$ -Quasimolekül skizziert. In der verwendeten Nomenklatur bezeichnet die Ziffer (1, 2, ...) sowie der erste Buchstabe (s, p, ...) den molekularen Zustand. Die griechischen Buchstaben ( $\sigma, \pi, ...$ ) stehen für die Quantenzahl  $\Lambda$  der Drehimpulskomponente in Richtung der Quantisierungsachse<sup>5</sup>; sie entspricht i. A. der Molekülachse. Der Index zeigt an, ob eine gerade (g) oder ungerade (u) Symmetrie vorliegt.

Kopplungen allgemein beschreiben Stoßanregungen, und mit einer um mehr Kopplungselemente vergrößerten Basis erhält man genauere Resultate. Die molekularen Zustandsvektoren zweier Zustände können sich an sog. vermiedenen Niveaukreuzungen (**a**nti**c**rossing, ac) ändern [GHat76, TLud05]. In der

 $<sup>^5</sup>$   $\Lambda$  entspricht dem Betrag der magnetischen Bahndrehimpulsquantenzahl m im Atom.



**Abbildung 4.3:** Korrelationsdiagramm: Potenzialkurven des  $He_2^{2+}$ - sowie die niedrigsten Zustände des  $He_2^{3+}$ -Quasimoleküls (dicke Linien) nach [HYag77, VLop78, LSch00].

Kopplungsmatrix treten zwei zusätzliche Terme, die Rotations- und die Radialkopplung auf; sie beschreiben den Wechsel auf andere Potenzialkurven. An vermiedenen Kreuzungen tritt nur Radialkopplung auf. Außerdem wird durch die Kopplungsterme die Drehung des Moleküls  $\theta$  während des Stoßes sowie der zeitlich veränderliche Abstand der Kerne R(t) in den molekularen Orbitalen berücksichtigt. Rotations- und Radialkopplung vermischen ausschließlich Zustände gleicher Symmetrie (gerade/ungerade) miteinander [SAll66, VNik78]; die Rotationskopplung Zustände unterschiedlicher  $\Lambda$  und die Radialkopplung Zustände gleicher  $\Lambda$ . Eine schematische Darstellung der Rotationskopplung am Beispiel des Übergangs von einem  $2p\sigma_u$  in einen  $2p\pi_u$ Zustand ist in Abbildung 4.5 dargestellt.

In Abbildung 4.4 ist der Verlauf an einer vermiedenen Kreuzung skizziert. Das System aus Projektil (P) und Target (T) bewegt sich von rechts kommend (Eingangskanal) zu kleineren Abständen. Im Bereich der geringsten Energiedifferenz zwischen den Niveaus ( $R_{ac}$ ) kann es mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch einen inelastischen Stoßprozess zum Wechsel auf die Kurve (3) kommen oder aber auf Kurve (2) weiterhin verbleiben. Beim Auseinanderlaufen (von links kommend) der Stoßpartner kann es mit gleicher Wahrscheinlichkeit wieder zu einem Wechsel der Potenzialkurven kommen. Das (P+T)-



**Abbildung 4.4:** Skizze zur Stoßanregung an vermiedenen Niveaukreuzungen.  $R_{ac}$  (anti crossing) ist der minimale Abstand der beiden Energieniveaus und der Ort des wahrscheinlichsten Übergangs. Verläuft das System ohne Wechsel der Potenzialkurve von 1 nach 2 spricht man von einem *adiabatischen Verlauf*. Wird hingegen die Potenzialkurve von 1 nach 3 bzw. 2 nach 4 gewechselt liegt ein *diabatischer Übergang* vor.

System ist dann mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit in den angeregten Zustand ( $P^* + T$ ) übergegangen [FSmi69, HNeu84]. Im Falle des Wechsels der Potenzialkurve (von 1 nach 3 nach 2 nach 4) spricht man von einem *diabatischen Übergang*. Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich aus dem Massey-Parameter durch Integration in der Ebene komplexer Kernabstände [MPie91]. Anschaulich kann sich bei einem diabatischen Übergang der Elektronenzustand nicht schnell genug anpassen (Drehung von  $|a\rangle$  nach  $|b\rangle$ im Hilbertraum) und das System bleibt im Anfangszustand. Je schneller die vermiedene Kreuzung durchlaufen wird, desto eher bleibt das Quasimolekül im Zustand  $|a\rangle$  bzw.  $|a^*\rangle$ . Durch die Rotationskopplung vermittelte Übergänge finden hauptsächlich bei geringen Kernabständen statt, da die Übergangswahrscheinlichkeit mit Winkelgeschwindigkeit  $\dot{\theta}$  gewichtet ist.

Das Hidden-Crossing-Modell [MPie94a, MPie94b, JMac95, PKrs98] beschreibt den quasimolekularen Stoß durch eine Sequenzierung in diabatische und adiabatische Übergänge. Es ist möglich, dass das Elektron während des Stoßes mehrfach die Potenzialkurve wechselt. Betrachtet man Abbildung 4.6, so lassen sich Serien finden, in welchen das Elektron durch fortwährenden diabatischen Übergang, nach und nach bis an die Kontinuumsgrenze angeregt wird. Abhängig vom Kernabstand spricht wird von einer S- bzw. einer T-(Super-)Serie gesprochen. Innerhalb der jeweiligen Serie ist die Drehimpulskomponente konstant. Die S-Serie liefert die starken diabatischen Kanäle für die Promotion des Systems, um in Kontinuumszustände zu gelangen (Superpromotion). Sie tritt ausschließlich bei kleinen Kernabständen und während



**Abbildung 4.5:** Skizze des Übergangs von einem  $2p\sigma_u$ - in einen  $2p\pi_u$ -Zustand, der Rotationskopplung: Vor dem Stoß (a) - bei großen Kernabständen - wird durch Addition zweier atomarer 1*s*-Zustände der  $2p\sigma_u$ -Zustand besetzt. Bei Annäherung der Kerne (b) bildet sich die für einen 2p-Zustand typische, keulenförmige Elektronenverteilung aus. Sobald die Kerne aneinander vorbeifliegen, kann diese Keule der schnellen Drehung der Molekülachse nicht folgen. Es wird der  $2p\sigma_u$ -Zustand besetzt (d). Bei großen Kernabständen (e) ist dieser Zustand gleich der Summe von zwei atomaren 2p-Zuständen (aus [LSch00]).s

des Annäherungsvorgangs auf. Die Elektronen gelangen durch instabile Trajektorien auf dem Maximum der Zentrifugalbarriere ins Kontinuum. Die T-Serie bildet die Ionisationskanäle während des Auseinanderlaufens des Quasimoleküls. Sie stehen in Verbindung zum Mechanismus der Sattelpunktionisation, während sich das Elektron auf dem Potenzialplateau zwischen den beiden Kernen befindet [RJan94].

Da beide Serien prinzipiell unendlich viele Rydbergzustände enthalten, muss zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit ein unendliches Produkt genähert werden. Die Entwicklung des Systems in sehr hoch angeregte Zustände wird daher nicht vollständig, sondern nur genähert mit einbezogen. Die Bestimmung differenzieller Querschnitte, beispielsweise der Elektronenemissionscharakteristik erfordert jedoch diese Zustände. Zuerst wird die Entwicklung in einer Serie aus adiabatischen Zuständen berechnet um nach einigen Gliedern abzubrechen und in einer diabatischen Basis weiterzurechnen [ESol90]. Rechnungen zum symmetrischen Stoßsystem H<sup>+</sup>/H sagen vorher, dass die S-Serien in Form zwei scharfer Peaks, bei  $v_{z,e} = v_P$  und  $v_{z,e} = 0$ mit  $v_{\perp,e}\simeq 0$ , auftritt. Elektronen, die durch eine Promotion entlang der T-Serie ins Kontinuum gelangen, befinden sich breit verteilt zwischen den beiden Peaks der S-Serie mit einer Knotenlinie entlang der Strahlrichtung, hervorgerufen durch die  $\pi$ -Symmetrie des Zustandes [SOvc95]. Die Erweiterung des Hidden-Crossing-Modells auf Mehrelektronensysteme mündete im MEHC-Modell (multi-electron-Hidden-Crossing), in welchem die ersten absoluten Wirkungsquerschnitte des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He berechnet werden konnten [PKrs96]. Weiteres zum Ionisationsprozess in quasimolekularen Stößen folgt in Unterkapitel 4.3.1.



**Abbildung 4.6:** Serie vermiedener Kreuzungen im H<sub>2</sub><sup>+</sup>-Molekül der Zustände  $1s\sigma_g$ ,  $3d\sigma_g$ ,  $5g\sigma_g$ , ... [ESol90]

Gut geeignet ist die Beschreibung mittels molekularer Orbitale bei besonders niedrigen Projektilgeschwindigkeiten. Höhere Geschwindigkeiten im Bereich oder größer der klassischen Elektronenumlaufzeit werden mit atomaren bzw. Linearkombinationen atomarer Orbitale gut beschrieben [ARie76, JAnt98]. Weitere theoretische Arbeiten für quasimolekulare Stoßsysteme sind für  $\mathbf{p} + \mathbf{H}$  bei [HMas33, WLic67, LPon78, HHak96, NTos99], für  $\mathbf{He}^{2+} + \mathbf{He}$  bei [AFer59, MFul66, SMuk73, KRoy76, SHar78, RRiv79, WFri91b, WFri95], für  $\mathbf{He}^+ + \mathbf{He}$  bei [LPau33, BMoi56, MBar72, BSte78, TRai79] und für den asymmetrischen Fall  $\mathbf{H}^+ + \mathbf{He}$  bei [TGre74a, TGre74b, JMac86, JPet86, MKim86, HSli91a, MRam93, RCab00] zu finden. Die Symmetrie in den homonuklearen Molekülen sowie der Transfer aller vorhandenen Elektronen erleichtern die Berechnungen erheblich.

# 4.1.5 Der Anfangszustand

Im klassischen Bohrschen Atommodell befinden sich die Elektronen auf diskreten Bahnen und besitzen eine fixe Elektronenorbitalgeschwindigkeit  $v_{B,e}$ . Quantenmechanisch besitzen die Elektronen eine breite, vom quantenmechanischen Zustand abhängige, Impuls- und Ortsverteilung. Durch inelastische Streuung hochenergetischer Photonen an Atomen oder Festkörpern wurde schon frühzeitig versucht diese Impulsverteilung der Elektronen zu ermitteln [JDuM33]. Aufgrund der Geschwindigkeitsverteilung der gebundenen Elektronen ist die spektrale Breite der gestreuten Strahlung größer als die des eingestrahlten Lichts. Eine Ableitung der Comptonverschiebung ist in [LSpi95, HHak96, LSpi96a, LSpi96b, LSpi99] zu finden. Daher wird die Geschwindigkeitsverteilung der gebundenen Elektronen häufig auch als Compton-Profil bezeichnet. In der Bornschen Näherung ist durch die quantenmechanische Beschreibung des Anfangszustandes das Compton-Profil bereits enthalten.

Helium, das einfachste Mehrelektronensystem, stellt in theoretischer Hinsicht schon eine enorme Herausforderung dar und dies nicht nur, weil es sich um ein Dreikörper-Problem handelt. Die meisten Rechnungen zu Ion-Atom-Stößen beschreiben Mehrelektronensysteme durch ein aktives Elektron, welches sich in einem abgeschirmten Potenzial bewegt. Die Stärke der Abschirmung hängt praktisch vom Abstand des Elektrons und dem Targetkern bzw. den anderen Elektronen ab. Befindet sich das Elektron nahe des Targetkerns, spürt es die volle Kernladung ( $Z_T$ ) und bei großen Kernabständen ein wesentlich geringeres Potenzial. Diese Näherungen sind vor allem im Hinblick auf den Stoßprozess von Interesse, da mehr oder weniger Elektronen in den Prozess involviert sind, welche wiederum ihrerseits miteinander wechselwirken können. Die Beschreibung des Targets als wasserstoffähnlich stellt die einfachste Modellierung eines effektiven Potenzials  $Z_{eff}$  für Mehrelektronensysteme dar. Das Potenzial  $V_T$  entspricht einem Zentralpotenzial mit

$$V_T \sim Z_{eff}/r \tag{4.47}$$

und r dem Abstand des Elektrons vom Targetkern. Für die Einfachionisation von Helium wird häufig  $Z_{eff}$ =1,35 a. u. gewählt, da sich direkt die erforderliche Bindungsenergie von 24,6 eV ergibt. Andere Modelle (siehe z. B. Unterkapitel 4.1.1), die die Stärke der Abschirmung in Abhängigkeit vom Abstand zum Targetkern berücksichtigen, liefern allerdings deutlich bessere Ergebnisse. Quantenmechanische Anfangszustandsverteilungen, die gebundene und Kontinuumszustände enthalten, können durch Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung berechnet werden. Viele weitere Potenziale, wie Hartree-Fock-Slater-Potenziale (HFS) [LTri98], Optimized Effective Potentials (OEP) [JTal76, PFai01] etc. wurden bisher für unterschiedlichste Anforderungen entwickelt. Mehrelektronenzustände werden auch häufig durch das Produkt von Einelektronenzuständen genähert (Independent **P**article **M**odell, IPM).

Nach den bisherigen Erläuterungen wurde nur ein Elektron in einem effektiven Potenzial betrachtet. Unter dem Oberbegriff "Korrelation" lässt sich die direkte gegenseitige Beeinflussung der Elektronen zusammenfassen. Mehrelektronenzustände entsprechen dann nicht mehr dem Produkt aus Einteilchenzuständen. Die gegenseitige Beeinflussung des Abstandes, eine feste Winkelbeziehung der Elektronen untereinander, aber auch eine immanente Verschränkung zählt zu den Korrelationseffekten. Methoden im Rahmen von Konfigurationsrechnungen (Configuration Interaction, CI) liefern die derzeit besten zur Verfügung stehenden Wellenfunktionen [TShi02, AGod05]. Die Zweiteilchenzustände sind hier Slaterdeterminanten von Einteilchenzuständen. Für den Grundzustand ist der Gesamtdrehimpuls L=0. Dieser kann jedoch in einer Drehimpulsbasis entweder aus zwei s-Einteilchenzuständen aufgebaut werden oder Beiträge höherer Drehimpulse enthalten, wobei die Summe der Drehimpulse stets null sein muss. Für den Helium-Grundzustand ergeben sich daraus etwa 2 % solcher nicht-s<sup>2</sup>-Beiträge ( $non - s^2$ ). Kheifets et al. konnten für Helium ebenfalls zeigen, dass die nicht-s<sup>2</sup>-Elektronen sich weit vom Kern entfernt aufhalten und über sehr große Impulse verfügen [AKhe05]. Dies steht in direktem Gegensatz zum klassischen Bild, in welchem die Elektronen weit außen an den Umkehrpunkten, über minimale Geschwindigkeit verfügen müssten. Einen guten experimentellen Zugriff auf die Elektronen-Elektronen-Korrelation gewähren nur wenige Prozesse, wie z. B. der Shake-off (siehe Unterkapitel 4.3.6 und 4.4.3). Insbesondere die Untersuchung verschränkter Elektronenbewegung im einfachsten Mehrelektronensystem - Helium - ist eine der Hauptfragen, die versucht wird in dieser Arbeit näher zu beleuchten.

# 4.2 Elektroneneinfang

Beim Elektroneneinfang (englisch: capture) bzw. -transfer wechseln ein oder mehrere Elektronen  $(n_c)$  von einem gebunden Zustand im Targetatom  $(_T)$  bzw. dann Rückstoßion  $(_{Rec})$  in einen gebundenen Zustand des Projektils  $(_P)$ :

$$P^{q+} + T \to P^{(q-n_c)+} + Rec^{n_c+}$$
 . (4.48)

Diese Reaktion ist sehr stark von der Projektilgeschwindigkeit abhängig und wird für schnelle Stöße zunehmend unwahrscheinlicher. Ein symmetrisches Stoßsystem liegt vor, wenn es sich um gleiche Stoßpartner (z. B. He<sup>+</sup> und He) handelt. In diesem System ist der Elektronentransfer resonant, falls die besetzten Energieniveaus von Projektil und Target gleich sind (Q = 0). Für den Fall verschiedener Stoßpartner liegt ein asymmetrisches Stoßsystem vor  $(Q \neq 0)$ . Die Differenz der Bindungsenergien muss dann vom Projektil aufgebracht bzw. aufgenommen werden, abhängig von den besetzten Energieniveaus in Projektil und Target. Befindet sich einer der beteiligten Stoßpartner nach der Reaktion in einem angeregten Zustand, spricht man von *Transferanregung*.



**Abbildung 4.7:** Totale Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{tot}$  von Elektronentransfer- und Transferanregungsreaktionen für H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> mit He in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$  [CBar90].

In Abbildung 4.7 ist der totale Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{tot}$  für Elektronentransfervorgänge in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$  für verschiedene Stoßsysteme dargestellt. Bei den resonanten Prozessen wächst der Wirkungsquerschnitt für fallende Projektilenergien stetig weiter. Während des Stoßes bildet sich ein molekularer Zwischenzustand aus. Im Fall asymmetrischer Stoßpartner bzw. unterschiedlich besetzter Energieniveaus ( $Q \neq 0$ ) liegt das Maximum des Wirkungsquerschnitts bei  $v_P \approx v_{B,e}$ .

Das Projektil und das einzufangende Elektron besitzen nur eine geringe Relativgeschwindigkeit, sodass das Elektron als im Projektil quasi ruhend angenommen werden kann. Für schnelle Stöße lautet die Frage im klassischen Bild: Welcher Mechanismus beschleunigt das Elektron auf Projektilgeschwindigkeit, sodass es eingefangen werden kann? Die Beantwortung dieser Frage im klassischen und quantenmechanischen Bild wird in Kapitel 4.2.3 und 4.2.1 beantwortet. Für den Fall langsamer und mittlerer Geschwindigkeiten wurde der Prozess des Elektronentransfers im quasimolekularen Bild bereits in Kapitel 4.1.4 erklärt.

Der entscheidende Unterschied zwischen Elektronentransfers bei niedrigen und hohen Projektilgeschwindigkeiten ist folgender: Langsame Stöße - die in einem quasimolekularen Bild beschrieben werden - erfordern, dass die Energieniveaus der beteiligten Stoßpartner zueinander passen. In schnellen Stößen kommt es darauf an, dass die Geschwindigkeit von Elektron und Projektil zueinander passen. Der Elektroneneinfang dominiert, verglichen mit der Ionisation, bei großen Streuwinkeln. Für einen Elektroneneinfang in höhere Bindungszustände des Projektils sind entsprechend der weiter außen liegenden Schalen, die mit  $1/n^2$  skalieren, weniger enge Stoßparameter erforderlich. Unter der Annahme eines ruhenden Elektrons ist der maximal mögliche transversale Impulsübertrag durch die Massenverhältnisse der Stoßpartner (Projektil und Elektron) festgelegt. Für Protonen gilt dann:  $\theta_P = m_e/m_P = 0,55$  mrad. Größere Streuwinkel beruhen in der Regel auf der Kern-Kern-Streuung [FKri90]. Aber auch große transversale Impulskomponenten des Elektrons (relativ zur Flugrichtung des Projektils) vergrößern die Auslenkung des Projektils. Je schneller das Projektil ist, desto wichtiger ist aber, dass die Geschwindigkeitsvektoren von Projektil und Elektron parallel sind (siehe OBK-Näherung im nächsten Abschnitt).

Ferner treten bei höheren Projektilgeschwindigkeiten weitere Prozesse auf, die schlussendlich den Wirkungsquerschnitt dominieren. Ein freies Elektron kann nur eingefangen werden, wenn dessen (sehr große) kinetische Energie im Projektilsystem durch einen anderen Prozess abgeführt bzw. aufgenommen werden kann. Besitzt das Projektil ein Elektron, kann es zur dielektronischen Rekombination [WShi01, CBra03, AArt05], dem zeitinversen Auger-Prozess kommen. Die überschüssige kinetische Energie wird in Anregungsenergie eines weiteren im Projektil gebundenen Elektrons umgewandelt. Befindet sich kein Elektron im Projektil, welches die Energie absorbiert, kann die überschüssige Energie in Form eines Photons emittiert werden. Dieser Prozess wird als radiativer Elektroneneinfang (**R**adiative **E**lectron **C**apture, REC) bezeichnet [RSha79, TSto91, TSto94, GBed03] und ist wie die dielektronische Rekombination für die durchgeführten Experimente von keiner weiteren Relevanz.

# 4.2.1 Quantenmechanische Näherungsmethoden

Ohne Näherungsverfahren lässt sich der Elektronentransfer - jedenfalls formal - ausschließlich für Proton-Wasserstoff-Kollisionen mittels der Faddeev-Gleichungen lösen. Praktisch war es bisher nicht möglich das System der gekoppelten Integralgleichungen zu berechnen und einen Wirkungsquerschnitt zu extrahieren. Abgesehen von einem Wasserstoff-Target, ist bereits für Helium und alle weiteren Atome schon der Anfangszustand nicht hinreichend exakt bekannt. Ebenso herrscht Unsicherheit über die genaue Art der Wechselwirkung (welche Teilchen aktiv involviert sind), so dass diese beiden Punkte bereits weitere Näherungen erforderlich machen. Der Elektroneneinfang kann mit den in Unterkapitel 4.1.2 erläuterten Verfahren, der ersten und zweiten Bornschen Näherung oder auch mittels der CDW-Näherung berechnet werden.

Der eigentliche Prozess des Elektronentransfers wird als kinematischer Einfang bezeichnet. Anschaulich ist die Wahrscheinlichkeit am größten, dass das Elektron vom Target in einen gebunden Projektilzustand wechselt, wenn das Elektron die gleiche Geschwindigkeit besitzt wie das Projektil ( $v_e = v_P$ ), die Relativgeschwindigkeit zwischen beiden Teilchen möglichst null ist. Man spricht hier auch vom velocity matching. Bereits 1928 entwickelte Oppenheimer eine quantenmechanische Theorie zum Elektroneneinfang in  $\alpha$ -H-Stößen [JOpp28a, JOpp28b, JOpp28c]. Heute ist dieser Ansatz als Oppenheimer-Brinkman-Kramers-Näherung (OBK) bekannt [MMcD70] und fußt auf der störungstheoretischen Beschreibung in erster Bornscher Näherung, weshalb sie auch als OBK1 bezeichnet wird. Die Wahrscheinlichkeit für einen Elektroneneinfang berechnet sich nach [MMcD70] durch:

$$\sigma_{OBK1} = \frac{1}{2\pi^2 v_P^2} \int_{p_{min}}^{\infty} \left| T_{OBK1}^{i,f} \right|^2 p dp \quad .$$
(4.49)

Dabei ist p der longitudinale Impulsübertrag zwischen Anfangs- und Endzustand. Das Übergangsmatrixelement  $T_{OBK1}^{i,f}$  ist wiederum gegeben durch:

$$T_{OBK1}^{i,f} = \langle \Psi^f | - Z_T / r_{T,e} | \Psi^i \rangle$$
(4.50)

mit  $Z_T$  der Kernladungszahl des Targets und  $r_{T,e}$  dem Abstand des Elektrons vom Targetnukleus. Die untere Integrationsgrenze in Gleichung 4.49, beschreibt den minimalen longitudinalen Impulsaustausch zwischen Anfangsund Endzustand:

$$p_{min} = \frac{v_P^2 - Q}{2v_P}$$
(4.51)

mit Q der Energiedifferenz zwischen Anfangs- und Endzustand (vgl. Definition 3.5). Das Übergangsmatrixelement in Gleichung 4.50 beschreibt den Elektronentransfer durch den Überlapp der Wellenfunktionen des Anfangs- und
Endzustandes im Impulsraum, verschoben um die Projektilgeschwindigkeit  $v_P$ . Für resonante Elektronentransfer (Q = 0) bzw. große Projektilgeschwindigkeiten ( $v_P >> Q$ ) vereinfacht sich Gleichung 4.51 zu:

$$p_{min} = v_P/2$$
 . (4.52)

Der Überlapp der Wellenfunktionen wird für ein gegebenes Stoßsystem also für  $v_P/2$  maximal. Für sehr hohe Projektilgeschwindigkeiten konvergiert der totale OBK1-Wirkungsquerschnitt für den Einfang in den Zustand n gegen [JOpp28b, MMcD70, RSha79]

$$\sigma_{OBK1} = \frac{2^{18}\pi Z_P^5 Z_T^5}{5n^3 v_P^{12}} \quad . \tag{4.53}$$

Besonders im mittleren Geschwindigkeitsbereich wird der totale Einfangquerschnitt aber deutlich überschätzt, wofür unter anderem die Vernachlässigung der Kern-Kern-Wechselwirkung [JJac53] die Ursache ist.

Mit ihr lassen sich daher auch nur Einfachelektronentransfers beschreiben. Unabhängig von der Anzahl der vorhandenen Elektronen wird ein Dreikörpersystem (Projektil, Elektron und Targetkern bzw. effektives Potenzial) angenommen. Im Falle eines Mehrelektronentargets wird von unabhängigen Elektronen ausgegangen, dem Independent-Electron-Model<sup>6</sup> [DBel88]. Dieses "einzige" Elektron bewegt sich im effektiven Targetpotenzial, welches im Falle von Helium  $Z_T$ =1,69 beträgt [DBel79, RSha79]. Ein vergleichbarer Ansatz wurde schon zuvor im Rahmen der CTMC-Theorie (siehe Unterkapitel 4.1.1) angenommen, um die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in statischer Form zu implementieren. Die Kern-Kern-Wechselwirkung (Projektil-Target), welche die Rutherfordstreuung beinhaltet, wird komplett vernachlässigt. Daher werden streuwinkel-differenzielle Wirkungsquerschnitte beim maximal möglichen transversalen Impulsübertrag von 0,55 mrad bei H<sup>+</sup>-Projektilen enden.

Rechnungen mit gestörten Wellen (Unterkapitel 4.1.2.2), beispielsweise der CDW-Näherung, ergeben wesentlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Der Prozess des Einfangs ist in beiden Näherungen, der CDW und der OBK1, der gleiche, nämlich velocity matching. Der totale Wirkungsquerschnitt wiederum im Limes hoher Projektilgeschwindigkeiten ist gegeben durch [VMer96]:

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Das Independent-Electron-Model wird häufig auch als Independent Particle Model (IPM) bezeichnet.

$$\sigma_{CDW} = \left(0,2946 + \frac{5\pi}{2^{11}} \frac{v_P}{(Z_P + Z_T)}\right) \sigma_{OBK1}$$
(4.54)

und fällt mit  $v_P^{-11}$ , ähnlich des klassischen Thomas-Prozesses [LTho27]. Für das einfachste untersuchte Stoßsystem Proton-Helium sind Rechnungen zum Einfachelektroneneinfang beispielsweise bei [TWin74, DBel77, DBel78, RGay91, PAbu05] zu finden, im Falle von He<sup>+</sup>-Projektilen bei [IMan96] und für He<sup>2+</sup>-Projektilen bei [DBel77, HBus97, PAbu04].

Um im Limes hoher Projektilgeschwindigkeiten überhaupt Elektronentransfers zu erhalten, werden Prozesse dominant, welche eine weitere Wechselwirkung voraussetzen, sodass das Elektron auf Projektilgeschwindigkeit beschleunigt wird. Hierzu zählt vor allem der Elektron-Kern- sowie der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess (siehe hierzu den Unterkapitel 4.2.3) [RSha78, JBri79, JBri80, JMcG82a, JMcG83, JMcG84, SAls88b, TIsh88, JMcG89, NTos93, IMan05]. Die dafür erforderliche theoretische Beschreibung erfordert entsprechend des Doppelstreucharakters mindestens eine störungstheoretische Behandlung in zweiter Ordnung, welche meist in der Oppenheimer-Brinkman-Kramers-Näherung (OBK2<sup>7</sup>) durchgeführt wird. Analog ist für den Zweifachelektronentransfer in ein He<sup>2+</sup>-Projektil ebenfalls eine Beschreibung in zweiter Ordnung erforderlich [DBel93, DBel94a, DBel94b].

Im Gegensatz zur OBK2-Näherung wird in der Strong-Potential-Born-Näherung (SPB), ebenfalls einer Theorie zweiter Ordnung, die Wechselwirkung zwischen dem aktiven Elektron und dem Targetkern berücksichtigt [JMcG85, JBur86, SAls88a]. Das Übergangsmatrixelement enthält gegenüber der OBK2-Näherung zusätzlich das Störpotenzial  $V_{T,e1}$  und ist auch dann noch gültig, wenn die Näherung ( $v_P \gg Z_P, Z_T$ ) nicht mehr erfüllt ist. Der totale Wirkungsquerschnitt für Elektronentransfers in Proton-Helium-Stößen ergibt sich danach zu [JMac82]:

$$\sigma_{SPB} = \left(0, 319 + \frac{5\pi}{2^{11}} \frac{v_P}{Z_T}\right) \sigma_{OBK1} \quad .$$
 (4.55)

Mit einer besseren Beschreibung der Randbedingungen lassen sich schon in erster Bornscher Näherung sehr viel bessere Ergebnisse erzielen. Die sog. CB1-3B-Näherung (3-body corrected first Born) verwendet hierzu Roothaan-Hartree-Fock (RHF) oder wasserstoffähnliche Modelle zur Beschreibung des

 $<sup>^7</sup>$  Die Ziffer "2" entsprechend der Anzahl der Wechselwirkungen bzw. der Ordnung der Störungstheorie.

Targetanfangszustandes [DBel88, IMan96]. In mittleren und hohen Energiebereichen wird der absolute Wirkungsquerschnitt sehr gut reproduziert, jedenfalls so lange die Thomas-Prozesse noch zu vernachlässigen sind. Abgesehen von der OBK, der CDW und der gerade erwähnten CB1-3B-Näherungen gibt es viele weitere theoretische Ansätze, wie die 'boundary corrected continuum intermediate state' (BCIS) Methode [DBel93], die 'Born distorted wave' (BDW) Theorie [DBel94a, DBel94b], die 'forced impulse method' (FIM) [AFor94], der Faddeev-Watson-Lovelace-Näherung (FWL) [KWat52, CLov64, EGha04] und die Impuls-Näherung<sup>8</sup> (Impulse Approximation, IA) [MGra92], um nur ein paar zu nennen.

#### 4.2.2 Shake over

Der "shake over" [JMcG88, AGod04] ist ein rein quantenmechanisches Phänomen und besitzt kein klassisches Analogon. Ähnlich des "shake off"-Prozesses [JMcG95] ist eine instantane Änderung des effektiven Kernpotenzials Voraussetzung, welche z. B. durch Ionisation oder Einfang geschehen kann. Für kurze Zeit ist dann die Wellenfunktion des noch gebundenen Elektrons nicht mehr Eigenfunktion des nun veränderten Potenzials und das Elektron wird in einen gebundenen Projektilzustand "geschüttelt" bzw. im Falle des shakeoffs ins Kontinuum. Je schneller sich das Kernpotenzial ändert, desto wahrscheinlicher sind diese Prozesse [AKna02a]. Der "shake-over" lässt sich im Impulsraum nicht von einem kinematischen Einfang unterscheiden und auch die Theorie hält ihn - im untersuchten Energiebereich bis 630 keV/u - für vernachlässigbar [JMcG88]. Im Gegensatz zum shake-over ist der shake-off für die durchgeführten Experimente von größerer Bedeutung, weshalb Details dieses Prozesses später, in Unterkapitel 4.3.6 und 4.4.3, zu finden sind.

#### 4.2.3 Thomas-Prozesse

1927, in den Anfangszeiten der Quantenmechanik und der Atomphysik, erdachte L. H. Thomas einen rein klassischen Prozess, wie ein langsames Elektron in ein sehr viel schnelleres Projektil transferiert werden könnte, ausschließlich basierend auf der Newtonschen Mechanik und der klassischen Rutherfordschen Streutheorie. Grundgedanke war eine Doppelstreuung; das Projektil streut am Elektron und dieses am zweiten Elektron bzw. am Targetkern. Das Elektron besitzt anschließend den gleichen Geschwindigkeitsvektor, wie das Projektil und kann leicht in einen gebundenen Zustand überge-

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> Mehrteilchenwechselwirkungen werden auf Zweiteilchenwechselwirkungen zwischen einem unendlich schweren Projektil und einem Elektron reduziert, bei kompletter Vernachlässigung des Targetkerns.

hen [LTho27]. Entsprechend den beteiligten Stoßpartnern wird der eben skizzierte Mechanismus als Elektron-Kern (e-N) Thomas-Mechanismus bezeichnet. Findet die zweite Streuung nicht am Kern, sondern am zweiten Elektron statt, spricht man vom Elektron-Elektron (e-e) Thomas-Mechanismus. Beide Prozesse resultieren in einem Elektroneneinfang. Allerdings wird beim e-e-Thomas-Mechanismus zusätzlich ein Elektron emittiert. In einer quantenmechanischen Rechnung handelt es sich um Prozesse 2. Ordnung.



**Abbildung 4.8:** Schematische Darstellung des a) Elektron-Kern- und b) Elektron-Elektron-Thomas-Prozesses.

Thomas' Idee liegen zwei Näherungen zu Grunde: Erstens wird das Elektron als quasi in Ruhe angenommen. Zweitens wird zusätzlich davon ausgegangen, dass das Elektron frei ist. Das Kernpotenzial übt keinen gravierenden Einfluss auf die Trajektorie des gestreuten Elektrons mehr aus. Die Dreiteilchen-Wechselwirkung wird später in zwei unabhängige Zweiteilchen-Wechselwirkungen aufgeteilt, was nur möglich ist, solange die Projektilgeschwindigkeit deutlich größer ist als die Anfangsgeschwindigkeit des Elektrons. Im Gegensatz zum klassischen CTMC-Verfahren, welches den Anfangszustand durch ein Ensemble von Startorten und -impulsen nähert, setzte Thomas für seine Elektronen eine Deltadistribution an. Für den Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus, verdeutlicht in Abbildung 4.8 a, streut zuerst das Projektil elastisch am Elektron. Beträgt der Winkel hier

$$\theta_{z,P} = \sin 60^{\circ} m_e / m_P \tag{4.56}$$

gemessen relativ zur Projektilflugrichtung, z-Achse und streut dieses Elektron wiederum elastisch am Targetkern, ebenfalls unter einem Winkel von 60°, verlässt es unter 0° das Target mit dem gleichen Geschwindigkeitsvektor wie das Projektil ( $\vec{v}_e = \vec{v}_P$ ). Das sich im Projektilsystem in Ruhe befindende Elektron kann leicht in einen gebundenen Zustand des Projektils übergehen. Ebenso ist der Einfang in Kontinuumszustände des Projektils [VRod00] möglich (siehe Unterkapitel 4.3.2 zu weiteren Details des Cusps). Für den Elektron-Kern-Thomas-Prozess ergibt sich nach Gleichung 4.56 für H<sup>+</sup>-Projektile ein Streuwinkel von 0,471 mrad bzw. 0,157 mrad für <sup>3</sup>He<sup>+</sup>-Projektile. Mit den Annahmen, dass sich das Elektron gemäß des Bohrschen Atommodells im Target (T) auf einer festen Kugelschale mit dem Radius  $r_{T,e}$  aufhält, ergibt sich für die Elektron-Kern-Doppelstreuung ein Wirkungsquerschnitt von:

$$\sigma^{eN} = \frac{64\sqrt{2}}{3}\pi a_0^2 \left(\frac{Z_T}{e}\right)^2 \left(\frac{Z_P}{e}\right)^{7/2} \left(\frac{a_0}{r_{T,e}}\right)^{7/2} \left(\frac{v_0}{v_P}\right)^{11} \cdot n_{T,e}$$
(4.57)

mit  $v_0$  und  $a_0$  der klassischen Bohrschen Elektronenorbitalgeschwindigkeit und dem -radius im Wasserstoff,  $Z_P$  und  $Z_T$  den Kernladungen von Projektil und Target, e der Elementarladung,  $v_P$  der Projektilgeschwindigkeit und  $n_{T,e}$  der Anzahl an Targetelektronen. Die Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit auf einer Kugelschale entspricht natürlich nicht einer realistischen Näherung. Klassische Rechnungen von Bates [DBat66], in denen die diskrete Aufenthaltswahrscheinlichkeit durch eine klassische adäquate Verteilung ersetzt wurde, ergeben für den Proton-Helium-Stoß lediglich eine  $v_P^{-9}$ -Abhängigkeit. Dies steht in erheblichem Gegensatz zu Thomas'  $v_p^{-11}$ -Abhängigkeit und demonstriert den enormen Einfluss des Anfangszustandes auf die  $v_P$ -Abhängigkeit; eine Tatsache, die vor allem im Hinblick auf quantenmechanische Rechnungen [RSha74, JBri79, PSim82, TIsh88, JMcG89, STol00, IMan05] immer bedacht werden muss. Verglichen mit der  $v_P^{-12}$ -Abhängigkeit des kinematischen Einfangs (OBK1) ist zu erwarten, dass bei hohen Projektilgeschwindigkeiten der Einfang durch den Thomas-Mechanismus dominant wird. Quantenmechanische Rechnungen im Rahmen der 2. Bornschen Näherung ergeben für den Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus [JBri79]:

$$\sigma_{SBA}^{eN} = 2^7 \pi^2 \frac{Z_P^5 Z_T^5}{Z_P + Z_T} v_P^{-11} \quad . \tag{4.58}$$

Ist statt des Targetkerns das zweite Elektron an der Streuung beteiligt, spricht man vom Elektron-Elektron-Thomas-Prozess. Verglichen mit dem e-N-Thomas-Prozess wird das Elektron (1) beim ersten Stoß unter 45° gestreut. Im zweiten Stoß streut das Elektron (1) dann nicht am Kern, sondern wieder an einem Elektron (2) (erneut unter 45°) und verlässt das Target mit dem gleichen Geschwindigkeitsvektor wie das Projektil ( $\vec{v}_P = \vec{v}_e$ ). Der Stoßpartner, das Elektron (2), erhält bei entsprechend hoher Projektilgeschwindigkeit einen so hohen Impuls, dass es das Target senkrecht zur Flugrichtung des Projektils verlässt. Per Definition muss die Wechselwirkung der drei Teilchen in einer Ebene stattfinden. Klassisch ergibt sich für den e-e-Thomas-Prozess ein Wirkungsquerschnitt [LTho27]:

$$\sigma^{ee} = \frac{4}{3}\pi a_0^2 \left(\frac{Z_P}{e}\right)^{7/2} \left(\frac{a_0}{r_{T,e}}\right)^{7/2} \left(\frac{v_0}{v_P}\right)^{11} \cdot n_{T,e} \cdot 2(n_{T,e} - 1 + n_{P,e})$$
(4.59)

und in 2. Bornscher Näherung [JBri79]:

$$\sigma_{SBA}^{ee} = 2^4 \pi^2 \frac{Z_P^5 Z_T^3}{Z_P + \sqrt{2} Z_T} \cdot v_P^{-11} \quad . \tag{4.60}$$

Im Faktor  $2(n_{T,e} - 1 + n_{P,e})$ , der die Anzahl der verfügbaren Stoßpartner (der Elektronen) berücksichtigt, spiegelt sich wider, dass die zweite Elektronenstreuung auch mit einem Elektron im Projektil erfolgen kann. Der Vorfaktor 2 trägt der Ununterscheidbarkeit der Elektronen Rechnung (Beim zweiten Stoßprozess kann sowohl Elektron 1 eingefangen und Elektron 2 emittiert werden, aber ebenso kann der umgekehrte Fall eintreten.). Bildet man das Verhältnis aus Elektron-Elektron- und Elektron-Kern-Thomas-Prozess (Gl. 4.60/Gl. 4.58), erhält man für H-He einen Wert von 2,45 %, für He-He 2,59 % und im Limes eines unendlichen Projektilpotenzials 3,12 %. Außerdem wird entlang:

$$\vec{p}_P + \vec{p}_e = -\vec{p}_{Rec} = 0 \tag{4.61}$$

ein Maximum des Wirkungsquerschnitts vorhergesagt, das als kinematischer Rücken 2. Ordnung (KR2) bezeichnet wird und eine Singularität bei  $\theta_P = 1/m_P$ , entsprechend der Position des Elektron-Elektron-Thomas-Peaks ( $\theta_{eP}$ =90°), besitzt [JBri79]. Dies ist vermutlich eine Folge der Anfangsimpulsverteilung der gebundenen Elektronen, die Thomas vernachlässigte. Mit diesen Betrachtungen, Gleichung 3.37, und den Forderungen  $\vec{p}_{Rec}$ =0 und  $Q_C, E^i_{Bdg,e}$ =0 folgt daraus:

$$p_{z,e} = -\frac{m_e v_P}{2} + \frac{\vec{p_e}^2}{2m_e v_P}$$
(4.62)

und weiterhin

$$\cos \theta_{eP} = \frac{p_e^2 - v_P^2}{2p_e v_P} \quad . \tag{4.63}$$

Die ersten Experimente zum Elektronentransfer, die die Vorhersagen des Thomas-Mechanismus' bestätigten, wurden von Horsdal [EHor82, EHor83] und Vogt [HVog86] durchgeführt. Eine leichte Überhöhung des Wirkungsquerschnitts fanden sie bei einem Streuwinkel von rund 0.5 mrad (10 < $v_P \leq 17$  a. u.). In späteren Experimenten verglichen sie die streuwinkel differenziellen Verhältnisse des Elektroneneinfangs mit denen einer Transferionisation ( $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ ) und fanden auch bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten ( $2,8 \le v_P \le 4,5$  a. u.) eine deutliche Überhöhung bei 0,55 mrad [EHor86] (siehe Abbildung 4.9 a). Entgegen der Vermutungen von Horsdal entspricht diese Überhöhung allerdings nicht dem e-e-Thomas-Prozess, sondern wurde im Rahmen eines Modells unabhängiger Elektronen von Gayet reproduziert und mit einem kinematischen Einfang, gefolgt von einem binären Projektil-Elektron-Stoß, erklärt [RGay91]. Erste experimentelle Evidenzen des e-e-Thomas-Prozesses wurden von Palinkas [JPal89] in winkelaufgelösten Elektronenemissionsspektren der Transferionisation gefunden, die bei einem Winkel von  $\theta_{eP}$ =90° eine Überhöhung aufwiesen (siehe Abbildung 4.9 b).

### 4.3 Ionisationsprozesse

Nach den einleitenden Beschreibungsmöglichkeiten durch klassische, störungstheoretische und nicht-perturbative Verfahren lautet die diesen Abschnitt kennzeichnende Frage, welche Mechanismen ein im Target gebundenes Elektron ins Kontinuum befördern:

$$P^{q+} + T \to P^{q+} + Rec^{n_{Rec}+} + n_{Rec} \cdot e^{-}$$
 . (4.64)

Ionisationsreaktionen unterscheiden sich in vielerlei Punkten erheblich vom Elektroneneinfang und ermöglichen somit einen ganz anderen Blick in die Dynamik des Atoms. Von experimenteller Seite ist zu erwähnen, dass Ionisation noch bei vergleichsweise niedrigen Störungen und hohen Projektilgeschwindigkeiten gut untersucht werden kann. Außerdem stehen im Gegensatz zum Elektronentransfer mehr Observablen zur Verfügung als nur der



**Abbildung 4.9:** a) Verhältnis der streuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitte von  $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$  Transferionisation zu Elektroneneinfang [EHor86]) und b) Elektronenemissionswinkel der Transferionisation von Palinkas et al. [JPal89] mit Rechnung in 2. Bornscher Näherung (durchgezogene Linie). Die vollen Kreise entsprechen dem Stoßsystem 1 MeV H<sup>+</sup>/He und die offenen Kreise 1 MeV H<sup>+</sup>/Ne.

absolute Wirkungsquerschnitt und der transversale Impulsübertrag (Streuwinkel). Im Endzustand liegen drei freie Teilchen (Projektilion, Rückstoßion und Elektron) vor, die alle miteinander wechselwirken konnten. 5 der 9 möglichen Freiheitsgrade der Bewegung sind jedoch nur unabhängig. Daher wird in diesem Abschnitt der Schwerpunkt auf der Struktur der Elektronenemission, dem Fingerabdruck der Reaktion, liegen. Folgende Fragestellungen sollen anhand der Messgrößen geklärt werden:

- Wie läuft der Prozess als solcher ab welches Teilchen wechselwirkt mit welchem und welche Impulsüberträge finden untereinander statt?
- In welchen multi-differenziellen Spektren lassen sich die jeweiligen Prozesse wie identifizieren?
- Wie skalieren die verschiedenen Prozesse mit der Projektilgeschwindigkeit, der -masse und -ladung?

Da im Ausgangskanal alle Teilchen geladen sind, müssen zusätzlich noch spätere Wechselwirkungen zwischen ihnen berücksichtigt werden; man spricht

von einer 'Post Collision Interaction' (PCI). Je geringer die Projektilgeschwindigkeit und die damit einhergehende längere Wechselwirkungszeit ist, desto wahrscheinlicher sind diese Effekte. Anschaulich wird ein emittiertes Elektron vom attraktiven Potenzial des Projektils hinter sich hergezogen. Ein binärer Stoß zwischen Projektil und Elektron (Binary Encounter) wird grundsätzlich sehr ähnliche Eigenschaften aufweisen, ganz gleich, ob er mittels erster Bornscher Näherung, der CDW-Theorie oder klassisch mit der CTMC-Theorie beschrieben wird. Die Unterschiede sind nur marginal und stehen meistens im Zusammenhang mit der Grundzustandsimpulsverteilung der Elektronen im Helium. Im vorangegangenen Unterkapitel über den Elektroneneinfang wurden die Grundlagen der verschiedenen theoretischen Ansätze erläutert. Die Bornsche Reihe und auch die DW-Näherungen (Distorted Wave, siehe Unterkapitel 4.1.2.2) gelten mit kleinen Änderungen für die Ionisation genauso wie zuvor für den Einfang, allerdings nur im Bereich hoher Projektilgeschwindigkeiten. Die CTMC-Theorie kann mit den gleichen Einschränkungen wie schon beim Elektroneneinfang auch die Ionisation gut beschreiben, wenn auch mit einigen Abstrichen bei niedrigen Stoßgeschwindigkeiten. Neu hinzu kommt im Bereich langsamer Stöße noch das "Hidden Crossing" Modell, das vom Prinzip her auch schon bei der Beschreibung quasimolekularer Stöße erläutert wurde. Im nächsten Kapitel werden die Kernpunkte dieses Modells nochmals erläutert und versucht mit dem Begriff der Sattelpunktionisation zu verbinden.

Unabhängig vom genauen Prozess sind an dieser Stelle noch zwei allgemeine Punkte für die Ionisation zu erwähnen. Bei schnellen Stößen findet die Ionisation vor allem bei sehr kleinen Projektiltransversalimpulsen statt, während der Elektroneneinfang von deutlich größeren Transversalimpulsüberträgen dominiert wird. Für den Impuls des Rückstoßions  $p_{z,Rec}$  im Falle einer Einfachionisation (Single Ionization, SI) gilt nach Gleichung 3.39:

$$p_{z,Rec} = \frac{E_{kin,e}^{\Sigma_P} - E_{Bdg,e}}{v_P} - p_{z,e} \quad .$$
(4.65)

Die meisten Ionisationsprozesse führen zu einer eindeutigen Struktur anhand derer sie identifiziert werden können. Einige Stoßbedingungen produzieren langsame Elektronen, sog. "soft electrons" [SMan76]. Sie stammen aus sehr peripheren Stößen und obwohl sie größtenteils einem der zuvor beschriebenen Prozesse, dem Binary Encounter (BE), der Promotion ins Kontinuum im Hidden-Crossing-Modell oder der Photoionisation zugrunde liegen, sind ihre Impulse so gering, dass über ihre Entstehung keine Aussage gemacht werden kann.

#### 4.3.1 Ionisation im molekularen Bild

Die Ionisation im molekularen Bild umfasst zwei verschiedene Mechanismen. Sie entsprechen der S- und der T-Serie. Erstere zeigt zwei scharfe Peaks, welche im Geschwindigkeitsraum um die beiden Potenzialzentren, Projektil und Target, verteilt sind ( $v_{z,e} = 0$  und  $v_{z,e} = v_P$ ). Die S-Serie tritt nur bei kleinen Kernabständen auf, wenn sich das Potenzial sehr schnell ändert. In einem klassischen Bild wird das Elektron von einer anfliegenden Potenzialwand rausgekickt. Das Ganze sieht aus wie ein weicher BE und die molekulare Symmetrie sorgt für die gleichberechtigte Ionisation des Elektrons im Projektil und Target [ESid99].

Die T-Serie wird häufig als Sattelpunktionisation bezeichnet. Die theoretische Grundlage, das Hidden-Crossing-Modell, wurde bereits in Unterkapitel 4.1.4 erläutert. Der Stoßprozess ist als Elektronenbewegung in einem zeitabhängigen Zweizentrenpotenzial zu beschreiben, wobei die beiden Zentren je nach Kernladung der Stoßpartner unterschiedlich attraktiv sind. Entlang der Verbindungslinie der Kerne befindet sich ein Sattelpunkt im Potenzial, welcher sich mit der Geschwindigkeit  $v_{SP}$  bewegt [VIrb89]:

$$v_{SP} = \frac{v_P}{1 + \sqrt{\frac{Z_P}{Z_T}}}$$
 (4.66)

Eine Erhöhung der Projektilladung hat danach zur Folge, dass sich der Sattelpunkt langsamer bewegt. Elektronen aus der Umgebung des Sattelpunktes erfahren nur eine kleine Beschleunigung entlang der internuklearen Achse. Wird der internukleare Abstand vergrößert, stranden die Elektronen auf dem Sattelpunkt und gelangen durch die Anhebung des Potenzials ins Kontinuum. Die minimale Energie des Sattelpunktes, bei nächster Annäherung, muss kleiner oder gleich der Bindungsenergie des Elektrons sein, damit das Elektron den Sattelpunkt erreichen kann.

Die attraktiven Potenziale der beiden Kerne, zwischen denen sich das Kontinuumselektron befindet, führen zu Elektronengeschwindigkeiten, die sich zwischen denen der beiden Teilchen (0 und  $v_P$ ) befinden. Für einen symmetrischen Stoß ist in Abbildung 4.10 die Sattelpunktionisation skizziert. In transversaler Richtung können die Elektronen im attraktiven Zweizentrenpotenzial Oszillationen ausführen. Frühere Erwartungen [ESid00], genau bei der Sattelpunktgeschwindigkeit  $\vec{v}_{SP}$  ein scharfes Maximum zu finden, konnten nicht bestätigt werden; allein die Anfangsimpulsverteilung der Elektronen und fehlende Reibung widersprechen dem schon. Je nach Projektil sowie



Abbildung 4.10: Skizze zur Sattelpunktionisation.

dessen Geschwindigkeit wandert dieses Maximum zwischen diesen beiden Grenzpunkten hin und her [VIrb88], auch wenn über diesen Punkt lange Zeit Uneinigkeit herrschte [RDuB93]. In seinen hochauflösenden Untersuchungen der Einfach- und Transferionisation in He<sup>2+</sup>/He-Stößen bei Geschwindigkeiten zwischen 0,63 und 1,06 a. u. konnte Schmidt zeigen, dass die beobachtete Elektronenimpulsverteilung einer Momentaufnahme einer zwischen zwei Wänden hin- und herschwappenden Welle gleicht [LSch00].

Vergleicht man Projektile gleicher Geschwindigkeit und zunehmenden Ladungszustandes miteinander, wird eine deutliche Verschiebung der Elektronenverteilung in Richtung des Projektils beobachtet [SKra96]. Das einfache Sattelpunktbild ist nur in der Lage zu erklären, wie die zur Ionisation erforderliche Energie auf das Elektron übertragen werden kann. Die folgende Argumentation über die Beschreibung der Elektronenemissionscharakteristik senkrecht zur internuklearen Achse folgt den Untersuchungen Schmidts [LSch00]. Dennoch besitzt das System molekulare Symmetrien wie die Rotationssymmetrie um die Molekülachse, welche im Limit separierter Kerne der Strahlachse entspricht. Promovieren die Elektronen während der Vergrößerung des internuklearen Abstandes entlang einer T-Serie, entspricht in erster Näherung die Molekülachse der Strahlachse, sobald die Elektronen die Kontinuumsgrenze erreichen. Vor und nach dem Stoß ist die magnetische Bahndrehimpulsquantenzahl m gleich und somit eine gute Quantenzahl. Daher ist sie zur Klassifizierung der Zustände entlang der Molekülachse zwar gut geeignet, jedoch bedeutet dies nicht, dass sie sich während des Stoßes nicht ändern kann. So wurde bereits früher gezeigt, dass während der Passage unterschiedliche Zustände miteinander koppeln können, z. B. durch Rotationskopplung. Diese vermischt verschiedene magnetische Bahndrehimpulse innerhalb eines 2p-Zustandes. Daraus und aus der Symmetrie des Potenzials folgt weiterhin, dass innerhalb des neu besetzten Zustandes +m und -m zu gleichen Teilen besetzt werden. Ist  $\varphi$  der Polarwinkel in der Ebene senkrecht zur Quantisierungs- bzw. Molekülachse, so ergibt sich für  $\Lambda = 1$  eine  $\cos \varphi^2$ -Abhängigkeit, während für  $\Lambda = 0$  die Verteilung von  $\varphi$  unabhängig ist.



**Abbildung 4.11:** Transferionisation (TI1) und Einfachionisation (SI1) für He<sup>2+</sup>-He-Stöße bei Projektilgeschwindigkeiten von  $v_P$ =0,90, 0,95 und 1,06 a. u. mit Blick auf die nukleare Streuebene [LSch00].

Bei großen Kernabständen schließlich verschwindet wieder die Rotationskopplung und der ursprüngliche Charakter der Verteilung ( $\cos \phi^2$ ) bleibt weiterhin erhalten. Können die beiden Elektronen im Endzustand als voneinander separiert angesehen werden, so behalten alle bisher gemachten Aussagen ihre Gültigkeit. Dies gilt bei der Verwendung nackter Projektilionen (H<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>) ganz sicher, aber nicht mehr bei He<sup>+</sup>-Projektilen. Den Hauptbeitrag zur Ionisation stammt aus einer Überlagerung von  $\sigma$ - und  $\pi$ -Zuständen, welche wiederum von der Konfiguration der beiden Zustände abhängt. Dabei wurden deutliche Unterschiede zwischen Ionisation und Transferionisation beobachtet. Während die Transferionisation bei kleineren Stoßparametern stattfindet und die Emissionscharakteristik durch  $\pi$ -Zustände dominiert wird, treten bei der Ionisation vor allem  $\sigma$ -Zustände auf, die zu einer fast rotationssymmetrischen Verteilung um die Molekülachse führen.

Der Hauptanteil des Projektiltransversalimpulses stammt aus einer direkten Kern-Kern-Wechselwirkung mit dem Target. Das Elektron ist hierbei nur Zuschauer. Solange durch die verwendeten Projektile (H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup>, He<sup>2+</sup>) und Targets (H, He) nur  $\sigma$ - und  $\pi$ -Zustände besetzt werden können, weisen die Elektronenimpulsverteilungen ähnliche Strukturen auf [MAbd97]. Deutliche strukturelle Änderungen wurden von Abdallah et al. bei asymmetrischen Stoßsystemen (He<sup>+</sup>/Ne) beobachtet und mit der Besetzung von höheren Drehimpulszuständen erklärt [MAbd99]. Ein guter Überblick über die Phänomene und neueste Untersuchungen der Ionisation auf dem Sattelpunkt ist in [MPie97, LPon04] zu finden. Sowohl theoretische wie experimentelle Untersuchungen beschränken sich nahezu ausschließlich auf nackte Projektilionen, wie H<sup>+</sup> [GBer89, RDoe96b] und He<sup>2+</sup> [ROls86, GBer90, TGay90].

Die beobachtete Elektronenverteilung wird maßgeblich durch die langreichweitige Coulombkraft nach der eigentlichen Ionisation des Targets bestimmt und weniger durch den Stoß selbst. Anschaulich kann die Sattelpunktionisation auch als Abfolge vieler BE-Stöße zwischen Elektron und Target- bzw. Projektilkern gesehen werden. Die durch eine Sattelpunktionisation hervorgerufene Elektronenverteilung resultiert aus dem zeitlich veränderlichen Zweizentrenpotenzial von Projektil und Target.

#### 4.3.2 Einfang in Projektilkontinuumszustände (ECC)

Wird ein Elektron in einen Kontinuumszustand (Electron Capture to the Continuum, ECC) eingefangen, spricht man auch vom Cusp<sup>9</sup>; im Bereich der Festkörperphysik werden die diesem Effekt zugrunde liegenden Elektronen als "Convoy-Elektronen" bezeichnet. Die Kinematik dieses Prozesses wurde kurz in Kapitel 3.2.2 erwähnt:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q_{c}}{v_{P}^{i}} + \frac{p_{z,e}^{f^{2}}}{2v_{P}^{i}} - p_{z,e}^{f} \quad .$$
(4.67)

Das in einen Kontinuumszustand eingefangene Elektron bewegt sich mit Projektilgeschwindigkeit ( $v_P = v_{z,e}^f$ )<sup>10</sup>. Die Relativgeschwindigkeit zwischen Elektron und Projektil konvergiert gegen Null, woraus ebenfalls folgt, dass

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup> Der Begriff entstammt dem Englischen Wort für 'Horn' aufgrund der Scheitelform des Elektronenenergiespektrums.

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup> Da in atomaren Einheiten die Elektronenmasse 1 beträgt, gilt auch  $v_P = p_{z,e}^f/m_e$ .

auch der transversale Impulsübertrag auf das Elektron minimal wird ( $p\perp, e=0$ ). Gleichung 4.67 vereinfacht sich zu:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\frac{Q_{c}}{v_{P}^{i}} - \frac{v_{P}^{i}}{2} \quad .$$
(4.68)

Dieser Sachverhalt tritt im Impulsraum des Rückstoßions in Form einer kinematischen Grenzlinie auf, hinter der es unmöglich ist, reale Ereignisse zu finden; andernfalls läge eine Verletzung der Impulserhaltung vor. Ein ähnlicher Prozess kann auftreten, wenn nicht nackte Projektilionen (z. B. He<sup>+</sup>) verwendet werden. Durch Streuung am Targetpotenzial können Elektronen aus dem Projektil an die Kontinuumsgrenze gehoben werden und man spricht vom Electron Loss to Continuum (ELC).



**Abbildung 4.12:** Schematische Darstellung des Zustandekommens des Einfangs in Kontinuumszustände (ECC) im Geschwindigkeitsraum durch Coulombfokussierung.

Zur Deutung des Elektroneneinfangs in Kontinuumszustände gibt es zwei verschiedene Ansätze. Favorisiert wird, dass der ECC kein eigenständiger Effekt, sondern nur das Resultat einer Post-Collision-Interaction (PCI) - auch Finale-State-Interaction (FSI) genannt - ist [YWan96, RBar97]. Niederenergetische Elektronen, die durch andere Ionisationsmechanismen in alle Richtungen emittiert werden, 'sammelt' das geladene Projektil mit seinem attraktiven Coulombpotenzial ein. Diese Coulombfokussierung kann nur im Zweizentrenpotenzial des verbleibenden Ions und des Projektils funktionieren. Spielte der Targetionenrumpf keine Rolle, streute das Elektron elastisch am Projektil und würde nur abgelenkt. Die zum Einsammeln erforderliche Reibung bringt das Potenzial des Targets ein. Nach längerer Stoßzeit weist schließlich das Elektron den gleichen Geschwindigkeitsvektor wie das Projektil auf. Der absolute Wirkungsquerschnitt für ein Wasserstofftarget im mittleren Energiebereich (25 - 500 keV/u) wurde von Olson et al. berechnet zu [ROls78, ROls83]:

$$\sigma_{ECC} = \frac{4 \cdot 10^{-12} q^{-2,3}}{E[kev/u]^{2,5}} \propto \sqrt{\sigma_{ion} \cdot \sigma_{capture}} \quad . \tag{4.69}$$

Nach den bisherigen Erläuterungen ist der Einfang in Projektilkontinuumszustände die Folge einer lange nach dem Stoß stattfindenden Wechselwirkung zwischen Projektil und einem emittierten Elektron. PCI-Effekte können Elektronen auf maximal Projektilgeschwindigkeit und nicht darüber hinaus beschleunigen. Je höher der Ladungszustand des Projektils ist, desto symmetrischer wird der Cusp-Peak in Elektronenenergiespektren, da der verbleibende Ionenrumpf des Targets immer unwichtiger und das attraktive Potenzial des Projektils immer stärker wird [CRei89a].

Nach dieser Erklärung stellt der Einfang in Kontinuumszustände eine Art Übergang zwischen Elektroneneinfang und Ionisation dar, welcher im mittleren Energiebereich und nach Gleichung 4.69 maximal wird, wenn  $\sigma_{ion} = \sigma_{capture}$ ist [ROls77, ROls87a, CRei87]. Für H<sup>+</sup>- und He<sup>+</sup>-Helium-Stöße wurde beobachtet, dass der Wirkungsquerschnitt für den ECC bei etwa  $1, 4 \cdot v_{B,e}$  maximal<sup>11</sup> wird [MRod79, AKoe89]. Die vorwiegende Streuung unter 0° ( $p_{\perp,e}$ ) wurde nur bei Ionenstoß-Experimenten beobachtet [ASal69, GCro70, JMac70], während sie bei Positronen bisher nicht beobachtet wurde [JMox92, RSpa94]. Zu größeren Winkeln gegenüber der Flugrichtung des Projektils wird die Elektronenenergieverteilung immer ausgeschmierter und bei über  $5^{\circ}$  ist kein Peak mehr zu erkennen [JFio01, JFio02]. Der ECC ist auch beim Stoß mit neutralen Projektilen zu beobachten. Allerdings muss der Prozess dahingehend erweitert werden, dass Mehrstufenprozesse stattfinden. Zunächst wird das Projektil selbst ionisiert, sodass die emittierten Elektronen coulombfokussiert werden können. Danach wird ein Elektron, welches auch ein Targetelektron sein kann, wieder in einen gebundenen Zustand eingefangen und ein weiteres in Kontinuumszustände.

Die dem Namen nach auf der Hand liegende zweite Erklärung des Einfangs in Kontinuumszustände stellt der direkte Prozess dar. Dieser ist zunächst einmal von der Anfangsimpulsverteilung der Elektronen im Targetatom abhängig. Der 'adiabatische Elektronenradius', für den die gebundenen Elektronen Projektilgeschwindigkeit ( $v_{B,e}=v_P$ ) besitzen, lässt sich relativ leicht abschät-

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup> Mit  $v_{B,e}$ =1,35 für Helium entspricht dies einer Projektilgeschwindigkeit von  $v_P$ =1,9 a. u.

zen [TWeb97]. Durch Gleichsetzen von kinetischer und potenzieller Energie erhält man:

$$E_{pot} = \frac{Z_T e^2}{r} = m_e v_e^2 = 2E_{kin} \quad . \tag{4.70}$$

Gleichung 4.70 nach r aufgelöst ergibt:

$$r = \frac{Z_T}{v_e^2} = \frac{Z_T}{v_P^2} = r_{ad} \quad .$$
 (4.71)

Für Projektile mit einer Energie von 60 keV/u (entspricht  $v_P$ =1,55 a. u.) ergibt sich für Elektronen im abgeschirmten Potenzial (Z=1,69 - siehe Unterkapitel 4.1.1) von Helium ein adiabatischer Elektronenradius von  $r_{ad}$ =0,7 a. u. und bei 150 keV/u ein Radius von 0,28 a. u. Der klassische Bohrsche Elektronenradius für den Grundzustand (n = 1) ergibt nach

$$r_{B,e} = \frac{n^2 \hbar^2}{Z e^2 m_e^2}$$
(4.72)

und wiederum mit einem abgeschirmten Kernpotenzial (Z=1,69) einen Wert von  $r_{B,e}=0,6$  a. u. Für den ECC-Prozess wurde gefunden, dass der Transversalimpuls auf das Projektil relativ groß ist, deutlich größer als bei der Ionisation und auch beim reinen Elektroneneinfang [TWeb01]. In Anlehnung an dieses Bild wird der ECC auch als Einfang in Rydberg-Zustände beschrieben, deren Bindungsenergien nur wenige meV betragen, die durch Wechselwirkung mit dem verbleibenden Targetionenrumpf (Rückstoßion) ionisieren.

Ältere und auch neuere theoretische Beschreibungen basieren vornehmlich auf CTMC-Berechnungen, da hier die Mehrfachstreuprozesse sehr leicht eingebunden werden können, während störungstheoretische Näherungen, wie die CDW oder die PWBA-Näherung [MRud76], höhere Ordnungen einbinden müssen, was den Rechenaufwand enorm vergrößert. Ebenso konnte der ECC-Prozess bei hohen Geschwindigkeiten und mittleren Störungen ( $v_P>9$ ;  $\eta=2$ ) experimentell beobachtet und theoretisch beschrieben werden [ROls97, ROls98, LSar03]. Allerdings wird für sehr starke Störungen und niedrige Geschwindigkeiten ( $v_P=1,5$ ;  $\eta=5$ ) der ECC im Falle der CTMC-Theorie stark unter- und im Falle der einer CDW-Rechnung stark überschätzt [MAbd97, ROls97].

Ebenso können Targetelektronen ins Kontinuum angeregt werden und man spricht vom EEC-Prozess (Electron Excitation to the Continuum), der um 0 verteilt ist. Solange die Elektron-Projektil-Wechselwirkung von einer Coulomb- oder einer Dipolnatur ist, funktioniert diese klassische Beschreibung des ECCs gut. Sobald aber die e-P-Wechselwirkung schneller fällt als das Dipolpotenzial ( $r^2V_{e-P} \rightarrow 0$ ), fehlt im Elektronenenergiespektrum der Peak bei Null [JFio02, RBar02]. Dies ist beispielsweise für neutrale, polarisierbare Projektile der Fall. Neuere hochauflösende Untersuchungen zeigen, dass bei Projektilgeschwindigkeiten deutlich unterhalb der klassischen Elektronengeschwindigkeit ( $v_P$ =0,7 a. u.) der Cusp-Peak nicht exakt bei Projektilgeschwindigkeit bzw. der entsprechenden Elektronenenergie liegt, sondern leicht zu etwas niedrigeren Energien verschoben ist [MSha03]. Darüber hinaus wird der eigentliche Peak mit geringerer Projektilgeschwindigkeit breiter. Zurückgeführt wird dies auf PCI, die das Elektron zum Targetionenrumpf ziehen [CIII02].

#### 4.3.3 Binärer Stoß

Der anschaulichste und einfachste Ansatz, die Stoßionisation zu beschreiben, ist Näherung einer Rutherfordstreuung an einem ruhenden Elektron. Dabei werden die elektronische Struktur und der Targetkern selbst vernachlässigt. Der differenzielle Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von der kinetischen Energie des Elektrons nach dem Stoß  $E_{kin,e}^{f}$  kann dann geschrieben werden als [MRud92]:

$$\frac{d\sigma_{Rutherford}}{dE_{kin,e}^{f}} \propto \frac{2\pi}{m_{e}v_{P}^{2}} \left(\frac{Z_{P}}{E_{kin,e}^{f} + E_{Bdg,e}}\right)^{2}$$
(4.73)

mit  $E_{Bdg,e}$  der zu überwindenden Bindungsenergie<sup>12</sup>. Dieser sehr vereinfachte Ansatz zeigt dieselbe Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit und -ladung wie die erste Bornsche Näherung. Allerdings gilt Gleichung 4.73 nach den zuvor gemachten Näherungen nur für direkte Stöße zwischen Projektil und Elektron, also  $E_{Bdg,e} \ll E_{kin,e}^{f}$ , und stellt eine starke Vereinfachung dar. Weiche Stöße, i. A. durch Dipolübergänge hervorgerufen, werden vollkommen vernachlässigt, sodass auch der Wirkungsquerschnitt in diesem Bereich dramatisch unterschätzt wird. Grundsätzlich gilt für die totale Ionisationswahrscheinlichkeit in Ion-Atom-Stößen [MIno71]:

$$\sigma \propto \frac{Z_P^2}{E_P \cdot \ln E_P} \quad . \tag{4.74}$$

Auch wenn anschaulich von inelastischen Stößen zwischen Kugeln gesprochen wird (z. B. Billardspiel), ist dieses Bild für Projektil-Elektron-Stöße

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup> Die Bindungsenergie wird häufig auch als Ionisationspotenzial bezeichnet.

eigentlich nicht korrekt. Die unterschiedlichen Ladungen von Projektil (+) und Elektron (-) führen zu einer attraktiven und nicht repulsiven Kraft, wie sie ein Billardspiel erforderte. Angebrachter ist es diesen Stoß mit einem "swing by"-Manöver zu vergleichen, wie ESA oder NASA es durchführen, um Satelliten in den Gravitationsfeldern von Planeten zu beschleunigen [MGry59, RWil41, SCha41]. Viel interessanter ist jedoch die Kinematik des Elektrons. Stößt ein schweres Teilchen, z. B. ein Projektilion, wiederum inelastisch mit einem ungebundenen ruhenden Elektron, kann nach der klassischen Mechanik maximal die kinetische Energie:

$$E_{kin,e}^{max} = 2m_e v_P^2 \tag{4.75}$$

auf das Elektron übertragen werden. In diesem Fall trifft das Projektilion das Elektron zentral und das Elektron wird mit doppelter Projektilgeschwindigkeit in dieselbe Richtung, in welche zuvor das Projektil flog, emittiert. Im Geschwindigkeitsraum entspricht dieser Stoß der Emission des Elektrons auf die Oberfläche einer Kugel, welche den Mittelpunkt bei Projektilgeschwindigkeit ( $v_P$ ) und den Radius  $v_P$  besitzt. Die "Binary-Encounter"-Näherung (BE) überträgt dieses Bild (die Rutherfordstreuung) auf gebundene Elektronen [JTho12, MGry65c, JGar68a]. Aus Gleichung 4.75 folgt, dass die BE-Näherung nur gültig ist, solange

$$v_P > \sqrt{\frac{1}{2} \frac{E_{Bdg,e}}{m_e}} \tag{4.76}$$

gilt, wodurch im Wesentlichen aus dem gebundenen ein quasi-freies Elektron wird. Berücksichtigt man des Weiteren den Emissionswinkel des Elektrons  $\theta_{eP}$ , so gilt in erster Bornscher Näherung [GBer99]:

$$E_{kin,e} \le 2v_P^2 m_e \cos \theta_{eP}^2 - E_{Bdg,e}$$
 . (4.77)

Gleichung 4.77 entspricht den zuvor gemachten Aussagen der Elektronenemission auf eine Kugeloberfläche mit Radius  $v_P$  und wird als kinematischer Rücken 1. Ordnung (KR1) bezeichnet. Um ein Elektron aus einem Helium-Atom ins Kontinuum zu befördern, ist die Bindungsenergie von  $E_{Bdg,e}$ =0,9 a. u. erforderlich. Die Projektilgeschwindigkeit muss für diesen Fall mindestens  $v_P$ >0,7 a. u. betragen, da sonst die Voraussetzung nach Gleichung 4.76 nicht mehr erfüllt ist und das gestreute Elektron dem Potenzial des Targetatoms nicht entweichen kann. Der Elektronenlongitudinalimpuls berechnet sich für den binären Stoß zwischen Projektil und Elektron dann zu [VMer96]:

$$p_{z,e} = \sqrt{2m_e v_P^2 + Q - p_{\perp,e}^2 \pm 2m_e v_P} \sqrt{v_P^2 + Q - p_{\perp,e}^2 + \frac{Q^2}{4v_P^2}} \quad .$$
(4.78)

Aus den Bemerkungen zum kinematischen Rücken 1. Ordnung zusammen mit Gleichung 3.39 über die kinematischen Grundlagen ergibt sich für den Rückstoßionenlongitudinalimpuls und -transversalimpuls nach [VMer96]:

$$p_{z,Rec} = 2v_P \cos \theta_{eP}^2 \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{E_{Bdg,e}}{2v_P^2 \cos \theta_{eP}^2}}\right)$$
(4.79)

$$p_{\perp,Rec} = 2v_P \sin \theta_{eP} \cos \theta_{eP} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{E_{Bdg,e}}{2v_P^2 \cos \theta_{eP}^2}}\right) \quad . \tag{4.80}$$

Diese Gleichungen spiegeln wider, dass das Elektron den Potenzialberg des Targetatoms hochlaufen muss. Dadurch wird das Elektron abgebremst und umgekehrt wird das Rückstoßion in Vorwärtsrichtung beschleunigt. Dass das Rückstoßion in einer Kollision zwischen Elektron und Projektil überhaupt einen Impulsübertrag erfährt, ist anschaulich die Folge der Inelastizität, mit welcher das Elektron an das Rückstoßion (Targetkern) gebunden ist. In Gleichung 4.80 wurde die Kern-Kern-Wechselwirkung vernachlässigt; Elektron und Rückstoßion laufen in entgegengesetzte Richtungen auseinander. Je niedriger die Projektilgeschwindigkeit ist, desto größer ist der Impulsübertrag auf das Rückstoßion. Im Grenzfall sehr hoher Projektilgeschwindigkeit konvergieren die Rückstoßionenimpulse gegen das Photolimit; in longitudinaler Richtung ist die Beschleunigung null ( $p_{z,Rec}=0$ ).

Neben der Elektronenemission in Vorwärtsrichtung (Binary Peak) wurden auch Elektronen entgegen der Projektilflugrichtung beobachtet (Recoil Peak). In diesem Fall erhalten die Elektronen durch einen Stoß mit dem Projektil einen hohen Impuls, der auf den Targetkern zeigt. Als nächstes wird das Elektron durch eine Rutherford-Streuung mit dem Targetkern in entgegengesetzter Richtung emittiert; in der Sprache der Quantenmechanik wird die Elektronenwelle am Targetkern reflektiert (Glory-Effekt). Klassische Rechnungen zum Proton-Wasserstoff-Stoß zeigen folgende Abhängigkeit des absoluten Wirkungsquerschnitts unter der Voraussetzung sehr schneller Stöße [IPer66, LVri67]:

$$\sigma^{BE} = \frac{4\pi a_0^2}{v_P / v_{B,e}}^2 0,28^2 \ln\left(4 \cdot 3,05 \left(\frac{v_P}{v_{B,e}}\right)^2\right) \quad . \tag{4.81}$$

#### 4.3.4 "Photoionisation"

Wird die Geschwindigkeit der Projektile sowie deren Ladungszustand immer weiter gesteigert, ergeben sich Parallelen zur Photoionisation. In relativistischen Schwerionenstößen (z. B. U<sup>92+</sup> bei 1 GeV/u) ist das erzeugte Feld nahezu identisch mit dem eines freien Strahlungsfeldes. Auf diese Weise können die kürzesten und leistungsstärksten elektromagnetischen Felder überhaupt erzeugt werden, im Subattosekunden-Bereich und mit Leistungsdichten von  $10^{21}$  W/cm<sup>2</sup> [RMos97]. Das Projektil induziert ein zeitabhängiges elektromagnetisches Feld. Die Ionisation selbst wird durch Absorption eines oder mehrerer virtueller Photonen erklärt. Allerdings müssen die Stöße nicht unbedingt relativistisch sein, um vergleichbare Effekte zur Photoionisation zu erzielen - jedenfalls solange die Impulsüberträge q klein bleiben [CWei34, JJac62]. In Unterkapitel 3.2.2 konnte bereits gezeigt werden, dass in einem solchen Stoß die Elektronen und das Rückstoßion ähnlich einer Dissoziation in entgegengesetzte Richtung emittiert werden:

$$p_{z,Rec}^{f} = -\sum_{j=1}^{n_{Rec}} p_{z,e_{j}}^{f} \quad .$$
(4.82)

Der Vergleich zwischen Photo- und photoneninduzierter Stoßionisation kann teilweise schon aus der Bornschen Näherung gezogen werden. Das Übergangsmatrixelement aus Gleichung 4.27 lässt sich u. a. nach der Vernachlässigung der Kern-Kern-Wechselwirkung in 1. Bornscher Näherung umschreiben zu:

$$T_{FBA}^{f,i} = \frac{1}{q^2} \left\langle \varphi^f \left| e^{i\vec{q}\cdot\vec{r_e}} \right| \varphi^i \right\rangle \quad . \tag{4.83}$$

Entwickelt man die Exponentialfunktion in eine Potenzreihe und berücksichtigt nur den ersten Term, verschwindet aufgrund der Orthogonalität des Anfangs- und Endzustandes der Monopolterm und man erhält die Dipolnäherung:

$$T_{FBA}^{f,i} = \frac{i}{q^2} \left\langle \varphi^f \left| \vec{q} \cdot \vec{r_e} \right| \varphi^i \right\rangle \quad . \tag{4.84}$$

Im Falle einer Photoionisation sähe die Übergangsamplitude vergleichbar aus. Allerdings stünde statt des Impulsübertrages  $\vec{q}$  der Polarisationsvektor des Photons und anstatt des Energieübertrages  $1/q^2$  die Energie des absorbierten Photons. Für Stöße mit kleinem Impulsübertrag und geringer Störung sind sowohl 1. Bornsche als auch Dipolnäherung gültig. Allerdings gibt es auch einige entscheidende Unterschiede, z. B. sind in der Stoßionisation deutlich mehr Freiheitsgrade vorhanden. Im Gegensatz zur Photoabsorption sind der Energie- und Impulsübertrag nicht vorher bereits festgelegt.

Aus Gründen der Drehimpulserhaltung folgt, dass die Absorption eines Photons ein Elektron von einem s- in einen p-Zustand überführt. Für die Winkelverteilung des Elektrons ergibt sich dann eine  $\cos^2$ -Verteilung. In Abbildung 4.13 ist eine solche Verteilung dargestellt. In beiden Fällen ist die Verteilung rotationssymmetrisch um den Polarisations-  $\vec{\varepsilon}$  bzw. den Impulsübertragsvektor  $\vec{q}$ . Ein Minimum in der zu  $\vec{q}$  senkrechten Richtung ist zu beobachten, welches durch die Dipolauswahlregeln hervorgerufen wird.



**Abbildung 4.13:** Skizzierte Winkelverteilung einer Einfachionisation für Photoionisation und stoßinduzierter Ionisation durch relativistische Projektilionen aus [DFis03].

Ein entscheidender Unterschied ist, dass im Falle der Stoßionisation die Spiegelsymmetrie senkrecht zur Propagationsrichtung gebrochen ist. Im Gegensatz zur Photoionisation, die keine Vorzugsrichtung kennt, wird durch  $\vec{q}$  die Richtung festgelegt. Die größere der beiden Verteilungen - entlang von  $\vec{q}$  wird als Binary-Peak und die kleinere Verteilung - in entgegengesetzter Richtung - wird als Recoil-Peak bezeichnet. Die große Keule in Richtung von  $\vec{q}$ stammt von einer direkten Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron und wird daher auch Binary-Peak genannt. Der Stoß selbst findet quasi ohne Beteiligung des Targetkerns statt. Der kleine Recoil-Peak stammt von Elektronen, die nach dem Stoß mit dem Projektil zusätzlich am Targetkern gestreut werden. Der dadurch auf den Targetkern ausgeübte Rückstoß (englisch: recoil) ist Namenspate. Diese Strukturen wurden sowohl in Elektronenund Ionenstoßexperimenten [JUll95, RMos97] gefunden. Abhängig vom gewählten Stoßsystem unterscheiden sich Recoil- und Binary-Peak in ihren relativen Größen. Mit steigendem Impulsübertrag nimmt die relative Intensität des Recoil-Peaks immer weiter ab und für große Impulsüberträge spricht man vom *Binary Limit*. Im Grenzfall sehr kleiner Impulsüberträge sind beide Keulen nahezu gleich ausgeprägt und man spricht vom *Photo Limit*.

## 4.3.5 Abregung durch Elektronenemission

Befindet sich ein Elektron in einem angeregten Zustand, so kann es durch Aussendung eines Photons wieder in den Grundzustand übergehen. Befinden sich zwei Elektronen in angeregten Zuständen oder enthält ein Vielelektronensystem (n>3) eine Vakanz in einer unteren Schale, so kann die Abregung auch durch Elektronenemission erfolgen. Als Konkurrenzprozess zur Fluoreszenzabregung erweist sich der Auger-Zerfall [PAug25]. Dieser wird durch Angabe der Hauptquantenzahl der ursprünglichen Vakanz und des emittierten Elektrons beschrieben. Ein KLL-Übergang entspricht:

K: Loch in der K-Schale

L: ein Elektron aus der L-Schale füllt das K-Loch auf

L: ein Elektron aus der L-Schale wird emittiert

Am häufigsten wird der Auger-Zerfall in Experimenten zur Photoionisation mit Atomen oder Molekülen untersucht. Mittels Synchrotronstrahlung wird beispielsweise ein Loch in der K-Schale erzeugt [TJah02]. Ein Elektron aus einer äußeren Schale füllt diese Vakanz auf. Die dabei frei werdende Energie wird nicht in Form eines Photons frei; vielmehr wird die Energie auf ein Elektron übertragen, welches daraufhin emittiert wird. In Abbildung 4.14 ist dieser Sachverhalt skizziert. Die Übergangszeiten befinden sich im Bereich von  $10^{-14} - 10^{-15}$  Sekunden.



**Abbildung 4.14:** Schematische Darstellung des Auger-Zerfalls bzw. der Autoionisation am Beispiel eines doppelt angeregten Heliumatoms.

Da für ein Zweielektronensystem wie Helium eine Vakanz in der K-Schale nicht ausreichend ist, müssen sich beide Elektronen in angeregten Zuständen befinden, um die Energiebilanz für einen Auger-Zerfall erfüllen zu können. Die Anregung kann durch Photonabsorption [ACza04b] oder durch Elektronen-/Ionenstoß [JPed89, VOst92, HSli95, AGod02] erfolgen. Man spricht hier auch von autoionisierenden Zuständen. Das Übergangsmatrixelement entspricht "Fermis goldener Regel" und ist gegeben durch:

$$T_{Auger}^{f,i} = \int \int \phi^{f*}(\vec{r}_{e_1}) \varphi^{f*}(\vec{r}_{e_2}) \frac{e^2}{|\vec{r}_{e_1} - \vec{r}_{e_2}|} \phi^i(\vec{r}_{e_1}) \varphi^i(\vec{r}_{e_2}) d\vec{r}_{e_1} d\vec{r}_{e_2} \propto \sqrt{Z}$$
(4.85)

mit  $e^2/|\vec{r}_{e_1} - \vec{r}_{e_2}|$  der Wechselwirkungsenergie der beiden Elektronen und  $\phi^{i,f}$ bzw.  $\varphi^{i,f}$  den Wellenfunktionen der Elektronen im Anfangs- und Endzustand [EBur52]. Sieht man von komplizierten Mehrstufenprozessen ab, ist der einzig plausible - im Rahmen der gemachten Experimente zu beobachtende - Prozess der eines zweifachen Elektroneneinfangs mit zweifacher Anregung; man spricht auch vom autoionisierenden Zweifachelektroneneinfang (Autoionizing Double Capture, ADC). Die Energie des emittierten Elektrons entspricht der Differenz der Bindungsenergien und die Winkelverteilung dem Drehimpuls ldes angeregten Zustands. Elektronen im ns-Zustand, also mit l=0, besitzen eine isotrope und im np-Zustand (l=1) eine Dipolverteilung. Für Helium wurden zahlreiche autoionisierende Zustände anhand von Elektronenemissionsspektren ermittelt (siehe Tabelle 4.3.5).

Zustand	Anregungsenergie	Elektronenenergie
$\operatorname{He}(2s^2)^1S$	57,82(4) eV	33,23  eV
$\operatorname{He}(2s2p)^{3}P$	58,30(3) eV	33,71  eV
$\operatorname{He}(2s2p)^{1}D$	59,89(3) eV	35,30  eV
$\operatorname{He}(2s2p)^{1}P$	60,13(0)  eV	$35,54~\mathrm{eV}$
$\operatorname{He}(2s3s)^1S$	62,94(3)  eV	38,35  eV

**Tabelle 4.1:** Anregungs- und Elektronenemissionsenergien doppeltangeregter Zustände im Helium [PHic75].

#### 4.3.6 Shake off

Kurz vorgestellt wurde das Prinzip der "Shake"-Prozesse in Unterkapitel 4.2.2. Zu den Shake-Prozessen zählen der Shake-over (Elektronentransfer), der Shake-up/-down (An-/Abregung) und der Shake-off (Ionisation). Allen Prozessen ist gemeinsam, dass sie eine Elektronenkorrelation im Anfangszustand erfordern [ITol98]. Die Shake-off-Theorie wurde nach Experimenten zur Photoabsorption von Carlson [TCar67] entwickelt, um zu große Verhältnisse zwischen Einfach- und Doppelionisation ( $\rho = \sigma^{2+}/\sigma^+$ ) zu erklären [TAbe70]. Der gleiche Effekt wurde später auch in Elektronen- und Ionenstoßinduzierten Experimenten festgestellt, sodass ein einheitlicher Mechanismus dahinter vermutet wird. Für grundsätzlich verschiedene Stoßsysteme wurden folgende Verhältnisse gefunden:

- SI/DI durch geladene Teilchen im Limes  $v_P \rightarrow \infty$ :  $\rho$  = 0,27 %
- SI/DI durch Photon absorption im Limes  $E_{\gamma} \rightarrow \infty$ :  $\rho$  = 1,7 %
- SI/DI durch Comptonstreuung im Limes  $E_{\gamma} \rightarrow \infty$ :  $\rho$  = 0,86 %
- SC/TI durch Ionen im Limes  $v_P \rightarrow \infty$ :  $\rho$  = 2,5 3,5 %

Da nicht direkt das Verhältnis der Einfachionisation zum Shake-off, sondern nur zur Doppelionisation gemessen wurde, müssen auch Effekte wie Compton-Streuung oder Zweistufenprozesse (TS1 und TS2; siehe Unterkapitel 4.4) berücksichtigt werden. So werden bei schnellen Schwerionenstößen oft nur langsame Elektronen produziert. Klarheit gäben hier nur differenziellere Daten, die Informationen über die Geschwindigkeit des ersten Elektrons erlauben. Die Amplitude für einen Shake-off-Prozess  $T_{SO}$  in einem 2-Elektronensystem (He) ist nach [TAbe67, TAbe76, JMcG82b, JMcG95] allgemein gegeben durch:

$$|T_{SO}|^2 = \left|a_{SO}^{f,i}\right|^2 = \left|\int e^{i(\vec{q}-\vec{p}_{e_1})\cdot\vec{r}_{e_1}}\Phi^{i*}(\vec{r}_{e_2})\Psi(\vec{r}_{e_1},\vec{r}_{e_2})dV\right|^2$$
(4.86)

mit  $\vec{p}_{e_1}$  dem Impuls des emittierten, schnellen Elektrons,  $\Psi(\vec{r}_{e_1}, \vec{r}_{e_2})$  der exakten Wellenfunktion des Anfangszustandes (He),  $\Phi^i(\vec{r}_{e_2})$  der Wellenfunktion des nach der Ionisation verbliebenen He<sup>+</sup>-Ionenrumpfes und  $\vec{q}$  dem Impulsübertrag auf das Targetion. Der Shake-off ist unabhängig von der Art und Weise wie das Elektron entfernt wurde, hingegen hängt er sehr wohl von dessen Anfangsimpuls (im Moment des Entfernens) ab (siehe Abbildung 4.15).

Projiziert man nach dem Entfernen des 1. Elektrons die Wellenfunktion des verbliebenen 2. Elektrons auf die He<sup>+</sup>-Basis, so besitzt die Wellenfunktion des 2. Elektrons einen Überlapp mit der Kontinuumswellenfunktion des zurückbleibenden Ionenrumpfes, welcher maximal wird, wenn der Impuls des Elektrons klein ist. Oder anders ausgedrückt: Das zweite Elektron wird aufgrund des plötzlich geänderten Kernpotenzials abgeschüttelt, da es beim Übergang von der Zweiteilchen- zur Einteilchenwellenfunktion nicht mehr stabil gebunden ist; das erste Elektron verschwindet so schnell, dass sich die Wellenfunktion des an-



**Abbildung 4.15:** Verhältnis der Transferionisation (H<sup>+</sup>/He) zum Elektroneneinfang  $(\sigma_{TI}/\sigma_{SC})$  als Funktion der Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  aus [TShi02] von verschiedenen Autoren: leere Quadrate [MSha85], leere Kreise [HSch02] für alle Ereignisse aus einer Transferionisation, sowie der Anteil aus einer kinematischen Transferionisation (SO) dargestellt als volle Quadrate, gefüllte Kreise von Mergel [VMer97]. Gestrichelte Linie bis  $v_P$ <8 a. u. von Samson [JSam98] und darüber hinaus von [AKhe98], durchgezogene Linie von [TShi02].

passen kann. Die ersten Shake-off-Rechnungen verwendeten die Kinoshita-Wellenfunktion [TKin57]. Je nach gewählter Wellenfunktion für den Grundzustand unterscheiden sich die Ergebnisse in ihren Vorhersagen; handelt es sich um isotrope bzw. gerichtete Emission oder was sind die typischen Impulse des Elektrons? Die Untersuchung von Shake-off-Elektronen ermöglicht einen Einblick in die Elektron-Elektron-Korrelation im Grundzustand; und genau hierin unterscheiden sich viele Theorien, wie auch ihre anschließenden Ergebnisse.

Im Wesentlichen kommt es darauf an, welchen anfänglichen Impuls das Elektron im Grundzustand hatte, bevor es entfernt wurde. In erster Näherung schneidet auch die Photoionisation sich diese Anteile heraus ( $\sigma_{SI} \propto E_{\gamma}^{7/2}$ ). Daher sind bei der Photodoppelionisation ähnliche Effekte zu finden wie bei der Ionisation durch Elektroneneinfang oder Teilchenstoß. Für 450 eV über der Photodoppelionisationsschwelle von Helium wurde dies von Knapp et al. untersucht [AKna02a]. Wird der Impulsvektor für das schnelle Elektron ( $E_{e1} \approx 448$  eV;  $p_{e1} \approx 5,7$  a. u.) im Raum festgehalten und die Winkelverteilung des zweiten, langsameren Elektrons dargestellt, so zeigt sich, dass dieses entgegengesetzt zum schnellen Elektron emittiert wird; siehe Abbildung 4.16.



**Abbildung 4.16:** Dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt der Helium Photodoppelionisation bei  $E_{\gamma}$ =529 eV für linear (horizontal) polarisiertes Licht. Die Richtung des 1. Elektrons, skizziert durch den roten Pfeil, wurde nach rechts festgehalten und die Winkelverteilung des 2. Elektrons (mit einer Energie von 2 eV) in koplanarer Geometrie (±25° aus der Ebene) dargestellt [AKna02a].

# 4.4 Transferionisation

Zwei Prozesse, nämlich der Einfang von Elektronen in das Projektil zusammen mit der Emission weiterer Elektronen - im Falle eines Heliumtargets nur eines Elektrons - kennzeichnen die Transferionisation:

$$P^{q+} + T \to P^{(q-n_c)+} + Rec^{(n_c+n_{Rec})+} + n_{Rec} \cdot e^{-}$$
 (4.87)

Unterschieden werden hierbei verschiedene Prozesstypen, die zunächst von der Anzahl der Wechselwirkungen zwischen Projektil und Targetsystem abhängen. Damit geht eine Beschreibung in verschiedenen Ordnungen der Störungstheorie einher. Auch wenn es naheliegend scheint, so ist ein Prozess 2. Ordnung nicht das gleiche wie zwei Prozesse 1. Ordnung! Während beim Prozess 2. Ordnung über alle möglichen Zwischenzustände integriert wird, ist im anderen Fall der Zwischenzustand festgelegt. Die drei einfachsten Prozesstypen, welche im Rahmen einer Transferionisation auftreten, sind:

- 1. "Two Step 2"-Prozesse (TS2): Hier liegen zwei unabhängige Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target vor (Projektil-Elektron 1 & Projektil-Elektron 2).
- 2. "Two Step 1"-Prozesse (TS1): Das Projektil wechselwirkt nur mit einem Targetelektron. In der zweiten erforderlichen Wechselwirkung

streut dieses Elektron am zweiten (Projektil-Elektron 1 & Elektron 1-Elektron 2). Ein Beispiel für den TS1-Mechanismus ist der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess.

3. "korrelierte" Prozesse (SO)<sup>13</sup>: Bei den abhängigen oder auch korrelierten Prozessen wechselwirkt das Projektil wie schon zuvor beim TS1-Prozess nur einmal mit dem Target. Der zweite Teil der Reaktion, die Emission bzw. der Capture, erfolgt aufgrund von Korrelationen im Target, weshalb auch nicht von einer weiteren Wechselwirkung gesprochen werden kann. Der Übergang zwischen TS1 und SO-Prozessen ist abhängig von der Theorie und eine strikte Trennung ist nur innerhalb dieser Theorie möglich. Die einzelnen Prozesse bezeichnen spezielle Übergangsmatrixelemente. Beobachtbar ist nur die kohärente Summe, es sind aber auch Interferenzterme zwischen den Mechanismen möglich.

In Form von Feynman-Graphen sind die einzelnen Prozesse in Abbildung 4.18 (Unterkapitel 4.4.3) skizziert. Manche Prozesse können in einfachdifferenziellen Querschnitten die gleichen Strukturen besitzen. Die Unterschiede kommen erst bei höher differenzieller Betrachtung zum Vorschein. Auf die Fingerabdrücke der verschiedenen Einzel- und kombinierter Prozesse wird in diesem Abschnitt der Schwerpunkt gelegt. Als erstes wird dabei der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess als klassischer Prozess, der in einer Transferionisation endet, vorgestellt.

Die Rotationssymmetrie um die Projektilstrahlrichtung macht eine Diskussion der Effekte im Laborsystem recht schwierig. Aufgrund der Symmetrie ist bereits ein vierfach-differenzieller Wirkungsquerschnitt für eine vollständige Darstellung ausreichend, anstatt der 5 unabhängigen Messgrößen. Im Vorgriff auf Unterkapitel 5.6.1 wird an dieser Stelle bereits ein neues Koordinatensystem definiert. Die Darstellung im Projektilstreusystem ( $\Sigma_P$ ), in welchem die Streuebene durch den transversalen Impulsübertrag auf das Projektil  $p_{\perp,P}$ und die Strahlrichtung  $v_{z,P}$  definiert wird, sorgen hierfür (siehe Abbildung 3.1 sowie weitere Erläuterungen zur Definition stoßinterner Streuebenen in Abschnitt 5.6). Per Definition ist dann die physikalische Information allein in  $\theta_P$ enthalten, während  $\phi_P$ =0 ist (bzw.  $p_{y,P}^{\Sigma_P}$ =0). Praktisch wird für jedes Ereignis  $\phi_P$  ermittelt und die gemessenen Impulse aller Teilchen um diesen Winkel gedreht. In diesen neuen Koordinaten ergeben sich zusammen mit den Erhaltungssätzen die Impulse von Projektil, Elektron und Rückstoßion beispielsweise zu:

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup> Die korrelierten Prozesse werden im weiteren den "Shake"-Prozessen zugeordnet.

$$\vec{p}_{p}^{\Sigma_{P}} = \begin{pmatrix} p_{x,p}^{\Sigma_{P}} \\ p_{y,p}^{\Sigma_{P}} \\ p_{z,p}^{\Sigma_{P}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{P}v_{P}\theta_{P} \\ 0 \\ Q/v_{P} + v_{P}/2 - |\vec{p_{e}}|^{2}/(2v_{P}) \end{pmatrix}$$
(4.88)

$$\vec{p}_{e}^{\Sigma_{P}} = \begin{pmatrix} p_{x,e}^{\Sigma_{P}} \\ p_{y,e}^{\Sigma_{P}} \\ p_{z,e}^{\Sigma_{P}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\vec{p}_{e}| \sin \theta_{z,e}^{\Sigma_{P}} \cos \phi_{z,e}^{\Sigma_{P}} \\ |\vec{p}_{e}| \sin \theta_{z,e}^{\Sigma_{P}} \sin \phi_{z,e}^{\Sigma_{P}} \\ |\vec{p}_{e}| \cos \theta_{z,e}^{\Sigma_{P}} \end{pmatrix}$$
(4.89)

$$\vec{p}_{Rec}^{\Sigma_{P}} = \begin{pmatrix} p_{x,Rec}^{\Sigma_{P}} \\ p_{y,Rec}^{\Sigma_{P}} \\ p_{z,Rec}^{\Sigma_{P}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -|\vec{p}_{e}|\sin\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}}\cos\phi_{z,e}^{\Sigma_{P}} - m_{P}v_{P}\theta_{P} \\ -|\vec{p}_{e}|\sin\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}}\sin\phi_{z,e}^{\Sigma_{P}} \\ -|\vec{p}_{e}|\cos\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}} - Q/v_{P} - v_{P}/2 + |\vec{p}_{e}|/(2v_{P}) \end{pmatrix}$$
(4.90)

#### 4.4.1 Two Step 2 (unabhängige Prozesse)

Beim TS2-Prozess liegen, wie der Name schon sagt, zwei unabhängige Wechselwirkungen zwischen Projektil- und Targetsystem vor. Diese werden im Rahmen des Modells unabhängiger Ereignisse (Independent Event Model, IEM) beschrieben. Mögliche Strukturen beispielsweise im Projektilstreuwinkel entsprechen jedoch nicht zwangsläufig der Summe der Einzelstrukturen, da Elektroneneinfang und Ionisation je nach Projektilgeschwindigkeit bei sehr unterschiedlichen Stoßparametern stattfinden.

Zur Gruppe der TS2-Prozesse gehören alle Prozesse mit kinematischem Einfang bzw. Einfang durch den Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus und einem BE, einem ECC oder weiterer Mehrkörper-Wechselwirkungen, wie beispielsweise der Sattelpunktionisation. Für einen kinematischen Einfang kombiniert mit einem BE (Elektronenimpulsbetrag  $|\vec{p}_e| \approx 2m_e v_P \cos \theta_{eP}$ ) ergeben sich die Impulse dieses TS2-Prozesses zu:

$$\vec{p}_p^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} m_P v_P \theta_P \\ 0 \\ Q/v_P + v_P/2 - 2m_e^2 v_P \cos \theta_{z,e}^{\Sigma_P^2} \end{pmatrix}$$
(4.91)

$$\vec{p}_{e}^{\Sigma_{P}} = \begin{pmatrix} 2m_{e}v_{P}\cos\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}}\sin\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}}\cos\phi_{z,e}^{\Sigma_{P}}\\ 2m_{e}v_{P}\cos\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}}\sin\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}}\sin\phi_{z,e}^{\Sigma_{P}}\\ 2m_{e}v_{P}\cos\theta_{z,e}^{\Sigma_{P}^{2}} \end{pmatrix}$$
(4.92)

$$\vec{p}_{Rec}^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} -2m_e v_P \cos\theta_{z,e}^{\Sigma_P} \sin\theta_{z,e}^{\Sigma_P} \cos\phi_{z,e}^{\Sigma_P} - m_P v_P \theta_P \\ -2m_e v_P \cos\theta_{z,e}^{\Sigma_P} \sin\theta_{z,e}^{\Sigma_P} \sin\phi_{z,e}^{\Sigma_P} \\ -Q/v_P - v_P/2 \end{pmatrix} .$$
(4.93)

Für den Grenzfall sehr kleiner Elektronenimpulse (oder eines Target-CUSPs)  $\lim_{\vec{p}_e \to 0}$ , der "soft electron", vereinfachen sich die Gleichungen 4.91, 4.92 und 4.93 zu:

$$\vec{p}_p^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} m_P v_P \theta_P \\ 0 \\ Q/v_P + v_P/2 \end{pmatrix}$$
(4.94)

$$\vec{p}_e^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} 0\\0\\0 \end{pmatrix} \tag{4.95}$$

$$\vec{p}_{Rec}^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} -m_P v_P \theta_P \\ 0 \\ -Q/v_P - v_P/2 \end{pmatrix} \quad . \tag{4.96}$$

Dieses Ergebnis entspricht dem Resultat des Einfachelektroneneinfangs (SC). Mergel konnte in p-He-Stoßexperimenten zur Transferionisation zeigen, dass bis etwa 0,5 MeV der Hauptbeitrag des totalen Wirkungsquerschnitts durch kinematischen Einfang und unabhängige Ionisation zustande kommt [VMer96]; erst bei sehr viel höheren Energien liefern die Thomas-Mechanismen relevante Beiträge. Ein kinematischer Einfang kombiniert mit einem Einfang in einen Projektilkontinuumszustand (ECC; siehe Unterkapitel 4.3.2) enthält in transversaler Richtung nur den Impulstransfer durch die Kern-Kern-Streuung und in longitudinaler Richtung die bereits bekannten Ergebnisse:

$$\vec{p}_{p}^{\Sigma_{P}} = \begin{pmatrix} m_{P}v_{P}\theta_{P} \\ 0 \\ Q/v_{P} \end{pmatrix}$$
(4.97)

$$\vec{p}_{e}^{\Sigma_{P}} = \begin{pmatrix} 0\\0\\v_{P} \end{pmatrix}$$
(4.98)

$$\vec{p}_{Rec}^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} -m_P v_P \theta_P \\ 0 \\ -v_P - Q/v_P \end{pmatrix} \quad . \tag{4.99}$$

#### 4.4.2 Abhängige Prozesse (TS1)

Streng genommen können die TS1-Prozesse bereits zu den korrelierten Prozessen gezählt werden. Einzig beim Elektron-Elektron-Thomas-Mechanismus herrscht über die intraatomare Kinematik Klarheit. Andere denkbare Prozesse enthalten Vielfachstreuungen, über deren genauen Ablauf Unklarheit herrscht. Der e-e-Thomas-Prozess hingegen unterliegt den umfangreichsten kinematischen Zwangsbedingungen, die zum Teil bereits in Unterkapitel 4.2.3 erläutert wurden. Durch das Projektil wird ein Doppelstreuprozess zwischen den Elektronen induziert, welcher zweimal unter  $45^{\circ}$  stattfinden muss. Im Ausgangskanal wird ein Elektron emittiert und das zweite Elektron auf Projektilgeschwindigkeit beschleunigt, sodass es eingefangen werden kann. Bei diesem Prozess wird das Projektil unter  $\theta_P = 1/m_P$ =0,54 mrad für H<sup>+</sup>-Projektile gestreut. Innerhalb des Projektilstreusystems sind folgende Impulse zu erwarten:

$$\vec{p}_p^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} v_P \\ 0 \\ Q/v_P \end{pmatrix}$$
(4.100)

$$\vec{p}_e^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} -v_P \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.101}$$

$$\vec{p}_{Rec}^{\Sigma_P} = \begin{pmatrix} \theta_P \\ 0 \\ -Q/v_P \end{pmatrix} \quad . \tag{4.102}$$

Damit wird der idealisierte Elektron-Elektron-Thomas-Prozess im Impulsraum singulär und sollte sehr leicht zu identifizieren sein. Obwohl der Targetkern abgesehen vom Inelastizitätsbeitrag nur Beobachter ist, so ist in der Realität zusätzlich mit einer Kern-Kern-Streuung zu rechnen, welche da nicht prozessrelevant - bisher komplett vernachlässigt wurde. Der Unterschied zwischen TS1- und TS2-Prozessen wird gut am Beispiel des kinematischen Rückens deutlich. In 1. Ordnung entspricht dieser einem TS2-Prozess, da das Projektil mit beiden Elektronen unabhängig nacheinander wechselwirkt; eines wird kinematisch eingefangen, während das zweite durch einen binären Stoß mit dem Projektil (Binary Encounter; siehe Unterkapitel 4.3.3) ionisiert wird. Der kinematische Rücken 2. Ordnung stellt einen TS1-Prozess dar. Das Projektil wechselwirkt nur einmal mit einem Elektron. Dieses gestreute Elektron tritt mit dem zweiten Elektron in Wechselwirkung (siehe Unterkapitel 4.2.3 über den Elektron-Elektron-Thomas-Prozess).



**Abbildung 4.17:** Erwartete Impulsverteilung des Elektrons für einen binären Stoß mit dem Projektil, KR1 (BE), dem kinematischen Rücken 2. Ordnung (KR2) sowie den Elektron-Elektron-Thomas-Prozess (Stern).

Unter Vernachlässigung der aufzubringenden Bindungsenergie Q entspricht der Rückstoßionenlongitudinalimpuls des kinematischen Rückens 1. Ordnung:  $p_{z,Rec}^{KR1} = -v_P/2$  und in 2. Ordnung:  $p_{z,Rec}^{KR2} = 0$ . Allerdings darf der Q-Wert nur bei hohen Stoßgeschwindigkeiten vernachlässigt werden ( $Q \ll v_P^2$ ). In Abbildung 4.17 ist die zu erwartende Elektronenwinkelverteilung beider Prozesse dargestellt. Eine Vernachlässigung der Anfangsimpulse der Elektronen sowie des Targetkerns ist streng genommen nur für sehr große Projektilgeschwindigkeiten ( $\vec{p}_{e1} = \vec{p}_{e2} = \vec{p}_{Rec} \ll v_P$ ) erlaubt. Allerdings führt die Vernachlässigung nur zu einer Verbreiterung um die Idealwerte.

#### 4.4.3 Korrelierte Prozesse (SO)

Zur Gruppe der korrelierten Prozesse werden im Folgenden nur solche gezählt, die auf einer Grundzustandskorrelation im Target beruhen<sup>14</sup>. Eine Transferionisation wird nach dieser Definition streng genommen in einer Störungstheorie 1. Ordnung in der Projektil-Target-Wechselwirkung beschrieben, da es nur zu einer einzigen Wechselwirkung kommt. Die beiden möglichen Prozesse sind ein kinematischer Einfang, gefolgt von einem Shakeoff, sowie einer direkten Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron, die zur Ionisation führt (z. B. BE), in Verbindung mit einem Shake-over.

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup> Eine Verfeinerung dieser Definition ist in [LSpi96b] zu finden.

Auch wenn es nicht hundertprozentig in Einklang mit der Definition steht, zählt auch ein Einfang durch den e-N-Thomas-Mechanismus gefolgt von einem Shake-off zu den korrelierten Prozessen. Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten ist wegen der kurzen Stoßzeiten zu erwarten, dass die korrelierten Prozesse den Hauptanteil des Wirkungsquerschnitts der Transferionisation darstellen. Der Theorie des Shake-offs folgend sind die Impulse des Elektrons nur minimal und vergleichbar mit denen der "soft"-Elektronen, beschrieben durch die Gleichungen 4.94, 4.95 und 4.96.

Darüber hinaus gibt es neue Rechnungen zur Transferionisation mit einem korrelierten Grundzustand von Shi et al. [TShi02] und Godunov et al. [AGod04, AGod05, MSch05]. Der Elektronentransfer wird als kinematischer Einfang angenommen. Shi setzt die Geschwindigkeit des Elektrons gleich mit der Projektilgeschwindigkeit ( $v_e = v_P$ ). Eine Photoionisation, bei welcher das erste Elektron sich ebenfalls mit hoher Geschwindigkeit vom Target entfernt, ist ein dazu äquivalenter Prozess. Godunov beschreibt den Prozess der Transferionisation explizit in 1. Bornscher Näherung der Projektil-Target-Wechselwirkung, wodurch Thomas-Prozesse ausgeschlossen sind. Das Elektron muss also in beiden Fällen bereits im Anfangszustand die erforderliche hohe Geschwindigkeit aufweisen. Der Grundzustand, bestimmt in einer Konfigurationsrechnung, weist neben dem isotropen  $s^2$ -Anteil noch Komponenten höherer Drehimpulse  $p^2$  und  $d^2$  auf. Übereinstimmend fanden beide Autoren Elektronen, die in entgegengesetzter Richtung zum Projektil  $(-p_{z.e})$  emittiert wurden, anstatt der manchmal angenommenen isotropen Verteilung der Shake-off-Elektronen.

Im Unterschied zu Shi, der nur den Shake-off-Prozess und somit einen Anteil der Transferionisation berücksichtigt, enthält Godunovs Ansatz weitere mögliche Prozesse. Um zu einer Transferionisation zu gelangen, bietet sich in 1. Bornscher Näherung (FBA) eine weitere Möglichkeit. Zwei Übergangsamplituden, entsprechend der möglichen Prozesse, stehen zur Verfügung: "Transfer First" (TF) und "Ionization First" (IF). Beide Prozesse sind in Abbildung 4.18 durch Feynman-Graphen skizziert. Die "Transfer First"-Amplitude entspricht Shis Theorie mit einem (kinematischen) Elektroneneinfang, gefolgt von einer Ionisation durch Shake-off. Die "Ionization First"-Amplitude beschreibt einen binären Stoß zwischen Projektil und Targetelektron zusammen mit einem Elektroneneinfang durch Shake-over. Kinematisch ist der IFnicht von einem TS2-Prozess zu unterscheiden, da die die Elektronenverteilung bestimmende Kinematik - der Stoß zwischen Projektil und Elektron weitestgehend unabhängig vom zweiten Prozess, dem Einfang, ist.



**Abbildung 4.18:** Skizzierte Feynman-Graphen verschiedener Transferionisations-Prozesse. a) Two-Step 1 (TS1), b) Two-Step 2 (TS2), c) Shake-(off)-Prozess mit "Transfer First" (TF) und d) Shake-(over)-Prozess mit "Ionization First" (IF).

Der Hauptbeitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt bei kleinen Projektilstreuwinkeln  $\theta_P$  stammt von der TF-Amplitude, wie es für einen Elektroneneinfang zu erwarten ist. Erst bei größeren Streuwinkeln, wenn Projektil und Targetelektron miteinander stoßen, dominiert die IF-Amplitude den Wirkungsquerschnitt. Durch Variation der Grundzustandswellenfunktion konnten Godunov et al. zeigen, dass die rückwärtige Emission der Elektronen eine direkte Folge der nicht-s<sup>2</sup>-Zustände ist. In Kapitel 6.7 wird dies, dann auch im Kontext mit den experimentellen Ergebnissen dieser Arbeit, ausführlich dargestellt. "Das Licht am Ende des Tunnels kann auch ein entgegenkommender Zug sein."

(Gregor Gysi)

# 5. Kalibration und Datenauswertung

In den Abschnitten 2.5.1 und 2.5.2 wurde bereits erläutert, wie aus den absoluten Messgrößen des Ortes und der Flugzeit die Impulse der einzelnen Teilchen rekonstruiert werden können. Darüber hinaus sind bereits einige Aussagen über die Kinematik inelastischer Ion-Atom-Stöße (Kapitel 3) gemacht worden. Die Analyse der im List-mode-Verfahren gespeicherten Daten und die Berechnung der Impulse steht im Vordergrund dieses Kapitels. Des Weiteren wird der Übergang vom Laborsystem in stoßinterne Koordinatensysteme sowie deren jeweilige Bedeutung erläutert. Die Impuls-/Energieauflösung der im Rahmen dieser Arbeit gewonnen Daten wird eingehend diskutiert und kann zum Teil mit Kalibrationsmessungen direkt belegt werden. Ebenso wird die Problematik des Untergrundes diskutiert und ein Vergleich mit früheren Experimenten gezogen.

Einer einfacheren Nomenklatur folgend, wird auf die Indizes f verzichtet, da nur sie gemessen wurden. Auch die Projektilgeschwindigkeit, die durch den Stoß nicht merklich verändert wird, wird nur noch mit  $v_P$  bezeichnet. Die Elektronenmasse, die in atomaren Einheiten 1 beträgt, wird als solche nicht mehr ausgewiesen.

# 5.1 Kalibration

Trotz der verwendeten 3-Teilchen-Koinzidenz enthalten die Daten zahlreiche Ereignisse, die nicht aus der gewollten Reaktion stammen. Innerhalb der Akzeptanzzeit des TDCs von 25  $\mu$ s können weitere Teilchen als "echte" Ereignisse auf den Detektoren aufgezeichnet werden. Die meisten von ihnen entstammen der Targeteinfachionisation (SI), dem Reaktionskanal mit dem größten Wirkungsquerschnitt. Statistisch gesehen ist innerhalb dieser Zeitperiode bei einer Rate von 150 kHz selbst bei einem perfekt eingestellten Experiment (kein schwankender Projektilstrahl, keine Nachschwinger auf den Detektoren etc.) mit durchschnittlich 4 Ereignissen zu rechnen. Ein in C++ geschriebenes Programm liest die Daten ein und sucht in engeren Zeitfenstern (enger im Vergleich zu den durch die Hardware-Koinzidenz gesetzten Zeitfenstern) nach den zeitlich korrelierten Ereignissen. Daraus werden Orte, Flugzeiten und weiterhin Impulse im Labor-, den verschiedenen Streusystemen sowie sonstige interessante Größen berechnet. Anschließend werden mit den errechneten Daten Histogramme gefüllt und mittels des Programms Root [Cern05] visualisiert.

Da die Flugzeiten der einzelnen Teilchen zueinander relativ konstant sind (das He<sup>+</sup>-Ion benötigt  $21 \pm 0,3 \mu$ s von der Targetzone zum Detektor), wird in vorgegebenen Zeitfenstern nach Ereignissen in den vom Multihit-TDC gelieferten Daten gesucht. Dies erfolgt für die jeweils fünf Signale (4 Anodenenden + MCP) des Projektil- und des Elektronendetektors sowie für das MCP-Signal des Rückstoßionendetektors. Bei der Suche nach den richtigen Ereignissen wird zuerst nach solchen gesucht, die die kürzeste Flugzeit aufweisen. Die Orte des Rückstoßionendetektors wurden mit einem Singlehit-TDC aufgezeichnet; eine Suche nach den passenden Anodensignalen ist daher nicht erforderlich. Aus all diesen Daten werden die Orte unter Zuhilfenahme der Zeitsumme 2.7.2 rekonstruiert, sodass auch Ereignisse mit bis zu zwei fehlenden Anodensignalen verwandt werden konnten.

Da sich die einzelnen Messungen auf sehr unterschiedliche Reaktionskanäle, Projektilgeschwindigkeiten und -ladungen beziehen, sind die erwarteten Elektronenimpulse entsprechend unterschiedlich. Daher wurde von Messung zu Messung das Magnetfeld neu eingestellt; als Faustregel zu Beginn einer Messung so, dass Elektronen mit  $1,5 \cdot v_P$  noch vollständig nachgewiesen werden konnten. Gegenüber der ursprünglichen Planung wurde darüber hinaus das elektrische Feld von 10 V/cm auf 5 V/cm reduziert, um eine verbesserte Impulsauflösung - vor allem in der wichtigen z-Komponente des Rückstoßions - zu erhalten.

Zur Berechnung der Impulse ist die Kenntnis der exakten elektrischen und magnetischen Felder unbedingt erforderlich, genauso wie die Maße des Spektrometers. Erschwert wird die Impulsberechnung noch durch das Auftreten nichtlinearer Abbildungsfunktionen sowie inhomogener Felder, die eine analytische Rekonstruktion der Trajektorien ausschließen. Der Weg der Rekon-
struktion wird Schritt für Schritt erläutert, zunächst für das Rückstoßion, dann für das Elektron und abschließend für das Ejektil.

### 5.1.1 Rückstoßionenimpulse

Mittels der Gleichungen 2.14, 2.15 und 2.16 könnten für den Fall homogener Extraktionsfelder die Impulse analytisch aus Orts- und Zeitkomponenten bestimmt werden. Die aufgrund der Linse (vgl. Abschnitt 2.5.1) inhomogenen Felder, der nicht durch ein Gitter abgeschlossene Übergang zwischen Absaugfeld und Driftbereich, die Verwendung des Rückstoßionensteerers sowie eine unzureichende Kenntnis über die angelegten Spannungen verhindern die analytische Berechnung. Ebenso Verkippung des Detektors gegenüber dem exakt orthogonalen Einbau und die Tatsache, dass auch die Rückstoßionen im starken Magnetfeld eine Gyrationsbewegung vollführen, müssen berücksichtigt werden.

Während für den Impuls in Flugzeitrichtung Gleichung 2.14 bzw. 2.17 weiterhin ihre Gültigkeit besitzt, nur die exakte elektrische Feldstärke E am Targetort unbekannt und zu bestimmen ist, müssen für die beiden senkrechten Raumrichtungen y und z alternative Zuordnungsvorschriften gefunden werden. Zur vollständigen Auswertung der Daten muss das nachstehende Gleichungssystem gelöst und den unbekannten Konstanten  $k_y$  und  $k_z$  (Kalibrationsfaktoren) Werte zugeordnet werden.

$$\vec{p_{Rec}} = \begin{pmatrix} p_{x,Rec} \\ p_{y,Rec} \\ p_{z,Rec} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\gamma & -\sin\gamma \\ 0 & \sin\gamma & \cos\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{Eq}{124,38} & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta t_{Rec} \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix}$$
(5.1)

Der Winkel  $\gamma$  (um die x-Achse) in der Drehmatrix dient zum Ausgleich des durch die Gyration hervorgerufenen Wegdrehens der Rückstoßionen aus der Senkrechten (y-Achse) und eines etwaigen schief eingebauten Detektors.

In Abschnitt 3.2.1 wurde gezeigt, dass im Falle des  $n_c$ -fachen Elektroneneinfangs in gebundene Zustände des Projektils nur diskrete Strukturen, in Form senkrechter Linien (parallel zur y-Achse), zu erwarten sind. Abhängig vom Ladungszustand des Rückstoßions - einfach oder zweifach - unterscheidet sich auch der Drehwinkel  $\gamma$ . Zweifach positiv geladene Rückstoßionen rotieren im Magnetfeld - entsprechend ihrem m/q-Verhältnis - um einen Faktor  $\sqrt{2}$  stärker als die nur einfach positiv geladenen (siehe Abbildung 5.1). Durch lineare Regression der Drehwinkel zu verschiedenen Magnetfeldstärken lässt sich zudem ableiten, um welchen Winkel der Detektor selbst gedreht ist.



**Abbildung 5.1:** Ortsbild des Rückstoßionendetektors mit Bedingungen auf der Rückstoßionenflugzeit und dem Ort auf dem Projektildetektor zur Selektion von He<sup>+</sup> bzw. He<sup>2+</sup> Rückstoßionen sowie He<sup>+</sup> bzw. He<sup>0</sup> Ejektilen für a) alle auf dem Rückstoßionendetektor aufgezeichneten Ereignisse b) den Einfachelektronentransfer (SC), c) Zweifachelektronentransfer (DC) und d) der Transferionisation (TI) für das Stoßsystem 60 keV/u He<sup>2+</sup>, dargestellt in logarithmischer Skalierung (siehe auch Tabelle 6.1).

Die verschiedenen Reaktionskanäle können durch Bedingungen auf die Rückstoßionenflugzeit sowie dem Ort auf dem Projektildetektor voneinander getrennt werden. Im ersten Schritt wurde für jeden der beiden Ladungszustände der Drehwinkel bestimmt, um die Capturelinien entlang der y-Achse auszurichten. Für die Stoßsysteme, bei denen kein zweifacher Elektronentransfer möglich war, also bei H<sup>+</sup> bzw. He<sup>+</sup>, wurde der Rotationswinkel nach dem aus der linearen Regression bestimmten Offset sowie dem Faktor  $\sqrt{2} \cdot \gamma_{SC}$ festgelegt. Die Genauigkeit bei der Bestimmung dieses Winkels beträgt etwa  $0,5^{\circ}$ .

Da im Falle des  $n_c$ -fachen Elektroneneinfangs im Ausgangskanal nur zwei freie Teilchen (Projektil und Rückstoßion) vorliegen, ist aufgrund der Impulserhaltung bereits durch Messung des Rückstoßions das Experiment kinematisch vollständig. Die Impulsverteilung muss rotationssymmetrisch um die Strahlachse sein, da sie die einzige ausgezeichnete Achse ist. In Abschnitt 3.2.1) wurde gezeigt, dass für den Impuls des Rückstoßions folgender Zusammenhang gilt:

$$p_{z,Rec} = -\frac{Q_c}{v_P} - \frac{n_c v_P}{2}$$
(5.2)



**Abbildung 5.2:** Rückstoßionenimpuls in z-Richtung  $p_{z,Rec}$  im He<sup>2+</sup>/He-Stoß bei 60 keV/u Einschussenergie, wiederum für die 3 verschiedenen Reaktionskanäle: a) Einfachelektronentransfer (SC), b) Zweifachelektronentransfer (DC) und c) Transferionisation (TI). Die Zahlen an den Peaks stehen für den Q-Wert der Reaktion und den nach Gleichung 5.2 berechneten Rückstoßionenimpuls  $p_{z,Rec}$ .

Anhand Gleichung 5.2 lässt sich bei bekanntem Q-Wert somit direkt aus dem Abstand der Linien auf dem Detektor (gemessen in Kanälen) der Eichfaktor  $k_z$  berechnen. Hierzu wurden die den einzelnen Linien entsprechenden Q-Werte berechnet sowie deren jeweilige Position. Mittels linearer Regression wurde die Steigung der Eichgerade durch zwei bis fünf<sup>1</sup> Punkte bestimmt. Für Einfach- (q=1) und Zweifachelektronentransfer (q=2) ergeben sich für die Steigung der Eichgeraden:

$$k_z^{q=1} = 0,00540$$
 [a. u. / Kanal]  
 $k_z^{q=2} = 0,00765$  [a. u. / Kanal] (5.3)

Ein Kanal entspricht der Zeitauflösung des verwendeten Multihit-TDCs, in diesem Fall 500 ps. Wie man leicht sieht, gilt für doppelt geladene Rückstoßionen und der damit verbundenen um  $\sqrt{2}$  kürzeren Flugzeit (siehe Abschnitt 2.5.1):

$$k_z^{q=2} = k_z^{q=1} \cdot \sqrt{2} \tag{5.4}$$

Daraus ist auch leicht zu ersehen, dass die Impulsauflösung der doppelt geladenen Rückstoßionen um einen Faktor  $\sqrt{2}$  schlechter ist, als die der einfach geladenen. Während die Position der Linien durch die Gesamtenergiebilanz gegeben ist, so resultiert deren Breite aus der Targettemperatur und dem Auflösungsvermögen des Spektrometers und der Detektoren. Die erzielte Auflösung in der z-Richtung der Rückstoßionen ergibt sich leicht durch einen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Abhängig von Projektil, dessen Ladungszustand und Geschwindigkeit werden die Zustände unterschiedlich besetzt und/oder können nicht mehr voneinander getrennt werden.

Gaußfit. Die Halbwertsbreite, FWHM (Full Width of Half Maximum), z. B. für den Zustand 1/1<sup>2</sup> des Einfachelektronentransfers beträgt 0,10 a. u. (FWHM); ein Wert, der nur unwesentlich schlechter ist als der mit 0,08 a. u. (FWHM) aus der reinen Spektrometersimulation (unter Vernachlässigung der Targettemperatur) erwartete Wert für He<sup>+</sup>-Ionen. Aus den Daten des Zweifachelektronentransfers ergibt sich eine mittlere Auflösung von 0,15 a. u. (FWHM) für die He<sup>2+</sup>-Rückstoßionen.

Der um die Spektrometerachse rotationssymmetrische Aufbau bestimmt gleiche Kalibrationsfaktoren in y- und z-Richtung ( $k_y = k_z$ ), allerdings wurde  $k_z$ aus einer Ortsmessung in Kanälen anstatt in Millimetern gewonnen. Der benutzte Detektor weist aufgrund seines Konstruktionsprinzips jedoch in y- und z-Richtung leicht unterschiedliche Eichfaktoren (Kanal-mm) auf (Vergleich Abschnitt 2.7). Speziell für diesen Detektor beträgt das Verhältnis von (z:y = 1:0,952), sodass gilt:

$$k_y = 0,952 \cdot k_z \tag{5.5}$$

Abbildung 5.3 zeigt die bereits erwähnte Symmetrie der Impulsüberträge, sprich die der Physik, um die Strahlachse. Aus den nun bekannten Impulsen in y-Richtung und der Symmetriebedingung lässt sich die elektrische Feldstärke (*E*) bestimmen. Ebenso ist zu sehen, dass das von 10 V/cm auf 5 V/cm reduzierte elektrische Feld zur Folge hat, dass große positive Impulse in der y-Richtung ( $p_{y,Rec} \ge 5$ ) aufgrund der endlichen Detektorgröße abgeschnitten werden. In Gleichung 5.1 wird *E* solange verändert, bis die aus Flugzeit (x) sowie der Ortsrichtung (y) errechneten Impulse rotationssymmetrisch um den Ursprung sind. Danach wurde bei einer elektrischen Feldstärke von 4,8 V/cm gemessen, ein Wert, der gut mit den zuvor abgeschätzten 5 V/cm übereinstimmt. Eine weitere unabhängige Bestimmung der elektrischen Feldstärke ist über die Elektronenmessung möglich (siehe hierzu Abschnitt 5.1.3).

Die gewählte Geometrie des Jets bedingt eine interne Impulsunschärfe des Targets von 0,11 a. u. (FWHM) in Ausbreitungsrichtung (y) und 0,08 a. u. (FWHM) in den dazu orthogonalen Richtungen (x und z), gibt also eine untere Schranke der erreichbaren Auflösung wieder (vgl. Kapitel 2.4). Die mit 4,8 V/cm geringe elektrische Feldstärke führt zu einer deutlich besseren Auflösung in Flugzeitrichtung von 0,03 a. u. (FWHM), sodass hier die Jettemperatur der limitierende Faktor ist ( $\Delta p_{x,Rec}$ =0,08 a. u. (FWHM)). In y-Richtung ist die durch das Spektrometer erreichbare Auflösung gleich der für die z-

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Projektil- und Target-Elektronen befinden sich im Grundzustand.



**Abbildung 5.3:** Transversalimpulsverteilung  $p_{x,Rec}$  vs.  $p_{y,Rec}$  der Transferionisation des Stoßsystems He<sup>2+</sup>+He bei 60 keV/u Einschussenergie. Die leeren Bereiche oben und unten bilden den Rand des Detektors; größere Rückstoßionenimpulse konnten in y-Richtung konnten nicht detektiert werden.

Richtung bestimmten Auflösung ( $\Delta p_{y,Rec}^{He^+}=0,08$  a. u. bzw.  $\Delta p_{y,Rec}^{He^{2+}}=0,15$  a. u.). Da allerdings in y-Richtung die Targettemperatur mit 0,11 a. u. (FWHM) etwas schlechter ist, wird dieser Wert als maximale Auflösung der He<sup>+</sup>-Rückstoßionen angenommen und 0,15 a. u. (FWHM) für He<sup>2+</sup>. Unabhängig voneinander wurden für jede einzelne Messung die Kalibrationswerte neu bestimmt. Die Streuung der aus den einzelnen Experimenten bestimmten Kalibrationswerte variiert bis  $\pm 2$  %. Von ihren Sollpositionen weichen die Linien des Elektronentransfers weniger als 4 % ab.



**Abbildung 5.4:** Verteilung der Gesamtenergiebilanz (Q-Wert) bei einer Transferionisation des Stoßsystems He<sup>2+</sup>+He bei 60 keV/u Einschussenergie.

Die absolute Position in z-Richtung lässt sich entsprechend der nach Gleichung 5.2 gewonnenen Werte für die reinen Elektronentransferreaktionen direkt bestimmen. Allerdings sind diese Werte für He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> verschieden, weshalb in Messungen, bei denen nur der Einfachelektroneneinfang vorliegt, der Nullpunkt für die He<sup>2+</sup>-Ionen auf anderem Wege bestimmt werden muss (siehe 5.3). Im Vorgriff auf noch zu tätigende Kalibrationen der Elektronenimpulse gibt es für die Messungen mit He<sup>2+</sup> Projektilen eine weitere Möglichkeit der Überprüfung des Eichfaktors  $k_z$ . Abbildung 5.4 zeigt die Q-Wert-Verteilung im Falle der Transferionisation für He<sup>2+</sup> Projektile mit einer Energie von 60 keV/u. Man sieht zwei Peaks; einen bei Q=-0,898 a. u., welcher Ereignissen zugeschrieben wird, bei denen das He<sup>+</sup>-Ejektil im Grundzustand (K-Schale) vorliegt. Der zweite Peak bei Q=-2,401 a. u. repräsentiert Ereignisse, bei denen das Elektron im He<sup>+</sup> in die L-Schale angeregt wurde. Die M-Schale, welche bei Q=-2,68 a. u. liegt, sowie alle höheren Schalen, können nicht mehr getrennt werden. Betrachtet man zunächst einmal die Gesamtenergiebilanz Q nach Gleichung 3.44, so gilt:

$$p_{z,Rec} = -\frac{Q}{v_P} - v_P + \frac{E_{kin,e}^{\Sigma'}}{v_P}$$
(5.6)

Da bei der Berechnung von Q der Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}$ (nach Gleichung 5.6) - mit  $v_P$  skalierend - einen relativ großen Anteil an der Gesamtenergiebilanz besitzt, lässt sich dessen Eichung relativ gut überprüfen. Der theoretische Abstand der beiden Linien  $\Delta Q$  beträgt exakt 1,5 a. u. Nach dieser Überprüfung ist von einer einwandfreien Eichung auszugehen. Weiteres zur Nullpunktfestlegung ist in Abschnitt 5.3 nachzulesen.

#### 5.1.2 Rückstoßionenablenkung

Trotz der Eichung des dreidimensionalen Impulsraumes anhand gemessener Größen sind an dieser Stelle einige kurze Worte zum Einfluss der in die Driftröhre eingebauten Rückstoßionenablenkung (Recoilsteerer) auf die Trajektorien erforderlich. Bewirken die inhomogenen Felder Nichtlinearitäten in den Abbildungseigenschaften, die in den nichtdiskretisierten Raumrichtungen (x/y) bisher nicht bemerkt wurden? Nur wenige Volt Ablenkspannung waren ausreichend, die Ionen über den gesamten Detektor zu bewegen. Eine Simulation des verwendeten Steerers zeigt, dass Verzerrungen in allen drei Impulskomponenten - wenn meist auch nur minimal - auftreten. In der Simulation wurde eine Ablenkspannung von 5 V gewählt, die auch der Realität recht nahe kommt. Als Ionen fanden <sup>4</sup>He<sup>+</sup> Verwendung und wurden auf einem dreidimensionalen Impulsgitter von -10, -8 ... +10 a. u. gestartet. Der Vergleich der Simulationsdaten mit und ohne Ablenkung soll in erster Linie einen groben Eindruck der zu erwartenden Effekte geben.

Die Verzerrungen sind unabhängig vom Rückstoßionenimpuls in Flugzeitrichtung (x). Bis zum Erreichen der Driftstrecke und des Steerers hat das Rückstoßion im elektrischen Feld des Spektrometers mehrere 100 eV kinetische Energie aufgenommen. Im Gegensatz dazu beträgt die Energie aus dem Stoßprozess deutlich weniger als 1 eV und kann somit vernachlässigt werden. Abhängig von den Impulsen liegt eine Aufstreuung in beiden Ortsrichtungen bis maximal 0,2 mm vor. Da dieser Fehler bei der Bestimmung der Auflösung durch gemessene Impulse aus Elektronentransferreaktionen bereits impliziert war, kann nicht von einer weiteren Verschlechterung in Bezug auf die bisher ermittelte Auflösung (siehe Kapitel 5.1.1 und Tabelle 5.4) gesprochen werden.



**Abbildung 5.5:** a) Abweichung des Mittelpunktes der Impulsverteilung in Flugzeitrichtung in Abhängigkeit des Auftreffortes auf dem Detektor. b) Simulierte Zeitdifferenz des Spektrometers mit und ohne Verwendung der Rückstoßionenablenkung bei einer Ablenkspannung von 5,0 V in Abhängigkeit des Auftreffortes auf dem Detektor.

Das homogene Feld im Inneren des Steerers dehnt sich in den zuvor feldfreien Raum der Driftröhre aus und führt zu einer Verzerrung der Impulskomponenten in Flugzeitrichtung (x). Die Verwendung des Steerers führt zu einer Verkürzung der Flugzeit um 11 ns. Aber gleichzeitig wird die Flugzeit abhängig vom y- bzw. vom Transversalimpuls ( $t_{Rec}^0 \rightarrow f(p_{zy,Rec})$ ). Im Maximum beträgt die Verschiebung des Flugzeitnullpunktes bis pprox 6 ns . Nach den Simulationsergebnissen verschlechtert sich die Auflösung in x-Richtung im Limit eines großen Transversalimpulses (hier nur simuliert für die y-Richtung) für einfach positiv geladene Heliumionen auf  $\approx 0.25$  a. u. beziehungsweise  $\approx 0.52$  a. u. für He<sup>2+</sup>-Ionen. Die Ergebnisse der Simulation, dargestellt in Abbildung 5.5 b, sowie die Resultate einer Simulation in Abbildung 5.5 a lassen gleichzeitig erwarten, dass mit einer ortsabhängigen Korrektur des Flugzeitnullpunktes das Problem zu beseitigen ist. Für ein Raster im Ort ( $25 \times 25$ ) wird jeweils der Schwerpunkt des Impulses in Flugzeitrichtung (x) mittels eines Gaußfits bestimmt. Aus technischen Gründen war es einfacher statt der Flugzeit den Impuls in Flugzeitrichtung zu korrigieren, obgleich das Ergebnis äquivalent ist. Gut zu erkennen ist, dass die größte Abweichung des Schwerpunktes am Rand des Detektors auftritt. In den Bereichen des Detektors, auf welchen sich unmöglich echte Ereignisse befinden können, besitzt der x-Impuls ebenfalls große Fehler, was aber nicht weiter von Interesse ist.

Zur Vermeidung einer raschen Ermüdung<sup>3</sup> des Detektors wurden einige Male die Steererspannungen verändert. Somit muss die Korrektur für jede Messung unabhängig und von neuem durchgeführt werden. Die Korrekturfunktion selbst verwendet die exakte Position und nicht das grobe Raster. Zwischen den Mittelpunkten der Stützstellen wird linear interpoliert. Da der Detektor aufgrund der Stoßkinematik hauptsächlich in einem schmalen Band (gedreht durch das Magnetfeld) Ereignisse aufweist, besitzen die Randbereiche meistens schlechte Statistik oder weisen gar falsche Werte auf. In Fällen viel zu großer absoluter Korrekturwerte bzw. zu großer Differenzen zwischen den Stützstellen, die auf falsche Werte bzw. Zufallswerte schließen lassen, wird/werden entweder eine, zwei oder drei der umliegenden Stützstellen nicht verwandt oder im Falle vier fehlender keine Korrektur gemacht, sodass zumindest keine weitere Verschlechterung eintritt.

Eine nochmalige Überprüfung der Flugzeitverteilung ergibt eine deutliche Verbesserung. Für den inneren Bereich  $p_{y,Rec}\pm 5$  a. u. beträgt die Abweichung des Schwerpunktes nur  $\pm 0,05$  a. u. gegenüber der Sollposition Null. Größere Transversalimpulse weisen einen Fehler bis zu  $\pm 0,10$  a. u. auf. Da für einen Großteil der Diskussion der Ergebnisse in ein stoßinternes Koordinatensystem gewechselt wird (siehe Kapitel 5.6) und der Rückstoßionenimpuls im Wesentlichen dazu verwendet wird eine Streuebene festzulegen, hat der größere Fehler in Flugzeitrichtung wegen des ebenfalls größeren y-Impulses keine negativen Auswirkungen. Ein Fehler von 0,05 bei 5 a. u. ist in diesem Falle gleichbedeutend mit 0,10 bei 10 a. u., so es um die Festlegung der Streuebene geht.

#### 5.1.3 Elektronenimpulse

Das parallel zum elektrischen Feld liegende Magnetfeld lässt senkrecht dazu emittierte Elektronen auf Kreisbahnen um die Magnetfeldlinien fliegen. Das elektrische Feld beschleunigt sie gleichzeitig, was zu einer Schraubenbahn mit zunehmender Steigung führt (siehe Kapitel 2.5.2). Dabei entkoppelt die Flugzeitrichtung (x) von der dazu orthogonal stehenden Detektorebene (yz) vollständig. In der atomaren Stoßphysik gibt es - abgesehen von sog. Augerelektronen (aus angeregten Atomen emittierte Elektronen - siehe

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Unter Ermüdung werden Abnutzungseffekte des Detektors zusammengefasst, welche zu einer Reduzierung der Nachweiseffizienz führen.

Abschnitt 4.3.5) - keine diskreten Elektronenenergien bzw. -impulse, was eine Eichung erheblich erschwert. Die Rekonstruktion der Impulse erfordert genaue Kenntnis von Betrag und Richtung des Magnetfeldes, der absoluten Flugzeit, der exakten Geometrie sowie der Größe des Detektors bzw. des Auftreffortes auf selbigem und alles in absoluten Einheiten wie Millimeter, Nanosekunden und Gauß.

Der Betrag des Magnetfeldes ergibt sich bei genauer Kenntnis der Gyrationsperiode direkt aus Gleichung 2.22:

$$T_{Gyr} [ns] = \frac{357, 22}{B [G]}$$
 (5.7)

Das zyklische Zurückkehren des Elektrons zum Startpunkt - projiziert auf die Detektorebene - bedingt im sog. Wiggle-Spektrum ( $t_e$  vs.  $r_{zy,e}$ ) eine unverkennbare Struktur. Die Größe  $r_{zy,e}$  kennzeichnet den Abstand von der Detektormitte und ist gegeben durch:

$$r_{zy,e} = \sqrt{z_e^2 + y_e^2}$$
(5.8)

Aufgrund dessen, dass der Schwerpunkt der Elektronenverteilung meistens nicht dem Mittelpunkt des Detektors entspricht, ist dies auch nur die erste Näherung und wird in einem der weiteren Schritte nachkorrigiert. In der Regel steht das Magnetfeld nicht exakt parallel zum elektrischen Feld. Der Nullpunkt, auf den die Elektronen nach  $T_{Gyr}$  zurückkehren sollten, ist dann abhängig von der Flugzeit; man spricht auch von einer EB-Drift.



**Abbildung 5.6:** Radialer Abstand zum Mittelpunkt  $r_{zy,e}$  auf dem Elektronendetektor in Abhängigkeit von der relativen Elektronenflugzeit  $t_e$  der Transferionisation im He<sup>2+</sup>-He-Stoß bei einer Projektilenergie  $E_P$  von 60 keV/u. Der zeitliche Abstand der Knoten  $T_{Gyr}$  beträgt 48,8 Kanäle bzw. 24,4 ns.

Erstellt man für jeden Knoten (N=1, 2, 3...), die vielfache der Gyrationsperiode ein Ortsbild, lässt sich der Fehler des wandernden Nullpunktes bestimmen und korrigieren. Da die Elektronen exakt zu diesem Zeitpunkt eine vollständige Kreisbahn durchlaufen haben, kehren sie zu ihrem Startort (wiederum projiziert auf die zy-Ebene) zurück; sie landen theoretisch alle in einem Punkt, der der Größe des Emissions-/Targetvolumens in yz-Richtung entspricht. Ebenso zeigen sich Inhomogenitäten des Magnetfeldes in einem unterschiedlichen Abstand der Knoten und einem nichtlinearen Zusammenhang zwischen Flugzeit und Schwerpunkt der Elektronenverteilung. In den vorliegenden Daten jedoch konnte dies nicht bestätigt werden, weshalb der Auftreffort linear mit der Flugzeit korrigiert wurde.

Durch diese flugzeitabhängige Ortskorrektur werden die Knoten sehr viel deutlicher sichtbar. Nun ist es relativ leicht einzusehen, dass sich aus dem Abstand der Knoten die Gyrationsperiode und aus dem zeitlichen Abstand der Knoten der Betrag des Magnetfeldes bestimmen lässt. Die Datenaufzeichnung mittels TDC diskretisiert die möglichen Gyrationsperioden auf dessen Zeitauflösung, also 500 ps. Mittels linearer Regression der gemessenen Knotenzeitpunkte (siehe Abbildung 5.7) lässt sich die Gyrationsperiode sehr viel genauer bestimmen als 0,5 ns, auch der 0. Knoten, d. h. der absolute Flugzeitnullpunkt  $t_e^0$  kann berechnet werden; dieser liegt für die Messung 60 keV/u He<sup>2+</sup> bei -2090,6 Kanälen bzw.  $t_e^0$ =139,3 ns.

Der gemessene Knotenabstand von 48,8 Kanälen bzw. 24,4 ns entspricht nach Gleichung 5.7 einem Magnetfeld von 14,64 Gauß, welches wiederum ausreicht, um Elektronen mit einem Maximalimpuls von 3,3 a. u. zum Detektor zu führen. Im Gegensatz zu anderen Experimenten mit gepulsten Strahlen (Synchrotron, Laser oder gepulstem Ionenstrahl) [TWeb03, RDoe04a, MWec04, LSch00, TWeb97], bei denen die Elektronen immer ein Referenzzeitsignal - zu welchem sie erzeugt wurden - besitzen, haben hier nur die tatsächlich echten (eines von hunderttausend) Elektronen eine korrekte Flugzeit und liegen auch korrekt im  $t_e$ - $r_{zy,e}$ -Spektrum. Alle anderen erzeugen einen diffusen, gleichmäßig verteilten Untergrund, der mit steigender Projektilgeschwindigkeit immer stärker wird und dann auch die Bestimmung der Knoten und Ortskorrekturen stark erschwert.

Nachdem nun die Stärke des Magnetfeldes bestimmt wurde, bleibt noch die Frage zu klären, in welche Richtung es zeigt - auf den Elektronendetektor zu oder von ihm weg. Je nachdem ändern sich die Vorzeichen der Drehmatrix in Gleichung 2.24. Die Richtung kann anhand des Stromflusses durch die Spulen bestimmt werden oder alternativ durch simples Ausprobieren; beim ersten Blick auf die berechneten Impulse erkennt man, ob die Vorzeichen richtig gewählt waren oder nicht, da im verkehrten Falle die Symmetrie um die y-Achse



**Abbildung 5.7:** a) Elektronenflugzeit für 5 Knoten des Wigglespektrums (Abbildung 5.6) in Abhängigkeit der jeweiligen Knotennummer n mit linearem Fit (Stoßsystem 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He). In Abbildung b) ist die Differenz des gemessenen Knoten zum linearen Fit dargestellt. Diese beträgt maximal 0,4 ns!

gebrochen wird. Zur weiteren Berechnung der Impulse müssen die Positionen auf dem Detektor von Kanälen in SI-Einheiten umgerechnet werden. Durch Verwendung einer Maske und der Bestrahlung mit einer  $\alpha$ -Quelle lassen sich sowohl die Linearität des Detektors sowie seine absolute Größe ermitteln. Für den benutzten 120 mm großen Elektronendetektor gilt danach:

$$z [mm] = 0, 193 \cdot z \quad [\text{Kanälen} \equiv 500 \ ps]$$
  

$$y [mm] = 0, 199 \cdot y \quad [\text{Kanälen} \equiv 500 \ ps]$$
(5.9)

Aus dem Gyrationsradius erfolgt mittels Gleichung 2.21 direkt der Impulsbetrag. Zusammen mit der Drehmatrix, die die Phase der Gyration berücksichtigt, werden zusammenfassend nach Gleichung 2.24 die Impulskomponenten in y- und z-Richtung berechnet. Für weitere Details zu den Trajektorien der Elektronen sei auf den Abschnitt 2.5.2 verwiesen. In Abbildung 5.8 ist das Ergebnis der Impulsberechnung dargestellt. Dass die Verteilung oben und unten spiegelsymmetrisch - ein Resultat der um die Strahlachse herrschenden Zylindersymmetrie - ist, zeigt, dass bei der Rekonstruktion der Impulse kein grober Fehler gemacht wurde. Die meisten Elektronen befinden sich zwischen  $p_{z,e}=0$  und  $p_{z,e}=v_P=1,55$  a. u., eine Tatsache, die nach [LSch00] für Sattelpunktelektronen zu erwarten ist.



**Abbildung 5.8:** Elektronenimpulsverteilung in Strahlrichtung (z) vs. senkrechter Richtung (y) der Transferionisation des Stoßsystem  $He^{2+}$ -He bei einer Projektilenergie von 60 keV/u.

Alternativ zur Bestimmung des absoluten Flugzeitnullpunktes aus den Knoten können auch aus angeregten Zuständen emittierte Photonen ( $\gamma$ ) verwendet werden. Die sehr kurze Lebensdauer der angeregten Zustände <100 ps und die konstante Flugzeit der Photonen machen diese Methode so attraktiv. Jedoch ist die Effizienz des Detektors für Photonen etwa um einen Faktor 10 geringer verglichen mit der für Elektronen (siehe Tabelle 2.7.1). Zum anderen können die Photonen nur mit ihrem geometrischen Raumwinkel von rund  $10^{-2}\pi$  detektiert werden. Daher ist eine eindeutige Identifikation des Photonen nenpeaks äußerst schwierig, wenn nicht gar unmöglich (siehe Abbildung 5.9).



**Abbildung 5.9:** Elektronenflugzeitverteilung unter den Bedingungen, dass es einen Einfachelektroneneinfang (SC) gab, das verbleibende Rückstoßion angeregt wurde und der Mittelpunkt des Elektronendetektors (die innersten 5 mm) ausgeblendet wurde, zur Bestimmung des absoluten Flugzeitnullpunktes durch Photonenabregung.

Für die letzte noch fehlende Komponente, den Impuls in Flugzeitrichtung (x), ist der zuvor berechnete absolute Flugzeitnullpunkt  $t_e^0$  von entscheidender Be-

deutung. Im Gegensatz zu den Rückstoßionen, bei denen ein einfacher linearer Zusammenhang zwischen Flugzeit  $\Delta t$  und Impuls  $\Delta p_x$  zur Berechnung herangezogen wurde, sind die Abweichungen zwischen linearem und kubischem Lösungsverfahren für die Elektronen zu groß, was bereits in Abbildung 2.10 dargestellt wurde. Aufgrund dessen, dass die Elektronen mehrere atomare Einheiten Impuls besitzen können (entspricht kinetische Energien bis einigen hundert eV), ist die Forderung, dass die kinetische Energie der Elektronen klein gegenüber der im elektrischen Feld aufgenommenen Energie ist (Näherung 2.11), nicht mehr gegeben. Besonders die um die Hälfte reduzierte elektrische Feldstärke verstärkt dies.

In Abschnitt 2.5.1 wurde bereits erläutert, wie der exakte Zusammenhang zwischen Flugzeit und Impuls aussieht. Gleichung 2.9, die dies verdeutlicht, nun speziell auf den Fall von Elektronen angepasst und in atomaren Einheiten ausgedrückt:

$$t_e(p_{x,e}) = -\frac{p_{x,e}}{E} + \sqrt{\frac{d}{E}} \cdot \left(\sqrt{\frac{p_{x,e}^2 + 2x_a E}{Ed}} + \sqrt{\frac{Ed}{p_{x,e}^2 + 2x_a E}}\right)$$
(5.10)

Die bekannte Spektrometergeometrie (Beschleunigungsstrecke  $x_a = 200 mm$ und Driftstrecke d=400 mm) erfordert für den gemessenen Flugzeitnullpunkt  $(t_e^0(p_{x,e} = 0)=139,3 ns)$  ein elektrisches Feld von  $E=4,7 V/cm^4$ , welches recht gut mit dem für die Rückstoßionen bestimmten Feld übereinstimmt. In Gleichung 5.10 tritt  $p_{x,e}$  nicht ausschließlich linear oder quadratisch, sondern in verschiedenen Potenzen auf. Der zur Flugzeit korrespondierende Impuls wird durch das Newtonsche Iterationsverfahren bestimmt [LSch00]. Das Ergebnis der Impulsrekonstruktion ist in Abbildung 5.10 dargestellt und kann analog zur Rückstoßioneneichung - durch den Vergleich mit den Impulsen in y-Richtung überprüft werden.

Neben der Überprüfung der Rotationssymmetrie um die z-Achse, welche nur besagt, dass beide Richtungen gleich gut bzw. gleich schlecht geeicht wurden, kann ebenfalls die Eichung entlang der Strahlrichtung (z) überprüft werden. Da bei der Rekonstruktion der Elektronenimpulse y- und z-Richtung nicht voneinander unabhängig sind, bestätigt eine korrekte Eichung der einen auch die andere Richtung. In Abbildung 5.14 sind die Longitudinalimpulse von Elektron und Recoil dargestellt. Diese stehen nach Gleichung 3.44 in quadratischem Zusammenhang. Details hierzu sind wenige Seiten weiter in Ab-

 $<sup>^4</sup>$ Neben 4,7 V/cm ergäben sich für eine um einen Knoten längere bzw. kürzere Flugzeit elektrische Feldstärken von 3,4 V/cm bzw. 6,9 V/cm - Werte die in starkem Gegensatz zu dem für die Rückstoßionen bestimmten elektrischen Feld von 4,8 V/cm stehen.



**Abbildung 5.10:** Elektronenimpulsverteilung um die Projektilstrahlachse  $(p_{x,e}^{\Sigma_P} \text{ vs. } p_{y,e}^{\Sigma_P})$  der Transferionisation im He2+-He-Stoß bei 60 keV/u.

schnitt 5.3 nachzulesen. Gut zu erkennen ist, dass die gemessenen Elektronen dem skizzierten parabolischen Verlauf folgen.

In einem einzigen Fall aller Messungen kann zusätzlich die Eichung absolut überprüft werden. Der Einfang eines oder mehrerer Elektronen findet nicht zwangsläufig in den Grundzustand statt. Es können ein- oder mehrfach angeregte Zustände besetzt werden. Allgemein kann die Abregung durch Emission eines Lichtquants erfolgen; im Falle doppelt hoch angeregter Zustände [RWhi34, JRos97, GTan00, ACza04a, ACza04b] jedoch auch durch Autoionisation, der Emission eines Augerelektrons [PHic75] (siehe ebenfalls 4.3.5). Der auf den autoionisierenden Zweifachelektroneneinfang (ADC = Autoionizing Double Capture) erfolgende Zerfall geschieht zwar im Projektil, aber noch unmittelbar innerhalb der Targetzone. Da die Elektronen aus dem Projektil emittiert werden, addiert sich zu ihrer Energie durch den Augerzerfall noch die Geschwindigkeit des Projektils. Zur Identifikation solcher Elektronen muss daher der Übergang vom Laborsystem in ein mit dem Projektil mitbewegtes System vollzogen werden. Die Elektronenimpulse liegen also auf einer Kugelschale im Impulsraum zentrisch um die Projektilgeschwindigkeit. Daher bietet sich der Übergang in Kugelkoordinaten um die x-Achse und der Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  als Ursprung an. Es gilt:

$$\theta_{x,e}^{\Sigma'} = \frac{p_{x,e}}{\sqrt{p_{x,e}^2 + p_{y,e}^2 + (p_{z,e} - v_P)^2}}$$
(5.11)

$$\phi_{x,e}^{\Sigma'} = atan2(p_{y,e}, (p_{z,e} - v_P))$$
(5.12)

$$p_{r,e}^{\Sigma'} = \sqrt{p_{x,e}^2 + p_{y,e}^2 + (p_{z,e} - v_P)^2}$$
(5.13)

Pederson et al. [JPed89] fanden in Versuchen mit schnellen Ionen/Elektronen und Helium bei ca. 35,4 eV einen Peak in den Elektronenemissionsspektren, welchen sie den zwei doppelt angeregten Zuständen,  $(2s2p)^1D$  und  $(2s2p)^1P$ , zuordneten (siehe Tabelle 4.3.5).



**Abbildung 5.11:** Radiale Impuls<br/>verteilung des Elektrons im sich mit Projektilgeschwindigkeiten bewegenden Bezugs<br/>system  $p_{r,e}^{\Sigma'}$  unter der Bedingung großer Rückstoßionen<br/>transversalimpulse ( $p_{\perp,Rec} > 6$  a. u.) der TI1 des Stoßsystem 40 keV/u<br/> He^2+/He zum Nachweis des autoionisierenden Zweifachelektronene<br/>infangs (ADC).

35,4 eV entspricht einem Elektronenimpuls von 1,6 a. u. In Abbildung 5.11 liegt bei 1,58 a. u. ein Peak, sodass von einer korrekten Elektronenimpulseichung  $\pm 2$  % auszugehen ist.

### 5.2 Ejektil

Im gemessenen Ejektil sind theoretisch zwei der drei Impulskomponenten (x/y) auch experimentell zugänglich, nämlich durch ihren Streuwinkel  $\theta_P$ , die Auslenkung aus ihrer Nulllage. Betrachtet man nur Ereignisse des einfachen Elektronentransfers (Single Capture), so sind im Endzustand lediglich zwei freie Teilchen vorhanden, das Rückstoßion und das Ejektil. Die Impulserhaltung erfordert, dass das jeweils andere Teilchen den Impuls seines Partners kompensiert (siehe auch 3.2.1); wodurch eine Überprüfung der Auflösung erleichtert wird. Trägt man von Projektil und Rückstoßion jeweils eine der beiden Impulskomponenten gegeneinander auf, so entspricht die Halbwertsbreite der daraus resultierenden Geraden der erreichbaren Streuwinkelauflösung. Siehe hierzu Abbildung 5.12 und [JTit04] für Details zur Streuwinkel-bestimmung.

Die mittlere Impulsauflösung des Projektils, bei gerechtfertigter Vernachlässigung der Rückstoßionenauflösung, beträgt  $\Delta p_{x,P}=2,5$  a. u. (FWHM) in x-Richtung und  $\Delta p_{y,P}=1,1$  a. u. (FWHM) in y-Richtung. In Streuwinkeln entspricht dies 0,55 mrad in x- und 0,24 mrad in y-Richtung. Aus Gleichung 3.38



**Abbildung 5.12:** Transversalimpulsverteilung von Projektil und Rückstoßion des SC im Stoßsystem H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 150 keV/u. a) Y-Impulskomponenten von Projektil und Rückstoßion, gemessen im Laborsystem. b) Summenimpuls von Projektil und Rückstoßion in x- und y-Richtung mit Gaußfit.

ist leicht zu ersehen, dass mit zunehmendem Projektilimpuls in Strahlrichtung - sei es durch höhere Projektilgeschwindigkeiten oder durch schwerere Projektile - bei gleichbleibender Streuwinkelauflösung die Impulsauflösung schlechter wird. Mit steigender Projektilgeschwindigkeit sinkt auch der totale Wirkungsquerschnitt der interessanten Reaktionskanäle dramatisch ab, weshalb die strahldefinierenden Kollimatoren weiter geöffnet wurden. Durch den größeren Strahlquerschnitt wird die Auflösung weiter reduziert. Diese Projektilimpulsauflösung ist wesentlich schlechter als die Summe der Einzelauflösungen von Rückstoßion und Elektron, weshalb die Impulse des Projektils - unter Verwendung der Impulserhaltung - berechnet wurden. Ebenso kann die nicht zugängliche Energie-/ bzw. Impulsänderung des Projektils in z-Richtung bestimmt werden:

$$-p_{x,P} = p_{x,Rec} + p_{x,e} -p_{y,P} = p_{y,Rec} + p_{y,e} -p_{z,P} = p_{z,Rec} + p_{z,e}$$
(5.14)

Aus der Summe der Einzelauflösungen von Rückstoßion und Elektron wird für dieses Projektil (150 keV/u H<sup>+</sup>) eine Streuwinkelauflösung von  $\Delta \theta_{x,P}$ =0,02 mrad bzw.  $\Delta \theta_{y,P}$ =0,03 mrad abgeschätzt. Diese Auflösung ist quasi unabhängig von der Projektilgeschwindigkeit, wenn man von der durch das höhere Magnetfeld hervorgerufenen schlechteren Impulsauflösung der Elekt-

ronen absieht. Trotz der schlechteren Auflösung der gemessenen Projektile, können die direkt gemessenen Projektilstreuwinkel zu einer einfachen Plausibilitätsüberprüfung herangezogen werden (siehe Abschnitt 5.5.2).

In Abbildung 5.13 sind die Impulse des Projektils in der Detektorebene (xy) dargestellt. Auch hier, wie schon zuvor für Rückstoßionen und Elektronen, muss die Verteilung weiterhin rotationssymmetrisch sein.



**Abbildung 5.13:** Aus Elektron und Rückstoßion berechnete Projektiltransversalimpulse  $(p_P = p_e + p_{Rec})$  der Transferionisation im H<sup>+</sup>-He-Stoß für 150 keV/u.

# 5.3 Nullpunkte

Die Zylindersymmetrie um die Strahlachse (z) erfordert schon, dass die Impulse in x- und y-Richtung symmetrisch um den Ursprung sein müssen. Dies gilt für alle Teilchen im Kontinuumsendzustand, seien es Elektronen, Rückstoßionen oder Ejektile. Aufgrund der reduzierten Raumwinkelakzeptanz durch das Abschneiden großer positiver y-Impulse der Rückstoßionen  $p_{y,Rec} \geq 6,5$  a. u. sowie von Elektronen, welche mit hohen Impulsen entgegen den Elektronendetektor starten  $p_{x,e} \leq -2$  a. u., besteht keine 100-prozentige Symmetrie. Nichts desto trotz müssen die Schwerpunkte um Null verteilt sein, was in den Abbildungen 5.3, 5.10 und 5.13 für Rückstoßionen, Elektronen und Ejektile zu sehen ist.

Sehr viel schwieriger, da keine Symmetrie existiert und darüber hinaus auch keine diskreten Linien - wie beispielsweise beim Elektronentransfer - vorhanden sind, ist die Nullpunktüberprüfung für die Strahlrichtung (z). Gleichung 5.6, die die Gesamtenergiebilanz des Stoßes beschreibt, legt ebenfalls den Nullpunkt der Rückstoßionen in Strahlrichtung fest. Zu große bzw. zu kleine Werte für z verschieben den Peak dementsprechend entlang der Q-Wertachse (siehe Abbildung 5.4). Da die Bindungsenergien der beteiligten Stoßpartner exakt bekannt sind und somit auch der Gesamtwert für Q, ist eine Korrektur leicht durchzuführen.

Die zweite Möglichkeit der Nullpunktbestimmung in longitudinaler Richtung (z) basiert auf einigen kinematischen Betrachtungen, die in Abschnitt 3.2.4 gemacht wurden. Ausgehend von Gleichung 3.44, die Rückstoßionen- und Elektronenlongitudinalimpuls miteinander verknüpft und den Endzustand im Phasenraum stark einschränkt, gilt:

$$p_{z,Rec} = -\frac{Q}{v_P} - v_P + \frac{E_{kin,e}^{\Sigma'}}{v_P}$$
 (5.15)

bzw. umgeformt und unter der Bedingung kleiner Transversalimpulse des Elektrons ( $p_{x,e} = p_{y,e} \approx 0$ ):

$$p_{z,Rec} = -\frac{Q}{v_P} - \frac{v_P}{2} + \frac{v_{z,e}^2}{2v_P} - v_{z,e}$$
(5.16)

Gleichung 5.16 beschreibt eine Parabel, die die Grenze der Rückstoßionenund Elektronenlongitudinalimpulse darstellt (siehe Abbildung 5.14). Elektronen, welche mit einer transversalen kinetischen Energie von  $E_{kin,\perp,e} = 1/2 \cdot (p_{x,e}^2 + p_{y,e}^2)=0$  eV emittiert werden, landen exakt auf der Linie, schnellere - in Abbildung 5.14 - oberhalb der Parabel. Kinematisch unmöglich ist es für ein reales Elektron unter dieser Grenzlinie zu landen.



**Abbildung 5.14:** Rückstoßionen- und Elektronenlongitudinalimpuls des Stoßsystems  $\text{He}^{2+}$  + He der Transferionisation bei einer Projektilgeschwindigkeit von  $v_P$ =1,55 a. u. für kleine Elektronentransversalimpulse ( $p_{xy,e} \leq 0,1$  a. u.). Nach Gleichung 5.16 wurden die Parabeln für Q=-0,9 bzw. -2,4 a. u. berechnet. Die senkrechte Linie repräsentiert Elektronen, die mit Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  emittiert (sog. CUSP) wurden, und gleichzeitig das Minimum der dargestellten Parabeln. Horizontal skizziert ist der zum CUSP-Mechanismus korrespondierende Rückstoßionenlongitudinalimpuls.

Die Kurve besitzt ein Minimum bei Projektilgeschwindigkeit. In diesem Minimum liegen die so genannten CUSP-Elektronen (siehe Gleichung 3.41 sowie Abschnitt 4.3.2). Dies sind solche, die in einen Kontinuumszustand des Projektils eingefangen werden. Ausgehend von Gleichung 3.41 ergibt sich - da  $(p_{z,e} = v_P)$  gilt - für den Rückstoßionenimpuls in Strahlrichtung:

$$p_{z,Rec} = -\frac{Q}{v_P} - \frac{v_P}{2} \tag{5.17}$$

Anhand dessen können die Nullpunkte in z-Richtung für Elektron  $p_{z,e}$  und Rückstoßion  $p_{z,Rec}$  sehr gut überprüft werden. Im Gegensatz zu einer einfachen Verschiebung des Nullpunktes wie zuvor bei den Rückstoßionen ist eine simple Verschiebung bei den Elektronen nicht möglich. Dies liegt vor allen Dingen an der durch das Magnetfeld hervorgerufenen Drehung und Stauchung des Phasenraumes. Es wurden so lange die Ortsnullpunkte der Gyration verändert sowie Abstand und Position der Knoten immer wieder variiert, bis die berechneten Impulse optimal mit der theoretischen Kurve nach Gleichung 5.16 übereinstimmten und auch die Symmetrie sowie der Nullpunkt in y-Richtung korrekt waren. Die maximal ermittelte Abweichung des Nullpunktes in Strahlrichtung beträgt für die Rückstoßionen etwa 0,03 a. u. und 0,05 a. u. für die Elektronen.

# 5.4 Auflösung

Zur Auflösung wurde in den vorangegangenen Abschnitten bereits einiges geschrieben. An dieser Stelle soll nicht nur zusammenfassend auf die Impulsauflösung der gemessenen 6 Impulskomponenten von Elektron und Rückstoßion in den drei Raumrichtungen eingegangen werden. Ebenso geht es um die Qualität der Daten in den daraus errechneten Größen, wie Winkelverteilungen, Impulsen in den verschiedenen Streusystemen, an welcher Stelle die Knoten der Gyration Löcher in den Phasenraum schneiden sowie weitere Größen. In Tabelle 5.4 sind die Auflösungen der bis zu 3 freien Teilchen im Endzustand angegeben.

Die Rückstoßionenauflösung wurde bereits eingehend in Abschnitt 5.1.1 diskutiert. Die Nullpunkte in x- und y-Richtung wurden aus dem Schwerpunkt ihrer Verteilung bestimmt und durch einfaches Verschieben korrigiert. Ein Fit der jeweiligen Komponente zeigt eine Abweichung von der exakten Nullposition, die zwischen 0,02 und 0,15 a. u. beträgt (zur Nullpunktfestlegung in Flugzeitrichtung siehe auch Abschnitt 5.1.2). Für die z-Richtung wird die Unsicherheit bei der Nullpunktfestlegung mit 0,02 a. u. im Falle der Bestimmung durch einen Elektronentransfer angenommen und bis 0,05 a. u., falls nach den in Kapitel 5.3 beschriebenen Verfahren vorgegangen wurde. Da die Targettemperatur keinen negativen Einfluss auf die Auflösung der Elektronen besitzt, sind ausschließlich die Stärken des elektrischen und magnetischen Feldes für die Auflösung verantwortlich. Extrahiert man aus Gleichung 5.10 die mittlere Impulsauflösung in x-Richtung, erhält man bei 1 ns Zeitauflösung für sie 0,04 a. u. (bzw. 0,02 - 0,1 a. u., je nach maximalem Impuls und Richtung<sup>5</sup>). Weitere limitierende Einflüsse liegen in dieser Richtung nicht vor, weder die Gitter noch aufgrund der zeitfokussierenden Spektrometergeometrie die Targetausdehnung. Die Nullpunktbestimmung ist qualitativ genauso gut wie schon zuvor im Falle der Rückstoßionen; die maximale Abweichung des x-Nullpunktes beträgt demnach  $2 \times 10^{-2}$  a. u. für  $\Delta p_{x,e}^0$ .



**Abbildung 5.15:** Simulierte Elektronenenergieauflösung mittels des Programms "Mr. Simulizer!" [TJah06]. Die Feldstärken entsprechen denen der vorgestellten Kalibrationsmessungen, B=14,4 Gauß und E=4,7 V/cm, sowie eine maximale kinetische Energie der Elektronen von 100 eV. Die verwendete Zeitauflösung beträgt  $\pm 1$  ns und der Ortsfehler  $\pm 1$  mm.

In transversaler Richtung (y/z) ist die Stärke des magnetischen Feldes für die erreichbare Auflösung verantwortlich. Die Auflösung kann durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung abgeschätzt werden. Details zur Fehlerrechnung sind in [MSch02] zu finden. Bei einer Feldstärke von 15 Gauß - einer typischen Feldstärke -, einer Zeitauflösung von  $\pm 1$  ns, einer Ortsunschärfe von  $\pm 1$  mm und einem Winkel in der Gyrationsphase von 45° ergibt sich eine Auflösung von 13 Prozent des Impulses zuzüglich eines Fehlers von 0,07 a. u., der auf der Ortsunsicherheit beruht. Niedrigere Feldstärken sowie eine in den meisten Fällen bessere Zeitauflösung sorgen für einen linear geringeren Fehler, gleiches gilt für höhere Feldstärken. Daneben wurde mit dem Simulationspro-

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Die Auflösung ist für auf den Detektor zu startende Elektronen schlechter als für solche, die in entgegengesetzter Richtung starten.

	$He^+$	$He^{2+}$	<i>e</i> <sup>-</sup>	Ejektil
$\Delta p_x$	0,08 a. u.	0,08 a. u.	0,02 - 0,1 a. u.	0,08 - 0,15 a. u.
$\Delta p_y$	0,11 a. u.	0,11 a. u.	0,07 - 0,5 a. u.	0,13 - 0,51 a. u.
$\Delta p_z$	0,10 a. u.	0,15 a. u.	0,07 - 0,5 a. u.	0,17 - 0,52 a. u.
$\Delta p_x^0$	0,02 - 0,10 a. u.	0,02 - 0,10 a. u.	0,02 a. u.	0,03 - 0,10 a. u.
$\Delta p_u^0$	0,02 a. u.	0,02 a. u.	0,05 a. u.	0,05 a. u.
$\Delta p_z^{0}$	0,02 a. u.	0,02 - 0,05 a. u.	0,05 a. u.	0,05 - 0,07 a. u.

**Tabelle 5.1:** Mittlere Auflösung der Rückstoßionen, Elektronen und Projektile sowie die maximale Abweichung bei der Nullpunktbestimmung. Die Werte basieren teils auf real überprüfbaren Messgrößen und zum Teil auf Abschätzungen aus Feldstärken, Spektrometergeometrie, Jettemperatur, Simulationen und Fehlerrechnungen.

gramm "Mr. Simulizer!" [TJah06] die Elektronenenergieauflösung in Abhängigkeit vom Emissionswinkel bestimmt (siehe Abbildung 5.15). Das Ausbleiben deutlicher diskreter Strukturen in der Elektronenemission verhindert eine experimentelle Überprüfung der gerade abgeschätzten Fehler. Mangelnde Statistik beim autoionisierenden Double Capture (ADC), aber vor allem der starke Untergrund, machen die einzige Überprüfung unmöglich.

Der Nullpunkt in y-Richtung wird wie schon zuvor aus der Symmetrie der Verteilung ermittelt und weicht  $\pm 0,05$  a. u. von der Sollposition ab; gleiches gilt für den Nullpunkt in z-Richtung. Weitere Versuche des Minimierens der Nullpunktabweichung waren aufgrund der Komplexität der Impulsberechnung - mit mehreren Ortsnullpunkten sowie verschiedenen Gyrationszeiten - nicht mehr möglich.

Als einzige nicht gemessene Größe kann die Impulsauflösung und die Genauigkeit der Nullpunktbestimmung der Ejektile nur anhand des Rückstoßions und Elektrons bestimmt werden, nämlich als Wurzel der Summe der einzelnen Fehlerquadrate:

$$\Delta p_{i,P} = \sqrt{\left(\Delta p_{i,Rec}\right)^2 + \left(\Delta p_{i,e}\right)^2} \tag{5.18}$$

### 5.5 Untergrundereignisse

Obwohl die Art der Messung mittels einer Mehrteilchenkoinzidenz und der hohen Raumwinkelakzeptanz vom Prinzip her relativ wenig Untergrund enthält, muss doch geklärt werden, welches die Ursache ist, in welcher Form er in den einzelnen Spektren auftritt und wie er minimiert werden kann. Der Untergrund resultiert im Wesentlichen aus zwei Quellen:

- 1. Reaktionen, die nicht durch Wechselwirkung mit dem Target sondern irgendwo innerhalb der Targetkammer mit Restgas stattfanden.
- 2. Statistische Koinzidenzen aus anderen parallel ablaufenden und dominanteren Reaktionskanälen, wie der Ein- bzw. Mehrfachionisation.

Zu Punkt 1 ist zu sagen, dass die Targetflächendichte etwa 10-mal größer ist als die Restgasflächendichte. Da der Hauptteil des Restgases in der Experimentierkammer warmes Heliumrestgas ist, ist es im Rückstoßionenflugzeitspektrum nicht von echten Ereignissen aus dem Target zu unterscheiden. Entstehende Elektronen aus einer solchen Reaktion besitzen zwangsläufig einen falschen und unbekannten Startpunkt, weshalb auch die Impulsberechnung fehlschlägt.

Den Hauptteil des Untergrundes bildet allerdings Punkt 2. Die Elektronentransferreaktionen, die eigentlich zu untersuchenden Reaktionen, nehmen mit steigender Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  sehr stark ab. Im Vergleich dazu bleibt der totale Wirkungsquerschnitt der Targeteinfachionisation nahezu konstant. Für einen Proton-Helium-Stoß bei der höchsten gemessenen Energie (v<sub>P</sub>=5 a. u.) beträgt das Verhältnis von Einfachionisation zu Einfachelektroneneinfang etwa 1 000 : 1 und zur Transferionisation (TI) rund 30 000 : 1. Dies bedeutet, dass auf ein echtes Elektron aus einer TI-Reaktion etwa 30 000 Elektronen kommen, die unerwünscht sind. Hinzu kommt die absolute Effizienz des Experiments für eine Zwei- bzw. Dreiteilchenkoinzidenz (Detektoren Effizienz und Transmission der Gitter). Diese beträgt für einen Elektroneneinfang rund 30 Prozent und im Falle der Transferionisation 14 Prozent<sup>6</sup>, was wiederum bedeutet, dass nur jedes 7. Ereignis einer Transferionisation als solches wahrgenommen und aufgezeichnet werden kann! Daraus folgt weiterhin, dass von 200 000 Elektronen zwar mehrere echt sind, aber nur eine einzige echte Koinzidenz registriert wird, bei der dann auch die Flugzeiten korrekt sind.

Bereinigt werden können die Spektren von ihrem Untergrund auf zwei verschiedenen Wegen. Die einfache bzw. dreifache Überbestimmtheit des Experiments erlaubt die Überprüfung der Erhaltungssätze. Auf die transversalen Komponenten x und y kann die Impulserhaltung angewandt werden, wenn auch nur in geringem Maße, da die Streuwinkelauflösung sehr schlecht ist.

 $<sup>^6</sup>$  Für jeden Detektor wird eine absolute Teilcheneffizienz von 60 % angenommen und die Transmission der Gitter beträgt 90 %. Die Gesamteffizienz berechnet sich aus dem Produkt des Projektil-, Elektronen- und Rückstoßionennachweises:  $(0,6)\cdot(0,9^2\cdot0,6)\cdot(0,9\cdot0,6)$ . Auf ihrem Weg zum Detektor sah das Projektil kein Gitter, das Rückstoßion eines (unmittelbar vor dem Detektor) und das Elektron zwei Gitter.

	Ejektil	Rückstoßion	Elektron	Kommentar
0	+	+	+	echtes Ereignis
1	+	+	-	
2	+	-	+	ein echtes Signal hat gefehlt
3	-	+	+	
4a	+	-	-	
4b	-	+	-	zwei oder drei echte
4c	-	-	+	Signale haben gefehlt
4d	-	-	-	

**Tabelle 5.2:** Zusammenstellung der möglichen Kombinationen von echten und statistischen Koinzidenzen. Die Wahrscheinlichkeit, dass der jeweils skizzierte Fall trotz einer 3-Teilchen-Koinzidenz aufgezeichnet wurde, nimmt von oben nach unten hin ab.

Die Energieerhaltung fordert ihrerseits die longitudinale Komponente des Rückstoßionenimpulses  $p_{z,Rec}$  sowie die kinetische Energie des Elektrons im Projektilsystem  $E_{kin,e}^{\Sigma'}$  ein.

Neben der Begrenzung auf einen gewissen Teil des Phasenraumes durch die Überprüfung der Erhaltungssätze kann auch der Untergrund bestimmt und anschließend von den Daten subtrahiert werden.

### 5.5.1 Untergrund in der Flugzeit

Die große Wahrscheinlichkeit von Koinzidenzen, die vorwiegend durch "falsche" Elektronen aber auch Rückstoßionen oder Ejektile ausgelöst wurden, zeigt sich am deutlichsten im Flugzeitspektrum. Grundsätzlich gibt es 8 verschiedene Möglichkeiten, weshalb das Ereignis aufgezeichnet wurde. Sie variieren von "es gab 3 echte Ereignisse", über "eines oder zwei Ereignisse waren statistische", bis hin zu "alle 3 Teilchen waren statistisch verteilt". In Tabelle 5.5.1 sind diese 8 Möglichkeiten zusammengestellt, wobei die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten des beschriebenen Falles von oben nach unten abnimmt.

Die Differenzen von Projektil-MCP minus Elektron-MCP bzw. Projektil-MCP minus Rückstoßionen-MCP entsprechen den Flugzeiten von Elektron bzw. Rückstoßion und sind in Abbildung 5.16 in einem zweidimensionalen Bild gegeneinander aufgetragen. Die drei Linien können jeweils einem statistischen Ereignis (siehe auch Tabelle 5.5.1) - innerhalb der 3-Teilchen-Koinzidenz zugeordnet werden. Die horizontale Linie 1 entspricht Ereignissen, bei denen das Elektron statistisch verteilt war. Ein fehlendes echtes bzw. statistisches Rückstoßion ist in der waagerechten Linie 2 zu sehen. Innerhalb der diagonalen Linie 3 sind Ereignisse mit einem statistischen Ejektil zu sehen. Nur



innerhalb des Kreuzungspunktes der 3 Linien befinden sich vollständig echte Ereignisse.

Abbildung 5.16: Elektronen- und Rückstoßionenflugzeit für die Transferionisationsreaktion von Protonen mit Helium bei 630 keV/u; dargestellt für das jeweils 1. Ereignis (in logarithmischer Skalierung). Linie 1 entspricht Ereignissen, die durch ein zufälliges Elektron zustande gekommen sind, während die senkrechte Linie 2 Ereignissen mit einem statistischen Rückstoßion zugeschrieben wird. Die diagonale Linie 3 entspricht einem fehlenden bzw. statistischen Ejektil. Das durch die Elektronik gesetzte Hardware-Koinzidenzfenster auf die Elektronenflugzeit ist anhand des breiten vertikalen Streifens deutlich zu erkennen.

Analysiert man wie zuvor die Daten und betrachtet die in Abbildung 5.16 dargestellten Fenster 1, 2 und 3 im Untergrund, bildet deren Summe den gesamten Flugzeituntergrund, der auch unter den echten Daten vorhanden ist. Dieser kann von den Daten mit korrekten Zeitfenstern subtrahiert werden.

## 5.5.2 Untergrundunterdrückung mittels der Erhaltungssätze

Die zwei möglichen Erhaltungssätze, welche überprüft werden können, sind die Energie- und die Impulserhaltung; letztere drückt sich in der Messgröße des Projektilstreuwinkels bzw. der Projektilimpulse in x- und y-Richtung aus (siehe Gleichungen 5.14 bzw. 3.32, 3.33 in Abschnitt 3.2). In Kapitel 5.2 wurde bereits gezeigt, dass die Auflösung des Streuwinkels nicht ausreichend ist, weshalb umgekehrt die Impulserhaltung verwendet wurde, um die Streuwinkel des Projektils zu berechnen. In Abbildung 5.17 ist dieser Sachverhalt am Beispiel der Transferionisation für eine Impulskomponente nochmals herausgegriffen. Die Halbwertsbreite beträgt in der x-Richtung  $\Delta p_{x,P}$ =5,1 a. u. und in der y-Richtung  $\Delta p_{y,P}$ =2,0 a. u. Impuls.

Obwohl gerade gezeigt wurde, dass die Impulsauflösung des gemessenen Ejektils mangelhaft ist, geben die gemessenen Streuwinkel einen groben Rahmen vor. Alle Ereignisse, die außerhalb dieses Bereichs liegen, werden verworfen (siehe Abbildung 5.18 c). Zwei der drei überbestimmten Größen wur-



**Abbildung 5.17:** a) Gemessene Projektilimpulskomponente  $p_{x,P}$  vs. Summe aus Elektronenund Rückstoßionenimpuls in selbiger Richtung  $(p_{x,Rec} + p_{x,e})$  der Transferionisation des Stoßsystems 630 keV/u H<sup>+</sup> + He. b) Summenimpuls aus Projektil, Elektron und Rückstoßion in x-Richtung. c) Summenimpuls aller drei freien Teilchen in y-Richtung.

den für die Überprüfung der Impulserhaltung verwandt. Die verbleibende Größe entspricht hauptsächlich dem Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}$ . Dieser kann aus der Energieerhaltung, der Bilanz der Bindungsenergien (Q-Wert) sowie der Energie des Elektrons im Projektilsystem berechnet werden, wie dies bereits in Kapitel 3.2.4 gezeigt wurde.

Für das Stoßsystem He<sup>2+</sup>/He beträgt die Differenz der Bindungsenergien  $Q_K$ =-0,9 a. u., sofern das verbleibende Elektron sich im Grundzustand - der K-Schale - befindet (siehe Abbildung 5.4).  $Q_L$ =-2,4 a. u. gilt im ersten angeregten Zustand, der L-Schale. Der niedrige energetische Abstand dieser zu den nächst höherliegenden Schalen M, N... ( $Q_M$ =-2,68 a. u.) lässt keine weitere Separation mehr zu. Die beiden anderen Stoßsysteme He<sup>+</sup>+He ( $Q_K$ =-2,0 a. u.) und H<sup>+</sup>+He ( $Q_K$ =-2,4 a. u.) weisen zu geringe Anregungsenergien auf, sodass keine Unterscheidung derselben mehr möglich ist. In die Berechnung des Q-Wertes geht die Projektilgeschwindigkeit linear ein. Dementsprechend wird auch die Verteilung breiter. Aus diesem Grunde wird die Breite nicht absolut, sondern skalierend mit der Projektilgeschwindigkeit angegeben. Die Gesamtenergieauflösung des Experiments, der Q-Wert, beträgt im Mittel 0,3 a. u./ $v_p$ (FWHM). Anders als der Untergrund in der Flugzeit ist der Untergrund entlang der Q-Wert-Achse nicht statistisch gleich verteilt. Ausschließlich Ereignisse, die sich innerhalb einer Breite von  $\pm 3 \cdot \sigma^7$  um die zur Reaktion gehörende Energiebilanz sowie  $\pm 3 \cdot \sigma$  um die Impulserhaltung befinden, werden später dargestellt, während alle anderen Ereignisse herausgefiltert werden. In Abbildung 5.18 ist die Effektivität der Überprüfung der verschiedenen Erhaltungsgrößen leicht zu erkennen. Aus 51 000 Ereignissen, die integral innerhalb des gezeigten Elektronenflugzeitspektrums liegen, wird durch die simple

 $<sup>^7</sup>$  Die Umrechnung zwischen der Halbwertsbreite <br/>  $\Delta$  (FWHM) und dem Gaußschen Sigma $\sigma$ ist gegeben durch:<br/>  $\Delta=\sigma\cdot 2\sqrt{2\cdot\ln(2)}=2,35$ 

Forderung nach einem Rückstoßion mit korrekter Flugzeit (He<sup>2+</sup>) deren Anzahl auf 31 000 reduziert. Eine sehr grobe Überprüfung der Impulserhaltung vermindert die Anzahl auf 16 000 bzw. circa 10 000 im Falle der Impulserhaltung und 9 000 für die Kombination aus Impuls- und Energieerhaltung. Das letzte Spektrum (Abbildung 5.18e) enthält nur noch etwa 250 Ereignisse aus statistischen Koinzidenzen als Untergrund.



**Abbildung 5.18:** Elektronenflugzeitverteilung (Elektron-Projektil-Koinzidenz) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =630 keV/u für: a) alle Ereignisse, b) solche, in denen zusätzlich das Rückstoßion die korrekte Flugzeit aufweist, c) weiterhin die Impulserhaltung erfüllt ist oder d) stattdessen die Energieerhaltung erfüllt ist und e) Impuls- und Energieerhaltung überprüft wurden. Die Zahl oben rechts gibt jeweils an, wieviele Ereignisse in diesem Spektrum vorhanden sind. Die Nullstellen in Abbildung c/d/e entsprechen den Knoten der Gyration und wurden herausgeschnitten, da eine Impulsrekonstruktion unmöglich ist.

Der zuvor beschriebene Flugzeituntergrund (Abschnitt 5.5.1) liegt gleichverteilt auch unter den echten Daten. Für die schwierigsten Messungen mit viel Untergrund ( $E_P$ =630 keV/u) führt die eben beschriebene Untergrundunterdrückung mittels Erhaltungssätzen zwar zu einer deutlichen Reduktion des Untergrundes (um rund einen Faktor 25); jedoch beinhalten die integralen Spektren immer noch 3 Prozent Untergrund. In höher differenziellen Spektren kann der Untergrundanteil auch noch sehr viel stärker sein. Die Summe des Untergrundes der Bereiche 1, 2 und 3 (siehe Abbildung 5.16) stellt den gesamten statistischen Untergrund der Messung dar. Für die Messungen:

- $H^+$  bei 630 keV
- He<sup>+</sup> bei 630 keV/u
- $He^{2+}$  bei 630 keV/u
- $He^{2+}$  bei 450 keV/u

wird der Untergrund der vier Teilbereiche einzeln erfasst, aufsummiert und anschließend von den Daten wieder subtrahiert. Schon ab einer Projektilgeschwindigkeit von 3,5 a. u. ist das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte von Transfer- zur Targeteinfachionisation groß genug bzw. der Untergrund akzeptabel gering, sodass auf einen Untergrundabzug in allen anderen Messungen verzichtet werden konnte.

Allein aus den totalen Wirkungsquerschnitten ist relativ klar, dass der Untergrund aus der Targeteinfachionisation (SI) kommt. In Abbildung 5.19 ist der Rückstoßionenlongitudinalimpuls der Transferionisation des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei 630 keV/U Projektilenergie dargestellt, ohne weitere Bedingung (a), mit der Forderung nach Energieerhaltung (b) und zusätzlich noch mit der Einschränkung auf Impulserhaltung (c). Ebenfalls ist die  $p_{z,Rec}$ -Verteilung von Weber [TWeb97] der SI für 500 keV/u H<sup>+</sup>/He dargestellt. Sehr gut zu erkennen ist, dass die Überprüfung der Erhaltungssätze tatsächlich den aus der SI stammenden Untergrund minimiert.



**Abbildung 5.19:** Rückstoßionenlongitudinalimpulsverteilung der TI des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =630 keV/u ohne weitere Einschränkung a), mit überprüfter Energieerhaltung b) und zusätzlich mit korrekter Impulserhaltung c). Zusätzlich ist die experimentell ermittelte  $p_{z,Rec}$ -Verteilung der Einfachtargetionisation (SI) für 500 keV/u H<sup>+</sup>/He von Weber skizziert [TWeb97].

# 5.6 Darstellung in verschiedenen Streusystemen

Bisher wurden die Impulse nur im Laborsystem, dessen Koordinatenursprung der Kreuzungspunkt aus Projektilstrahl und Gasjettarget ist, dargestellt. Die Zylindersymmetrie der Physik um die Strahlrichtung z macht diese auch zur einzigen ausgezeichneten Achse. Allerdings können wesentliche physikalische Betrachtungen im Laborsystem nicht gemacht werden. Daher werden die Impulse in ein stoßinternes Koordinatensystem transformiert (siehe Abbildung 3.1). Z als die Strahlrichtung, welche Informationen über die Kinematik des Stoßes besitzt, bleibt als solche erhalten. Jedoch wird gegebenenfalls der Koordinatenursprung mittels einer Lorentztransformation - in der Regel zur Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  - verschoben. Die mit x zu bezeichnende Richtung ist gekennzeichnet durch die Richtung des Impulsübertrages auf das entsprechende Fragment. Die beiden Vektoren  $\vec{x'}$  und  $\vec{z}$  spannen die so genannte Streuebene auf. Senkrecht auf der Streuebene, die Richtung der Normalen, steht die y'-Achse. Für jedes einzelne Ereignis wird der Impulstransfer berechnet und es in das neue Koordinatensystem gedreht.

Trigonometrische Funktionen wie Sinus und Cosinus sind relativ rechen- und somit zeitaufwändig, sodass anstatt die Impulse jedes einzelnen Ereignisses mittels einer Drehmatrix in das neue Streusystem zu überführen, Projektoren dazu verwendet wurden. Für die Transformation in das neue Streusystem  $\Sigma'$ gilt:

$$r^{\vec{\Sigma}'} = \frac{1}{|\vec{r_2}|} \begin{pmatrix} \vec{r_1} \cdot \vec{r_2} \\ \vec{r_1} \cdot (\vec{r_2} \times \vec{e_2}) \end{pmatrix}$$
(5.19)

Hierbei sind  $\vec{r_1}$  das in der neuen Streuebene darzustellende Teilchen (Beispiel: das Elektron im ...streusystem),  $\vec{r_2}$  das Teilchen, welches die Streuebene definiert (Beispiel: der Impulsübertrag auf das Projektil) und  $\vec{e_z}$  der Einheitsvektor in z-Richtung, für die gilt:

$$\vec{r}_{1} = \begin{pmatrix} x_{1} \\ y_{1} \\ z_{1} = 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{r}_{2} = \begin{pmatrix} x_{2} \\ y_{2} \\ z_{2} = 0 \end{pmatrix} \quad und \quad \vec{e}_{z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
(5.20)

Aus den Gleichungen 5.19 und 5.20 folgt:

$$\bar{r}^{\Sigma'} = \frac{1}{\sqrt{x_2^2 + y_2^2}} \begin{pmatrix} x_2 y_1 + x_2 y_2 \\ x_1 y_2 - y_1 x_2 \end{pmatrix}$$
(5.21)

Eine schlechte Eichung der Nullpunkte im Laborsystem führt in streusysteminternen Koordinaten niemals zu einer asymmetrischen Verteilung. Im ungünstigsten Fall entstünden ringförmige Strukturen. Neben der Präsentation in kartesischen Koordinaten werden auch sphärische Koordinaten benutzt. Die Definition entspricht der üblichen Notation;  $\theta$  entspricht dem Polarwinkel und  $\phi$  dem Azimutalwinkel gemessen zur z-Achse. Der bisher verwendeten Schreibweise folgend handelt es sich bei  $\theta_{z,e}^{\Sigma_P}$  um den Azimutalwinkel des Elektrons, im Projektilstreusystem gemessen in Bezug auf die z-Achse.

#### 5.6.1 Projektilstreusystem

Das Projektilstreusystem ist das in der atomaren Stoßphysik mit Abstand am häufigsten verwendete. Die Streuebene wird - wie schon zuvor - durch die Strahlrichtung z und den in der xy-Ebene auf das Projektil übertragenen Transversalimpuls festgelegt. Die Projektion der Impulse auf diese Ebene wurde im vorherigen Kapitel bereits erläutert und erbrachte als Resultat Gleichung 5.21. Für ein Elektron  $(\vec{r_1})$  im Projektilstreusystem  $(\vec{r_2})$  gilt:

$$p_{e}^{\vec{\Sigma}_{P}} = \begin{pmatrix} p_{x,e}^{\Sigma_{P}} \\ p_{y,e}^{\Sigma_{P}} \\ p_{z,e}^{\Sigma_{P}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{p_{x,P}e_{x,P}+p_{y,P}e_{y,P}}{\sqrt{p_{x,P}^{2}+p_{y,P}^{2}}} \\ \frac{p_{y,P}e_{x,P}+p_{x,P}e_{y,P}}{\sqrt{p_{x,P}^{2}+p_{y,P}^{2}}} \\ p_{z,e} \end{pmatrix}$$
(5.22)

Anschaulicher ist allerdings die Verwendung einer Drehmatrix:

$$p_{e}^{\vec{\Sigma}_{P}} = \begin{pmatrix} p_{x,e}^{\Sigma_{P}} \\ p_{y,e}^{\Sigma_{P}} \\ p_{z,e}^{\Sigma_{P}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \Phi_{P} & \sin \Phi_{P} & 0 \\ -\sin \Phi_{P} & \cos \Phi_{P} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} p_{x,e} \\ p_{y,e} \\ p_{z,e} \end{pmatrix}$$
(5.23)

Anhand eines binären Stoßes (BE = **B**inary **E**ncounter) zwischen Projektil und Elektron soll dies kurz verdeutlicht werden (siehe Kapitel 4.3.3). Wird ein Elektron von einem wesentlich schwereren Projektil getroffen, so kann das Elektron, abhängig vom Auftreffwinkel, maximal auf doppelte Projektilgeschwindigkeit beschleunigt werden [RJel91].

In Abbildung 5.20 a sind die Impulse des Elektrons in der Streuebene zu sehen. Das Projektil wird immer nach rechts gestreut und zwar in ein gewähltes Streuwinkelfenster  $\theta_P$  von 0,25 - 0,45 mrad. Vernachlässigt man Effekte höherer Ordnung und auch, dass der vorherige Elektroneneinfang einen kleinen Impulsübertrag auf das Projektil ausgeübt hat, so muss allein das Projektil den Elektronenimpuls kompensieren; das Elektron wird in dieser Darstellung folglich nach links gestreut. Die Elektronenverteilung muss dem skizzierten Kreis, dessen Radius der Projektilgeschwindigkeit entspricht, folgen. Der stark abfallende Wirkungsquerschnitt für zentraler werdende Stöße führt dazu, dass keine Elektronen mit hohen Impulsen in z-Richtung gemessen wurden. Weiteres zur Kinematik eines solchen Stoßes ist in Kapitel 4.3.3 nachzulesen.



**Abbildung 5.20:** Elektronenimpulsverteilung der Transferionisation im H<sup>+</sup>-He-Stoß bei 300 keV/u Projektilenergie unter der Bedingung auf den Projektilstreuwinkel  $0, 25 < \theta_P < 0, 45$  mrad. Das Projektil wird nach rechts gestreut, skizziert durch den grünen Pfeil. Die Kreislinie entspricht der erwarteten Verteilung im klassischen BE-Bild. a) Elektronenimpulse mit Blick auf die Projektilstreuebene  $(p_{x,e}^{\Sigma_P}$  vs.  $p_{z,e})$  und b) Elektronenimpulsverteilung um das Projektil  $(p_{x,e}^{\Sigma_P}$  vs.  $p_{y,e}^{\Sigma_P})$ .

Der binäre Stoß spielt sich per Definition vollends in einer Ebene ab, sodass dies auch senkrecht zur Streuebene zu beobachten ist (siehe hierzu Abbildung 5.20 b). Die Invarianz der Coulombkraft gegenüber Raumspiegelung hat zur Folge, dass die Verteilung unterhalb und oberhalb der Streuebene spiegelsymmetrisch sein muss. Anschaulich ist diese Tatsache darin begründet, dass die Achse senkrecht zur Streuebene  $y^{\Sigma_P}$  physikalisch nicht ausgezeichnet ist, sondern lediglich als Kreuzprodukt von  $p_{z,e}^{\Sigma_P}$  und  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$  gebildet wurde.

#### 5.6.2 Rückstoßionenstreusystem

Das Rückstoßionenstreusystem oder kurz Recoilstreusystem  $\Sigma_{Rec}$  wird durch die Q-Wert-Achse (entspricht der Strahlrichtung des Projektils) und den auf das Rückstoßion übertragenen Transversalimpuls aufgespannt. Durch Vergleich der Daten im Projektil- und Rückstoßionenstreusystem lässt sich feststellen, welche Teilchen miteinander wechselwirkten und wer mehr oder minder nur Zuschauer der Reaktion war. Im Falle sequenzieller Prozesse ist es dann möglich den zeitlichen Ablauf der Reaktion zu beobachten.

In Abbildung 5.21 ist der Impuls des Elektrons zum Vergleich sowohl im Projektil- und im Rückstoßionenstreusystem - aufgespannt durch die initiale Projektilflugrichtung (z) und den auf das Projektil bzw. Rückstoßion übertragenen Transversalimpuls  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$  bzw.  $p_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}$  - dargestellt.



**Abbildung 5.21:** Elektronenimpulsverteilung der Transferionisation im H<sup>+</sup>-He-Stoß bei 630 keV/u Projektilenergie unter der Bedingung kleiner Projektilstreuwinkel ( $0 < \theta_P < 0, 25$  mrad). a) Mit Blick auf die Projektilstreuebene  $\Sigma_P$ . b) Blick auf die Rückstoßionenstreuebene  $\Sigma_{Rec}$ . In beiden Fällen wird das die Streuebene definierende Teilchen nach rechts gestreut, skizziert durch den grünen (Projektil) bzw. roten (Rückstoßion) Pfeil.

## 5.7 Wirkungsquerschnitte

#### 5.7.1 Totale Wirkungsquerschnitte

Eine Berechnung der totalen Wirkungsquerschnitte setzt eine Normierung auf bekannte Werte voraus. Weder Strahlstrom, Jetdichte noch die absolute Effizienz des Experiments, bestimmt aus dem Produkt der Effizienz der Detektoren, der Transmission der Gitter und der Totzeit der Datenaufnahme, sind hierfür hinreichend genau bekannt. Die Normierung auf eine bekannte Reaktion - z. B. den Einfachelektroneneinfang - eliminiert die meisten dieser Schwierigkeiten, da Targetdichte, Strahlstrom und Experimenteffizienz in beiden Fällen gleich sind. Allerdings müsste auf eine Reaktion normiert werden, die die gleiche Anzahl freier Teilchen hat und nicht nur zwei wie beim Elektroneneinfang.

Vergleicht man das experimentell bestimmte Verhältnis des absoluten Wirkungsquerschnitts des Elektroneneinfangs und der Transferionisation (SC/TI) mit dem anhand von Literaturwerten ermittelten Verhältnis, bestimmt der Quotient der beiden Verhältnisse die Effizienz des direkten Elektronennachweises  $\tau$ :

$$\tau = \frac{\sigma_{Experiment} \left(\frac{TI}{SC}\right)}{\sigma_{Literatur} \left(\frac{TI}{SC}\right)}$$
(5.24)

Diese neu definierte Größe enthält neben der Detektoreffizienz noch die Transmission zweier Gitter sowie die geringfügig größere Effizienz aufgrund der höheren kinetischen Energie der He<sup>2+</sup>-Ionen. Aufgrund bekannter absolut normierter Wirkungsquerschnitte der Transferionisation und des Einfachelektroneneinfangs [VMer96, MSha89, RDuB87] zeigt sich, dass die einzelnen für  $\tau$  ermittelten Werte stark voneinander abweichen (siehe Abbildung 5.22).



Abbildung 5.22: Experimentelle Effizienz  $\tau$  des Elektronennachweises für verschiedene Stoßsysteme (H<sup>+</sup>/He und He<sup>2+</sup>/He) in Abhängigkeit von der Ereignisrate auf dem Elektronendetektor.

Ursache hierfür ist die mit steigender Projektilgeschwindigkeit in Kauf genommene höhere Rate speziell des Elektronendetektors. Die größere Ereignisrate auf dem Elektronendetektor erhöht die Totzeit des Experiments und reduziert gleichzeitig die Gesamteffizienz bis zu einem Faktor von 4. Eine absolute Normierung der Daten kann aus diesem Grunde nicht vorgenommen werden! Anhand des Stoßsystems mit dem höchsten Wirkungsgrad lässt sich abschätzen, dass der direkte Elektronennachweis eine Effizienz von 54 % besitzt. Enthalten ist darin neben der Detektoreffizienz zusätzlich die Transmission der beiden Gitter.

Auf eine absolute Normierung der Daten wird für die Projektilionen H<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> verzichtet und statt dessen auf die Literaturwerte verwiesen! Für He<sup>+</sup>-Projektile konnten in der Literatur weder absolute Wirkungsquerschnitte noch Verhältnisse zu anderen bekannten Reaktionen (Einfachionisation oder Einfachelektronentransfer) gefunden werden. Die später dargestellten absoluten Wirkungsquerschnitte der Transferionisation für He<sup>+</sup>-Projektile wurden durchweg auf 2,5 Prozent des totalen SC-Wirkungsquerschnitts normiert!

### 5.7.2 Differenzielle Wirkungsquerschnitte

Drei freie Teilchen mit je drei Impulskomponenten kennzeichnen den Endzustand der freien Teilchen nach einer Transferionisationsreaktion; insgesamt 6 Impulskomponenten sind es im Falle eines  $n_C$ -fachen Elektroneneinfangs. Hinzu kommen noch ein bzw. zwei Freiheitsgrade aus der Anregung von gebundenen Elektronen im Ejektil. Aus der Energiebilanz des Stoßes können die Anregungszustände genau berechnet werden, sodass 5 linear unabhängige (Mess-)Größen verbleiben. Berücksichtigt man noch die Rotationssymmetrie um die Strahlachse, liegen alle Ereignisse auf einer vierdimensionalen Hyperfläche im Phasenraum. Dabei sind die verschiedenen Darstellungen äquivalent und können jederzeit ineinander überführt werden. Die Beschreibung durch den Emissionswinkel des Elektrons, seiner kinetischen Energie und den Projektilstreuwinkel gemessen im Laborsystem  $d^4\sigma/(d\theta_{z,e}, d\phi_{z,e}, dE_{kin,e}, d\theta_P)$  ist nur ein Beispiel dieses vierfach-differenziellen Wirkungsquerschnitts.

Die häufigste Darstellung, die zu finden sein wird, ist die Verteilung der Elektronenimpulse in der Projektilstreuebene, gegeben durch  $d^2\sigma/\left(dp_{x,e}^{\Sigma_P}, dp_{z,e}^{\Sigma_P}\right)$  bzw. eingeschränkt auf bestimmte Projektilstreuwinkel  $d^3\sigma/\left(dp_{x,e}^{\Sigma_P}, dp_{z,e}^{\Sigma_P}, d\theta_P\right)$ .

Für den Fall einer Elektronentransferreaktion reduziert sich die Zahl der Freiheitsgrade um die des gebundenen Elektrons. Berücksichtigt man wiederum auch die Rotationssymmetrie, so bleiben 2 Freiheitsgrade, der Streuwinkel und die Energiebilanz der Reaktion übrig. Der Stoß kann maximal durch einen zweifach differenziellen Wirkungsquerschnitt, zum Beispiel  $d^2\sigma/(d\theta_P, dQ)$  oder  $d^2\sigma/(dp_{xy,Rec}, dp_{z,Rec})$  beschrieben werden.

# 5.8 Elektronenimpulsrekonstruktion aus Projektil und Rückstoßion

Ein Teil der Motivation dieser Arbeit waren die Ergebnisse von V. Mergel [VMer96, VMer97, HSch03a, HSch03b] zur Transferionisation und die daraus abgeleiteten Ideen und Schlussfolgerungen. Aufgrund des damaligen Standes der COLTRIMS-Technik war es nicht möglich Elektronen mit hohen Impulsen direkt zu detektieren. Der damalige Ausweg bestand darin, von den 9 Freiheitsgraden (jeweils 3 des Rückstoßions, Projektils und Elektrons) nur fünf, nämlich die 3 Impulskomponenten des Rückstoßions und 2 Impulskomponenten des Ejektils - in Form des Streuwinkels - zu messen. Die Erhaltungssätze des Impulses und der Energie wurden verwendet, um die vier fehlenden Komponenten (alle 3 des Elektrons und des Projektillongitudinalimpulses) zu berechnen.

Die deutlich bessere Auflösung der Rückstoßionen- und Elektronenimpulse der aktuellen Messung in Verbindung mit der Untergrundbereinigung der Spektren durch Verwendung der Energieerhaltung wirft die Frage auf, ob durch die damals verwendete Berechnung und schlechtere Auflösung (im Wesentlichen der des Projektils) ein systematischer Fehler in den Daten entstand. Daher wird im folgenden Abschnitt ein kurzer Abriss über die Impulsberechnung des Elektrons gegeben; Details sind wiederum in [VMer96] zu finden.

#### 5.8.1 Elektronentransversalimpuls

Basierend auf der Impulserhaltung lassen sich die Transversalimpulse des Elektrons sehr leicht berechnen. Analog zur Berechnung der Projektilimpulse dieser Arbeit, nach Gleichung 5.14, müssen Projektil und Rückstoßion die Transversalimpulskomponenten des Kontinuumselektrons kompensieren:

$$p_{x,e} = -p_{x,Rec} - p_{x,P}$$

$$p_{y,e} = -p_{y,Rec} - p_{y,P}$$
(5.25)

Während die Impulsmessung des Rückstoßions damals von vergleichbarer Qualität wie in dieser Arbeit war, so stellte das Projektil den Hauptfehler mit einer Auflösung von 125 - 275  $\mu$ rad dar. Bei einer Energie von 630 keV für H<sup>+</sup>-Projektile entspricht dies einer Impulsunschärfe von 1,1 bis 2,5 a. u.!

#### 5.8.2 Elektronenlongitudinalimpuls

In longitudinaler Richtung gestaltet sich die Berechnung des Elektronenimpulses sehr viel schwieriger. Ausgehend von Gleichung 3.44 gilt für den Elektronenlongitudinalimpuls:

$$p_{z,e} = v_P \pm \sqrt{2v_P \cdot \left(p_{z,Rec} + \frac{Q}{v_P} + v_P\right) - \left(p_{x_e}^2 + p_{y_e}^2\right)}$$
(5.26)

Die Uneindeutigkeit aufgrund des positiven bzw. negativen Vorzeichens der Wurzel kann nicht aufgelöst werden. Jedoch lässt sich aus CDW-Born-IEM-Rechnungen folgern, dass im Falle hoher Projektilgeschwindigkeiten lediglich 2 Prozent aller Elektronenlongitudinalimpulse größer als  $v_P$  sind, für welche das positive Vorzeichen gilt [VMer96]. Für alle  $p_{z,e}^f \leq v_P$  gilt das negative Vorzeichen. Energetisch ist der Abstand zwischen Grund- und angeregtem Zustand im  $H^0$ -Ejektil mit 0,5 a. u. sehr gering, sodass aus dem gemessenen Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}^f$  der Q-Wert nicht eindeutig bestimmt werden kann. Obwohl der Hauptanteil der Ejektile im Grundzustand vorliegt (etwa 80 Prozent), so muss ein Fehler von 0,5 a. u. für Q angenommen werden. Der Fehler für den so ermittelten Elektronenlongitudinalimpuls berechnet sich wie folgt:

$$\Delta p_{z,e} = \frac{1}{v_P - p_{z,e}} \cdot \sqrt{(\Delta Q)^2 + (v_P \Delta p_{z,Rec})^2 + (p_{x,e} \Delta p_{x,e})^2 + (p_{y,e} \Delta p_{y,e})^2}$$
(5.27)

Der wahrscheinlich interessanteste und gleichzeitig aussagekräftigste Vergleich zwischen den Messergebnissen dieser Arbeit und den Daten von V. Mergel sind H<sup>+</sup>-Projektile mit  $U_B$ =630 keV. Mit den angenommenen Werten

	kleine $p_e$	mittlere $p_e$
$\Delta Q$	0,5 a. u.	0,5 a. u.
$\Delta p_{z,Rec}$	0,45 a. u.	0,45 a. u.
$p_{z,e}$	0,5 a. u.	3,0 a. u.
$p_{x,e} = p_{y,e}$	0,5 a. u.	3,0 a. u.
$\Delta p_{x,e} = \Delta p_{y,e}$	1,1 a. u.	2,0 a. u.

ergibt  $\Delta p_{z,e}^{f}$  im optimistischen Fall und bei kleinen Impulsen ein Fehler von 0,53 a. u. (mittlere Spalte) bzw. 3,2 a. u. (rechte Spalte) bei größeren Impulsen. Der Fehler für  $\Delta p_{z,Rec}$  wurde aus der Breite der SC-Linie sowie dem typischen elektrischen Feld von 6,3 V/cm sowie der Flugzeit berechnet.

#### 5.8.3 Berechnung und Ergebnisse

Die aus der Messung ermittelten Impulse für Rückstoßionen und Elektronen stellen den Ausgangspunkt der folgenden Kalkulationen dar. Die berechneten Projektilimpulse bzw. -streuwinkel werden mit einer angenommenen Impulsauflösung von 1,5 a. u. gefaltet. Der Impuls des Rückstoßions in Strahlrichtung ( $p_{z,Rec}$ ) wird mit Mergels Auflösung von 0,45 a. u. gefaltet. Mit den so verschlechterten Projektilimpulsen werden nach Gleichung 5.25 und 5.26 die Transversalimpulse des Elektrons neu berechnet. In Abbildung 5.23 sind die Daten **a**) von V. Mergel, **b**) die dieser Arbeit zu Grunde liegenden Daten vor der Berechnung sowie **c**) die Resultate danach dargestellt.

Während das Maximum der Verteilung der Daten von V. Mergel bei  $p_{z,e}=0,5$  a. u. und  $p_{x,e}^{\Sigma_P}=-0,7$  a. u. liegt (siehe Abbildung 5.23 a), so befinden



**Abbildung 5.23:** Elektronenimpulsverteilung in der Projektilstreuebene  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$  vs.  $p_{z,e}$  der Transferionisation des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 630 keV/u für kleine Projektilstreuwinkel ( $0 < \theta_P < 0, 25$  mrad). a) Original-Daten von Mergel [VMer96], b) experimentelle Daten dieser Arbeit und c) Daten dieser Arbeit gefaltet mit Mergels Projektilund Rückstoßionenauflösung und den daraus berechneten (nach Abschnitts 5.8) Elektronenimpulsen.

sich die im Rahmen dieser Arbeit ermittelten Daten symmetrisch um die z-Achse, verteilt bei  $p_{z,e}=0,4$  a. u. und  $p_{x,e}^{\Sigma_P}=0,0$  a. u. (siehe Abbildung 5.23 b)! Die Rekonstruktion der Elektronenimpulse mittels der "gemessenen" Projektilimpulse nach Gleichung 5.25 und 5.26 ergibt eine Verschiebung der Verteilung in Richtung größerer negativer x-Impulse. In z-Richtung bleibt das Maximum an etwa gleicher Position ( $p_{z,e}=0,4$  a. u.), wenn auch breiter verteilt als zuvor.

Die x-Komponente beträgt nach dieser Prozedur jedoch  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$ =-0,45 a. u., wurde also deutlich nach links verschoben (siehe Abbildung 5.23 c). Durch die Definition der Projektilstreuebene lässt sich diese Tatsache auch anschaulich recht gut verstehen. Das Projektil wird definitionsgemäß immer nach rechts und das Elektron in Folge dessen nach links gestreut. Aus einer schlechten Projektilstreuwinkelauflösung resultiert eine schlechte Impulsauflösung der Elektronen, die wiederum zu einer Verschiebung der Elektronen im Projektilstreusystem führt. Im Laborsystem ist diese Verschiebung nicht erkennbar, da die Rotationssymmetrie diese Strukturen verwäscht. Weitere Vergleiche, insbesondere in Bezug auf den longitudinalen Rückstoßionenimpuls  $p_{z,Rec}$  erfolgen im nächsten Kapitel durch direkten Vergleich mit den im Rahmen dieser Arbeit gewonnen Ergebnissen.
"Irrtümer haben ihren Wert nur hier und da. Nicht jeder, der nach Indien fährt, entdeckt Amerika."

(Erich Kästner)

# 6. Ergebnisse und Diskussion

In den vorangegangenen Kapiteln wurden die Messungen durch eine Vielzahl von Gründen motiviert und die theoretischen Grundlagen gelegt. An detaillierten Beispielen wurde die vorgenommene Kalibrierung sowie die Untergrundunterdrückung der Messdaten erläutert. Die systematisch durchgeführten Messungen decken den Phasenraum nahezu vollständig ab. Etwaige Lücken bzw. die maximale Impulsakzeptanz werden - so sie für die diskutierten Verteilungen relevant sind - an entsprechender Stelle bzw. im Anhang C genannt. Insgesamt liegen Ergebnisse des Ein- und Zweifachelektroneneinfangs ins Projektil (SC und DC) sowie der Transferionisation (TI) für verschiedene Projektilionen und -geschwindigkeiten vor:

$E_P$ [keV/u]	$\mathrm{H}^+$	$\mathrm{He^{+}}$	$\mathrm{He}^{2+}$
40			SC, DC, TI
60	SC, TI	SC, TI	SC, DC, TI
100	SC, TI		
150	SC, TI	SC, TI	SC, DC, TI
200			DC
300	SC, TI	SC, TI	SC, DC, TI
450			SC, TI
630	SC, TI	SC, TI	SC, TI

Als Projektile kamen jeweils beide möglichen Isotope <sup>3</sup>He und <sup>4</sup>He bzw. <sup>1</sup>H bzw. <sup>2</sup>D zum Einsatz, vor allem um Uneindeutigkeiten im m/q-Verhältnis zu vermeiden, aber auch um den zugänglichen Energiebereich des Van-de-Graaff-Beschleunigers optimal auszunutzen. Eine genaue Zusammenstellung dieser und weiterer Parameter ist im Anhang C zu finden. Als Target fand ausschließlich <sup>4</sup>He Verwendung.

Entsprechend der möglichen angeregten Endzustände von Projektil und Target unterscheidet sich auch die Gesamtenergiebilanz Q. Ausschließlich durch Messung des Rückstoßionenlongitudinalimpulses  $p_{z,Rec}$  sowie der Energie des emittierten Elektrons im Falle der Transferionisation ist eine Zuordnung des elektronischen Endzustandes möglich. Daher werden die einzelnen Reaktionen im Folgenden auch in ihrer Bezeichnung weiter unterschieden. Ist dies experimentell nicht möglich, wird nur das Kürzel der Reaktion (SC, DC, TI) verwendet. Eine Übersicht der Bezeichnungen und Q-Werte ist in Tabelle 6.1 zu finden. Der Index *P* bzw. *T* kennzeichnet jeweils das Projektil bzw. Target. Befinden sich alle Fragmente im Grundzustand, wird der Reaktion eine 1 nachgestellt, eine 2 für den energetisch niedrigsten Anregungszustand usw. Der energetisch geringer werdende Abstand zwischen den höher angeregten Zuständen hat zur Folge, dass quasi nur zwischen angeregt (\*) oder nicht angeregt  $(P-T, P^*-T, P-T^* \text{ und } P^*-T^*)$  unterschieden werden kann. Eine Unterscheidung der verschiedenen Drehimpulszustände innerhalb einer Schale ist nicht möglich; ebenso kann keine Aussage darüber gemacht werden, ob Projektil oder Target im Falle von SC2 und SC3 des Stoßsystems He<sup>2+</sup>-He angeregt wurde.

Zunächst werden die absoluten Wirkungsquerschnitte, auf welche im Weiteren normiert wurde, vorgestellt, gefolgt von einfach-differenziellen Daten, der Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel  $\theta_P$  und des Rückstoßionenlongitudinalimpulses  $p_{z,Rec}$ . Schwerpunkt der Diskussion werden die Sattelpunktionisation, der Binary Encounter sowie korrelierte Übergänge der Transferionisation sein, in erster Linie in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$ . Der Vergleich zwischen den unterschiedlichen Projektilen wird nur gezogen, sofern signifikante Änderungen in der Struktur der Daten auftreten. Eine komplette Zusammenstellung der einfach- und multi-differenziellen Daten ist im Anhang D zu finden.

## 6.1 Totale Wirkungsquerschnitte

Zu ungenaue Kenntnisse über Strahlintensität, Targetdichte, Detektor- und Nachweiseffizienzen sowie Totzeiten der Elektronik und Datenaufnahme machen eine Messung von absolut normierten Wirkungsquerschnitten unmöglich. Die gemessenen Daten wurden daher auf Literaturwerte [MSha85, MSha89, CBar90, VMer96] normiert. Wirkungsquerschnitte zur Transferionisation in Stößen mit He<sup>+</sup>-Projektilen wurden nicht gefunden. Ihre Daten

Projektil	Kürzel	Endzustand	Q-Wert
$H^+$	SC1	$_{P}H^{0}(1s) + _{T}He^{+}(1s)$	-0,4 a. u.
$H^+$	SC2	$_{P}H^{0}(nl) + _{T}He^{+}(1s)$	-0,78 a. u.
$H^+$	SC3	$_{P}H^{0}(1s) + _{T}He^{+}(nl)$	-1,9 a. u.
$H^+$	SC4	$_PH^0(nl) + _THe^+(nl)$	-2,28 a. u.
$H^+$	TI	$_{P}H^{0}(nl) + _{T}He^{2+} + e^{-}$	-0,9 a. u.
$He^+$	SC1	$_{P}He^{0}(1s) + _{T}He^{+}(1s)$	0,0 a. u.
$He^+$	SC2	$_PHe^0(1s) + _THe^+(nl)$	-0,72 a. u.
$He^+$	SC3	$_PHe^0(nl) + _THe^+(1s)$	-1,5 a. u.
$He^+$	SC4	$_PHe^0(nl) + _THe^+(nl)$	-2,22 a. u.
$He^+$	TI1	$_{P}He^{0}(1s) + _{T}He^{2+} + e^{-}$	-2,0 a. u.
$He^+$	TI2	$_{P}He^{0}(nl) + _{T}He^{2+} + e^{-}$	-2,7 a. u.
$He^{2+}$	SC1	$_PHe^+(1s) + _THe^+(1s)$	1,1 a. u.
$He^{2+}$	SC2	$_{P}He^{+}(2l) + _{T}He^{+}(1s)$ bzw. $_{P}He^{+}(1s) + _{T}He^{+}(2l)$	-0,4 a. u.
$He^{2+}$	SC3	$_{P}He^{+}(nl) + _{T}He^{+}(1s)$ bzw. $_{P}He^{+}(1s) + _{T}He^{+}(nl) n > 3$	-0,68 a. u.
$He^{2+}$	SC4	$PHe^{+}(nl) + THe^{+}(nl) n \ge 2$	-1,9 a. u.
$He^{2+}$	DC1	$_{P}He^{0}(1s^{2}) + _{T}He^{2+}$	0,0 a. u.
$He^{2+}$	DC2	$_{P}He^{0}(1s\ nl) + _{T}He^{2+}$	-0,73 a. u.
$He^{2+}$	TI1	$_{P}He^{+}(1s) + _{T}He^{2+} + e^{-}$	-0,9 a. u.
$He^{2+}$	TI2	$_{P}He^{+}(nl) + _{T}He^{2+} + e^{-}$	-2,4 a. u.

**Tabelle 6.1:** Verwendete Nomenklatur zur Differenzierung der verschiedenen Reaktionskanäle. Die Indizes P und T kennzeichnen jeweils das Projektil bzw. Target. Befinden sich alle Fragmente im Grundzustand wird eine 1 verwendet. Wird kein Zusatz zum Reaktionskanal gemacht, so wird über alle möglichen angeregten Endzustände integriert.

wurden auf 2,5 % des absoluten SC-Wirkungsquerschnitts normiert. In Abbildung 6.1 ist der Verlauf des absoluten Wirkungsquerschnitts in Abhängigkeit von der Projektilenergie dargestellt. Weitere Quellen mit von den hier verwendeten leicht abweichenden totalen Querschnitten sind beispielsweise [TWin74, DBel77, RRiv79, RDuB87, HSli91a, KTok96].

Die Quotienten der totalen Wirkungsquerschnitte aus Transferionisation und Einfachelektroneneinfang in Abhängigkeit von der Projektilenergie sind in Abbildung 6.2 dargestellt; sie entsprechen den der Literatur entnommenen Werten. Die dazugehörigen experimentellen Verhältnisse dieser Arbeit weichen, nach den Erläuterungen aus Kapitel 5.7.1, aufgrund der nichtkonstanten Elektronennachweiseffizienz stark von den Literaturwerten ab. Für He<sup>2+</sup>-Projektile wird das Verhältnis  $\sigma_{TI}/\sigma_{SC}$  mit einem Wert von 26 % bei etwa 150 keV/u maximal und strebt für höhere Projektilenergien einem konstanten Wert bei 10 % entgegen. Messungen mit H<sup>+</sup>-Projektilen bis 1,4 MeV von Mergel ergaben, dass sich das Verhältnis ab 500 keV gemäß der Funktion 2,55 + 0,51( $v_P$  - 4,22) [%] entwickelt [VMer96]. Im Gegensatz dazu fanden



**Abbildung 6.1:** Absolut normierte Wirkungsquerschnitte der a) Elektronentransferreaktionen (SC und DC) sowie der b) Transferionisation (TI) integriert über alle Anregungszustände für H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$  [MSha85, MSha89, CBar90, VMer96].

Schmidt et al. in ihren Messungen (ab 1,4 MeV) ein rund 25 Prozent niedrigeres Verhältnis, welches erst ab 6 MeV wieder ansteigt [HSch05a]. Dieses Verhältnis für Proton-Helium-Stöße entspricht in etwa den Rechnungen für einen Shake-off-Prozess [TShi02].

Gemäß der Nomenklatur aus Tabelle 6.1 werden die einzelnen Reaktionen verschiedenen elektronischen Endzuständen zugeordnet. Bei den Elektronentransferreaktionen ist dazu ausschließlich die Messung des Rückstoßionenlongitudinalimpulses erforderlich, während bei der Transferionisation zusätzlich die Kenntnis der Elektronenenergie erforderlich ist. In Abbildung 6.3 sind die Ergebnisse, so eine Differenzierung möglich war, für alle drei Projektile in Abhängigkeit von der Projektilenergie dargestellt. Die Summe der einzelnen Reaktionen ergibt 100 Prozent.

Allen drei Projektilen ist gemeinsam, dass mit steigender Projektilenergie der Einfang in den Grundzustand ohne Targetanregung (SC1 und DC1) stetig zunimmt. Bei der niedrigsten Energie, 40 keV/u, beträgt der nichtresonante SC1 für He<sup>2+</sup> lediglich 25 Prozent. Dieses Resultat steht in guter Übereinstimmung mit den Messungen von Schmidt [LSch00] und hat die Ursache darin, dass im He<sup>2+</sup>-Quasimolekül die Energielücke zwischen Grundzustand und allen anderen molekularen Orbitalen sehr groß ist (siehe Potenzialkurven in Abbildung 4.3). Der resonante Anteil des Zweielektronentransfers (DC1) bei 60 keV/u beträgt 78 %. Die verbleibenden 22 Prozent, die sämtliche angeregten nicht autoionisierenden Projektilzustände umfassen, stehen in grober Übereinstimmung mit den Experimenten von Dörner et al. [RDoe98b], die einen Wert von 16±3 Prozent bei 62,5 keV/u fanden. Diese Diskrepanz ist auf eine erheblich bessere Separation der Zustände in dieser Arbeit zurückzuführen. CTMC-basierte Rechnungen von Tökési ergeben einen Anteil der angeregten Zustände von 12 bis 17 % für Energien zwischen 25 und 125 keV/u [KTok96]. Der relativ große Anteil angeregter Zustände bei  $E_P$ =60 keV/u steht in Verbindung mit einer starken dynamischen Kopplung der molekularen Zustände. Bei Projektilenergien um 10 keV/u sinkt der DC2-Anteil wieder auf 5 Prozent, sodass nur der resonante Übergang verbleibt.



**Abbildung 6.2:** Verhältnisse der absoluten Wirkungsquerschnitte aus Transferionisation (TI) und Einfachelektroneneinfang (SC) für H<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektile in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$  [MSha85, MSha89, VMer96].

Eine semiklassische Stoßparameter-Rechnung (von Slim et al.) des Verhältnisses SC1/SC2 im Proton-Helium-Stoß ergab bei 60 bzw. 100 keV/u einen Anteil von 15 bzw. 20 Prozent für eine Projektilanregung [HSli91a], ebenfalls in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen dieser Arbeit. Im He<sup>+</sup>-He-Stoß erfolgt der Elektroneneinfang (SC) nur in 65 Prozent aller Fälle in den Grundzustand und dies weitestgehend unabhängig von der Projektilenergie. Für einen resonanten Übergang (Q=0) wie den SC1 ist dieser niedrige Anteil recht verwunderlich, auch verglichen mit dem resonanten DC für He<sup>2+</sup>-Projektile. Eine Erklärung für die in allen Stoßsystemen beobachtete stete Zunahme des Einfangs in den Grundzustand (SC1 bzw. DC1) mit steigender Projektilgeschwindigkeit kann in einem halbklassischen Bild folgendermaßen aussehen:

Der Elektroneneinfang mit gleichzeitiger Targetanregung ist entweder über einen Prozess zweiter Ordnung in der Projektil-Target-Wechselwirkung oder über einen Shake-up-Prozess möglich. Aufgrund der abnehmenden Wechselwirkungszeit fällt der Querschnitt in Bornscher Näherung mit  $1/(E \cdot lnE)$  für jede Wechselwirkung. Im Gegensatz dazu ist für den Einfang mit gleichzeitiger Projektilanregung bzw. - um genauer zu sein - für den Einfang in einen angeregten Projektilzustand lediglich eine Projektil-Target-Wechselwirkung erforderlich. Je größer die Hauptquantenzahl n ist, desto niedriger ist in diesem Zustand die klassische Elektronenorbitalgeschwindigkeit ( $v_{B,e} \propto 1/n$ ). Ab einer Projektilenergie über 100 keV/u ist die klassische Orbitalgeschwindigkeit bereits niedriger als die Geschwindigkeit des Projektils. Da der Einfang des Elektrons am wahrscheinlichsten erfolgt, wenn der Übergang keine Geschwindigkeitsänderung des Elektrons erfordert (velocity matching), wird bei hohen Stoßgeschwindigkeiten der Grundzustand am wahrscheinlichsten besetzt. Wiederum in Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Schmidt wurde gefunden, dass der TI2-Anteil bei 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He knapp 10 Prozent beträgt [LSch00]. Grund hierfür ist die große Energielücke zwischen TI1 und TI2 von 41 eV, welche zusätzlich zur erforderlichen Ionisationsenergie aufgebracht werden muss. Damit in Einklang steht eine Zunahme der TI2 am Gesamtwirkungsquerschnitt mit steigender Projektilgeschwindigkeit, die zusätzlich Energie in das Gesamtsystem einbringt.



**Abbildung 6.3:** Experimentell ermittelte Anteile von Grundzustand und angeregten Zuständen in Abhängigkeit vom Projektil und dessen Energie. Die einzelnen elektronischen Zustände entsprechen den Abkürzungen aus Tabelle 6.1. Dargestellt sind nur solche, die eindeutig zugeordnet werden konnten.

## 6.2 Streuwinkel-differenzielle Daten ( $d\sigma/d\theta_P$ )

Der transversale Impulsübertrag  $p_{\perp,P}$  bzw. Streuwinkel des Projektils  $\theta_P$ stellt eine relativ einfach zu messende Größe dar und gibt einen ersten Hinweis auf den abgelaufenen Prozess. Unabhängig von der Projektilmasse wurden die Streuwinkel auf 1 amu (Protonen) normiert  $\theta'_P$  (in Einheiten von [mrad·amu]), sodass der etwaige Thomas-Peak immer bei 0,54 mrad·amu liegt. Daneben geht in die Berechnung des Streuwinkels noch die Projektilgeschwindigkeit ein, weshalb mit steigender Energie - bei gleichem Rückstoßionenakzeptanzbereich - die Streuwinkelakzeptanz sinkt. Dargestellt sind nur Daten bis zum vollständigen Akzeptanzbereich, was umgerechnet einem Rückstoßionentransversalimpuls von 15 a. u. entspricht. Es wurden nur solche Ereignisse berücksichtigt, welche in der unteren Hälfte des Rückstoßionendetektors lagen ( $p_{y,Rec} \leq 0$  a. u.). Differenziert nach den verschiedenen elektronischen Endzuständen sind die Spektren im Anhang D zu finden.

In die Messgröße des Projektilstreuwinkels geht im Falle der Kern-Kern-Streuung die Information zum einen über den Stoßparameter und zum anderen über die Form des Potenzials ein. Kleine Streuwinkel beruhen hauptsächlich auf einer Streuung am Elektron, die aber aufgrund der geringen Masse  $1/m_P=0,54$  mrad·amu für ein ruhendes Elektron nicht übersteigen kann. Eine Aussage über den Stoßparameter kann nur bei bekanntem Potenzialverlauf und für große Projektilstreuwinkel gemacht werden, da gegenüber der Wechselwirkung mit dem Elektron diskriminiert werden muss. Allein aus dem Projektilstreuwinkel lassen sich somit auch Rückschlüsse über die dominanten Beiträge zur jeweiligen Reaktion ziehen.

### 6.2.1 Elektronentransfers (SC und DC)

Während für die Daten zur Transferionisation eine Untergrundunterdrückung durch die Forderung nach Energieerhaltung erreicht werden kann, ist für die Elektronentransferreaktionen nur die Ausnutzung der Impulserhaltung möglich. In Abbildung 5.12 wurde die Streuung des Projektils und die des Rückstoßions in y-Richtung (Jetrichtung) dargestellt. Die diagonale Linie repräsentierte echte Ereignisse eines SC. Senkrecht um  $p_{y,Rec}=0$  ist der Flugzeituntergrund aus Ionisationsreaktionen mit dem Target verteilt. Die waagerechte Linie  $p_{y,P}=0$ , welche nur in y-Richtung auftritt, entstammt SC-Reaktionen mit dem Restgas. Da es sich um warmes He-Restgas handelt, sind die Impulse 4,5 a. u. breit (entsprechend der Raumtemperatur) und um den Jetoffset von 5,9 a. u. nach unten versetzt. In Abbildung 5.1 c ist dies auch als diffuse Verteilung unterhalb des Schwerpunktes der Capture-Linien zu erkennen. In der Streuwinkelverteilung akkumuliert sich der Untergrund durch einen Peak um 4,5 a. u. (mit einer Breite von 6 a. u.) bzw. dem entsprechenden Streuwinkel, für 630 keV/u sind dies 0,5±0,6 mrad amu. Durch den starken Abfall der Verteilung überhöht der Untergrund erst bei großen Streuwinkeln die Verteilung merklich.

Den Untergrund mittels Impulserhaltung durch das gemessene Projektil zu unterdrücken funktionierte aufgrund der geringen Projektilmasse nur bei den Messungen mit H<sup>+</sup>; die <sup>3</sup>He<sup>+,2+</sup>-Projektile werden bei gleicher Projektilgeschwindigkeit und gleichem Impulsübertrag nur  $1/m_P=1/3$  so weit auf dem Projektildetektor ausgelenkt<sup>1</sup>. Zum anderen wird die Auflösung der Impulserhaltung für große Impulse zu schlecht, wodurch echte Ereignisse weggeschnitten würden. Aus diesen Gründen erfolgt ein Abzug des statistischen in der Flugzeit  $p_x$  verteilten Untergrundes sowie des wohl lokalisierten Untergrundes in y-Richtung.

In Abbildung 6.4 ist der einfach-differenzielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\theta'_P$ für den Ein- und Zweifachelektroneneinfang der untersuchten Stoßsysteme und -geschwindigkeiten dargestellt. Zwischen 0,1 und 0,2 mrad amu besitzt der SC-Wirkungsquerschnitt ein Maximum, unabhängig vom Projektil aber mit leichter Tendenz zu kleineren Winkeln bei hohen Geschwindigkeiten. Ab 0,4 mrad amu ändert sich die Steigung der Verteilung, wird wesentlich flacher und behält diesen Verlauf bei. Da 0,54 mrad amu der maximal mögliche Streuwinkel durch eine Wechselwirkung mit einem ruhenden Elektron ist, können größere Streuwinkel nur durch hohe Anfangsimpulse des Elektrons oder aber durch eine Kern-Kern-Streuung erreicht werden. Das Hauptmaximum um 0,15 mrad amu resultiert danach von einer Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron.

Sehr ähnlich verhält es sich auch beim Zweifachelektroneneinfang (DC). Dessen Maximum verschiebt sich von 0,35 mrad amu bei 40 keV/u hin zu 0,2 mrad amu bei 300 keV/u und knickt erst ab 0,65 mrad amu ab. Da im Gegensatz zum SC zwei Elektronen übertragen werden müssen, ist für den mittleren Transversalimpulsübertrag durch den Elektroneneinfang ein um  $\sqrt{2}$  größerer Wert zu erwarten. Der flache Verlauf ab 0,45 mrad amu bzw. 0,65 mrad amu entspricht - auch in Übereinstimmung mit der Theorie [DBel78, FKri90] - einer Kern-Kern-Wechselwirkung. Ebenso stimmen die Daten des SC H<sup>+</sup> sowie des DC He<sup>2+</sup> gut mit vergleichbaren Experimenten überein [VMer96, RDoe98b]. Im Bereich niedriger Stoßenergien, 40 und

 $<sup>^1</sup>$ Eine Projektilauslenkung von 0,5 mrad entspricht mit dem verwendeten Aufbau einer Auslenkung von 1,75 mm für H<sup>+</sup>, aber nur 0,58 mm für <sup>3</sup>He. Die Ortsauflösung des Projektildetektors mit 0,35 mm ist nur geringfügig besser.



**Abbildung 6.4:** Streuwinkel-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\theta'_P$  des Ein- und Zweielektronentransfers (SC und DC) für verschiedene Projektile und Geschwindigkeiten, integriert über alle Anregungszustände. Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.

60 keV/u, sind deutlich Oszillationen im Streuwinkel zu erkennen. Sie beruhen auf Interferenzen zwischen den verschiedenen Reaktionswegen innerhalb des Korrelationsdiagramms und wurden ebenfalls schon früher beobachtet [DBel94a, LSch00]. Ebenso ist auch eine Überlagerung zwischen ein- und auslaufendem Kern innerhalb des gleichen molekularen Zustandes möglich. Allerdings müsste man für eine genauere Untersuchung der Oszillationen die verschiedenen elektronischen Endzustände (SC1, SC2...) miteinander vergleichen.

Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten ist überdies zu beobachten, dass der Beitrag der Kern-Kern-Wechselwirkung zum Gesamtwirkungsquerschnitt kontinuierlich abnimmt. Hauptgrund hierfür ist die kürzere Wechselwirkungszeit zwischen Projektil und Target. Das schwache Maximum bei 630 keV/u im H<sup>+</sup>-He-Stoß um 0,8 mrad au wird auf verbliebenen Untergrund aus Reaktionen mit warmem Restgas zurückgeführt, der nicht ausreichend gut abgezogen werden konnte. Die Messung dieses Stoßsystems besitzt den niedrigsten absoluten Wirkungsquerschnitt, wurde bei höchsten Raten gemessen und die Gesamtausbeute an verwendbaren Ereignissen war die geringste, weshalb die statistische Signifikanz für die Untergrundabzü-



**Abbildung 6.5:** Streuwinkel-differenzieller Wirkungsquerschnitt des Einfachelektronentransfers (SC) für H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> bei Projektilenergien von a) 60, b) 150, c) 300 und d) 630 keV/u. Die Daten wurden im Maximum auf 1 normiert und über alle elektronischen Endzustände integriert.

ge schlecht ist. Das einzige Maximum in der Projektilstreuwinkelverteilung bei hohen Stoßgeschwindigkeiten befindet sich bei fast allen Rechnungen (siehe z. B. [PAbu05]) um 0,5 mrad amu, dem Thomas-Peak; ansonsten weist die Kurve zu größeren Winkeln einen stetig fallenden Verlauf auf. Mit nur geringer statistischer Signifikanz ist für H<sup>+</sup>-He bei 630 keV/u im Bereich des Thomas-Peaks ein schwaches Maximum zu erkennen. Besser sichtbar ist dies in Abbildung 6.5d.

Betrachtet man den streuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitt in schnellen Stößen, so erlaubt der Verlauf des Streuwinkels (für  $\theta_P \ge 0,55$  mrad amu) Rückschlüsse auf die Form des Potenzials gewichtet mit der Elektroneneinfangwahrscheinlichkeit der Stoßpartner zu ziehen, da Interferenzterme und der Impulstransfer durch das Elektron vernachlässigt werden können. In Abbildung 6.5 wurden die streuwinkel-differenziellen Daten in ihrem Maximum auf 1 normiert. Die Struktur der Daten bei 300 und 630 keV/u von He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> ist relativ ähnlich. Jedoch ist der Verlauf für He<sup>+</sup> etwas flacher als der bei He<sup>2+</sup>-Projektilen, was mit der steileren Potenzialform des He<sup>+</sup> im Zusammenhang steht. Im Gegensatz dazu weisen für eine Projektilenergie von 150 keV/u H<sup>+</sup> und He<sup>+</sup> eine ähnliche Struktur auf. Daraus lässt sich folgern, dass je nach Projektilgeschwindigkeit sehr unterschiedliche Stoßparameter und Prozesse zum totalen Wirkungsquerschnitt beitragen. Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten und größeren Kernannäherungen spüren die Stoßpartner eher das effektive Kernpotenzial (He<sup>+</sup>  $\approx$  He<sup>2+</sup>). Umgekehrt wirkt bei niedrigen Geschwindigkeiten und großen Kernabständen hauptsächlich das absolute Potenzial ( $_{H^+} = V_{He^+}$ ).



**Abbildung 6.6:** Quotient aus streuwinkel-differenziellem Wirkungsquerschnitt des Einfachelektroneneinfangs aus Abbildung 6.4 ( $d\sigma/d\theta'_P(SC)$ ), dividiert durch den streuwinkeldifferenziellen Wirkungsquerschnitt der Rutherfordstreuung nach Gleichung 6.1 ( $d\sigma/d\theta'_P(Rutherford)$ ) für H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>-Projektile für Projektilenergien von a) 60, b) 150, c) 300 und d) 630 keV/u.

Nach [LSch00] ergibt sich der differenzielle Wirkungsquerschnitt einer Rutherfordstreuung in cm<sup>2</sup> zu:

$$\frac{d\sigma}{dp_{\perp,P}} = 7,0 \cdot 10^{-16} cm^2 \cdot Z_P^2 Z_{Rec}^2 \frac{1}{v_P^2} \frac{1}{p_{\perp,P}^3}$$
(6.1)

mit dem Transversalimpuls des Projektils  $p_{\perp,P}$  und den Kernladungszahlen von Projektil und Target  $Z_P$  und  $Z_{Rec}$ . Der Quotient aus streuwinkeldifferenziellem Wirkungsquerschnitt des Einfachelektroneneinfangs (aus Abbildung 6.4) und der nach Gleichung 6.1 bestimmten Rutherfordstreuung nackter Teilchen<sup>2</sup> ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Entgegen der intuitiven Erwartung eines flachen Verlaufs der Verteilung bei großen Streuwinkeln steigen alle Verteilungen stetig an, wobei sie - werden Interferenzeffekte außer Acht gelassen - nicht über 50 Prozent steigen dürften. In schnellen Stößen, bei denen Interferenzterme keinen nennenswerten Einfluss haben, trifft dies auch zu. Hingegen wird bei langsamen Stößen auch eine Wahrscheinlichkeit von 90 Prozent erreicht. Weshalb für He<sup>2+</sup>-Projektile bei 150 keV/u die Wahrscheinlichkeit stets größer ist als bei 60 keV/u, konnte nicht geklärt werden. Sehr gut ist hier auch für 630 keV/u H<sup>+</sup>/He die Überhöhung bei  $\theta_P$ =0,5 mrad amu zu erkennen, welche höchstwahrscheinlich mit dem Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus in Verbindung steht.

#### 6.2.2 Transferionisation (TI)

Ahnlich des Zweifachelektronentransfers erfordert die Transferionisation (TI) in den meisten möglichen Prozessen zwei Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target. Die in Abbildung 6.7 dargestellte Streuwinkelverteilung der TI unterscheidet sich daher auch in einigen Punkten ganz erheblich von der Streuwinkelverteilung des Elektronentransfers aus Abbildung 6.4. Im Bereich des Maximums ist die Verteilung vor allem erheblich breiter. Ebenso verschiebt sich das Maximum stetig von 0,6 mrad amu bei 60 keV/u zu 0,15 mrad amu bei 630 keV/u und ist unabhängig vom gewählten Projektil. Der Übergang von der Projektil-Elektron- zur Kern-Kern-Streuung für die einfach positiv geladenen Projektilionen findet zwischen 1,0 mrad amu (langsamer Stoß) und 0,7 mrad amu (schneller Stoß) statt, während er für He<sup>2+</sup> relativ konstant um 0,7 mrad amu liegt. Sowohl der flache Verlauf bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten als auch das ausgeprägte Maximum decken sich mit den experimentellen Befunden von Mergel und Schmidt [VMer96, LSch00]. Für einen TS2-Prozess, der zwei Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target voraussetzt, liegt der maximale Streuwinkel bei  $\theta_P = 2 \cdot m_e/m_P = 1,1 \text{ mrad} \cdot \text{amu.}$ 

Vergleicht man wie zuvor schon beim SC das nukleare Streuverhalten, so zeigt sich das gleiche Ergebnis. Beide Heliumprojektilionen (He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>) weisen für die hohen Projektilenergien eine vergleichbare Struktur auf, während sich bei niedrigen Energien die einfach positiv geladenen Projektile (H<sup>+</sup> und He<sup>+</sup>) ähneln. Daraus ist zu schließen, dass nicht die Ionisation, sondern der Elektroneneinfang den Stoßparameter zwischen Projektil und Target bestimmt. Dies deckt sich gut mit den Erläuterungen zum Elektroneneinfang,

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Auch für He<sup>+</sup>-Projektile wurde  $Z_P$ =2 gesetzt.



**Abbildung 6.7:** Streuwinkel-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/d\theta'_P$  der Transferionisation (TI) für verschiedene Projektile (a-c) und Geschwindigkeiten, integriert über alle Anregungszustände. Die Transversalimpulsüberträge wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert. d) Vergleich zwischen der Transferionisation ohne Anregung (TI1) und Zweifachelektronentransfer mit (DC2) und ohne Anregung (DC1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He.

der für schnelle Stöße bei größeren Streuwinkeln als die Ionisation, stattfindet. Experimente zur Targeteinfachionisation (SI) in H<sup>+</sup>-He-Stößen (1 MeV) zeigten, dass die SI hauptsächlich von Streuwinkeln unter 0,1 mrad dominiert wird [TWeb97].

Das mit steigender Projektilenergie zu kleinen Streuwinkeln verschobene Maximum wurde von Mergel folgendermaßen erklärt: Bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten sind für den Elektroneneinfang keine hohen Anfangsimpulskomponenten des Elektrons für einen kinematischen Einfang erforderlich, weshalb dieser auch bei großen Stoßparametern stattfinden kann. Die zusätzliche Ionisation vergrößert den Impulsübertrag der TI gegenüber dem SC. Bei hohen Geschwindigkeiten werden durch den kinematischen Einfang sehr kleine Stoßparameter selektiert, bei denen die Ionisationswahrscheinlichkeit nahezu konstant ist; die zusätzliche Ionisation beeinflusst den Impulsübertrag nicht mehr.

Das gleiche Resultat, die schmäler werdende Verteilung, wird auch durch andere Prozesse, wie den TS1 oder SO, die nur eine Wechselwirkung erfordern, erzielt. Während bei niedrigen Geschwindigkeiten das Projektil mehrfach mit dem Target und den Elektronen wechselwirken kann, wird die Wechselwirkungszeit und somit die Anzahl der Wechselwirkungen mit steigender Projektilgeschwindigkeit geringer. Eine Ionisation durch Shake-off infolge eines Elektroneneinfangs führte zum selben Streuwinkel wie der SC alleine. Dies ist zwar eine notwendige Bedingung für das Auftreten korrelierter Prozesse zur Transferionisation, aber keine hinreichende. Genauere Aufschlüsse hierüber können - wenn überhaupt - erst höher differenzielle Daten liefern.

Die Ionisation im Sattelpunktbild wird durch eine stetige Anhebung des Elektrons über molekulare Rydbergserien ins Kontinuum erklärt. Danach sollten sich die Transferionisation und der Zweifachelektroneneinfang in ihrem streuwinkel-differenziellen Verhalten angleichen, sofern im DC sich eines der Elektronen in einem hochangeregten Endzustand befindet. Das am Rande des Kontinuums befindliche Elektron des Zweifachelektroneneinfangs entspräche in diesem Limit einem auf dem Sattel gestrandeten Kontinuumselektron der Transferionisation. Eine experimentelle Bestätigung hierfür ist schwierig. Jedoch ist in Abbildung 6.7 d ein deutlicher Unterschied zwischen DC1 und DC2 zu erkennen sowie signifikante Gemeinsamkeiten zwischen der Transferionisation und dem DC in angeregte Zustände (DC2). Sichtbar ist der Unterschied bzw. die Gemeinsamkeit nur bei kleinen Streuwinkeln, in denen die elektronische Struktur den Wirkungsquerschnitt dominiert.

# 6.2.3 Quotienten aus Transferionisation und Elektroneneinfang ( $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ )

Der Darstellung von Horsdal [EHor86] folgend ist in Abbildung 6.8 (a-c) das Verhältnis  $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ , die Wahrscheinlichkeit einer Targetionisation unter Bedingung eines Elektroneneinfangs, als Funktion des Projektilstreuwinkels dargestellt. Wie von Horsdal und Mergel gefunden, ist auch hier ein ausgeprägtes Maximum mit etwa gleicher Amplitude (22 % statt 19 % für 300 keV H<sup>+</sup>-Projektile) zu erkennen. Allerdings befindet es sich bei etwas kleinerem Streuwinkel (0,55 anstatt 0,65 mrad amu wie von Mergel ermittelt) und verschiebt sich mit steigender Projektilgeschwindigkeit zu kleineren Werten. Ebenso ist eine starke Projektilabhängigkeit zu beobachten:

	Position des Maximums			
$\sigma_{TI}/(\sigma_{SC}+\sigma_{TI})$	$\mathbf{H}^+$	$\mathrm{He^{+}}$	$\mathrm{He}^{2+}$	
150 keV/u	0,55 mrad∙amu	0,55 mrad∙amu	0,45 mrad∙amu	
300 keV/u	0,45 mrad∙amu	0,45 mrad∙amu	0,40 mrad∙amu	
450 keV/u	-	-	0,35 mrad∙amu	
630 keV/u	0,40 mrad∙amu	0,40 mrad∙amu	0,35 mrad∙amu	

Der Grund für die Verschiebung des Peakmaximums zu kleineren Werten konnte nicht zweifelsfrei geklärt werden. Am wahrscheinlichsten ist aber die gleiche Erklärung wie für die Verschiebung des Peakmaximums der reinen TI (Abbildung 6.7), nämlich die stärkere Gewichtung der Anfangsimpulsverteilung des Elektrons sowie das Auftreten anderer Prozesse. Genauere Aufschlüsse hierüber können erst die multi-differenziellen Daten der folgenden Abschnitte geben. Ein deutlicher Unterschied ist für He<sup>2+</sup> bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten bis 60 keV/u zu beobachten. Während die einfach positiv geladenen Projektile, H<sup>+</sup> und He<sup>+</sup>, zu höheren Geschwindigkeiten eine vergleichbare Struktur aufweisen, weicht die der He<sup>2+</sup>-Projektile gänzlich davon ab. Das heißt: Bei größeren Projektilstreuwinkeln folgt einem Elektroneneinfang quasi automatisch eine Targetionisation.



**Abbildung 6.8:** Quotienten der streuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitte aus Transferionisation und Einfachelektroneneinfang ( $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ ), aus Abbildung 6.4 und 6.7 für a) H<sup>+</sup>-, b) He<sup>+</sup>- und c) He<sup>2+</sup>-Projektile, sowie d) das Verhältnis Transferionisation zu Zweifachelektroneneinfang ( $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ ) für He<sup>2+</sup>-Projektile.

Das Verhältnis  $\sigma_{TI}/(\sigma_{DC} + \sigma_{TI})$  - dargestellt in Abbildung 6.8 d - beschreibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit der zweite Prozess (nach dem Einfang eines Elektrons) eine Ionisation oder ein weiterer Elektroneneinfang ist. Zunächst einmal zeigt sich, dass in schnellen Stößen eine Ionisation sehr viel wahrscheinlicher als ein Einfang ist, eine Tatsache die - betrachtet man die absoluten Wirkungsquerschnitte (Abbildung 6.1) - nicht verwundert. Weiterhin wird in langsamen Stößen bei kleinen Streuwinkeln eingefangen und bei großen Streuwinkeln ionisiert. Der beginnende Anstieg des Verhältnisses für 150 keV/u, parallel zu denen von 40 und 60 keV/u (siehe skizzierte Linien in Abbildung 6.8 d), lässt folgende Vermutung zu: Der für den zweiten Einfang erforderliche Prozess wird mit steigender Projektilgeschwindigkeit zu kleinen Streuwinkeln (großen Stoßparametern) verschoben.

Aus den bisherigen Ergebnissen lassen sich die untersuchten Stoßsysteme in zwei Bereiche aufteilen: a) Niedrige Projektilgeschwindigkeiten und große Störungen einhergehend mit einer breiten Streuwinkelverteilung sowie b) den Bereich hoher Projektilgeschwindigkeiten mit einem signifikanten Unterschied zwischen dem vom Elektron übertragenen Impuls und der Kern-Kern-Wechselwirkung. Nach den Erläuterung aus Kapitel 4 bildet die Sattelpunktionisation bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten den Hauptbeitrag zum totalen TI-Wirkungsquerschnitt, während bei hohen Energien Thomas-(TS1) und korrelierte Prozesse (SO) den Wirkungsquerschnitt dominieren. In beiden Energiebereichen treten zusätzlich weitere Prozesse auf, beispielsweise unabhängige Prozesse (TS2), bestehend aus einem Elektroneneinfang verbunden mit einem binären Stoß zwischen Projektil und Elektron (BE). Anhand hoch-differenzieller Daten wird in den nächsten Unterkapiteln versucht, die einzelnen Prozesse (TS1, TS2 und SO) eindeutig zu identifizieren und näher zu untersuchen.

In Abbildung 6.9 ist analog zu Abbildung 6.8 der Transversalimpuls des Rückstoßions (anstatt des Projektils) aufgetragen. Wie schon bei Mergel für H<sup>+</sup>/He gefunden, so ähneln sich auch hier die Verteilungen von Projektil- und Rückstoßionentransversalimpuls. Ebenfalls Übereinstimmung besteht darin, dass die Verteilung der Rückstoßionen eine geringere Amplitude im Maximum aufweist. Dieses Maximum kann nicht wie von Horsdal et al. [EHor86] auf den Elektron-Elektron-Thomas-Mechanismus zurückgeführt werden, da bei diesem Prozess der Targetkern nur Beobachter ist und idealerweise gar keinen Impulsaustausch erfährt. Allenfalls die Differenz im Maximum zwischen den beiden Abbildungen 6.8 und 6.9 (Projektil- und Rückstoßionentransversalimpuls) stünde für den e-e-Thomas-Prozess zur Verfügung. Die Erklärung von Salin [ASal91, RGay91], das Maximum im Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$  sei ein Beleg für einen unabhängigen Zweistufenprozess (TS2), ist danach falsch. Handelte es sich darum, so ist der Targetkern im Projektil-Elektron-Stoß ebenfalls



**Abbildung 6.9:** Verhältnis von Transferionisation und der Summe aus Transferionisation und Einfachelektroneneinfang ( $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ ), der Transferionisation als Funktion des Rückstoßionentransversalimpulses  $p_{\perp,Rec}$  für a) H<sup>+</sup>-, b) He<sup>+</sup>- und c) He<sup>2+</sup>-Projektile, sowie d) das Verhältnis Transferionisation zum Zweifachelektroneneinfang ( $\sigma_{TI}/(\sigma_{SC} + \sigma_{TI})$ ) für He<sup>2+</sup>-Projektile.

nur ein Beobachter und erfährt keinen Transversalimpulsaustausch. Eine alternative Erklärung für dieses Maximum kann leider nicht gegeben werden.

# 6.3 Longitudinale Rückstoßionenimpulsverteilung ( $d\sigma/dp_{z,Rec}$ )

Während die Impulsverteilung senkrecht zur Strahlachse, diskutiert anhand der Messgröße des Projektilstreuwinkels  $\theta'_P$ , das Streuverhalten der beteiligten Stoßpartner widerspiegelt, enthält die longitudinale Komponente  $p_z$ , besonders die des Rückstoßions  $p_{z,Rec}$ , Informationen über die gesamte Energiebilanz. Sehr gut war dies beim Elektroneneinfang (SC) in Abbildung 5.1 zu sehen; jede einzelne Linie entspricht einem anderen elektronischen Endzustand und somit einer unterschiedlichen Energiebilanz Q. Im Gegensatz zum SC befindet sich bei der Transferionisation zusätzlich noch ein Elektron



**Abbildung 6.10:** Einfach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dp_{z,Rec}$  der TI1 im Proton-Helium-Stoß bei a) 300 keV/u und b) 630 keV/u Projektilenergie. Das Integral der experimentellen Daten dieser Arbeit wurde auf 1 normiert. Die experimentellen Ergebnisse von Mergel wurden auf das Maximum normiert; die Theoriekurven wurden auf das Maximum des linken Peaks normiert (entnommen aus [VMer96]). Die senkrechten Linien entsprechen:  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (cyan) mit Q = -2,4 a. u.

im Kontinuum und dieses verfügt im Allgemeinen über eine kontinuierliche Energieverteilung. Bezieht man die kinetische Energie des freien Elektrons in die Gesamtenergiebilanz ein, so wird Q zwar wieder diskret, jedoch geht gemäß den Erläuterungen aus Kapitel 3 die diskrete Zuordnung zum Rückstoßionenlongitudinalimpuls verloren. Eine durch die kinetische Energie des Elektrons verbreiterte Verteilung für  $p_{z.Rec}$  ist die Folge. In den Unterkapiteln 4.4 und 4.2.3 konnte aufgezeigt werden, dass der longitudinale Rückstoßionenimpuls dennoch eine sehr wichtige Messgröße ist, da verschiedene zu einer Transferionisation<sup>3</sup> führende Prozesse sich stark in ihrer  $p_{z, Rec}$ -Verteilung unterscheiden. In Abbildung 6.10 ist zunächst für das Stoßsystem H<sup>+</sup>-He bei 300 und 630 keV/u der Rückstoßionenlongitudinalimpuls ( $p_{z,Rec}$ ) dargestellt. Die Theoriekurven (CDW-Born-IEM und dCTMC), wurden der Arbeit von Mergel [VMer96] entnommen und in ihrem Maximum auf den linken der beiden Peaks normiert. Die beiden senkrechten Linien repräsentieren den Rückstoßionenlongitudinalimpuls zu  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (CUSP-Kante) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (Elektroneneinfang<sup>4</sup>), mit Q=-2,4 a. u. Die CUSP-Kante begrenzt den longitudinalen Rückstoßionenimpuls; physikalisch ist es unmöglich, Ereignisse dahinter, also bei größeren negativen Werten, zu finden.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Zu den Prozessen der Transferionisation werden hier alle Teilprozesse gezählt, welche zu einer Umladung im Projektil, einem freien Elektron und einem nackten Target führen, ganz gleich ob das emittierte Elektron tatsächlich aus dem Target stammt.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Genauer gesagt dem korrespondierenden Impuls für eine Transferionisation mit  $E_{kin,e}=0$  (Target-CUSP)

und denen Mergels. Einerseits weisen letztgenannte Daten keine Struktur mit zwei Maxima auf und zweitens ist die Verteilung zu größeren positiven Impulsen ausgedehnt sowie leicht verschoben. Dies lässt sich durch mehrere Argumente erklären: Die Impulsauflösung bei Mergel betrug nur 0,5 a. u. in longitudinaler Richtung, gegenüber einer mehr als 3-mal so hohen Auflösung dieser Arbeit. Etwaige Strukturen im Rückstoßionenlongitudinalimpuls waren daher - wenn überhaupt - nur sehr schwer zu erkennen. Des Weiteren gab es - wie sich im Nachhinein erst herausstellte - Probleme mit der Eichung des Nullpunktes der He<sup>2+</sup>-Rückstoßionen [VMer03]. Anhand Abbildung 5.19 ist leicht zu sehen, dass die in diesem Experiment zur Untergrundreduktion verwendete Energieerhaltung vornehmlich Elektronen aus der Targeteinfachionisation (SI), welche symmetrisch um  $p_{z,Rec}=0$  a. u. liegen, wegschneidet. Wahrscheinlich ist auch dieser Untergrund in größerem Anteil noch in den Daten von Mergel vorhanden, was den breiten Ausläufer der Verteilung zu positiven Rückstoßionenlongitudinalimpulsen erklärt.

Deutlich zu erkennen ist in beiden Fällen (bei  $E_P$ =300 und 630 keV/u), dass die  $p_{z,Rec}$ -Verteilung eine Struktur mit zwei Peaks aufweist, welche unterschiedlichen Prozessen zuzuordnen sind. Mit zunehmendem Rückstoßionenlongitudinalimpuls (größeren positiven Werten) besitzen die Elektronen größere kinetische Energien, gemessen in einem sich mit dem Projektil bewegenden Bezugssystem ( $E_{kin,e}^{\Sigma'}$ ). Die Elektronen zum linken Peak besitzen im Projektilsystem eine niedrigere kinetische Energie gegenüber den Elektronen im rechten Peak. Beide Theoriekurven, sowohl die CDW-Born-IEM- als auch die dCTMC-Theorie, entstammen der Arbeit von Mergel [VMer96]. Die klassische dCTMC-Theorie berücksichtigt keine quantenmechanischen Prozesse, wie beispielsweise den Shake-off. Elektroneneinfang und Ionisation stellen in beiden Fällen unabhängige Prozesse dar, z. B. kinematischer Einfang kombiniert mit einem BE.

Die Grenze zwischen beiden Peaks wird gut durch die Linie bei  $p_{z,Rec}$  =  $-Q/v_P - v_P/2$  beschrieben; sie entspricht einem Elektroneneinfang mit einem Target-CUSP<sup>5</sup>. Im idealisierten BE-Modell befinden sich die Elektronen auf einer Kugeloberfläche mit dem Radius  $v_P$  und dem Ursprung  $v_{z,e} = v_P$ , sodass auch ihre kinetische Energie im Projektilsystem eine fixe Größe darstellt, welche zu einem scharfen Peak bei  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  führte. Das gleiche gilt für den SO, sofern das Elektron mit minimalster Energie symmetrisch um das Target emittiert wird (siehe Erläuterungen aus Unterkapitel 4.4). Einzig beim Elektron-Elektron-Thomas-Prozess besitzen die Elektronen im sich mit

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Also einem Elektron, das im Targetsystem über keine kinetische Energie verfügt.



**Abbildung 6.11:** Einfach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dp_{z,Rec}$  der Transferionisation des Stoßsystems H<sup>+</sup>-He für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten (a-e). Das Integral der jeweiligen Verteilung wurde auf 1 normiert. Die senkrechten Linien entsprechen:  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (cyan) mit Q = -2,4 a. u. In Abbildung f wurden die  $p_{z,Rec}$  so verschoben, dass der Elektroneneinfang (Target-CUSP) bei  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2 = 0$  liegt. Die farblich passend skizzierten Linien entsprechen dem jeweils korrespondierenden Impuls zu  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (Projektil-CUSP).

dem Projektil mitbewegenden System eine größere kinetische Energie. Solche Ereignisse liegen vor dieser Linie, nämlich bei exakt  $p_{z,Rec}$ =0.

Beide Theorien, die CDW-Born-IEM- und die dCTMC-Theorie, können nur TS2-Prozesse beschreiben, weder TS1- noch Shake-off-Prozesse sind in ihnen enthalten. Sie alleine reichen nicht aus, die experimentellen Daten vollständig zu beschreiben. Zwei weitere Möglichkeiten einer Transferionisation wurden bisher noch nicht berücksichtigt, der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess, aber auch Ionisation durch Shake-off. Die Erklärung des zweiten - nicht beschriebenen - Maximums kann zweifelsfrei erst durch die Analyse der Elektronenimpulsverteilungen in den nächsten Unterkapiteln gegeben werden. In Realität kann zwischen Elektronen aus einem BE (TS2-Prozess) und einem



**Abbildung 6.12:** Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dp_{z,Rec}d\theta'_P$  der Transferionisation bzw. TI1 für 300 keV/u a) H<sup>+</sup>-, b) He<sup>+</sup>- und c) He<sup>2+</sup>-Projektile in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$ . Die senkrechten Linien entsprechen:  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (cyan). Die Summe der Kurven je Stoßsystem wurde auf das Integral 1 normiert.

SO unterschieden werden. Die Elektronen aus dem BE (siehe Unterkapitel 6.5) liegen deutlich innerhalb des idealisierten BE-Kreises, beispielsweise aufgrund einer nachträglichen Wechselwirkung des emittierten Elektrons mit dem Projektil (Post Collision Interaction, PCI). Sie besitzen daher im projektilmitbewegten System  $\Sigma'$  weniger kinetische Energie, was zu einer Rückwärtsverschiebung im  $p_{z,Rec}$ -Spektrum führt. Auf der anderen Seite werden Elektronen aus dem SO (siehe Unterkapitel 6.7) nicht isotrop um das Target emittiert, sondern zu negativen  $p_{z,e}$ -Werten verschoben, sodass sie wieder gemessen in  $\Sigma'$  größere kinetische Energien besitzen und vor der Linie  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  liegen.

Daher ist zu vermuten, dass im rechten Peak die Ionisation durch Shakeoff erfolgt und links durch einen unabhängigen Binary Encounter. Die Wahrscheinlichkeit eines Shake-offs nimmt zu, je schneller sich das Targetpotenzial ändert, also das Elektron dem Atom durch Einfang entrissen wird, und gleichzeitig sinkt mit der kürzeren Stoßzeit die Wahrscheinlichkeit für zwei unabhängige Wechselwirkungen. Eine genauere Aufschlüsselung und eindeutige Identifizierung wird allerdings erst bei Betrachtung der Elektronenimpulsverteilungen in den folgenden Abschnitten möglich sein. Der ElektronElektron-Thomas-Mechanismus scheint, in Übereinstimmung mit der Theorie, hier keine Rolle zu spielen.

In Abbildung 6.11, ist die Rückstoßionenlongitudinalimpulsverteilung  $p_{z,Rec}$ für H<sup>+</sup>-Projektile bei verschiedenen Einschussenergien dargestellt. Je niedriger die Projektilgeschwindigkeit wird, desto mehr nähert sich die CUSP-Kante der Impulsverteilung an. Gleichzeitig wird die gesamte Verteilung schmäler. Eine Ursache für die geringere Breite der  $p_{z,Rec}$ -Verteilung bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten ist der große Anteil an Sattelpunktelektronen. Außerdem ziehen PCI-Effekte die Elektronen im Geschwindigkeitsraum zum Projektil heran. Infolge dessen scheinen die Elektronen aus einem ECC-Prozess zu stammen, wodurch sich die  $p_{z,Rec}$ -Verteilung der CUSP-Kante annähern muss. Zwar nicht absolut, doch relativ zur CUSP-Kante liegen die Ereignisse mit steigender Projektilgeschwindigkeit bei immer größeren  $p_{z,Rec}$ -Impulsen. Sie besitzen (im Laborsystem gemessen) Impulse kleiner oder aber größer als Projektilgeschwindigkeit. Ein Problem in dieser Darstellung ist, dass nicht zwischen Elektronen unterschieden werden kann, die Impulse größer oder kleiner  $v_P$  besitzen, da nur die kinetische Energie im sich mit Projektilgeschwindigkeit bewegenden System  $\Sigma'$  gemessen wird. Aus diesem Grund ist auch eine Unterscheidung von Elektronen aus einer Sattelpunktionisation und Elektronen aus einem BE-Stoß nur bedingt möglich. Bei 150 keV/u ist um die Linie des Target-CUSPs ( $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$ ) eine leichte Schulter zu erkennen, die ab 300 keV/u deutlich zu zwei Maxima wird.

Während eine Projektil-Elektron-Wechselwirkung zu vergleichsweise großen Streuwinkeln  $\theta'_P$  führt, ist bei einer Ionisation durch Shake-off kein transversaler Impulsaustausch zwischen Projektil und Elektron vorhanden. Vorausgesetzt, der Elektroneneinfang findet in beiden soeben skizzierten Fällen bei gleichen Stoßparametern statt, so ist zu erwarten, dass der zum Shake-off korrespondierende Peak (rechts) bei kleinen Streuwinkeln dominiert und bei größeren Streuwinkeln der linke Peak. In Abbildung 6.12 ist der Rückstoßionenlongitudinalimpuls für verschiedene Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$  und Projektile bei 300 keV/u dargestellt. Zumindest für den Fall von H<sup>+</sup>-Projektilen ist gut zu erkennen, dass bei kleinen Streuwinkeln der mit dem Shake-off assoziierte Anteil die Verteilung dominiert. Im mittleren Streuwinkelbereich (0,25 -0,65 mrad amu) trägt vor allem der dem BE zugeschriebene Peak den größten Anteil zum differenziellen Wirkungsquerschnitt bei. Für  $\theta'_P > 0,65$  mrad amu ist wiederum der Shake-off-Anteil (SO) größer. Allerdings tritt der SO hauptsächlich bei kleinen Streuwinkeln auf, sodass hier möglicherweise ein weiterer Prozess hinzukommt.



**Abbildung 6.13:** Einfach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dp_{z,Rec}$  der TI des Stoßsystems He<sup>+</sup>-He für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten (a-d). Das Integral der jeweiligen Verteilung wurde auf 1 normiert. Die senkrechten Linien entsprechen:  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (cyan) mit Q=-2,0 a. u. In Abbildung e wurde die  $p_{z,Rec}$ -Verteilung so verschoben, dass der Elektroneneinfang (Target-CUSP) bei  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2 = 0$  liegt. Die farblich passend skizzierten Linien entsprechen dem jeweils korrespondierenden Impuls zu  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (Projektil-CUSP).

Die Verteilungen für He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektile (Abbildungen 6.13 und 6.14) unterscheiden sich dahingehend von denen der H<sup>+</sup>-Projektile, dass der dem SO zugeschriebene Anteil am Gesamtwirkungsquerschnitt wesentlich schwächer ist und/oder von anderen Prozessen überlagert wird. Der Shake-off-Prozess sollte unabhängig von den verwendeten Projektilen auftreten. Im Falle der He<sup>+</sup>-Projektile muss zusätzlich berücksichtigt werden, dass bei dieser Messung ( $E_P$ =300 keV/u) mit einem höheren elektrischen Feld gearbeitet wurde, was die Impulsauflösung um 50 % reduzierte. Nach den vielen vorbereitenden Darstellungen und Argumentationsketten ist klar geworden, dass die letztendliche Identifizierung der der Transferionisation zugrunde liegenden Prozesse bisher zwar notwendige, jedoch nicht hinreichende Bedingungen



**Abbildung 6.14:** Einfach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dp_{z,Rec}$  der Transferionisation (TI) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>-He für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten (a-f). Das Integral der jeweiligen Verteilung wurde auf 1 normiert. Die senkrechten Linien entsprechen:  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (cyan) mit Q = -0,9 a. u. In Abbildung g wurden die Rückstoßionenlongitudinalimpulsverteilungen so verschoben, dass der Elektroneneinfang (Target-CUSP) bei  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2 = 0$  liegt. Die farblich passend skizzierten Linien entsprechen dem jeweils korrespondierenden Impuls zu  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (dem Projektil-CUSP).

geliefert hat. In den nächsten Unterkapiteln wird zusammen mit den vorangegangenen Hinweisen die Bestimmung der Prozesse (Sattelpunktionisation, TS2, TS1 und SO) anhand von Elektronenimpulsverteilungen, vor allem im Projektilstreusystem, erfolgen.

## 6.4 Sattelpunktionisation

Zur Darstellung der weiteren Ergebnisse in diesem sowie den folgenden Kapiteln wird nicht mehr das Laborsystem, sondern - Bezug nehmend auf die Erläuterungen des Unterkapitels 5.6 - ein stoßinternes Koordinatensystem verwendet. Der transversale Impulsübertrag auf das Projektil, der sich im Projektilstreuwinkel widerspiegelt, sowie die Strahlrichtung (z) spannen dieses rechtshändige, kartesische Koordinatensystem auf. Per Definition gilt für das Projektilstreusystem  $\theta_P \propto p_{x,P}^{\Sigma_P} \ge 0$  und  $p_{y,P}^{\Sigma_P} = 0$ .



**Abbildung 6.15:** Impulse von Projektil, Elektron und Rückstoßion der Transferionisation (TI1) für das Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He, dargestellt in der Projektilstreuebene  $(p_x^{\Sigma_P})$ . Die Projektiltransversalimpulsverteilung entspricht hier dem Projektilstreuwinkel  $\theta_P$ .

Des Weiteren werden in diesem Kapitel die Elektronenimpulse in Einheiten von  $m_e v_P$  angegeben, um einen Vergleich zwischen den verschiedenen Stoßgeschwindigkeiten zu erleichtern. In Abbildung 6.15 ist die *x*-Komponente des Impulses von Projektil, Elektron und Rückstoßion dargestellt. Nach den Erkenntnissen des vorherigen Abschnittes kann ein ruhendes Elektron ein Projektil maximal um 0,54 mrad amu ablenken; in einer Transferionisation mit zwei Projektil-Elektron-Streuungen ist ein maximaler Streuwinkel von  $\theta_P=1,1$  mrad amu möglich. Es ist deutlich zu sehen, dass Rückstoßion und Projektil eine nahezu perfekt spiegelsymmetrische Verteilung aufweisen. Während die großen Impulse aus einer Kern-Kern-Streuung resultieren, nimmt das Elektron hauptsächlich eine "Beobachter"-Position im Zweizentrenpotenzial des  $He_2^{2+}$ -Quasimoleküls ein. Der kleine Beitrag positiver Rückstoßionenimpulse ist die Folge eines großen Impulsaustauschs durch eine Projektil-Elektron-Wechselwirkung zusammen mit einer schwächeren Wechselwirkung der beiden Kerne, deutet also auf eine Kollision mit großem Stoßparameter hin.



**Abbildung 6.16:** Elektronenimpulsverteilung (in Einheiten von  $v_P$ ) der TI1 des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He, dargestellt im Projektilstreusystem mit a) Blick auf die Streuebene und b) dem Blick in Flugrichtung des Projektils. In beiden Fällen wird das Projektil nach rechts gestreut und über alle Projektiltransversalimpulse integriert  $0 \le \theta_P \le \infty$ .

Wie gezeigt definiert die Bewegung der Kerne die Streuebene, die in Abbildung 6.16 a dargestellt ist. Die dazu senkrechte Richtung mit Blick in Strahlrichtung ist in Abbildung 6.16 b gezeigt. Verglichen mit den Ergebnissen des gleichen Stoßsystems von Schmidt aus Abbildung 4.11, fallen zwei Dinge auf: Zum einen ähnelt sich die prinzipielle Struktur der auf dem Sattel befindlichen Elektronen (der "Bananen") bei 28 keV/u und 40 keV/u (entspricht  $v_P$ =1,06 bzw. 1,26 a. u.). Die spiegelsymmetrische Vertauschung entlang der z-Achse ist mit der umgekehrten Definition der Streuebene - durch den Transversalimpulsübertrag auf das Rückstoßion - zu erklären. Andererseits fällt auf, dass ein nicht zu vernachlässigender Teil der Elektronen Impulse in Strahlrichtung besitzt, die größer als Projektilgeschwindigkeit sind. Eine Begründung für die Unterschiede - welche in den Projektionen noch deutlicher zu Tage treten - ist, dass von Schmidt ausschließlich Impulse mit maximal Projektilgeschwindigkeit detektiert werden konnten [LSch05]. Exemplarisch ist in Abbildung 6.17 eine Elektronenortsverteilung der Transferionisation dargestellt.

Die reduzierte Raumwinkelakzeptanz sowie das untere Abschneiden der Farbskala bei 15 % erklären zum größten Teil die Diskrepanzen zwischen den Messungen dieser Arbeit und denen von Schmidt. Andererseits ist innerhalb des Phasenraumes, der von Schmidt vollständig erfasst werden konnte, die Elektronenimpulsauflösung mindestens um einen Faktor 2 besser, verglichen mit den Daten dieser Arbeit. In Abbildung 6.18 ist die Elektronenimpulsverteilung senkrecht zur Streuebene - in Blickrichtung des Projektils - für verschiedene Schnitte entlang dieser Achse dargestellt; dies entspricht einer Fahrt durch die Verteilung vom Target zum Projektil und ein wenig darüber hinaus.



**Abbildung 6.17:** Ortsverteilung der Transferionisation im He<sup>2+</sup>-He-Stoß bei  $v_P$ =0,84 a. u. mit einer Bedingung auf kleinen x-Impulsen (-0,05 <  $p_{x,e}$  < 0,05 a. u.) aus [LSch00]. Der große Kreis entspricht dem Detektor und damit gleichzeitig der Nachweismöglichkeit. Der rote Kreis mit "BE" skizziert den Auftreffort von Elektronen aus einer Projektil-Elektron-Wechselwirkung, wie sie nach Erkenntnissen dieser Arbeit erwartet werden.

Wie nicht anders zu erwarten war, ist für negative Elektronenlongitudinalimpulse (Abbildung 6.18 a) keine Struktur, sondern nur eine diffuse Verteilung zu erkennen. Abgesehen von komplizierten Mehrfachstreuprozessen gibt es keinen plausiblen Grund, weshalb in diesem Bereich etwas zu sehen sein sollte. Elektronenlongitudinalimpulse um das Target (6.18 b) weisen eine leicht nach rechts verschobene, relativ zentral symmetrische Verteilung auf. Infolge zunehmender  $p_{z,e}$ -Impulse werden nach und nach zwei Maxima sichtbar, wobei das rechte immer das stärkere ist. Ebenso wandert der Mittelpunkt der Maxima bis  $v_P/2$  weiter nach außen, um anschließend wieder zur Mitte zurückzukehren. Gegenüber dem Blick auf die Streuebene (Abbildung 6.16) fällt vor allem die Konzentration der Elektronenemission auf die Streuebene auf. Für Elektronenlongitudinalimpulse um  $v_P$  laufen die beiden Maxima wieder zu einem, relativ um die Strahlachse zentralsymmetrischen, Maximum zusammen. Erst ab  $p_{z,e} > 0, 9v_P$  (Abbildung 6.18 g) verschiebt sich die Verteilung weiter nach links, welches mit dem Auftreten eines anderen Prozesses, einem binären Stoß zwischen Projektil und Elektron, in Verbindung gebracht wird.



**Abbildung 6.18:** Elektronenimpulsverteilung der TI1 des Stoßsystems He<sup>2+</sup>-He bei 40 keV/u im Projektilstreusystem für verschiedene Schnitte entlang der Impulse in Strahlrichtung  $(p_{z,e})$ . Das Projektil wird weiterhin nach rechts gestreut.

Die Doppelpeakstruktur ( $\cos^2(\phi)$ -Charakteristik) sowie das auftreten nur kleiner Impulse senkrecht zur Streuebene resultieren aus der Besetzung der  $\pi$ -Zustände durch Rotationskopplung bzw. der Promotion entlang der  $T_{01}$ -Serie, wie in Unterkapitel 4.3.1 bereits erläutert wurde. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Elektronenverteilung von zwei unterschiedlichen Strukturen geprägt wird. Der erste Teil, der zu großen Elektronenimpulsen jenseits der Projektilgeschwindigkeit führt und einem Binary Encounter zugeschrieben wird, wird später noch ausführlich diskutiert. Aber der Hauptteil, der sich in Form zweier "Bananen" darstellt, wird der Sattelpunktionisation zugeordnet und befindet sich im Geschwindigkeitsraum zwischen Projektil und Target. Dieses Ergebnis steht in guter Übereinstimmung mit früheren Experimenten von Schmidt [LSch00].

#### 6.4.1 Vergleich zur TI2

Wie aus Abbildung 6.3 ersichtlich befinden sich rund 10 Prozent der Projektile, mit steigender Tendenz zu größeren Projektilgeschwindigkeiten, nach der Reaktion in einem angeregten Zustand. In Abbildung 6.19 a ist die normierte Projektilstreuwinkelverteilung  $\theta'_P$  von TI1 und TI2 des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He dargestellt sowie die Elektronenemissionscharakteristik in der nuklearen Streuebene einer Transferionisation mit Projektilanregung (TI2).



**Abbildung 6.19:** a) Elektronenimpulsverteilung der TI2 des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He, dargestellt im Projektilstreusystem mit Blick auf die Streuebene. Das Projektil wird nach rechts gestreut und über alle Streuwinkel  $\theta'_P$  integriert. b) Projektilstreuwinkelverteilung der TI1 und TI2 des Stoßsystems He<sup>2+</sup>-He bei einer Projektilenergie von 40 keV/u. Die Verteilung der TI2 wurde mit einem Faktor 10 multipliziert.

Betrachten wir zunächst die Projektilstreuwinkelverteilung der Transferionisation mit und ohne Anregung aus Abbildung 6.19 a. Die Hauptverteilung der TI2 besitzt bei etwa 3 mrad amu ihr Maximum und nicht schon bei 1 mrad amu wie die TI1. Daraus lässt sich schließen, dass die Transferionisation mit Projektilanregung bei sehr viel kleineren Stoßparametern auftritt. Daneben tritt bei der TI2 ein kleines Maximum um 0,5 mrad amu auf, welches in Anlehnung an einen Zweifachelektroneneinfang (vgl. Abbildung 6.4 d) dem Impulsübertrag zweier Elektronen zugeschrieben wird.

Verglichen mit einer Transferionisation ohne Anregung liegen bei der TI2 lediglich 3 Prozent der Elektronen innerhalb der "Bananen", während es bei einer TI1 etwa 40 Prozent sind. Trotzdem weisen die restlichen 97 Prozent der TI2 keine ausgeprägte Struktur auf. Sogar der große Anteil an Elektronen, die größere Geschwindigkeiten als das Projektil aufweisen und einem binären Stoß zugerechnet wurden, fehlen vollkommen, was eher überrascht. Der größere Teil der Ereignisse innerhalb der "Bananen" befindet sich, umgekehrt zur TI1, auf der linken Seite. Ansonsten scheint auf den ersten Blick die Knotenlinie entlang der Molekülachse (z) zu fehlen. Betrachtet man die Impulsverteilung  $x^{\Sigma_P}-y^{\Sigma_P}$ -Ebene für unterschiedliche Elektronenlongitudinalimpulse, zeichnet sich ganz schwach ein Minimum exakt auf der Achse  $(x^{\Sigma_P}=0)$  ab. Trotz grober Übereinstimmung von Transferionisation mit und ohne Anregung fehlen bei der TI1 andere Teile der "Bananen" als bei der TI2.

Ob sich aus der Tatsache des fehlenden Binary Encounters der TI2 sowie des Maximums von  $\theta'_P$  bei großen Impulsüberträgen ableiten lässt, dass die Sattelpunktionisation eher bei kleinen Stoßparametern stattfindet, bleibt fraglich. Die kleineren Projektilstreuwinkel würden demnach von einem Stoß zwischen Projektil und Elektron dominiert. Durch die Untersuchung der Elektronenemissionscharakteristik für verschiedene Transversalimpulsüberträge auf das Projektile kann diese Hypothese genauer überprüft werden, wie in den nächsten Absätzen ausgeführt wird.

### 6.4.2 Einfluss des Projektilstreuwinkels

Die bisherigen Erkenntnisse, insbesondere die Projektilstreuwinkelverteilung aus Abbildung 6.7, zeigen für das untersuchte Stoßsystem (He<sup>2+</sup>/He bei  $E_P$ =40 keV/u) keine besondere Struktur, die auf im Streuwinkel signifikante Prozesse schließen lässt, wie es beispielsweise der Thomas-Prozess wäre. Die getroffene Auswahl an Schnitten im Projektilstreuwinkel in Abbildung 6.20 konzentriert sich auf den durch Projektil-Elektron-Wechselwirkung zugänglichen Bereich (Abbildungen a-d).

Entgegen der Erwartungen zeigt sich, dass die "Bananen"-Struktur nahezu unverändert bleibt, egal welches Streuwinkelintervall betrachtet wird. Lediglich das Intensitätsmaximum variiert innerhalb der betrachteten Intervalle



**Abbildung 6.20:** Elektronenimpulsverteilung der TI1 des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He, dargestellt im Projektilstreusystem mit Blick auf die Streuebene für verschiedene Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$ . Das Projektil wird nach rechts gestreut.

leicht, jedoch ohne erkennbaren Trend. Des Weiteren ist eine Zunahme des diffus verteilten Untergrunds mit größerem Projektilstreuwinkel zu beobachten. Allerdings handelt es sich nicht um Untergrund im Sinne von statistischen Koinzidenzen, sondern um Elektronen aus echten Prozessen, die wahrscheinlich in Mehrfachstreuprozessen erzeugt wurden. Eine relative Verschiebung zwischen den "Bananen" und größeren Impulsen des Elektrons, die einer binären Kollision zugeschrieben werden, tritt erst ab  $\theta'_P > 1,5$  mrad amu auf. Zumindest für die Transferionisation ohne Anregung (TI1) erweist sich die zuvor aufgestellte Hypothese als falsch! Demnach dominieren bei kleinen Stoßparametern (große Projektilstreuwinkel) binäre Stöße zwischen Projektil und Elektron. Die Sattelpunktionisation mit der Promotion ins Kontinuum scheint hingegen unabhängig vom Stoßparameter zu sein. Ein Problem der gewählten Darstellung ist die bis zu einem Faktor 3 unterschiedliche Anzahl an Ereignissen je präsentiertem Spektrum. Einen absoluten Vergleich der Reaktionskanäle gewährt beispielsweise eine Darstellung, wie sie in Abbildung 6.21 gewählt wurde. Aufgetragen sind hier die Transversalimpulse von Elektron und Projektil. Die Impulserhaltung (erkennbar an diagonalen Strukturen) entspricht einer Projektil-Elektron-Wechselwirkung. Der Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$  ist abgesehen von einem Skalierungsfaktor gleichbedeutend mit dem Projektiltransversalimpuls  $p_{x,P}^{\Sigma_P}$ .

Aus Abbildung 6.21 ist leicht zu ersehen, dass die Sattelpunktionisation auch noch bei Projektiltransversalimpulsen von 15 a. u. ( $\theta'_{P}$ =6,5 mrad·amu) auftritt. Den Hauptbeitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt bei einer TI1 (Abbildungen a/b) liefert die Sattelpunktionisation allerdings nur bis etwa 2,5 mrad amu bzw. 6 a. u. Projektiltransversalimpuls. Projektil-Elektron-Wechselwirkungen (BE) treten nur in Form einer Verbreiterung der Verteilung zu negativen  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$ -Werten auf. Aus den Abbildungen 6.21 c/d sowie der Zusammenstellung in Abbildung 6.22 ist für die Transferionisation mit Anregung (TI2) ein anderes Bild zu ersehen. Für kleine Streuwinkel, unterhalb 0,7 mrad amu, endet die Elektronenverteilung deutlich vor der Projektilgeschwindigkeit. Ebenso ist keine Knotenlinie entlang der Molekülachse zu erkennen. Erst mit steigendem Projektiltransversalimpuls tritt die bekannte "Bananen"-Struktur hervor, wenn auch die Knotenlinie nur sehr schwach zu erkennen ist. Die relative Gewichtung des Streuwinkels war bereits in Abbildung 6.19 b zu erkennen; die TI2 besitzt um 3 mrad amu den maximalen Wirkungsquerschnitt.

Um überhaupt eine TI2 erhalten zu können, ist - betrachtet man die Potenzialkurven in Abbildung 4.3 - bei sehr kleinen Kernabständen (<0,3 a. u.) mindestens eine Rotationskopplung erforderlich, um in einen  $2p\pi_u^2$ -Zustand



**Abbildung 6.21:** Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt der TI1 (a/b) sowie der TI2 (c/d) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>-He bei 40 keV/u. a/c)  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}d\theta'_P$  Elektronen- vs. Projektiltransversalimpuls bzw. b/d)  $d^2\sigma/dp_{z,e}d\theta'_P$  Elektronenlongitudinalimpuls vs. Projektiltransversalimpuls. Die rote senkrechte Linie skizziert die Projektilgeschwindigkeit  $v_P$ .

zu gelangen, der über eine Serie vermiedener Kreuzungen zur Elektronenemission sowie einem im  $2p\pi_u$ -Zustand gebundenen Elektron führt [LSch00]. Die kleinen Kernabstände, die zu großen Projektiltransversalimpulsen führen, konnten unter anderem bereits in der Streuwinkelverteilung in Abbildung 6.19 beobachtet werden. Die sich abzeichnende Knotenlinie bestätigt die Vermutung der Besetzung eines  $\pi$ -Zustandes der TI2.

Insgesamt konnte keine Abhängigkeit der Sattelpunktionisation vom Stoßparameter bzw. dem Projektilstreuwinkel festgestellt werden, weder für Transferionisation ohne noch mit einer Projektilanregung. Allerdings ist für die TI2 eine minimale Annäherung der Kerne notwendig, sodass eine Rotationskopplung möglich wird. Weiterhin konnte lediglich ein schwacher Einfluss auf die Sekundärprozesse, wie die binären Stöße, festgestellt werden. Mit den bisher gewonnenen Informationen und Erläuterungen anhand verschiede-



**Abbildung 6.22:** Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  der Transferionisation mit Projektilanregung (TI2) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He. Dargestellt ist die Elektronenimpulsverteilung mit Blick auf die Streuebene, in welcher das Projektil nach rechts abgelenkt wird für verschiedene Streuwinkel  $\theta'_P$ .
ner niedrigdimensionaler Darstellungen, anstatt zahlloser Schnitte<sup>6</sup>, wird im nächsten Abschnitt der Einfluss verschiedener Streupotenziale sowie Stoßgeschwindigkeiten untersucht. Die einzige bekannte Vergleichsmöglichkeit, die Daten von Schmidt [LSch00], welche dasselbe Stoßsystem umfassen sowie eine vergleichbare Projektilgeschwindigkeit ( $v_P$ =1,06 bzw. 1,26 a. u.), weichen nur in einem Punkt von den im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Daten ab: Andere Stoßprozesse, die ebenfalls in einer Transferionisation münden, tragen erheblich mehr zum totalen Wirkungsquerschnitt bei, als von Schmidt angenommen wurde.

#### 6.4.3 Unterschiedliche Stoßsysteme

Die Frage dieses Unterkapitels lautet, wie groß der Unterschied zwischen klassischer Elektronen- und Projektilgeschwindigkeit sein darf, um weiterhin von einer Sattelpunktionisation sprechen zu können; aber auch was geschieht, wenn Projektile verwendet werden, die im Ausgangskanal neutral sind (H<sup>+</sup> und He<sup>+</sup>). Zur Transferionisation in langsamen Stößen sind dem Autor abgesehen von den bereits zitierten Werken, keine weiteren bekannt. Experimente, die sich mit der Einfachionisation in langsamen Stößen beschäftigen, gibt es dagegen in größerer Anzahl (z. B. [WMec91, VIrb93, SKra96, MAbd98, MAbd99]. Allerdings konnte von Schmidt eindeutig gezeigt werden, dass mit zunehmender Projektilgeschwindigkeit ( $v_P > 0.8$  a. u.) die Unterschiede zwischen Transfer- und Einfachtargetionisation immer stärker werden. Während bei der Einfachionisation (SI) das Minimum auf der z-Achse verschwindet, verbreitert es sich bei der Transferionisation. Die Streuwinkelverteilung der SI weist vor allem kleine Streuwinkel auf und folglich spielt Rotationskopplung - die einen wesentlichen Beitrag der TI liefert - keine Rolle [LSch00]. Daher ist ein Vergleich zur Einfachionisation nicht angebracht. Für die Einfachionisation wurde in anderen Experimenten gefunden, dass sich mit steigender Projektilladung das Maximum der Verteilung in Strahlrichtung (zum Projektil) verschiebt, was man sich aber leicht mit PCI erklären kann [MAbd98, MAbd99].

In Abbildung 6.23 ist die Projektilstreuwinkelverteilung  $(d\sigma/d\theta'_P)$  aus Unterkapitel 6.2 normiert und für die verschiedenen Endzustände dargestellt. Das Maximum wurde auf 1 normiert, um einen besseren Vergleich zu ermöglichen. Im vorherigen Abschnitt wurde am Beispiel einer Transferionisation mit/ohne Anregung (TI2/TI1) gezeigt, dass sich Eigenschaften aus höher differenziellen Impulsspektren in der Streuwinkelverteilung des Projektils zeigen

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Z. B. die gewählte Darstellung aus Abbildung 6.21 anstatt mehrerer Schnitte wie in Abbildung 6.22.



**Abbildung 6.23:** Streuwinkelverteilung  $\theta'_P$  verschiedener Projektile, Energien und Endzustände (TI/TI1/TI2). Die Verteilungen wurden in ihrem Maximum auf 1 normiert.

können. Aus Abbildung 6.23 zeigen sich Gemeinsamkeiten in der Struktur des Projektilstreuwinkels. Vier verschiedene Gruppen lassen sich danach bestimmen:

- 1.  $He^{2+}$  60 keV/u TI2
- 2. He $^{2+}$  60 keV/u TI1 & He $^+$  60 keV/u TI2
- 3. H<sup>+</sup> 60 keV/u TI & He<sup>+</sup> 60 keV/u TI
- 4. H<sup>+</sup>-, He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektilen mit  $E_P \ge 100$  keV/u.

In Abbildung 6.24 und 6.25 ist für die verbleibenden Stoßsysteme die Elektronenverteilung mit Blick auf die Streuebene  $(d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e})$  sowie mit Blick in Strahlrichtung  $(d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{y,e}^{\Sigma_P})$  dargestellt. Die rote Kreislinie skizziert auch hier den Elektronenimpuls nach einer Projektil-Elektron-Wechselwirkung (BE). Für alle Stoßenergien bis 60 keV/u zeigen die Elektronenimpulse in der Streuebene Elemente der typischen "bananenförmigen" Verteilung, wie sie bereits bei He<sup>2+</sup>-Projektilen mit  $E_P$ =40 keV/u gefunden wurde. Im Gegensatz zur vorherigen Klassifizierung mit Hilfe des Projektilstreuwinkels weisen die TI1 von He<sup>2+</sup> sowie He<sup>+</sup> bei einer Projektilenergie von 60 keV/u (Abbildung a und c) den deutlichsten erkennbaren Ansatz zweier "Bananen" (rechts und links der Strahlachse) auf. Auch im Vergleich der Stoßsysteme (a e) stimmt die Differenzierung nach dem Streuwinkelverhalten nicht mit den Elektronenverteilungen in der Streuebene überein bzw. sind die Gemeinsamkeiten nur marginal. Dies ist ein hervorragendes Beispiel dafür, dass einfachdifferenzielle Daten zwar einen Hinweis auf Prozesse geben können, diese aber in hoch differenziellen Spektren bestätigt werden müssen!

Der Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt, welcher mit dem Bild einer Sattelpunktionisation beschrieben werden kann, die Spektren a, b, d und e aus den Abbildungen 6.24, 6.25 - sind vergleichbar mit den Ergebnissen des Stoßsystems He<sup>2+</sup>-He bei 40 keV/u. Jedoch ist bei den einfach positiv geladenen Projektilionen (Spektren d und e) eine starke Konzentration der Verteilung um die z-Achse zu beobachten; die typische Knotenlinie scheint zu fehlen, ähnlich der Verteilung für He<sup>2+</sup> mit Projektilanregung (Spektrum b). Handelt es sich in diesen Fällen nur um die linke Seite der bisherigen "Bananen", während die rechte fehlt, ist dies im Vergleich zu den 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He nicht zu verstehen. Während bei 40 keV/u - in Übereinstimmung mit den Daten von Schmidt - mit steigender Projektilgeschwindigkeit die linke Seite verschwindet, ist bei 60 keV/u nun die komplette rechte Seite verschwunden. Andererseits geht bereits beim Übergang von 40 zu 60 keV/u He<sup>2+</sup> das kontinuierliche Fehlen eines Teils der "Banane" verloren. Da für die 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He das Fehlen nicht eindeutig erklärt werden konnte, bleibt diese Frage auch weiterhin ungeklärt; zumindest ist auszuschließen, dass dieser Effekt (das Fehlen eines Teils der "Bananen") direkt mit der Projektilgeschwindigkeit in Verbindung steht, wie der Vergleich zwischen 40 und 60 keV/u dieser Arbeit sowie den Daten von Schmidt [LSch00] bis 28 keV/u zeigt.

Ein ganz anderer Erklärungsversuch beruht darauf, dass das Bild einer Sattelpunktionisation in diesem Geschwindigkeitsbereich einfach keine Gültigkeit mehr besitzt; die zu kurze Wechselwirkungszeit lässt das Elektron nicht länger auf dem Sattel reiten. Die Strukturen könnten dann die Folge einer Ionisation mit geringem Impulsaustausch zwischen Projektil und Elektron sein, die durch das starke attraktive Projektilpotenzial angezogen werden. Da kinematisch weder die Ionisation auf dem Sattelpunkt noch die zuvor beschriebene Kombination einer Ionisation mit einer Post-Collision-Interaction (PCI) scharfe Grenzen besitzt und die Übergänge in den Bildern fließend sind, kann ohne weitere theoretische Grundlagen (die derzeit noch nicht vorhanden sind) keine abschließende Antwort gegeben werden. Jedoch gilt in diesem Falle, dass ebenso bei höheren Projektilgeschwindigkeiten - ab 100 keV/u (Spektren f, g, h, i und j) - die Ionisation nicht die Folge einer Promotion ins Kontinuum im Hidden Crossing Modell ist, was zumindest für die einfach positiv geladenen Projektilionen eindeutig zutrifft. Zusätzlich enthalten alle betrachteten Stoßsysteme einen vom Stoßsystem abhängigen Beitrag



**Abbildung 6.24:** Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  TI1/TI2 (bzw. der integralen Form, TI, sofern sie nicht getrennt werden konnten - siehe Tabelle 6.1) verschiedener Stoßsysteme und -geschwindigkeiten. Dargestellt ist Elektronenimpulsverteilung mit Blick auf die Streuebene, in welcher das Projektil nach rechts abgelenkt wird, integriert über alle Streuwinkel.



**Abbildung 6.25:** Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P} dp_{y,e}^{\Sigma_P}$  TI1/TI2 (bzw. der integralen Form, TI, sofern sie nicht getrennt werden konnten - siehe Tabelle 6.1) verschiedener Stoßsysteme und -geschwindigkeiten. Dargestellt ist Elektronenimpulsverteilung mit Blick in Strahlrichtung. Es werden alle Projektilstreuwinkel berücksichtigt; das Projektil selbst wird nach rechts gestreut.

von Elektronen, die mit großen Transversalimpulsen emittiert werden - eine genauere Untersuchung erfolgt in den nächsten Abschnitten.

Einzig das Stoßsystem He<sup>+</sup>/He bei 60 keV/u ohne Projektilanregung (Spektrum c) weist eine konträre Emissionscharakteristik auf. Sowohl die Impulse in Strahlrichtung, aber auch in transversaler Richtung sind deutlich größer als die der anderen Stoßsysteme. Auch wenn ein Fehler - wie falsche Projektilenergie, andere Projektile oder eine fehlerhafte Eichung - nicht hundertprozentig ausgeschlossen werden kann, so hielt die Verteilung allen Überprüfungen stand:

- 1. Überprüfung des korrekten Projektils und dessen Geschwindigkeit anhand des Abstandes der SC-Linien.
- 2. Überprüfung der Rückstoßioneneichung sowohl anhand der SC-Linien aber auch der Q-Wertverteilung mit und ohne Projektilanregung der TI.
- 3. Test der richtig skalierten Projektilgeschwindigkeit und Elektronenimpulse mittels einer Bedingung auf Cusp-Elektronen.
- 4. Darüber hinaus wurden alle Messungen innerhalb weniger Monate hintereinander durchgeführt, ohne dass das elektrische Feld im Spektrometer oder ein Detektor geändert wurden.
- 5. Die in Abbildung 6.26 dargestellte Verteilung des Stoßsystems He<sup>+</sup>/He bei 25 keV/u weist ähnlich große Impulse des Elektrons - sowohl longitudinal als auch transversal - auf<sup>7</sup>.

Ebenso der Vergleich für eine Transferionisation mit Anregung (TI2) aus Abbildung 6.24 d steht in guter Übereinstimmung zu den anderen Stoßsystemen. Da TI1 und TI2 simultan gemessen und analysiert wurden, ist ein experimenteller Fehler auszuschließen, sodass mit großer Wahrscheinlichkeit von einer echten Verteilung auszugehen ist. Eine eindeutige Erklärung für diese außergewöhnliche Struktur kann derzeit nicht gegeben werden, jedoch gibt es zwei Ansätze, die das im Projektil gebundene Elektron als aktiv oder passiv betrachten.

Ein denkbarer Prozess, in welchem das Projektilelektron aktiv in den Gesamtprozess involviert ist, könnte folgendermaßen aussehen: Zuerst wird das

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Aufgrund experimenteller Probleme mit der Rückstoßionenablenkung während dieser Messung ist die Eichung der Rückstoßionenimpulse nicht mit ausreichender Qualität möglich. Dies betrifft die beiden Ortsrichtungen ( $p_{z,Rec}$  und  $p_{y,Rec}$ ). Die Elektroneneichung ist einwandfrei, nur die Festlegung der Projektilstreuebene ist mit einem größeren Fehler behaftet.



**Abbildung 6.26:** Dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P$  der Transferionisation integriert über alle Projektilstreuwinkel des Stoßsystem He<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =25 keV/u. Dargestellt ist Elektronenimpulsverteilung mit Blick auf die Streuebene, in welcher das Projektil nach rechts abgelenkt wird. Experimentelle Probleme während dieser Messung führten zu Schwierigkeiten bei der Rekonstruktion der Rückstoßionenimpulse in Ortsrichtung ( $p_{y,Rec}$  und  $p_{z,Rec}$ ). Die Kalibration der Elektronenimpulse ist einwandfrei, nur bei der Festlegung der Projektilstreuebene ist der Fehler größer.

Projektilelektron emittiert (Projectile Loss). Im zweiten Schritt findet ein Zweifachelektroneneinfang (DC) statt. In diesem Fall ist der DC resonant (Q=0) und somit ist auch der Wirkungsquerschnitt sehr groß. Erst durch den DC scheint die Reaktion einer echten Transferionisation zu entsprechen, da sowohl ein Ladungstransfer zum Projektil zu beobachten ist ( $_P$ He<sup>+</sup>), ein freies Kontinuumselektron (e) als auch ein nackter Targetkern ( $_T$ He<sup>2+</sup>) vorliegen. Dafür spricht, dass die Elektronen relativ symmetrisch um  $p_{z,e}=v_P$  verteilt sind. Bei noch niedrigeren Projektilgeschwindigkeiten, dargestellt in Abbildung 6.26, bleiben nur noch die "unbekannten" Elektronen übrig. Der Wirkungsquerschnitt für den resonanten DC nimmt mit niedrigeren Projektilgeschwindigkeiten weiter zu, genau wie die Wechselwirkungszeit; immerhin müssen mindestens 3 Wechselwirkungen erfolgen, gegenüber 2 für eine echte Transferionisation. Dargestellt in der Projektil- und zusätzlich auch in der Rückstoßionenstreuebene sind im Anhang weitere Elektronenimpulsverteilungen dargestellt.

Ein alternativer Erklärungsversuch geht von einem unbekannten Ionisationsprozess aus und betrachtet das im Projektil befindliche Elektron als vollkommen passiv. Für diesen Punkt spricht, dass im vergleichbaren Stoßsystem - He<sup>2+</sup>-He, 60 keV/u, TI1 - (Abbildung 6.24 a) eine ähnliche Struktur zu beobachten ist, diese jedoch gegenüber He<sup>+</sup> verkleinert wirkt. Die für He<sup>2+</sup>-Projektile niedrigeren Elektronenimpulse (die "Verkleinerung") könnten die Folge einer Post Collision Interaction (PCI) sein. Das im Ausgangskanal weiterhin einfach positiv geladene Projektil stellt für die emittierten Elektronen ein attraktives Potenzial dar, wodurch die gesamte Verteilung etwas geschrumpft wird. Andererseits passt dann der Vergleich zwischen He<sup>+</sup>- und H<sup>+</sup>-Projektilen nur mit besonderen Einschränkungen in das eben skizzierte Szenario. Für He<sup>+</sup> müssten insgesamt sehr viel engere Stoßparameter auftreten, da nur im Limit geringer Kernabstände He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> vergleichbare Potenzialverläufe aufweisen. Diese besonders engen Stoßparameter treten allerdings, wie der Blick auf die Streuwinkelverteilung in Abbildung 6.23 zeigt, nicht auf. Aus diesen Gründen ist der vorherige Deutungsversuch mit einem Projektil-loss gefolgt von einem Zweifachelektronentransfer (DC) am wahrscheinlichsten.

## 6.5 Two-Step-2-Prozesse (TS2)

Im letzten Unterkapitel konnte gezeigt werden, dass bei niedrigen Stoßgeschwindigkeiten ein beträchtlicher Anteil aller emittierter Elektronen nicht der klassischen Struktur einer Sattelpunktionisation entspricht. Am wahrscheinlichsten ist, dass sie aus einem unabhängigen Zweistufenprozess (TS2) stammen. Hierzu zählen alle Prozesse, die zu einem Elektronentransfer (ganz gleich ob kinematischer Einfang oder e-N-Thomas-Prozess) zusammen mit einer weiteren Projektil-Elektron-Wechselwirkung (einem Binary Encounter) führen. Durch PCI kann das emittierte Elektron zusätzlich in einen Projektilkontinuumzustand eingefangen werden (ECC). Ein direkter Vergleich zu Messungen der Ionisation wird auch nur bedingt möglich sein. Selbst beim Modell unabhängiger Elektronen und Ereignisse (IEM) sind für die Transferionisation andere Ergebnisse zu erwarten, da der Elektroneneinfang sehr selektiv einen bestimmten Stoßparameter erfordert. Prinzipiell ist die Ionisation einer Transferionisation ein kleiner spezieller Schnitt im Phasenraum, der durch Ionisation besetzt werden kann. Außerdem sind durch das weniger stark geladene, auslaufende Projektil PCI-Effekte wesentlich geringer als bei der Ionisation.

### 6.5.1 Electron Capture to Continuum - CUSP

Da der "Electron Capture to Continuum" (ECC), der Einfang in Kontinuumszustände des Projektils, durch Wechselwirkung zwischen dem emittierten Elektron und dem emittierten Projektil zustande kommt, wird er am ehesten im langsamsten untersuchten Stoßsystem zu finden sein. In Abbildung 6.27 ist für die Stoßsysteme 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He sowie 60 keV/u H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> die Energieverteilung des Elektrons dargestellt unter der Bedingung, dass das Elektron unter einem Beobachtungswinkel von  $\theta_e < 1^\circ$  (rot) bzw.  $\theta_e < 2,5^\circ$ (schwarz) senkrecht zur z-Achse emittiert wird; seine Transversalimpulse  $p_{\perp,e}$ minimal sind. Dies entspricht der üblichen Darstellung der Elektronenspektroskopie.



**Abbildung 6.27:** Elektronenenergieverteilung im Laborsystem für kleine Elektronenemissionswinkel um die Strahlachse (z)  $\theta_e <1^{\circ}$  (rot) bzw.  $\theta_e <2,5^{\circ}$  (schwarz), der TI1 für a) He<sup>2+</sup>/He bei 40 keV/u, b) He<sup>2+</sup>/He bei 60 keV/u, c) He<sup>+</sup>/He bei 60 keV/u und d) H<sup>+</sup>/He bei 60 keV/u. Der Pfeil skizziert die theoretische Elektronenenergie für einen Projektil-CUSP im Falle  $E_P=40$  keV bei  $E_{kin,e}=21,8$  eV bzw. für  $E_P=60$  keV/u bei  $E_{kin,e}=32,6$  eV. Die Spektren a/b  $\theta_e <1^{\circ}$  wurden zur größeren Deutlichkeit mit einem Faktor 2 multipliziert.

In den gezeigten Elektronenenergieverteilungen ist an der Stelle, an welcher der ECC liegen müsste ( $v_e=v_P$ ,  $E_{kin,e}=21,8$  eV bzw.  $E_{kin,e}=32,6$  eV), keine besonders ausgeprägte Struktur zu erkennen. In den Messungen mit H<sup>+</sup>- sowie He<sup>+</sup>-Projektilen ist bereits zu wenig Statistik, um überhaupt eine Aussage treffen zu können<sup>8</sup>. Am wahrscheinlichsten ist eine hierfür unzureichende Elektronenenergie- und Winkelauflösung, welche die sehr scharfe Struktur verschwimmen lässt. Ebenso die Möglichkeit, dass die Eichung nicht hundertprozentig exakt ist, sodass die Strahlrichtung wenige Grad neben der

 $<sup>^8</sup>$  Im integralen Spektrum der TI bei 40 keV/u He $^{2+}$  befinden sich rund 800 000 Ereignisse, verglichen mit nur 100 000 bzw. 300 000 Ereignissen der He $^+$ - und H $^+$ -Projektile.

tatsächlichen liegt, wurde in Betracht gezogen und durch andere "Beobachtungsfenster" überprüft. Aber das Resultat ist überall das gleiche - kein typischer CUSP-Peak. Dass der ECC mittels dispersiver Elektronenspektroskopie beobachtet werden kann, konnte in einer vergleichbaren Messung zur Transferionisation von Martinéz et al. bei 25 keV/u (He $^{2+}$ /He) unter 0° Beobachtungswinkel gezeigt werden [SMar02]. Bei einer Elektronenenergie von 13,6 eV, dies entspricht einem Elektronenimpuls von 1 a. u. bzw. der Projektilgeschwindigkeit  $v_e = v_P$ , wurde die typische CUSP-Form beobachtet. Prinzipiell tritt der ECC sogar bei Kollisionen mit neutralen Projektilen auf. In Experimenten zur Transferionisation von Bernardi et al. mit 70 keV/u H<sup>+</sup>-Projektilen (auf ein Helium-Target) wurde auch hier bei einer Elektronenenergie von 38 eV ein Peak beobachtet [GBer99]. Obwohl das Projektil neutral ist, kann es durch Dipolwechselwirkung - falls sich das Projektil in einem angeregten Zustand befindet - zum ECC kommen [LSar88]. Bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten können Elektronen auch bei  $v_P$  liegen, wenn sie durch eine Promotion entlang der S-Serie bei kleinen Kernabständen ins Kontinuum gelangen. Ihre Struktur wäre sehr ähnlich wie bei einem ECC. Allenfalls durch eine noch engere Bedingung auf die Transversalimpulskomponenten könnte zwischen S-Serien-Promotion und Coulombfokussierung differenziert werden.

### 6.5.2 Binary Encounter - BE

Der anschaulichste Prozess, der zu einer Transferionisation führt, ist ein Elektroneneinfang in Verbindung mit einer unabhängigen Zwei-Körper-Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron. Wie aus Unterkapitel 4.3.3 bekannt ist, wird sich das Elektron beim idealisierten Stoßprozess auf der Kugeloberfläche mit einem Durchmesser von  $v_P$  und dem Mittelpunkt  $v_{z,e} = v_P$  aufhalten; im Projektilsystem wird daraus eine Kreislinie, welche - vernachlässigt man den Transversalimpulsübertrag aufgrund des Elektroneneinfangs - immer nur auf der linken Seite besetzt werden kann. Für die niedrigen Stoßgeschwindigkeiten bis 150 keV/u wurden die Elektronenverteilungen im Projektilstreusystem in den Abbildungen 6.24 und 6.25 gezeigt. Schon bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten war aufgefallen, dass die Elektronenverteilung nicht der Kreislinie des idealen BE folgt, sondern viel weiter zur Strahlachse hin verschoben ist. Weitere Wechselwirkungen mit dem auslaufenden Projektil (PCI) können hierfür nur im Falle der He<sup>2+</sup>-Projektile eine gute Begründung sein. Allerdings zeigt sich die gleiche Abweichung von der BE-Näherung auch bei höheren Geschwindigkeiten sowie in allen Fällen ebenso für neutrale Ejektile. Daher wird im nächsten Abschnitt die Binary Encounter-Näherung des freien Elektrons weiter verfeinert.

#### 6.5.2.1 Binary Encounter mit Energieverlust

An die Erläuterungen aus Unterkapitel 4.3.3 anknüpfend zeigt sich, dass bei den untersuchten Projektilgeschwindigkeiten die klassische Binary Encounter-Näherung erst ab etwa  $v_P>3$  a. u. annähernd erfüllt ist. Je nachdem, ob die Ionisation vor oder nach dem Elektronentransfer geschieht, muss das Elektron unterschiedliche Bindungsenergien überwinden. Diese Inelastizität des Targets berücksichtigt die Näherung des Binary Encounters (**BE-Q**) nach Gleichung 4.78 folgendermaßen:

$$p_{z,e} = \sqrt{2m_e v_P^2 + Q - p_{\perp,e}^2 \pm 2m_e v_P \sqrt{v_P^2 + Q - p_{\perp,e}^2 + \frac{Q^2}{4v_P^2}}}$$
(6.2)

Tritt die Ionisation als erstes ein, so beträgt Q=-0,9 a. u., die Bindungsenergie des 1. im Grundzustand gebundenen Elektrons. Folgt die Ionisation jedoch im Anschluss an den Elektronentransfer, so muss das Elektron dem He<sup>+</sup>-Targetionenrumpf entkommen und dabei eine Bindungsenergie von Q=-2,0 a. u. überwinden. Da nach einer Begründung für die geringeren Elektronentransversalimpulse  $p_{\perp,e}$  gesucht wird und für diese ein großer Energieverlust verantwortlich gemacht wird, wird im Folgenden nur der Fall Q=-2,0 a. u. - erst Einfang, dann Ionisation - betrachtet.

Ein weitere Verfeinerung des BE-Modells, zugeschnitten speziell auf die Transferionisation, wurde im Jahre 2003 von L. Schmidt vorgeschlagen [LSch03a, LSch03b]. Die Grundidee basiert zunächst auf einem zentralen Stoß zwischen Projektil und Elektron. Dieses durch den BE hochenergetische Elektron muss nicht nur seine Bindungsenergie aufbringen, um ins Kontinuum zu gelangen, sondern gleichzeitig auch noch die kinetische Energie des einzufangenden Elektrons, um es auf Projektilgeschwindigkeit zu beschleunigen. Im Rahmen der Quantenmechanik kann man diesen "Binary Encounter *mit Energieverlust*", **BE-E**, folgendermaßen erklären: Im Rahmen der Unschärferelation befindet sich das eine Elektron in einem virtuellen Zustand und besitzt die passende Impulskomponente, so dass es gut eingefangen werden kann. Das zweite Elektron, welches sich ebenfalls in einem virtuellen Zustand befindet, ist es, um die Erhaltungssätze nicht zu verletzen, welches durch den Stoß mit dem Projektil ionisiert wird. In der Summe müssen beide die Gesamtbindungsenergie von Helium (2,9 a. u.) ergeben. Allerdings muss dieser Zustand so kurzlebig sein, dass im zeitlichen Mittel wieder eine gleichmäßige Energieaufteilung der Elektronen vorliegt um sie ununterscheidbar zu machen. Dieses Modell verwendet in einfacher Weise eine Radialkorrelation der Targetelektronen im Anfangszustand. Während der kinematische Einfang dafür sorgt, dass die Geschwindigkeiten von Elektron und Projektil zusammenpassen, wird über die Energiebilanz nichts gesagt. Durch den Beschleunigungsmechanismus des einzufangenden Elektrons wird der Wirkungsquerschnitt für den Elektroneneinfang bei einer Transferionisation gegenüber dem Modell unabhängiger Prozesse (IEM) erhöht. Der zusätzliche Energieverlust, den das gesamte Targetsystem aufwenden muss, um das einzufangende Elektron auf Projektilgeschwindigkeit zu beschleunigen, beträgt:

$$\Delta E_{Capture,e} = \frac{v_e^2}{2m_e} - Q'_{Rec} \tag{6.3}$$

wobei  $Q'_{Rec}$  die Ionisationsenergie für das einzufangende Elektron ist, also, je nachdem von welchem Elektron man zunächst ausgeht, -0,9 a. u. (24,5 eV) oder -2,0 a. u. (54,4 eV). Berücksichtigt man diesen Term in Gleichung 4.77, gilt für die kinetische Energie des freien Elektrons:

$$E_{kin,e} = E_{kin,e}^{BE} - \Delta E_{Capture,e}$$
(6.4)

bzw. ausgeschrieben

$$E_{kin,e} = 2v_P^2 m_e \cos \theta_{eP} - \frac{v_P^2}{2m_e} + Q$$
 (6.5)

wobei Q hier wiederum die Gesamtenergiebilanz darstellt (für He<sup>2+</sup> im Grundzustand Q=-0,9), da beide Elektronen die Bindungsenergie des Targets überwinden müssen, gleichzeitig aber auch durch den Einfang ins Projektil wiederum Energie gewinnen. Sobald die Projektilgeschwindigkeit groß ist, kann Q wieder vernachlässigt werden.

Für eine Projektilgeschwindigkeit von  $v_P=1$  a. u. und Q=-0.9 a. u. ist in Abbildung 6.28 die Elektronenverteilung des idealisierten Binary Encounters, des BE mit berücksichtigter Bindungsenergie (BE-Q), sowie des Binary Encounters mit Energieverlust (BE-E) skizziert. Deutlich zu erkennen ist, dass in beiden Fällen dem gestoßenen Elektron viel Energie entzogen wird, was zu geringeren Transversal- und Longitudinalimpulsen führt. Wird eine Ionisation aus dem He<sup>+</sup>-Targetionenrumpf (Q=-2,0 a. u.) angenommen, so ist für den BE-Q eine minimale Projektilgeschwindigkeit von 1,1 a. u. erforderlich, um



**Abbildung 6.28:** Skizzierte Elektronenverteilung für den idealisierten Binary Encounter  $\blacksquare$ , den BE mit Berücksichtigung der aufzuwendenden Bindungsenergie • (BE-Q), sowie den BE mit Energieverlust für eine Transferionisation  $\blacktriangle$  (BE-E) für Q=-0,9 a. u. und  $v_P$ =1 a. u., berechnet nach den Gleichungen 6.2 und 6.5.

die Kontinuumsgrenze überwinden zu können. Für eine BE-E mit Projektilanregung (ebenfalls Q=-2,4 a. u.) ist sogar  $v_P \ge 1,3$  a. u. für eine Ionisation erforderlich. In beiden Fällen sind die Transversalimpulse sehr klein, etwa  $p_{\perp,e} \approx 0, 2 \cdot v_P$  und die Verteilung ähnelt sehr den "Bananen" der Sattelpunktionisation. Des Weiteren lässt sich erklären, weshalb für eine Transferionisation mit Projektilanregung (TI2) im 40 keV/u He<sup>2+</sup>-He-Stoß (Abbildung 6.19) kein Anzeichen für einen Binary Encounter zu sehen war, im Gegensatz zur TI1 (Abbildung 6.16).

Im Limit hoher Projektilgeschwindigkeiten kann in beiden Fällen der Q-Wert vernachlässigt werden. Für den BE-Q führt dies dazu, dass sich die Verteilung an den idealisierten Binary Encounter anschmiegt (siehe Abbildung 6.31 a). Für den Binary Encounter mit Energieverlust (BE-E) beträgt der maximal mögliche Impuls des Elektrons in Strahlrichtung  $p_{z,e} = 1,73 \cdot v_P$ . Die fehlende Energie (in Form des geringeren Impulses) benötigt das einzufangende Elektron um auf Projektilgeschwindigkeit beschleunigt zu werden.

Aus den Elektronenimpulsverteilungen der Abbildung 6.24 bei Projektilgeschwindigkeiten bis  $v_P \leq 2,5$  a. u. ist zu ersehen, dass weder BE-E noch BE-Q für sich allein mit den gezeigten Daten übereinstimmen. Vielmehr ist für He<sup>+</sup> eine gute Übereinstimmung mit dem BE-E-Modell zu verzeichnen; während bei den nackten Projektilionen H<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup> deutlich mehr Gemeinsamkeiten mit dem Binary Encounter mit Energieverlust, BE-Q, vorhanden sind. Für die Messungen bei 60 keV/u ist allerdings im BE-Q-Modell ein fließender Übergang zu der Bananen-Struktur der Sattelpunktionisation zu verzeichnen.

Für hohe Projektilgeschwindigkeiten, über  $E_P \ge 300 \text{ keV/u}$ , ist in den Abbildungen 6.29 und 6.30 die Elektronenverteilung dargestellt - diesmal aller-



**Abbildung 6.29:** Integrale Elektronenimpulsverteilung in der Projektilstreuebene (Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$ ) für verschiedene Projektile und Energien ( $E_P$ =300, 450 bzw. 630 keV/u) der TI1 und TI2. Skizziert sind darüber hinaus die Linien des idealen Binary Encounters (rote punktierte Kreislinie), des BE-Q (schwarzgestrichelte Linie) nach Gleichung 6.2 sowie des BE-E (schwarze Linie) nach Gleichung 6.5.



**Abbildung 6.30:** Integrale Elektronenimpulsverteilung mit Blick in Projektilflugrichtung (Zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{y,e}^{\Sigma_P}$ ) für verschiedene Projektile und Energien ( $E_P$ =300, 450 bzw. 630 keV/u) der TI1 und TI2.



**Abbildung 6.31:** Skizzierte Elektronenverteilung für a) den BE-Q sowie b) den BE-E für jeweils Q=-0,9 a. u. und verschiedene Projektilgeschwindigkeiten nach den Gleichungen 6.2 und 6.5.

dings nicht in Einheiten von  $v_P$ , sondern in atomaren Einheiten des Impulses. Wie schon zuvor bei niedrigeren Projektilgeschwindigkeiten ist hier ebenfalls eine Verschiebung hin zur Strahlachse festzustellen. Außerdem findet die Elektronenemission in allen Fällen einigermaßen in einer Ebene statt, wie die Impulsverteilungen in  $p_{x,e}^{\Sigma_P} - p_{y,e}^{\Sigma_P}$ -Ansicht zeigen. Sofern der Elektroneneinfang nur zu einem geringen Transversalimpuls führt, muss sich das Elektron per Definition nach einer Projektil-Elektron-Wechselwirkung in der Projektilstreuebene befinden. Die y-Richtung ist dann ein Maß für den Impulsübertrag aufgrund des SC und der zusätzlichen Kern-Kern-Wechselwirkung während des BE-Stoßes.

Sowohl bei bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten (Abbildung 6.24), als auch bei hohen zeigt sich, dass die Elektronenverteilungen für H<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektile eher dem Binary Encounter mit Energieverlust (BE-E) folgen. Im Gegensatz dazu weichen die Elektronenverteilungen der He<sup>+</sup>-Ionen von dieser Näherung etwas ab und tendieren zu größeren Transversalimpulsen. Sie werden besser von der skizzierten BE-Q- bzw. der klassischen Binary Encounter-Näherung beschrieben. Allerdings ist der Unterschied zwischen diesen beiden Näherungen aufgrund der hohen Projektilenergie und der dadurch vernachlässigbar kleinen Bindungsenergie nur minimal.

Der Endzustand des Projektils (TI1 oder TI2) hat bei diesen hohen Projektilgeschwindigkeiten keinen sichtbaren Einfluss mehr auf die Elektronenverteilung. Zwischen TI1 und TI2 beträgt der Unterschied im Q-Wert immerhin 1,5 a. u., jedoch führt dies bei 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He lediglich zu einem um 0,26 a. u. geringeren Impuls longitudinaler Richtung<sup>9</sup>. Daraus resultierende Unterschiede könnten allenfalls bei Elektronen mit maximalen Longitudinalimpulsen genauer untersucht werden. Da ein solcher zentraler Stoß äußerst unwahrscheinlich ist und diese Elektronen nicht beobachtet wurden, kann keine Aussage über den Einfluss des elektronischen Endzustandes auf die Elektronenverteilung bei hohen Projektilgeschwindigkeiten gemacht werden. Keines der BE-Modelle beschreibt die Elektronen zu kleineren Transversalimpulsen hin zur Strahlachse verschoben. PCI mit dem Projektil können dies nur bedingt erklären, da die Abweichungen auch bei sehr großen Projektilgeschwindigkeiten auftreten.

Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten - siehe Abbildung 6.29 - ist überdies ein rückwärtiger Beitrag in der Elektronenemission zu beobachten, welcher mit steigender Projektilgeschwindigkeit zunimmt. Wäre dies der in (e, 2e)-Prozessen zuerst entdeckte Recoil-Peak, müsste er punktgespiegelt zum BE-Ring liegen, also zu positiven  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$ -Werten und nicht symmetrisch um 0. Außerdem müsste er einen festen Bruchteil der Intensität des Binary-Peaks (Vorwärtselektronenemission) aufweisen, da die zusätzliche Streuung des Elektrons am Targetkern für diesen Recoil-Peak verantwortlich ist. Besonders deutlich ist dies für das Stoßsystem 630 keV/u H<sup>+</sup>/He zu sehen. Hier werden die meisten Elektronen in Rückwärtsrichtung emittiert, während fast keine Elektronen mehr aus aus einer direkten Projektil-Elektron-Wechselwirkung (BE) stammen.

#### 6.5.2.2 Bilanz der Transversalimpulse

Relativ unbeachtet in allen bisherigen Diskussionen blieb der Targetkern. Stellt dieser nur das Potenzial dar, in welchem sich die Elektronen bewegen, oder existiert neben der im BE-E-Modell verwendeten Radialkorrelation eine weitere Korrelation zwischen Elektron und Targetkern? Wird die Ionisation durch das Projektil als eine vom Einfang unabhängige Wechselwirkung betrachtet, welche ausschließlich zwischen dem Projektilion und dem

 $<sup>^9</sup>$ Nach der BE-Q-Näherung beträgt der maximale Elektronenlong<br/>itudinalimpuls für  $Q{=}{-}0{,}9$ a. u. $p_{z,e}{=}5{,}85$  und für  $Q{=}{-}2{,}4$ a. u. $p_{z,e}{=}5{,}59$ a. u.

Targetelektron stattfindet, bleibt der Targetkern Zuschauer. Die Transversalimpulse des Rückstoßions  $p_{\perp,Rec}$  sind dann eine Folge des Elektroneneinfangs oder einer zusätzlichen Kern-Kern-Wechselwirkung.

Für das Stoßsystem 300 keV/u H<sup>+</sup> ist in Abbildung 6.32 die Elektronenverteilung mit Blick auf die Projektilstreuebene dargestellt. In Abbildung 6.33 ist die Verteilung der Rückstoßionenimpulse in der Projektilstreuebene für die gleichen Streuwinkelfenster gezeigt. Gut zu erkennen ist, dass für Streuwinkel kleiner 0,2 mrad amu die Elektronen hauptsächlich mit geringem Impuls rückwärts emittiert werden. Diese korrespondieren mit einem Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}$ , welcher kleiner als  $-Q/v_P - v_P/2$  ist (siehe hierzu die Erörterungen in Unterkapitel 6.3). Der Rückstoßionentransversalimpuls  $p_{x,Rec}^{\Sigma_P}$ dieser Elektronen entspricht exakt dem auf das Projektil übertragenen Impuls, dargestellt durch die beiden senkrecht verlaufenden Linien. Der Transversalimpuls wird hiernach hauptsächlich zwischen Projektil und Targetkern ausgetauscht. Auf diese - mit dem Shake-off-Prozess assoziierten - Elektronen wird später in Unterkapitel 6.7 nochmals näher eingegangen. Bei ganz großen Streuwinkeln  $\theta'_{P}>0.65$  mrad amu (Abbildungen g und h) ist in der Elektronenverteilung keine dem Binary Encounter auch nur annähernd ähnliche Verteilung zu erkennen. Projektilstreuwinkel größer als  $m_e/m_P=0.55$  mrad and auch nur durch eine zusätzliche Wechselwirkung möglich. Der Elektronentransfer (SC) kann zu insgesamt größeren Transversalimpulsen führen; für sich genommen bis  $m_e/m_P=0.55$  mrad amu und insgesamt zu  $2 \cdot m_e/m_P = 1,1$  mrad amu. Durch eine Kern-Kern-Wechselwirkung können - nach Rutherford - beliebig große Streuwinkel erreicht werden. Beide sind zunächst nicht in ihrer Richtung gegenüber der BE-Kollision ausgezeichnet. Bei großen Projektilstreuwinkeln ist ebenfalls der Shake-off wieder der Prozess, welcher den Reaktionskanal dominiert - wenn auch absolut sehr viel schwächer als bei kleinen Streuwinkeln. Gestützt wird diese These ebenfalls durch die Rückstoßionenimpulsverteilung, welche sowohl den entsprechenden Impuls in Strahlrichtung aufweist aber auch den komplementären Transversalimpuls zum Projektil.

Im mittleren Projektilstreuwinkelbereich  $0,2<\theta'_P<0,65$  mrad amu ist zu erkennen, dass die Elektronenverteilung sich mit steigendem Streuwinkel von der Strahlachse (ab Abbildung 6.32 b) nach und nach dem klassischen BE-Ring annähert. Sofern das Modell des Binary Encounters mit Energieverlust (BE-E) gilt, so nur für Elektronen, welche in Prozessen mit kleinen Projektilstreuwinkeln entstehen. Daraus lässt sich folgern, dass das BE-E-Modell nur eingeschränkt gilt, oder eher zufällig bei integraler Betrachtung mit einem Großteil der untersuchten Stoßsysteme übereinstimmt! Bei gleicher Projektil-



**Abbildung 6.32:** Elektronenimpulsverteilung in der Projektilstreuebene (Dreifachdifferenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =300 keV/u und verschiedenen Streuwinkelfenstern  $\theta'_P$ . Das Projektil wird nach rechts gestreut. Skizziert sind darüber hinaus der ideale Binary Encounter (rote punktierte Kreislinie), der BE-Q (schwarzgestrichelte Linie) nach Gleichung 6.2 sowie der BE-E (schwarze Linie) nach Gleichung 6.5. Die schwarzen senkrechten Linien entsprechen dem alleinigen transversalen Impulsübertrag des Projektils auf das Elektron für den jeweils betrachteten Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$ . In Abbildung f, g und h befinden sich die senkrechten Linien außerhalb der dargestellten Impulse.



**Abbildung 6.33:** Rückstoßionenimpulsverteilung in der Projektilstreuebene (Dreifachdifferenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =300 keV/u und verschiedenen Streuwinkelfenstern  $\theta'_P$ . Die schwarzen senkrechten Linien links des Ursprungs entsprechen dem alleinigen Transversalimpulstranser zwischen Projektil und Targetkern für den jeweils betrachteten Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$  - in dieser Darstellung wird das Projektil nach rechts gestreut. Die horizontalen Linien skizzieren:  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) und  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  (cyan) mit Q=-2,4 a. u.

geschwindigkeit zeigt die Elektronenverteilung für He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektile ein vergleichbare Struktur (die stete Annäherung der Verteilung an den klassischen BE-Ring) wie für die dargestellten H<sup>+</sup>-Projektile (siehe hier die weiteren multi-differenziellen Spektren im Anhang D).

Gut zu erkennen ist, dass sich die Elektronenverteilung zwischen 0,3 und 0,65 mrad·amu (Abbildungen d-f) nur wenig ändert und dies, obwohl der Transversalimpuls des Projektils zunimmt. Einem unabhängigen 2-Stufen-Prozess folgend, müsste das Elektron auch entsprechend weiter ausgelenkt werden. Gleichzeitig ist das Rückstoßion weder Beobachter (Transversalimpuls 0), noch übernimmt es den gesamten Transversalimpuls; vielmehr besitzen die meisten Rückstoßionen einen Transversalimpuls, der kleiner ist, als durch eine Kern-Kern-Streuung zu erwarten wäre (siehe Abbildungen 6.33 cf) - ein Umstand, wie er ebenfalls von Mergel [VMer96] beobachtet wurde. Der Transversalimpuls des Projektils ist somit eine Folge aus einer Projektil-Targetkern- und einer Projektil-Elektron-Streuung.



**Abbildung 6.34:** Skizzierte Rückstoßionenimpulsverteilung a) mit Blick auf die Projektilstreuebene ( $p_{x,Rec}^{\Sigma_P}$  vs.  $p_{z,Rec}$ ) und b) in Blickrichtung des Projektils ( $p_{x,Rec}^{\Sigma_P}$  vs.  $p_{y,Rec}^{\Sigma_P}$ ), wie sie nach einem Modell unabhängiger Teilchen und Stöße (IEM und IPM) zu erwarten wäre. Den Hauptbeitrag zum Transversalimpuls liefert die Kern-Kern-Streuung, während die Projektil-Elektron-Streuung lediglich für eine rotationssymmetrische Verschmierung um das Projektil sorgt.

Aber: Weshalb ist bei zwei unabhängigen Streuvorgängen (Projektil-Elektron und Projektil-Targetnukleus) immer noch eine klare Ausrichtung der Elektronenverteilung am BE-Ring zu beobachten und keine um die Strahlachse isotrope Verteilung? Umgekehrt vom Standpunkt der Rückstoßionen aus betrachtet lautet die Frage: Wieso ist bei einer Kern-Kern-Streuung, welche innerhalb der senkrechten skizzierten Linien liegen müsste, die Verteilung ausschließlich zu kleineren Transversalimpulsen verschoben? Innerhalb des Projektilstreusystems sollte die auf die Kern-Kern-Wechselwirkung folgende Projektil-Elektron-Streuung für eine um die Kern-Kern-Streuung rotationssymmetrische Verteilung sorgen, wie es nach Abbildung 6.34 zu erwarten wäre. Ausgehend von einer Kern-Kern-Streuung, die den Hauptbeitrag bei großen Transversalimpulsen bildet, sorgt in einem Modell unabhängiger Stöße und Teilchen (IEM und IPM) der BE für eine um die Strahlachse rotationssymmetrische Verteilung.

Im Gegensatz zu dieser Erwartung ist - siehe Abbildung 6.33 - zu beobachten, dass das Rückstoßion stets zu kleineren Transversalimpulsen, also nach rechts, verschoben ist. Ein Hinweis hierauf wurde schon bei der Betrachtung der Quotienten der streuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitte von TI und SC in Unterkapitel 6.2.3 (siehe Abbildung 6.8 und 6.9) gefunden. Dort waren die Maxima zu Streuwinkeln kleiner als die erwarteten  $\theta'_P$ =0,55 mrad·amu verschoben. Die Ursache hierfür ist mit großer Wahrscheinlichkeit in einer Anfangszustandskorrelation des Targets zu suchen.

# 6.6 Two-Step-1-Prozess (TS1)

Der einzige wirklich denkbare Two-Step-One-Prozess (TS1) ist der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess. Nach den Erläuterungen der physikalischen Grundlagen sowie der experimentellen Befunde von Mergel [VMer96] ist eine Beobachtung des e-e-Thomas-Prozesses, wenn überhaupt, bei der höchsten hier gemessenen Projektilenergie, 630 keV/u bzw.  $v_P$ =5,02 a. u., zu erwarten. Eine Überhöhung des streuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitts bei  $\theta'_{P}=0.55$  mrad amu, welches Kennzeichen für einen signifikanten Beitrag des e-e-Thomas-Prozesses zum Transferionisationsquerschnitt ist, ist in Abbildung 6.7 nur für das Stoßsystem  $E_P$ =630 keV/u H<sup>+</sup>/He schwach zu beobachten. Das beobachtete Maximum kann aber auch das Resultat eines Elektron-Kern-Thomas-Prozesses sein, welcher bei  $\theta'_P=0,47$  mrad amu liegt. Allenfalls bei den Quotienten aus Transferionisation und Elektroneneinfang war ein steigendes Verhältnis um 0,5 mrad amu zu verzeichnen, welches allerdings auch schon bei niedrigeren Projektilenergien (150 keV/u) auftrat - einem Energiebereich, bei welchem Thomas-Prozesse ganz sicher keinen relevanten Beitrag liefern.

In Abbildung 6.35 ist die Elektronen- und Rückstoßionenimpulsverteilung mit Blick auf die Projektilstreuebene für den Streuwinkelbereich von  $0,40 < \theta'_P < 0,70 \text{ mrad} \cdot \text{amu}$  für alle drei gemessenen Projektile (H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>) dargestellt. Das Streuwinkelfenster wurde bewusst großzügig gewählt,



**Abbildung 6.35:** Dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P$  der TI1 für H<sup>+</sup>-, He<sup>+</sup>- sowie He<sup>2+</sup>-Projektile bei einer Einschussenergie von 630 keV/u ( $v_P$ =5,02 a. u.) für einen massebereinigten Projektilstreuwinkel von  $0,40<\theta'_P<0,70$  mrad·amu. Dargestellt sind die Impulsverteilungen von Elektron (linke Spalte) und Rückstoßion (rechte Spalte) in der Projektilstreuebene. Die senkrechten Linien entsprechen den Transversalimpulsen aufgrund einer ausschließlichen Streuung mit dem Projektil. Die rot gepunktete Kreislinie in der Elektronenverteilung entspricht dem klassischen BE, während die schwarz gestrichelte Kreislinie dem kinematischen Rücken 2. Ordnung (nach Gleichung 4.61) unter Vernachlässigung des Q-Wertes entspricht. Der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess befindet sich an der durch das Kreuz skizzierten Position.

da nach den Erkenntnissen des letzten Abschnitts auch immer noch eine zusätzliche Kern-Kern-Abstoßung eine Rolle spielt.

Nach den Grundlagen des Unterkapitels 4.2.3 werden Elektronen, welche durch den Elektron-Elektron-Thomas-Prozess ins Kontinuum gelangen, im Projektilstreusystem an der Stelle  $p_{x,e}^{\Sigma_P} = v_P$  und  $p_{z,e} = 0$ , in Abbildung 6.35 durch ein Kreuz gekennzeichnet. Es finden sich einige wenige Elektronen im entsprechenden Bereich des Phasenraumes für H<sup>+</sup>-Projektile. Der Targetkern ist lediglich Zuschauer und erfährt keinen Impuls, weder longitudinal noch transversal. Um den Ursprung  $p_{x,Rece}^{\Sigma_P} = 0$  und  $p_{z,Rec} = 0$  befinden sich übereinstimmend einige wenige Rückstoßionen. Der von Mergel beschrittene Weg, den Wirkungsquerschnitt des e-e-Thomas-Prozesses als Bruchteil des Rückstoßionenlongitudinalimpulses ( $p_{z,Rec}$ ) zu bestimmen, ist vor allem im Hinblick auf die Erkenntnisse der letzten Abschnitte sehr zweifelhaft. Erstens stimmt die Rückstoßionenlongitudinalimpulsverteilung ( $p_{z,Rec}$ ) nicht mit den Daten dieser Arbeit überein, und zweitens umfasst die gewählte kinematische Bedingung vor allem Elektronen, die zuvor als Elektronen aus einem BE-Stoß eindeutig identifiziert wurden.

Zusammenfassend konnte bei einer Projektilenergie von 630 keV/u kein signifikanter Beitrag des Elektron-Elektron-Thomas-Prozess zum Gesamtwirkungsquerschnitt beobachtet werden. Entlang der Funktion 4.61, welche den kinematischen Rücken zweiter Ordnung (KR2) beschreibt, ist ebenfalls keine besondere Häufung der Elektronenverteilung festzustellen - für keines der untersuchten Projektile. Die von Mergel verwandte kinematische Bedingung zur Bestimmung des totalen Wirkungsquerschnitts des Elektron-Elektron-Thomas-Prozesses [VMer96] ist daher stark anzuzweifeln. Während bei Mergel der Anteil des e-e-Thomas-Prozesses für das Stoßsystem H<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =630 keV/u etwa 18 Prozent beträgt, befinden sich deutlich weniger als 1 Prozent<sup>10</sup> der Ereignisse auch nur in der Nähe des erwarteten Impulses. Ebenfalls die von Horsdal et al. gedeutete Überhöhung des projektilstreuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitts bei  $\theta'_P = 0.55$  mrad amu für H<sup>+</sup>/He bis  $E_P = 500$  keV/u als Folge des Elektron-Elektron-Thomas-Mechanismus [EHor86] muss spätestens mit den Erkenntnissen dieses Unterkapitels als falsch angenommen werden.

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup> Innerhalb eines Radius von p=2,0 a. u. um die idealisierte Position des Elektron-Elektron-Thomas-Prozesses befinden sich bei den Elektronen 80 und für Rückstoßionen 20 Ereignisse von insgesamt über 9.000 Ereignissen.

## 6.7 Shake-off und Korrelationseffekte

In den longitudinalen Rückstoßionenimpulsspektren der Abbildungen 6.10, 6.11 und 6.12 zeigte sich ein mit zunehmender Projektilgeschwindigkeit stetig wachsender Beitrag, der als Folge eines Shake-off-Prozesses (siehe Unterkapitel 4.3.6) gedeutet wurde. Damit einhergehend trat in der Elektronenimpulsverteilung ein scharf begrenzter Beitrag von Elektronen auf, die in Rückwärtsrichtung emittiert wurden und vor allem bei kleinen Projektilstreuwinkeln (sehr große Stoßparameter) den Wirkungsquerschnitt dominieren. Dieser konnte nicht mit dem aus Ionisationsexperimenten (e, 2e) bekannten Recoil-Peak erklärt werden. Die Elektronenverteilung für 630 keV/u H<sup>+</sup>-Projektile unter der Bedingung kleiner Projektilstreuwinkel (0 <  $\theta'_P$  < 0,25 mrad amu) ist in Abbildung 6.36 dargestellt.



**Abbildung 6.36:** Elektronenimpulsverteilung der TI für H<sup>+</sup>/He bei  $E_P$ =630 keV/u unter der Bedingung kleiner Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$ <0,25 mrad amu dargestellt im Projektilstreusystem  $\Sigma_P$  mit a) Blick auf die Streuebene  $d\sigma^2/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  b) Blick senkrecht auf die Strahlrichtung  $d\sigma^2/dp_{y,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  c) Blick mit dem Projektil  $d\sigma^2/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{y,e}^{\Sigma_P}$ 

Verglichen mit dem integralen Blick auf die Streuebene (Abbildung 6.29) bleibt fast nur der Anteil rückwärtig emittierter Elektronen übrig. Für ein Heliumatom mit einem 1s<sup>2</sup>-Grundzustand ist für den Shake-off-Prozess eine in allen drei Raumrichtungen symmetrische Verteilung um Impuls 0 zu erwarten. Zu sehen ist zwar eine nahezu isotrope Verteilung, jedoch liegt diese nicht bei  $p_{z,e}=0$  a. u., sondern ist um etwa 0,4 a. u. in Rückwärtsrichtung versetzt. Experimente zur Photodoppelionisation von Helium bei 450 eV oberhalb der Doppelionisationschwelle ergaben für den SO bei einer asymmetrischen Elektronenenergieaufteilung (448 eV und 2 eV) eine schwach anisotrope Verteilung des langsamen abgeschüttelten Elektrons [AKna05d]. Die Photoionisation selektiert diejenige Impulskomponente aus dem Anfangszustand, die dem Kontinuumsimpuls des freien Elektrons entspricht, welche wiederum durch die Photonenenergie bestimmt ist. Dies zeigt sich bereits beim totalen Ionisationswirkungsquerschnitt  $\sigma_{\gamma}^{SI} \propto E_{\gamma}^{-7/2}$  [VSch92]. Eine Elektronenenergie von 448 eV entspricht einer Geschwindigkeit (in atomaren Einheiten gleich dem Impuls) von 5,7 a. u. für das freie Elektron. Verglichen damit entfernt sich das eingefangene Elektron mit 5,0 a. u. Projektilgeschwindigkeit ähnlich schnell [JMcG95, TShi02, TPat03, HSch05a]. Für die Wahrscheinlichkeit der Emission eines Elektrons durch einen SO spielt es zunächst einmal keine Rolle, welcher Prozess das erste Elektron entfernt; sei es durch Photoabsorption, Elektroneneinfang in gebundene Projektilzustände durch velocity matching bzw. den Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus oder durch Stoßionisation (BE). Jedoch zeigen neuere Untersuchungen von Shi [TShi02] deutlich, dass die Elektronenimpulsverteilung des abgeschüttelten Elektrons von der Geschwindigkeit des 1. Elektrons abhängt.

Der Vergleich von Einfach- zu Doppeltargetionisation (He<sup>+</sup>/He<sup>2+</sup>) durch verschiedenste Projektile und Mechanismen (Stoßionisation, Elektronentransfer, Photoionisation [MSha85, JLev91, JLev93, NBer93, MSag95, LSpi95, JLev96, VMer97, AKhe98, JSam98, HSch02]) ergibt Werte zwischen 0,3 % und 3 %, allerdings mit relativ großen Fehlergrenzen. Allerdings ist dabei zu berücksichtigen, dass bei der Stoßionisation der Impuls des emittierten Elektrons nicht direkt an die Projektilgeschwindigkeit gekoppelt ist. Für Photoionisation und Elektroneneinfang, bei denen in erster Näherung das Elektron bereits im Anfangszustand den "passenden" Impuls besitzen musste, stimmt das Verhältnis (He<sup>+</sup>/He<sup>2+</sup>) gut überein und nähert sich dem Shake-off-Limit von 1,6 % an. Bei niedrigen Geschwindigkeiten tritt ein deutlicher Unterschied zwischen Photoionisation und Elektronentransfer auf. Während bei der Photoionisation die Geschwindigkeit des emittierten Elektrons bekannt ist, hängt diese beim Elektronentransfer vom zugrunde gelegten Modell ab und schwankt zwischen  $v_P/2$  und  $v_P$ .

Basierend auf den experimentellen Untersuchungen von Mergel wurde die rückwärtige Elektronenemission als Fingerabdruck der Grundzustandswellenfunktion mit nicht-s<sup>2</sup>-Anteilen gedeutet [VMer01, HSch03a, HSch05b]. In Multikonfigurationsrechnungen (MCI) bilden sie einen etwa 2-prozentigen Anteil am Helium-Grundzustand [TKin57]. Demnach wird durch den Elektroneneinfang gezielt ein bestimmter Teil des Grundzustandes selektiert. Dies ist die Impulskomponente des Elektrons, welche den größtmöglichen Überlapp mit einem gebundenen Projektilzustand besitzt. Im klassischen Bild des velocity-matchings ist es die Gleichheit der Geschwindigkeitsvektoren von Projektil und Elektron. Im Grundzustand wird der Impulsvektor eines Elektrons zu jedem Zeitpunkt von der Summe aus Kernimpuls und Impuls des zweiten Elektrons kompensiert. Dies zeigt sich auch darin, dass MCI-Wellenfunktionen zwingend auf nicht-s<sup>2</sup>-Anteile angewiesen sind beziehungsweise, dass andere Wellenfunktionsansätze immer auch Winkelkorrelation benötigen. Während der Geschwindigkeitsvektor des einzufangenden Elektrons in Vorwärtsrichtung - der Flugrichtung des Projektils - zeigt, hat das abgeschüttelte Elektron eine entgegengesetzte Vorzugsrichtung. Mit niedrigerer Projektilgeschwindigkeit kann man dann erwarten, dass das Elektron zu kleineren negativen z-Impulsen emittiert wird. Für H<sup>+</sup>-Projektile mit einer Energie von 300 keV/u ( $v_P$ =5,02 a. u.) war dies bereits beim integralen Blick auf die Streuebene in Abbildung 6.29 zu erkennen. Das Elektron besitzt hier nur einen Rückwärtsimpuls von etwa  $p_{z,e}$ =-0,2 a. u., gegenüber -0,4 a. u. für den Fall des mit 630 keV/u deutlich schnelleren Projektils.

Im Gegensatz zur Ionisation mittels Photoabsorption, welche die korrekten Elektronenenergien im Anfangszustand benötigt, wird durch den Einfang in Verbindung mit der Messung des Projektilstreuwinkels  $\theta'_P$  ein bestimmter Stoßparameter selektiert. Nach [LSch00] gilt für reine Rutherfordstreuung in atomaren Einheiten zwischen Stoßparameter  $b_R$  und Transversalimpuls  $(p_{\perp,Rec}$  bzw.  $p_{\perp,P})$  folgender Zusammenhang:

$$b_R = \frac{2}{v_P} \frac{1}{p_{\perp,P}} \cdot Z_P Z_{Rec}$$
(6.6)

mit  $Z_P$  und  $Z_{Rec}$  der Kernladungszahl von Projektil und Target (Recoil). Für das in Abbildung 6.36 betrachtete Streuwinkelintervall bis  $\theta'_P < 0,25$  mrad amu entsprechend eines Rückstoßionentransversalimpulses von  $p_{\perp,Rec}=2,3$  a. u. ergibt sich daraus ein Stoßparameter von  $b_R=0,35$  a. u., etwa ein Drittel des Abstandes des Bohrschen Elektronenradius' im H-Atom. Für ein abgeschirmtes Potenzial, wie es beim He<sup>+</sup>-Ion vorliegt, gilt nach [SHag82] zunächst:

$$b_{screened} = b_R \cdot \exp{-\frac{b_R}{3a}} \tag{6.7}$$

mit a dem Abschirmparameter:

$$a = \frac{0,88a_0}{\sqrt{Z_P^{2/3} + Z_T^{2/3}}}$$
(6.8)

Daraus ergibt sich der Stoßparameter zu  $b_{screened}$ =0,28 a. u., also nur geringfügig weniger als für ein unabgeschirmtes Potenzial. Wird statt des in Abbildung 6.36 verwendeten Streuwinkelfensters ein noch kleineres, bis 0,1 mrad, gewählt, welches dann noch immer ausschließlich rückwärtige Shake-off-Elektronen enthält, so ergibt sich ein Stoßparameter von  $b_R$ =0,87 a. u. beziehungsweise  $b_{screened}$ =0,51 a. u. für ein abgeschirmtes Potenzial. Allgemein gilt für die Photoionisation:

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} \simeq b_{\gamma} \cdot p \tag{6.9}$$

mit dem Drehimpuls des Photons  $\vec{l}=1$ . Um den "Stoßparameter"  $b_{\gamma}$  der Photoionisation bestimmen und in Relation zum Elektroneneinfang setzen zu können, wird der Impuls des Elektrons p (bzw. dessen Geschwindigkeit) gleich der Geschwindigkeit des Projektils  $v_P$  gesetzt. Für das vorgestellte Stoßsystem bei  $E_P=630$  keV/u ergibt sich ein "Stoßparameter" von  $b_{\gamma}=0,2$  a. u. für die Photoionisation. In dieser äußerst einfachen Abschätzung wird schon deutlich, dass der Elektroneneinfang wesentlich größere Stoßparameter selektiert als die Photoionisation. Allerdings tritt der Shake-off bei hohen Geschwindigkeiten nahezu bei allen Stoßparametern auf; am häufigsten jedoch bei kleinen Streuwinkeln - vergleichbar mit dem Elektroneneinfang.

Die Elektronenwinkelverteilung in der Projektilstreuebene für Elektronen mit Energien von  $5\pm2,5$  eV sowie  $20\pm5$  eV ist in Abbildung 6.37 für verschiedene Projektilstreuwinkel dargestellt [MSch05]. Ein Winkel von 0° entspricht der Vorwärts- und 180° der Rückwärtsrichtung; der Elektron-Elektron-Thomas-Mechanismus läge bei 90°. Die Balken entsprechen den im Rahmen dieser Arbeit erzielten experimentellen Resultaten und die Linien verschiedenen theoretischen Kurven, basierend auf den Erläuterungen aus Kapitel 4.4.3 und [AGod04], im Einzelnen:

- 1. punktierte Linie (blau): "Transfer First"-Prozess, ausschließlich mit ns<sup>2</sup>-Anteilen (n $\leq$ 5) im Grundzustand.
- 2. strichpunktierte Linie (magenta): Kohärente Summe von "Transfer First" und "Ionization First", ebenfalls nur mit ns<sup>2</sup>-Anteilen (n $\leq$ 5).
- 3. gestrichelte Linie (rot): Nur "Transfer First", jedoch mit höheren Drehimpulsbeiträgen (p<sup>2</sup>, d<sup>2</sup>, ...) in der Grundzustandswellenfunktion.
- durchgezogene Linie (grün): Kohärente Summe beider Teilprozesse, der "Transfer & Ionization First", zusätzlich mit non-s<sup>2</sup>-Anteilen.



**Abbildung 6.37:** Elektronenwinkelverteilung  $\theta_{z,e}^{\Sigma_P}$  der TI für 630 keV/u H<sup>+</sup>/He in der Projektilstreuebene (±20°) für Elektronen mit einer kinetischen Energie von a/b) 5±2,5 eV und c/d/e) 20±5 eV für verschiedene Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$ . Die Linien entsprechen einer FBA mit unterschiedlichen Wellenfunktionen des Heliumgrundzustandes und der am Stoß beteiligten Prozesse (Details siehe Text) [MSch05].

Die isotrope Winkelverteilung des 1. Prozesses (blau gepunktete Linie) folgt aus der Tatsache, dass der verwendete s<sup>2</sup>-Grundzustand ausschließlich Radial- und keine Winkelkorrelation enthält. Die Winkelverteilung des magenta-farbenen, strichpunktierten Graphen, der zusätzlich noch den BE-Prozess gefolgt von einem Shake-over für den Einfang enthält, sorgt bei kleinen Streuwinkeln nur für eine geringe Abweichung von der Isotropie - anschaulich die Übereinstimmung mit einem sehr weichen Projektil-Elektron-Stoß. Anhand Abbildung 6.37 e) ist besonders klar zu erkennen, dass diese Kurven der klassischen BE-Näherung mit einem Binary- (75°) und einem Recoil-Peak (250°) entsprechen. Trotz großer Fehlerbalken ist eindeutig keine Übereinstimmung zwischen den experimentellen Daten und diesen bei-



**Abbildung 6.38:** Vergleich der Elektronenwinkelverteilung  $\theta_{z,e}^{\Sigma_P}$  in der Projektilstreuebene (±20°) für Elektronen mit einer kinetischen Energie von tatsächlich 5±2,5 bzw. 20±5 eV mit den alten Daten aus [MSch05] (10±5 bzw. 40±10 eV) des Stoßsystems 630 keV/u H<sup>+</sup>/He.

den Graphen zu sehen; wenn überhaupt dann bei großen Elektronenenergien und Projektilstreuwinkeln (Abbildung d). Erst durch eine bessere Grundzustandswellenfunktion, die auch höhere Drehimpulskomponenten, die sog. *nicht-s*<sup>2</sup>-Anteile, berücksichtigt, können vor allem die in Rückwärtsrichtung emittierten Elektronen (180°) sehr gut reproduziert werden. Insgesamt wirkt sich die kohärente Überlagerung mit der "Ionization First"-Amplitude erst bei größeren Streuwinkeln als notwendig für die Beschreibung aus. Dies steht in guter Übereinstimmung mit allen bisherigen Erkenntnissen, dass bei kleinen Streuwinkeln die Elektronenemission als Folge eines Shake-offs dominiert, während bei größeren Streuwinkeln der BE die Elektronenverteilung bestimmt. Da im zweiten Fall die Elektronenemissionsstruktur durch den BE geprägt wird und der Shake-over nur erforderlich ist, um in einer First-Born-Approximation (FBA) überhaupt eine Transferionisation zu ermöglichen, ist eine vergleichbare Struktur auch für ein Modell unabhängiger Ereignisse zu erwarten.

Die in Abbildung 6.37 gezeigten Daten sind nicht identisch mit denen in [MSch05] publizierten Daten. Während der Aufbereitung der Daten zum Abschnitt über den ECC zeigte sich, dass in der der Publikation zugrunde liegenden Auswertung ein Faktor 2 bei der Energieberechnung vergessen worden war. In Abbildung 6.37 wurde dieser bereits korrigiert. In Abbildung 6.38 wurden die Elektronenwinkelverteilungen aus [MSch05] - mit den in Wirklichkeit größeren Elektronenenergien - verglichen mit den korrekten Energiefenstern, für welche auch die Theoriekurven berechnet wurden. Die grundsätzliche Struktur einer rückwärtigen Elektronenemission bleibt vorhanden, ebenso der Binary-Peak. Jedoch ist die statistische Signifikanz der Winkelverteilungen für die richtigen Energiefenster etwas geringer.

### 6.7.1 Andere Stoßsysteme

Bereits die integralen Elektronenimpulsverteilungen in der Projektilstreuebene zeigten, dass auch die Stoßsysteme He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-He bei hohen Projektilgeschwindigkeiten rückwärtige Elektronenemission zeigten. Jedoch ist die Gewichtung der einzelnen Beiträge (BE und SO) für die Projektile verschieden. Die Winkelverteilung des emittierten Elektrons für  $E_{kin,e}$ =5±2,5 (linke Spalte) und 20±5 eV (rechte Spalte) und mehrere Projektilstreuwinkel ist in Abbildung 6.39 dargestellt. Das Integral der Daten wurde auf 1 normiert.

Die größte statistische Aussagekraft besitzen die Daten für He $^+$ -Projektile, während sie für H $^+$  und He $^{2+}$  nahezu gleich ist. Das Maximum der Elekt-

ronenverteilung in Abbildung b) um  $\theta_{z,e}^{\Sigma_P} \approx 180^\circ$  ist nur für H<sup>+</sup>-Projektile besonders ausgeprägt, während es für beide Heliumprojektile sehr viel kleiner ist. Vorhanden ist es dennoch in allen drei Stoßsystemen, nur ist der Wirkungsquerschnitt für SO entweder kleiner oder der für BE sehr viel stärker gegenüber dem für H<sup>+</sup>-Projektile. Das in Abbildung a) deutlich sichtbare und sich in Abbildung b) abzeichnende Minimum der He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektile bei 180° bzw. 0/360° ist ein Artefakt des Loches im Impulsraum für  $p_{x,e}$ =0. Dieses wurde hervorgerufen, da der Schwerpunkt der Flugzeitverteilung des Elektrons einem ganzzahligen Vielfachen der Gyrationsperiode entspricht ( $t_e (p_{x,e} = 0) = n \cdot t_{Gyr}$ ). Ansonsten stimmen die Winkelverteilungen für alle drei verwendeten Projektile in ihrer Struktur, wenn auch nicht in ihren Amplituden, überein.



**Abbildung 6.39:** Elektronenwinkelverteilung der TI bzw. TI1 für  $E_P$ =630 keV/u und H<sup>+</sup> (schwarz), He<sup>+</sup>(rot) bzw. He<sup>2+</sup>-Projektile (grün) in der Projektilstreuebene (±20°) für Elektronen mit einer kinetischen Energie von a/b) 5±2,5 eV und c/d/e) 20±5 eV für verschiedene Projektilstreuwinkel  $\theta'_P$ . Das Integral jeder Verteilung wurde auf 1 normiert.

Ein zu Godunov et al. vergleichbarer theoretischer Ansatz von Shi und Lin beinhaltet ebenfalls höhere Drehimpulskomponenten für den Heliumgrundzustand [TShi02]. Shis Untersuchung bezieht sich vor allem auf die Geschwindigkeit, mit der das erste Elektron entfernt wird. Egal ob Photoionisation, kinematischer Einfang oder Einfang durch den Thomas-Mechanismus, der Prozess ist irrelevant. Entscheidend für Elektronenverteilung ist nicht, wie schnell das erste Elektron entfernt wird, sondern aus welchem Anfangszustand (s<sup>2</sup>, p<sup>2</sup>, ...). Und genau hierin unterscheiden sich Photodoppelionisation (PDI), kinematischer Einfang (velocity matching) auf der einen und Einfang durch e-N-Thomas-Prozess auf der anderen Seite. In den ersten beiden Fällen muss das Elektron bereits einen hohen Anfangsimpuls besitzen, während im letzten Fall der Anfangszustand des Elektrons eine vernachlässigbare Rolle spielt und für das abgeschüttelte Elektron eine weitgehend isotrope Verteilung (der des wahrscheinlichsten Anfangszustandes  $s^2$ ) zu erwarten ist.

Dass mit steigender Projektilgeschwindigkeit der Impuls des emittierten Elektrons größer wird, deutet sich bereits in der  $p_{z,Rec}$ -Verteilung an. Der Abstand zwischen Shake-off-Peak und der kinematischen Linie bei  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$  vergrößert sich mit zunehmender Energie, was einem größeren Abstand zwischen Projektil und Elektron im Geschwindigkeitsraum entspricht (bereinigt um  $v_P$ ). In Abbildung 6.40 ist die  $p_{z,e}$ -Position des Maximums der Verteilung unter der Bedingung kleiner Streuwinkel  $(\theta_P < 0.25 \text{ mrad} \cdot \text{amu})$  in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit sowie für verschiedene Projektile aufgetragen. Des Weiteren konnte für He<sup>2+</sup> zwischen TI1 und TI2 getrennt werden, während bei allen anderen Projektilen beide Beiträge vorhanden sind. Die Bedingung kleiner Streuwinkel sorgt für die Differenzierung der Einfangprozesse (kinematischer oder e-N-Thomas). Ebenfalls eingezeichnet ist das Ergebnis von Shis Rechnung sowie Mergels Experimenten [VMer96, TShi02]. Letztere wurden per Augenmaß aus den 2d-Spektren bestimmt; der Fehler nach Gleichung 5.27 beträgt mindestens  $\Delta p_{z,e}$ =0,5 a. u. für kleine Transversalimpulse.

Im Rahmen der Messfehler zeigt sich eine starke Abhängigkeit des Elektronenlongitudinalimpulses  $p_{z,e}$  von der Projektilgeschwindigkeit. Hingegen ist der Einfluss des Projektils auf die Struktur der Elektronenemission gering. Die Ergebnisse von Mergel zeigen tendenziell einen ähnlichen Verlauf, trotz einiger Ausreißer. Diese Abweichungen können auf die Bestimmung von  $p_{z,e}$ aus mehreren - bereits mit großen Fehlern behafteten - Messgrößen (siehe Unterkapitel 5.8.2) zurückgeführt werden, besonders ein fehlerhafter Nullpunkt im Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}$  bewirkt diese starken Abweichungen. Ebenfalls den gleichen Trend weisen Shis Berechnungen auf [TShi02].



**Abbildung 6.40:** Longitudinale Elektronenimpulsverteilung  $p_{z,e}$  für kleine Projektilstreuwinkel ( $\theta'_P < 0.25 \text{ mrad} \cdot \text{amu}$ ) in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  für verschiedene Projektile. Vergleich zur Theorie von Shi [TShi02]. Diese Theoriekurve wurde ein weiteres Mal dargestellt, allerdings um den Faktor 2 gedehnt ( $v_P \cdot 2$ ). Zusätzlich sind Ergebnisse von Mergel skizziert [VMer96].

Im theoretischen Ansatz wurde  $v_P = v_{z,e}^{SC}$  gesetzt und damit vorausgesetzt, dass das Elektron im Moment des Einfangs den gleichen Geschwindigkeitsvektor besitzt wie das Projektil. Es stellt sich die Frage, bei welcher Geschwindigkeit der kinematische Einfang am ehesten stattfindet; bei gleichen Geschwindigkeiten von Projektil und Elektron oder bereits bei halber Geschwindigkeit, dem Überlapp der Wellenfunktionen entsprechend? Eine wesentlich bessere Übereinstimmung ist zu erreichen, wenn von halber Geschwindigkeit ausgegangen wird. Dann nämlich wird die Theoriekurve um einen Faktor 2 gedehnt, entsprechend der in Abbildung 6.40 gestrichelt dargestellten Linie. Im Rahmen der experimentellen Auflösung ist eine wesentliche bessere Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment zu erzielen. Die Abweichungen im unteren Geschwindigkeitsbereich sind auf PCI zurückzuführen, die zu einer Vorwärtsverschiebung der Elektronenverteilung führt. Mit der Annahme, dass das Elektron beim Einfang eine Geschwindigkeit von  $v_P/2$  besitzt, wird auch eine bessere Übereinstimmung der Ergebnisse von Mergel mit der Theorie bei den Verhältnissen von Doppel- zu Einfachionisation erreicht. Siehe hierzu Abbildung 4.15.

Für He<sup>2+</sup>-Projektile unterhalb von 300 keV/u ist der Shake-off auch in höher differenziellen Spektren nicht klar zu erkennen. Ursache hierfür sind entweder Post-Collision-Effekte (PCI), welche die Verteilungen des BE mit dem



**Abbildung 6.41:** Transversale Elektronenimpulsverteilung  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$  unter der Bedingung  $(p_{x,P}^{\Sigma_P} < 1, 0 \text{ a. u. und } p_{z,e} < 0 \text{ a. u.})$  für He<sup>+</sup>-Projektile in Abhängigkeit von  $v_P$ .

des SO verwischen oder aber der Shake-off als Reaktionskanal zu schwach ist. Dieses Resultat wird durch die Betrachtung des Rückstoßionenlongitudinalimpulses aus Unterkapitel 6.3 gestützt. Für He<sup>2+</sup>-Projektile ist noch bei maximaler Projektilenergie eine Separation nach TI1 und TI2, dem Einfang ohne und mit Anregung, möglich. Zwar stimmen innerhalb der Fehlerbalken die Elektronenlongitudinalimpulse für beide Fälle überein, jedoch ist eine geringe Verschiebung von etwa 0,15 a. u. in Vorwärtsrichtung für den Fall mit Anregung zu beobachten. Diese Tatsache steht in gewissem Widerspruch zur Unabhängigkeit des Elektronenlongitudinalimpulses vom verwendeten Projektil und daraus folgend, dass der Shake-off unabhängig vom Elektroneneinfangprozess ist. Zur Klärung dessen bedarf es zunächst einmal weiterer Messungen mit größerer statistischer Aussagekraft und maximaler Auflösung.

Unter der Bedingung eines kleinen transversalen Impulsübertrages auf das Projektil ( $p_{x,P}^{\Sigma_P} < 1,0$  a. u.) zusammen mit einem Longitudinalimpuls in Rückwärtsrichtung ( $p_{z,e} < 0$  a. u.) ist in Abbildung 6.41 für He<sup>+</sup> und zusammenfassend in Abbildung 6.42 der Schwerpunkt der Verteilung sowie die Halbwertsbreite der abgeschüttelten Elektronen in transversaler Richtung ( $p_{x,e}^{\Sigma_P}$ und  $p_{y,e}^{\Sigma_P}$ ) in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit und für verschiedene Projektile dargestellt. Die x-Richtung beinhaltet die Impulse aller drei freien Teilchen ( $p_{x,e}^{\Sigma_P} + p_{x,Rec}^{\Sigma_P} = -m_P v_P \theta_P$ ), ist also ein Maß für die transversale Impulsaufteilung zwischen Elektron und Rückstoßion. Die "Off-Plane"-Komponente ( $p_{u,e}^{\Sigma_P}$ ) spiegelt die Anfangsimpulsverteilung im Helium wider.

Die Abweichung vom Mittelpunkt ( $p_{x,e}^{\Sigma_P} = p_{y,e}^{\Sigma_P}$ =0) befindet sich in beiden Richtungen x und y innerhalb der Fehlergrenzen, jedoch nimmt sie mit steigender Projektilgeschwindigkeit in x-Richtung leicht zu. Zudem können PCI-Effekte



**Abbildung 6.42:** a) Halbwertsbreite der  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$ - und  $p_{y,e}^{\Sigma_P}$ -Verteilung bei Shake-off b) Schwerpunkt der Elektronenverteilung in  $p_{x,e}^{\Sigma_P}$ - und  $p_{y,e}^{\Sigma_P}$ -Richtung für Shake-off Elektronen (TI bzw. TI1) jeweils unter der Bedingung ( $p_{x,P}^{\Sigma_P}$ <1,0 a. u. und  $p_{z,e}$ <0 a. u.) für verschiedene Projektile und in Abhängigkeit von  $v_P$ .

bei größeren Projektilgeschwindigkeiten nach und nach vernachlässigt werden, sodass die Ursache eine andere sein muss. Die oben-unten-Symmetrie in y-Richtung ist zudem ein Hinweis auf die Güte der Eichung sowie der Darstellung der Impulse im stoßinternen Koordinatensystem. In beiden transversalen Richtungen ist eine gleichmäßige und stetige Verbreiterung der Impulsverteilung (Abbildung 6.42 b) zu verzeichnen. Während die Rückwärtsemission (Abbildung 6.40) die Winkelkorrelation im Anfangszustand sichtbar macht, zeigt die Breite der Verteilung (Abbildung 6.42 a) die Radialkorrelation. Überraschend ist, dass eine hohe Impulskomponente eines Elektrons (des eingefangenen) mit ebenfalls hohem Impuls des anderen Elektrons (des emittierten) einhergeht.

## 6.8 Relative Prozessanteile

Als roter Faden durch die gesamte Auswertung zog sich, dass für unterschiedliche Projektile sowie deren Geschwindigkeiten verschiedenste Prozesse den totalen Transferionisationswirkungsquerschnitt dominierten. Bei sehr langsamen Stößen war es die Elektronenemission aus Quasimolekülen - die Sattelpunktelektronen. Ganz anders in sehr schnellen Stößen; hier stammten die meisten Elektronen aus einem Shake-off-Prozess. Parallel dazu trat bei allen untersuchten Stoßsystemen der binäre Projektil-Elektron-Stoß auf. Hinzu kommt noch für das Stoßsystem 60 keV/u He<sup>+</sup>/He die Projektilionisation mit Zweifachelektronentransfer. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass Sattel-
punktelektronen kinematisch nicht sauber von Elektronen aus BE-Stößen zu trennen sind und ein stetiger Übergang zwischen beiden Ionisationsprozessen vorliegt. Es gibt dennoch zwei deutliche kinematisch Trennungslinien, die sich beide an der longitudinalen Impulskomponente orientieren:

- 1. Elektronenlongitudinalimpuls  $p_{z,e}$ : Hier wird zwischen Vorwärts- und Rückwärtselektronenemission unterschieden. Zur Gruppe der vorwärtsemittierten Elektronen zählen Sattelpunktionisation, der BE sowie die Projektilionisation; im Folgenden werden diese zur Gruppe der TS2-Prozesse gezählt. Hauptsächlich der Shake-off-Prozess emittiert Elektronen in Rückwärtsrichtung zu negativen  $p_{z,e}$ -Werten<sup>11</sup>.
- 2. Rückstoßionenlongitudinalimpuls  $p_{z,Rec}$ : Als Trennungslinie wird die Linie des Targetcusps bzw. des reinen SCs ( $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P/2$ ) gewählt. Hinter dieser Linie, also bis zur CUSP-Kante, befinden sich Prozesse mit einem BE sowie einer Sattelpunktionisation. Shake-off-Prozesse führen zu  $p_{z,Rec}$ -Impulsen, welche vor dieser skizzierten Grenzlinie liegen.



**Abbildung 6.43:** Prozentualer Anteil des Shake-off-Prozesses in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  sowie für verschiedene Projektile und Endzustände (TI/TI1/TI2). a) Der Anteil wurde bestimmt durch eine Bedingung auf negative Elektronenlongitudinalimpulse. b) Die Rückstoßionen besitzen einen Longitudinalimpuls >  $-Q/v_P - v_P/2$ .

Nicht in dieser Aufstellung enthalten ist der Elektron-Elektron-Thomas-Prozess, da dieser nicht eindeutig beobachtet wurde beziehungsweise nur

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup> Denkbar für rückwärtige Elektronenemission sind ebenfalls Mehrfachstreuprozesse wie sie beispielsweise in Form des Recoilpeaks sichtbar werden.

marginal zum Wirkungsquerschnitt beiträgt. In Abbildung 6.43 ist der prozentuale Anteil des Shake-off-Prozesses am Gesamtwirkungsquerschnitt für verschiedene Projektile und Endzustände (TI/TI1/TI2) in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit dargestellt; bestimmt aus der longitudinalen Impulsverteilung der Elektronen (a) bzw. der Rückstoßionen (b).

Der mit dem Shake-off assoziierte Anteil ist bei der Bestimmung mittels der  $p_{z,Rec}$ -Verteilung insgesamt etwas niedriger, aber vor allem bei niedrigen Geschwindigkeiten etwa 15 Prozent größer als der aus der Elektronenverteilung ermittelte Wert. Ursache hierfür ist die besondere kinematische Bedingung des  $p_{z,Rec}$  (siehe hierzu ebenfalls die Unterkapitel 6.3 und 3.2.4). Alle Elektronen, welche außerhalb des BE-Ringes liegen, werden daher automatisch dem Shake-off zugerechnet. Ebenfalls angeregte Zustände des Projektils verschieben die  $p_{z,Rec}$ -Verteilung in Vorwärtsrichtung. Im Idealfall sollten angeregter und Grundzustand durch die Überprüfung der Energieerhaltung (siehe Unterkapitel 5.5.2 sowie die Abbildungen 5.4 und 5.2) getrennt werden. Die einzelnen Impulsauflösungen verbreitern jedoch diese Kurven und die steigende Projektilgeschwindigkeit lässt die einzelnen Q-Werte enger zusammenrücken, sodass die verschiedenen Rückstoßionenlongitudinalimpulse sich miteinander vermischen. Auch wenn es scheint, als seien die beiden Graphen in ihrer Bestimmungsmethode unabhängig, da sie unabhängige Messgrößen darstellen, so sind sie letztendlich über die angewandte Untergrundunterdrückung mittels Energieerhaltung auf komplizierte Weise miteinander verknüpft. Aus Abbildung 6.43 gehen drei Dinge klar hervor:

- Die relative SO-Wahrscheinlichkeit f
  ür H<sup>+</sup>-Projektile ist erheblich gr
  ößer als f
  ür die beiden anderen Projektile, He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>.
- 2. Zwischen He<sup>+</sup>- und He<sup>2+</sup>-Projektilen besteht kein oder nur ein minimaler Unterschied in der relativen Gewichtung von SO und BE.
- 3. Der Endzustand des Projektils (TI1 oder TI2) spielt wenn nur eine untergeordnete Rolle.

Der korrekt zu beschreitende Weg wäre die Normierung der Daten auf absolute Wirkungsquerschnitte. Erst dann wäre es möglich eine Aussage darüber zu treffen, ob die Shake-off-Wahrscheinlichkeit vom Projektil, welches das erste Elektron entfernte, abhängig ist. Allerdings übersteigen die Fehlerbalken der absoluten Wirkungsquerschnitte die zu erwartenden Unterschiede bei weitem, sodass man nichts daraus lernen kann.



**Abbildung 6.44:** Anteil der TS2-Prozesse ( $p_{z,e} > 0$ ) am TI-Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$ , dargestellt für verschiedene Projektile.

Unter der Annahme, dass die Shake-off-Wahrscheinlichkeit unabhängig vom verwendeten Projektil ist, hängt das steigende Verhältnis von der Wahrscheinlichkeit für den BE ab. Für  $\sigma_{TS2}$ , die absolute Ionisationswahrscheinlichkeit, gilt nach Gleichung 4.74, dass sie proportional zu  $\frac{Z_P^2}{E_P \ln E_P}$ ist. In Abbildung 6.44 ist daher der Anteil der TS2-Prozesse am gesamten Transferionisationswirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von der Projektilenergie  $E_P$  dargestellt. Da sich die Kurve für H<sup>+</sup>- von denen der Helium-Projektile unterscheidet, steht zumindest fest, dass der Shake-off nicht mit  $Z_P^2$  skaliert.

"In der Wissenschaft geht es im Wesentlichen nicht um einen komplizierten mathematischen Formalismus oder eine ritualisierte Abfolge von Experimenten. Viel eher liegt ihr eine Art gewitzte Aufrichtigkeit am Herzen, die dem Bedürfnis entspringt, wirklich wissen zu wollen, was zum Teufel eigentlich los ist!"

(Saul-Paul Sirag)

# 7. Zusammenfassung und Ausblick

#### 7.1 Zusammenfassung

Motivation dieser Arbeit war es, einen tieferen Einblick in den Anfangszustand zu erhalten; genauer gesagt, die Grundzustandskorrelationen im einfachsten Mehrelektronensystem, Helium, zu untersuchen. Es sollte der experimentelle Nachweis von winzigsten Beimischungen höherer Drehimpulskomponenten - sog. nicht-s<sup>2</sup>-Anteile - geführt werden. Diese Anteile wurden in numerischen Modellen des Grundzustandes vorhergesagt. Ein direkter experimenteller Nachweis, der über die genaue Bestimmung der Bindungsenergie hinausgeht, war für unmöglich gehalten worden. Hierzu wurden verschiedene Elektronentransferprozesse in Ion-He-Stößen experimentell in kinematisch vollständiger Weise untersucht. Die Stoßsysteme setzten sich aus einem Helium-Target und H<sup>+</sup>-, He<sup>+</sup>- sowie He<sup>2+</sup>-Projektilionen mit einer Einschussenergie von 40 bzw. 60 keV/u bis 630 keV/u zusammen. Neben den reinen Elektronentransferprozessen (Einfachelektronentransfer = SC und Zweifachelektronentransfer = DC) wurde vor allem die Transferionisation (TI) untersucht. Das Hauptaugenmerk lag auf der TI, bei welcher zusätzlich zum Elektronentransfer das zweite Targetelektron ins Kontinuum gelangt. Das emittierte Elektron trägt nicht nur die Informationen über die Stoßdynamik, sondern ebenfalls Informationen über den Anfangszustand in seiner Impulsverteilung. Um den geringen Einfluss des Anfangszustandes auf die Stoßdynamik verstehen zu können, war es zunächst erforderlich, die während der Reaktion ablaufenden Mechanismen zu verstehen.

Je nach gewählter Projektilenergie können unterschiedliche dynamische Prozesse sowohl für den Elektronentransfer wie auch die Ionisation verantwortlich sein. Die Messgrößen zur Erforschung der Dynamik sind die Impulse aller freien Teilchen. Zu deren Messung kam die seit Jahren wohl etablierte COLTRIMS-Technologie zum Einsatz, welche sich durch die  $4\pi$ -Raumwinkelakzeptanz für alle emittierten Teilchen auszeichnet. Durch eine Überschallgasexpansion sowie geometrische Kollimation liegt ein sehr kaltes und wohl lokalisiertes Target vor. Dank einer speziellen Anordnung elektrischer und magnetische Felder ist es möglich, die drei Impulsvektoren jedes einzelnen Teilchens (Projektil, Rückstoßion und Elektron) koinzident zu messen. Dadurch konnten Reaktionen mit Wirkungsquerschnitten im kbarn-Bereich hoch-differenziell untersucht werden. Dies gelang selbst dann noch, wenn parallel dazu ablaufende Reaktionen bis zu 6 Größenordnungen wahrscheinlicher waren. Die erforderliche Untergrundunterdrückung sowie die nach vorangegangenen Experimenten von Mergel beobachten großen Elektronenimpulse [VMer96] machten eine Weiterentwicklung am gesamten Experimentaufbau erforderlich. Neben einer deutlichen Erhöhung der Dichte des Gastargets wurde vor allem das Impulsspektrometer erheblich verbessert. Es weist nun eine Länge von über 2 m und einen Innendurchmesser von 130 mm auf. So konnten Elektronen bis zu einer Energie von  $E_e \leq 500$  eV, Rückstoßionen mit Impulsen  $|p|_{Rec} \leq 10$  a. u. und Projektile bis zu Streuwinkeln  $\theta_P \leq 5$  mrad gemessen werden.

Bereits anhand ein- oder zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitte konnte auf verschiedene Mechanismen, die zu einer Transferionisation führten, geschlossen werden. Eine sichere Identifikation war, wenn überhaupt, letztlich nur durch Berücksichtigung aller gemessenen Größen möglich. Mit steigender Projektilgeschwindigkeit sinkt gleichzeitig die durchschnittliche Anzahl der Wechselwirkungen zwischen Projektil- und Targetsystem. Parallel dazu geht eine unterschiedliche theoretische Beschreibung einher - vom quasimolekularen Bild hin zum störungstheoretischen Bild mit mehr oder weniger starken Post-Collision-Effekten (PCI). Bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten, im Bereich der klassischen Elektronenorbitalgeschwindigkeit, wird das später emittierte Elektron vielfach zwischen den beiden Kernen von Projektil und Target gestreut und gelangt über eine kontinuierliche Anregung ins Kontinuum. Bei sehr hohen Projektilgeschwindigkeiten treten Prozesse in den Vordergrund, die nur eine einzige Wechselwirkung zwischen Projektil und Target erfordern; die Elektronenemission beruht auf einem Shake-off-Prozess (SO). Bei allen untersuchten Projektilgeschwindigkeiten tritt auch eine vom Elektroneneinfang unabhängige Ionisation auf. Dieser Binary Encounter (BE) basiert auf einer direkten Projektil-Elektron-Wechselwirkung. Obwohl kein deutlicher Unterschied in der Elektronenemissionscharakteristik für die verschiedenen Projektile zu beobachten ist, sind jedoch die Teilprozesse für H<sup>+</sup> und He<sup>+,2+</sup> verschieden stark gewichtet. Ursache hierfür ist vor allem der BE-Anteil, welcher in erster Bornscher Näherung (FBA) proportional zu  $Z_P^2/(E_P \cdot \ln E_P)$  ist.

Gänzlich unerwartet waren die Ergebnisse für das Stoßsystem He<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 60 keV/u. Hier traten sehr viele Elektronen mit unerwartet großen Longitudinal- und Transversalimpulsen auf, welche durch das BE-Modell oder andere Stoßmechanismen nicht zu erklären waren. Einzig das im Projektil anwesende Elektron konnte dafür verantwortlich gemacht werden. Der Projektil-Loss, die Ionisation des Projektils, gefolgt von einem Zweifachelektroneneinfang führt zum gleichen Endzustand (nacktes Target, Elektronentransfer und einem freien Elektron) wie eine echte Transferionisation. Der entscheidende Unterschied ist, dass das Elektron nicht dem Target sondern dem Projektil entstammt. Aufgrund der Komplexität dieses Dreistufenprozesses sowie der Vermischung mit weiteren TI-Mechanismen konnte dessen Dynamik nicht im Detail analysiert werden.

In langsamen Ion-Atom-Stößen ist die Geschwindigkeit des Projektils häufig zu gering, um auf das Elektron selbst bei maximalem Impulsaustausch die erforderliche Energie zur Überwindung der Bindungsenergie zu transferieren. Stattdessen tritt - beschrieben durch das Hidden Crossing Modell - eine kontinuierliche Folge von Anregungen des Elektrons bis an die Kontinuumsgrenze auf. Während des Erklimmens dieser Anregungsleiter bewegt sich das Elektron im zeitabhängigen Zweizentren-Potenzial von Projektil- und Targetkern. Ist die Stoßgeschwindigkeit hinreichend niedrig, so erfolgt die Beschreibung der Anregungszustände nicht mehr durch atomare, sondern durch molekulare Zustände (Molekül Orbital, MO). Die Struktur der Elektronenimpulsverteilung ist eine direkte Konsequenz des Drehimpulsaustauschs zwischen den Elektronen und den beiden Kernen. Sie gleicht zwei "Bananen" zwischen 0 und Projektilgeschwindigkeit mit einer Knotenlinie auf der Strahlachse. Ausgehend von Schmidts Messungen des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bis  $E_P$ =30 keV/u [LSch00], dem einzigen kinematisch vollständigen Experiment zur Transferionisation in langsamen Stößen, wurde eine gute Übereinstimmung mit den Daten dieser Arbeit gefunden. Ebenso konnten Schmidts Ergebnisse, dass mit steigender Projektilgeschwindigkeit zunächst ein Teil und später vollständig die rechte "Banane"<sup>1</sup> verschwindet, stetig bis zu einer Projektilenergie von

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Der rechte Teil bezieht sich auf eine Darstellung in der nuklearen Streuebene, sodass das Projektil nach rechts gestreut wird.

60 keV/u fortgeschrieben werden. Unterschiede in der Elektronenemissionsstruktur zu den beiden einfach positiv geladenen Projektilen, H<sup>+</sup> und He<sup>+</sup> wurden nicht beobachtet. Für He<sup>2+</sup>-Projektile wurden sogar bis  $E_P$ =150 keV/u noch Anzeichen der Sattelpunktionisation gefunden.

Während bei den von Schmidt untersuchten Stoßsystemen quasi kein BE auftrat, bildet dieser bei 60 keV/u bereits einen signifikanten Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt. Für große Störungen (q/v) wird die Elektronenimpulsverteilung maßgeblich durch Post Collision-Effekte (PCI) beeinflusst. Der Elektroneneinfang in Kontinuumszustände des Projektils (ECC) ist ein ausschließlich durch PCI hervorgerufener Effekt. Das stark attraktive Potenzial des Projektils zieht zuvor emittierte Elektronen an, sodass diese im Impulsraum exakt um  $v_P$  verteilt zu finden sind. Allerdings konnte selbst bei bester Statistik, dem langsamsten Stoßprozess und dem attraktivsten Projektilpotenzial (He<sup>2+</sup>/He bei 40 keV/u) kein Cusp-Peak in der Elektronenenergieverteilung beobachtet werden. Grund hierfür ist eine unzureichende Elektronenenergieauflösung, die die scharfe Struktur des ECCs verwischt.

Der anschaulich einfachste Ionisationsprozess ist der direkte Stoß zwischen Projektil und Elektron. Für eine Transferionisation wurde zunächst davon ausgegangen, dass Elektroneneinfang und Ionisation voneinander unabhängige Prozesse sind. Bei freien Elektronen entspräche die Elektronenimpulsverteilung der einer Rutherfordstreuung. Die "Binary Encounter"-Näherung (BE) überträgt dieses Bild von einem freien auf ein gebundenes Elektron, wobei sie zunächst nur gilt, solange die Projektilenergie groß gegenüber der Bindungsenergie des Elektrons ist. Für diese skizzierte Näherung wird das Elektron auf eine Kugelschale mit dem Radius  $v_P$  und dem Mittelpunkt  $v_P$ emittiert. Die Daten dieser Arbeit zeigten Elektronen, die mit dem BE assoziiert wurden, im Impulsraum immer weiter zur Strahlachse hin verschoben. Dieser Effekt war relativ unabhängig von der Projektilgeschwindigkeit, wodurch PCI ausgeschlossen werden konnten.

Um die Diskrepanz zwischen dem idealen BE-Modell und den vorliegenden Daten zu erklären, wurden weitere Verfeinerungen für die BE-Näherung ausprobiert: Da das emittierte Elektron die Inelastizität durch das Targetpotenzial (*Q*) überwinden muss, erfährt es vor allem bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten einen deutlichen Energieverlust (BE-Q) [VMer96]. Durch diesen wird die erwartete Elektronenverteilung in transversaler Richtung gestaucht. Im Rahmen der Transferionisation ist unklar, ob zuerst eingefangen oder ionisiert wird, sodass das Elektron ein noch stärkeres Targetpotenzial bei der Ionisation überwinden muss. Allerdings war auch dieser Energieverlust - durch maximal mögliche Inelastizität des Targetions - nicht ausreichend, um die gemessenen Elektronenimpulsverteilungen zu erklären. Die Daten dieser Arbeit waren mit zusätzlichen Fehlerbetrachtungen in Einklang mit den Daten des Vorläuferexperiments von V. Mergel zum Stoßsystem  $H^+/He$  ab  $U_P$ =150 keV/u zu bringen.

Speziell für die Transferionisation wurde ein Modell entwickelt, welches einen nicht mehr unabhängigen Prozess mit größerem Energieverlust beschreibt (BE-E). Das zu ionisierende Elektron muss die gesamte Energiebilanz ausgleichen. Nicht nur die Bindungsenergien müssen von ihm aufgewandt werden, sondern zusätzlich auch die Energie, die erforderlich ist, das einzufangende Elektron auf Projektilgeschwindigkeit zu beschleunigen. Genau genommen beruht dieses Modell nicht auf einem veränderten Stoßprozess, sondern auf einer Elektron-Elektron-Korrelation im Anfangszustand. Während sich ein Targetelektron in Kernnähe aufhält, befindet sich das zweite weiter weg, sodass eines stark und eines schwach gebunden ist. Dadurch wurde auch im Limit hoher Projektilgeschwindigkeiten ein konstanter Energieverlust ermöglicht. Dennoch ermöglichte keines der BE-Modelle eine befriedigende Beschreibung aller untersuchten Stoßsysteme.

Diese Diskrepanz ist stark verknüpft mit einem weiteren Problem. Es handelt sich insgesamt um ein Vielkörperproblem, bei dem nicht strikt die einzelnen Wechselwirkungen voneinander getrennt werden können. So tritt neben allen Projektil-Elektron-Wechselwirkungen auch stets eine Kern-Kern-Wechselwirkung auf. Aber anstatt einer statistischen Superposition der beiden Wechselwirkungen, die zu einer Ausschmierung der Transversalimpulse führen würde, wurde eine gerichtete Addition von P-e- und N-N-Wechselwirkung beobachtet. Das Elektron besitzt, gemessen in der Projektilstreuebene, immer einen kleineren Transversalimpuls, als es durch den Projektiltransversalimpuls möglich wäre. Mit einem Modell unabhängiger Wechselwirkungen war dieser Befund nicht zu erklären und konnte auch nicht schlüssig aufgelöst werden. Höchstwahrscheinlich liegt eine starke Korrelation zwischen Targetkern und den beiden Elektronen vor, welche über eine einfache Radialkorrelation hinausgeht.

Ein weiterer höchst interessanter Prozess, dem eine komplexe Vielteilchendynamik inhärent ist, stellt der Thomas-Prozess dar. Er beschreibt eine Möglichkeit auch bei höchsten Projektilgeschwindigkeiten, ein anfangs im Laborsystem ruhendes Elektron auf Projektilgeschwindigkeit zu beschleunigen, sodass es eingefangen werden kann. Hierzu streut das Projektil unter einem fixen Winkel (60 bzw. 45°) an einem Targetelektron und dieses wiederum am Targetkern bzw. an einem weiteren Elektron (wiederum 60 bzw. 45°). Dieser zuletzt genannte Elektron-Elektron-Thomas-Prozess führt automatisch zu einer Transferionisation, bei der das zweite Elektron das Target senkrecht zur Projektilstrahlrichtung mit  $v_P$  verlässt. Diese theoretisch strengen Zwangsbedingungen erlauben einen einzigartigen Blick in die Mehrteilchendynamik. Da erst im Limit sehr hoher Projektilgeschwindigkeiten die Thomas-Prozesse einen relevanten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt liefern, konnte dieser auch nur für das Stoßsystem H<sup>+</sup>/He bei 630 keV/u mit großer Wahrscheinlichkeit beobachtet werden. Der Elektron-Elektron-Thomas-Prozesse konnte nicht als singuläres Maximum bei  $p_{z,e}=0 / p_{x,e}^{\Sigma_P}=v_P$  beobachtet werden. Der von Mergel mit etwa 20 % bestimmte Anteil des e-e-Thomas-Prozesses am gesamten TI-Wirkungsquerschnitt [VMer96] für 630 keV/u H<sup>+</sup>/He konnte durch die Identifizierung eines weiteren Ionisationsprozesses neu bestimmt werden und beträgt demnach weniger als 1 Prozent.

Die bei hohen Projektilgeschwindigkeiten abnehmende Anzahl an Wechselwirkungen führt bei der Transferionisation dazu, dass Shake-Prozesse zur Beschreibung an Bedeutung gewinnen. Nur für den (kinematischen) Elektroneneinfang ist eine Wechselwirkung erforderlich. Wird dieses Elektron hinreichend schnell aus seinem Grundzustand entfernt, so besteht die Möglichkeit, dass sich die Wellenfunktion des verbliebenen Elektrons nicht schnell genug an den neuen Eigenzustand des He<sup>+</sup>-Targetionenrumpfes anpasst. In diesem Falle kommt es zum Shake-off-Prozess (SO) und das eigentlich gebundene Elektron wird abgeschüttelt. Da das Projektil nicht in Wechselwirkung mit dem emittierten Elektron tritt und der Elektroneneinfang i. A. zu sehr kleinen Projektiltransversalimpulsen führt, war es dadurch sehr gut möglich, den SO-Prozess im Phasenraum von anderen Prozessen zu isolieren. Die Impulsverteilung des abgeschüttelten Elektrons soll - so Vorhersagen und Vermutungen -, da es nicht in Wechselwirkung zu einem weiteren Teilchen trat, die Grundzustandswellenfunktion widerspiegeln [HSch03a]. Eine Variation der Projektilenergie führt in einem einfachen OBK-Capture-Bild dazu, dass der Überlappbereich der Wellenfunktionen im Geschwindigkeitsraum verschoben wird. Dadurch ist es möglich, unterschiedliche Anteile des Grundzustandes herauszupräparieren.

Das Elektron wird entgegen der Projektilstrahlrichtung emittiert, was von der Theorie nur erklärt werden kann, wenn die Grundzustandswellenfunktion Komponenten mit höheren Drehimpulsen, sog. nicht-s<sup>2</sup>-Anteile, enthält [TShi02, MSch05]. Der Impulsbetrag in Rückwärtsrichtung nimmt mit steigender Projektilgeschwindigkeit stetig zu. Für das Stoßsystem 630 keV/u H<sup>+</sup>/He konnte gezeigt werden, dass diese rückwärtige Elektronenemission auf nicht-s<sup>2</sup> Anteile im Heliumgrundzustand zurückzuführen sind [AGod04]. Für He<sup>+,2+</sup>-Projektile wurden sehr ähnliche Elektronenimpulsverteilungen, wie schon zuvor für H<sup>+</sup>, gefunden. Dadurch bestätigte sich die Vermutung, dass das emittierte Elektron nicht in Wechselwirkung mit dem Projektil trat und die Elektronenimpulsverteilung hauptsächlich von der anfänglichen Impulsverteilung im Grundzustand herrührt. Damit wurden erstmals und mit hervorragender Qualität die winzigen Anteile (1 bis 2 %) von nicht-s<sup>2</sup>-Beimischungen am Helium-Grundzustand experimentell bestätigt und vermessen.

Zusammenfassend knüpfen die vorliegenden Experimente an die Arbeit von Schmidt [LSch00] im niedrigen Energiebereich für He<sup>2+</sup>-Projektile an und können direkt mit Messungen von Mergel [VMer96] für das Stoßsystem H<sup>+</sup>/He zwischen 150 und 630 keV/u verglichen werden. Sowohl eine 3- bis 10fach bessere Impulsauflösung in Verbindung mit einer starken Untergrundunterdrückung machen die vorliegenden Daten einzigartig - und ihre Deutung ist noch nicht abgeschlossen.

### 7.2 Ausblick

Die über einen großen Bereich durchgeführten Experimente und die daraus erhaltenen Ergebnisse motivieren vielerlei weitere Untersuchungen. Manche davon sind direkt miteinander verknüpft, andere wiederum unabhängig voneinander. Kernfrage und Motivationsgrundlage basierten auf dem Interesse nach dem Anfangszustand. Am saubersten konnte dieser bei Shakeoff-Prozessen herauspräpariert werden. Bis zu einer Projektilgeschwindigkeit von 5 a. u. wurde das Elektron stets mit größerem Impuls in Rückwärtsrichtung emittiert und dies mit höheren Impulsen im Grundzustand erklärt. Vor allem die Messung bei sehr viel höheren Projektilgeschwindigkeit steht ganz oben auf der Agenda; immer kleinere Beiträge des Anfangszustandes mit immer größeren Impulsen und Drehimpulsen sollen untersucht werden. Vorhersagen von Shi et al. [TShi02] besagen, dass der rückwärtige Impuls um 7 a. u. Projektilgeschwindigkeit ein Nebenmaximum besitzt und, dass ab  $v_P>12$  a. u. die Elektronen weniger stark in Rückwärtsrichtung emittiert werden.

Das stetig schlechter werdende Verhältnis zwischen Einfachionisation und Transferionisation macht kinematisch vollständige Messungen mit direktem Elektronennachweis für H<sup>+</sup>/He ab etwa 1 MeV/u unmöglich. Bei 1,5 MeV/u beträgt das Verhältnis SI/TI 6 Größenordnungen, sodass auf ein echtes Ereignis aus einer Transferionisation 1 000 000 Elektronen aus einer Einfachtargetionisation kommen. Für ein optimal aufgebautes COLTRIMS-Experiment oh-

ne Gitter ergibt sich eine absolute Koinzidenzwahrscheinlichkeit von 20 Prozent<sup>2</sup>. Berücksichtigt man, dass die Koinzidenzwahrscheinlichkeit für hohe Ereignisraten auf den Detektoren geringer wird, so sollte bei nicht mehr als 50 kHz auf dem Elektronendetektor gemessen werden. Daraus folgt, dass nur rund alle 2 Minuten ein echtes Ereignis aus einer Transferionisation nachgewiesen werden kann. Dieses eine Ereignis aus 5 000 000 falschen Ereignissen herauszufiltern wird sehr schwer oder gar unmöglich. Da nach aktuellem Erkenntnisstand die Elektronenemission durch den Shake-off-Prozess unabhängig vom Projektil ist und es nur wichtig ist, dass das 1. Elektron schnell weggefangen wird, können höher geladene Projektilionen das Verhältnis SI/TI (bzw. SI/SC) verbessern. Am besten würden sich nackte Projektilionen eignen, da die Targetionisation mit  $Z_P^2$ , während der Elektroneneinfang, in der OBK1-Näherung im Limes hoher Projektilgeschwindigkeiten, mit  $Z_P^5$ skaliert. Die relativ geringen Impulse des abgeschüttelten Elektrons ermöglichen auch bei noch niedrigeren elektrischen ( $|\vec{E}| < 2$  V/cm) und magnetischen Feldstärken ( $|\vec{B}|$  < 6 Gauß) zu messen. In Verbindung mit der Verwendung neuartiger TDCs mit 50 ps Zeitauflösung können die Impulsauflösungen um den Faktor 5 bis 10 gesteigert werden.

Ob die Näherung für den Elektroneneinfang, dass sich das Elektron mit voller oder halber Projektilgeschwindigkeit im Moment des Einfangs bewegt, gültig ist, kann beispielsweise durch Vergleiche mit der Doppelionisation geklärt werden. Erfolgt hier die Einfachionisation zunächst durch einen binären Stoß und ist dieses Elektron hinreichend schnell, so kann das zweite Elektron durch einen Shake-off-Prozess emittiert werden. Hierzu müssen bei der Analyse Ereignisse selektiert werden, bei denen das Elektron nur schwach mit dem Projektil wechselwirkten (kleiner Streuwinkel) wechselwirkte, das Elektron selbst aber schnell ist. Somit wurde ein BE-Elektron aus dem schnellen Teil der Grundzustandswellenfunktion genommen. Die Wellenfunktion wird dann nicht mehr von der Projektilgeschwindigkeit, sondern von der Elektronengeschwindigkeit des ersten emittierten Elektrons abhängig sein. Da die Ionisation durch BE bei anderen Stoßparametern als der Elektroneneinfang stattfindet, kann in erster Näherung überprüft werden, ob sich die "schnellen" Elektronen eng am Kern oder weit von ihm weg befinden.

Relativ unbeachtet blieb der Targetkern und die direkte Vielteilchen-Wechselwirkung. Mehrteilchendynamik kann jedoch erst richtig verstanden werden, sobald Klarheit über die Beiträge der einzelnen Zweiteilchen-Wechselwirkungen besteht. Diese Frage wurde im Zusammenhang mit dem

 $<sup>^2</sup>$ Dabei wurde eine abs. Nachweiswahrscheinlichkeit von 60 Prozent für jeden der 3 Detektoren angenommen.

BE und der richtungskorrelierten Emission von Elektron und Targetkern diskutiert, jedoch nicht zufriedenstellend gelöst. Durch die Untersuchung weiterer atomarer 2-Elektronensysteme besteht die Möglichkeit, den Einfluss des Targetkerns auf den Grundzustand besser zu verstehen. Als besonders interessant dürfte sich H<sup>-</sup> erweisen, nicht nur wegen seiner geringen Kernmasse sondern auch wegen des sehr schwach gebundenen zweiten Elektrons. Von experimenteller Seite steht dem derzeit noch im Wege, dass kein kaltes H<sup>-</sup>-Target mit ausreichend hoher Dichte existiert. Durch die Kombination von Überschallexpansion mit einer Hochdruck-Mikroentladung, sog. Plasmajets [SSch02, MOde05], steht in Zukunft möglicherweise ein solches Target zur Verfügung. Der Übergang von einem atomaren zu einem molekularen 2-Elektronensystem, wie dem H<sub>2</sub>, erlaubt Rückschlüsse auf langreichweitige Korrelationseffekte der Elektronen. Nicht zuletzt der Einfluss der Potenzialform, welche in einem Molekül nicht zentralsymmetrisch ist, kann untersucht werden, ebenso wie die Elektronenemission als Funktion des Kernabstandes oder der Molekülachse relativ zur Strahlrichtung.

Im Gegensatz zum SO, der ausschließlich der Erforschung des Anfangszustandes dient, steht bei der Untersuchung des Elektron-Elektron-Thomas-Prozesses eine komplexe Vielteilchendynamik im Vordergrund. Da dieser Prozess nur einen äußerst geringen Beitrag bei den vorliegenden Experimenten lieferte, steht auch hier der Wechsel zu deutlich höheren Projektilgeschwindigkeiten im Vordergrund. Jedoch müssen hier die Feldstärken weiter erhöht werden, was auf Kosten der Auflösung geht. In beiden Fällen, SO- und ee-Thomas-Prozess, sollten im Hinblick auf statistischen Untergrund in Verbindung mit den Erkenntnissen aus Unterkapitel 5.7.1 (Abbildung 5.22) bei insgesamt niedrigeren totalen Einzelraten auf den Detektoren (<50 kHz) gearbeitet werden. Zudem wird eine Verbesserung der direkten Streuwinkelmessung des Projektils notwendig werden, um eine direkte Untergrundunterdrückung zu ermöglichen.

Auch der Elektron-Kern-Thomas, der für die winzige Überhöhung des streuwinkel-differenziellen Wirkungsquerschnitts beim Elektroneneinfang des Stoßsystems 630 keV/u H<sup>+</sup>/He verantwortlich gemacht wurde, macht weitere Messungen erforderlich. Zunächst gilt es eine direkte Untergrundunterdrückung zu erhalten, die nur durch eine Verbesserung der gemessenen Projektile erreicht werden kann. Im nächsten Schritt muss dann der Übergang zu höheren Projektilgeschwindigkeiten vollzogen werden. Zur Reduktion des großen Rückstoßionenuntergrundes aus der Targeteinfachionisation ist sowohl die Pulsung des Rückstoßionensteerers, aber auch eine direkte Pulsung des MCPs selbst möglich. Vielteilchendynamik und Korrelationseffekte wurden für die gerichtete Streuung der Elektronen beim Binary Encounter im Zusammenhang mit einer Transferionisation verantwortlich gemacht. Die genaue Ursache konnte jedoch nicht geklärt werden. Eine weitergehende Analyse der Daten sollte zunächst im Vordergrund stehen. Zur weiteren Klärung dieser offenen Fragen müssen von experimenteller Seite Versuche zur Einfachionisation unter gleichen Bedingungen (Projektilgeschwindigkeit und Stoßpartner) folgen, sodass eine Wechselwirkung weniger zu berücksichtigen sein wird. Das ideale Stoßsystem wäre ein Target aus atomarem Wasserstoff (H), welches mit H<sup>+</sup>-Projektilen wechselwirkt. Dadurch besteht ein guter Zugang zum Verständnis der Bilanz der Transversalimpulse für Einfachionisationsexperimente. Wasserstoff kommt natürlich allerdings nur in molekularer Form vor. Die Erzeugung von atomarem Wasserstoff ist schwierig, die Targetdichten sind äußerst gering und vor allem ist das Target nur schwer zu kühlen.

Ein zu atomarem Wasserstoff ähnliches Stoßsystem, jedoch in inverser Kinematik, stellt die Untersuchung von Projektil-Loss-Reaktionen dar. Vor allem bei höheren Projektilgeschwindigkeiten ist die Projektilionisation mit gleichzeitiger Targetionisation wesentlich leichter zugänglich als der bei He<sup>+</sup>/He 60 keV/u beobachtete Projektil-Loss mit DC. Besonders interessant werden im niedrigen Geschwindigkeitsbereich die verschiedenen Kombinationsmöglichkeiten des Projektil-Loss' mit weiteren Wechselwirkungen: die vorliegende Messung (Projektil-Loss und DC), Projektil-Loss mit gleichzeitiger Targetionisation, vor allem aber die reine Projektilionisation. Dadurch können einzigartige Einblicke in die komplizierte Vielteilchendynamik gewonnen werden. Derzeit laufen die Vorbereitungen für Experimente zum Projektil-Loss mit Targetionisation für He<sup>+</sup>-Projektile. Vor allem der Elektronendetektor muss auf gleichzeitigen Mehrteilchennachweis optimiert werden. Neben der herkömmlichen Technik mit hexagonalen Delaylinedetektoren, schnellen Vorverstärkern, Constant Fraction Diskrimatoren (CFDs) zur Pulstransformation und der Datenaufnahme mittels Multihit-TDC wird derzeit eine neue Technologie entwickelt. Diese basiert auf der Verwendung von Flash-ADCs. Die direkten Pulse der Detektoren werden kontinuierlich, ähnlich wie bei einem digitalen Speicheroszilloskop aufgezeichnet und später analysiert. Dadurch können auch ineinander gelaufene Doppelpulse voneinander getrennt werden, da z. B. der Quotient aus integraler Fläche und Pulshöhe eine fixe Größe darstellt.

Abschließend kann man sagen: Die systematische Untersuchung des Heliumgrundzustandes steht, trotz der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente, erst am Anfang. Die von vielen lediglich für einen mathematischen Trick gehaltenen nicht-s<sup>2</sup>-Zustände in der Grundzustandswellenfunktion von Helium konnten experimentell nachgewiesen und vermessen werden. Die im Ausblick vorgeschlagenen Experimente sollen die erzielten Ergebnisse durch andere Experimente bestätigen und sich den abgeleiteten neuen Fragen im Zusammenhang mit nicht-s<sup>2</sup>-Zuständen stellen:

Da ihr Anteil an der Grundzustandwellenfunktion im Helium lediglich 2 % ausmacht - welche Auswirkungen haben solche kleinen Anteile in der Natur? Erstaunlicherweise besitzen die Elektronen der nicht-s<sup>2</sup>-Zustände große Impulse, sodass sie klassisch nicht mehr gebunden wären und zeigen einen hohen Grad an Verschränkung [AKhe05]. Hier besteht eine gewisse Analogie zu Cooperpaaren, zu deren Erforschung gerade Experimente geplant werden. Carl Friedrich von Weizsäcker geht so weit, dass er Verschränkung, Informationen, deren Erhaltung und Quantenmechanik miteinander verknüpft.

### A. Atomare Einheiten

In dieser Arbeit wurden weitestgehend die international üblichen SI-Einheiten (Système International d'Unités) verwendet [PTB05]. Diese auf makroskopischen Einheiten basierenden Größen sind bei der Diskussion atomphysikalischer Prozesse jedoch recht unhandlich. Eine bessere Basis bieten die von Hartree [DHar28] bereits 1928 eingeführten atomaren Einheiten (a. u. = atomic units), welche auf klassische Größen des Wasserstoffatoms normiert sind:

Elementarladung	$e = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ As}$	= 1 a. u.
Elektronenmasse	$m_e$ = 9,1095 $\cdot$ 10 <sup>-31</sup> kg	= 1 a. u.
Bohrscher Elektronenradius im H-Atom	$r_{B,e}$ = 5,2918 · 10 <sup>-11</sup> m	= 1 a. u.
Elektronengeschwindigkeit im H-Atom	$v_{B,e}$ = 2,1877 $\cdot$ 10 <sup>6</sup> m/s	= 1 a. u.
Vakuumlichtgeschwindigkeit	$c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ m/s}$	= 137 a. u.

Werte in atomaren Einheiten erhalten im Allgemeinen nur die Bezeichnung "a. u.". Dadurch geht die Information, ob es sich bei der Größe um eine Zeit, Länge, Geschwindigkeit, etc. handelt verloren und ebenso entspricht 1 a. u. = 1 a. u.<sup>2</sup> ... = 1. Einige Naturkonstanten ergeben in atomaren Einheiten folgende, leicht zu berechnende Werte:

Plancksches Wirkungsquantum	$h = 2\pi$	$\hbar = h/2\pi = 1$
Feinstrukturkonstante	$\alpha=1/137$ a. u.	$\alpha c$ = 1 a. u.
Influenzkonstante	$\varepsilon_0 = 1/4\pi$	
Induktionskonstante	$\mu_0 = 6,6918\cdot 10^{-4}$	
Ruhemasse des Protons	$m_P = 1836, 1528$ a. u.	
Compton-Wellenlänge des Elektrons	$\lambda_{C} = 0,04585$ a. u.	

Zur Umrechnung von SI- in atomare Einheiten gilt:

Zeit (s)	<b>1 a. u. =</b> $\hbar m_e^{-1} (\alpha c)^{-2} = 2,4189 \cdot 10^{-17} \text{ s}$
Länge (m)	<b>1 a. u. =</b> $\hbar m_e^{-1} (\alpha c)^{-1} = 5,2918 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Masse (kg)	<b>1</b> a. u. = $m_e = 9,1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ladung (C)	<b>1</b> a. u. = $e = 1,6022 \cdot 10^{-19}$ As
Geschwindigkeit (m/s)	<b>1 a. u. =</b> $(\alpha c) = 2,1877 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1}$
Impuls (kgm/s)	<b>1 a. u. =</b> $m_e(\alpha c) = 1,9929 \cdot 10^{-24} \text{ kgm} s^{-1}$
Drehimpuls (Js)	<b>1</b> a. u. = $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ kgm}^2 \text{s}^{-1}$
Kraft (N)	<b>1 a. u. =</b> $\hbar^{-1}m_e^2(\alpha c)^3 = 8,2387 \cdot 10^{-8} \text{ kgm}s^{-2}$
Energie (J)	<b>1</b> a. u. = $m_e(\alpha c)^2 = 4,3598 \cdot 10^{-18} \text{ kgm}^2 \text{s}^{-2} = 27,212 \text{ eV}$
Spannung (V)	1 a. u. = $m_e(\alpha c)^2 e^{-1} = 27,212$ V
Magnetfeld (T)	1 a. u. = $m_e^2 (\alpha c)^2 e^{-1} \hbar^{-1} = 2,3505 \cdot 10^5 \text{ kgA}$

Außerdem hier noch eine kleine hilfreiche Übersicht zur Umrechnung von Projektilenergien in Impulse, Geschwindigkeiten und die Stärke der Störung am Beispiel eines H<sup>+</sup>-Projektils:

$E_P$ [keV/u]	<i>E</i> <sub><i>P</i></sub> [a. u.]	<i>v</i> <sub><i>P</i></sub> [a. u.]	$v_P$ [mm/ns]	<i>p</i> <sub><i>P</i></sub> [a. u.]	$q_P/v_P$ [a. u.]
25	919	1,00	2,19	1837	1,00
40	1470	$1,\!27$	2,77	$2\ 323$	0,79
60	$2\ 205$	$1,\!55$	3,39	$2\ 845$	0,65
100	$3\ 675$	2,00	4,38	$3\ 673$	0,50
150	$5\ 511$	$2,\!45$	5,36	4 499	0,41
225	$8\ 267$	3,00	6,56	$5\ 510$	0,33
300	11024	$3,\!47$	7,58	6 363	0,29
450	$16\;535$	4,24	9,28	$7\ 792$	0,24
630	$23\ 150$	5,02	10,98	9 220	0,20
1 000	$36\ 745$	6,32	13,84	11616	0,16
1500	$55\ 118$	7,75	$16,\!95$	$14\ 227$	0,13

# B. Verwendete Zeichen und Symbole

Zeichen	physikalische Größe bzw. Bedeutung
$\vec{p}$ , $p$	Impuls, Druck
ec v, $v$	Geschwindigkeit
$\vec{a}$ , $a$	Beschleunigung
$\vec{F}$ , $F$	Kraft
E	Energie
$E_{kin}$	kinetische Energie
$E_{Bdg}$	Bindungsenergie
Q	Gesamtenergiebilanz
$ec{E}$ , $E$	elektrisches Feld
k	Boltzmann Konstante
T	Temperatur
S	Speedratio
m	Masse
q	Ladung
Z	Kernladung
$\vec{B}, B$	Magnetfeld
t	Zeit
R, r, x, y, z	Radius, Abstand, Richtungskomponente
b	Stoßparameter
$ heta'_P$	Masse normierter Projektilstreuwinkel
$\theta_P = \theta'_P \cdot / m_P$	realer Projektilstreuwinkel
V, U	Potenzial
$H, \hat{H}$	Hamiltonoperator
$\sigma$	Wirkungsquerschnitt
$\Delta$	Differenz, Fehler, Halbwertsbreite

Indizes, Exponenten	Bedeutung
P, E	Projektil (auch Projektilionisation) bzw. Ejektil
e	Elektron
Rec, T	Rückstoßion bzw. Target (auch Targetionisation)
c	Elektroneneinfang (Capture)
x , $y$ , $z$	kartesische Koordinaten
<sup>i</sup> , –	Anfangszustand (initial)
<sup>f</sup> , +	Endzustand (final)
$\Sigma_P$	Projektilstreusystem
$\Sigma_{Rec}$	Rückstoßionenstreusystem
$\Sigma'$	mit dem Projektil bewegtes System (Ursprung = $v_P$ ; $v'_z$ = $v_z$ + $v_P$ )
	Transversalkomponente
<i>i, j</i>	Laufindex

# C. typische Experimentelle Parameter

Aus der Geometrie des Aufbaus sowie den Betriebsparametern der Tabelle C.2 ergeben sich folgende Raumwinkelakzeptanzen: Projektile konnten bis zu einem Projektilstreuwinkel von ungefähr 4 mrad amu nachgewiesen werden. Elektronen, die in Richtung des Rückstoßionendetektors starteten konnten bis zu einem Maximalimpuls von 2 a. u. umgedreht werden. In senkrechter Richtung, in welcher das Magnetfeld die Elektronen führt, konnten Impulse bis  $I_{Sp}/29$  vollständig erfasst werden. Für einfach geladene Rückstoßionen (He<sup>+</sup>) konnten Impulse bis  $|p_{x,Rec}| < 20$  a. u.,  $-4 < p_{y,Rec} < 12$  a. u. und  $-8 < p_{z,Rec} < 8$  a. u. nachgewiesen werden. Für doppelt geladene Rückstoßionen beträgt der Akzeptanzbereich:  $|p_{x,Rec}| < 40$  a. u.,  $-6 < p_{y,Rec} < 17$  a. u. und  $-10 < |p_{z,Rec}| < 10$  a. u.

Detektoren	Projektil	Elektron	Rückstoßion
MCP	Chevron	Chevron	Chevron
$\varnothing$ MCP	40 mm	120  mm	80 mm
$R_{MCP}$ (Front-Back)	$91 \ M\Omega$	$19 \ M\Omega$	$17 \ M\Omega$
$R_{B-H}$ (Back-Holder)	$3$ - $5$ $\mathbf{M}\Omega$	5 - 10 $\mathbf{M}\Omega$	$1$ - $2~\mathrm{M}\Omega$
$R_{H-R}$ (Holder-Referenz)	0,5 - 1,5 M $\Omega$	$f 1$ - $f 2$ $f M\Omega$	<b>0,1 - 0,6 Μ</b> Ω
$R_{R-S}$ (Referenz-Signal)	0,5 - 1,5 M $\Omega$	$1$ - $2~\mathbf{M}\Omega$	<b>0,1 - 0,6 Μ</b> Ω
$U_{Front}$	-150 V	+250  V	$-1520 \mathrm{V}$
$U_{Signal}$	+2160  V	+2450  V	+1020 V
$I_{gesamt}$	$22~\mu\mathbf{A}$	$125~\mu\mathrm{A}$	$154 \ \mu A$

**Tabelle C.1:** Typische Betriebsparameter der verwendeten MCP-Detektoren mit Delayline-Anoden. Die Spannungsteiler waren mit variablen Widerständen ausgestattet, so dass der Detektor optimal eingestellt werden konnte.

$He^{2+}$ (630)	$He^{2+}$ (450)	$He^{2+}$ (300)	$He^{2+}$ (150)	$He^{2+}$ (60)	$He^{2+}$ (40)	$He^{+}$ (630)	$He^{+}$ (300)	${ m He^{+}}$ (150)	$He^{+}$ (60)	${ m H^{+}}$ (630)	${ m H^{+}}$ (630)	${ m H^{+}}$ (300)	${ m H^{+}}~(150)$	${ m H^{+}}~(100)$	${ m H^{+}}$ (60)	Name	Sto
${}^{3}\text{He}^{+}$	${}^{3}\mathrm{He^{+}}$	${}^{3}\mathrm{He}^{+}$	${}^{3}\mathrm{He}^{+}$	${}^{3}\mathrm{He^{+}}$	${}^{3}\text{He}^{+}$	${}^{3}\mathrm{He^{+}}$	${}^{4}\mathrm{He}^{+}$	${}^{3}\mathrm{He^{+}}$	${}^{3}\text{He}^{+}$	$\mathbf{H}^+$	$\mathbf{H}^+$	$\mathbf{H}^+$	$\mathrm{H}^+$	$\mathbf{D}_{+}$	$\mathbf{D}^+$	Proj.	oßsyster
1890	1350	006	450	180	120	1890	1200	450	180	630	630	300	150	200	120	$U_B$ [keV]	n
$3 \mathrm{kHz}$	$6 \mathrm{kHz}$	8 kHz	7 kHz	11 kHz	17 kHz	$0,1 \mathrm{kHz}$	1  m kHz	3 kHz	5  m kHz	0,7 kHz	1  m kHz	$1,5~\mathrm{kHz}$	6 kHz	10  kHz	14 kHz	Proj.	D
75 kHz	120  kHz	60  kHz	20  kHz	7 kHz	$6,5~\mathrm{kHz}$	15 kHz	100  kHz	26  kHz	10  kHz	80 kHz	130  kHz	70 kHz	70 kHz	30  kHz	$15 \mathrm{kHz}$	Elektr.	etekorrate
40 kHz	65 kHz	35 kHz	8 kHz	6 kHz	7 kHz	6 kHz	17 kHz	8 kHz	4 kHz	60 kHz	70 kHz	22  kHz	20  kHz	17 kHz	14 kHz	Rec.	n
156 A	135 A	120 A	116 A	100 A	A 66	152 A	153 A	116 A	95 A	156 A	95 A	88 A	84 A	91 A	93 A	$I_{Sp}$ [A]	Fe
+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+185 / -386	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	+100 / -200	$U_{Spek}$ e/Rec [V]	ldstärken
1.2 nA	1,5 nA	1,0 nA	0,5 nA	0,3 nA	0,2 nA	1,5 nA	1,2 nA	0,7 nA	0,2 nA	1 nA	1 nA	1 nA	1 nA	1 nA	0,4 nA	$I_P$	
12 h	7 h	4 h	7 h	8 h	8 h	64 h	11 h	7 h	6 h	46 h	24 h	33 h	9 h	6 h	7 h	Messzeit	
20 000	80 000	70 000	$350\ 000$	770 000	830 000	$140\ 000$	70 000	000 00	$300\ 000$	$20\ 000$	$10\ 000$	$30\ 000$	80 000	$120\ 000$	$110\ 000$	<b>TI-Events</b>	Dɛ
50 000	$150\ 000$	$300\ 000$	$40\ 000$	80 000	70 000	$650\ 000$	$350\ 000$	$300\ 000$	70 000	$15\ 000$	$35\ 000$	$150\ 000$	$320\ 000$	$50\ 000$	000 06	SC-Events	ıten

Einzelraten auf den jeweiligen Detektoren,  $I_{Sp}$  dem Strom durch die 2 Hauptspulen,  $U_{Spek}$  der angelegten Spektrometerspannung und  $I_P$  dem Strahlstrom (Projektile). Die Messzeit bezieht sich auf den Teil der aufgezeichneten Daten, die anschließend auch analysiert werden konnten und die guten SCbeziehungsweise TI-Ereignisse bildeten. Tabelle C.2: Experimentelle Parameter während des Experiments. Mit  $U_B$  der Spannung des Van-de-Graff-Beschleunigers, Proj., Elektr. und Rec. den

# D. Differenzielle Wirkungsquerschnitte

Für jedes Projektil (H<sup>+</sup>, He<sup>+</sup> und He<sup>2+</sup>) und jede Stoßenergie (40, 60, 100, 150, 300, 450 und 630 keV/u), sind in diesem Abschnitt - sortiert zuerst nach dem Projektil und anschließend nach dessen Energie pro Nukleon - der streuwinkel-differenzielle Wirkungsquerschnitt des Einfachelektroneneinfangs (SC), die Impulsverteilungen des Elektrons und Rückstoßions mit Blick auf die Projektilstreuebene sowie die Impulsverteilung des Elektrons mit Blick auf die Rückstoßionenstreuebene dargestellt. Auf die Darstellungen senkrecht zur Streuebene wurde aus Gründen des Umfangs verzichtet.

Der zweifach-differenzielle Streuwinkelwirkungsquerschnitt ( $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$ ) des Einfachelektronentransfers ist für verschiedene energetische Endzustände von Projektil und Target (*Q*-Wert) dargestellt. Die Nomenklatur entspricht der Beschreibung aus Tabelle 6.1. Sofern Endzustände nicht getrennt werden konnten, wurden sie zusammengefasst (dargestellt durch einen Schrägstrich).

Für die Transferionisation (TI) sind die Impulsspektren (in atomaren Einheiten) integriert und für verschiedene Projektilstreuwinkel  $theta'_P$  [0;0,25[, [0,25;0,45[, [0,45;0,65[, [0,65;0,95[, [0,95;1,35[, [1,35;2,0[ und [2,0;4,0[ mrad-amu dargestellt; im einzelnen sind dies:

• Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$ bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P$ )

- Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P} dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P} dp_{z,Rec} d\theta'_P$ )
- Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ )

Sofern eine Separation der verschiedenen Endzustände (ohne und mit Anregung - TI1/TI2) möglich war, sind beide Varianten dargestellt. Die zwei senkrechten Linien links des Ursprungs repräsentieren den zum Streuwinkelintervall gehörenden transversalen Impulsübertrag. Die waagerechten gestrichelten Linien in den Rückstoßionenimpulsspektren skizzieren die kinematischen Grenzlinien des Projektil-CUSPs  $p_{z,Rec} = -Q/v_P - v_P$  (rot) sowie des Target-CUSPs (Elektroneneinfang und -ionisation mit  $E_{kin,e}=0$ )  $p_{z,Rec}=0$  $-Q/v_P - v_P/2$  (cyan) mit entsprechendem Q nach Tabelle 6.1. Die rote gestrichelte Kreislinie skizziert den klassischen BE-Ring mit dem Ursprung bei  $v_P$ und dem Radius von ebenfalls  $v_P$ . Horizontal ist zusätzlich die Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  durch eine rote Linie skizziert. Für die Darstellung in der Projektilstreuebene wird das Projektil jeweils nach rechts gestreut. Die in der Rückstoßionenstreuebene dargestellten Streuwinkelintervalle (senkrechte Linien) skizzieren nur die Größe eines um die  $y^{\Sigma_{Rec}}$ -Achse rotationssymmetrischen Hohlzylinders. Der Transversalimpulsübertrag auf das Target gibt in dieser Darstellung keine ausgezeichnete Richtung vor.

### D.1 H<sup>+</sup> Projektile



**Abbildung D.1:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 60 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.2:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.3:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.4:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.5:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 100 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.6:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 100 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.7:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 100 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.8:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 100 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.9:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 150 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.10:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.11:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.12:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.


**Abbildung D.13:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 300 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.14:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.15:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.16:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.17:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems H<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 630 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.18:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.19:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}dp_{P}$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.20:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u H<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.

## **D.2** He<sup>+</sup> Projektile



**Abbildung D.21:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 60 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.22:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.23:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.24:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.25:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.26:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.27:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.28:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 150 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.29:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.30:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.31:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\sum_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.32:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 300 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.33:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.34:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.35:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.36:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 630 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.37:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.38:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}dp_{r})$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.39:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u He<sup>+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.





**Abbildung D.40:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 40 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.41:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.42:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.43:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.44:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.45:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.46:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 40 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.47:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 60 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.48:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.


**Abbildung D.49:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.50:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.51:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.52:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.53:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 60 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.54:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 150 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.55:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$ bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.56:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.57:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.58:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.59:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.60:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 150 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.61:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 300 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.62:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.63:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.64:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.65:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$ bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.66:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.67:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 300 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.68:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 450 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.69:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$ bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 450 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.70:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 450 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.71:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI1 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 450 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.72:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 450 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.73:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}d\theta'_P$ ) der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 450 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.74:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI2 (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 450 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.75:** Streuwinkel differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/d\theta'_P dp_{z,Rec}$  des Einelektronentransfers (SC) des Stoßsystems He<sup>2+</sup>/He bei einer Projektilenergie von 630 keV/u für verschiedene Anregungszustände (siehe Tabelle 6.1). Die Projektilstreuwinkel wurden auf ein Projektil der Masse 1 amu (Proton) normiert.



**Abbildung D.76:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zweibzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_P}dp_{z,e}d\theta'_P)$  der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.77:** Rückstoßionenimpulsverteilung dargestellt in der Projektilstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,Rec}^{\Sigma_P}dp_{z,Rec}dp_{P}$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.



**Abbildung D.78:** Elektronenimpulsverteilung dargestellt in der Rückstoßionenstreuebene (Zwei- bzw. dreifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt  $d^2\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}$  bzw.  $d^3\sigma/dp_{x,e}^{\Sigma_{Rec}}dp_{z,e}d\theta'_P$ ) der TI (siehe Tabelle 6.1) des Stoßsystems 630 keV/u He<sup>2+</sup>/He. Weitere Erläuterungen sind zu Beginn dieses Kapitels zu finden.

## Literatur

- [AArt05] A. N. Artemyev, A. E. Klasnikov, T. Beier, J. Eichler, C. Kozhuharov, V. M. Shabaev, Th. Stöhlker and V. A. Yerokhin: Negative-continuum dielectronic recombination into low-lying bound states of heavy ions, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 235, (2005) 270
- [ACza04a] A. Czasch, M. Schöffler, T. Jahnke, S. Schössler, M. Hattass, Th. Weber, M. Weckenbrock, J. Titze, Ch. Wimmer, A. Staudte, S. Kammer, S. Voss, R. Dörner, H. Schmidt-Böcking, J. M. Rost, T. Schneider and C. Liu: Doubly Excited States in Helium Close to the Double Ionization Threshold: Angular and Energy Resolved Partial Cross Sections, Physica Scripta. Vol. **T110**, (2004), 141
- [ACza04b] A. O. Czasch: Doppelt hoch angeregte Zustände von Helium: Partielle Wirkungsquerschnitte und Winkelverteilungen der Elektronenemission, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2004)
- [AFer59] A. F. Ferguson and B. L. Moiseiwitsch: Double Charge Transfer and the Mobility of He<sup>2+</sup>-Ions in Helium, Proc. Phys. Soc., 74, (1959), 457
- [AFor94] A. L. Ford and J. F. Reading: Improved forced impulse method calculations of single and double ionization of helium by collisions with high-energy protons and antiprotons, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 27, (1994), 4215
- [AGod02] A. L. Godunov, P. B. Ivanov, V. A. Schipakov and M. Schulz: Differential cross sections for double excitation of the autoionizing states of helium by 100-150 keV proton impact, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35, (2002), 2477
- [AGod04] A. L. Godunov, C. T. Whelan and H. R. J. Walters: Fully differential cross sections for transfer ionization - a sensitive probe of high level correlation effects in atoms, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 37, (2004), L201
- [AGod05] A. L. Godunov, C. T. Whelan, H. R. J. Walters, V. S. Schipakov, M. Schöffler, V. Mergel, R. Dörner, O. Jagutzki, L. Ph. H. Schmidt, J. Titze and H. Schmidt-Böcking: Transfer ionization process  $p + He \rightarrow H^0 + He^{2+} + e^-$  with the ejected electron detected in the plane perpendicular to the incident beam direction, Phys. Rev. A, **71**, (2005), 052712
- [AHas04] A. Hasan, N. V. Maydanyuk, B. Fendler, A. Voitkiv, B. Najjari and M. Schulz: *Three-dimensional fully differential single ionization cross sections* for 75 keV p + He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **37**, (2004), 1923
- [AJai87] A. Jain, C. D. Lin and W. Fritsch: Density matrices of the excited H (n=2 and 3) atoms formed in 25 - 100-keV proton-helium charge-transfer collisions, Phys. Rev. A, 36, (1987), 2041

- [AKan51] A. Kantrowitz, J. Grey: A High Intensity Source for the Molecular Beam. Part I. Theoretical, Rev. Sci. Instr., 22, (1951), 328
- [AKhe98] A. S. Kheifets and I. Bray: *Photoionization with excitation and double pho*toionization of the helium isoelectronic sequence, Phys. Rev. A, **58**, (1998), 4501
- [AKhe05] A. S. Kheifets: persönliche Mitteilung, (2005)
- [AKna02a] A. Knapp, A. Kheifets, I. Bray, Th. Weber, A. L. Landers, S. Schössler, T. Jahnke, J. Nickles, S. Kammer, O. Jagutzki, L. Ph. Schmidt, T. Osipov, J. Rösch, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, C. L. Cocke and R. Dörner: *Mechanisms of Photo Double Ionization of Helium by 530 eV Photons*, Phys. Rev. Lett., 89, (2002), 033004
- [AKna02b] A. Knapp, M. Walter, Th. Weber, A. L. Landers, S. Schössler, T. Jahnke, M. Schöffler, J. Nickles, S. Kammer, O. Jagutzki, L. Ph. H. Schmidt, T. Osipov, J. Rösch, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, C. L. Cocke, J. Feagin and R. Dörner: Energy sharing and asymmetry parameters for photo double ionization of helium 100 eV above threshold in single-particle and Jacobi coordinates, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35, (2002), L521-L526
- [AKna05a] A. Knapp, A. Kheifets, I. Bray, Th. Weber, A. L. Landers, S. Schössler, T. Jahnke, J. Nickles, S. Kammer, O. Jagutzki, L. Ph. Schmidt, M. Schöffler, T. Osipov, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, C. L. Cocke and R. Dörner: *Pho*to double ionization of helium 100 eV and 450 eV above threshold: I. Linearly polarzied light, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **38**, (2005), 615
- [AKna05b] A. Knapp, A. Kheifets, I. Bray, Th. Weber, A. L. Landers, S. Schössler, T. Jahnke, J. Nickles, S. Kammer, O. Jagutzki, L. Ph. Schmidt, M. Schöffler, T. Osipov, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, C. L. Cocke and R. Dörner: *Photo double ionization of helium 100 eV and 450 eV above threshold: II. Circularly polarzied light*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **38**, (2005), 635
- [AKna05c] A. Knapp, B. Krässig, A. Kheifets, I. Bray, Th. Weber, A. L. Landers, S. Schössler, T. Jahnke, J. Nickles, S. Kammer, O. Jagutzki, L. Ph. Schmidt, M. Schöffler, T. Osipov, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, C. L. Cocke and R. Dörner: Photo double ionization of helium 100 eV and 450 eV above threshold: III. Gerade and ungerade amplitudes and their relative phases, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 38, (2005), 645
- [AKna05d] A. Knapp: *Photodoppelionisation von Helium*, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2005)
- [AKoe89] A. Kövér, L. Sarkadi, J. Pálinkás, G.y Szabó, T. Vajnai, O. Heil, K. O. Groeneveld, J. Gibbons and I. A. Sellin: The contribution of the ECC to the forward electron cusp in 50-150 keV amu<sup>-1</sup> He<sup>+</sup>-He, Ar collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 22, (1989), 1595
- [AMar88] A. E. Martínez, R. G. Deco, R. D. Rivarola and P. D. Fainstein: K-Shell vacancy production in asymmetric collisions, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 34, (1988), 32
- [ARie76] A. Riera and A. Salin Limitations on the use of the perturbed stationarystate method for the description of slow atom-atom collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 9, (1976), 2877

- [ASal69] A. Salin Ionization of atomic hydrogen by proton impact, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 2, (1969), 631
- [ASal91] A. Salin Projectile Scattering in double Ionization of Helium by Protons, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 24, (1991), 3211
- [ASta01] A. Staudte:  $D_2$  in ultrakurzen, hochintensiven Laserpulsen, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2001)
- [ASta05] A. Staudte: Subfemtosecond Electron Dynamics of  $H_2$  in Strong Fields or The Quest for the Molecular Clock, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2005)
- [AWet86] A. E. Wetmore and R. E. Olson: Ionization of H and He<sup>+</sup> by electrons and positrons colliding at near-threshold energies, Phys. Rev. A, **34**, (1986), 2822
- [BJon04] B. Jonson: Light dripline nuclei, Phys. Reports, 389, (2004), 1
- [BMoi56] B. L. Moiseiwitsch: Interaction Energy and Charge Exchange between Helium Atoms and Ions, Proc. Phys. Soc. A, 69, (1956), 653
- [BPek00] B. L. Peko and T. M. Stephen: Absolute detection efficiencies of low energy H, H<sup>-</sup>, H<sup>+</sup>, H<sup>+</sup><sub>2</sub> and H<sup>+</sup><sub>3</sub> incident on a multichannel plate detector, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, **171**, (2000) 597
- [BSte78] B. Stern, J. P. Gauyacq and V. Sidis: Quantal treatment of one-electron (n=2 levels) and two-electron excitations of He in He<sup>+</sup> on He collisions at a few keV, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, (1978), 653
- [CBar90] C. F. Barnett: Atomic Data for Fusion, Collisions of H, H<sub>2</sub>, He and Li Atoms with Atoms and Molecules, edited by I. Alvarez, C. Cisneros and R. A. Phaneuf, Controlled Fusion Atomic Data Center, Springfield, Volume I, (1990)
- [CBra03] C. Brandau, A. Müller, W. Shi, S. Schippers, T.vBartsch, S. Böhm, C. Böhme, A. Hoffknecht, H. Knopp, N. Grün, W. Scheid, T. Steih, F. Bosch, B. Franzke, P. H. Mokler, F. Nolden, M. Steck, Th. Stöhlker and Z. Stachura: Precise Determination of the 2s<sub>1/2</sub> 2p<sub>1/2</sub> Splitting in Very Heavy Lithiumlike Ions Utilizing Dielectronic Recombination, Phys. Rev. Lett., **91**, (2003), 073202
- [Cern05] R. Brun, F. Rademakers, http://root.cern.ch, (2005)
- [CGer97] C. Gerthsen, H. Vogel: Gerthsen Physik, Springer Verlag, 19. Auflage, (1997)
- [CHar80] C. Harel and A. Salin: Application of OEDM orbitals to many-electron systems: He<sup>2+</sup>-He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 13, (1980), 785
- [CIII02] C. Illescas, B. Pons and A. Riera: Classical description of the electron capture to the continuum cusp formation in ion-atom collisions, Phys. Rev. A, 65, (2002), 030703
- [CLov64] C. Lovelace: Practical Theory of Three-Particle States. I. Nonrelativistic, Phys. Rev., 135, (1964), 1225
- [CLun94] C. J. Lundy, R. E. Olson, D. R. Schultz and J. P. Pascale: Coherence parameters for electron capture in H<sup>+</sup>+He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 27, (1994), 935

- [CMor96] C. Mortimer, H. Vogel: Chemie das Basiswissen der Chemie, Georg Thieme Verlag Stuttgart, New York, 6. Auflage, (1996)
- [CRei86] C. O. Reinhold and C. A. Falcón: Classical ionization and charge-transfer cross sections for  $H^+$  + He and  $H^+$  + Li<sup>+</sup> collisions with consideration of model interactions, Phys. Rev. A, **33**, (1986), 3859
- [CRei87] C. O. Reinhold, C. A. Falcon and J. E. Miraglia: Ionisation and excitation to Rydberg states in collisions of fully stripped ions with hydrogen atoms, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 20, (1987), 3737
- [CRei89a] C. O. Reinhold and R. E. Olson: Classical two-center effects in ejectedelectron spectra from p<sup>+</sup>, p<sup>-</sup>, and He<sup>2+</sup> + He collisions at intermediate energies, Phys. Rev. A, **39**, (1989), 3861
- [CWei34] C. F. Weizsäcker: Ausstrahlung bei Stößen sehr schneller Elektronen, Z. Phys., 88, (1934), 612
- [CWoo97] C. J. Wood, R. E. Olson, W. Schmitt, R. Moshammer and J. Ullrich: Momentum spectra for single and double electron ionization of He in relativistic collisions, Phys. Rev. A, 56, (1997), 3746
- [DBat66] D. R. Bates and R. A. Mapleton: Classical calculations on electron capture, Proc. Phys. Soc., 87, (1966), 657
- [DBat78] D. R. Bates: Other men's flowers: Classical treatment of collisions, Massey's adiabatic criterion and ionization in flames; ion-molecule reactions; bound-free and free-free transition of electrons in ambient atomic hydrogen, Physics Reports, 35, (1978), 305
- [DBel77] Dž. Belkić and R. Gayet: Charge exchange in fast collisions of H<sup>+</sup> and He<sup>2+</sup> with helium, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **10**, (1977), 1923
- [DBel78] Dž. Belkić and A. Salin: Differential cross sections for charge exchange at high energies, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, (1978), 3905
- [DBel79] Dž. Belkić and I. Mančev: Electron capture in high-energy ion-atom collisions Physics Reports, 56, (1971), 279
- [DBel88] Dž. Belkić: Electron capture by fast proton from helium, nitrogen and oxygen: The corrected first Born approximation, Phys. Rev. A, **37**, (1988), 55
- [DBel93] Dž. Belkić: Intermediate ionization continua for double charge exchange at high impact energies, Phys. Rev. A, 47, (1993), 3824
- [DBel94a] Dž. Belkić, I. Mančev and M. Mudrinić: *Two-electron capture from helium* by fast alpha particles, Phys. Rev. A, **49**, (1994), 3646
- [DBel94b] Dž. Belkić: Double charge exchange at high impact energies, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 86, (1994), 62
- [DBel97a] Dž. Belkić, R. Gayet, J. Hanssen, I. Mančev and A. Nuñez: Dynamic electron correlations in single capture form helium by fast protons, Phys. Rev. A, 56, (1997), 3675
- [DBoa90] D. H. Boal, C. K. Gelbke and B. K. Jennings: Intensity interferometry in subatomic physics, Rev. Mod. Phys., 62, (1990), 553

- [DBun71] D. L. Bunker: Methods in Computational Physics, edited by B. Alder, S. Fernback and M. Rotenberg, Volume 10, Academic Press, New York, (1971)
- [DCor05] D. Cortina-Gil, J. Fernandez-Vazquez, T. Aumann, T. Baumann, J. Benlliure, M. J. G. Borge, L. V. Chulkov, U. Datta Pramanik, C. Forssén, L. M. Fraile, H. Geissel, J. Gerl, F. Hammache, K. Itahashi, R. Janik, B. Jonson, S. Mandal, K. Markenroth, M. Meister, M. Mocko, G. Münzenberg, T. Ohtsubo, A. Ozawa, Y. Prezado, V. Pribora, K. Riisager, H. Scheit, R. Schneider, G. Schrieder, H. Simon, B. Sitar, A. Stolz, P. Strmen, K. Sümmerer, I. Szarka and H. Weick: *Oneneutron knockout of*<sup>23</sup>O, The European Physical Journal A, **25**, (2005), 343
- [DCro82] D. S. F. Crothers: Refined Orthogonal Variational Treatment of Continuum Distorted Waves, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 15, (1982), 2061
- [DCro83] D. S. F. Crothers and J. F. McCann: Ionisation of atoms by ion impact, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 16, (1983), 3229
- [DFis03] D. Fischer: Mehr-Teilchen-Dynamik in der Einfach- und Doppelionisation von Helium durch geladene Projektile, Doktorarbeit, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, (2003)
- [DHar28] D. R. Hartree: The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. I. Theory and methods, Proc. Cambridge Phil. Soc., 24, (1928), 89
- [DMad75] D. H. Madison and E. Merzbacher: "Ionization and Transition Probabilities" in ATOMIC INNER-SHELL PROCESSES, Volume I, Academic Press, New-York, (1975)
- [DMil88a] D. R. Miller: "Free Jet Sources" in Atomic and Molecular Beam Methods, Oxford University Press, Oxford/New York, (1988)
- [DSch88] D. R. Schultz and R. E. Olson: Single-electron-removal processes in collisions of positrons and protons with helium at intermediate velocities, Phys. Rev. A, 38, (1988), 1866
- [DSch92] D. R. Schultz, C. O. Reinhold, R. E. Olson and D. G. Seely: Differential cross sections for state-selective electron capture in 25-100 keV proton-helium collisions, Phys. Rev. A, 46, (1992), 275
- [EBur52] E. Burhop: "Auger effect and other radiationless transitions, University Press, Camebridge, (1952)
- [EGha04] E. Ghanbari Adivi and M. A. Bolorizadeh: Faddeev treatment of singleelectron capture by protons in collision with many-electron atoms, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 37, (2004), 3321
- [EHor82] E. Horsdal-Pedersen, P. Loftager and J. L. Rasmussen: Angular-dependent electron-capture probabilities for H<sup>+</sup> in helium, neon and argon, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 15, (1982), 2461
- [EHor83] E. Horsdal-Pedersen, C. L. Cocke and M. Stöckli: Experimental Observation of the Thomas Peak in High-Velocity Electron Capture by Protons from He, Phys. Rev. Lett., 50, (1983), 1910
- [EHor86] E. Horsdal, B. Jensen and K. O. Nielsen: Critical Angle in Electron Capture, Phys. Rev. Lett., 57, (1986), 1414

- [ESid99] E. Y. Sidky and C. D. Lin: Impact-velocity dependence of ejected-electron distributions for ionization in proton-hydrogen collisions, Phys. Rev. A, 60, (1999), 377
- [ESid00] E. Y. Sidky, C. Illescas and C. D. Lin: Electrons Ejected with Half the Projectile Velocity and the Saddle Point Mechanism in Ion-Atom Collisions, Phys. Rev. Lett., 85, (2000), 1634
- [ESol90] E. A. Solov'ev: Angular distribution of saddle-point electron in slow H<sup>+</sup>+H collisions, Phys. Rev. A, 42, (1990), 1331
- [FAfa01] F. Afaneh: Momentum Images of Continuum Electrons from the Molecular Ionization and Dissociation of H<sub>2</sub> Induced by Slow He<sup>2+</sup> Ions, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2001)
- [FKoi78] F. Koike, N. Nakamura, S. Hara, Y. Itikawa, M. Matsuzawa, H. Sato and I. Shimamura: *Theoretical study of two-electron excitation in He<sup>2+</sup> + He collisi*ons, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **11**, (1978), 4193
- [FKri90] F. G. Kristensen and E. Horsdal-Pedersen: Angular differential measurements of ionization in fast H<sup>+</sup>-He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 23, (1990), 4129
- [FMar01] F. M. Marqués, M. Labiche, N. A. Orr, J. C. Angélique, L. Axelsson, B. Benoit, U. C. Bergmann, M. J. G. Borge, W. N. Catford, S. P. G. Chappell, N. M. Clarke, G. Costa, N. Curtis, A. D'Arrigo, E. de Góes Brennand, F. de Oliveira Santos, O. Dorvaux, G. Fazio, M. Freer, B. R. Fulton, G. Giardina, S. Grévy, D. Guillemaud-Mueller, F. Hanappe, B. Heusch, B. Jonson, C. Le Brun, S. Leenhardt, M. Lewitowicz, M. J. López, K. Markenroth, A. C. Müller, T. Nilsson, A. Ninane, G. Nyman, I. Piqueras K. Riisager, M. G. Saint Laurent, F. Sarazin, S. M. Singer, O. Sorlin and L. Stuttgé: *Three-body correlations in Borromean halo nuclei*, Phys. Rev. C, **64**, (2001), 061301
- [FSmi69] F. T. Smith: Diabatic and Adiabatic Representations for Atomic Collison Problems, Phys. Rev., 179, (1969), 111
- [FWal61] F. T. Wall, L. A. Hiller, JR. and J. Mazur: Statistical Computation of Reaction Probabilities. II, Journal of Chemical Physics, 35, (1961), 1284
- [GBer89] G. C. Bernardi, S. Suárez, P. D. Fainstein, C. R. Garibotti, W. Meckbach and P. Focke: Two-center effects in electron emission in <sup>3</sup>He<sup>2+</sup>-He and H<sup>+</sup>-He collisions at intermediate energies, Phys. Rev. A, **40**, (1989), 6863
- [GBer90] G. Bernardi, S. Suarez, P. Fainstein, C. Garibotti, W. Meckbach and P. Focke: Reply to projectile- and target-charge dependent effects in ionizing collisions of H<sup>+</sup> and He<sup>+</sup> with He, Ne and Ar atoms, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 23, (1990), L829
- [GBer99] G. Bernardi, P. Focke, A. D. González, S. Suárez and D. Fregenal: *Electron* emission for transfer ionization in 70 keV H<sup>+</sup> on He, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **32**, (1999), L451
- [GCro70] G. B. Crooks and M. E. Rudd: Experimental Evidence for the Mechanism of Charge Transfer into Continuum States, Phys. Rev. Lett., 25, (1970), 1599
- [GHat76] G: J. Hatton: The noncrossing rule and spurios avoided crossings, Phys. Rev. A, 14, (1976), 901
- [GBed03] G. Bednarz, A. Warczak, D. Sierpowski, Th. Stöhlker, S. Hagmann, F. Bosch, A. Gumberidze, C. Kozhuharov, D. Liesen and P. H. Mokler: Radiative Electron Capture into the K- and L- Shell of H-, He-, and Li-like Uranium Ions at Relativistic Energies, Hyperfine Interactions, 146/147, (2003), 29
- [GBru89] G. Brusdeylins, J. P. Toennies und R. Vollmer, XII. Symposion on Molecular Beams, Book of Abstracts, Perugia, (1989)
- [GSch87] G. Schiwietz and W. Fritsch: Determination of differential cross sections in classical trajectory Monte Carlo calculations, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 20, (1987), 5463
- [GSco88] G. Scoles, D. Bassai, U. Buck and D. Lainé: Atomic and Molecular Beam Methods, Volume I, Oxford University Press, New York/Oxford, (1988)
- [GTan00] G. Tanner, K. Richter and J.-M. Rost: The theory of two electron atoms: between ground state and complete fragmentation, Rev. Mod. Phys., 73, (2000), 497
- [JDuM33] J. W. M. DuMond: The Linear Momenta of Electrons in Atoms and in Solid Bodies as Revealed By X-Ray Scattering, Rev. Mod. Phys., 5, (1933), 1
- [JLev91] J. C. Levin, D. W. Lindle, N. Keller, R. D. Miller, Y. Azuma, N. Berrah Mansour, H. G. Berry and I. A. Sellin: *Measurement of the ratio of double-to-single* photoionization of helium at 2.8 keV using synchrotron radiation, Phys. Rev. Lett., 67, (1991), 968
- [JLev93] J. C. Levin, I. A. Sellin, B. M. Johnson, D. W. Lindle, R. D. Miller, N. Berrah, Y. Azuma, H. G. Berry and D.-H. Lee: *High-energy behavior of the double photoionization of helium from 2 to 12 keV*, Phys. Rev. A, 47, (1993), R16
- [JLev96] J. C. Levin, G. Bradley Armen and I. A. Sellin: Photoionization and Compton Double Ionization of Helium from Threshold to 20 keV, Phys. Rev. Lett., 76, (1996), 1220
- [JSam98] J. A. R. Samson, W. C. Stolte, Z.-X. He, J. N. Cutler and Y. Lu: Double photoionization of helium, Phys. Rev. A, 57, (1998), 1906
- [Hama94] Hamamatsu: Technik Information, MCP Assembly, (2004)
- [HAsh66] H. Ashkenas, F. S. Sherman: "The Structure and Utilization of Supersonic Free Jets in Wind Tunnels" in Rarefield Gas Dynamics, Volume II, Academic Press, New York, (1966)
- [HBet30] H. A. Bethe: Theorie des Durchganges schneller Korpuskularstrahlen durch Materie, Annalen der Physik (Leipzig), 5, (1930), 325
- [HBil00] H. Billen and Lloyd M. Young, Los Alamos National Laboratory: Poisson Superfish, AUTOMESH, (2000)
- [HBus97] H. F. Busnengo, A. E. Martínez, R. D. Rivarola and H. Tawara: *Electron* capture cross sections of interest for plasma diagnostics: the He<sup>2+</sup> + He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **30**, (1997), L805

- [HFol94] H. O. Folkerts, F. W. Bliek, L. Meng, R. E. Olson, R. Morgenstern, M. von Hellermann, H. P. Summers and R. Hoekstra: He<sup>2+</sup>-He collisions: oneelectron capture and target-ion excitation, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 27, (1994), 3475
- [HHak96] H. Haken, H. Wolf: Atom- und Quantenphysik Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen, Springer Verlag, 6. Auflage, (1996)
- [HMas32] H. S. W. Massey and C. B. O. Mohr: The collision of slow electron with atoms I - General theory and elastic collisions, Proc. Roy. Soc. London A, 136, (1932), 289
- [HMas33] H. S. W. Massey and R. A. Smith: The Passage of Positive Ions through Gases, Proc. Roy. Soc. London A, 142, (1933), 142
- [HMas56] H. S. W. Massey: Theory of the Scattering of Slow Electrons, Rev. Mod. Phys., 28, (1956), 199
- [HMas74] H. S. W. Massey, E. H. S. Burhop and H. B. Gilbody: *Electronic and Ionic Impact Phenomena Vol.* 74, Clarendon Press, Oxford, (1974)
- [HNeu84] H. Neuert: Atomare Stoβorzesse, Teubner-Verlag, Stuttgart, (1984)
- [HSch89] H. Schmidt-Böcking, J. Ullrich, R. Schuch, R. E. Olson, R. Dörner: Electronic Transitions in Highly Charged Ion-Atom-Collisions, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 43, (1989), 272
- [HSch02] H. T. Schmidt, A. Fardi, R. Schuch, S. H. Schwartz, H. Zettergren, H. Cederquist, L. Bagge, H. Danared, A. Källberg, J. Jensen, K.-G. Rensfelt, V. Mergel, L. Schmidt and H. Schmidt-Böcking: *Double-to-Single Target Ionization Ratio for Electron Capture in Fast p-He Collisions*, Phys. Rev. Lett., 89, (2002), 163201
- [HSch03a] H. Schmidt-Böcking, V. Mergel, R. Dörner, C. L. Cocke, O. Jagutzki, L. Schmidt, Th. Weber, H. J. Lüdde, E. Weigold, J. Berakdar, H. Cederquist, H. T. Schmidt, R. Schuch and A. S. Kheifets: *Revealing the non-s<sup>2</sup> contributions* in the momentum wave function of ground state He, Europhys. Lett., 62, (2003), 477
- [HSch03b] H. Schmidt-Böcking, V. Mergel, L. Schmidt, R. Dörner, O. Jagutzki, K. Ullmann, T. Weber, H. J. Lüdde, E. Weigold, A. S. Kheifets: Dynamics of ionization processes studied with the COLTRIMS method - new insight into e-e correlation, Rad. Phys. Chem., 68, (2003), 41
- [HSch05a] H. T. Schmidt, J. Jensen, P. Reinhed, R. Schuch, K. Stochkel, H. Zettergren, H. Cederquist, L. Bagge, H. Danared, A. Källberg, H. Schmidt-Böcking and C. L. Cocke: *Recoil-ion momentum distribution for transfer ionization in fast proton-He collisions*, Phys. Rev. A, 72, (2005), 012713
- [HSch05b] H. Schmidt-Böcking, M. S. Schöffler, T. Jahnke, A. Czasch, V. Mergel, R. Dörner, O. Jagutzki, M. Hattass, Th. Weber, E. Weigold, H. T. Schmidt, R. Schuch, H. Cederquist, Y. Demokov, C. Whelan, A. Godunov and J. Walters: Many-particle fragmentation processes in atomic and molecular physics - new insight into the world of correlation, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 233, (2005), 3

- [HSim99] H. Simon, D. Aleksandrov, T. Aumann, L. Axelsson, T. Baumann, M. J. G. Borge, L. V. Chulkov, R. Collatz, J. Cub, W. Dostal, B. Eberlein, Th. W. Elze, H. Emling, H. Geissel, A. Grünschloss, M. Hellström, J. Holeczek, R. Holzmann, B. Jonson, J. V. Kratz, G. Kraus, R. Kulessa, Y. Leifels, A. Leistenschneider, T. Leth, I. Mukha, G. Münzenberg, F. Nickel, T. Nilsson, G. Nyman, B. Petersen, M. Pfützner, A. Richter, K. Riisager, C. Scheidenberger, G. Schrieder, W. Schwab, M. H. Smedberg, J. Stroth, A. Surowiec, O. Tengblad and M. V. Zhukov: Direct Experimental Evidence for Strong Admixture of Different Parity States in <sup>11</sup>Li, Phys. Rev. Lett., 83, (1999), 496
- [HSli91a] H. A. Slim, E. L. Heck, B. H. Bransden and D. R. Flower: Charge transfer and excitation in proton-helium collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 24, (1991), 1683
- [HSli91b] H. A. Slim, E. L. Heck, B. H. Bransden and D. R. Flower: Theoretical differential cross sections for proton-helium scattering at intermediate energies, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 24, (1991), 2353
- [HSli95] H. A. Slim, B. H. Bransden and D. R. Flower: Formation of autoionizing states of helium in collisions with protons, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 28, (1995), 1623
- [HSto98] H. Stöcker: Taschenbuch der Physik, 3. Auflage, Harry Deutsch Verlag, (1998)
- [HVog86] H. Vogt, R. Schuch, E. Justiniano, M. Schulz and W. Schwab: Experimental Test of Higher-Orer Electron-Capture Processes in Collisions of Fast Protons with Atomic Hydrogen, Phys. Rev. Lett., 57, (1986), 2256
- [HYag77] H. Yagisawa, H. Sato and T. Watanabe: Accurate electronic energies of  $He_2^{+2}$ , Phys. Rev. A, 16, (1977), 1352
- [IAli99] I. Ali, R. Dörner, O. Jagutzki, S. Nüttgens, V. Mergel, L. Spielberger, Kh. Khayyat, T. Vogt, H. Bräuning, K. Ullmann, R. Moshammer, J. Ullrich, S. Hagmann, K.-O. Groeneveld, C. L. Cocke and H. Schmidt-Böcking: *Multi-Hit* Detector System for Complete Momentum Balance in Spectroscopy in Molecular Fragmentation Processes, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 149, (1999), 490
- [IBra92] I. Bray and A. T. Stelbovics: Convergent Close-Coupling Calculations of Electron-Hydrogen Scattering, Phys. Rev. A, 46, (1992), 6995
- [IChe64] I. M. Cheshire: Continuum distorted wave approximation; resonant charge transfer by fast protons in atomic hydrogen, Proc. Phys. Soc., 84, (1964), 89
- [IMan96] I. Mančev: Single-electron capture by hydrogen atoms and helium ions from helium atoms, Phys. Rev. A, 54, (1996), 423
- [IMan05] I. Mančev: Single-electron capture from helium-like atomic systems by bare projectiles, Europhys. Lett., 69, (2005), 200
- [IPer66] I. C. Percival: Classical impulse approximation to ionization of hydrogen atoms by protons, Proc. Phys. Soc., 88, (1966), 885

- [ITol98] I. Y. Tolstikhina, O. I. Tolstikhin and H. Tawara: Shake-off mechanism of two-electron transitions in slow ion-atom collisions, Phys. Rev. A, 57, (1998), 4387
- [JAnt98] J. Anton: Eine generalistische Lösung der zeitabhängigen DFS-Gleichung mit Hilfe angepaßter atomarer Basissätze und expliziter elektronischer Translationsfaktoren, Doktorarbeit, Universität Kassel, (1998)
- [JBri79] J. S. Briggs and K. Taulbjerg: Charge transfer by a double-scattering mechanism involving target electrons, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 12, (1979), 2565
- [JBri80] J. S. Briggs and L. Dubé: *The second Born approximation to the electron transfer cross section*, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **13**, (1980), 771
- [JBur86] J. Burgdörfer and K. Taulbjerg: Distorted-wave methods for electron caapture in ion-atom collisions, Phys. Rev. A, **33**, (1986), 2959
- [JFio01] J. Fiol, V. D. Rodríguez and R. O. Barrachina: *Electron capture to the continuum by proton and positron impact*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **34**, (2001), 933
- [JFio02] J. Fiol, R. O. Barrachina and V: D. Rodríguez: Cusp formation in the singleparticle momentum distribution of three-body continuum states, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35, (2002), 149
- [JGar68a] J. D. Garcia, E. Gerjuoy and J. E. Welker: *Classical Approximation for Ionization by Proton Impact, Phys. Rev.*, **165**, (1968), 66
- [JGar68b] J. D. Garcia and E. Gerjuoy: Classical Calculations of Charge-Transfer Cross Sections, Phys. Rev., 165, (1968), 72
- [JHan72] J. M. Hansteen and O. P. Mosebekk: Simultaneous Coulomb Ejection of Kand L-Shell Electrons by Heavy, Charged Projectiles, Phys. Rev. Lett., 29, (1972), 1361
- [JHan73] J. M. Hansteen and O. P. Mosebekk: Atomic Coulomb excitation by heavy charged particles, Nucl. Phys. A, **201**, (1973), 541
- [JJac53] J. D. Jackson and H. Schiff: Electron Capture by Protons Passing through Hydrogen, Phys. Rev., 89, (1953), 359
- [JJac62] J. D. Jackson: Classical Electrodynamics, New York, John Wiley & Sons, (1962)
- [JMac70] J. Macek: Theory of the Forward Peak in the Angular Distribution of Electrons Ejected by Fast Protons, Phys. Rev. A, 1, (1970), 235
- [JMac82] J. Macek and S. Alston: Theory of electron capture from a hydrogenlike ion by a bare ion, Phys. Rev. A, 26, (1982), 250
- [JMac86] J. Mace and C. Wang: *Theory of united-atom rotational coupling in H*<sup>+</sup>+*He collisions*, Phys. Rev. A, **34**, (1986), 1787
- [JMac95] J. H. Macek and S. Y. Ovchinnikov: Hidden Crossing Theory of Threshold Ionization of Atoms by Electron Impact, Phys. Rev. Lett., 74, (1995), 4631

- [JMcG77] J. H. McGuire and L. Weaver: Independent electron approximation for atomic scattering by heavy particles, Phys. Rev. A, 16, (1977), 41
- [JMcG82a] J. H. McGuire, P. R. Simony and O. L. Weaver: Interpretation of second Born amplitudes in electron capture, Phys. Rev. A, 26, (1982), 1109
- [JMcG82b] J. H. McGuire: Double Ionization of Helium by Protons and Electrons at High Velocities, Phys. Rev. Lett., 49, (1982), 1153
- [JMcG83] J. H. McGuire, J. Eichler and P. R. Simony: Exact second Born calculations for electron capture for systems with various projectile and target charges, Phys. Rev. A, 28, (1983), 2104
- [JMcG84] J. H. McGuire, M. Stöckli, C. L. Cocke, E. Horsdal-Pedersen and N. C. Sil: Study of the Thomas peak in electron capture, Phys. Rev. A, 30, (1984), 89
- [JMcG85] J. H. McGuire and R. E. Kletke: Strong-potential Born calculations for 1s-1s electron capture from atoms by protons, Phys. Rev. A, **32**, (1985), 815
- [JMcG88] J. H. McGuire, N. C. Deb and Y. Aktas: Shakeover probability for electron capture, Phys. Rev. A, 38, (1988), 3333
- [JMcG89] J. H. McGuire, J. C. Straton, W. J. Axmann, T. Ishihara and E. Horsdal: Recoil Distributions in Particle Transfer, Phys. Rev. Lett., 62, (1989), 2933
- [JMcG95] J. H. McGuire, N. Berrah, R. J. Bartlett, J. A. R. Samson, J. A. Tanis, C. L. Cocke and A. S. Schlachter: The ratio of cross sections for double to single ionization of helium by high energy photons and charged particles, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 28, (1995), 913
- [JMox92] J. Moxom, G. Laricchia, M. Charlton, G. O. Jones and A. Köver: Ejectedelectron energy spectra in low energy positron-argon collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 25, (1992), L613
- [JOpp28a] J. R. Oppenheimer: *Three notes on the quantum theory of aperiodic effects,* Phys. Rev., **13**, (1928), 66
- [JOpp28b] J. R. Oppenheimer: On the quantum theory of the capture of electrons, Phys. Rev., 31, (1928), 349
- [JOpp28c] J. R. Oppenheimer: On the theory of electronic impacts, Phys. Rev., 32, (1928), 361
- [JPal89] J. Pálinkás, R. Schuch, H. Cederquist and O. Gustafsson: Observation of Electron-Electron Scattering in Electron Capture by Fast Proton from He, Phys. Rev. Lett., 63, (1989), 2464
- [JPet86] J. R. Peterson and Y. K. Bae: Bound excited states of HeH: Predissociation of  $A^{2}\Sigma^{+}$  and radiative dissociation from  $B^{2}\Pi$ , Phys. Rev. A, **34**, (1986), 3517
- [JPed89] J. O. P. Pedersen and P. Hvelplund: Double excitation of helium by fast electrons, protons and  $C^{(4-6)+}$  ions, Phys. Rev. Lett., **62**, (1989), 2373
- [JRos97] J.-M. Rost, K. Schulz, M. Domke and G. Kaindl: Resonance parameters of photo doubly excited helium, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 30, (1997), 4663

- [JTal76] J. D. Talman, and W. F. Shadwick: Optimized Effective Atomic Central Potential, Phys. Rev. A, 14, (1976), 36
- [JTho12] J. J. Thomson: Ionization by Moving Electrified Particles, Phil. Mag., 23, (1912), 449
- [JTit04] J. Titze: Untersuchung des Elektronentransfers in p-D<sub>2</sub>-Stöβen, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2004)
- [JToe77] J. P. Toennies und K. Winkelmann: Theoretical studies of highly expanded free jets: Influence of quantum effects and a realistic intermolecular potential, J. Chem. Phys., 66, (1977), 3965
- [JUll88] J. Ullrich, H. Schmidt-Böcking, C. Kelbch: Determination of Very Small Projectile Scattering Angles by Measuring Recoil Ion Transverse Velocities, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A, 268, (1988), 216
- [JUll89] J. Ullrich, R. E. Olson, H. Schmidt-Böcking, S. Schmidt, R. Dörner, V. Dangendorf, H. Berg: Multiple Ionization and Collective Electron Emission in MeV/U Uranium-Ion Rare Gas Collisions, J. Phys., 50, (1989), C 1-29
- [JUll91] J. Ullrich, R. Dörner, S. Lencinas, O. Jagutzki, H. Schmidt-Böcking, U. Buck: *Recoil-Ion Momentum Spectroscopy*, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 61 (1991), 415
- [JUll95] J. Ullrich, R. Moshammer, M. Unverzagt, W. Schmidt, P. Jardin, R. E. Olson, R. Dörner, V. Mergel and H. Schmidt-Böcking: *Ionization collision dynamics in* 3.6 MeV/u Ni<sup>24+</sup> on He encounters, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 98, (1995), 375
- [JUll97] J. Ullrich, R. Moshammer, R. Dörner, O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking and L. Spielberger: *Recoil Ion Momentum Spectroscopy*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **30**, (1997), 2917
- [JUll03] J. Ullrich, R. Moshammer, A. Dorn, R. Dörner, L. Ph. H.Schmidt and H. Schmidt-Böcking: *Recoil-ion and electron momentum spectroscopy: reactionmicroscopes*, Rep. Prog. Phys., 66, (2003), 1463
- [JWiz79] J. L. Wiza: Microchannel plate detectors, Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. A, 162, (1979), 587
- [KBar96] K. Bartschat, E. T. Hudson, M. P. Scott, P. G. Burke und V. M Burke: Electron-Atom Scattering at Low and Intermediate Energies Using a Pseudostate/R-Matrix Basis, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 29, (1996), 115
- [KBar02] K. Bartschat, M. P. Scott, P. G. Burke, T. Stitt, N. S. Scott, A. N. Grum-Grzhimailo, S. Riordan, G. Ver-Steeg and I. S. Strakhova: Convergene of Energy-Differential Ionization Cross Sections Obtained from a T-Matrix Approach with R-Matrix Wave Functions, Phys. Rev. A, 65, (2002), 062715
- [KBer78] K. H. Berkner, W: G. Graham, R. V. Pyle, A. S. Schlachter, J. W. Stearns and R. E. Olson: *Electron-capture and impact-ionisation cross sections for partially stripped iron ions colliding with atomic and molecular hydrogen*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **11**, (1978), 875

- [KBer81] K. H. Berkner, W. G. Graham, R. V. Pyle, A. S. Schlachter and J. W. Stearns: Electron-capture, electron-loss and impact-ionization cross sections for 103- to 3400-keV/amu multicharged iron ions colliding with molecular hydrogen, Phys. Rev. A, 23, (1981), 2891
- [KBet90] K. Bethge und G. Gruber: *Physik der Atome und Moleküle*, VCH-Verlagsgesellschaft Weinheim, (1990)
- [KGra89] K. Gramlich, N. Grün and W. Scheid: Coupled-channel calculations with Gauss-type orbitals for charge transfer and ionisation in collisions of the (He-He)<sup>2+</sup> system, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 22, (1989), 2567
- [KKha98] K. Khayyat: Differentielle Wirkungsquerschnitte in Antiprotonen- und Protonen-Helium-Stöβen, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1998)
- [KMue02] K. H. Mütter: *Theoretische Physik II: klassische Elektrodynamik*, Vorlesungsausarbeitung, Universität Wuppertal, (2002)
- [Kore04] http://www.kore.co.uk, Kore Technology Limited, (2004)
- [KRoy76] K. Roy and S. C. Mukherjee: Differential cross sections in He<sup>2+</sup>-He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 9, (1976), 1121
- [KTob87] K. Tobita, H. Takeuchi, H. Kimura, Y. Kusama and M. Nemoto: Absolute Detection Efficiency of a Microchannel-Plate Detector for Ions and Neutrals, Jpn. J. Appl. Phys., 26, (1987), 509
- [KTok96] K. Tökési and G. Hock: Double electron capture in He<sup>2+</sup>+He collisions up to 1500 keV/amu projectile impact, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 29, (1996), L119
- [KUll04] K. Ullmann-Pfleger, http://www.roentdek.com, Roentdek Handels GmbH, (2004)
- [KWat52] K. M. Watson: The Effect of Final State Interactions on Reaction Cross Sections, Phys. Rev., 88, (1952), 1163
- [LBer87a] L. Bergmann, C. Schäfer: Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 2 -Elektrizitätslehre und Magnetismus, De Gruyter, Berlin, New York, (1987)
- [LBer87b] L. Bergmann, C. Schäfer: Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 4 Atomphysik, De Gruyter, Berlin, New York, (1987)
- [LChu93] L. V. Chulkov, B. Jonson, M. V. Zhukov: Energy Correlation Distributions from 3-body Coulomb Break-up of Li-11, Europhys. Lett., 24, (1993), 171
- [LChu97] L. V. Chulkov, T. Aumann, D. Aleksandrov, L. Axelsson, T. Baumann, M. J. G. Borge, R. Collatz, J. Cub, W. Dostal, B. Eberlein, Th. W. Elze, H. Emling, H. Geissel, V. Z. Goldberg, M. Golovkov, A. Grünschloss, M. Hellström, J. Holeczek, R. Holzmann, B. Jonson, A. A. Korsheninnikov, J. V. Kratz, G. Kraus, R. Kulessa, Y. Leifels, A. Leistenschneider, T. Leth, I. Mukha, G. Münzenberg, F. Nickel, T. Nilsson, G. Nyman, B. Petersen, M. Pfützner, A. Richter, K. Riisager, C. Scheidenberger, G. Schrieder, W. Schwab, H. Simon, M. H. Smedberg, M. Steiner, J. Stroth, A. Surowiec, T. Suzuki and O. Tengblad: Large Spin Alignment of the Unbound <sup>5</sup>He Fragment after Fragmentation of 240 MeV/nucleon <sup>6</sup>He, Phys. Rev. Lett., **79**, (1997), 201

- [LChu05] L. V. Chulkov, H. Simon, I. J. Thompson, T. Aumann, M. J. G. Borge, Th. W. Elze, H. Emling, H. Geissel, L. V. Grigorenko, M. Hellström, B. Jonson, J. W. V. Kratz, R. Kulessa, K. Markenroth, M. Meister, G. Münzenberg, F. Nickel, T. Nilsson, G. Nyman, V. Pribora, A. Richter, K. Riisager, C. Scheidenberger, G. Schrieder, O. Tengblad, M. V. Zhukov: *Three-body correlations in electromagnetic dissociation of Borromean nuclei: The He-6 case*, Nucl. Phys. A, **759**, (2005), 23
- [LFou03] L. Foucar: Ionisation und Anregung von Wasserstoff- und Deuteriummolekülen mit Synchrotronstrahlung, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2003)
- [LGul02] L. Gulyás, P. D. Fainstein and T. Shirai: Extended description for electron capture in ion-atom collisions: Application of model potentials within the framework of the continuum-distorted-wave theory, Phys. Rev. A, 65, (2002), 052720
- [LLim96] L. Lara-Limon, U. Meyer, O. Jagutzki, L. Spielberger, K. Ullmann-Pfleger, G. Rüschmann, W. Meuter, M. Waldschmidt, E. Zanger and H. Schmidt-Böcking: Weiterentwicklung eines ortssensitiven Multichannel-Plate Detektors auf Basis der Delay-Line Methode, IKF-Jahresbericht, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [LLim97] L. L. Limon: Weiterentwicklung der Ortsauslese von Mikrokanalplatten-Detektoren mit der Delay-Line-Methode, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1997)
- [LMen87] L. Meng, C. O. Reinhold and R. E. Olson: Subshell electron capture in collisions of fully stripped ions with He and H<sub>2</sub> at intermediate energies, Phys. Rev. A, 36, (1987), 2041
- [LMen89] L. Meng, C. O. Reinhold and R. E. Olson: Electron removal from molecular hydrogen by fully stripped ions at intermediate energies, Phys. Rev. A, 40, (1989), 3637
- [LPau33] L. Pauling: The Normale State of the Helium Molecule-Ions He<sub>2</sub><sup>+</sup> and He<sub>2</sub><sup>++</sup>,
  J. Chem. Phys., 1, (1933), 56
- [LPon78] L. I. Ponomarev, T. P. Puzynina and N. F. Truskova: Effective potentials of the three-body problem in the adiabatic representation, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, (1978), 3861
- [LPon04] L. Ponce, R. Taïeb, V. Vénieard and A. Maquet: Dynamics of the ionization mechanism in ion-atom collisions at intermediate velocities, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 37, (2004), L297
- [LSar88] L. Sarkadi, J. Pálinkás, A. Kövér, D. Berényi and T. Vajnai: Observation of Electron Capture into Continuum States of Neutral Atoms, Phys. Rev. Lett., 62, (1989), 527
- [LSar03] L. Sarkadi: Theoretical study of cusp-electron emissions from O<sup>8+</sup>+Ar collisions, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 205, (2003) 533
- [LSch00] L. Ph. H. Schmidt: Effekte molekularer Symmetrien in der Elektronenemission bei langsamen He<sup>2+</sup>-He-Stöβen: Eine kinematisch vollständige experimentelle Untersuchung, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2000)

- [LSch03a] L. Ph. H. Schmidt, M. Schöffler, J. Titze, O. Jagutzki, R. Dörner and H. Schmidt-Böcking: Mechanismen der Transferionisation bei langsamen und schnellen He<sup>2+</sup>-He-Stöβen, DPG-Frühjahrstagung, Hannover, (2003)
- [LSch03b] L. Ph. H. Schmidt, M. Schöffler, J. Titze, O. Jagutzki, K. E. Stiebing, R. Dörner and H. Schmidt-Böcking: Fully differential study of transfer ionization processes - a view into correlated many particle dynamics, ICPEAC XXIII, Stockholm, (2003)
- [LSch05] L. Ph. H. Schmidt, persönliche Mitteilung, (2005)
- [LSpi95] L. Spielberger, O. Jagutzki, R. Dörner, J. Ullrich, U. Meyer, V. Mergel, M. Unverzagt, M. Damrau, T. Vogt, I. Ali, Kh. Khayyat, D. Bahr, H. G. Schmidt, R. Frahm, H. Schmidt-Böcking: Separation of Photoabsorption and Compton Scattering Contributions to He Single and Double Ionization, Phys. Rev. Lett., 74, (1995), 4615
- [LSpi96a] L. Spielberger, O. Jagutzki, B. Krässig, U. Meyer, Kh. Khayyat, V. Mergel, Th. Tschentscher, Th. Buslaps, H. Bräuning, R. Dörner, T. Vogt, M. Achler, J. Ullrich, D. S. Gemmell and H. Schmidt-Böcking: *Double and Single Ionization* of Helium by 58-keV X-Rays, Phys. Rev. Lett., **76**, (1996), 4685
- [LSpi96b] L. Spielberger: Erforschung von Korrelationseffekten in atomaren Mehrteilchensystemen: Doppel- und Einfachionisation von Helium induziert durch hochenergetische Photonen, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [LSpi99] L. Spielberger, H. Bräuning, A. Muthig, J. Z. Tang, J. Wang, Y. Qui, R. Dörner, O. Jagutzki, Th. Tschentscher, V. Honkimäki, V. Mergel, M. Achler, Th. Weber, Kh. Khayyat, J. Burgdörfer, J. McGuire and H. Schmidt-Böcking: Cross Section Ratio of Double to Single Ionization of Helium by Compton Scattering of 40 to 100 keV X-rays, Phys. Rev. A, 59, (1999), 371
- [LTho27] L. H. Thomas: On the Capture of Electrons by Swiftly Moving Electrified Particles, Proc. Roy. Soc. A, 114, (1927), 561
- [LTri98] L. C. Tribedi, P. Richards, Y. D. Wang, C. D. Lin, L. Gulyás and M. E. Rudd: Ionization Dynamics in Fast Ion-Atom Collisions, Phys. Rev. A, 58, (1998), 3619
- [LVri67] L. Vriens: Binary-encounter proton-atom collision theory, Proc. Phys. Soc., 90, (1967), 935
- [MAbd97] M. Abdallah, S. Kravis, C. L. Cocke, Y. Wang, V. D. Rodriguez and M. Stöckli: Velocity-space picutres of continuum electrons produced by slow, bare, highly charged ions, Phys. Rev. A, 56, (1997), 2000
- [MAbd98] M. A. Abdallah, C. L. Cocke, W. Wolff, H. Wolf, S. D. Kravis, M. Stöckli and E. Kamber: *Momentum Images of Continuum Electrons from He*<sup>+</sup> and He<sup>2+</sup> on He: Ubiiquity of  $\pi$  Structure in the Continuum, Phys. Rev. Lett., **81** (1998), 3627
- [MAbd99] M. A. Abdallah, W. Wolff, H. E. Wolf, C. L. Cocke and M. Stöckli: Lowvelocity ionization in asymmetric systems: a comparative study of the He<sup>+</sup>-Ne and Ne<sup>+</sup>-He cases, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **32**, (1999), 4237

- [MAch99] M. Achler: Untersuchung von Symmetrieeffekten in der Photodoppelionisation von Helium mit zirkular polarisiertem Licht, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1999)
- [MBar72] M. Barat, D. Dhuicq, R. Francois, R. McCarroll, R. D. Piacentini and A. Salin: *Inelastic Processes in He<sup>+</sup>-He collisions*, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 5, (1922), 1343
- [MBar92] M. Barat and P. Roncin: Multiple electron capture by highly charged ions at keV energies, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 25, (1992), 2205
- [MBor26] M. Born: *Quantum mechanics in impact processes*, Zeitschrift für Physik, **38**, (1926) 803
- [MFul66] M. J. Fulton and M. H. Mittleman: Electron Capture by helium ions in neutral helium, Proc. Phys. Soc., 87, (1966), 669
- [MGal71] M. Galanti, R. Gott, J. F. Renaud: A High resolution, high sensitivity channel plate image intensifier for use in particle spectrographs, Rev. Sci. Instr., 42, (1974), 1818
- [MGra92] M. S. Gravielle and J. E. Miraglia: Double-electron capture as a two-step process, Phys. Rev. A, 45, (1992), 2965
- [MGry59] M. Gryziński: Classical Theory of Electronic and Ionic Inelastic Collisions, Phys. Rev., 115, (1959), 374
- [MGry65a] M. Gryziński: Two-Particle Collisions. I. General Relations for Collisions in the Laboratory System, Phys. Rev., 138, (1965), A 305
- [MGry65b] M. Gryziński: Two-Particle Collisions. II. Coulomb Collisions in the Laboratory System of Coordinates, Phys. Rev., 36, (1965), A 322
- [MGry65c] M. Gryziński: Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions, Phys. Rev., 138, (1965), A 336
- [MHat04] M. Hattass, Th. Jalowy, A. Czasch, Th. Weber, T. Jahnke, S. Schössler, L. Ph. Schmidt, O. Jagutzki, R. Dörner and H. Schmidt-Böcking:  $A 2\pi$  Spectrometer for Electron-Electron Coincidence Studies on Surfaces, Rev. Sci. Instr., **75**, (2004), 2373
- [MIno71] M. Inokuti: Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules - The Bethe Theory Revisited, Rev. Mod. Phys., 43, (1971), 297
- [MMcD70] M. R. C. McDowell and J. P. Coleman: Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, (1970)
- [MKim86] M. Kimura, and C. D. Lin: Charge transfer and excitation processes in p-He collisions studied using a unified atomic-orbital-molecular-orbital matching method, Phys. Rev. A, 34, (1986), 176
- [MKim88] M. Kimura: Single- and double-electron capture in He<sup>2+</sup> + He collisions and single-electron capture in He<sup>+</sup> + He<sup>+</sup> collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 21, (1988), L19

- [MKre05] M. Krems, J. Zirbel, M. Thomason and R. D. DuBois: Channel electron multiplier and channelplate efficiencies for detecting positive ions, Rev. Sci. Instr., 76, (2005), 093305
- [MOde05] M. Odenweller: Erzeugung negativer Ionen mit einer Mikrostruktur-Ionenquelle, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2005)
- [MPie91] M. Pieksma and S. Y. Ovchinnikov: The contribution of the saddle point mechanism to the total ionization cross section in slow atomic collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 24, (1991), 2699
- [MPie94a] M. Pieksma and S. Y. Ovchinnikov: The velocity distribution of saddlepoint electrons, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 27, (1994), 4573
- [MPie94b] M. Pieksma, S. Y. Ovchinnikov, J. van Eck, W. B. Westerveld and A. Niehaus: Experimental Identification of Saddle-Point Electrons, Phys. Rev. Lett., 73, (1994), 46
- [MPie97] M. Pieksam: Saddle-point effects in adiabatic to intermediate-energy ionatom collisions, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 124, (1997) 177
- [MRam93] M. Ramillion and R. McCarroll: Electron-capture to excited-states in H<sup>+</sup> collisions with H and He, Physica Scripta. Vol. 48, (1993), 573
- [MRod79] M. Rodbro and F. D. Andersen: Charge transfer to the continuum for 15 to 1500 keV H<sup>+</sup> in He, Ne, Ar and H<sub>2</sub> gases under single-collision conditions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **12**, (1979), 2883
- [MRud76] M. E. Rudd and D. H. Madison: Comparision of experimental and theoretical electron ejection cross sections in helium by proton impact from 5 to 100 keV, Phys. Rev. A, 14, (1976), 128
- [MRud92] M. E. Rudd, Y.-K. Kim, D. H. Madison and T. J. Gay: Electron production in proton collisions with atoms and molecules: energy distributions, Rev. Mod. Phys., 64, (1992), 441
- [MSag95] M. Sagurton, R. J. Bartlett, J. A. R. Samson, Z. X. He and D. Morgan : Effect of Compton scattering on the double-to-single photoionization ratio in helium, Phys. Rev. A, 52, (1995), 2829
- [MSch02] M. S.Schöffler: Entwicklung und Aufbau eines Abbildungssystems zur Messung von Elektronen jenseits niedriger Energien, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2002)
- [MSch03a] M. S. Schöffler, J. Titze, L. Ph. H. Schmidt, O. Jagutzki, R. Dörner und H. Schmidt-Böcking: Erweiterungen und Verbesserungen am COLTRIMS-XXL-Projekt, IKF-Jahresbericht, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2003)
- [MSch05] M. Schöffler, A. L. Godunov, C. T. Whelan, H. R. J. Walters, V. S. Schipakov, V. Mergel, R. Dörner, O. Jagutzki, L. Ph. H. Schmidt, J. Titze, E. Weigold and H. Schmidt-Böcking: Revealing the effect of angular correlation in the groundstate He wavefunction: a coincidence study of the transfer ionization process, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 38, (2005), L123
- [MSha85] M. B. Shah, and H. B. Gilbody: Single and double ionisation of helium by H<sup>+</sup>, He<sup>2+</sup> and Li<sup>3+</sup> ions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 18, (1985), 899

- [MSha89] M. B. Shah, P. McCallion and H. B. Gilbody: Electron capture and ionisation in collisions of slow H<sup>+</sup> and He<sup>2+</sup> ions with helium, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 22, (1989), 3037
- [MSha03] M. B. Shah, C. McGrath, C. Illescas, B. Pons A. Riera, H. Luna, D. S. F. Crothers, S. F. C. O'Rourke and H. B. Gilbody: Shifts in electron capture to the continuum at low collision energies: Enhanced role of target postcollision interactions, Phys. Rev. A, 67, (2003), 10704
- [MSmo04] M. P. Smolarski: *Ionisation von N2 und O2 in starken Laserfeldern*, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2004)
- [WMec91] W. Meckbach, S. Suárez, P. Focke and G. Bernardi: Is doubly differential electron emission produced in ion-atom collisions dominant at the saddle point velocity?, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 24, (1991), 3763
- [MWec04] M. Weckenbrock, D. Zeidler, A. Staudte, Th. Weber, M. Schöffler, M. Meckel, S. Kammer, M. Smolarski, O. Jagutzki, V. R. Bhardwaj, D. M. Rayner, D. M. Villeneuve, P. B. Corkum and R. Dörner: *Fully Differential Rates for Fem*tosecond Multiphoton Double Ionization of Neon, Phys. Rev. Lett., **92**, (2004), 213002
- [MWut88] M. Wutz, H. Adama und W. Walcher: *Theorie und Praxis der Vakuumtech*nik, Vieweg-Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, (1988), 4. Auflage
- [NBer93] N. Berrah, F. Heiser, R. Wehlitz, J. Levin, S. B. Whitfield, J. Viefhaus, I. A. Sellin and U. Becker: Probing electron correlations in double photoionization of He at intermediate energies, Phys. Rev. A, 48, (1993), R1733
- [NMot65] N. F. Mott and H. S. W. Massey: The Theory of Atomic Collisions, 3. Auflage, Oxford University Press, Oxford/New York, (1965)
- [NTos93] N. Toshima: Convergence of the perturbation series for high-energy electron capture, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 26, (1993), L281
- [NTos97] N. Toshima: On the instability of excitation and capture cross sections in the two-centre AO close-coupling calculations, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 30, (1997), L131
- [NTos99] N. Toshima and T. Nakagawa: Coupled-channel eikonal approach to electron capture, Phys. Rev. A, 60, (1999), 2182
- [OJag94] O. Jagutzki: Entwicklung eines Rückstoßionenimpulsspektrometers zur Untersuchung der Dynamik in Heliumatomen, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1994)
- [OJag96] O. Jagutzki, K. Ullmann-Pfleger, L. Spielberger, U. Meyer, L. Lara-Limon, G. Rüschmann, M. Waldschmidt, E. Zanger, R. Moshammer, J. Ullriich, R. Schulze and H. Schmidt-Böcking: Aufbau von digitalen Nachweissystemen für UV- und Partikelstrahlung mit ortsempfindlichen MCP-Detektoren, IKF-Jahresbericht, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [PAbu04] P. N. Abufager, A. E. Martínez, R. D. Rivarola and P. D. Fainstein: CDW-EIS model for single-electron capture in ion-atom collisions involving multielectronic targets, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 37, (2004), 817

- [PAbu05] P. N. Abufager, P. D. Fainstein, A. E. Martínez and R. D. Rivarola: Single electron capture differential cross section in H<sup>+</sup>+He collisions at intermediate and high collision energies, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 38, (2005), 11
- [PAmu75] P. A. Amundsen and L. Kocbach: Electronic relativistic effects in the K-shell Coulomb ionization of heavy atoms by massive charged particles, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 8, (1975), L122
- [PAmu76] P. A. Amundsen: Electronic relativistic effects in K-shell Coulomb ionization by heavy charged particles, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 9, (1976), 971
- [PAug25] P. V. Auger,: The compound photoelectric effect, J. Phys. Radium, 6, (1925), 205
- [PFai89] P. D. Fainstein, V. H. Ponce and R. D. Rivarola: Single-electron ionisation of helium by anti-proton and proton impact, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 22, (1989), L559
- [PFai01] P. D. Fainstein, R. Moshammer and J. Ullrich: Target Dependence of Slow Electrons Emitted in Swift Ion-Atom Collisions, Phys. Rev. A, 63, (2001), 062720
- [PHic75] P. J. Hicks and J. Comer: Ejected electron spectroscopy of autoionizing states excited by low energy electron impact, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 8, (1975), 1866
- [PKrs96] P. S. Krstić, G. Bent and D. R. Schultz: New Method for Treating Slow Multielectron, Multicenter Atomic Collisions, Phys. Rev. Lett., 77 (1996), 2428
- [PKrs98] P. S. Krstić, D. R. Schultz and G. Bent: Ionization of He by slow protons, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 31, (1998), 183
- [PMar81] P. J. Martin, K. Arnett, D. M. Blankenship, T. J. Kvale, J. L. Peacher, E. Redd, V. C. Sutcliffe, J. T. Park, C. D. Lin and J. H. McGuire: Differential cross sections for electron capture from helium by 25- to 100-keV incident protons Phys. Rev. A, 23, (1981), 2858
- [PSch74] P. Schagen: Advances in image pick-up and display, Academic Press, New York, 1, (1974), 1
- [PSim82] P. R. Simony, J. H. McGuire and J. Eichler: Exact second Born electron capture for p + He, Phys. Rev. A, 26, (1982), 1337
- [PTB05] Homepage der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt: http://www.ptb.de/ de/wegweiser/einheiten/si/index.html, (2005)
- [PVin05] P. S. Vinitsy and Yu. V. Popov: Fast proton-hydrogen charge exchange reaction at small scattering angles, Phys. Rev. A, 71, (2005), 012706
- [RAbr66] R. Abrines and I. C. Percival: Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons, Proc. Phys. Soc., 88, (1966), 861
- [RBar97] R. O. Barrachina: Final-state interaction theory of cusp formation, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 124, (1997) 198
- [RBar02] R. O. Barrachina and C. Courbin: Cusp formation in classical trajectory Monte Carlo calculations of ion-impact ionization collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 35, (2001), 3157

- [RCab00] R. Cabrera-Trujillo, J. R. Sabin, Y. Öhrn and E. Deumens: Direct differential-cross-section calculations for ion-atom and atom-atom collisions in the keV range, Phys. Rev. A, 61, (2000), 032719
- [RDoe89] R. Dörner, J. Ullrich, R. E. Olson, H. Schmidt-Böcking: Three-Body Interactions in Proton-Helium Angular Scattering, Phys. Rev. Lett., 63 (1989), 147
- [RDoe94] R. Dörner, V. Mergel, R. Ali, U. Buck, C. L. Cocke, K. Froschauer, O. Jagutzki, S. Lencinas, W. E. Meyerhof, S. Nüttgens, R. E. Olson, H. Schmidt-Böcking, L. Spielberger, K. Tökesi, J. Ullrich, M. Unverzagt, W. Wu: Electron-Electron Interaction in Projectile Ionization Investigated by High Resolution Recoil Ion Momentum Spectroscopy, Phys. Rev. Lett., 72, (1994), 3166
- [RDoe95a] R. Dörner, V. Mergel, L. Zaoyuan, J. Ullrich, L. Spielberger, R. E. Olson, H. Schmidt-Böcking: Three Body Final State Momentum Distributions for Swift H<sup>+</sup> and He<sup>2+</sup> on He Collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 28, (1995), 435
- [RDoe95b] R. Dörner, V. Mergel, L. Spielberger, O. Jagutzki, S. Nüttgens, M. Unverzagt, H. Schmidt-Böcking, J. Ullrich, R. E. Olson, K. Tökesi, W. E. Meyerhof, W. Wu, C. L. Cocke: Capture, Ionisation and Loss in Swift He1,2+-He Collision Investigated by Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 99, (1995), 111
- [RDoe96a] R. Dörner, T. Vogt, V. Mergel, H. Khemliche, S. Kravis, C. L. Cocke, J. Ullrich, M. Unverzagt, L. Spielberger, M. Damrau, O. Jagutzki, I. Ali, B. Weaver, K. Ullmann, C. C. Hsu, M. Jung, E. P. Kanter, B. Sonntag, M. H. Prior, E. Rotenberg, J. Denlinger, T. Warwick, S. T. Manson, H. Schmidt-Böcking: *Ratio of Cross Sections for Double to Single Ionization of He by 85-400 eV Photons*, Phys. Rev. Lett., **76**, (1996), 2654
- [RDoe96b] R. Dörner, H. Khemliche, M. H. Prior, C. L. Cocke, J. A. Gary, R. E. Olson, V. Mergel, J. Ullrich and H. Schmidt-Böcking: *Imaging of Saddle Point Electron Emission in Slow p-He Collisions*, Phys. Rev. Lett., **77**, (1996), 4520
- [RDoe98a] R. Dörner, H. Bräuning, O. Jagutzki, V. Mergel, M. Achler, R. Mooshammer, J. M. Feagin, T. Osipov, A. Bräuning-Demian, L. Spielberger, J. H. McGuire, M. H. Prior, N. Berrah, J. D. Bozek, C. L. Cocke and H. Schmidt-Böcking: *Double Photoionization of Spatially Aligned D*<sub>2</sub>, Phys. Rev. Lett., **81**, (1998), 5776
- [RDoe98b] R. Dörner, V. Mergel, L. Spielberger, O. Jagutzki, J. Ullrich and H. Schmiodt-Böcking: State-selective differential cross sections for doubleelectron capture in 0.25 - 0.75 MeV He<sup>2+</sup>-He collisions, Phys. Rev. A, 57, (1998), 312
- [RDoe00a] R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich. R. Moshammer and H. Schmidt-Böcking: Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy: A 'Momentum Microscope' to View Atomic Collision Dynamics, Physics Reports, 330, (2000), 95
- [RDoe04a] R. Dörner, H. Schmidt-Böcking, Th. Weber, T. Jahnke, M. Schöffler, A. Knapp, M. Hattass, A. Czasch, L. Ph. H. Schmidt and O. Jagutzki: *Ionization by One and Many Photons*, Radiation Physics and Chemistry, **70**, (2004), 191
- [RDuB87] R. D. DuBois: Ionization and charge transfer in He<sup>2+</sup>-rare-gas collisions. II, Phys. Rev. A, 36, (1987), 2585

- [RDuB89] R. D. DuBois and A. Kövèr: Single and double ionization of helium by hydrogen-atom impact, Phys. Rev. A, 40, (1989), 3605
- [RDuB93] R. D. Dubois: Differential electron emission for isotachic H<sup>+</sup> and He<sup>2+</sup> impact on helium, Phys. Rev. A, 48, (1993), 1123
- [RGao87] R. S. Gao, P. S. Gibner, J. H. Newman, K. A. Smith and R. F. Stebbings: Absolute and angular efficiencies of a microchannel-plate position-sensitive detector, Rev. Sci. Instr., 55, (1987), 1756
- [RGay72] A. Gayet: Charge exchange scattering amplitude to first order of a three body expansion, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 5, (1972), 483
- [RGay91] R. Gayet and A. Salin: Differential scattering in ionisation processes, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 56/57, (1991), 82
- [RJan94] R. K. Janev, G. Ivanovski and E. A. Solov'ev: Ionization of hydrogen atoms by multiply charged ions at low energies: The scaling law, Phys. Rev. A, 49, (1994), R645
- [RJel84] R. J. Jelitto: Theoretische Physik 5: Quantenmechanik II, Aula-Verlag Wiesbaden, 2. Auflage, (1984)
- [RJel91] R. J. Jelitto: Theoretische Physik 1: Mechanik, Aula-Verlag Wiesbaden, 3. Auflage, (1991)
- [RJe193] R. J. Jelitto: Theoretische Physik 4: Quantenmechanik I, Aula-Verlag Wiesbaden, 3. Auflage, (1993)
- [RJel95] R. J. Jelitto: Theoretische Physik 2: Mechanik II, Aula-Verlag Wiesbaden, 3. Auflage, (1995)
- [RMcC68] R. McCarroll and A. Salin: Impact parameter treatment of atomic collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1, (1968), 163
- [RMos94] R. Moshammer, J. Ullrich, M. Unverzagt, W. Schmidt, P. Jardin, R. E. Olson, R. Mann, R. Dörner, V. Mergel, U. Buck and H. Schmidt-Böcking: Low-Energy Electrons and their Dynamical Correlation with the Recoil-Ions for Single Ionization of Helium by Fast Heavy-Ion Impact, Phys. Rev. Lett., 73, (1994), 3371
- [RMos96a] R. Moshammer, J. Ullrich, M. Unverzagt, W. Schmitt and H. Schmidt-Böcking: A  $4\pi$  recoil-ion electron momentum analyzer: A high-resolution 'microscope' for the investigation of the dynamics of atomic, molecular and nuclear reactions, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, **108**, (1996), 425
- [RMos96b] R. Moshammer, J. Ullrich, H. Kollmus, W. Schmitt, M. Unverzagt, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking, R. Mann, C. J. Woods and R. E. Olsen: Double Ionization of Helium and Neon for Fast Heavy-Ion Impact: Correlated Motion of Electrons from Bound in Continuum States, Phys. Rev. Lett., 77, (1996), 1242
- [RMos96c] R. Moshammer, J. Ullrich, M. Unverzagt, W. Schmitt, P. Jardin, R. E. Olson, R. Dörner, V. Mergel and H. Schmidt-Böcking: *The Dynamics of Target Ionization by Fast Highly Charged Projectiles*, Nucl. Instr. Meth. B, **107**, (1996), 62

- [RMos97] R. Moshammer, W. Schmitt, J. Ullrich, H. Kollmus, A. Cassimi, R. Dörner, O. Jagutzki, R. Mann, R. E. Olson, H. T. Prinz, H. Schmidt-Böcking and L. Spielberger: Ionization of Helium in the Attosecond Equivalent Light Pulse of 1 GeV/Nucleon U<sup>92+</sup> Projectiles, Phys. Rev. Lett., **76**, (1997), 3621
- [RPia76] R. D. Piacentini and A. Salin: Multistate molecular treatment of atomic collisions in the impact parameter approximation. III - integration of coupled equations and calculation of transition amplitudes for Coulomb trajectories, Computer Physics Communications, 12, (1976), 125
- [ROIs77] R. E. Olson and A. Salop: Charge-transfer and impact-ionization cross sections for fully and partially stripped positive ions colliding with atomic hydrogen, Phys. Rev. A, 16, (1977), 531
- [ROls78] R. E. Olson, K. H. Berkner, W. G. Graham, R. V. Pyle, A. S. Schlachter and J. W. Stearns: Charge-State Dependence of Electron Loss from H by Collisions with Heavy, Highly Stripped Ions, Phys. Rev. Lett., 41, (1978), 163
- [ROls83] R. E. Olson: Ion-atom differential cross sections at intermediate energies, Phys. Rev. A, 27, (1983), 1871
- [ROls86] R. E. Olson: v/2 electrons in  $H^+$ +H ionizing collisions, Phys. Rev. A, **33**, (1986), 4397
- [ROls87a] R. E. Olson, T. J. Gay, H. G. Berry, E. B. Hale and V. D. Riby: Saddle-Point Electrons in Ionizing Ion-Atom Collisions, Phys. Rev. Lett., 59, (1987), 36
- [ROls87b] R. E. Olson: Collisional mechanisms for single and double ionization of He by protons and antiprotons, Phys. Rev. A, 36, (1987), 1519
- [ROIs97] R. E. Olson, C. R. Feeler, C. J. Wood, C. L. Cocke, R. Dörner, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking, R. Moshammer and J. Ullrich: *Detailed investigations* of two-center collision dynamics, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, **124**, (1997), 249
- [ROls98] R. E. Olson, C. J. Wood, H.Schmidt-Böcking, R. Moshammer and J. Ullrich: Complete single-ionization momentum spectra for strong perturbation collisions, Phys. Rev. A, 58, (1998), 270
- [RPha78] R. A. Phaneuf, F. W. Meyer and R. H. McKnight: Single-electron capture by multiply charged ions of carbon, nitrogen and oxygen in atomic and molecular hydrogen, Phys. Rev. A, 17, (1978), 534
- [RRiv79] R. D. Rivarola and R. D. Piacentini: Differential and total cross sections in He<sup>2+</sup>-He collisions, Phys. Rev. A, 20, (1979), 1816
- [RRiv80] R. D. Rivarola, R. D. Piacentini, A. Salin and Dž. Belkić: The influence of the static potential in high-energy K-shell electron capture collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 13, (1980), 2601
- [RRiv82] R. D. Rivarola and J. E. Miraglia: Comparison between the continuum distroted-wave and the second Brinkman-Kramers approximations at high energies electron capture, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 15, (1982), 2221
- [RSch88] R. Schuch, H. Schöne, P. D. Miller, H. F. Krause, P. F. Dittner, S. Datz and R. E. Olson: Charge- and angle-correlated inelasticities of bare fast carbon ions with neon, Phys. Rev. Lett., 60, (1988), 925

- [RSha74] R. Shakeshaft: Connection between the classical and quantum mechanical treatments of the forward capture of a light particle in the high velocity limit, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 7, (1974), 1059
- [RSha78] R. Shakeshaft and L. Spruch: Possibility of observing the second Born contribution to electron capture at high impact velocities, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, (1978), L457
- [RSha79] R. Shakeshaft and L. Spruch: Mechansisms for charge transfer (or for the capture of any light particle) at asymptotically high impact velocities, Rev. Mod. Phys., 51, (1979), 369
- [RSpa94] R. A. Sparrow and R. E. Olson: Projectile and electron spectra resulting from positron-argon collisions J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 27, (1994), 2647
- [RWhi34] R. Whiddington, and H. Priestley: Note on a New Transition produced by Electron Impact in Helium, Proc. Roy. Soc., A145, (1934), 462
- [RWil41] R. E. Williamson and S. Chandrasekhar: The time of relaxion of stellar systems. II, Astrophys. J., 93, (1941), 308
- [SAll66] S. P. Alliluev and A. B. Matvenko: Symmetry group of the hydrogen molecular ion, Zh. Eksp. Teor. Phys., 51, (1966), 1873
- [SAls88a] S. Alston: Strong-potential Born-approximation electron-capture cross sections for realistic atomic potentials, Phys. Rev. A, 38, (1989), 3124
- [SAls88b] S. Alston: Further contributions of the Thomas double-scattering mechanism to electron capture in the second Born approximation, Phys. Rev. A, 38, (1988), 6092
- [SCha41] S. Chandrasekhar: The time of relaxion of stellar systems. I, Astrophys. J., 93, (1941), 285
- [SHar78] S. Hara and H. Sato: Autoionising states of He<sub>2</sub><sup>2+</sup>: adiabatic potential energy curves, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, (1978), 955
- [SHag82] S. Hagmann, C. L. Cocke, J. R. Macdonald, P. Richard, H. Schmidt-Böcking an R. Schuch: Quasiresonant charge transfer in inner-shell excitation: Impactparameter dependence of K-vacancy creation in  $F^{q+} \rightarrow Ne$  collisions, Phys. Rev. A, **25**, (1982), 1918
- [SHaw01] S. Hawking: Das Universum in der Nussschale, Hoffmann und Campe Verlag, 1. Auflage, 25, (2001)
- [SKra96] S. D. Kravis, M. Abdallah, C. L. Cocke, C. D. Lin, M. Stöckli, B. Walch, Y. D. Wang, R. E. Olson, V. D. Rodríguez, W. Wu, M. Pieksam and N. Watanabe: Single ionization of He by low-velocity protons and C<sup>6+</sup>: Ejected electron momentum distributions, Phys. Rev. A, 54, (1996), 1394
- [SMan76] S. T. Manson, L. H. Toburen, D. H. Madison and N. Stolterfoht: *Energy* and angular distribution of electrons ejected from helium by fast protons and electrons: Theory and experiment, Phys. Rev. A, **12**, (1976), 60
- [SMar02] S. Martiínez, G. Bernardi, P. Focke, A. D. González and S. Suárez: Transfer ionization and total electron emission for 25keV amu<sup>-1</sup> He<sup>2+</sup> colliding on He and H<sub>2</sub>, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **35**, (2002), 2261

- [SMuk73] S. C. Mukherjee, K. Roy and N. C. Sil: Electron capture and excitation in He<sup>++</sup>-He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 6, (1973), 467
- [SOro97] S. F. C. O'Rourke and D. S. F. Crothers: Single ionization of He by 3.6 MeV  $amu^{-1} Ni^{24+}$  ions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **30**, (1997), 2443
- [SOvc95] S. Y. Ovchinnikov and J. H. Macek: Electron-Energy and Angular-Distribution Theory for Low-Energy Ion-Atom Collisions, Phys. Rev. Lett., 75, (1995), 2474
- [SSch02] S. Schössler: *Ionenerzeugung mit Hochdruck-Mikroentladungen*, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2002)
- [Simi00] Simion 3d: User Manual, Version 7.0, (2000)
- [SNue94] S. Nüttgens: Entwicklung und Aufbau eines multihitfähigen Micro-Channel-Plate-Detektors mit Delay-Line-Anode, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1994)
- [STol00] S. G. Tolmanov and J. H. McGuire: Electron-electron Thomas peak in fast transfer ionization, Phys. Rev. A, 62, (2000), 032711
- [SYag01] S. Yagi, T. Nagata, M. Koide, Y. Itoh, T. Koizumi and Y. Azuma: *Relative counting efficiencies of ion charge-states by microchannel plate*, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 183, (2001) 476
- [TAbe67] T. Aberg: Theory of X-Ray Sattelites, Phys. Rev., 156, (1967), 35
- [TAbe70] T. Aberg: Asymptotic Double-Photoexcitation Cross Sections of the Helium Atom, Phys. Rev. A, 2, (1970), 1726
- [TAbe76] T. Aberg: Photoionization and Other Probes of Many Electron Interactions, edited by F. Wuilleumier, Plenum, New York, (1976)
- [TBon71] T. F. M. Bonsen and D. Banks: Angular distribution of electrons ejected by charged particles. III. Classical treatment of forward ejection, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 4, (1971), 706
- [TCar67] T. A. Carlson: Double Electron Ejection Resulting from Photo-Ionization in the Outermost Shell of He, Ne and Ar and Its Relationship to Electron Correlation, Phys. Rev., 156, (1967), 142
- [TGay90] T. J. Gay, M. W. Gealy and M. E. Rudd: Projectile- and target-charge dependent effects in ionizing collisions of H<sup>+</sup> and He<sup>+</sup> with He, Ne and Ar atoms, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 23, (1990), L823
- [TGre74a] T. A. Green, H. H. Michels, J. C. Browne and M. M. Madsen: Configuration interaction studies of the HeH<sup>+</sup> molecular ion. I Singlet sigma states, J. Chem. Phys., 61, (1974), 5186
- [TGre74b] T. A. Green, H. H. Michels, J. C. Browne and M. M. Madsen: Configuration interaction studies of the HeH<sup>+</sup> molecular ion. II Dipole and radial coupling matrix elements for the singlet sigma states, J. Chem. Phys., 61, (1974), 5198
- [TIsh88] T. Ishihara and J. H. McGuire: Second-order singularities in transfer ionization, Phys. Rev. A, 38, (1988), 3310

- [TJah02] T. Jahnke, Th. Weber, A. L. Landers, A. Knapp, S. Schössler, J. Nickles, S. Kammer, O. Jagutzki, L. Schmidt, A. Czasch, T. Osipov, E. Arenholz, A. T. Young, R. Diez Muino, D. Rolles, F. J. Garcia de Abajo, C. S. Fadley, M. A. Van Hove, S. K. Semenov, N. A. Cherepkov, J. Rösch, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, C. L. Cocke and R. Dörner: Circular Dichroism in K-shell Ionization from Fixed-in-Space CO and N<sub>2</sub> Molecules, Phys. Rev. Lett., 88, (2002), 073002
- [TJah04a] T. Jahnke, L. Foucar, J. Titze, R. Wallauer, T. Osipov, E. P. Benis, A. Alnaser, O. Jagutzki, W. Arnold, S. K. Semenov, N. A. Cherepkov, L. Ph. H. Schmidt, A. Czasch, A. Staudte, M. Schöffler, C. L. Cocke, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking and R. Dörner: Vibrationally Resolved K-shell Photoionization of CO with Circularly Polarized Light, Phys. Rev. Lett., 93, (2004), 083002
- [TJah04b] T. Jahnke, A. Czasch, M. S. Schöffler, S. Schössler, A. Knapp, M. Käsz, J. Titze, Ch. Wimmer, K. Kreidi, R. E. Grisenti, A. Staudte, O. Jagutzki, U. Hergenhahn, H. Schmidt-Böcking and R. Dörner: *Experimental Observation of In*teratomic Coulombic Decay in Neon Dimers, Phys. Rev. Lett., 93, (2004), 163401
- [TJah04c] T. Jahnke, Th. Weber, T. Osipov, A. L. Landers, O. Jagutzki, L. Ph. H. Schmidt, C. L. Cocke, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking and R Dörner: Multicoincidence studies of photo and Auger electrons from fixed-in-space molecules using the COLTRIMS technique, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 141, (2004), 229
- [TJah05] T. Jahnke: Interatomic Coulombis Decay Experimentelle Untersuchung eines neuartigen, interatomaren Abregungsmechanismus, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2005)
- [TJah06] T. Jahnke: Numerisches Simulationsprogramm zur Berechnung der Elektronenergieauflösung, Frankfurt am Main, (2006)
- [TJal01] Th. Jalowy, persönliche Mitteilung, (2001)
- [TKin57] T. Kinoshita: Ground State of the Helium Atom, Phys. Rev., 105, (1957), 1490
- [TLud05] T. Ludwig: Anticrossing-Spektroskopie schnell bewegter Heliumatome nach Elektroneneinfang in 10 bis 50 keV He+-He-Stöβen, Doktorarbeit, Technische Universität, Berlin, (2005)
- [TPat03] T. Pattard, T. Schneider and J. M. Rost: On the role of shake-off in singlephoton double ionization, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 36, (2003), L189
- [TRai79] T. K. Raidastidar, K. Raidastidar and M. Bose: Use of an approximate diabatic molecular representation in He<sup>+</sup>-He charge-transfer collisions, Chem. Phys., 43, (1979), 183
- [TRes99] T. N. Rescigno, M. Baertschy, W. A. Isaacs and C. W. McCurdy: Collision Breakup in a Quantum System of Three Charged Particles, Science, 286, (1999), 2474
- [TShi02] T. Y. Shi and C. D. Lin: Double Photoionization and Transfer Ionization of He: Shakeoff Theory Revisited, Phys. Rev. Lett., 89, (2002), 163202

- [TSto91] Th. Stöhlker, P. H. Mokler, C. Kozhuharov, E. A. Livingston and J. Ullrich: Capture of Quasifree Electrons into Highly-Charged, Heavy Projectiles, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 56/57, (1991) 86
- [TSto94] Th. Stöhlker, H. Geissel, H. Irnich, C. Kozhuharov, P. H. Mokler, G. Münzenberg, F. Nickel, C. Scheidenberger, T. Suzuki, M. Kucharski, A. Warczak, P. Rymuza, Z. Stachura, A. Kriessbach, D. Dauvergne, B. Dunford, J. Eichler, A. Ichihara and T. Shirai: L-Subshell Resolved Photon Angular Distribution of Radiative Electron Capture into He-like Uranium, Phys. Rev. Lett., 73, (1994), 352
- [TVog96] T. Vogt: Bestimmung des vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitts für Doppelphotoionisation von Helium mittels Rückstoßionenimpulsspektroskopie, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [TWeb97] Th. Weber: Impulstransfer in Proton-Heliumstößen untersucht mit hochauflösender Rückstoßionenimpulsspektroskopie, Diplomarbeit (2. Auflage), Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1997)
- [TWeb01] Th. Weber, Kh. Khayyat, R. Dörner, V. D. Rodríguez, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Schmidt, K. A. Müller, F. Afaneh, A. Gonzalez and H. Schmidt-Böcking: *Abrupt Rise of the Longitudinal Recoil Ion Momentum Distribution for Ionizing Collisions*, Phys. Rev. Lett., 86, (2001), 224
- [TWeb03] Th. Weber: Untersuchung der verschränkten Bewegung freier Elektronenpaare emittiert aus Ein- und Zweizentren Coulomb-Potentialen in Phtoabsorptionsprozessen, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2003)
- [TWeb04a] Th. Weber, A. O. Czasch, O. Jagutzki, A. K. Müller, V. Mergel, A. Kheifets, E. Rotenberg, G. Meigs, M. H. Prior, S. Daveau, A. Landers, C. L. Cocke, T. Osipov, R. Diez Muino, H. Schmidt-Böcking and R. Dörner: Complete photofragmentation of the deuterium molecule, NATURE Vol. 431, (2004), 437
- [TWeb04b] Th. Weber, A. Czasch, O. Jagutzki, A. Müller, V. Mergel, A. Kheifets, J. Feagin, E. Rotenberg, G. Meigs, M. H. Prior, S. Daveau, A. L. Landers, C. L. Cocke, T. Osipov, H. Schmidt-Böcking and R. Dörner: *Fully Differential Cross Sections for Photo-Double-Ionization of D*<sub>2</sub>, Phys. Rev. Lett., **92**, (2004), 163001-1
- [TWin74] T. G. Winter and C. C. Lin: *Electron capture by protons in helium and hy*drogen atoms at intermediate energies, Phys. Rev. A, **10**, (1974), 2141
- [USch94] U. E. Schröder: *Spezielle Relativitätstheorie*, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, (1994)
- [USpi01] U. Spillmann: Entwicklung einer 2-dimensional ortsauflösenden Delayline-Anode nach Art der Bildladungsauslese zum Teilchennachweis in offenen MCPbasierenden und gekapselten Detektorsystemen, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (2001)
- [VIrb88] V. D. Irby, T. J. Gay, J. Wm. Edwards, E. B. Hale, M. L. McKenzie and R. E. Olson: Projectile-charge dependence of ejected-electron spectra, Phys. Rev. A, 37, (1988), 3612
- [VIrb89] V. D. Irby: Saddle-point scaling method for ionizing collisions, Phys. Rev. A, 39, (1989), 54

- [VIrb93] V. D. Irby, S. Datz, P. F. Dittner, N. L. Jones, H. F. Krause and C. R. Vane: Saddle-point shifts in ionizing collisions, Phys. Rev. A, 47, (1993), 2957
- [VLop78] V. López, A. Macías, R. D. Piacentini, A. Riera and M. Yáñez: Molecular treatment of elastic and double charge-exchange He<sup>2+</sup>-He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **11**, (1978), 2889
- [VMer94] V. Mergel: Dynamik von Elektronentransferreaktionen am Stoßsystem  $p + He \rightarrow H^0 + He^+$  untersucht mit hochauflösender Rückstoßionenimpulsspektroskopie, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1994)
- [VMer95a] V. Mergel, R. Dörner, J. Ullrich, O. Jagutzki, S. Lencinas, S. Nüttgens, L. Spielberger, M. Unverzagt, C. L. Cocke, R. E. Olson, M. Schulz, U. Buck, E. Zanger, W. Theisinger, M. Isser, S. Geis, H. Schmidt-Böcking: State Selective Scattering Angle Dependent Capture Cross Sections using Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy (COLTRIMS), Phys. Rev. Lett., 74, (1995), 2200
- [VMer95b] V. Mergel, R. Dörner, J. Ullrich, O. Jagutzki, S. Lencinas, S. Nüttgens, L. Spielberger, M. Unverzagt, C. L. Cocke, R. E. Olson, M. Schulz, U. Buck, H. Schmidt-Böcking: He<sup>2+</sup> on He: State-Selective, Scattering-Angle-Dependent Capture Cross Sections Measured by Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy (COLTRIMS), Nucl. Instr. Meth. B, 98, (1995) 593
- [VMer96] V. Mergel: Dynamische Elektronenkorrelationen in Helium, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1996)
- [VMer97] V. Mergel, R. Dörner, M. Achler, K. Khayyat, S. Lencinas, J. Euler, O. Jagutzki, S. Nüttgens, M. Unverzagt, L. Spielberger, W. Wu, R. Ali, J. Ullrich, H. Cederquist, A. Salin, C. J. Wood, R. E. Olson, Dž. Belkić, C. L. Cocke and H. Schmidt-Böcking: Intraatomic electron-electron scattering in p-He collisions (Thomas process) investigated by Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy, Phys. Rev. Lett., **79**, (1997) 387
- [VMer98a] V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, K. Ullmann-Pfleger, R. Dörner and H. Schmidt-Böcking: Particle and UV-Imaging with Position Sensitive MCP-Detectors-Three-Dimensional Momentum Space Imaging, Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 502, (1998), 171
- [VMer01] V. Mergel, R. Dörner, K. Khayyat, M. Achler, T. Weber, H. Schmidt-Böcking and H. J. Lüdde: Strong Correlations in the He ground state momentum wave function - observed in the fully differential momentum distributions for the four particle p+He transfer ionization process, Phys. Rev. Lett.,86, (2001), 2257
- [VMer03] V. Mergel, persönliche Mitteilung, (2004)
- [VMon89] V. J. Montemayor and G. Schiwietz: Dynamic target screening for twoactive-electron classical-trajectory Monte Carlo calculations for  $H^+$  + He collisions, Phys. Rev. A, **40**, (1989), 6223
- [VNik78] V. K. Nikulin and N. A. Guschina: Diabatic correlation diagrams for the quasi-molecular description of ion-atom collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, (1978), 3553
- [VOst92] V. N. Ostrovsky and N. R. Toivonen: Spectra of electrons ejected in autoionization of quasimolecules, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 25, (1992), 2981

- [VRod00] V. D. Rodíguez and R. O. Barrachina: Thomas mechanism in electron capture to the continuum, Phys. Rev. A, 62, (2000), 062716
- [VSch92] V. Schmidt: Photoionization of atoms using synchrotron radiation, Reports on Progress in Physics, 55, (1992), 1483
- [WFri91a] W. Fritsch and C. D. Lin: The semiclassical close-coupling description of atomic collisions: Recent developments and results, Physics Reports, **202**, (1991), 1
- [WFri91b] W. Fritsch: *He excitation in collisions with protons: an unresolved problem,* Phys. Lett. A, **160**, (1991), 64
- [WFri94] W. Fritsch: Theoretical study of electron processes in slow He<sup>2+</sup>-He collisions, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 27, (1994), 3461
- [WFri95] W. Fritsch: Electron transfer and excitation in slow collisions of bare He, Be, and C ions with atomic helium, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B, 98, (1995), 246
- [Wiki06] Homepage der freien Enzyklopädie, Wikipedia über Atommodelle: http://de. wikipedia.org/wiki/Atommodelle, (2006)
- [WLic63] W. Lichten: Resonant Charge Exchange in Atomic Collisions, Phys. Rev., 131, (1963), 229
- [WLic67] W. Lichten: Molecular Wave Functions and Inelastic Atomic Collisions, Phys. Rev., 164, (1967), 131
- [WLic75] W. Lichten: Atomic Physics IV, Plenum Press, New York, (1975)
- [WNol03] W. Nolting: Grundkurs theoretische Physik, Band 5/1: Quantenmechanik, Springer-Verlag Berlin, **6. Auflage**, (2003)
- [WSch99] W. Schmitt: Kinematisch vollständige Experimente zur Einfachionisation von Helium durch hochenergetische Schwerionen, Doktorarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main, (1999)
- [WShi01] W. Shi, T. Bartsch, S. Böhm, C. Böhme, F. Bosch, C. Brandau, B. Franzke, N. Grün, A. Hoffknacht, S. Kiesslich, H. Knopp, C. Kozhuharov, A. Krämer, P. H. Mokler, A. Müller, F. Nolden, W. Scheid, S. Schippers, Z. Stachura, M. Steck, T. Steith, Th. Stöhlker and T. Winkler: *Dielectronic Recombination* and Spectroscopy of the Heaviest Li-Like Ions, Physica Scripta, **T92**, (2001), 191
- [WWil55] W. C. Wiley, I. H. McLaren: Time-of-Flight Mass Spectrometer with Improved Resolution, Rev. Sci. Instr., 26, 1150, (1955)
- [YWan96] Y. D. Wang, V. D. Rodríguez, C. D. Lin, C. L. Cocke, S. Kravis, M. Abdallah and R. Dörner: Analysis of final-state momentum distributions of ionization products in ion-atom collisions, Phys. Rev. A, 53, (1996), 3278

# Danksagung

Neben der Einleitung ist die Danksagung der meiner Meinung nach wichtigste Abschnitt dieser Arbeit und doch werden beide Abschnitte erst kurz vor der endgültigen Fertigstellung geschrieben. Die Einleitung liegt auf der Hand, schließlich können sich die Ergebnisse immer wieder ändern und mit ihnen die erzählte Geschichte, auf welche es einzuleiten gilt. Aber weshalb wird die Danksagung zum Schluss geschrieben, obwohl ohne die Hilfe der vielen hilfreichen Geister eine solche Arbeit nicht zu bewältigen gewesen wäre? Vielleicht ist es eure Allgegenwart und Verfügbarkeit, wenn Fragen und Probleme auftreten, die es vergessen lassen, wie wichtig ihr auch für diese Arbeit gewesen seid! 5 Jahre sind seit den ersten Tagen meiner Diplomarbeit vergangen, Leute kamen, Freunde gingen - es war eine tolle Zeit.

Wenn Du ein Schiff bauen willst, so trommle nicht Männer zusammen, um Holz zu beschaffen, Werkzeuge vorzubereiten, Aufgaben zu vergeben, und die Arbeit einzuteilen, sondern lehre die Männer die Sehnsucht nach dem weiten endlosen Meer.

Antoine de Saint-Exuperys Worte spiegeln das Klima unserer Arbeitsgruppe wahrlich treffend wider. Während Horst mit manchmal nicht ganz lehrmeinungskonformen Ideen, aber einer schier übermenschlichen eigenen Begeisterung und Motivationsfähigkeit sein Umfeld zum Nachdenken über "verstandene" Tatsachen bringt, ist Lothar (das Orakel) der bodenständigste "Gegenspieler". Und nicht zu vergessen in diesem besonderen Triumvirat (oder karnevalistischen Dreigestirn?) ist Reinhard - die wichtigste Person, der ich auch am allermeisten zu danken habe! Deine Geduld war grenzenlos, fast so wie deine Zeit und gerade in den letzten Monaten haben mich das begeisterte Spektren Vergleichen, Erstellen und Diskutieren, gepaart mit "Wow, unglaublich, faszinierend"-Ausrufen, erneut motiviert und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Du und Horst gabt mir überdies die einzigartige Möglichkeit die Welt zu sehen und Physik mal woanders zu machen. Die dadurch eröffneten neuen Blickwinkel auf eine mir bis dato unbekannte Welt und Kultur waren einfach super und wurde begleitet von einer großen Anzahl neuer Bekanntschaften. Auch sie trugen zum Gelingen dieser Arbeit bei und/oder sorgten auch für ereignisreiche Jahre abseits der Physik, ganz gleich ob hier in der Nähe oder auf der anderen Seite des Erdballs.

Nach meinen Mentoren hat Jasmin den größten Beitrag - sowohl an Zeit (Tag-, Nacht- und "Rund-um-die-Uhr"-Schichten), aber auch Körpereinsatz (autsch, wieder ein blauer Fleck) - geleistet. Vielleicht (mit einer Wahrscheinlichkeit von ungefähr 1:5 942 112) hätte es auch allein funktioniert, aber es wäre niemals so lustig und lehrreich gewesen - für uns beide. Gab es etwas zu organisieren, du hast überall geholfen und mir vielfach den Rücken freigehalten; dank dir gab es Doktorhüte, Geschenke oder "Freizeitaktivitäten". Ich drücke dir die Daumen für deinen eigenen namenerweiternden Präfix.

Sven, ohne dich funktionierte heute kein Computer mehr. Was auch immer zu erledigen war - wo Arbeit wartete, warst du nicht weit, einem stets behilflich. Unsere Strahlzeit in Ottawa mit "Überlebenstraining" beim Abendessen war außergewöhnlich.

Ein ganz besonderes Danke++ auch an Achim. Ohne dich wäre ich in Root nicht weiter als bis zum Startbildschirm gelangt. Deine Programmierkenntnisse haben mir etliche nervenaufreibende Stunden erspart - vor allem bei der Heliumgrundzustandswellenfunktion. Und auch für die jederzeitige Gastfreundschaft danke ich dir.

Till, du hast es schon geschafft und die Ziellinie überquert. Dein trockener Humor (oder ist es Sarkasmus?) ließen mich so einiges nochmals überdenken. Danke auch, dass sich dein Effekt nicht zu sehr in meiner Arbeit breit gemacht hat.

Mit André erfuhr ich am eigenen Leib, dass man doch tatsächlich Temperaturen jenseits der -35  $^{\circ}$ C in Ottawa lebend überstehen konnte. Laser und COLTRIMS - eine besonders zeitraubende Kombination, wie ich dank dir in Kanada lernen durfte.

Die besten Tipps für die Erkundung von Land und Leuten bietet Ottmar. Und ganz nebenbei ist er der absolute Detektorspezialist. Den ersten 120er Detektor durfte ich dank deiner verwenden, ganz zu schweigen vom ersten mit Loch. :-)

Totti, dir danke ich für deine Vorbildfunktion, das Spezial-Coaching und eine unendliche Zahl guter Tipps. Naja, eine "grüne Hölle" ist es zum Glück nicht geworden - gelb finde ich ohnehin viel schöner. Natürlich auch dem Rest der HSB/Dörner-Gruppe - Nadine, Kathi Odi, Birte, Jürgen, Klaus, Kurt, Kyra, Lutz, Maciek, Manuel, Mathias, Mirko, Nikos, Oli, Robert, Rui und Thorsten - danke ich für eine unvergessene Zeit. Erst alle zusammen bringen das echte Leben in den Alltag auf unserem Gang. Aber auch jenseits von Frankfurt sind zahlreiche Personen zu nennen, die für Abwechslung, ereignisreiche Tage, interessante Diskussionen sorgten oder Einblicke außerhalb der Physik gewährten: Angela, Harald, Markus, Matthias, Mike, Allen, Michael, Matt, Pedro, Sergio, Maria, Alexander, Takahasi, Norio, Manolis und Pavel - *danke, thanks, gracias, arigato gozaimasu, efcharisto, spasiba*. Ein weiteres Extradankeschön geht an Ivan, der mir in der Schlussphase bei der Fehlerreduzierung äußerst behilflich war und tiefere Einblicke für den Standpunkt eines Theoretikers gewährte - *hvala*.

Natürlich haben nicht nur Physiker und solche, die es mal werden wollen, wichtige Beiträge zu dieser Arbeit geleistet. Ganz vorne steht die Beschleunigermannschaft um Karl Schneider zusammen mit Herrn Dilfer, Herrn Ziel und Herrn Baumgarten. Sie alle erfüllten auch exotische Strahlwünsche, selbst wenn dafür der Van-de-Graff-Beschleuniger umgebaut werden musste. Ich war bestimmt kein leichter Experimentator, umso dankbarer bin ich heute; nicht zuletzt für die gute Infrastruktur mitsamt Kühlwasser, Hochspannung & -strom, Pumpenwartung sowie der vielen weiteren "Kleinigkeiten". Herrn Waldschmidt aus dem Targetlabor (obwohl ich gasförmige Targets verwendete \*g\*) habe ich zu danken für eine schier unendliche Zahl zu bedampfender Hülsen (und nicht zu vergessen den Recoilsteerer), von denen ich erst heute weiß, wie viel Arbeit sie wirklich bereiteten.

Und dann gab es noch die drei Werkstätten des IKF, die Feinmechanik, die Schlosserei und die Elektronikabteilung. Spezieller Dank gebührt Herrn Theisinger, der den meisten Teilen meiner manchmal "originellen" Zeichnungen Leben einhauchte, sodass überhaupt eine Messapparatur entstehen konnte. Stellvertretend für die restlichen Mitarbeiter der mechanischen Werkstätten danke ich Erich Zanger ebenfalls für die Erledigung der vielen "Zwischendurchs", welche auch kurz vor Feierabend noch mal schnell zu erledigen waren. Herrn Köhler stellvertretend für die Elektronikabteilung danke ich ebenfalls für die vielen nicht in Worte zu fassenden Kleinigkeiten. Stellvertretend für die Verwaltung bedanke ich mich bei Herrn Eschenbrenner.

Nicht unter den Tisch fallen dürfen die "Sponsoren" - das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), die Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und die Roentdek Handels GmbH -, bei welchen ich mich vielmals bedanke. Speziell der Firma Roentdek danke ich für die Detektor-Spezialanfertigungen und Prototypen.

Damit wären alle Begleiter in der Physik genannt. Weiterhin bedanke ich mich bei meinem "Privatleben":

Vielen Dank an meine Lektoren, Brigitte, Meike, Tanja und nochmals Sven, Ihr platziertet die letzten Kommata an die korrekten Stellen, gabt der Orthographie das Aussehen der 'Neuen Deutschen Rechtschreibung', die Interpunktion verdient erst jetzt diesen Namen und merztet die vielen weiteren kleinen und großen Fehler aus.

Danke meinen Freunden - jeder von euch wird wissen, wer gemeint ist - für die Entführung aus dem "Elfenbeinturm", in welchem der Physiker zuweilen festsitzt. Danke für "Herr Präsident, meine Damen und Herren, ...", für "1, 2, 3" und "cha cha cha", für "18, 20, 2 und Null" sowie für alles nicht durch Worte Auszudrückende.

Am allermeisten habe ich aber den Menschen zu danken, die mich mein ganzes Leben auch außerhalb der Physik begleitet haben - meine Eltern und natürlich mein Bruder Kai. Danke für eure Liebe und Vertrauen. Danke, dass ihr mich auf meinem Weg immer wieder bestärkt und unterstützt habt. Danke für alle "Selbstverständlichkeiten". Ich bin das Produkt meiner Umwelt<sup>1</sup> und ihr wart der wesentlichste Teil. Euch widme ich diese Arbeit!

 $<sup>^{1}</sup>$ Danke Totti für dieses zutreffende Sprüchlein. ;-)

## über den Autor

Markus Stefan Schöffler, geboren am 12. Januar 1978 in Offenbach am Main

Eltern: Horst Schöffler und Sabine Schöffler, geb. Grewin Geschwister: Kai Th. Schöffler

### Ausbildung

**Grundschule** (1984 - 1988) Beethovenschule, Offenbach am Main

**Gymnasium** (1988 - 1997) Albert-Schweitzer-Schule, Offenbach am Main Schulabschluss: Abitur (2,0)

**Studium** der Physik (seit 1997) Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main

Zwischenprüfung (1999): Vordiplom (sehr gut)

Beginn der Diplomarbeit (2000) Abschluss (2002): Diplom (sehr gut)

Beginn der Promotion (2003)

#### Forschungsaufenthalte

Juli 2001	4 Wochen	ALS, Berkeley (USA)
Januar 2002	1 Woche	BESSY II, Berlin (Deutschland)
Juni 2002	1 Woche	HASYLAB, Hamburg (Deutschland)
Juli/August 2002	4 Wochen	ALS, Berkeley (USA)
Januar 2003	1 Woche	HASYLAB, Hamburg (Deutschland)
Januar 2003	2 Wochen	NRC, Ottawa (Kanada)
Februar 2003	1 Woche	Technische Universität, Wien (Österreich)
Februar 2003	2 Wochen	GSI, Darmstadt (Deutschland)
April 2003	1 Woche	BESSY II, Berlin (Deutschland)
August 2003	4 Wochen	ALS, Berkeley (USA)
Oktober 2003	2 Wochen	GSI, Darmstadt (Deutschland)
Oktober 2003	1 Woche	HASYLAB, Hamburg (Deutschland)
November 2003	2 Wochen	BESSY II, Berlin (Deutschland)
Februar 2004	2 Wochen	GSI, Darmstadt (Deutschland)
April 2004	1 Woche	ETH, Zürich (Schweiz)
Juni 2004	3 Wochen	AIST & IMS, Tsukuba & Okazaki (Japan)
Juli 2004	2 Wochen	NRC, Ottawa (Kanada)
August 2004	4 Wochen	ALS, Berkeley (USA)
September 2004	2 Wochen	GSI, Darmstadt (Deutschland)
Februar 2005	2 Wochen	GSI, Darmstadt (Deutschland)
März 2005	1 Woche	Technische Universität, Wien (Österreich)
April 2005	2 Wochen	CAB, Bariloche (Argentinien)
Dezember 2005	1 Woche	FEL, Hamburg (Deutschland)
März 2006	4 Wochen	ALS, Berkeley (USA)

### Konferenzteilnahmen / Vorträge

März 2001	1 Woche	ECAMP & DPG-Frühjahrstagung, Berlin (Deutschland)
März 2002	1 Woche	DPG-Frühjahrstagung, Osnabrück (Deutschland)
Juli 2002	1 Woche	W&E Heraeus Workshop, Bad Honnef (Deutschland)
März 2003	1 Woche	DPG-Frühjahrstagung, Hannover (Deutschland)
Juli 2003	1 Woche	ICPEAC XXIII, Stockholm (Schweden)
Juli 2003	1 Woche	ISIAC XVIII, Stockholm-Helsinki (Schweden-Finnland)
Februar 2004	1 Woche	EAS, Riezlern (Österreich)
März 2004	1 Woche	DPG-Frühjahrstagung, München (Deutschland)
Juli 2004	1 Woche	ECAMP VIII, Rennes (Frankreich)
Juli 2005	1 Woche	ICPEAC XXIV, Rosario (Argentinien)
Juli 2005	1 Woche	(e, 2e) and related Topics, Buenos Aires (Argentinien)