

Untersuchung der Transferionisation in
protoninduzierten Stoßprozessen an
Heliumatomen

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

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

von
Barbara Helmes
aus Polch, Kreis Mayen/Koblenz

Frankfurt am Main 2003
(D F 1)

vom Fachbereich Physik der
Johann Wolfgang Goethe - Universität als Dissertation angenommen.

Dekan:Prof. Dr. H. Schmidt-Böcking
Gutachter:Prof. Dr. R. M. Dreizler, Prof. Dr. R. Dörner
Datum der Disputation:.....23. Januar 2004

“Es ist nicht leicht, sich in einem Ganzen zurechtzufinden, das sich aus Gliedern zusammensetzt, welche verschiedenen Dimensionen angehören. Und solch ein Ganzes ist sowohl die Natur als auch ihr umgeformtes Abbild, die Kunst.

Es ist schwer, ein solches Ganzes, sei es Natur oder Kunst, zu übersehen, und noch schwerer ist es, einem anderen zum Überblick zu verhelfen. ...

Denn es fehlt uns hier an Mitteln, eine mehrdimensionale Gleichzeitigkeit synthetisch zu diskutieren.

Wir müssen trotz aller Mangelhaftigkeit uns eingehend mit den Teilen befassen.

Aber bei jedem Teil sollen wir, so mancherlei es auch da schon zu erwägen gibt, uns der Teilhandlung als solcher bewußt bleiben.”

P. Klee, Über die moderne Kunst (1945) [105]

Inhaltsverzeichnis

I	Einleitung	1
II	Transferionisation in der Theorie	9
1	Transferionisation im Überblick	13
1.1	Theoretische Beschreibung von Ion-Atom-Stößen	13
1.2	Struktur des Targets	24
1.3	Transferionisation im (H^+, He) -Stoßsystem	39
1.4	Bisherige theoretische Untersuchungen	55
2	Die korrelierte Transferionisation	71
2.1	Beschreibung der Modellstruktur	71
2.2	Beschreibung des Targets	72
2.3	Das Modell unabhängiger Ereignisse	75
2.4	Berechnung der Einfangskomponente	89
2.5	Berechnung der Ionisationskomponente	92
2.6	Die Extraktion der Observablen	98
III	Dynamische Eigenschaften der Transferionisation	105
3	Die Stoßdynamik	109
4	Schrittweise und abhängig ablaufende Transferionisation	115
4.1	Schrittweise Transferionisation	115

4.2	Transferionisation durch abhängige Prozesse	125
4.3	Zusammenfassende Anordnung der Prozesse auf der Energieskala und existierende Messungen	127
IV	Vergleich von Theorie und Experiment	131
4.4	Ergebnisse der Rechnungen mit einem wasserstoffähnlichen Ansatz	136
4.5	Ergebnisse der Rechnungen mit einem Hartree-Fock-Ansatz . . .	166
4.6	Ergebnisse der Rechnungen mit einem Eckart-Ansatz	201
V	Zusammenfassung und Schlußbetrachtung	245
VI	Anhang	255
A	Abkürzungen	257
B	Die genäherten Zwischenzustände	259
C	Untersuchung der Beiträge zur Transferionisation	263
C.1	Einfang gefolgt von Ionisation	264
C.2	Ionisation gefolgt von Einfang	271
D	Transformation der Amplituden vom Streuwinkel- ins Stoßpara- meterbild	277
E	Berechnung des Fourier-Bessel-Integrals	281

Teil I

Einleitung

Den Aufbau von Materie über den Prozess der Modellbildung zu verstehen, ist eine grundlegende Motivation der Physik. Im Spannungsfeld zwischen theoretischer Beschreibung und ihrer empirischen Basis, der erfassbaren Wirklichkeit, kommt hier den Streuprozessen eine besondere Bedeutung zu: seit den Rutherford'schen Streuversuchen besitzen Streuexperimente eine lange Tradition bei der Erforschung der submikroskopischen Struktur der Materie. Parallel dazu entwickelte sich ein Instrumentarium zu ihrer Beschreibung im Rahmen der Quantenmechanik: die quantenmechanische Streutheorie. Sie gründet sich im nicht-relativistischen Fall auf die Lösung der Schrödingergleichung. Da an Ion-Atom-Stoßprozessen mindestens drei Teilchen beteiligt sind, impliziert dies die Komplexität eines Vielteilchensystems. In der Regel ist es nicht möglich, die Schrödingergleichung für ein wechselwirkendes Vielteilchensystem exakt zu lösen. Aus diesem Grund kann die theoretische Beschreibung solcher Stoßprozesse prinzipiell nur approximativ bewältigt werden. Diese Problematik ist prinzipieller Natur und betrifft sowohl klassische, wie quantenmechanische Systeme. Da sie sich bei der Beschreibung aller atomaren, beziehungsweise ionischen Systeme zeigt, die über das atomare Wasserstoffproblem hinausgehen, stellt die Beschreibung der gekoppelten interelektronischen Bewegung eine Herausforderung allgemeineren Charakters dar.

Generell eignet sich zum Studium von Vielteilcheneffekten die Untersuchung von Stoßprozessen, bei denen mehrere Elektronen ihren Zustand ändern. Das einfachste Stoßsystem an dem sich Vielteilcheneffekte wie die interelektronische Korrelation zeigen, ist das Stoßsystem $(H^+; He)$, in dem nur vier Teilchen beteiligt sind. Um Vielteilcheneffekte beobachten zu können, ist es eminent wichtig, möglichst viele Observablen zu messen. In dieser Hinsicht hat sich die experimentelle Technik im Zuge der Zeit stark verbessert: so ist es heute mit der Entwicklung der hochauflösenden Rückstoßionenimpuls-Spektroskopie möglich, die Dynamik von Vielteilchenstößen detailliert zu untersuchen. Diese Technik der *Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy* (COLTRIMS) wurde von Dörner et al. [87] entwickelt. Die COLTRIMS-Technik erlaubt es, den Impulszustand aller am Stoß beteiligten Partner zu ermitteln und eignet sich daher insbesondere, um Vielteilcheneffekte wie die interelektronische Korrelation nachzuweisen.

Gegenstand dieser Arbeit ist die Untersuchung der Transferionisation am Beispiel

des Stoßsystems ($H^+; He$)



bei der ein Elektron des Projektils eingefangen und ein Elektron ins Kontinuum emittiert wird. Sie ist somit charakterisiert durch den Übergang zweier Elektronen und stellt eine einfache Stoßreaktion dar, in welcher interelektronische Korrelationseffekte erkennbar werden können. Der Grund hierfür liegt in der Kopplung beider Übergänge. Stellt man die zur Transferionisation führenden Reaktionskanäle zusammen, so lassen sich generell zwei Typen unterscheiden: in der ersten Variante laufen die beiden Teilübergänge in guter Näherung unabhängig voneinander ab, im zweiten Fall hingegen hängen die Teilübergänge voneinander ab. Die Identifikation der experimentell beobachteten Strukturen findet auf der Basis der Erhaltungssätze statt: dynamische Überlegungen liefern die Signatur der verschiedenen Mechanismen im Impulsraum.

Anlass für die theoretische Untersuchung der Transferionisation im Stoßsystem ($H^+; He$) sind experimentelle Beobachtungen, die sich auf die Anwendung der COLTRIMS-Technik gründen. So zeigen die Experimente, die im wesentlichen von Volker Mergel [62] an diesem Stoßsystem ausgeführt wurden, interessante Eigenschaften im elektronischen Emissionsverhalten. Der experimentelle Befund weist folgende Emissionscharakteristika aus:

- Das Elektron wird bevorzugt in entgegengesetzter Richtung zum auslaufenden, nunmehr neutralen Projektil, emittiert.
- Man beobachtet Elektronen mit sehr hoher Emissionsenergie.
- Alle Ejektile, das He^{2+} -Ion, das Wasserstoffatom H^0 und das emittierte Elektron e^- , werden in die Streuebene des Projektils emittiert.

Bislang wurde das Emissionsverhalten von theoretischer Seite noch nicht systematisch untersucht, so dass für die Abweichung von einer radialsymmetrischen Verteilung der Elektronenemission und die anderen beobachteten Strukturen noch kein Grund bekannt ist. Hier besteht ein Klärungsbedarf, dem im Rahmen dieser Arbeit Rechnung getragen werden soll: die vorliegende Untersuchung konzentriert sich auf die Suche nach den Ursachen für die markanten Emissionseigenschaften.

Da es experimentelle Indizien für die Annahme gibt, dass zur Transferionisation unabhängig ablaufende Elektronenübergänge massgeblich beitragen, diskutieren Mergel et al. [88] als verantwortlichen Mechanismus die kinematische Transferionisation c-KTI¹, i.e. die Kopplung von einem sehr schnell ablaufenden Einfang und einer nahezu unabhängig davon ablaufenden Ionisation. Das Adjektiv *kinematisch* bezieht sich auf die vermutete Einfangsprozedur. Man nimmt hierbei an, dass das Elektron im Target zum Stoßzeitpunkt nahezu dieselben Impulskomponenten aufweist, wie das Projektil und von ihm daher einfach mitgerissen werden kann. Ein solcher Mechanismus wird als ein kinematischer Einfang bezeichnet. Die dem Mechanismus c-KTI zugrundeliegende Hypothese ist, daß die Ursache für die prägnanten Emissionseigenschaften durch Viel-Teilchen-Eigenschaften des Heliumatoms erzeugt werden und targetinterne Korrelationseffekte, wie Wechselbeziehungen in der räumlichen Verteilung der Elektronen um den Kern, die beobachteten Verteilungsmuster verursachen.

Ausgehend davon ergibt sich folgende Untersuchungsstrategie: es wird eine Modellstruktur entwickelt, die im Bild der unabhängigen Ereignisse verbleibt, aber bestimmte Aspekte elektronischer Korrelation im Rahmen der Beschreibung des Targetatoms berücksichtigt. Es bietet sich an, durch Einbau verschiedener Wellenfunktionen für $He(1s^2)$ den Einfluss der Targetstruktur detailliert zu untersuchen. Dies kann in verschiedener Hinsicht umgesetzt werden.

Da die interelektronische Korrelation im Heliumatom in radial- und winkelabhängige Anteile zerlegt werden kann, kann die Rolle untersucht werden, die die funktionale Abhängigkeit von Korrelation spielt. In einfachster Form ist dies möglich, indem ausschliesslich radiale Anteile von Korrelation in der Wellenfunktion berücksichtigt werden. Ein entsprechend gewählter Ansatz kann als erfolgversprechend gelten. Einen Anlass für diese Annahme bietet die Vermutung, dass die Emission von hochenergetischen Elektronen durch eine Wechselbeziehung zwischen den Elektronen erzeugt sein könnte, die sich in einer Abhängigkeit in der radialen Verteilung der Elektronen um den Kern äußert. Zudem sollte sich ein strukturierter Radialanteil generell in einem facettenreichen Emissionsverhalten äußern.

Eine anschliessende Untersuchung sollte sich auf die Gegenüberstellung der Ergebnisse mit Prognosen stützen, die das Modell für Targetansätze liefert, die den

¹correlated-Kinematical Transfer Ionisation

über die Coulombabstoßung der Elektronen ins Spiel gebrachten Anteil an Korrelation per Definition nicht abbilden. Hierzu gehören sämtliche auf der Basis des Modells unabhängiger Teilchen (IPM²) gewonnenen Ansätze. Zu nennen sind hier sowohl störungstheoretische, als auch einige im Kontext einer Variationsrechnung gewonnene Ansätze. Eine Sonderrolle kommt aber dem Hartree-Fock-Ansatz zu, da er die beste Näherung im Rahmen des Modells der unabhängigen Teilchen darstellt. So wird der Begriff der Korrelationsenergie – er bezeichnet die aus der interelektronischen Wechselwirkung resultierende Energie – als Differenz zwischen Hartree-Fock-Energie und exakter, i.e. experimentell gemessener Energie definiert. Durch einen Vergleich der sich in qualitativer Hinsicht unterscheidenden Ansätze des IPM, kann ein weiterer wichtiger Aspekt untersucht werden: der Einfluss, der durch die Qualität der Targetstruktur in die Ergebnisse eingebracht wird.

Bei der Umsetzung dieses Konzepts in konkrete Rechnungen wurden drei verschiedene Ansätze für den Heliumgrundzustand in das Modell implementiert und mit den Experimenten verglichen. Die beiden ersten – hier handelt es sich um einen wasserstoffähnlichen Ansatz und einen Hartree-Fock-Ansatz – stellen Näherungen im Rahmen des Modells unabhängiger Teilchen dar, während der dritte Ansatz – der Eckart-Ansatz – auch radiale Korrelationsanteile der Targetstruktur abbildet.

Rechnungen von Belkic und Gayet [41] legen nahe, dass der Einfang in 80% bis 85% aller Fälle in den Grundzustand erfolgt. In den Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit wurden daher nur Beiträge durch einen Einfang in den Grundzustand berücksichtigt.

Insgesamt gliedert sich die Arbeit wie folgt: Der erste Teil befasst sich mit der theoretischen Behandlung der Transferionisation. Es wird eine kurze Zusammenstellung der Grundlagen der Streutheorie gegeben, deren Anwendung auf das untersuchte Stoßsystem wird vorgestellt, wobei insbesondere auf den Prozess der Transferionisation eingegangen wird, bisherige Arbeiten werden diskutiert. Der Abschnitt endet mit einer Erläuterung der Modellstruktur, die den Rechnungen dieser Arbeit zugrundeliegt. Im zweiten Teil wird die Analyse der beitragenden Kanäle im Hinblick auf ihr Potential vorgenommen, die experimentellen Beobachtungen zu erklären. Instrument ist hier die Ableitung dynamischer Bedingun-

²Independent Particle Model

gen aus den Erhaltungssätzen. Dies liefert auch die Basis zur Identifizierung der Transferionisation im Experiment (Prozesssignaturen). Im dritten Teil schließlich, werden die experimentellen Daten mit den theoretischen Ergebnissen verglichen und im Hinblick auf das resultierende Emissionsverhalten bewertet. Die Arbeit schließt mit einer kompakten Zusammenfassung der Ergebnisse, wobei auch ein Ausblick auf eine mögliche Erweiterung des Modells gegeben wird. Eine Liste der verwendeten nicht allgemeinverständlichen Abkürzungen findet man zu Referenzzwecken im Anhang.

Im Rahmen der Arbeit werden die Rechnungen in atomaren Einheiten ausgeführt, die sich aus den Eigenschaften des Wasserstoffatoms im Grundzustand ergeben. Man erhält sie durch die nachstehende Setzung:

- für die Länge $1 a.u.$ (Bohr) $= 5.29177 \cdot 10^{-8} cm = a_0$ (Bohrscher Radius),
- für die Masse $1 a.u. = 9.10953 \cdot 10^{-28} g = m_e$ (Elektronenmasse),
- für die Zeit $1 a.u. = 2.41889 \cdot 10^{-17} s$ (klassische Umlaufzeit des Elektrons auf kreisförmiger Bahn mit Radius 1 Bohr).

Daraus ergeben sich für die Elementarladung e , das Plancksche Wirkungsquantum \hbar , die Lichtgeschwindigkeit c und die Energie als abgeleitete Dimension folgende Umrechnungsfaktoren:

- für die Elementarladung $e = 1.60219 \cdot 10^{-19} As = 1 a.u.$
- für das Plancksche Wirkungsquantum, dividiert durch 2π ,
 $\hbar = 1.05459 \cdot 10^{-34} Js = 1 a.u.$
- für die Lichtgeschwindigkeit $c = 2.99792 \cdot 10^{10} \frac{cm}{s} = 137 a.u.$
- für die Energie, die in Einheiten der doppelten Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms im Grundzustand gemessen wird
 $E_h = 27.2116 eV = 1 a.u.$ (Hartree).

Teil II

Transferionisation in der Theorie

Gegenstand dieses Teils ist die Beschreibung der Transferionisation aus theoretischer Sicht. Das erste Kapitel umfasst sowohl eine Zusammenstellung der Grundlagen der Streutheorie im Überblick, als auch deren Anwendung auf das untersuchte Stoßsystem und den betrachteten Prozess. Es wird vervollständigt durch eine Bestandsaufnahme der bisherigen Arbeiten. Im zweiten Kapitel wird die den Rechnungen in dieser Arbeit zugrundeliegende Modellstruktur erläutert.

Kapitel 1

Transferionisation im Überblick

Das Hauptinteresse dieses Kapitels gilt der theoretischen Beschreibung einer Transferionisation. Um das Verständnis der hier verwendeten Verfahren zu erleichtern, wird in einem Überblick zunächst der theoretische Apparat zur Beschreibung von Stoßprozessen vorgestellt, wobei jedoch der besondere Fokus auf die verwendeten Ansätze gelegt wird.

Beim betrachteten Stoßsystem treten Vielteilcheneffekte auf, die infolge der Entkopplung der nukleonischen und der elektronischen Bewegung bei den betrachteten Stoßenergien nur das elektronische System betreffen. Daher wird darauf folgend ein Überblick über die involvierten Vielteilchenaspekte und deren Beschreibung gegeben; ein Schwerpunkt bildet die theoretische Beschreibung des Heliumatoms als Vielteilchensystem. Inhalt des sich daran anschließenden Abschnitts ist die Betrachtung einer Transferionisation im Proton-Helium-Stoßsystem aus dem Blickwinkel der Theorie.

1.1 Theoretische Beschreibung von Ion-Atom-Stößen

Aufgrund der inneren Struktur der stoßenden Partner gestaltet sich die Beschreibung von Ion-Atom-Stößen recht komplex. Eine Vielzahl von inelastischen Prozessen ist möglich, bei denen ein oder mehrere Elektronen ihren Zustand verändern können: Beispiele hierfür sind Ionisation, Anregung, Einfang oder Kombinationen davon. Welche Prozesse tatsächlich ablaufen, ist eine Frage der Energiebilanz.

Vielelektronenübergänge, wie der hier beleuchtete Fall, werden im Rahmen der Streutheorie ausgewertet.

Die quantentheoretische Beschreibung von Ion-Atom-Stößen hängt sowohl von der Geschwindigkeit der Projektilbewegung als auch von der Masse und der Ladung der beteiligten Stoßpartner ab. Für sehr schwere oder stark geladene Projektil- oder Targetsysteme ($Z\alpha \gg 0.1$, $\alpha = \frac{1}{137}$ ist die Feinstrukturkonstante) und sehr schnelle ($v_p \gg \frac{c}{10}$) Stöße, ist eine relativistische Behandlung erforderlich [17]. Hier ist die zeitabhängige Dirac-Gleichung zu lösen, während im nicht-relativistischen Energiebereich die zeitabhängige Viel-Teilchen-Schrödinger-Gleichung den Ausgangspunkt der Beschreibung bildet. Diese Arbeit beschränkt sich ausschließlich auf die Untersuchung von Streuprozessen im Bereich nicht-relativistischer Projektilgeschwindigkeiten, der Streuung des leichtesten Ions, des Protons, am Heliumatom (Energiebereich von 0.3 MeV bis 1.4 MeV). Für dieses Stoßsystem ist eine nicht-relativistische Behandlung gerechtfertigt. Zu diskutieren ist also

$$i \partial_t |\tilde{\Psi}\rangle = \hat{H} |\tilde{\Psi}\rangle \quad (1.1)$$

mit geeigneten Rand- und Anfangsbedingungen. Es kann davon ausgegangen werden, dass selbst relativistische Korrekturen des Hamilton-Operators, wie die Spin-Bahn-Kopplung in sehr guter Näherung vernachlässigt werden können und somit keine spinabhängigen Wechselwirkungen auftreten. Der Spinanteil kann absepariert werden und die Betrachtung beschränkt sich auf den Ortsraumanteil.

Der Hamilton-Operator \hat{H} in der Ortsdarstellung setzt sich zusammen aus Operatoren, die die kinetische und potentielle Energie der beteiligten Nukleonen und Elektronen abbilden

$$\hat{H} = \hat{T}_P + \hat{T}_T + \hat{V}_{PT} + \sum_{i=1}^N [\hat{T}_{e_i} + \hat{V}_{e_i T} + \hat{V}_{e_i P}] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1; i \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.2)$$

Falls infolge fehlender zeitabhängiger Kräfte die Operatoren des Systems nicht explizit zeitabhängig sind, ist die Streuung energieerhaltend und die Beschreibung des Stoßvorgangs kann sich auf die stationäre Schrödinger-Gleichung stützen. Die Evolution der Wellenfunktion ist dann durch den Energieeigenwert E und die

Eigenfunktion Ψ der stationären Schrödinger-Gleichung eindeutig bestimmt zu

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle e^{iEt} \quad . \quad (1.3)$$

In der experimentellen Praxis finden Messungen am Stoßsystem nur vor oder nach dem Stoß statt. Der genaue zeitliche Ablauf interessiert nicht. In dieser Hinsicht ist die Beschreibung von Streuprozessen zugeschnitten auf die experimentelle Situation: man löst hier die Schrödinger-Gleichung für an das physikalische Geschehen angepasste Randbedingungen, die die Situation lange vor und nach dem Stoß, in asymptotischen Entfernungen vom Streuzentrum, charakterisieren.

Man teilt den Hamilton-Operator zunächst so auf, dass die Eigenzustände des Hamilton-Operators \hat{H}_α der entstehenden Komponenten die Situation im Eingangskanal, beziehungsweise Endkanal widerspiegeln. Für den Eingangskanal α wählt man den Hamilton-Operator der Komponenten so, dass er demjenigen der Subsysteme des Stoßsystems lange Zeit vor dem Stoß entspricht. Werden die Subsysteme des Stoßsystems durch die Suffizes a und b charakterisiert, erhält man somit folgende Zerlegung des Hamilton-Operators:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_\alpha + \hat{V}_\alpha \\ \hat{H}_\alpha &= \hat{H}_\alpha^a + \hat{H}_\alpha^b \quad . \end{aligned} \quad (1.4)$$

Analog wählt man die Eigenzustände des Hamilton-Operators der Komponenten im Endkanal bezogen auf die Zeit lange nach dem Stoß β , \hat{H}_β

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_\beta + \hat{V}_\beta \\ \hat{H}_\beta &= \hat{H}_\beta^a + \hat{H}_\beta^b \quad . \end{aligned} \quad (1.5)$$

Für Prozesse, die mit einer Umverteilung der Elektronen verbunden sind (Rearrangement-Prozesse), gibt es eine Zerlegung von \hat{H} für die Situation vor dem Stoß, die sich von derjenigen, für die Situation nach dem Stoß, unterscheidet, da sich die Wechselwirkung zwischen den Stoßpartnern im Eingangs- von der im Endkanal unterscheidet. Jeder Kanal ist nicht nur durch die Art der Zerlegung des Hamilton-Operators \hat{H} gekennzeichnet, sondern auch durch den Zustand des Systems, der durch den Satz an Quantenzahlen bestimmt wird, die den inneren Zustand der Systemkomponenten eines Kanals beschreiben. Daher gehört zu jeder

Zerlegung von \hat{H} ein ganzer Satz von Kanälen. Falls die Wellenfunktionen der asymptotischen Zustände den Schrödinger-Gleichungen

$$\begin{aligned} i \partial_t |\Psi_\alpha\rangle &= \hat{H}_\alpha |\Psi_\alpha\rangle \\ i \partial_t |\Psi_\beta\rangle &= \hat{H}_\beta |\Psi_\beta\rangle \end{aligned} \quad (1.6)$$

genügen und die Wechselwirkungen zwischen den Teilsystemen \hat{V}_γ , $\gamma = \alpha, \beta$ für große absolute Zeitwerte $|t| \rightarrow \infty$ vernachlässigbar sind, sollte sich die Wellenfunktion des gesamten Systems aus dem asymptotischen Zustand vor dem Stoß (Index α) in den asymptotischen Zustand danach (Index β) entwickeln. Dies ist der Inhalt der asymptotischen Bedingungen

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -\infty} |\Psi\rangle &= |\Psi_\alpha\rangle \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} |\Psi\rangle &= |\Psi_\beta\rangle \quad . \end{aligned}$$

Es gibt verschiedene Standardverfahren um die Schrödinger-Gleichung (1.1) zu lösen: man unterscheidet hier vollständig quantenmechanische, semiklassische und klassische Lösungsmethoden, die in den Abschnitten 1.1.1, 1.1.2, 1.1.3 zusammengefasst vorgestellt werden. Hier ist anzumerken, dass die Auflistung der unter den verschiedenen Methoden angeführten Lösungsstrategien nicht erschöpfend, sondern eher exemplarisch zu verstehen ist. Aufgrund des betrachteten Energiebereichs und der kleinen Projektil-Ladung kommen im Rahmen dieser Arbeit störungstheoretische Methoden und die semiklassische Näherung zum Einsatz. Daher wird ein besonderes Gewicht auf diese Methoden gelegt.

Zentrales Anliegen der theoretischen Beschreibung ist die Extraktion von Observablen. Im Streuexperiment werden Energie- und Winkelverteilung der gestreuten Teilchen gegen die Eingangsrichtung gemessen und in Form von Wirkungsquerschnitten angegeben. Der differentielle Wirkungsquerschnitt gibt das Verhältnis der Anzahl der in das Raumwinkelelement $d\Omega$ gestreuten Teilchen pro Zeiteinheit bezogen auf die Anzahl der einlaufenden Projektilen an. In der Streutheorie berechnet man hingegen Übergangswahrscheinlichkeiten und Teilchenströme aus denen sich der Wirkungsquerschnitt bestimmen läßt.

1.1.1 Quantenmechanische Methoden

Da die Eigenzustände der Subsysteme der einzelnen Kanäle ein vollständiges System orthogonaler Funktionen darstellen, bietet es sich an, die Gesamtwellenfunktion der stationären Schrödinger-Gleichung nach ihnen zu entwickeln

$$|\Psi\rangle = \sum_k a_k |\kappa_k\rangle \quad . \quad (1.7)$$

Mit diesem Ansatz erhält man ein gekoppeltes System von Integralgleichungen für die Koeffizienten. Dieses Verfahren ist in der Literatur unter dem Stichwort Close-Coupling zu finden¹. In der Praxis bleibt man jedoch immer auf eine endliche Zahl von Termen beschränkt. Daher ist es notwendig, die Basis so auszuwählen, dass die exakte Lösung möglichst gut dargestellt wird und ein der physikalischen Situation angemessenes Bild entsteht. Das Verhältnis von Orbitalgeschwindigkeit der Elektronen zu Projektilgeschwindigkeit legt die Art des Funktionensystems fest. Hiervon gibt es generell drei Kategorien:

- Molekülorbitale (MO-CC-Entwicklung)
- Atomare Orbitale (AO-CC-Entwicklung)
- Pseudozustände.

Ist die mittlere Projektilgeschwindigkeit klein gegenüber der Elektronengeschwindigkeit, so ist ein molekulares Bild des Stoßgeschehens angemessen, denn die Elektronenwolke kann sich in jedem Augenblick der Nukleonenbewegung adiabatisch anpassen. Man entwickelt die Gesamtwellenfunktion dann nach den zweizentrierten Eigenzuständen des aus Target und Projektilsystem gebildeten Quasimoleküls (MO-CC-Entwicklungen). Liegen beide Geschwindigkeiten in der gleichen Größenordnung, entwickelt man nach Eigenzuständen der atomaren Zentren. Man verwendet hier sowohl Target- als auch projektilzentrierte atomare Orbitale, sowie Kombinationen beider (Ein-Zentren- oder Zwei-Zentren-AO-CC-Entwicklungen). Allerdings ist es wichtig, möglichst alle relevanten Reaktionskanäle und Zwischenzustände darzustellen. Ein Problem ist hier die Darstellung des Kontinuumanteils des Zustandsspektrums: da sowohl die atomaren gebundenen Zustände als auch

¹Details hierzu findet man zum Beispiel in [17] oder [54].

die molekularen orthogonal zu den Kontinuumszuständen sind, kann damit das Kontinuum nicht dargestellt werden. Hier setzt nun die Entwicklung nach Pseudozuständen an. Man schließt, um eine möglichst exakte Darstellung der Streuwellenfunktion zu erhalten, in die Basis zusätzlich bestimmte relevante Anteile des Kontinuums durch solche Pseudozustände ein. Diese Pseudozustandsfunktionen werden so gewählt, dass der Grad ihrer Überlappung mit dem einzuschließenden Zustand möglichst maximal ist.

Eine weitere Möglichkeit zur Lösung der Schrödinger-Gleichung ist der Einsatz eines störungstheoretischen Verfahrens. Viele Verfahren, die in der Streutheorie Anwendung finden, beruhen auf der Störungsrechnung. Aus störungstheoretischer Sicht zerfällt der Hamilton-Operator in zwei Anteile, einen ungestörten und die Störung V , wobei die mit der Störung verbundenen Energieänderung klein sein soll gegen die Energie des Ausgangszustands. Die Entscheidung, ob ein solches Verfahren anzusetzen ist, hängt natürlich von der Stärke der Störung (Parameter ist hier die Ladung der Stoßpartner) und von der Zeit, in der die Wechselwirkung wirksam ist, und damit von dem Verhältnis der Orbitalgeschwindigkeit der Elektronen zur Geschwindigkeit des Projektils ab. Für große Relativgeschwindigkeiten ist die Stoßzeit klein gegenüber den elektronischen Relaxationszeiten. In diesem Fall kann das Wechselwirkungspotential als Störpotential behandelt werden.

Im Rahmen der stationären Streutheorie wird eine statistische Perspektive eingenommen: man verfolgt nicht das Schicksal eines einzelnen Teilchens, sondern betrachtet Teilchenströme. Der physikalischen Situation gemäß, interessiert nur der Anteil der Lösung der Schrödinger-Gleichung außerhalb des Streupotentials. Insofern kann der Zeitanteil abgespalten werden und es sind die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung zu suchen: die stationären Streuzustände. Eine solche stationäre Streuwellenfunktion muß, für große Abstände R vom Streuzentrum, sowohl einen Anteil enthalten, der einen stationären einlaufenden Teilchenstrahl mit bestimmtem Impuls \vec{k}_0 beschreibt, als auch einen stationären auslaufenden Strahl, der den Strahl der gestreuten Teilchen in Form einer Kugelwelle mit der Amplitude $f(\hat{\mathbf{R}}, E)$ repräsentiert: der Vektor $\hat{\mathbf{R}}$ weist hier in radialer Richtung vom Streuzentrum weg, E ist die Stoßenergie. Die gesamte Information über die Eigenschaften des Streupotentials steckt in der Form des auslaufenden Teilchenstroms und geht in den Ansatz für die auslaufende Welle als Streuamplitude ein. Die Randbedingungen lassen sich für Streuung eines strukturlosen

Projektils mit dem Impuls \vec{k}_0 an einem zusammengesetzten Target, welches sich vor dem Stoß im Zustand $\Psi_0(\vec{r}_1 \cdots \vec{r}_N)$ befunden hat, unter Berücksichtigung aller möglichen Kanäle, so formulieren [20]:

$$\Psi^+ \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} A \left[e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}} \Psi_0(\vec{r}_1 \cdots \vec{r}_N) + \sum_n f_{0n}(\hat{\mathbf{R}}) \Psi_n(\vec{r}_1 \cdots \vec{r}_N) \frac{e^{ik_n R}}{R} \right] . \quad (1.8)$$

Die Summation erstreckt sich über den vollständigen Satz an Targetzuständen. Außer von $\hat{\mathbf{R}}$ und der Stoßenergie E , hängt die Streuamplitude noch von inneren Freiheitsgraden des Anfangs- und Endzustandes ab. Ihr Quadrat erweist sich zudem als direkt proportional zum differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim |f_{0n}(\hat{R}, E)|^2 .$$

In der Durchführung reduziert sich die Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnitts damit auf die Berechnung der Streuamplitude, beziehungsweise eines T-Matrix-Elementes, welches sich von der Streuamplitude nur durch einen Vorfaktor unterscheidet. Um das T-Matrix-Elementes für einen Übergang auf der Energieschale zu erhalten, kann man die Lippmann-Schwinger-Gleichung heranziehen. Man gewinnt sie durch Umformung der stationären Schrödinger-Gleichung in eine Integralgleichung mit Hilfe der Greensfunktion

$$\hat{G}_\gamma^\pm = \frac{1}{E - \hat{H}_\gamma \pm i\eta}, \quad \gamma = \alpha, \beta \quad (1.9)$$

zu

$$\begin{aligned} \psi^+ &= (1 + \hat{G}_\alpha^+ V_\alpha) \psi^+ \\ \psi^- &= (1 + \hat{G}_\beta^- V_\beta) \psi^- \end{aligned} \quad (1.10)$$

und ihrer formalen Lösung

$$\begin{aligned} \psi^+ &= (1 + \hat{G}^+ V_\alpha) \psi_\alpha \\ \psi^- &= (1 + \hat{G}^- V_\beta) \psi_\beta \end{aligned} \quad (1.11)$$

oder in einer Darstellungsform mit Hilfe des T-Operators

$$\hat{T}_{\alpha\beta}^{(+)} = V_{\beta} \hat{\Omega}_{\alpha}^{(+)} \quad \hat{T}_{\alpha\beta}^{(-)} = \left(\hat{\Omega}_{\beta}^{(-)} \right)^{\dagger} V_{\alpha} \quad (1.12)$$

und den Møller-Operatoren

$$\hat{\Omega}_{\alpha}^{(+)} = 1 + \hat{G}^{+} V_{\alpha} \quad \hat{\Omega}_{\beta}^{(-)} = 1 + \hat{G}^{-} V_{\beta} \quad .$$

Diese Umformulierung hat den Nutzen, dass in der Integralform die Randbedingungen (einlaufende Welle + auslaufende Streuwelle) bereits eingearbeitet sind und so leichter handhabbar sind. Die gesuchte Lösungsfunktion hat sofort die richtige Asymptotik. Die Suffizes charakterisieren die Randbedingungen, denn die Lippmann-Schwinger-Gleichung gibt es in zwei Formulierungen, die aus der Freiheit, den Stoßprozess aus dem Blickwinkel zweier verschiedener zeitlicher Limes (vor dem Stoß und nach dem Stoß) zu betrachten, geboren werden (Post- und Prior- Formulierung). Hier steht (+) für eine auslaufende Streuwelle und (-) für eine einlaufende Streuwelle.

Beide Lippmann-Schwinger-Gleichungen, (1.10) und (1.12) sind mit Hilfe der Resolventenidentität $\hat{G} = \hat{G}_{\gamma} + \hat{G}_{\gamma} V_{\gamma} \hat{G}$ iterierbar und damit, falls die daraus resultierende Reihe konvergiert, störungstheoretisch verwertbar. Diese Reihenentwicklung ist als Bornsche Reihe bekannt. Eine Bornsche Näherung n-ter Ordnung enthält dementsprechend die ersten n Terme der Reihe. Die einzelnen Reihenglieder lassen sich physikalisch deuten: das erste Glied repräsentiert eine einfache Streuung am Potential V_1 , das zweite eine Doppelstreuung, und so fort.

Erwähnenswert ist eine Methode, die im Sinne der Störungstheorie zwischen der ersten und zweiten Ordnung steht: die Methode der verzerrten Wellen (DWBA²). Man versucht hier, Potentialanteile durch Aufspalten der T-Matrix zugänglich zu machen. Man packt einfach einen Teil der potentiellen Energie der Störung in den ungestörten Anteil des System-Hamilton-Operators, wendet die Störungstheorie in Form der Bornschen Reihe an und erhält eine Reihenentwicklung nach Potenzen des Störrests. Ein Teil der Zwischenzustände, die zu Prozessen zweiter und höherer Ordnung beitragen, ist jetzt in der Rechnung enthalten.

²Distorted Wave Born Approximation

Für den Fall eines Rearrangement-Prozesses erhält man den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu

$$\frac{\partial^2 \sigma_{if}}{\partial \Omega_p} = \frac{\mu_i \mu_f}{(2\pi)^2} \frac{k_f}{k_i} |T_{if}|^2 \quad . \quad (1.13)$$

Hier sind μ_i, μ_f die reduzierten Massen der Systeme im Anfangs-, beziehungsweise Endkanal und k_i, k_f die Relativimpulse der stoßenden Systeme im Anfangs-, beziehungsweise Endkanal. Die Herleitung ist bei [10] ausführlich dargestellt.

1.1.2 Semiklassische Verfahren

Die Idee der semiklassischen Beschreibung ist es, die Kernbewegung in einem klassischen Modell zu nähern, wo hingegen die unter dem Einfluß der Kernbewegung stehende elektronische Bewegung quantenmechanisch behandelt wird. Dieser Ansatz ist gültig, wenn beide Kerne zu jedem Zeitpunkt unterscheidbar sind, wenn also die De Broglie-Wellenlänge des Wellenpaketes, welches die Bewegung der Nukleonen beschreibt, klein gegenüber der Ausdehnung der nuklearen Wechselwirkungsregion ist. Zudem dürfen Einflüsse der Bewegung der Elektronen auf den Zustand und die Bewegung der Kerne keine Rolle spielen, so dass das nukleare Schwerpunktsystem in Bezug auf die Elektronenbewegung inertial ist. Dies ist dann der Fall, wenn die kinetische Energie der Relativbewegung der Kerne groß gegenüber der Änderung der kinetischen Energie der Elektronen ist. Diese Bedingungen sind ab Stoßenergien von 1.0 keV erfüllt [17].

Zur Diskussion der semiklassischen Näherung, separiert man die stationäre Form der Schrödinger-Gleichung (1.1) in einen nukleonischen Anteil und einen Anteil, der von den elektronischen Koordinaten abhängt und gewinnt so zwei zeitabhängige Gleichungen für Elektronen- und Kernbewegung, die über ein effektives Potential miteinander verkoppelt sind. Aufgrund des Massenverhältnisses von Elektronen- zur Nukleonenmasse, dürfen Rückkopplungseffekte der elektronischen Bewegung auf die Bewegung der Nukleonen vernachlässigt werden. Falls sich dieses Potential nur langsam mit der internuklearen Koordinate ändert, erhält man eine klassische Bewegungsgleichung für das nukleonische System. Die Nukleonen bewegen sich nun auf klassischen Trajektorien, die durch das effektive Potential festgelegt sind. Die Elektronenbewegung ist nun über die Zeitabhängig-

keit der Kernbahn zeitabhängig und man erhält mit einer Phasentransformation, mit der das effektive Potential berücksichtigt werden kann, und Vernachlässigung von Termen der Ordnung $\frac{1}{\mu}$, wobei μ die reduzierte Masse ist, die elektronische Schrödinger-Gleichung der semiklassischen Näherung oder Eikonalnäherung, kurz SCA³, [22]

$$\left[i (\partial_t + \vec{R} \nabla_R) - \hat{H}_{el} - V_{PT} \right] \Psi^{el}(\vec{R}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = 0$$

$$\hat{H}_{el} = \sum_{i=1}^N [\hat{t}_{e_i} + \hat{v}_{e_i T} + \hat{v}_{e_i P}] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1; i \neq j}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad .(1.14)$$

Eine völlige Entkopplung der nukleonischen Bewegung von der elektronischen Dynamik erreicht man, indem man das zeitabhängige effektive Potential durch ein stationäres ersetzt. Es ergibt sich die Kernbahn als Lösung der Keplergleichung. Bei großen Einschußenergien kann man sogar annehmen, dass sich das Projektil auf einer nahezu geraden Bahn bewegt. Das internukleare Potential läßt sich in diesem Fall ganz vernachlässigen und die Kernbahn wird beschrieben durch

$$\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v} t \quad . \quad (1.15)$$

Sie ist festgelegt durch den Stoßparameter \vec{b} und die Stoßenergie E . Diese Näherung wird in der Literatur als Stoßparameternäherung [22] bezeichnet. Allerdings sind durch die Vorgabe einer festen Kernbahn, sowohl Drehimpuls-, Impuls- und Energieerhaltung nicht mehr gewährleistet.

Anzumerken bleibt noch,

- dass die semiklassische Formulierung für den Energiebereich, in dem die Eikonalnäherung gültig ist, eine sehr gute Näherung an die vollquantenmechanische Formulierung darstellt [10] .
- dass sich die internukleare Wechselwirkung im Anwendungsbereich der Eikonalnäherung durch Multiplikation der Übergangsamplitude mit einem Phasenfaktor berücksichtigen lässt [10].
- dass sich differentielle Wirkungsquerschnitte gewinnen lassen [23].

³Semiclassical Approximation

Zur Lösung der nunmehr zeitabhängigen elektronischen Schrödinger-Gleichung (1.14) kann auf die vorgestellten Methoden, Abschnitt 1.1.1, zurückgegriffen werden. Aus den Übergangsamplituden als Funktion des Stoßparameters

$$\begin{aligned} a_{fi}(\vec{b}) &= i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi^- | V_\alpha | \Psi_\alpha^{el} \rangle \quad \textit{Prior} \\ a_{fi}(\vec{b}) &= i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_\beta^{el} | V_\beta | \Psi^+ \rangle \quad \textit{Post} \end{aligned} \quad (1.16)$$

erhält man dann durch Quadrieren Besetzungs- oder Übergangswahrscheinlichkeiten, [17]. Den totalen Wirkungsquerschnitt liefert die Integration über den Stoßparameter mit der Annahme azimuthaler Symmetrie

$$\sigma_{fi} = 2\pi \int_0^\infty |a_{fi}(\vec{b})|^2 b db \quad . \quad (1.17)$$

Durch Entwicklung der elektronischen Wellenfunktion mit der Lippmann-Schwinger-Gleichung erhält man, wählt man ein perturbatives Verfahren, ebensolche Störungsreihen. Eine Erweiterung des DWBA-Ansatzes bildet die Continuum Distorted Wave Approximation (CDW), die 1964 von Cheshire im Rahmen eines semiklassischen Zugangs entwickelt wurde [70]⁴. Man zerlegt das Störpotential so, dass als Reststörung nur ein Teil der kinetischen Energie des aktiven Elektrons verbleibt. In den Randbedingungen wird der Einfluß der Coulombwechselwirkungen auf die asymptotischen Anfangs- und Endzustände in Form einer Verzerrung der Wellenfunktion gegenüber den ungestörten Zuständen berücksichtigt.

1.1.3 Klassische Methoden

Hier wird, anstelle der Schrödinger-Gleichung, das klassische Viel-Körper-Problem gelöst. Beispielsweise löst man im Rahmen der Classical Trajectory Monte Carlo-Methode (CTMC) die klassischen Bewegungsgleichungen in der Hamiltonschen Formulierung zur Bestimmung der Teilchenbewegung. Als klassische Näherung, die aus der Quantenmechanik hervorgeht, wird die quantenmechanische Orts-

⁴Es gibt verschiedene Wege um die CDW-Näherung anzusetzen, nicht nur denjenigen im Rahmen der semiklassischen Näherung. Es ist ebenso möglich, sie als Näherung erster Ordnung der Reihenentwicklung im Rahmen des Formalismus von Dodd und Greider zu erhalten (siehe dazu auch [101], [75]).

und Impulsverteilung der Elektronen im Anfangszustand des Targets als klassische Phasenraumverteilung, also durch ein großes Ensemble von Elektronenkonfigurationen mit klassischen Umlaufbahnen, präpariert. Jede Trajektorie wird für einen Satz zufällig gewählter Parameter als Lösung der Kepler-Gleichung berechnet. Über die jeweils unabhängige zeitliche Entwicklung aller Phasenraumpunkte bestimmt man die zeitliche Entwicklung des Systems. Eine statistische Analyse der propagierten Verteilung im Hinblick auf die interessierenden Reaktionen liefert den Wirkungsquerschnitt [18], [19]. Daneben gibt es weitere Ansätze, wie zum Beispiel die klassische Impulsnäherung (BEA). Hier wird der Streuprozess in erster Linie als klassischer Stoßprozess beschrieben. Diese Methode wurde als erstes durch L.H.Thomas 1927 [21] auf einen Einfang-Prozess angewandt. Thomas zerlegte den Einfangprozess in zwei sukzessive binäre Stöße. Von beiden nahm er an, dass sie Rutherfordstreuungen seien und untersuchte die Bedingungen unter denen es zu einem Einfang kommen kann. Unter der Annahme einer nur vom Elektron-Kern-Abstand abhängenden Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit im Target, errechnete er den Wirkungsquerschnitt aus dem Produkt der Wahrscheinlichkeiten für die Einzelstreuprozesse.

1.2 Struktur des Targets

In diesem Kapitel geht es um den Viel-Teilchen-Charakter des Stoßsystems, der sich allerdings, bedingt durch die Entkopplung von elektronischer und nukleonischer Bewegung in diesem Energiebereich, nur in dem elektronischen System in Form von Korrelationseffekten äußert. Zunächst wird ein Überblick über Methoden der Beschreibung des Targetsystems Helium gegeben. Im Anschluß daran wird der Blick auf die hier verwendeten Targetansätze gelenkt.

1.2.1 Beschreibung des Heliumgrundzustands

Kenntnis über die Struktur atomarer Zustände gewinnt man aus der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung. In nichtrelativistischer Näherung ist der Hamilton-Operator des Targetsystems nicht spinabhängig und kann nach Über-

gang ins Schwerpunktsystem für Helium angegeben werden zu

$$\hat{H}^{2,2} = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{1}{2\mu} \nabla_{r_i}^2 - \frac{2}{r_i} \right] + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{1}{M} \vec{\nabla}_{r_1} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} \quad . \quad (1.18)$$

Hier ist $\mu = \frac{M}{1+M}$ die reduzierte Masse eines Elektrons bezogen auf den Kern der Masse M und $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ ist der Abstand zwischen den Elektronen. Mit Vernachlässigung des Massenpolarisationsterms, aufgrund der Annahme eines unendlich schweren Kerns, geht (1.18) über in

$$\hat{H}^{2,2} = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 - \frac{2}{r_i} \right] + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad . \quad (1.19)$$

Das Heliumatom ist das einfachste atomare System, in dem quantenmechanische Viel-Teilchen-Effekte zum Tragen kommen. Dazu gehören zum einen Austauscheffekte, die durch den fermionischen Charakter der Elektronen verursacht werden, zum anderen Korrelationseffekte, die durch die interelektronische Coulombwechselwirkung entstehen.

Der fermionische Charakter definiert die Symmetrieeigenschaften der aus Spin- und Ortsanteil kombinierten Wellenfunktion. Sie muß so konstruiert sein, dass sie in Bezug auf Permutationen antisymmetrisch ist. Diese Antisymmetrieforderung bedingt das Auftreten von Effekten für die es kein klassisches Analogon gibt: den Austauscheffekten.

Der Hamilton-Operator (1.19) enthält die Elektron-Kern-Anziehung und die Elektron-Elektron-Abstoßung. Über die interelektronische Wechselwirkung hängt die Bewegung der beiden Elektronen voneinander ab. Durch die Kopplung der elektronischen Bewegung zeigt sich ein anderer Viel-Teilchen-Aspekt des Systems: die Korrelation. Der Begriff Korrelation bezeichnet Effekte, die mit der paarweisen Wechselwirkung zweier Elektronen (z. B. Effekte in der Verteilung der Elektronen um den Kern, die durch die Coulombabstoßung bedingt werden) zusammenhängen. In der Folge dieser gegenseitigen Beeinflussung der elektronischen Bewegung aufeinander ist die exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung nicht möglich und man bleibt, will man die Wellenfunktion dieses Systems ermitteln, auf Näherungsverfahren angewiesen.

Es gibt verschiedene Wege um die elektronische Bewegung zu entkoppeln: in ei-

nem störungstheoretischen Ansatz ignoriert man in nullter Ordnung einfach den Elektron-Elektron-Wechselwirkungsanteil, ein Verfahren, welches, schränkt man die Betrachtung nicht nur auf Helium ein, nur für Stoßsysteme, deren Komponenten nicht zu große Kernladungen aufweisen, funktionieren kann. Andernfalls werden die Abschirmeffekte der inneren Elektronen so groß, dass die Anwendbarkeit der Störungstheorie in Frage zu stellen ist.

Eine Observable, mit der die Güte des Ansatzes eingeschätzt werden kann, ist der Energieerwartungswert. Für das Heliumatom beispielsweise gelangt man mit einem störungstheoretischen Ansatz in nullter Ordnung zu einem Wert für den Energieerwartungswert im Grundzustand, der um nahezu -38 % vom experimentell bestimmten Wert abweicht. Berücksichtigt man jedoch auch den Term erster Ordnung beträgt die Abweichung nur noch +5.3 %.

Eine elegantere Strategie besteht darin, die Abschirmungseffekte der inneren Elektronen größtenteils in einen Ein-Teilchen-Operator zu packen und so einen Übergang in ein effektives Ein-Teilchen-Bild zu vollziehen: Die interelektronische Wechselwirkung wird approximiert durch Ein-Teilchen-Potential-Operatoren, die die interelektronische Wechselwirkung als Wechselwirkung des Elektrons mit dem Feld einer gemittelten Ladungsverteilung, bestehend aus Elektron und Kern, genähert beschreiben, so dass

$$v_{e_{1T}}(x_1) + v_{e_{2T}}(x_2) + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \approx v_{e_{1T}}^{eff}(x_1) + v_{e_{2T}}^{eff}(x_2) \quad . \quad (1.20)$$

Im einfachsten Fall approximiert man die Wellenfunktion durch eine Kombination von zwei wasserstoffähnlichen Ein-Teilchen-Wellenfunktionen. Die Bestimmungsgleichung für die Viel-Teilchen-Wellenfunktion erhält man anhand der Extremaleigenschaft der Gesamtenergie: um die beste wasserstoffähnliche Näherung an die exakte Wellenfunktion zu finden, minimiert man den Erwartungswert des Hamilton-Operators bezüglich eines Parameters, der in diesem Bild einer mittleren effektiven Kernladung entspricht. Man gelangt mit diesem Verfahren zu einem Energiewert, der lediglich noch 1.93 % über dem experimentellen Wert liegt.

Die beste erreichbare Näherung im Rahmen des *Modells der unabhängigen Teilchen* resultiert aus der Anwendung des Hartree-Fock-Verfahrens. In der Sichtweise dieses Modells ist die Grundzustandswellenfunktion eine Slater-Determinante und

alle Ein-Teilchen-Zustände bis zur Fermienergie sind besetzt. Nun minimiert man den Erwartungswert des Hamilton-Operators bezüglich einer Slaterdeterminante nach den Ein-Teilchen-Orbitalen. Die Variationsgleichung löst man dann mit einem selbstkonsistenten Verfahren. Der mit dieser Methode erzielte Energieerwartungswert liegt jetzt nur noch um 1.44 % über dem experimentell bestimmten Wert. Ein eklatanter Mangel von Hartree-Fock-Ansätzen ist, das Fehlen der elektronischen Korrelation, da die interelektronische Wechselwirkung nur gemittelt berücksichtigt wird. So ist es nachvollziehbar, dass man im Rahmen einer allgemein anerkannten Definition die Korrelationsenergie als Differenz zwischen exaktem Energieeigenwert des nichtrelativistischen N-Teilchen-Hamilton-Operators und der Hartree-Fock-Energie versteht, wenn relativistische Effekte vernachlässigbar sind, wie im Fall des Heliumgrundzustands.

Will man nun über das effektive Ein-Teilchen-Bild hinausgehen, gibt es eine Vielzahl von Methoden. Eine Möglichkeit besteht darin, ein Prinzip auszunutzen, wonach aus einer gegebenen Menge von Funktionen diejenige ermittelt werden kann, die die Wellenfunktion des Systemgrundzustands am besten approximiert. Die Minimaleigenschaft des Energieerwartungswertes ist ein solches Prinzip. Um diese optimale Annäherung an die exakte Grundzustandswellenfunktion zu finden, wird das Ritzsche Variationsverfahren verwendet. Auf der Grundlage dieser Methode wurde 1930 von Carl Eckart [11] ein Ansatz zur Beschreibung des Heliumgrundzustands entwickelt, der in dieser Arbeit Verwendung findet. In diesem Ansatz sind bereits radiale Korrelationseffekte enthalten und der so ermittelte Energieerwartungswert für den Grundzustand liegt nahe beim experimentellen Wert: er weicht nur um 0.9 % nach oben hin ab. Neben dem Eckart-Ansatz gibt es weitere Variationsansätze, die Korrelationsanteile in unterschiedlicher Form berücksichtigen. In der Regel handelt es sich dabei um Reihenentwicklungen, die Potenzen der intraatomaren und interelektronischen Abstandskordinaten enthalten. Ein bekanntes Beispiel hierfür stellt der Ansatz von Hylleraas [29] dar, mit dem man eine Grundzustandsenergie errechnet, die nur noch um 0.02 % zu hoch liegt. Nennenswert sind darüberhinaus die Ansätze von Pekeris et al. [28] und von Kinoshita [58], mit denen die genauesten Ergebnisse im Hinblick auf den Energieerwartungswert für den Grundzustand berechnet wurden. Sie liegen auf dem beobachteten Wert von 2.90372 a.u. .

Daneben gibt es eine Reihe von Methoden, die auf der Hartree-Fock-Basis auf-

bauen und ebenfalls das Variationsprinzip einsetzen. Ein Beispiel ist die Konfigurationsmischung, ein Verfahren, dessen Essenz es ist, eine Überlagerung von Slaterdeterminanten herbeizuführen und so höhere Beiträge anderer Konfigurationen zum betrachteten Zustand zu berücksichtigen. Natürlich hängt das Ergebnis der Rechnung bedingt durch eine notwendigerweise endliche Anzahl an Basistermen, die man berücksichtigen kann, nun von der Basis ab. Für den Heliumgrundzustand existieren eine Reihe von Rechnungen, siehe beispielsweise [59], [35], [33].

Neben der gewünschten Reproduktion des experimentellen Werts als Energieerwartungswert des Target-Hamilton-Operators bezüglich der konstruierten Wellenfunktion, gibt es weitere Anforderungen an eine physikalisch vernünftige Wellenfunktion:

- Die Eigenfunktionen eines Viel-Teilchen-Coulomb-Systems müssen stetig und normierbar sein [25].
- Ihre Ableitungen müssen einem Satz von Randbedingungen genügen, die das Verhalten der Wellenfunktion an den Coulombsingularitäten und für einen verschwindenden interelektronischen Abstand festlegen. Dort divergiert die Coulombwechselwirkung zwischen geladenen Teilchen, wenn sie sich einander annähern. Daher muß es eine kompensierende Divergenz in der Wellenfunktion geben, die als Cusp bezeichnet wird und die durch die Randbedingungen erzwungen wird. Diese Bedingungen sind als Cusp-Bedingungen von Kato [25] bekannt.

Da der Bereich im Konfigurationsraum, in dem der Cusp eine Rolle spielt, sehr klein ist, ist es für die Grundzustandsenergie nicht von Bedeutung, wenn die Wellenfunktion den Cusp-Bedingungen nicht entspricht. Allerdings kann es einen Einfluß auf das Konvergenzverhalten einer Variationsrechnung geben [26].

Zur Beschreibung des Quantenzustandes des Heliumatoms, wird im Rahmen dieser Arbeit auf drei Ansätze zurückgegriffen: einen Ansatz mit wasserstoffähnlichen Ein-Teilchen-Orbitalen, einen Hartree-Fock-Ansatz und den Eckart-Ansatz. Der Konfigurationsmischungsansatz stellt einen wesentlich allgemeineren Ansatz für eine Viel-Teilchen-Wellenfunktion dar. Um die Ableitung der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modellstruktur, die Thema des Kapitels 2 sein wird, möglichst allgemein zu halten, wird sie auch für einen Konfigurationsmischungsansatz

formuliert. Neben den direkt verwendeten Ansätzen wird daher auch der Konfigurationsmischungsansatz in den nächsten Kapiteln beschrieben.

1.2.2 Der Variationsansatz mit wasserstoffähnlichen Einzelteilchen-Orbitalen

Dieser Ansatz fällt in den Bereich der Ansätze, deren Basis das Modell unabhängiger Teilchen (IPM) ist. Man hat hier die Vorstellung, dass jedes Elektron eines Atoms sich in einem effektiven Potential bewegt, das vom Kern und den anderen Elektronen erzeugt wird. Seine Ausarbeitung stützt sich auf das Ritzsche Variationsverfahren.

Diese Methode beruht auf dem *Ritzschen Theorem* [15]. Als Variationsprinzip gilt hier, dass der Energieerwartungswert des System-Hamilton-Operators \hat{H} einer beliebigen Wellenfunktion Ψ , die den Standardanforderungen nach Stetigkeit, Differenzierbarkeit, Eindeutigkeit und Normierbarkeit genügt, eine obere Schranke für die exakte Grundzustandsenergie E_0 liefert

$$E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0 \quad , \quad (1.21)$$

falls der Hamilton-Operator \hat{H} hermitesch und nach unten beschränkt ist.

Damit besitzt die stationäre Schrödinger-Gleichung eines quantenmechanischen Systems

$$\hat{H}\Phi_n = E_n\Phi_n \quad (1.22)$$

einen Satz von zueinander orthogonalen Eigenfunktionen Φ_n , die der Vollständigkeitsrelation genügen und deren korrespondierende Energieeigenwerte E_n nach der Größe geordnet sind

$$E_n \leq E_{n+1} \quad . \quad (1.23)$$

Die Idee eines Variationsverfahrens besteht darin, eine physikalisch motivierte Testfunktion mit freien Parametern $\Psi(\lambda_i)$, $i = 1, N$ zu formulieren. Die Parameter werden so bestimmt, dass die Testfunktion die Eigenwertgleichung (1.22) so gut wie möglich erfüllt. Man erhält dann den Energieerwartungswert für diese

Testfunktion in Abhängigkeit von λ_i

$$E[\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_N)] = \frac{\langle \Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_N) | \hat{H} | \Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_N) \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (1.24)$$

und minimiert mit diesem Ansatz den Energieerwartungswert bezüglich des Hamilton-Operators. Man bildet

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda_i} = 0 \quad (1.25)$$

mit der Nebenbedingung

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \lambda_i^2} \geq 0 \quad (1.26)$$

und erhält λ_i^{opt} und damit den im Hinblick auf die verwendete Testfunktion besten Zustandsvektor

$$\Psi(\lambda_1^{opt}, \dots, \lambda_N^{opt}) \quad . \quad (1.27)$$

Als Testfunktion zur Beschreibung des Heliumgrundzustands wählt man das Produkt zweier normierter Eigenfunktionen des wasserstoffähnlichen Ein-Teilchen--Hamilton-Operators

$$\Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \varphi_{1s}^\gamma(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\gamma(\vec{x}_2) \quad (1.28)$$

$$\varphi_{1s}^\gamma(\vec{x}) = \sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}} e^{-\gamma x} \quad . \quad (1.29)$$

Einsetzen von (1.28) in (1.24) liefert die Ausgangsgleichung zur Minimierung des Energieerwartungswertes der Wellenfunktion (1.28)

$$E[\Psi] = E(\gamma) = \gamma^2 - 2\gamma Z + \frac{5}{8} \quad . \quad (1.30)$$

Mit (1.25) ergibt sich der optimale Wert für den Parameter γ_{opt} zu $\frac{27}{16}$. Dies entspricht einer Grundzustandsenergie von

$$E(\gamma_{opt}) = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 = -2.8477 \text{ a.u.} \quad . \quad (1.31)$$

Die physikalische Bedeutung des Variationsparameters γ entspricht derjenigen einer effektiven Kernladung. In der Sichtweise dieses Modells bewegt sich jedes

Elektron also in einem effektiven Coulombpotential

$$V^{eff}(r) = -\frac{\gamma_{opt}}{r} \quad ,$$

welches die abschirmende Wirkung des weiteren Elektrons gemittelt und unabhängig vom Abstand des Elektrons vom Kern berücksichtigt.

1.2.3 Das Hartree-Fock-Modell

Ausgangspunkt dieser Methode ist ebenfalls das Modell der unabhängigen Teilchen (IPM). Man approximiert also den N-Teilchen- Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_i^N (\hat{t}_i + \hat{v}_{eN}(r_i)) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^N \hat{v}_{ee}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \\ \hat{t}_i(\vec{r}) &= -\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 \quad , \quad \hat{v}_{eN}(r_i) = -\frac{Z_N}{r_i} \quad , \quad \hat{v}_{ee}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \end{aligned} \quad (1.32)$$

durch einen effektiven Operator, der nunmehr auf ein Teilchen wirkt,

$$\hat{H}_{eff} = \sum_i^N (\hat{t}_i + \hat{v}_{eff}(q_i)) \quad , \quad (1.33)$$

wobei $q_i = (\vec{r}_i; m_{s_i})$, $i = 1, \dots, N$. Mit der grundlegenden Idee, dass eine Viel-Teilchen-Wellenfunktion durch Produkte von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen angenähert werden kann, kann die Lösung $|\Phi\rangle$ der elektronischen Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad (1.34)$$

für ein System wechselwirkender Fermionen exakt als Linearkombination unendlich vieler Slaterdeterminanten

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(q_1) & \cdots & u_\nu(q_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_\alpha(q_N) & \cdots & u_\nu(q_N) \end{vmatrix} \quad . \quad (1.35)$$

dargestellt werden. Die Spinorbitale $u_\gamma(q_i)$ mit $\gamma = \{n l m m_s\}$, werden hier als orthonormal angenommen. Im Rahmen des Hartree-Fock-Ansatzes berücksichtigt

man als Eigenfunktion des Hamilton-Operators (1.33), nur eine Slaterdeterminante, nämlich diejenige, die den Satz an Spinorbitalen enthält, die zur dominierenden Konfiguration gehören. Für den Grundzustand ist das natürlich die $1s^2$ -Konfiguration. Um die Ein-Teilchen-Orbitale zu bestimmen, minimiert man den Erwartungswert des N-Teilchen-Hamilton-Operators, gemäß dem Variationsprinzip von Ritz (1.21), bezüglich einer Slaterdeterminante nach den Ein-Teilchen-Orbitalen $u_\gamma(q_i)$ unter der Nebenbedingung, dass die Spinorbitale orthogonal bleiben sollen. Die Hartree-Fock-Gleichungen ergeben sich aus der Variationsgleichung zu⁵

$$\begin{aligned}
(\hat{t} + \hat{v}_{HF})u_\gamma(q) &= \epsilon_\gamma u_\gamma(q), \quad \gamma = \alpha, \dots, \nu \\
&= \left(\hat{t} + \hat{v}_{eT}(r) + \sum_\lambda \int v_{ee}(\vec{r}, \vec{r}') |u_\lambda(q')|^2 dq' \right) u_\gamma(q) \\
&\quad - \sum_\lambda \int u_\lambda^*(q') v_{ee}(\vec{r}, \vec{r}') u_\gamma(q') dq' u_\lambda(q) \quad . \quad (1.36)
\end{aligned}$$

Die N Orbitale, mit den niedrigsten Orbitalenergien, die man durch Lösen dieser Eigenwertgleichung erhält, bilden einen Satz von besetzten Orbitalen, gehörend zum HF-Zustand $|\Psi_0\rangle$. Zusätzlich dazu bekommt man noch eine Reihe weiterer Orbitale mit höheren Orbitalenergien, die als virtuelle oder unbesetzte Spinorbitale bezeichnet werden.

Aus (1.36) ist ersichtlich, dass das Hartree-Fock-Potential außer dem Targetkernpotential einen Beitrag enthält, der sich aus dem direkten Wechselwirkungsterm und dem Austauschterm zusammensetzt. Der direkte Term beschreibt das mittlere lokale elektrostatische Potential, welches durch die Ladungsverteilung $\sum_\lambda |u_\lambda(q)|^*$ an der Stelle \vec{r} hervorgerufen wird und damit die Kraft, die auf das Elektron in $u_\gamma(q)$ wirkt. Allerdings ist aufgrund der Summation über alle λ , auch eine Selbstwechselwirkung des Elektrons im Orbital u_γ enthalten, die sich mit dem entsprechenden Term der Austauschwechselwirkung weghebt.

Der Austauschterm hingegen ist nicht lokal, sondern hängt von den Koordinaten im ganzen Raum ab. Er ist eine Konsequenz des Pauliprinzips und läßt sich klassisch nicht interpretieren. Nach dem Pauliprinzip dürfen sich Fermionen mit der gleichen Spinprojektion nicht im gleichen Raumbereich aufhalten. Damit re-

⁵Hier bedeutet die Integration über dq eine Summation über die Spinkoordinaten und die Integration über die Ortskoordinaten.

duziert sich die potentielle Energie aufgrund der abstoßenden Coulombwechselwirkung zwischen diesen Elektronen um die Austauschenergie. Dadurch bedingt, ist das Hartree-Fock-Potential auch für Systeme mit einem spinunabhängigen Hamilton-Operator, wie er hier vorliegt, spinabhängig.

Nimmt man an, dass innerhalb einer Schale für beide Spineinstellungen eines Elektronenpaars der gleiche Raumanteil der Spinorbitale verwendet wird, ist der Spin wohldefiniert und eine Eigenfunktion der Projektion des Gesam spins in z-Richtung. Damit wird für Atome oder Ionen mit geschlossenen Schalen das Hartree-Fock-Potential spinunabhängig. Für den Helium-Grundzustand zum Beispiel hat man dann, dem Singulettcharakter des Heliumgrundzustands gemäß, mit

$$\begin{aligned} u_\gamma(q) &= u_{1s}(\vec{r}) \chi_{\frac{1}{2};m_s^\gamma} \\ \langle \chi_{\frac{1}{2};m_s^\gamma} | \chi_{\frac{1}{2};m_s^\lambda} \rangle &= \delta_{m_s^\lambda; m_s^\gamma} \quad , \end{aligned} \quad (1.37)$$

und Ersetzen von \sum_λ durch $\sum_{n_\lambda l_\lambda m_\lambda} \sum_{m_s^\lambda}$ in den Hartree-Fock-Gleichungen für den Heliumgrundzustand ein rein lokales, weiterhin von der Coulombform abweichendes Hartree-Fock-Potential,

$$\begin{aligned} (\hat{t} + \hat{v}_{HF}) u_{1s}(\vec{r}) &= (\hat{t} + \hat{v}_{eT}(r)) u_{1s}(\vec{r}) \\ &+ \int v_{ee}(\vec{r}, \vec{r}') |u_{1s}(\vec{r}')|^2 d\vec{r}' u_{1s}(\vec{r}) \quad . \end{aligned} \quad (1.38)$$

Dieses Potential entspricht einem halben Hartree-Potential und ist mit einer Hartree-Fock-Energie von

$$E_{HF} = \langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_{HF} \rangle = 2 \langle u_{1s} | \hat{t} + \hat{v}_{eT} | u_{1s} \rangle + \langle u_{1s} | \hat{v}_{ee} | u_{1s} \rangle \quad (1.39)$$

verknüpft.

Die Hartree-Fock-Energie deckt sich allerdings nicht mit der Summe der Orbitalenergien ϵ_γ , wie man vielleicht zunächst vermuten würde, denn in jeder Orbitalenergie ϵ_γ ist die Wechselwirkungsenergie des Elektrons in u_γ mit allen anderen Elektronen in besetzten Orbitalen enthalten und wird daher doppelt gezählt. Trotzdem kann man die Orbitalenergien physikalisch interpretieren. Sie können mit der Energie in Verbindung gebracht werden, die notwendig ist, um das am schwächsten gebundenen Orbital zu entfernen, falls man voraussetzt, dass sich

die restlichen besetzten Orbitale im ionisierten Zustand nicht ändern, also Relaxationseffekte keine Rolle spielen.

Da die Wechselwirkungsterme in (1.36) selbst noch von den zu bestimmenden Ein-Teilchen-Orbitalen abhängen, ist zur Bestimmung der Eigenfunktionen und des Hartree-Fock-Potentials ein Selbstkonsistenz-Verfahren anzusetzen. Details dazu findet man zum Beispiel bei [15], [16]. In der numerischen Umsetzung gibt es zwei Möglichkeiten:

1. Man löst die Hartree-Fock-Gleichungen im Ortsraum numerisch und erhält als Resultat den Radialanteil $R_{nl}(r)$ der Ein-Teilchen-Orbitale

$$u_{nl}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

in Form tabellierter Datensätze. Dieses Verfahren wurde zum Beispiel von C. Froese-Fischer angewendet [32].

2. Da es nützlich ist, analytische Näherungen an die Ergebnisse der Hartree-Fock-Rechnungen zu besitzen, entwickelt man das unbekannte Orbital nach einem geeigneten Satz an Basisfunktionen und formt die Hartree-Fock-Gleichungen in numerisch zugängliche algebraische Gleichungen um (Roothan-Gleichungen), die mit Hilfe des Variationsverfahrens iterativ gelöst werden. Eine geeignete Basis stellen zum Beispiel Slaterorbitale dar. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind in Tabellenwerken öffentlich verfügbar. Ein bekanntes Beispiel ist die Zusammenstellung von Clementi und Roetti [31]. Einzelheiten findet man zum Beispiel bei Roothan [30].

1.2.4 Der Eckart-Ansatz

Der Ansatz für den Grundzustand des atomaren Heliums wurde 1930 von Carl Eckart entwickelt, der hierzu ebenfalls das Ritzsche Variationsverfahren einsetzte. Beim Eckart-Ansatz wählt man als Testfunktion für den Helium-Grundzustand einen zweiparametrischen Ansatz, der aus einer Kombination von zwei Wasserstoff-Grundzustandswellenfunktionen mit den zu optimierenden Abschirmparametern,

α und β , besteht

$$\begin{aligned}
\Psi_{1s^2}^1(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= N_{\alpha\beta} [\varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_2) + \varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_2) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_1)] \\
\varphi_{1s}^\lambda(\vec{x}) &= \frac{\lambda^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} e^{-\lambda x} \quad \lambda = \alpha, \beta \\
N_{\alpha\beta} &= \frac{1}{[2(1+c^2)]^{\frac{1}{2}}} \quad c = \frac{8(\alpha\beta)^{\frac{3}{2}}}{(\alpha+\beta)^3} \quad . \quad (1.40)
\end{aligned}$$

Man erhält mit (1.24) einen Ausdruck für die Energie als Funktion von α und β

$$\begin{aligned}
E_{1s^2}(\alpha, \beta) &= -2(\alpha + \beta) + \frac{\alpha^2 + 2\alpha\beta c^2 + \beta^2}{2(1+c^2)} \\
&+ \frac{\beta}{1+c^2} \left(1 - \frac{2\frac{\alpha}{\beta} + 1}{\left(\frac{\alpha}{\beta} + 1\right)^3} + \frac{20\left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^3}{\left(\frac{\alpha}{\beta} + 1\right)^5} \right) \quad . \quad (1.41)
\end{aligned}$$

Die numerische Auswertung von (1.41) bezüglich (1.25) und (1.26) liefert die Werte α_{opt} und β_{opt} für die der Energieerwartungswert minimal wird

$$\begin{aligned}
\alpha_{opt} &= 2.14 & \beta_{opt} &= 1.19 \\
N_{\alpha_{opt}\beta_{opt}} &= 0.53 & c_{opt} &= 0.88 \\
E_{1s^2}(\alpha_{opt}, \beta_{opt}) &= -2.8775 \text{ a.u.} \quad . \quad (1.42)
\end{aligned}$$

Die physikalisch anschauliche Deutung dieses Ansatzes geht in die folgende Richtung: man hat hier das Bild eines kernnäheren und eines entfernteren Elektrons, die sich beide in einem abgeschirmten Feld des Kerns bewegen. Die effektive Kernladung, die das jeweilige Elektron sieht, resultiert aus der Überlagerung der Coulombfelder des Kerns und des jeweiligen zweiten Elektrons. Das innere Elektron erfährt also zusätzlich zur tatsächlichen Kernladung $Z = 2$ eine abstoßende Coulombkraft durch das sich weiter außen bewegende Elektron, die den Elektron-Kern-Abstand verkleinert. Als Konsequenz sieht das innere Elektron eine gegenüber der tatsächlichen Kernladung erhöhte Ladung von 2.14. Das äußere Elektron wird durch das abstoßende Feld des inneren Elektrons nach außen gedrückt und sieht infolgedessen eine abgeschwächte Kernladung von 1.19.

Die aufgrund der interelektronischen Coulombwechselwirkung erwartete Korrelation in der Wellenfunktion zwischen den Orten der beiden Elektronen wird in

einem Aspekt in dem von Eckart entwickelten Ansatz berücksichtigt: er enthält eine Korrelation der Elektronen-Abstände vom Kern, das heißt, die mit diesem Ansatz berechnete Wahrscheinlichkeit, die beiden Elektronen gleichzeitig zu finden, ist um so kleiner, je näher sie in radialer Richtung beieinander sind. In dieser Hinsicht geht dieser Ansatz über das effektive Ein-Teilchen-Bild hinaus.

Die Energie zur Ablösung eines Elektrons aus dem Heliumatom (erstes Ionisationspotential) kann man als Differenz der Energie des $1s^2$ - Zustandes und der Bindungsenergie des nach Ablösung des ersten weiterhin gebundenen zweiten Elektrons, welches jetzt die volle Kernladung $Z = 2$ sieht, berechnen zu

$$IP = E_{1s^2}(\alpha_{opt}, \beta_{opt}) - E_{1s}(Z = 2) \quad (1.43)$$

$$= 2.8775 \text{ a.u.} - 2 \text{ a.u.} = 0.8775 \text{ a.u.} \quad (1.44)$$

Der Energieeigenwert $E_{1s}(Z = 2)$ ist der Energieeigenwert für ein wasserstoffähnliches Ion

$$E_n(Z = 2) = \frac{Z^2}{2 n^2} \quad .$$

Der experimentell bestimmte Wert für das erste Ionisationspotential IP liegt bei 0.904 a.u..

1.2.5 Der Konfigurationsmischungsansatz

Eine Methode, das Viel-Teilchen-Problem in den Griff zu bekommen, die über das *Modell der unabhängigen Teilchen* hinausgeht, besteht darin, die Gesamtwellenfunktion des Systems definierter Symmetrie als endliche Linearkombinationen von sogenannten Konfigurationen darzustellen und so Korrelation miteinzuschließen. Dieses Verfahren beruht ebenfalls auf dem Ritzschen Variationsprinzip, allerdings minimiert man den Energieerwartungswert bezüglich des Hamilton-Operators nun nicht mehr nach den Ein-Teilchen-Orbitalen der Slaterdeterminanten, sondern nach den Entwicklungskoeffizienten. Als Ansatz für eine CI-Viel-Teilchen-

Wellenfunktion wählt man also

$$\begin{aligned}
\Psi^{JLMS}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N) &= c_0 \Psi(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N) + \sum_{\alpha}^B \sum_r^V c_{\alpha}^r \Psi_{\alpha}^r(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N) \\
&+ \sum_{\alpha, \beta}^B \sum_{r, s}^V c_{\alpha\beta}^{rs} \Psi_{\alpha\beta}^{rs}(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N) + \dots \\
&\equiv \sum_R^V \sum_{\Delta}^B c_{\Delta}^R \Psi_{\Delta}^R \quad \Delta = \alpha, \beta \dots B; R = r, s, \dots V \quad (1.45)
\end{aligned}$$

mit der Normierung $\langle \Psi^{JLMS} | \Psi^{JLMS} \rangle = \sum_{R\Delta} |c_{\Delta}^R|^2 = 1$. Jede der Konfigurationen Ψ_{Δ}^R kann sowohl aus einer als auch aus mehreren Slaterdeterminanten zusammengesetzt sein, die bereits zum richtigen Gesamtdrehimpuls gekoppelt sind. Diese Slaterdeterminanten können natürlich sowohl aus besetzten als auch aus virtuellen Spinorbitalen konstruiert sein und werden hinsichtlich der angeregten Orbitale im Vergleich zur Referenzfunktion Ψ durch Indizes charakterisiert. So bezeichnet Ψ_{α}^r eine Konfiguration, in der das Elektron, das sich in der Referenzfunktion im Orbital u_{α} befunden hat, in das Orbital u_r angeregt wurde. Analog dazu gibt es doppelt-, dreifach-, mehrfach angeregte Konfigurationen, die genau so definiert sind. Die Summation über Δ erfolgt über die in der jeweiligen Konfiguration besetzten B Orbitale, die auch in der Referenzfunktion besetzt waren. Analog repräsentiert der Summationsindex R die Summation über die V virtuellen Orbitale.

Wie schon zu Anfang erwähnt wurde, ergeben sich die Bestimmungsgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten aus der Anwendung des Ritzschen Variationsprinzips (1.21). Dazu schreibt man die Variationsgleichungen, die man durch Einsetzen des CI-Ansatzes in das Energiefunktional gewinnt, in ein Eigenwertproblem um:

$$\sum_{R'} \sum_{\Delta'} \langle \Psi_{\Delta}^R | \hat{H} - E | \Psi_{\Delta'}^{R'} \rangle c_{\Delta'}^{R'*} = 0 \quad \Delta = 1, \dots, B; R = 1, \dots, V \quad . \quad (1.46)$$

In (1.46) stecken außer der Summation über die Konfigurationen natürlich noch Summationen über Ein-Teilchen-Matrixelemente, die die Handhabung der Berechnung von (1.46) erschweren, denn mit der Anzahl der mitgenommenen Konfigurationen steigt der numerische Aufwand. Zudem konvergiert die Entwicklung

nur langsam [34]. In der Praxis beschränkt man sich daher häufig auf die Berücksichtigung von Einfach- und Zweifach-Anregungen oder man versucht die Konvergenz zu beschleunigen, indem man eine verbesserte Basis einsetzt. Hier werden zum Beispiel Basis-Ansätze verwendet, die im Radialanteil den interelektronischen Abstand direkt enthalten [35].

Verwendet man als Referenzfunktion $\Psi(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N)$ in der Entwicklung eine Hartree-Fock-Basis, so vereinfachen sich die CI-Gleichungen (1.46) beträchtlich, denn nach dem Theorem von Brillouin verschwinden die Matrixelemente von direkten Kopplungen zwischen der HF-Referenzfunktion Ψ_{HF} und den einfach-angeregten Konfigurationen Ψ_α^r

$$\langle \Psi_{HF} | \hat{H} | \Psi_\alpha^r \rangle = 0 \quad \forall \alpha, r \quad . \quad (1.47)$$

Zudem sind alle Matrixelemente zwischen Determinanten gleich Null, die sich in mehr als zwei Spinorbitalen unterscheiden. Details können zum Beispiel bei Harris et al. [16] nachgelesen werden.

Als Abschluß dieses kurzen Überblicks über die Konfigurationsmischung als Methode zur Strukturberechnung, wird noch kurz auf den Heliumgrundzustand in der CI-Entwicklung eingegangen.

Im atomaren Helium ist $N = 2$. Falls vor dem Stoß beide Elektronen im Grundzustand des Helium-Targets präpariert sind, sind Spin- und Bahn-Drehimpuls im Grundzustand gleich Null, i.e. $J = 0$, $S = 0$, also $L = 0$ und $M = 0$. Die Elektronendrehimpulse müssen infolgedessen den Bedingungen $l' = l$ und $m = -m'$ genügen. Ein Konfigurationsmischungsansatz für den Grundzustand des Heliumatoms ist daher in der Form

$$\Psi^{00}(\vec{q}_1 \vec{q}_2) = c_0 \Psi(\vec{q}_1, \vec{q}_2) + \sum_{n n' l} c_{1010}^{n n' l} \Psi_{(10)(10)}^{n n' l}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \quad (1.48)$$

zu konstruieren, wobei für eine HF-Basis aufgrund des Theorems von Brillouin nur Beiträge durch Doppelanregungen eine Rolle spielen: $n, n' \neq 1$. Aufgrund der Abgeschlossenheit der Schalen und der Wohldefiniertheit des Gesamtspins kann

man (1.48) nur für den Ortsanteil der Spinorbitale formulieren

$$\begin{aligned} \Psi^{00}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n n' l} c_{(10)(10)}^{n n' l} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \\ &\times (\varphi_{nlm}(\vec{r}_1) \varphi_{n'l-m}(\vec{r}_2) + \varphi_{nlm}(\vec{r}_2) \varphi_{n'l-m}(\vec{r}_1)) \quad . \quad (1.49) \end{aligned}$$

Werden im einfachsten Fall nur Konfigurationen mit $n = n'$ berücksichtigt, nimmt die elektronische Wellenfunktion die folgende Form an

$$\Psi^{00}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \varphi_{nlm}(\vec{r}_1) \varphi_{nl-m}(\vec{r}_2) \quad . \quad (1.50)$$

Da hier alle Konfigurationen nur doppelt angeregte Orbitale enthalten, werden die Indizes, im Sinne einer einfachen Darstellung, nun fortgelassen. Die Ortsanteile der gebundenen Ein-Teilchen-Orbitale

$$\varphi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}^{Z, n_e}(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{e}}_r) \quad (1.51)$$

bilden einen Satz von Funktionen, die den Orthonormalitätsbedingungen genügen

$$\int \varphi_{nlm}^*(\vec{r}) \varphi_{n'l'm'}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad . \quad (1.52)$$

Hier ist $R_{nl}^{Z, n_e}(r)$ der Radialanteil der Wellenfunktion. Die Indizes Z und n_e bezeichnen die Kernladungszahl und die Anzahl der gebundenen Elektronen. Die Gesamtwellenfunktion ist auf 1 normiert

$$\int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Psi^{00*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi^{00}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{nl} |c_{nl}|^2 = 1 \quad . \quad (1.53)$$

1.3 Transferionisation im (H^+, He) -Stoßsystem

1.3.1 Transferionisation als Prozess

Stößt ein Proton auf ein Heliumatom, so ist ein Vielzahl von Reaktionen möglich: Elastische Streuung, Anregung, Ionisation und Einfang sowie Kombinationen davon, also Prozesse, bei denen nur ein Elektron oder auch beide ihren Zustand ändern können. Die Zustandsänderung eines Elektrons kann in einem Schritt,

durch eine einmalige Wechselwirkung, oder auch in mehreren Schritten, durch mehrfaches Wechselwirken, erfolgen. Reaktionen in denen beide Elektronen ihren Zustand ändern, erfordern natürlich die Berücksichtigung von mindestens zwei Wechselwirkungen.

Im Rahmen dieser Arbeit richtet sich das Augenmerk auf einen Prozess, bei dem ein solcher Zwei-Elektronenübergang stattfindet: den Prozess einer Transferionisation. Die Transferionisation, bei der ein Elektron durch das Projektil eingefangen wird und ein Elektron ionisiert wird, bietet Gelegenheit zur Untersuchung von Korrelationseffekten. Der Grund hierfür liegt in der Kopplung zweier Prozesse, Einfang und Ionisation, die unabhängig oder abhängig voneinander ablaufen können.

Im Stoßgeschehen einer Transferionisation sind mindestens 4 Teilchen involviert. Dies hat zur Konsequenz, dass man es mit der Komplexität einer Viel-Teilchen--Problematik zu tun hat. Eine theoretische Beschreibung kann vor diesem Hintergrund nur approximativ sein und bestimmte ausgewählte Aspekte betonen.

Zum Beispiel kann man in unterschiedlicher Hinsicht, der Abhängigkeit der beiden Teilübergänge voneinander Rechnung tragen. Es gibt zwei Angriffspunkte zu deren Berücksichtigung:

- Zum einen die Beschreibung des Targetatoms. So lassen sich Korrelationseffekte im ungestörten Heliumatom berücksichtigen.
- Eine weitere Möglichkeit ist die Beschreibung des Übergangs. Mit der Wahl der Näherungen in der T-Matrix lassen sich stoßdynamische Korrelationseffekte einschließen.

In einer exakten Beschreibung ist die gesamte Vielfalt an möglichen Reaktionswegen, die zu einer Transferionisation führen und somit zum Wirkungsquerschnitt beitragen, bereits implizit enthalten. Über die Wahl der Herangehensweise kann man verschiedene Mechanismen erfassen, die sich in Grad und Qualität der Abhängigkeit voneinander unterscheiden. Allerdings entfällt mit der Beschränkung auf bestimmte Mechanismen ein wichtiger quantenmechanischer Aspekt: die kohärente Überlagerung aller Amplituden, die zur Transferionisation beitragen.

Eine Transferionisation, die durch abhängige Prozesse zustandekommt, kann sowohl im Rahmen einer quantenmechanischen Berechnung des T-Matrixelementes

T_{if} , als auch in einem klassischen Modell erfasst werden. Will man sie im Rahmen eines störungstheoretischen Zugangs beschreiben, muss dies in mindestens zweiter Ordnung erfolgen. So lassen sich stoßdynamische Korrelationseffekte erfassen.

Laufen die beiden Teilübergänge vergleichsweise unabhängig ab, können sie in einem Modell erfasst werden, in dem man beide Übergänge getrennt behandelt. Hier gibt es zum einen das Modell unabhängiger Teilchen (IPM), das von McGuire und Weaver [36] entwickelt wurde. Dieses Modell beruht auf einem effektiven Ein-Teilchen-Bild. Mit den Annahmen, dass

1. die Einschußenergien in einem Bereich liegen, in dem die Stoßparameternäherung gültig ist
2. und die elektronische Gesamtstreuwellenfunktion Ψ_{el}^{\pm} als Produkt von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen approximiert werden kann

$$\Psi_{el}^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \approx \prod_{k=1}^2 \varphi_k(\vec{r}_k, t) \quad (1.54)$$

und damit alle Wechselwirkungen, die das aktive Elektron erfährt, durch effektive Ein-Teilchen-Potentiale genähert werden können

$$\hat{H} \approx \sum_{k=1}^2 \hat{h}_k \quad , \quad (1.55)$$

ergibt sich die in der Stoßparameternäherung berechnete Übergangsamplitude als Produkt von Ein-Teilchen-Amplituden. Allerdings werden Korrelationseffekte komplett vernachlässigt.

Das Modell unabhängiger Ereignisse (IEM)⁶ wurde von Crothers u. McCarroll [1] entwickelt. Seine Verwendbarkeit hängt von bestimmten Bedingungen ab:

- Der dominante Beitrag in der Streuung kann über die Berücksichtigung von zwei Zwischenzuständen beschrieben werden.
- Interferenzterme, die die beiden Übergänge miteinander verkoppeln, können vernachlässigt werden.

⁶Independent Event Model

Innerhalb dieses Modells versteht man den Zwei-Elektronenübergang als sukzessive Abfolge von zwei unabhängig voneinander ablaufenden Übergängen, die als Ereignisse aufgefasst werden. Für jedes einzelne Ereignis wird das nicht am betrachteten Übergang teilnehmende Elektron als vollkommen passiv angenommen, während das andere, "aktive" Elektron von einem Zustand in einen anderen wechselt. Im Sinne dieses Bildes ergibt sich die Nettowahrscheinlichkeit P_{net} des Übergangs als Produkt der Wahrscheinlichkeiten für jedes einzelne Ereignis P_k und es folgt $P_{net} = P_1 \cdot P_2$. Gibt es mehrere mögliche spezielle Abfolgen, die zum gleichen Gesamtereignis führen, werden die Wahrscheinlichkeiten der Subabfolgen addiert. Die Vorstellung einer sukzessiven Abfolge prägt dem Prozess eine zeitliche Ordnung auf: die Übergänge laufen in einer bestimmten Reihenfolge ab. Für das Zustandekommen einer Transferionisation gibt es zwei mögliche Abfolgen. Das erste Ereignis kann entweder eine Ionisation oder ein Einfang sein. Durch die Art des ersten Ereignisses ist das zweite Ereignis festgelegt. Die Nettowahrscheinlichkeit für die Transferionisation ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten für jeden einzelnen Weg, also

$$P_{cI} = P_{c1} P_{c1I2} + P_{I1} P_{I1c2} \quad . \quad (1.56)$$

Die Indizes $j = I, c$ der Einzelwahrscheinlichkeiten stehen für die Art der Prozesse (c Einfang und I Ionisation) und die Reihenfolge ihres Auftretens $k = 1, 2$. Der Term P_{I1c2} zum Beispiel, stellt die Wahrscheinlichkeit für einen Einfang nach erfolgter Ionisation dar. Über die Berücksichtigung dieser Reihenfolge lassen sich zum Teil auch hier in einem sehr geringen Grad stoßdynamische Anteile der Korrelation erfassen, denn man vernachlässigt zum einen die Verkopplung der Übergänge durch quantenmechanische Interferenz und nimmt lediglich zwei Zwischenzustände mit.

Nach Dunseath und Crothers [3] bestehen die Unterschiede zwischen IEM und IPM in der unterschiedlichen Bedeutung der Wahrscheinlichkeiten. Im IEM wird ein Zwei-Elektronenübergang als eine Sequenz zweier konsekutiver Ereignisse aufgefasst, in denen jedes Elektron einen bestimmten Übergang eingeht. Zum Endzustand führen zwei mögliche Ereignisabfolgen. Die Wahrscheinlichkeit eines Teilereignisses bezieht sich auf beide Elektronen. Im IPM hingegen gründet sich die Wahrscheinlichkeit nicht auf Ereignisse, sondern auf die Wahrscheinlichkeit, dass irgendeines der beiden Elektronen an einem bestimmten Übergang teilnimmt. In-

folgedessen hat man kein zeitliches Bild des Gesamtprozesses. In diesem Sinne ist die Frage nach Relaxation bedeutungslos.

Da sich das Modell der unabhängigen Ereignisse nicht auf die Darstellung der Gesamtstreuwellenfunktion als Produktansatz stützt, können auch Korrelationsanteile durch eine dementsprechend gewählte Beschreibung des Targets berücksichtigt werden.

Ein solcher Weg wurde mit dieser Arbeit beschritten und eine Modellstruktur entwickelt, die den gesamten Übergang aus der Perspektive des IEM betrachtet. Eine ausführliche Herleitung der grundlegenden Gleichungen wird in Abschnitt 2.1 gegeben.

Beiden Ansätzen ist gemeinsam, dass der Zwei-Elektronenübergang in zwei unabhängig ablaufende Ein-Teilchen-Übergänge zerlegt wird, die beide getrennt beschrieben werden. So stellt sich hier die Frage, wie Einfang und Ionisation angemessen beschrieben werden können. Dies wird im nachfolgenden Abschnitt zunächst für den Einfang und anschließend für die Ionisation untersucht.

Der Einfang eines Elektrons in einen gebundenen Zustand des Projektils unterliegt den folgenden Bedingungen:

1. Der Einfang eines Elektrons durch das Projektil beinhaltet den Wechsel vom Targetsystem ins Projektilsystem. Der Energieübertrag, beziehungsweise der Betrag des Impulsübertrags auf das Elektron während des Stoßes, muss daher mindestens so groß sein, dass die Geschwindigkeit des Elektrons im Laborsystem nach dem Stoß zwischen Projektilgeschwindigkeit nach dem Stoß und der dazu addierten Entweichgeschwindigkeit aus dem Projektil liegt

$$|\vec{v}_p| < |\vec{v}_e| \leq |\vec{v}_p + \vec{v}_{entweich}| \quad . \quad (1.57)$$

2. Ein Einfangprozess kann dynamisch betrachtet nur auftreten, wenn es innerhalb des Streuprozesses, mindestens zwei Wechselwirkungen zwischen den beteiligten Partnern gibt, sofern man die Möglichkeit von Abstrahlungsprozessen nicht betrachtet.

Den letzten Punkt macht man sich klar, wenn man sich überlegt, dass der Impulsübertrag auf das Elektron so geartet sein muss, dass Elektron- und Projektilgeschwindigkeitsvektoren im zeitlichen Mittel in die gleiche Richtung weisen

und der Bedingung (1.57) genügen müssen. Dazu muss die überschüssige Energie des Elektrons nach dem Stoß abgeführt werden. Dies geht, falls die überschüssige Energie nicht durch Abstrahlung oder Absorption innerhalb des Systems (z.B. Anregung eines Projektilelektrons) verloren wird, nur über eine weitere Wechselwirkung. Quantenmechanisch gibt es allerdings eine Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron von vornherein eine Geschwindigkeit mit $\vec{v}_e = \vec{v}_p$, besitzt, die natürlich mit zunehmender Stoßgeschwindigkeit abnimmt. In diesem Fall wird ein Impuls auf einen dritten Körper übertragen, so dass man es in der Konsequenz mit einem Dreikörper-einfachstreuprozess zu tun hat.

Der Charakter der Einfangprozesse und damit auch die Art sie zu beschreiben, hängt stark von der Relativgeschwindigkeit des Projektils verglichen mit der Elektronengeschwindigkeit im Target ab. Im Bereich hoher Relativenergien, also schneller Stöße, wird die Situation vollkommen vom Bezugssystemwechsel des Elektrons geprägt. Hier kommen nämlich die Hauptbeiträge zum Wirkungsquerschnitt aus Regionen, in denen die Elektronendichte besonders hoch ist. Das entspricht einem Stoßparameterbereich von einigen Bohrradien. In diesem Bereich spielt die Streuung zwischen den Kernen keine Rolle und die Relativbewegung der Kerne kann sehr gut durch eine klassische gerade Bahn angenähert werden. Da die Impulsverteilung des Elektrons im Grundzustand bei Null maximal ist, ist es vorstellbar, dass Doppel- oder Mehrfachstreuprozesse gegenüber Einfachstreuprozessen überwiegen. Überdies konnte gezeigt werden, dass für ein System von drei wechselwirkenden Teilchen Beiträge höherer Ordnung im Bereich asymptotisch hoher Stoßenergien nicht über den Term zweiter Ordnung dominieren [37], [38].

Nahezu alle Berechnungen von Einfangprozessen in diesem Bereich verwenden die Störungstheorie, denn der Wirkungsquerschnitt ist hier sehr klein und die Wechselwirkung zwischen den stoßenden Partnern kann als kleine Störung aufgefasst werden. Die Berechnung der Übergangsmatrix sollte Einfach- und Doppelstreureaktionen berücksichtigen und ist somit störungstheoretisch von 2. Ordnung. Daher stellt die Berechnung des T-Matrixelementes höherer Ordnung den Ausgangspunkt der meisten existierenden Rechnungen dar. Sie unterscheiden sich dann hinsichtlich der mitgenommenen Zwischenzustände, der Beschreibung des Targets und dem T-Operator. In vielen Fällen wird der Einfang mit einem Ansatz der verzerrten Wellen (CDW⁷) [3], [41], [42] oder mit einer zweiten Bornschen

⁷Continuum Distorted Wave

Näherung [38], [39], [40] berechnet.

Für niedrige Geschwindigkeiten spielen die dynamischen Bedingungen eine nicht so große Rolle. Verläuft der Stoß sehr langsam, so kann das Feld des Projektils die Elektronenwolke, die zuvor um das Targetzentrum herum liegt, so in Richtung des Projektils verzerren, dass das Elektron vom Projektil mitgerissen wird. Aufgrund des relativ großen Wirkungsquerschnitts und der mit der niedrigen Stoßgeschwindigkeit verknüpften langen Stoßdauer, sind störungstheoretische Methoden hier nicht angebracht. Dann behandelt man das gesamte System als Quasimolekül, das seinen Zustand adiabatisch an die sich ändernde Wechselwirkungssituation infolge des variablen Abstandes zwischen den Kernen anpasst und versucht die Schrödinger-Gleichung direkt zu lösen: man entwickelt die Gesamtstreuwellenfunktion nach einer notwendigerweise endlichen Basis, die aus zweizentrierten Orbitalen dieses Quasimoleküls besteht.

Betrachtet man Ionisation, so fällt auf, dass die Freisetzung eines Elektrons aus einem gebundenen Targetzustand, induziert durch ein nacktes Projektil, mindestens ein Drei-Körper-Problem ist. So richtet sich deren Beschreibung nach der Dominanz der Wechselwirkung im Endkanal, i.e. die Wechselwirkung zwischen aktivem emittiertem Elektron und den beiden Stoßzentren Projektil und verbleibendes Targetion. Dementsprechend wird auch die Wellenfunktion des emittierten Elektrons konstruiert.

Entlang dieses Sachverhalts hat man ein Begriffskonzept entwickelt: bewegt sich das emittierte Elektron beispielsweise stark unter dem Einfluß des Targetfeldes, so spricht man von einer Ein-Zentren-Target-Emission, spielt eher das Projektilfeld eine Rolle, von einer Ein-Zentren-Projektil-Emission. Natürlich gibt es auch den Fall, dass keines der Felder vernachlässigt werden kann. Dann hat man einen Zwei-Zentren-Fall. In manchen Näherungen vernachlässigt man sogar jegliche Coulombwechselwirkung im Endkanal und beschreibt das auslaufende Elektron als ebene Welle (Null-Zentren-Fall), [43].

Eine Targetionisation, ist entweder unter Berücksichtigung von Zwei-Zentren-Effekten zu beschreiben, oder man kann im günstigen Fall die Ionisation auf eine Ein-Zentren- oder die Null-Zentren-Emission reduzieren.

Zur Beschreibung von Ionisationsprozessen gibt es eine Vielzahl von Modellen, die man in die bereits genannten Schemata zur Lösung der Schrödinger-Gleichung aufteilen kann: auch hier existieren perturbative Ansätze, als auch klassische und

solche, in denen man versucht, die Schrödinger-Gleichung direkt, durch Basissatzentwicklung, zu lösen.

Die Art der Beschreibung einer Ionisation hängt von der Stärke der Wechselwirkung zwischen den beteiligten Partnern, und damit von ihrer Ladung, der Stoßenergie – denn diese bestimmt die Stoßdauer – und der Energie der auslaufenden Elektronen ab.

Störungstheoretische Methoden liefern brauchbare Aussagen, zum Beispiel für schnelle Stöße mit leichten, schwach geladenen Projektilionen, da der Einfluß des Projektils aufgrund der kurzen Stoßdauer als kleine Störung betrachtet werden kann. Dies gilt sogar schon schon für Methoden erster Ordnung (PWBA⁸, OBK1⁹), deren Ergebnisse allerdings mit einer Berechnung in zweiter Ordnung (OBK2¹⁰) verbessert werden können. In beiden Fällen betrachtet man lediglich Null-Zentren- oder Ein-Zentren-Target-Emission [93], [45]. Spielen Zwei-Zentren-Effekte eine Rolle, liefern Ansätze gute Ergebnisse, die im Einzugsbereich der Methode der verzerrten Wellen (Distorted Wave) angesiedelt sind. Hierzu gehören die CDW-Näherung [51] oder der CDWEIS-Ansatz¹¹ [52]. Im Rahmen der CDW-Näherung wird die Verzerrung der Wellenfunktion für den Eingangskanal und den Endkanal in Form eines Kontinuumfaktors berücksichtigt. Den CDW-EIS-Ansatz erhält man hingegen als Näherung des CDW-Ansatzes: die Verzerrung der Wellenfunktion im Eingangskanal wird in Form einer Eikonalphase beschrieben, die dem Verhalten des CDW-Kontinuumfaktors für asymptotisch große Distanzen entspricht.

Eine solche Situation, in der beide Zentren einen Einfluß auf das auslaufende Elektron besitzen, tritt im Bereich mittlerer elektronischer Geschwindigkeiten auf, wenn Projektil- und Elektronengeschwindigkeiten in der gleichen Größenordnung liegen können, ohne dass das Elektron das Einzugsgebiet des Targets verlassen hat.

Steht die Anwendbarkeit der Störungstheorie aufgrund von geringerer Stoßenergie oder zunehmender Ladung, in Frage, kann man entweder klassische Methoden, wie CTMC [46], [47], einsetzen oder man versucht die direkte Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Hilfe einer Basisentwicklung. Dieses Verfahren wird

⁸Plane Wave Born Approximation

⁹Oppenheimer Brinkmann Kramers 1

¹⁰Oppenheimer Brinkmann Kramers 2

¹¹Continuum Distorted Wave with Eikonal Initial State

zumeist im Rahmen der semiklassischen Näherung angewendet. Hier steht man vor der Situation das Kontinuum in irgend einer Form repräsentieren zu müssen. In Abschnitt 1.1.1 wurde bereits die Möglichkeit erwähnt, in die Basis zur Darstellung der Streuwellenfunktion bestimmte relevante Anteile des Kontinuums durch sogenannte Pseudozustände miteinzuschließen. Hier gibt es sowohl Ein- ([48], [49]) als auch Zwei-Zentren-Entwicklungen [50].

In manchen Fällen wird der Streuprozess auf einen binären Stoß (BE¹²) zwischen Elektron und Projektil reduziert und der Targetkern verursacht nur die anfängliche Impulsverteilung des emittierten Elektrons. Hier ist die “free-electron”- oder Impulsnäherung einzuordnen, in der Effekte des Targetkerns auf den Stoß völlig vernachlässigt werden.

1.3.2 Das Stoßsystem

Beim Proton-Helium-Stoßsystem sind, wie schon erwähnt, insgesamt vier Teilchen am Stoßgeschehen beteiligt. Dem Viel-Teilchen-Charakter, der sich in der Verkopplung der Bewegungen der Elektronen und der Kerne äußert, begegnet man mit einer gängigen Strategie: man versucht verkoppelte dynamische Variablen zu entkoppeln. Der Hamilton-Operator separiert dann im Hinblick auf die entkoppelten Variablen und die zugehörige Eigenfunktion faktorisiert in nur von den entkoppelten Variablen abhängige Anteile. Ein Beispiel hierfür ist der Übergang ins Schwerpunktsystem: in sehr guter Näherung kann das Stoßsystem aufgrund fehlender externer Krafteinwirkung als abgeschlossenes System aufgefasst werden. Alle Wechselwirkungen, die im Hamilton-Operator \hat{H} dieses Stoßsystems auftreten, sind gegenüber einer Translation des Stoßsystems invariant, das heißt sie hängen nur von der relativen Lage der Stoßsystemkomponenten ab. Die uniforme Bewegung des Schwerpunkts, die aufgrund ihrer Trivialität bereits bekannt ist und infolgedessen nicht weiter betrachtet werden muss, kann von der Relativbewegung des Systems getrennt behandelt werden

$$\hat{H} - \hat{H}_{CM} = \hat{H}' \quad .$$

¹²Binary Encounter

Man erhält dann

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \hat{T}_N + \hat{V}_{PT} + \hat{H}^{el} \\ \hat{H}^{el} &= \hat{t}_{e_1} + \hat{t}_{e_2} + \hat{v}_{e_1T} + \hat{v}_{e_2T} + \hat{v}_{e_1P} + \hat{v}_{e_2P} + \hat{v}_{ee} \quad .\end{aligned}\quad (1.58)$$

Sinnvollerweise wird die Relativbewegung der Teilchen auf die atomaren Zentren bezogen angegeben und hängt daher vom betrachteten Kanal ab. So enthalten die Operatoren für die kinetische Energie der Relativbewegung zunächst Jacobi-Koordinaten und reduzierte Massen bezogen auf die Schwerpunkte der atomaren Zentren der jeweiligen Kanäle. Während man für die Situation im Eingangskanal, wenn beide Elektronen noch im Heliumatom gebunden sind, folgende Formulierung findet

$$\hat{T}_N + \hat{t}_{e_1} + \hat{t}_{e_2} = -\frac{1}{2\mu_\alpha} \Delta_{R_\alpha} - \frac{1}{2\mu_{T1}} \Delta_{r_{T1}} - \frac{1}{2\mu_{T2}} \Delta_{r_{T2}} \quad ,$$

beschreibt man das emittierte Elektron, das sich im Endkanal im Feld des verbleibenden zweifach positiv geladenen Heliumions bewegt, targetzentriert und man kann die Relativbewegung im Endkanal bezogen auf die Schwerpunkte von Wasserstoff und He^+ angeben

$$\hat{T}_N + \hat{t}_{e_1} + \hat{t}_{e_2} = -\frac{1}{2\mu_\beta} \Delta_{R_\beta} - \frac{1}{2\mu_{P1}} \Delta_{r_{P1}} - \frac{1}{2\mu_{T2}} \Delta_{r_{T2}} \quad .$$

Für alle praktischen Zwecke kann man aufgrund des großen Massenunterschiedes zwischen Elektron und Kern davon ausgehen, dass die elektronische Masse die Lage des Schwerpunkts nicht beeinflusst.

Damit vereinfachen sich die Massenterme und Ortsvektoren zu

$$\begin{aligned}\mu_\alpha &= \frac{m_P (m_T + 2)}{m_P + m_T + 2} \approx \frac{m_P m_T}{m_P + m_T} = \mu \\ \mu_\beta &= \frac{(m_P + 1)(m_T + 1)}{m_P + m_T + 2} \approx \mu \\ \mu_{T1} &= \frac{m_T + 1}{m_T + 2} \approx 1 \\ \mu_{T2} &= \frac{m_T}{m_T + 1} \approx 1\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mu_{P1} &= \frac{m_P}{m_P + 1} \approx 1 \\
\vec{R}_\alpha &= \vec{r}_P - \frac{m_T \vec{r}_T + \vec{r}_1 + \vec{r}_2}{m_T + 2} \approx \vec{R} \\
\vec{R}_\beta &= \frac{m_T \vec{r}_T + \vec{r}_2}{m_T + 1} - \frac{m_P \vec{r}_P + \vec{r}_1}{m_P + 1} \approx \vec{R} \\
\vec{r}_{T1} &= \vec{r}_1 - \frac{m_T \vec{r}_T + \vec{r}_2}{m_T + 1} \approx \vec{x}_1 \\
\vec{r}_{T2} &= \vec{r}_2 - \vec{r}_T = \vec{x}_2 \\
\vec{r}_{P1} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_P = \vec{s}_1 \\
\vec{x}_j &= \vec{r}_j - \vec{r}_T \quad \vec{s}_j = \vec{r}_j - \vec{r}_P \quad .
\end{aligned} \tag{1.59}$$

Die Koordinaten beziehen sich auf ein galileisches Koordinatensystem mit beliebiger Lage des Ursprungs. \vec{r}_j , \vec{x}_j , \vec{s}_j sind die Ortsvektoren des j-ten Elektrons bezogen auf den Ursprung, das Targetatom und das Projektilatom, \vec{r}_T und \vec{r}_P sind die Ortsvektoren der Kerne bezogen auf den Ursprung. Der Index N steht allgemein für nukleonische Variablen, P bezieht sich speziell auf projektilbezogene, T auf targetbezogene und j bezeichnet die elektronischen Variablen. Die restlichen Bestandteile des Hamilton-Operators (1.58) sind die Operatoren, die

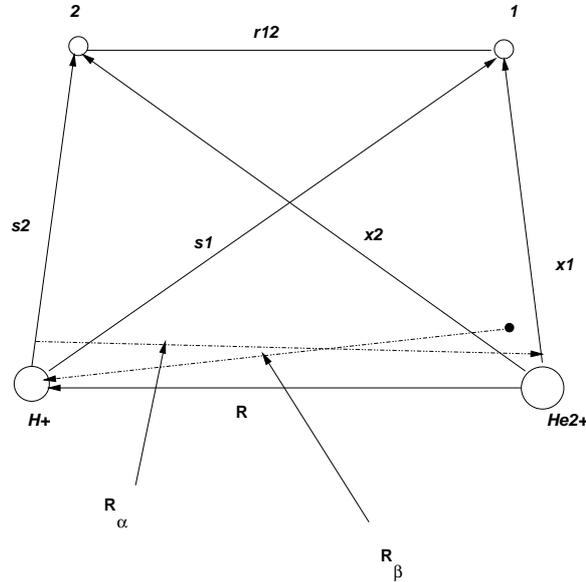


Abbildung 1.1: Koordinatensystem des He, H^+ -Stoßsystems

die potentielle Energie der Bestandteile des Stoßsystems abbilden

$$\begin{aligned}
\hat{v}_{e_j T} &= -\frac{Z_T}{|\vec{x}_j|} \\
\hat{v}_{e_j P} &= -\frac{Z_P}{|\vec{s}_j|} \\
\hat{V}_{PT} &= \frac{Z_P Z_T}{R} \\
\hat{v}_{ee} &= \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{|\vec{s}_2 - \vec{s}_1|} = \frac{1}{|\vec{x}_2 - \vec{x}_1|} \quad .
\end{aligned} \tag{1.60}$$

Die Stoßparameternäherung (siehe 1.1.2) ist im hier untersuchten Energiebereich in sehr guter Näherung vertretbar: die Trajektorie der nukleonischen Relativbewegung kann als gerade Bahn angegeben werden

$$\vec{R}(t) = \vec{b} + \vec{v}t, \quad \vec{b} \vec{v} = 0 \quad . \tag{1.61}$$

Im Gültigkeitsbereich der semiklassischen Näherung (SCA) läßt sich die internukleare Wechselwirkung mit einer kanonischen Transformation aus dem Hamilton-Operator entfernen, so dass sich die transformierte Wellenfunktion nur durch einen Phasenfaktor von der nicht transformierten unterscheidet. Hierbei kann man den Einfluß der internuklearen Wechselwirkung $V_{PT}(R)$ durch Multiplikation der Übergangsamplitude im Stoßparameterbild mit einem Phasenfaktor $G(b)$ berücksichtigen. Da dieser Weg hier beschritten wird, wird die die internukleare Wechselwirkung \hat{V}_{PT} im Folgenden fortgelassen. Zu lösen ist also die zeitabhängige elektronische Schrödinger-Gleichung

$$\left(i \partial_t - \hat{H}^{el} \right) |\Psi(t)\rangle = 0 \tag{1.62}$$

mit den Anfangsbedingungen einer aus- beziehungsweise einlaufenden Streuwelle

$$\Psi^+(t) \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} \Phi_i^\alpha(t) \tag{1.63}$$

$$\Psi^-(t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} \Phi_f^\beta(t) \quad . \tag{1.64}$$

Φ_i^α und Φ_f^β sind die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für den elektronischen Anteil der voneinander isolierten atomaren Systeme des Eingangs- und des End-

kanals

$$\left(i \partial_t - \hat{H}_\alpha^{el} \right) |\Phi_i^\alpha(t)\rangle = 0 \quad (1.65)$$

$$\left(i \partial_t - \hat{H}_\beta^{el} \right) |\Phi_f^\beta(t)\rangle = 0 \quad . \quad (1.66)$$

Die Zusammensetzung der Kanal-Hamilton-Operatoren \hat{H}_α^{el} und \hat{H}_β^{el} entspricht dem elektronischen Anteil der Kanal-Hamilton-Operatoren \hat{H}_α und \hat{H}_β , die die asymptotischen Zustände des Systems vor und nach dem Stoß, $|\alpha_i\rangle$ und $|\beta_f\rangle$, definieren. Sie wird an späterer Stelle besprochen (1.70), (1.73).

Da die stoßparameterabhängige Formulierung im Gültigkeitsbereich der semiklassischen Näherung eine sehr gute Näherung an die rein quantenmechanische Formulierung darstellt, und dann stoßparameterabhängige Formulierung und quantenmechanische Formulierung durch eine Fouriertransformation auseinander hervorgehen¹³, kann man also aus dem T-Matrixelement $T_{\alpha\beta}$ für einen Übergang vom Anfangszustand $|\alpha_i\rangle$ in einen Endzustand $|\beta_f\rangle$ mit

$$T_{\alpha\beta} = \langle \beta_f | \hat{T} | \alpha_i \rangle \quad (1.67)$$

und (1.12) die Übergangsamplitude

$$a_{fi}(\vec{b}) = i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi^-(t) | \hat{V}_\alpha | \Phi_i^\alpha(t) \rangle \quad (1.68)$$

gewinnen und umgekehrt¹⁴.

Die Zustände $|\alpha_i\rangle$ und $|\beta_f\rangle$ beschreiben die asymptotischen und infolge ihrer Zeitentwicklung stationären Zustände vor und nach dem Übergang

$$H^+ + He(1s^2) \longrightarrow H(n_f l_f m_f) + He^{2+} + e^- \quad . \quad (1.69)$$

Hier stehen die Indizes i und f jeweils für den Satz an Quantenzahlen, der die innere Struktur des Zustands festlegt. Die Zustände müssen, um dem Pauli-Prinzip

¹³Siehe Abschnitt (1.1.2) und auch [23].

¹⁴Natürlich gibt es die Übergangsamplitude auch noch in einer alternativen Formulierung

$$a_{fi}(\vec{b}) = i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_f^\beta(t) | V_\beta | \Psi^+(t) \rangle \quad .$$

Details dazu findet man in Abschnitt 1.1.2.

zu genügen, antisymmetrisch gegenüber einer Vertauschung der Teilchenkoordinaten sein. Da der Spinanteil im Grundzustand des Heliumatoms, aus dem der Übergang erfolgt, antisymmetrisch ist ($S = 0$), muss der Ortsanteil der Grundzustandswellenfunktion symmetrisch sein. Hier wird angenommen, dass spinabhängige Wechselwirkungen während des Übergangs vernachlässigt werden können und die Symmetrieeigenschaften der Zustände, die hier als Konsequenz der Übergänge bevölkert werden, denen des Anfangszustands entsprechen.

Lange Zeit vor dem Stoß sind Projektil H^+ und Target He ($1s^2$) weit voneinander entfernt. Der asymptotisch ungestörte Zustand im Eingangskanal $|\alpha_i\rangle$ in (1.67) wird dann durch den Hamilton-Operator für $|\vec{R}| \gg |\vec{x}_j|$ definiert und genügt der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}\hat{H}_\alpha |\alpha_i\rangle &= E |\alpha_i\rangle \\ \hat{H}_\alpha &= \hat{T}_N + \hat{H}_\alpha^{el}\end{aligned}\quad (1.70)$$

mit

$$\hat{V}_\alpha = \sum_{j=1}^2 \hat{v}_{e_j P} \quad . \quad (1.71)$$

Die zugehörigen Eigenzustände zu \hat{H}_α haben die Gestalt

$$|\alpha_i\rangle = |\vec{K}_\alpha; (n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2)_{He^{00}}\rangle \quad . \quad (1.72)$$

Die Wellenfunktion enthält die gebundenen elektronischen Zustände des Heliumatoms sowie einen Anteil, der die nukleonische Bewegung mit dem Impuls \vec{K}_α beschreibt.

Die Situation nach der Streuung sieht folgendermaßen aus: das eingefangene Elektron bewegt sich mit dem Proton. Für asymptotisch große Abstände zwischen den Zentren des Endkanals gilt daher $|\vec{R}| \gg |\vec{s}_{cap}|$. Die Koordinate \vec{s}_{cap} gibt die intratomare Position des eingefangenen Elektrons relativ zum Wasserstoffkern an. Aufgrund dessen kann man die Wechselwirkung zwischen dem eingefangenen Elektron und dem Target-Kern in den Störanteil des Hamiltonoperator mit einschließen. Das emittierte Elektron bewegt sich sowohl im Feld von He^{2+} als auch des Projektils. Die Aufteilung des Hamilton-Operators in einen ungestörten

und einen Störanteil ist in diesem Fall nicht eindeutig. Sie steht und fällt mit der Stärke der Wechselwirkung.

Aufgrund der vergleichsweise höheren Ladung des Targetkerns gegenüber der des Projektils, die zudem durch das eingefangene Elektron abgeschirmt wird, wird der Einfluß des Projektilfeldes auf das emittierte Elektron als Störung aufgefasst und man hat die folgende Aufteilung im Endkanal¹⁵

$$\begin{aligned}\hat{H}_\beta|\beta_f\rangle &= E|\beta_f\rangle \\ \hat{H}_\beta &= \hat{T}_N + \hat{H}_\beta^{el}\end{aligned}\quad (1.73)$$

mit

$$\hat{V}_\beta = \hat{v}_{e_1P} + \hat{v}_{e_2T} + \hat{v}_{ee} \quad . \quad (1.74)$$

Es stellt sich hier die Frage, wie das freie Elektron zu beschreiben ist. Als mögliche Optionen hat man

- eine Zwei-Zentren-Coulombwellenfunktion, die den Einfluß des Targetfeldes und des Projektilfeldes berücksichtigt,
- eine Ein-Zentren-Coulombwellenfunktion im Targetkontinuum,
- eine Ein-Zentren-Coulombwellenfunktion im Kontinuum des Projektils.

Gemäß der Argumentation zur Aufteilung des Hamilton-Operators im Endkanal, kann die Wirkung des Projektilfeldes auf das emittierte Elektron vernachlässigt werden und es wird zugunsten einer targetzentrierten Ein-Zentren-Coulombwellenfunktion entschieden. Die Endzustandswellenfunktion enthält also sowohl einen Term, der die Relativbewegung der Nukleonen beschreibt, als auch zwei elektronische Ein-Teilchen-Wellenfunktionen. Hier handelt es sich um einen gebundenen Zustand im atomaren Wasserstoffsystem $\Phi_{n_f l_f m_f}$ sowie einen Kontinuumszustand im Feld des zweifach negativ geladenen Heliumions $\chi_{\vec{k}_f^e}$

$$|\beta_f\rangle = |\vec{K}_\beta; (\vec{k}_f^e)_{He^{2+}}; (n_f l_f m_f)_H\rangle \quad . \quad (1.75)$$

¹⁵Der Operator \hat{V}_β ist, ebenso wie \hat{H}_β , nicht symmetrisch. Eine Symmetrisierung ist auch nicht notwendig, falls die Zustände symmetrisiert sind, da ${}_S\langle\beta|\hat{O}_S|\gamma\rangle_S = \langle\beta|\hat{S}^\dagger\hat{O}_S\hat{S}|\gamma\rangle = \langle\beta|\hat{S}^\dagger\hat{S}^\dagger\hat{O}\hat{S}\hat{S}|\gamma\rangle = {}_S\langle\beta|\hat{O}|\gamma\rangle_S$. Hier ist \hat{S} der Symmetrisierungsoperator. Er ist im Zwei-Teilchenfall $\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{P}_{12} + 1)$. \hat{S} ist hermitesch $\hat{S} = \hat{S}^\dagger$ und es gilt $\hat{S}^2 = \hat{S}$.

Die normierte¹⁶ und symmetrisierte Gesamtwellenfunktion kann man für große internukleare Zustände folgendermaßen ansetzen

$$\begin{aligned}
\langle \vec{R}, \vec{s}_1, \vec{x}_2 | \beta_f \rangle &= \langle \vec{R}, \vec{s}_1, \vec{x}_2 | \vec{K}_\beta; (\vec{k}_f^e)_{He^{2+}}; (n_f l_f m_f)_H \rangle \\
&= e^{i \vec{K}_\beta \vec{R}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi(n_f l_f m_f)(\vec{s}_1) \chi_{\vec{k}_f^e}(\vec{x}_2) + \Phi(n_f l_f m_f)(\vec{s}_2) \chi_{\vec{k}_f^e}(\vec{x}_1) \right) \\
&= e^{i \vec{K}_\beta \vec{R}} \Psi_f^{el}(\vec{R}, \vec{s}_1, \vec{x}_2)
\end{aligned}$$

mit $\vec{s}_2 = \vec{x}_2 - \vec{R}$, $\vec{x}_1 = \vec{s}_1 + \vec{R}$. Die elektronischen Koordinaten beziehen sich auf verschiedene Zentren: \vec{s} bezieht sich auf den Projektilkern und \vec{x} auf den Targetkern.

Hier ist $\Phi(nlm)(\vec{s}) = R_{nl}^{1,1}(s) Y_{lm}(\hat{\mathbf{e}}_s)$ ein gebundener Wasserstoffzustand und $\chi_{\vec{k}_f^e}(\vec{x})$ ist ein Streuzustand im Feld des He^{2+} -Ion. Beide Zustände sind in der üblichen Form normiert

- $\langle \chi_{\vec{k}_e} | \chi_{\vec{k}'_e} \rangle = \delta(\vec{k}_e - \vec{k}'_e)$
- $\langle \Phi(nlm) | \Phi(n'l'm') \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$.

Für große internukleare Distanzen ist der Überlapp zwischen Wasserstoffatom¹⁷

$$\tilde{\Phi}(nlm)(\vec{x}) = R_{nl}^{1,1}(s(\vec{x}, \vec{R})) Y_{lm}(\hat{\mathbf{e}}_s(\vec{x}, \vec{R}))$$

und elektronischem Streuzustand vernachlässigbar und es gilt

$$\langle \tilde{\Phi}(nlm) | \chi_{\vec{k}_f^e} \rangle = 0 \quad .$$

Damit ist der gesamte asymptotische Zustand normiert mit

$$\begin{aligned}
&\int d\vec{R} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \Psi_f^*(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \Psi_f(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \\
&= (2\pi)^3 \delta(\vec{K}_\beta - \vec{K}'_\beta) \delta(\vec{k}_f - \vec{k}'_f) \delta_{n_f n'_f} \delta_{l_f l'_f} \delta_{m_f m'_f} \quad . \quad (1.76)
\end{aligned}$$

¹⁶Hierbei wurde berücksichtigt, dass zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts (1.13) die freie Relativbewegung der Nukleonen normiert sein muss gemäß

$$\langle \phi_i^{\nu'}(\vec{K}_\nu) | \phi_i^{\nu}(\vec{K}_{\nu'}) \rangle = (2\pi)^3 \delta_{if} \delta(\vec{K}_\nu - \vec{K}_{\nu'}) \quad .$$

Details findet man in [10].

¹⁷Da die Koordinaten der Anteile der gesamten Wellenfunktion sich auf verschiedene Zentren beziehen, müssen die intraatomaren Koordinaten der Subsysteme zur Normierung der gesamten Wellenfunktion auf dasselbe Zentrum bezogen werden.

Hier steht der Index f für den Satz Quantenzahlen, der die innere Struktur des Zustands beschreibt.

1.4 Bisherige theoretische Untersuchungen

In diesem Abschnitt geht es um eine Bestandsaufnahme der theoretischen Modelle zur Beschreibung der Transferionisation für das betrachtete Stoßsystem. Wichtige Aspekte dabei sind die Beschreibung des Stoßprozesses, die Beschreibung des Targets und die Extraktion der Observablen. Die relevanten Resultate – hier handelt es sich lediglich um totale Wirkungsquerschnitte – werden in Abschnitt (4.6.3) präsentiert. Man kann die bisherigen Arbeiten zur Transferionisation in zwei Kategorien einteilen:

- **Kategorie I:** Beide Prozesse, Einfang und Ionisation, werden abhängig voneinander beschrieben. Die meisten der Untersuchungen, die zu dieser Kategorie gehören, konzentrieren sich allerdings nur auf die Beschreibung des ee-Thomas-Prozesses. Dazu zählt die historisch bedeutende Pionierarbeit von L.H. Thomas [21], der die Transferionisation im Rahmen einer klassischen Betrachtungsweise beschrieben hat, und die Rechnungen von Briggs und Taulbjerg [71] und McGuire et al. [73], [72], die den ee-Thomas-Beitrag zum Wirkungsquerschnitt in zweiter Bornscher Näherung abschätzten. Über die Berechnung des ee-Thomas-Beitrags hinaus, gehen die Rechnungen von Olson et al. [55], [56], [62], die einen CTMC-Ansatz anwendeten.
- **Kategorie II:** Beide Prozesse werden unabhängig von einander beschrieben. Sie sind von daher nur in der Lage Beiträge zum Wirkungsquerschnitt zu erfassen, die durch in guter Näherung unabhängige Prozesse zu stande kommen. Hierunter fallen die Arbeiten von Crothers und Dunseath im Rahmen des IEM, [3], als auch diejenigen von Gayet und Salin [67], [68], [69]. Die Rechnungen der letztgenannten Autoren basieren auf dem IPM-Ansatz.

Leider haben die meisten Autoren lediglich totale Wirkungsquerschnitte berechnet, differentielle winkelabhängige Querschnitte gibt es nur im Rahmen der Arbeiten von Gayet/Salin [69]¹⁸ und McGuire et al. [72].

¹⁸Die von Gayet und Salin berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte werden allerdings lediglich in Form des Verhältnisses von Transferionisation zur Summe aus Transferioni-

Es existiert noch eine Vielzahl anderer Untersuchungen, die sich auf ein anderes Stoßsystem beziehen und an dieser Stelle teilweise Erwähnung finden sollen. Die hier angeführten quantenmechanischen Rechnungen, die sich nicht nur auf den ee-Thomas-Beitrag zum Wirkungsquerschnitt beschränken, gehen alle von der Annahme aus, dass die Übergänge der Elektronen sich in ihrer Dynamik gegenseitig nicht beeinflussen. Stoßdynamische Korrelationseffekte werden daher in keinem der Ansätze berücksichtigt. Jene zum Untersuchungsgegenstand zu machen, war erklärtes Ziel einer Rechnung von Belkic et al. [76]. Sie entwickelten einen Formalismus, in dem sowohl stoß- als auch targetinterne Korrelation mit eingeschlossen ist: das sogenannte CDW-4body-Model.

Shingal und Lin [64] haben Wirkungsquerschnitte im Bereich niedriger Stoßenergien für eine Transferionisation mit einer gekoppelten Kanalrechnung in einem semiklassischen Ansatz berechnet, der auf den Annahmen des Modells der unabhängigen Teilchen beruht. Allerdings bezogen sich ihre Arbeiten nicht auf das (H^+, He) -Stoßsystem. Sie zeigten, dass die korrekte Wahl der Ionisierungsenergie in jedem der beiden Übergänge einen großen Einfluß auf die Richtigkeit der berechneten totalen Wirkungsquerschnitte hat. Da das effektive Einteilchenpotential des Targetatoms die korrekte Ionisierungsenergie liefert, so werden alle Eielektronenübergänge gut beschrieben, denn das effektive Einteilchenpotential des Targetatoms liefert die korrekte Ionisierungsenergie. Die totalen Wirkungsquerschnitte für alle Zweielektronenübergänge werden allerdings nur dann gut beschrieben, wenn man ein solches effektives Potential annimmt, in dem die Energie für die Einfachionisation halb so groß ist wie die Energie für die Doppelionisation von Helium. Mit dieser Wahl wird der Effekt berücksichtigt, der durch die Änderung der Abschirmung zwischen den Elektronen infolge des Übergangs beider Elektronen entsteht.

sation und Einfacheinfang angegeben,

$$\frac{\frac{d\sigma^{TI}}{d\theta_P}}{\frac{d\sigma^{TI}}{d\theta_P} + \frac{d\sigma^{CAP}}{d\theta_P}} \quad .$$

1.4.1 Klassische Impulsnäherung

Die klassische Impulsnäherung wurde 1927 durch L. H. Thomas [21] auf die Transferionisation angewendet. Er zerlegte den Prozess in zwei aufeinander abfolgende, quasielastische Stöße unter der Annahme, dass beide Rutherfordstreuungen seien und untersuchte die Bedingungen unter denen eine sukzessive Abfolge zweier Stöße eines Projektils der Masse m_p mit einem Targetatom zu einer Transferionisation führt.

Thomas ging dazu von der plausiblen Vorstellung aus, dass ein Einfang dann stattgefunden habe, wenn die Geschwindigkeit des emittierten Elektrons in etwa der Geschwindigkeit des einlaufenden Projektils entspricht. Mit den Annahmen, dass die Elektronen im Target in Ruhe und das Elektron-Targetpotential vernachlässigbar seien und die Geschwindigkeit des Projektils infolge des Massenunterschieds zwischen Elektron und Projektil durch die Streuung an einem Elektron kaum verändert werde, liefern Impuls- und Energieerhaltung Bedingungen für den Ablaufmechanismus (siehe Abb. 1.2):

1. Im ersten Schritt wird das Projektil am Targetelektron unter einem sehr kleinen Winkel von $\theta_P = \frac{1}{m_p} = 0.55$ mrad relativ zur Einflugrichtung des Projektils gestreut, wobei das Elektron eine Geschwindigkeit von $\sqrt{2} v$ erhält und in einem Winkel von $\theta'_e = 45^\circ$ emittiert wird.
2. Im zweiten Schritt wird das emittierte Elektron am zweiten Targetelektron gestreut. Eines der beiden Elektronen verlässt das Target unter einem Winkel von $\theta_e = 90^\circ$ relativ zur Projektilflugrichtung, das andere unter einem Winkel von 0° . Beide Elektronen laufen mit dem Geschwindigkeitsbetrag $|\vec{v}|$ aus.

Den Wirkungsquerschnitt erhält man mit der Annahme einer homogenen Verteilung des Elektrons im charakteristischen Abstand r_0 um den Targetkern zu

$$\sigma_{ee} = \frac{dW}{\rho_{Target} ds} = \frac{4\pi}{3} N^2 (N-1) a^2 \left(\frac{Z_P}{r_0}\right)^{\frac{7}{2}} v^{-11} \quad . \quad (1.77)$$

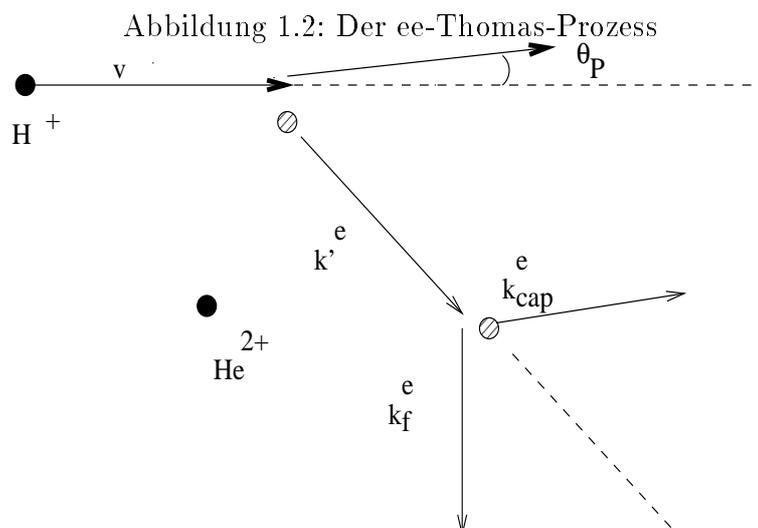
Hier ist dW die Gesamtwahrscheinlichkeit für den jeweiligen Doppelstreuprozess, ρ_{Target} ist die Targetdichte, also die Anzahl an Targetatomen pro Volumenelement, ds ist die Targetschichtdicke, N die Anzahl der Elektronen pro Targe-

tatom. Für den charakteristischen Abstand r_0 nahm Thomas den Bohrradius für wasserstoffähnliche Atome $r_0 = \frac{n^2}{Z_T}$ an. Die Gesamtwahrscheinlichkeit dW ergibt sich aus dem Produkt der Wahrscheinlichkeiten für die beiden Rutherford-Einzelstreuprozesse, sowie aus den Bedingungen, die aus der Verknüpfung der beiden Streuprozesse resultieren.

Eine methodisch ähnliche Rechnung, die ebenfalls die klassische Impulsnäherung anwendet, stammt von Bates und Mapleton [57]. Sie gingen jedoch von einer etwas anderen Verteilung der Elektronen um den Targetkern aus: sie ersetzten die Deltafunktion in der Radialverteilung um den Kern durch die klassisch korrekte Verteilung und erhielten für den Proton-Helium-Stoß anstelle der v^{-11} -Abhängigkeit eine v^{-9} -Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts von der Stoßgeschwindigkeit. Dieser Sachverhalt deutet eine Sensitivität der klassischen Berechnung von der verwendeten Anfangsverteilung der Elektronen im Target an.

1.4.2 Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC)

Die Classical Trajectory Monte Carlo-Methode (CTMC) stellt eine vollständig klassische Methode zur Beschreibung von quantenmechanischen Systemen zur Verfügung. Genau darin begründet liegen ihre Vor- und Nachteile. Positiv ins Gewicht fällt zum Beispiel ihr großer Anwendungsbereich: genau dann, wenn störungstheoretische Methoden versagen und Close-Coupling-Methoden aufgrund der Unvollständigkeit der Basis zu aufwendig werden, kann die CTMC-Methode



eingesetzt werden. Zudem ist sie als klassisches Verfahren recht anschaulich. Sämtliche Erhaltungssätze werden erfüllt, die Dynamik wird, wenn auch klassisch, exakt behandelt und man kann alle Umladungen eines Stoßsystems gleichzeitig berechnen. Auf der anderen Seite steht natürlich das Festhalten am klassischen Bahnbegriff: an einem Teilchen, das zu jedem Zeitpunkt einen festen Impuls und eine feste Energie hat und der damit einhergehenden Vernachlässigung der quantenmechanischen Vielteilchenaspekte der Wellenfunktion. Ein Problem ist zum Beispiel die Instabilität der klassischen Mehrelektronenatome. Diese Instabilität resultiert aus der Möglichkeit intraatomarer Stöße zwischen den Elektronen, die zur Autoionisation führen können. Um dem Rechnung zu tragen, wird in den meisten Fällen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung entweder vernachlässigt oder so berücksichtigt (effektive Ladungen, Modellpotential, etc.), dass keine Autoionisation auftreten kann. Die Orts- und Impulsverteilung der quantenmechanischen Aspekte des Anfangszustandes wird in der CTMC-Methode durch ein großes Ensemble von Elektronenkonfigurationen mit klassischen Umlaufbahnen repräsentiert. Diese klassischen Orbits gewinnt man als Lösung der Keplergleichung, unter der Nebenbedingung, dass die Hamilton-Funktion H der Gesamtenergie des Systems entspricht. Man erhält die Phasenraumtrajektorie des Teilchens aus der direkten numerischen Integration der klassischen Bewegungsgleichungen in der Hamiltonschen Formulierung für zufällig ausgewählte Randbedingungen¹⁹.

Insgesamt gliedert sich eine CTMC-Rechnung in drei Schritte:

1. die Initialisierung des quantenmechanischen Anfangszustandes des Targets als mikrokanonische Phasenraumverteilung und die Initialisierung des Projektils,
2. die Integration der klassischen Bewegungsgleichungen,
3. die Untersuchung der asymptotischen Trajektorien zur Diagnose des Endzustandes und die Berechnung der Observablen.

Die Berechnung von totalen und von differentiellen Wirkungsquerschnitten für das Proton-Helium-Stoßsystem mit dem CTMC-Ansatz wurde von Olson et al.

¹⁹Siehe auch Abschnitt (1.1.2).

durchgeführt [55], [56], [62]. Die Autoren lösen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für das Vier-Körper-Stoßsystem, das aus dem einlaufenden Projektil, dem Targetkern und den beiden Elektronen besteht. Die Gleichungen werden für sehr viele verschiedene Anfangsbedingungen numerisch gelöst, in denen Stoßparameter, die Relativgeschwindigkeit des Projektils relativ zum Target, die Ortsvektoren und die Impulse der Elektronen spezifiziert werden. Für jeden Satz an Anfangsbedingungen berechnet man die klassischen Trajektorien der Kerne über die ganze Bandbreite der internuklearen Distanzen hinweg, i.e. für große internukleare Abstände vor und nach dem Stoß bis hin zur größten Annäherung. In den verschiedenen Veröffentlichungen von Olson et al. werden verschiedene Wege besprochen, die in der Targetbeschreibung, speziell in der Behandlung der interelektronischen Wechselwirkung, differieren.

Im ersten Ansatztyp – es handelt sich um eine Variante des sogenannten nCTMC-Ansatzes, der in [55], [56] eingeführt wurde – wird die Wechselwirkung der Elektronen explizit berücksichtigt. Dem Problem der Autoionisation begegnen Olson et al. mit der Methode von Kirschbaum und Wilets [61], die um den Kollaps des “klassischen” Atoms zu verhindern, die Heisenbergsche Unschärferelation verwenden. Zu den Coulombwechselwirkungspotentialen wird ein zusätzliches Potential addiert, dessen Form durch die Heisenbergsche Unschärferelation motiviert ist. Dieses Potential sorgt dafür, dass unerlaubte Bereiche des Phasenraumes von den Elektronen nicht eingenommen werden.

In einer weiteren Variante²⁰ wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch ein dynamisch veränderliches Effektivpotential approximiert. Dieser unter dem Namen dynamical-screening-CTMC-Methode (dCTMC) eingeführte Weg erlaubt es, die Stärke der Abschirmung auf die physikalische Situation abzustimmen, da die effektive Wechselwirkung zwischen Target und Elektron vom veränderlichen Abstand zwischen zweitem Elektron und Target abhängt. So schließt man Response-Effekte in den Ansatz mit ein. In der Version, die von Olson et al. entwickelt wurde, wird das veränderliche Abschirmpotential, wenn das Elektron den gebundenen Zustand des Targets verläßt, ab- und die vollständigen Potentiale eingeschaltet.

Was die Beschreibung des Targetatoms anbetrifft, kann, da die interelektronische Wechselwirkung mit berücksichtigt wird, für die Ladung des Targetatoms

²⁰Die Ergebnisse dieses Ansatzes findet man in der Dissertation von V. Mergel [62].

die tatsächliche Ladung anstelle einer effektiven verwendet werden und eine Bindungsenergie von 0.903 a.u., die die potentielle Energie aufgrund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung beinhaltet.

Während des Stoßes wird die Bewegung der Stoßpartikel ausgehend von der Hamilton-Funktion des Stoßsystems

$$H = \frac{K_T^2}{2m_T} + \frac{K_P^2}{2m_P} + \frac{Z_P Z_T}{R} + \sum_{i=1}^2 \left(\frac{k_{e_i}^2}{2} - \frac{Z_P}{s_i} - \frac{Z_T}{x_i} \right) + \frac{1}{|x_1 - x_2|} \quad (1.78)$$

mit den Impulsen des Targets K_T , des Projektils K_P und der Elektronen k_{e_i} durch direkte numerische Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen berechnet.

Die Analyse der elektronischen Zustände nach dem Stoß liefert den Wirkungsquerschnitt. Um die abschließende statistische Auswertung der Verteilung der elektronischen Endzustände aussagekräftig zu gestalten, muss ein großes Ensemble an Trajektorien der Berechnung zugrundegelegt werden: Olson et al. werteten zwischen 5000 und 10000 Trajektorien aus und berechneten damit den totalen Wirkungsquerschnitt für verschiedene Stoßenergien für das System Proton-Helium.

1.4.3 Das Modell unabhängiger Teilchen (IPM)

Das Modell unabhängiger Teilchen basiert auf den Annahmen, jedes Elektron des Grundzustands bewege sich unter dem Einfluß eines zentralen effektiven Potentials und der genäherte Hamilton-Operator sei in Bezug auf die elektronischen Koordinaten separierbar. Im Rahmen der Stoßparameternäherung, gemäß der die Relativbewegung der Kerne einem klassischen geraden Pfad folgt

$$\vec{R}(\vec{b}, t) = \vec{b} + \vec{v} t \quad ; \vec{v} \vec{b} = 0 \quad , \quad (1.79)$$

kann die elektronische Wellenfunktion infolgedessen als Produkt von Ein-Teilchen-Spinorbitalen (1.54) dargestellt werden. Der Ortsanteil der Ein-Teilchen-Orbitale

genügt der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} i\partial_t\psi(\vec{r}, t) &= \hat{h}\psi(\vec{r}, t) \\ \hat{h} &= \hat{t}_e - \frac{Z_P}{s} + \hat{v}_{eT}^{eff}(x) \quad , \end{aligned} \quad (1.80)$$

die auf verschiedenen Wegen gelöst werden kann. Somit zerfällt die Amplitude für den Übergang vom Zustand α in den Zustand β in ein Produkt von Ein-Teilchen-Amplituden für einen Übergang aus dem Grundzustand des Heliumatoms

$$A_{\alpha\beta}(\vec{b}) = a_{\alpha_1\beta_1}(\vec{b}) a_{\alpha_2\beta_2}(\vec{b}) \quad \alpha_1 = \alpha_2 \quad . \quad (1.81)$$

Gleichung (1.81) berücksichtigt nur den Ortsanteil der Wellenfunktion, der in diesem Fall symmetrisch ist. Der Übergang eines Elektrons bleibt im Rahmen dieser Annahmen ohne Einfluß auf das passive Elektron und wird auch nicht von diesem beeinflusst. Den Wirkungsquerschnitt für eine Transferionisation gewinnt man mit (1.81) dann auf der Basis der Ein-Teilchen-Wahrscheinlichkeiten für Ionisation $P_{ion} = |a_{ion}|^2$ und Einfang $P_{cap} = |a_{cap}|^2$ zu

$$\sigma_{\alpha\beta} = 2\pi \int d\vec{k}_e \int_0^\infty 2 |a_{cap}(b)|^2 |a_{ion}(b, \vec{k}_e)|^2 b db \quad , \quad (1.82)$$

falls andere Kanäle vernachlässigt werden [66].

Das Modell der unabhängigen Elektronen wurde von A. Salin und R. Gayet auf die Transferionisation angewandt [67], [68]. Sie berechneten den differentiellen Wirkungsquerschnitt für Streuung des Projektils in den Raumwinkel Ω_p um die Richtung (φ_p, Θ_p) [69], die sich aus der Fouriertransformierten der Übergangsamplituden für die Transferionisation $a_{ci}(b, \vec{k}_e) = a_c(b) a_i(b, \vec{k}_e) b^{2i\nu}$ zu

$$\frac{\partial\sigma_{\alpha\beta}}{\partial\Omega_p} = 2 \frac{m_p^2}{4\pi^2} \int d\vec{k}_e |T_{\alpha\beta}(\vec{\eta}, \vec{k}_e)|^2 \quad (1.83)$$

$$= 2 \frac{m_p^2 v^2}{4\pi^2} \int d\vec{k}_e \left| \int a_{ci}(b, \vec{k}_e) e^{-i\vec{\eta}\vec{b}} b db \right|^2 \quad ; \quad \eta = m_p v \Theta_p \quad (1.84)$$

(im Laborsystem) gewinnen lässt, wobei η der Impulsübertrag senkrecht zur Eingangsrichtung ist. Der Phasenfaktor $b^{2i\nu}$ mit $\nu = \frac{Z_P Z_T}{v}$ berücksichtigt die internukleare Wechselwirkung. In Konsistenz mit dem IPM-Ansatz wird der Heliumgrundzustand auf der Basis von Hartree-Fock beschrieben; die Autoren verwen-

deten eine Funktion von Clementi und Roetti [31].

Gayet und Salin gehen die Berechnung der Ein-Teilchen-Amplituden mit etablierten störungstheoretischen Methoden an: die Einfangsamplitude wird im Rahmen der CDW-Näherung gewonnen, die Ionisationsamplitude in erster Bornscher Näherung.

Als Spezialfall eines DWBA-Ansatzes, berücksichtigt die CDW-Amplitude der Natur des Einfangprozesses gemäß Beiträge höherer Ordnung der Störungstheorie. Für einen Übergang aus dem Zustand $\phi_i^\alpha(\vec{x}, t)$ in einen Zustand $\phi_f^\beta(\vec{s}, t)$ hat die Übergangsamplitude in Prior-Formulierung die Gestalt

$$a_{\beta\alpha}^{if} = i \int dt \langle \psi^- | v_\alpha - u_\alpha | \chi_i^{\alpha+} \rangle \quad . \quad (1.85)$$

Hierbei wurde der Störanteil u_α in den ungestörten Anteil des Hamilton-Operators mit aufgenommen. Obige Formulierung (1.85) ist nur zulässig, falls die durch den Störanteil u_α verzerrte Wellenfunktion $\chi_i^{\alpha+}$ der Bedingung

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \phi_f^\beta e^{-i\tau_\beta} | \chi_i^{\alpha+} \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi^- | \chi_i^{\alpha+} \rangle = 0 \quad (1.86)$$

genügt. Hier drückt sich die Forderung aus, nur solche Störanteile in der verzerrten Wellenfunktion zu berücksichtigen, die nicht zu einem Übergang führen. Die Langreichweitigkeit der Coulombwechselwirkung äußert sich in einer Verzerrung der asymptotischen Anfangs- und Endzustände $\phi_i^\alpha(\vec{r}, t)$ und $\phi_f^\beta(\vec{r}, t)$, die in den Randbedingungen berücksichtigt wird

$$\begin{aligned} \psi^-(\vec{r}, t) &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \phi_f^\beta(\vec{r}, t) e^{-i\tau_\beta} \\ \tau_\beta &= \frac{Z_T(Z_P - 1)}{v} \ln(vR + v^2t) \\ \chi_i^{\alpha+}(\vec{r}, t) &\xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \phi_i^\alpha(\vec{r}, t) e^{i\tau_\alpha} \\ \tau_\alpha &= \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v} \ln(vR - v^2t) = 0 \quad . \end{aligned} \quad (1.87)$$

Da nach dem Einfang des Elektrons das Projektil nunmehr neutral ist und somit τ_β gleich Null ist, entfällt im Endkanal β der verzerrende Effekt auf die asymptotischen Zustände für das vorliegende Stoßsystem. Der Vektor \vec{r} lokalisiert den Ort des Elektrons relativ zum Ursprung des Bezugskordinatensystems. In der

Regel wählt man hier den Mittelpunkt der internuklearen Verbindungslinie. Da die elektronischen Koordinaten in den Eigenzuständen der stationären atomaren Subsysteme auf die atomaren Zentren bezogen angegeben werden, enthalten die asymptotischen Wellenfunktionen neben den Eigenzuständen der Subsysteme im Eingangs- und im Endkanal $\varphi_i^\alpha(\vec{x})$ und $\varphi_f^\beta(\vec{s})$, Translationsfaktoren, die den Einfluß durch die zusätzliche Bewegung der atomaren Zentren berücksichtigen

$$\begin{aligned}
\phi_i^\alpha(\vec{r}, t) &= \varphi_i^\alpha(\vec{x}) e^{-i\xi_\alpha} \\
\xi_\alpha &= \frac{1}{2}\vec{v}\vec{r} + \frac{1}{8}v^2t + \epsilon_i t \\
\phi_f^\beta(\vec{r}, t) &= \varphi_f^\beta(\vec{s}) e^{-i\xi_\beta} \\
\xi_\beta &= -\frac{1}{2}\vec{v}\vec{r} + \frac{1}{8}v^2t + \epsilon_f t \quad .
\end{aligned} \tag{1.88}$$

Die durch den zusätzlich mitgenommenen Störanteil verzerrte Wellenfunktion $\chi_i^{\alpha+}$ wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$\left(\hat{H}_\alpha^{DW} - i\partial_t \right) \chi_i^{\alpha+}(\vec{r}, t) = 0, \quad \hat{H}_\alpha^{DW} = \hat{t}_e + v_\alpha + u_\alpha \quad . \tag{1.89}$$

definiert zu

$$\begin{aligned}
\chi_i^{\alpha+}(\vec{r}, t) &= \phi_i^\alpha(\vec{r}, t) L_i^+(\vec{s}, t) \\
L_i^+(\vec{s}, t) &= N\left(\frac{Z_P}{v}\right) e^{i\frac{Z_P Z_T}{v} \ln(v R - v^2 t)} F\left(i\frac{Z_P}{v}, 1, i v s + \vec{v}\vec{s}\right)
\end{aligned} \tag{1.90}$$

und erfüllt natürlich die Randbedingungen des Systems (1.87). Die CDW-Näherung ergibt sich aus dem speziellen Ansatz

$$\psi^-(\vec{r}, t) \approx \chi_f^{\beta-}(\vec{r}, t) = \phi_f^\beta(\vec{r}, t) L_f^-(\vec{x}, t) \quad . \tag{1.91}$$

für die Gesamtstreuwellenfunktion $\psi^-(\vec{r}, t)$. Einsetzen in (1.80), liefert eine Bestimmungsgleichung für den Anteil $L_f^-(\vec{x}, t)$. Man wählt $L_f^-(\vec{x}, t)$ so, dass lediglich ein Teil der kinetischen Energie der Elektronen als Störanteil ($v_\alpha - u_\alpha$) übrig

bleibt, so dass gilt

$$\begin{aligned}
L_f^-(\vec{x}, t) &= N\left(\frac{Z'_T}{v}\right) e^{-i\frac{Z'_P Z'_T}{v} \ln(vR+v^2 t)} F\left(i\frac{Z'_T}{v}, 1, i v x + \vec{v} \vec{x}\right) \\
(v_\alpha - u_\alpha) \chi_i^{\alpha+}(\vec{r}, t) &= e^{-i\xi_\alpha} \nabla_x \varphi_i^\alpha(\vec{x}, t) \nabla_s L_i^+(\vec{s}, t) \\
\left(\hat{H}_\beta^{DW} - i\partial_t\right) \chi_f^{\beta-}(\vec{r}, t) &= 0, \quad \hat{H}_\beta^{DW} = \hat{t}_e + v_\beta + u_\beta \\
\chi_f^{\beta-}(\vec{r}, t) &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \phi_f^\beta(\vec{r}, t) e^{-i\tau_\beta} \quad .
\end{aligned} \tag{1.92}$$

Die asymptotischen Wellenfunktionen enthalten jetzt einen gebundenen Anteil und einen Kontinuumanteil, so dass Effekte zweiter Ordnung wie die Ankopplung der elektronischen Zwischenzustände an das Kontinuum in der Übergangsamplitude mit eingeschlossen sind. Die Gesamtamplitude für den Einfang nimmt dann die nachstehende Form an

$$\begin{aligned}
a_{\alpha\beta}(\vec{b}) &= i N\left(\frac{Z'_T}{v}\right) N\left(\frac{Z'_P}{v}\right) (b v)^{2i\nu} \int dt \int d\vec{r} e^{-i(\vec{v} \vec{r} + (\epsilon_i - \epsilon_f) t)} S_{if}^{\alpha\beta-} \\
S_{if}^{\alpha\beta-} &= \varphi_f^{\beta*}(\vec{s}) F\left(i\frac{Z'_T}{v}, 1, i v x + \vec{v} \vec{x}\right) \nabla_x \varphi_i^\beta(\vec{x}) \nabla_s F\left(i\frac{Z'_P}{v}, 1, i v s + \vec{v} \vec{s}\right) \\
N\left(\frac{Z'_k}{v}\right) &= e^{\frac{\pi Z'_k}{2v}} \Gamma\left(1 - i\frac{Z'_k}{v}\right); \quad k = P, T \quad .
\end{aligned} \tag{1.93}$$

Die Ladung Z'_T entspricht der effektiven Ladung des Targets, die das aktive Elektron sieht. Die Autoren Gayet und Salin setzen hierfür an

$$Z'_T = (-2 n_i^2 \epsilon_i)^{\frac{1}{2}} \quad . \tag{1.94}$$

Hier entspricht n_i der Hauptquantenzahl des aktiven Elektrons im Anfangszustand und ϵ_i seiner Orbitalenergie.

Zur Beschreibung des Ionisationsprozesses ist in erster Bornscher Näherung das T-Matrixelement

$$T_{\alpha\beta}^{B1} = \langle \chi_{\vec{k}_e}^- | e^{i\vec{q} \vec{r}} | \varphi_i^\alpha \rangle \quad , \tag{1.95}$$

zu berechnen. Hier ist $\chi_{\vec{k}_e}^-$ ein Kontinuumzustand, der das mit einem Impuls \vec{k}_e emittierte Elektron beschreibt und \vec{q} ist der Impulsübertrag des Projektils. Die numerische Integration der Schrödingergleichung liefert für ein Elektron im Feld des effektiven Targetpotentials $V_T^{eff}(r)$ die gebundenen Anfangs- und die

Kontinuum-Endzustände. Zwei-Zentreneffekte werden vernachlässigt. Als effektives Targetpotential $V_T^{eff}(r)$ verwenden Gayet und Salin einen analytischen Fit an das Hartree-Fock-Potential. Um die stoßparameterabhängige Übergangsamplitude zu erhalten, ist eine Fouriertransformation zu berechnen, die sich nach Integration über den winkelabhängigen Anteil des senkrechten Anteils des Impulsübertrags auf eine Hankeltransformation reduziert. Da für kleine Stoßenergien oder große Ladungen der störungstheoretische Ansatz in Frage gestellt sein könnte, berechneten die Autoren die Ionisationsamplitude für eine Einschussenergie von 400 keV mit einer nichtstörungstheoretischen Methode, die auf einer targetzentrierten Multipol-Entwicklung (MEDOC)²¹ beruht. Dazu wurde die Ein-Teilchen-Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ nach Kugelflächenfunktionen um das Target entwickelt. Nach Einsetzen dieses Ansatzes in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (1.80) erhält man so einen Satz von gekoppelten Differentialgleichungen, die von Gayet und Salin numerisch mit Hilfe der Methode der finiten Differenzen gelöst werden. Ein Vergleich der Ergebnisse für die totalen Querschnitte zeigt, dass bei Berücksichtigung der Partialwellen $l = 0$ und $l = 1$ Differenzen zwischen dem störungstheoretisch berechneten und dem mit MEDOC berechneten Wert auftreten.

Ein etwas kritischerer Punkt bleibt zu erwähnen: die Wahl der Bindungsenergien. Als elektronische Bindungsenergie wurde für jeden Übergang die Hartree-Fock-Orbitalenergie gewählt, die -0.9042 a.u. beträgt. In der Summe macht das eine Grundzustandsenergie von etwas mehr als 1.8 a.u.. Der experimentelle Wert liegt jedoch bei 2.904 a.u. und wird damit zweifelsohne unterschätzt. Zudem ist zu überprüfen, ob die Berücksichtigung von lediglich insgesamt 4 Partialwellen, im Fall der Bornschen Näherung befriedigende Ergebnisse liefern kann.

1.4.4 Das Modell unabhängiger Ereignisse (IEM)

Von Dunseath und Crothers [3] wurde die Transferionisation im Independent Event Model-Ansatz (IEM), der auch von ihnen entwickelt wurde, beschrieben. Dazu wird der Übergang entsprechend dem physikalischen Bild eines Zwei-Schritt-Übergangs, der über einen Zwischenzustand verläuft, in eine sukzessive Folge von

²¹Multipol Expansion Defined on One Centre

Subereignissen zerlegt:

$$\begin{aligned} H^+ + H e_{1s^2} &\rightarrow H e_{n_1 l_1 m_1}^+ + H_{n_2 l_2 m_2} \rightarrow H e^{2+} + H_{1s} + e_k^- \\ &\rightarrow H e_{n_1 l_1 m_1}^+ + e_{k'}^- \rightarrow \end{aligned}$$

In diesem Modell ergibt sich der totale Wirkungsquerschnitt zu

$$\sigma_{ci} = 2\pi \int_0^\infty b db \left(P_{c1}(\vec{b}) P_{c1i2}(\vec{b}) + P_{i1}(\vec{b}) P_{i1c2}(\vec{b}) \right) . \quad (1.96)$$

Dann sind die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(\vec{b})$ für jedes Subereignis einer Abfolge die Quadrate der Übergangsamplituden und man hat

- für den Einfang $P(\vec{b}) = |a(\vec{b})|^2$
- und für die Ionisation integriert über die Endimpulse des emittierten Elektrons $P(\vec{b}) = \int d\vec{k}^e |a(\vec{b}, \vec{k}^e)|^2$.

Crothers und Dunseath berechnen die Übergangsamplituden für alle Subereignisse als Fouriertransformierte der T-Matrixelemente im Rahmen der CDW-Näherung. Die Zwischenzustände in (1.97) enthalten lediglich gebundene Zustände, deren Beschreibung mit normierten wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen erfolgen kann, und den Kontinuumszustand des emittierten Elektrons, der in diesem Ansatz als targetzentrierter Einzentrenzustand beschrieben wird.

Die vollständige CDW-Formulierung für das Vier-Körper-Problem ist kompliziert, da sie die Wechselwirkungsterme aller Teilchen untereinander enthält. Daher vernachlässigen Dunseath und Crothers im ersten Übergang sowohl die Wechselwirkung des Projektils mit dem passiven Elektron, als auch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung, nehmen allerdings die Verzerrung durch die Wechselwirkung des Projektils mit dem aktiven Elektron mit.

Um den Effekt elektronischer Korrelation im ungestörten Target explizit in der Targetbeschreibung miteinzuschließen, wird der Heliumgrundzustand mit einer Wellenfunktion beschrieben, die von Pluvinaige [74] 1950 angegeben wurde zu

$$\begin{aligned} \Psi^{el}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= c(k), \varphi(\vec{x}_1) \varphi(\vec{x}_2) \chi(k; x_{12}) \\ \chi(k; x) &= e^{-ikx} {}_1F_1\left(1 + \frac{1}{2ik}, 2, 2ikx\right) . \end{aligned} \quad (1.97)$$

Sie erfüllt sogar die Cusp-Bedingungen und erfasst über den interelektronischen Abstand x_{12} Korrelation innerhalb des Targets. Die Art der eingearbeiteten Näherungen reduziert im ersten Übergang allerdings die Rolle des passiven Elektrons jeweils auf die Bereitstellung eben jener Korrelation. Im zweiten Übergang wird die Anwesenheit des passiven Elektrons nur noch im Rahmen eines effektiven Ein-Teilchen-Modells berücksichtigt.

Die Auswertung der totalen Wirkungsquerschnitte (1.96) erfordert aufwendige und komplizierte Berechnungen. Die Integrationen, die in den Wahrscheinlichkeitsamplituden stecken, werden numerisch ausgeführt. Allein in der Berechnung von P_{i1} stecken 6 Integrationen. Crothers und Dunseath berechneten mit diesem Modellansatz eine Reihe von totalen Wirkungsquerschnitten als Funktion der Stoßenergien, und zwar für das (H^+, He) - und das (He^{2+}, He) -Stoßsystem.

1.4.5 Die zweite Bornsche Näherung

Um eine quantenmechanische Beschreibung des dem ee-Thomas-Mechanismus (1.2) entsprechenden Übergangs im Bereich hoher Stoßgeschwindigkeiten zu geben, haben Briggs und Taulbjerg [71], die Transferionisation in zweiter Bornscher Näherung berechnet. In diesem Bereich ist die Stoßparameternäherung anwendbar und man hat für das Matrixelement zweiter Ordnung für einen Stoß eines nackten Projektils mit einem Zwei-Elektronen-Target

$$A_{fi}^{\alpha\beta DS}(\vec{b}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Phi_f^\beta | \hat{V}_\beta \hat{g}_\alpha \hat{V}_\alpha | \Phi_i^\alpha \rangle \quad (1.98)$$

$$\hat{g}_\alpha(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{i \partial_t - \hat{H}_\alpha + i\eta} \quad (1.99)$$

Weitere Näherungen machen die Berechnung von (1.98) handhabbar:

- Propagation des Zwischenzustandes durch Greensfunktion eines freien Teilchens

$$\hat{g}_\alpha(t_1, t_2) \approx \hat{g}_0(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \frac{1}{i \partial_t - (\hat{t}_{e_1} + \hat{t}_{e_2}) + i\eta} \quad (1.100)$$

- Vernachlässigung der Austauschwechselwirkung

- Beschreibung des Heliumgrundzustandes im effektiven Ein-Teilchen-Bild

$$\Phi_i^\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \varphi(\vec{r}_1) \varphi(\vec{r}_2) e^{-2i\epsilon_i t} \quad (1.101)$$

- Beschreibung des emittierten Elektrons als ebene Welle unter Vernachlässigung der verzerrenden Effekte durch die Projektil- und Targetwechselwirkung,

so dass,

$$A_{fi}^{\alpha\beta DS}(\vec{b}) \approx -i \int dt \langle \Phi_f^\beta | \hat{v}_{ee} \hat{g}_0 \hat{v}_{e_1 P} | \Phi_i^\alpha \rangle \quad (1.102)$$

Zusätzlich dazu ist, um die Integrationen ausführen zu können, die Anwendung verschiedener weiterer Näherungen notwendig, die unter dem Namen Peaking Näherung bekannt sind und im wesentlichen die gegenüber der Projektilgeschwindigkeit vernachlässigbar kleinen Geschwindigkeiten der gebundenen Elektronen ausnutzen. Die Asymptotik des totalen Wirkungsquerschnitts für $v \rightarrow \infty$ ergibt sich damit zu

$$\frac{2^4 \pi^2 Z_P^5 Z_T^3}{Z_P + 2^{\frac{1}{2}} Z_T} \quad (1.103)$$

Es gibt eine ähnliche Berechnung des Beitrags zweiter Ordnung zum Transferionisationsquerschnitt von McGuire et al. [?], [72], die sich in ein paar Aspekten von dem Briggs/Taulbjerg-Ansatz unterscheidet:

- Der Austauschterm wird berücksichtigt.
- Etwas andere Peaking Näherungen werden angesetzt.

Um die Peaking Näherungen, die es ermöglichen, das Matrixelement in analytisch geschlossener Form darstellen zu können, zu überprüfen, haben die Autoren das T-Matrixelement ebenfalls numerisch berechnet. Hier zeigte sich, dass die verwendeten Peaking Näherungen zu Fehlern in der Form und der Lage des Peaks in den differentiellen Wirkungsquerschnitten führt.

Ein Ergebnis der Rechnungen ist die Prognose verschiedener Strukturen, die als Folge der Heisenbergschen Unschärferelation und der Vernachlässigung der elek-

tronischen Anfangsimpulse in den klassischen Rechnungen auftreten. In der quantenmechanischen Berechnung bleibt im Zwischenzustand die Gesamtenergie infolge der Heisenbergschen Unschärferelation nicht unbedingt erhalten. Hier gibt es eine Propagation des Elektrons in Zwischenzustände, die die Energieerhaltung im Rahmen der Energie-Zeit-Unschärfe verletzen. Fordert man nur die Erhaltung der Gesamtenergie und des Gesamtimpulses, so liefert die Kombination der Erhaltungssätze eine Gleichung für die Lage des Thomas-Peaks. Die Struktur, die sich daraus ergibt, wird als kinematische Erhöhung zweiter Ordnung (kinematic ridge) bezeichnet. Die Breite dieser Erhöhung ergibt sich aus der Impulsverteilung der Elektronen im Target. Die Bergkammstruktur entsteht durch die Anwesenheit des Targetkerns, der sich im Gegensatz zu der Annahme der klassischen Thomas-Rechnung nicht darauf beschränkt, die Elektronen zu lokalisieren, so dass die Beiträge zum Wirkungsquerschnitt an den Stellen

$$\vec{q} + \vec{k}_f^e = -\Delta\vec{K}_T = 0 \quad (1.104)$$

und

$$\cos(\Theta_\epsilon) = \frac{k_f^{e2} - v^2}{2 k_f^e v} \quad (1.105)$$

erhöht sein sollten, bei Vernachlässigung der Impulse der gebundenen Elektronen. Hier ist $\vec{q} = \vec{K}_\alpha - \vec{K}_\beta$ der Impuls, den das Projektil überträgt,

$$\Delta\vec{K}_T^i = \vec{K}_T^i - \vec{K}_T^f \quad (1.106)$$

die Impulsänderung des Targetkerns und \vec{k}_f^e ist der Impuls des emittierten Elektrons. Dieser Struktur überlagert ist eine zweite Erhöhung, deren Scheitel mit der Erhaltung der Energie in den Zwischenzuständen korrespondiert $\vec{k}_f^e \approx \vec{v}$.

Der klassische Thomas-Peak liegt genau auf dem Schnittpunkt der beiden Rücken an dem Punkt, wo sowohl die Erhaltungssätze für den Gesamtprozess, als auch für die Zwischenzustände gelten. McGuire et al. schätzten, dass circa 50% des totalen Wirkungsquerschnitts Beiträge durch nichtenergieerhaltende Übergänge in Zwischenzustände darstellen.

Kapitel 2

Die korrelierte Transferionisation

Ziel dieser Arbeit ist die Beschreibung der Transferionisation im Bild unabhängiger Ereignisse. In diesem Kapitel soll es daher um die Ableitung einer hierfür geeigneten Modellstruktur zur Beschreibung der Transferionisation und die Umsetzung des Modells in konkrete Rechnungen gehen. Wichtige Aspekte hierbei sind die Beschreibung des Targets, des Stoßprozesses und die Extraktion der Observablen. Diesem Ansatz ist die unabhängige Behandlung der beiden Teilübergänge Ionisation und Einfang zugrunde gelegt. Nachdem in einem ersten Abschnitt die Grundgleichungen für den gesamten Stoßprozess hergeleitet werden, werden anschließend sich auf Einfang und Ionisation beziehende Anteile der Rechnung behandelt.

2.1 Beschreibung der Modellstruktur

Die Struktur des in dieser Arbeit zur Beschreibung der Transferionisation verwendeten Modells ist motiviert durch das Modell unabhängiger Ereignisse (IEM). Die Herleitung der Grundgleichungen dieses Modells fußt auf den folgenden grundlegenden Näherungen:

1. Im betrachteten Energiebereich ist ein nicht-relativistischer Ansatz gerechtfertigt und der Spin wird nicht berücksichtigt.
2. Der Prozess ist in einem störungstheoretischen Rahmen zu beschreiben.

3. Die semiklassische bzw. Eikonalnäherung kann als Folge der Auswertung des Massenunterschieds zwischen Elektron und Nukleon angewendet werden.
4. Der Gesamtübergang wird als Zweischnittprozess dargestellt, wobei in jedem Teilschritt jeweils ein Elektron seinen Zustand ändert und beide Teilschritte voneinander unabhängig ablaufen.
5. Es werden nur 2 Zwischenzustände berücksichtigt, und zwar

$$\begin{aligned}
 He_{n_1 l_1 m_1}^+ &+ H_{n_2 l_2 m_2} \\
 He_{n_1 l_1 m_1}^+ &+ e_{k'}^- \quad .
 \end{aligned}$$

6. Den Zwischenzuständen, die berücksichtigt werden, wird im Rahmen der Closure-Näherung eine mittlere Energie zugewiesen.

Die Wahl der IEM-Strategie bietet sich für solche Kanäle der Transferionisation an, bei denen die definierenden Prozesse aus einer Kombination nahezu unabhängig ablaufender Einelektronenübergänge bestehen und lediglich targetinterne Korrelation berücksichtigt werden muss. Mit der IEM-Strategie verfügt man über einen theoretischen Rahmen, der es erlaubt, den Einfluss verschiedener Ansätze zur Beschreibung des Targets auf den Prozess zu untersuchen.

Hierzu wurden drei verschiedene Ansätze zur Beschreibung des Heliumgrundzustands in die Modellstruktur implementiert. Zur Beschreibung des Einfangs wurde zugunsten des CDW-Ansatzes entschieden, die Beschreibung der Ionisation erfolgt in erster Bornscher Näherung. Details werden in den entsprechenden Abschnitten ausgeführt. Die im Hinblick auf den Vergleich mit dem Experiment aussagekräftigen Observablen sind solche, die sensitiv auf räumliche Verteilung und den Energiegehalt der Elektronen sind. Daher werden hier fünffach differentielle Wirkungsquerschnitte berechnet.

2.2 Beschreibung des Targets

Um untersuchen zu können, welche Aspekte der Targetbeschreibung bei diesem Prozess eine Rolle spielen, wurden verschiedene Ansätze für den Heliumgrundzustand in das Modell implementiert: ein Ansatz mit wasserstoffähnlichen Ein-

Teilchen-Orbitalen, ein HF- und ein Eckartansatz. Zusätzlich wurde die Herleitung der Modellgleichungen für einen Konfigurationsmischungsansatz, der in Ortsdarstellung die nachstehende Form (siehe 1.50) hat

$$\Psi^{00}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \varphi_{nlm}(\vec{x}_1) \varphi_{nl-m}(\vec{x}_2) \quad ,$$

formuliert.

2.2.1 Der wasserstoffähnliche Ansatz

Der einfachste der implementierten Varianten der Targetbeschreibung ist der aus einer Kombination zweier wasserstoffähnlicher Orbitale bestehende Ansatz¹

$$\begin{aligned} \Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \varphi_{1s}^\Lambda(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\Lambda(\vec{x}_2) \\ \varphi_{1s}^\Lambda(\vec{x}) &= \sqrt{\frac{\Lambda^3}{\pi}} e^{-\Lambda x}, \quad \Lambda = \frac{27}{16} \quad . \end{aligned} \quad (2.1)$$

Als Bindungsenergie eines Elektrons wird der Energieeigenwert für ein wasserstoffähnliches Ion mit der effektiven Kernladung Λ gewählt

$$\epsilon_{n=1}^\Lambda = -\frac{\Lambda^2}{2n^2} = -0.84766 \text{ a.u.} \quad . \quad (2.2)$$

2.2.2 Der Hartree-Fock-Ansatz

Den Ausführungen des Abschnitts 1.2.3 gemäß, in welchem der HF-Ansatz beschrieben wurde, kann der Ortsanteil der Hartree-Fock-Wellenfunktion für den Heliumgrundzustand angegeben werden zu

$$\Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \varphi_{1s}(\vec{x}_1) \varphi_{1s}(\vec{x}_2) \quad . \quad (2.3)$$

Die analytische Darstellung der ortsabhängigen Ein-Teilchen-Orbitale $\varphi_{1s}(\vec{x})$ in einer Basis aus Slater ähnlichen Orbitalen sind dem Tabellenwerk von Clementi-

¹Siehe Abschnitt 1.2.2.

Roetti [31] entnommen. Sie haben für den Grundzustand die Form

$$\begin{aligned}\varphi_{100}(\vec{x}) &= \sum_p c_p \chi_p \\ \chi_p(\vec{r}) &= N_p e^{-\xi_p r} Y_{00} = \chi_p(r), \quad N_p = \frac{(2 \xi_p)^{0.5}}{(2!)^{0.5}} .\end{aligned}\quad (2.4)$$

Die Werte für die Entwicklungskoeffizienten c_p , die Orbitalexponenten ξ_p und die Anzahl der Terme p werden dort angegeben zu:

Entwicklungskoeffizienten c_p	Orbitalexponent ξ_p
0.76838	1.41714
0.22346	2.37682
0.04082	4.39628
-0.00994	6.52699
0.00230	7.94252

Für beide Übergänge wird als elektronische Bindungsenergie die Hartree-Fock-Orbitalenergie angesetzt, die für den Heliumgrundzustand einen Wert von $\epsilon_\alpha(1s^2) = -0.9175$ a.u. annimmt.

2.2.3 Der Eckart-Ansatz

Der in Abschnitt (1.2.4) vorgestellte Eckart-Ansatz bildet radiale Anteile von Korrelation ab. Er besitzt die nachstehende Form

$$\begin{aligned}\Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= N_{\alpha\beta} [\varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_2) + \varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_2) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_1)] \\ \varphi_{1s}^\lambda(\vec{x}) &= \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}} e^{-\lambda x}(x) \quad \lambda = \alpha, \beta \\ N_{\alpha\beta} &= \frac{1}{[2(1+c^2)]^{\frac{1}{2}}} \quad c = \frac{8(\alpha\beta)^{\frac{3}{2}}}{(\alpha+\beta)^3} .\end{aligned}\quad (2.5)$$

mit

$$\begin{aligned}\alpha_{opt} &= 2.14 & \beta_{opt} &= 1.19 \\ N_{\alpha_{opt}\beta_{opt}} &= 0.53 & c_{opt} &= 0.88 \\ E_{1s^2}(\alpha_{opt}, \beta_{opt}) &= -2.8775 \text{ a.u.} .\end{aligned}\quad (2.6)$$

Um die Übergänge getrennt beschreiben zu können, braucht man die Bindungsenergien jedes Elektrons. Innerhalb des Eckart-Ansatzes hat man die Vorstellung zweier Elektronen, deren Abstand zum Kern hin unterschiedlich ist. Daher wird für die elektronische Bindungsenergie der Energieeigenwert eines wasserstoffähnlichen Ions mit der jeweiligen effektiven Kernladung α, β gewählt, also

$$\begin{aligned}\epsilon_{n=1}^\lambda &= -\frac{\lambda^2}{2n^2}, \quad \lambda = \alpha, \beta \\ \epsilon_{n=1}^\alpha &= -2.29 \text{ a.u.} \\ \epsilon_{n=1}^\beta &= -0.70805 \text{ a.u.}\end{aligned}\tag{2.7}$$

Die Summe der beiden Energien liegt damit etwas oberhalb vom berechneten Energiewert $E_{1s^2}(\alpha_{opt}, \beta_{opt})$.

2.3 Das Modell unabhängiger Ereignisse

Um Vielfachstreuprozesse zu beschreiben, betrachtet man das T-Matrixelement

$$T_{\alpha\beta}^{(VS)} =_S \langle \beta_f | \hat{V}_\beta \hat{G}^\pm \hat{V}_\alpha | \alpha_i \rangle_S \quad .\tag{2.8}$$

$|\alpha_i\rangle$ ist der Anfangs- (1.72) und $|\beta_f\rangle$ der Endzustand des Übergangs (1.75), \hat{V}_α und \hat{V}_β sind die Potentialoperatoren des Störanteils im Eingang- und Endkanal, (1.71) und (1.74). Physikalisch enthält das T-Matrixelement unendlich viele Mehrfachstreuprozesse, da die vollständige Greensfunktion

$$\hat{G}^\pm = \frac{1}{E - \hat{H}' \pm i\eta} \quad ,\tag{2.9}$$

die die Propagation des Systems unter dem Einfluß des vollständigen Hamilton-Operators (1.58) beschreibt, enthalten ist.

Im Rahmen des Modells voneinander unabhängiger Ereignisse wird die Transferionisation als Kombination von zwei sukzessiv und unabhängig voneinander ablaufenden Teilprozessen aufgefasst. Daher werden in (2.8) nur Doppelstreubeiträge berücksichtigt.

Zu einem reinen Doppelstreu-Matrixelement kommt man mit der folgenden Überlegung: die Zwischenzustände $|\gamma_z\rangle$, über die der Prozess verläuft, sind Eigenzu-

stände des vollständigen Hamilton-Operators

$$\left[E_{\gamma_z} - \hat{H}' \right] |\gamma_z\rangle = 0 \quad , \quad (2.10)$$

wobei

$$\langle \gamma_z | \gamma_{z'} \rangle = \delta_{zz'} \quad . \quad (2.11)$$

Sie bilden einen vollständigen Satz von Funktionen mit der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_z |\gamma_z\rangle \langle \gamma_z| = 1 \quad .$$

Einfügen der Vollständigkeitsrelation rechts und links der Greensfunktion (2.9) und Auswerten von (2.10), (2.11) liefert

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{VS} &= \sum_z \sum_{z'} s \langle \beta_f | V_\beta | \gamma_z \rangle_S s \langle \gamma_z | \hat{G}^\pm | \gamma_{z'} \rangle_S s \langle \gamma_{z'} | V_\alpha | \alpha_i \rangle_S \\ &= \sum_z \frac{s \langle \beta_f | V_\beta | \gamma_z \rangle_S s \langle \gamma_z | V_\alpha | \alpha_i \rangle_S}{E - E_{\gamma_z} \pm i\eta} \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

(2.12) enthält eine Summation über alle elektronischen Zustände, sowohl die elektronisch gebundenen als auch die Kontinuumzustände und ein Integral über die Relativimpulse der nukleonischen Bewegung, die über einen Phasenfaktor eingehen. Formal läßt sich jeder Summand als Folge von zwei Streuprozessen mit jeweils eingeschalteter Propagation des Zwischenzustandes interpretieren.

Allerdings enthält die Darstellung der Resolvente in (2.12) noch die Propagation in der vollen Wechselwirkung und damit implizit auch unendlich viele Mehrfachstreuprozesse. An dieser Stelle greift jetzt der wesentliche Aspekt des IEM-Ansatzes: die Zerlegung des Übergangs in zwei unabhängige Einelektronenübergänge. Im Bild des IEM-Modells wechselwirkt in jedem dieser Teilprozesse jeweils ein Elektron unabhängig vom anderen mit dem Projektil. Diese Wechselwirkung hat einen Übergang des Elektrons in den jeweiligen elektronischen Endzustand zur Konsequenz. Das nicht am betrachteten Übergang teilnehmende Elektron nimmt man dagegen als vollkommen passiv an. Mathematisch wird der Ansatz in zwei Näherungen manifest:

1. In (2.12) berücksichtigt man nur die Beiträge, in denen sich das aktive Elektron nach einem ersten Übergang entweder gebunden im Wasserstoffatom

oder im Kontinuum befindet und man hat

$$\sum_z |\gamma_z\rangle\langle\gamma_z| \approx \frac{1}{2} \left\{ \sum_{zd} |\gamma_{zd}\rangle\langle\gamma_{zd}| + \sum_{zk} |\gamma_{zk}\rangle\langle\gamma_{zk}| \right\} . \quad (2.13)$$

Die Indizes zd^2 und zk^3 kennzeichnen die Quantenzahlen, die die interne Struktur der Systeme des Zwischenzustandes beschreiben. zd charakterisiert Zwischenzustände in denen das aktive Elektron nach dem Übergang im Wasserstoffatom gebunden ist,

$$H(n_2l_2m_2) + He^+(n_1l_1m_1) \quad (2.14)$$

und zk bezeichnet Zustände in denen sich das aktive Elektron im Kontinuum befindet

$$H^+ + He^+(n_1l_1m_1) + e^- . \quad (2.15)$$

- Die beiden Zwischenzustandstypen werden durch Eigenzustände von jeweils einem der beiden voneinander verschiedenen Hamilton-Operatoren (1.70), (1.73) des Anfangs- und des Endkanals approximiert

$$\begin{aligned} \gamma_{zd} &\rightarrow \beta_{zd}, & [E_{\beta_{zd}} - \hat{H}_\beta]|\beta_{zd}\rangle &= 0 \\ \gamma_{zk} &\rightarrow \alpha_{zk}, & [E_{\alpha_{zk}} - \hat{H}_\alpha]|\alpha_{zk}\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

und die wechselwirkende Greensfunktion ersetzt durch

$$\hat{G}^\pm \approx \hat{G}_\alpha^\pm = \frac{1}{E - \hat{H}_\alpha \pm i\eta} , \quad (2.17)$$

beziehungsweise

$$\hat{G}^\pm \approx \hat{G}_\beta^\pm = \frac{1}{E - \hat{H}_\beta \pm i\eta} . \quad (2.18)$$

Die Struktur und die Normierung dieser genäherten Zwischenzustände ist im Detail im Anhang (B) nachzulesen.

Jetzt hat man gemäß der Strategie des IEM-Ansatzes, die Reduktion auf einen echten Doppelstreuterm und eine Entkopplung der beiden Übergänge erreicht.

²diskreter Anteil

³kontinuierlicher Anteil

Die Greensfunktionen \hat{G}_γ^\pm berücksichtigen nunmehr Korrelationsanteile, die durch die Beschreibung des Targets ins Spiel gebracht werden. Stoßkorrelation wird hier vernachlässigt und die Verknüpfung der Übergänge ist aufgehoben. Unter diesen Voraussetzungen erhält man für den Fall einer Doppelstreuung an den Potentialen V_α und V_β

$$T_{\alpha\beta}^{DS} = \frac{1}{2} \sum_{zk} \frac{s\langle\beta_f|V_\beta|\alpha_{zk}\rangle_S s\langle\alpha_{zk}|V_\alpha|\alpha_i\rangle_S}{E - E_{\alpha_{zk}} \pm i\eta} + \frac{1}{2} \sum_{zd} \frac{s\langle\beta_f|V_\beta|\beta_{zd}\rangle_S s\langle\beta_{zd}|V_\alpha|\alpha_i\rangle_S}{E - E_{\beta_{zd}} \pm i\eta} . \quad (2.19)$$

Dieses Matrixelement kann als aufeinanderfolgende Streuung an den Potentialen V_α und V_β mit dazwischengeschalteter Propagation des virtuellen Zwischenzustands, gefolgt von einem Übergang in einen beobachtbaren Endzustand interpretiert werden. Er entspricht prinzipiell dem Doppelstreuterm in zweiter Bornschen Näherung.

2.3.1 Closure-Näherung

Das Matrixelement enthält sowohl eine Integration über den nukleonischen Anteil als auch die Integration beziehungsweise Summation über die elektronischen Zwischenzustände, von denen auch der Energienenner in den einzelnen Summanden abhängt

$$T_{\alpha\beta}^{(DS)} = \frac{1}{2} \sum_{n_1 l_1 m_1} \left[\int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_{zk} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}} s\langle\beta_f^{el}|V_\beta|\alpha_{zk}^{el}\rangle_S \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}'} s\langle\alpha_{zk}^{el}|V_\alpha|\alpha_i^{el}\rangle_S \frac{1}{E - E_{\alpha_{zk}} \pm i\eta} + \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2 l_2 m_2} \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_{zd} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}} s\langle\beta_f^{el}|V_\beta|\beta_{zd}^{el}\rangle_S \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zd}) \cdot \vec{R}'} s\langle\beta_{zd}^{el}|V_\alpha|\alpha_i^{el}\rangle_S \frac{1}{E - E_{\beta_{zd}} \pm i\eta} \right] . \quad (2.20)$$

Der demzufolge schwer auszuwertende Summenausdruck läßt sich mit der Closure-Näherung [13] handhaben. Im Rahmen dieser Näherung weist man der Energie der Zwischenzustände einen mittleren Wert \bar{E}_z zu. Dadurch wird der Nenner der

Greensfunktion unabhängig gemacht von den Energien der eingeschobenen Zustände und kann vor das Integral gezogen werden. Somit erhält man mit einem Gewichtungsfaktor multiplizierte T-Matrixelemente. Dieser Gewichtungsfaktor, der die Energieskalierung bestimmt, hängt nur noch von der Gesamtenergie und der mittleren Energie der Zwischenzustände ab. Der Fall, dass der Energienenner verschwindet, kann nicht eintreten, denn beim Einschleiben des vollständigen Satzes an Zwischenzuständen (2.10) wurden keinerlei Einschränkungen bezüglich ihrer energetischen Struktur gemacht. Daher enthält Gleichung (2.20) sowohl eine Summation über energieerhaltende On-Shell-Beiträge, als auch über Off-Shell-Beiträge, für die die Energiebilanz vor und nach einem Teilübergang ungleich Null ist. Für den Gesamtübergang muss natürlich Energieerhaltung gewährleistet sein. Mittelt man nun über alle Zustandsenergien, so kann der erhaltene Wert niemals gleich der Gesamtenergie des Systems sein.

Angesichts der enthaltenen Kontinuumzustände und der Unkenntnis der Projekttilbewegung nach dem Stoß ist eine direkte Abschätzung der mittleren Energie der berücksichtigten Zwischenzustände nicht möglich. Dennoch sollte ein weiterer wichtiger Punkt diskutiert werden: die Stoßenergieabhängigkeit des Gewichtungsfaktors. Damit steht und fällt nämlich der qualitative Vergleich berechneter und gemessener Querschnitte, während ein quantitativer Vergleich die Kenntnis seiner absoluten Höhe voraussetzt.

Der Gewichtungsfaktor entspricht der Differenz aus Gesamtenergie des Systems und der mittleren Energie des Zwischenzustandes. Die Gesamtenergie des Systems entspricht der Energie des asymptotischen Zustands vor dem Stoß, die sich aus der Summe von kinetischer Energie des Projektils $\frac{K_{\alpha i}^2}{2\mu}$ und der Bindungsenergie der Elektronen im Heliumatom $E_{1s^2}^{He}$ zusammensetzt. Die mittlere Energie des Zwischenzustandes besteht aus der mittleren kinetischen Energie des auslaufenden Projektils $\frac{\overline{K}_z^2}{2\mu}$ und den mittleren Energien der beiden Elektronen $\overline{E}_{el}(1, 2)$. Zu den Komponenten des Gewichtungsfaktors, deren Größe von der Stoßenergie abhängen kann, gehören der sehr geringe Energieverlust des Projektils und die mittlere kinetische Energie der Kontinuumselektronen

$$E - \overline{E}_z = \frac{K_{\alpha i}^2}{2\mu} - \frac{\overline{K}_z^2}{2\mu} + E_{1s^2}^{He} - \overline{E}_{el}(1, 2) \quad . \quad (2.21)$$

Letztlich bleibt die Frage nach der Stoßenergieabhängigkeit des Gewichtungsfak-

tors offen. Man kann sich überlegen, dass ein hinsichtlich der Stoßenergie un-sensibler Gewichtungsfaktor physikalisch eine von der Stoßenergie unabhängige Bevölkerung der elektronischen Kontinuumszwischenzustände bedeutet. Dies ist allerdings selbst für schnelle Stöße eine auf den ersten Blick unwahrscheinliche Vorstellung, da der Energieübertrag in das System um so größer sein sollte, je größer die Projektilgeschwindigkeit ist. Intuitiv ist aufgrund dessen eher anzunehmen, dass der Gewichtungsfaktor von der Energie des Projektils abhängt.

Im Folgenden wird der Skalierungsfaktor $g(E, \bar{E}_z)$ unterdrückt durch

$$\tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)} \equiv T_{\alpha\beta}^{(DS)} g(E, \bar{E}_z) \quad (2.22)$$

und das T-Matrixelement erhält die Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)} \approx & \frac{1}{2} \sum_{n_1 l_1 m_1} \left[\int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e t_{c2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \right. \\ & \left. + \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2 l_2 m_2} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \right] . \end{aligned} \quad (2.23)$$

Hier sind

$$\begin{aligned} t_{x1}(\vec{q}_{1r}) &= \int d\vec{R} e^{i(q\vec{1}_r) \vec{R}} {}_S \langle \gamma_{zr}^{el} | V_\alpha | \alpha_i^{el} \rangle_S \\ t_{x2}(\vec{q}_{2r}) &= \int d\vec{R} e^{i(q\vec{2}_r) \vec{R}} {}_S \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \gamma_{zr}^{el} \rangle_S \\ \gamma_{zr}^{el} &= \begin{cases} \beta_{zd}^{el}, & r = d, x = c \\ \alpha_{zk}^{el}, & r = k, x = I \end{cases} \end{aligned} \quad (2.24)$$

die T-Matrix-Beiträge der einzelnen Schritte⁴, wobei

$$\vec{q}_{1r} = \vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zr}$$

und

$$\vec{q}_{2r} = \vec{K}_{zr} - \vec{K}_\beta \quad ,$$

die Impulsüberträge sind, die bei jedem Schritt übertragen werden. Aufgrund der

⁴Der Index x steht für einen Einfang (c) oder für eine Ionisation (I).

Erhaltung des Gesamtimpulses gilt

$$\vec{q} = \vec{K}_\alpha - \vec{K}_\beta = \vec{q}_{1r} + \vec{q}_{2r} \quad .$$

2.3.2 Berechnung des T-Matrixelementes auf der Basis von Ein-Teilchen-Matrixelementen

Man hat im IEM eine Faktorisierung der elektronischen Zwei-Teilchen-Terme

$${}_S \langle \gamma_{zr}^{el} | V_\alpha | \alpha_i^{el} \rangle_S$$

und

$${}_S \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \gamma_{zr}^{el} \rangle_S$$

in Ein-Teilchen-Beiträge. Diese Faktorisierung ist dem IEM durch die Vernachlässigung der interelektronischen Wechselwirkung in (2.12) und die mit der Zuweisung einer mittleren Energie der Zwischenzustände verknüpfte Unabhängigkeit der beiden Übergänge bereits inhärent. Die Potentialoperatoren V_α und V_β , die die potentielle Energie der Wechselwirkungen im Eingangs-, beziehungsweise Endkanal enthalten, umfassen nur elektronische Ein-Teilchen-Wechselwirkungsterme, die auf eine elektronische Koordinate wirken

$$V_\gamma = \sum_{i=1}^2 v_\gamma^i \quad .$$

Betrachtet man die Einschnittbeiträge $t_{xj}(\vec{q}_{jr})$ auf der Basis der Ein-Teilchen-Terme, so fallen viele Beiträge durch die Orthogonalität der Ein-Teilchen-Zustände weg. Die Untersuchung der Beiträge der einzelnen Terme $t_{xj}(\vec{q}_{jr})$ zur Gesamtübergangsamplitude wird im Anhang (C) ausführlich dargestellt. Sie liefert eine Reihe von Auswahlregeln, die die möglichen Übergänge einschränken

$$l_1 = l; \quad m_1 = -m \quad (2.25)$$

$$n_f = n_2; \quad l_f = l_2; \quad m_f = m_2 \quad (2.26)$$

$$\text{bzw.} \quad \vec{k}_f^e = \vec{k}_z^e \quad (2.27)$$

für Einfang und Ionisation im ersten Schritt (2.25), für Ionisation im zweiten

Schritt (2.26) und für Einfang im zweiten Schritt (2.27). Diese beziehen sich jeweils auf das “inaktive” zweite Elektron. Die Auswahlregeln (2.25) zeigen, dass im ersten Übergang höchstens Anregung in solche Zustände des He^+ -Ions eine Rolle spielt, in denen sich nur die Hauptquantenzahl ändert, während die winkelabhängige Struktur der Zustände erhalten bleibt, die durch Drehimpuls- und magnetische Quantenzahlen beschrieben wird. Im zweiten Übergang gibt es bei Ionisation des “aktiven” Elektrons keinen Beitrag durch Anregung des “inaktiven” zweiten Elektrons in höhere Wasserstoffzustände und bei Einfang des “aktiven” Elektrons tragen nur solche Kontinuumszustände des “inaktiven” zweiten Elektrons bei, die denen des Endzustandes des ionisierten Elektrons entsprechen. Für die gesamte Transferionisation unter Berücksichtigung beider Wege hat man

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)}(\vec{q}) \approx & \frac{1}{2} \sum_{n_1 l_1 m_1} \left[\int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e t_{c2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \right. \\ & \left. + \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2 l_2 m_2} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

Die Einschrittbeiträge $t_{xj}(\vec{q}_{jr})$ faktorisieren in Ein-Elektronen-Beiträge $\tau_{xj}(\vec{q}_{jr})$. Je nach Ansatz, den man zur Beschreibung des Zwei-Elektronen-Problems wählt, bekommt man für den ersten Schritt

1. mit dem CI-Ansatz

$$\begin{aligned} t_{c1}(\vec{q}_{1d}) &= \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \tilde{N}_{zd} \sqrt{2} \tau_{c1}^{(nl-m)He}(\vec{q}_{1d}) \\ t_{I1}(\vec{q}_{1k}) &= \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \sqrt{2} \tau_{I1}^{(nlm)He}(\vec{q}_{1k}) \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \tau_{c1}^{(nl-m)He}(\vec{q}_{1d}) &= \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zd}) \cdot \vec{R}} \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{ep} | (nl-m)_{He} \rangle \\ \tau_{I1}^{(nlm)He}(\vec{q}_{1k}) &= \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}} \langle (\vec{k}_f^e) | v_{ep} | (nlm)_{He} \rangle \end{aligned} \quad (2.30)$$

2. mit dem wasserstoffähnlichen Ansatz: entspricht (2.29) mit den zusätzlichen Bedingungen $\delta_{1n} \delta_{0l} \delta_{0m}$ und $c_{10} = 1$. Er enthält also nur einen Summanden.

3. mit dem HF-Ansatz: der Beitrag entspricht ebenfalls (2.29) mit den zusätzlichen Bedingungen $\delta_{1n}\delta_{0l}\delta_{0m}$ und $c_{10} = 1$.

4. mit dem Eckart-Ansatz

$$\begin{aligned}
t_{c1}(\vec{q}_{1d}) &= \sqrt{2} \tilde{N}_{zd} N_{\alpha\beta} [r^{2,1/\beta,2}(n_1 10) \tau_{c1}^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{q}_{1d}) \\
&\quad + r^{2,1/\alpha,2}(n_1 10) \tau_{c1}^{(100)_{He}^\beta}(\vec{q}_{1d})] \\
t_{I1}(\vec{q}_{1k}) &= \sqrt{2} N_{\alpha\beta} [r^{2,1/\beta,2}(n_1 10) \tau_{I1}^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{q}_{1k}) \\
&\quad + r^{2,1/\beta,2}(n_1 10) \tau_{I1}^{(100)_{He}^\beta}(\vec{q}_{1k})] \quad (2.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tau_{c1}^{(100)_{He}^\gamma}(\vec{q}_{1d}) &= \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zd}) \cdot \vec{R}} \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{ep} | (100)_{He}^\gamma \rangle \\
\tau_{I1}^{(100)_{He}^\gamma}(\vec{q}_{1k}) &= \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}} \langle (\vec{k}_f^e) | v_{ep} | (100)_{He}^\gamma \rangle \quad (2.32)
\end{aligned}$$

und für den zweiten Schritt

$$\begin{aligned}
t_{I2}(\vec{q}_{2d}) &= \tilde{N}_{zd} \tau_{I2}^{(n_1 l m)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \\
t_{c2}(\vec{q}_{2k}) &= \tau_{c2}^{(n_1 l m)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) \quad (2.33)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tau_{c2}^{(n_1 l m)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) &= \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_{zk} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}'} \frac{1}{2} \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{ep} + v_{et} | (n_1 l - m)_{He^+} \rangle \\
\tau_{I2}^{(n_1 l m)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) &= \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_{zd} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}'} \frac{1}{2} \langle \vec{k}_f^e | v_{ep} + v_{et} | (n_1 l m)_{He^+} \rangle \quad (2.34)
\end{aligned}$$

Der Faktor \tilde{N}_{zd} ist eine Konstante, die aus der Normierung der Zwischenzustände resultiert⁵.

2.3.3 Reduktion der Zwischenzustände durch Vernachlässigung von Relaxation

Das Matrixelement (2.28) enthält trotz der Auswertung der Auswahlregeln eine unendliche Summe an Zwischenzuständen, die man reduzieren will. Eine Möglichkeit in dieser Richtung bietet der folgende Sachverhalt:

⁵Siehe dazu Abschnitt B im Anhang.

falls die Stoßzeit ($\sim v$) kleiner ist, als die Reaktionszeit des Systems ($\sim v_e$), kann die Relaxation des zweiten Elektrons in einen stationären Zustand vernachlässigt werden.

Eine Abschätzung, wie gut diese Näherung ist, liefert ein Vergleich der Geschwindigkeit v_e mit der die Elektronen auf Änderungen der elektronischen Dichte reagieren, mit der Stoßgeschwindigkeit v . Ein vernünftiges Maß für v_e ist die mittlere Bahngeschwindigkeit der Elektronen, die im $He(1s^2, ^1S)$ bei $v_e \approx 1$ a.u. liegt. Ein Projektil dieser Geschwindigkeit entspricht der Stoßenergie von $T_{kin}^{Projektile} = 25 \frac{keV}{amu}$ [14]. Im betrachteten Energiebereich sollte daher diese Annahme vertretbar sein.

Man kann dies auch so ausdrücken: erfolgt der Übergang so schnell, daß sich das im Heliumatom verbleibende Elektron nicht adiabatisch an die sich ändernde Situation anpassen kann, kann man annehmen, dass sich der elektronische Zustand nicht ändert und damit die Struktur des Orbitals erhalten bleibt. Man ersetzt also in Gleichung (2.28) $|(n_1 l \pm m)_{He^+}\rangle$ durch $|(nl \pm m)_{He}\rangle$ und berücksichtigt nur die Zustände, für die gilt: $n_1 = n$. Die Summe über n_1 bricht zusammen und man hat für CI- und HF-Ansatz

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)} &\approx \frac{1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \tilde{N}_{zd}^2 \int d\vec{K}_{zd} \tau_{c1}^{(nl-m)_{He}}(\vec{q}_{1d}) \tau_{I2}^{(nlm)_{He}}(\vec{q}_{2d}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \int d\vec{K}_{zk} \tau_{I1}^{(nlm)_{He}}(\vec{q}_{1k}) \tau_{c2}^{(nl-m)_{He}}(\vec{q}_{2k}) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \int d\vec{K}_{zk} t_{c2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) + \int d\vec{K}_{zd} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \right\} , \end{aligned} \quad (2.35)$$

beziehungsweise für den Eckart-Ansatz

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)} &\approx \frac{\sqrt{2}}{2} \tilde{N}_{zd}^2 N_{\alpha\beta} \left[\int d\vec{K}_{zd} \left\{ \tau_{c1}^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{q}_{1d}) \tau_{I2}^{(100)_{He}^\beta}(\vec{q}_{2d}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \tau_{c1}^{(100)_{He}^\beta}(\vec{q}_{1d}) \tau_{I2}^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{q}_{2d}) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \int d\vec{K}_{zk} \left\{ \tau_{I1}^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{q}_{1k}) \tau_{c2}^{(100)_{He}^\beta}(\vec{q}_{2k}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \tau_{I1}^{(100)_{He}^\beta}(\vec{q}_{1k}) \tau_{c2}^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{q}_{2k}) \right\} \right] . \end{aligned} \quad (2.36)$$

Das heißt also, dass alle Beiträge durch Überlappung von möglichen Zwischenzu-

ständen mit dem Zustand des nicht aktiven Elektrons vernachlässigt werden.

2.3.4 Berücksichtigung der internuklearen Wechselwirkung durch Übergang ins Stoßparameterbild

Die internukleare Wechselwirkung läßt sich im Anwendungsbereich der Eikonalnäherung durch Multiplikation der Übergangsamplitude mit einem Phasenfaktor

$$G(b) = e^{-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dZ V_{PT}(R)} \quad (2.37)$$

berücksichtigen. Hier ist Z die Komponente des internuklearen Abstandes \vec{R} in Richtung des einfallenden Projektilstromes, b ist der Stoßparameter und v ist die initiale Relativgeschwindigkeit der Nukleonen, also die Geschwindigkeit des Projektils. Für den Fall einer reinen Coulomb-Wechselwirkung ist dieser Phasenfaktor

$$G(b) = b^{2i\nu} \quad . \quad (2.38)$$

Z_T, Z_P sind Projektil- und Targetladung und $\nu = \frac{Z_P Z_T}{v}$. Der Übergang ins Stoßparameterbild wird so vollzogen:

McDowell und Coleman [10] haben gezeigt, daß die semiklassische Formulierung für den Energiebereich, in dem die Eikonalnäherung gültig ist, eine sehr gute Näherung an die quantenmechanische Formulierung darstellt. Aus der Bedingung, dass die jeweils berechneten Wirkungsquerschnitte identisch sind, folgt der Zusammenhang zwischen der Übergangsamplitude für die gesamte Transferionisation $A(\vec{b})$ und dem T-Matrixelement $T(\vec{\eta})$ zu

$$A(\vec{b}) = \frac{1}{v} \frac{1}{(2\pi)^2} \int e^{i\vec{\eta}\vec{b}} T(\vec{\eta}) d\vec{\eta} \quad (2.39)$$

und

$$T(\vec{\eta}) = v \int e^{-i\vec{\eta}\vec{b}} A(\vec{b}) d\vec{b} \quad . \quad (2.40)$$

$A(\vec{b})$ ist die Fouriertransformierte von $T(\vec{\eta})$ ⁶. So transformieren sich die T-Matrixelemente bezogen auf den Gesamtübergang. Die Herleitung dieser Gleichung

⁶Siehe [23]

wird im Anhang (D) im Detail ausgeführt.

$\vec{\eta}$ ist eine Funktion von \vec{q} und zwar die Komponente des Impulsübertrags senkrecht zur Einfallrichtung des Projektils, $\vec{\eta} = \vec{q}_{||} - \vec{q}$. Führt man einen Wechsel der Integrationsvariablen durch, $\vec{q}_{jr} \rightarrow \vec{\eta}_{jr} = \vec{q}_{jr||} - \vec{q}_{jr}$ und $\vec{K}_{zr} \rightarrow \vec{\eta}_{1r} = \vec{q}_{1r||} - (\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zr})$ und berücksichtigt, dass $\vec{\eta} = \vec{\eta}_{1r} + \vec{\eta}_{2r}$, wird deutlich, dass (2.35) die Struktur zweier Faltungen von $t_{cj}(\vec{\eta}_{jr})$ und $t_{Ij}(\vec{\eta}_{jr})$ hat

$$\tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)} = \frac{1}{2} \left(\int d\vec{\eta}_{1k} t_{c2}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{1k}) t_{I1}(\vec{\eta}_{1k}) + \int d\vec{\eta}_{1d} t_{I2}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{1d}) t_{c1}(\vec{\eta}_{1d}) \right) \quad (2.41)$$

Die Fouriertransformierte einer Faltung ist proportional zum Produkt der Fouriertransformierten der gefalteten Funktionen, was bei einer weiteren Änderung der Integrationsvariablen $\vec{\eta}_{2r} = \vec{\eta} - \vec{\eta}_{1r}$ sofort auffällt

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ci}(\vec{b}) &= \frac{1}{v} \frac{1}{2(2\pi)^2} \left(\int d\vec{\eta}_{1k} \int d\vec{\eta}_{2k} t_{c2}(\vec{\eta}_{2k}) t_{I1}(\vec{\eta}_{1k}) e^{i(\vec{\eta}_{1k} + \vec{\eta}_{2k}) \cdot \vec{b}} \right. \\ &\quad \left. + \int d\vec{\eta}_{1d} \int d\vec{\eta}_{2d} t_{I2}(\vec{\eta}_{2d}) t_{c1}(\vec{\eta}_{1d}) e^{i(\vec{\eta}_{1d} + \vec{\eta}_{2d}) \cdot \vec{b}} \right) . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Die Struktur dieses T-Matrixelementes legt nahe, die Einschnittanteile der Amplitude $\tilde{A}_{ci}(\vec{b})$ mit den stoßparameterabhängigen Übergangsamplituden für Ionisation $a_{Ij}(\vec{b})$ und Einfang $a_{cj}(\vec{b})$ zu identifizieren

$$\tilde{A}_{ci}(\vec{b}) = \frac{1}{2} \left(a_{c2}(\vec{b}) a_{I1}(\vec{b}) + a_{c1}(\vec{b}) a_{I2}(\vec{b}) \right) . \quad (2.43)$$

Damit läßt sich das Transformationsverhalten für die Einschnittbeiträge ableiten zu

$$a_{jr}(\vec{b}) = \frac{1}{(v(2\pi)^2)^{\frac{1}{2}}} \int e^{i\vec{\eta}_{jr} \cdot \vec{b}} t_{jr}(\vec{\eta}) d\vec{\eta} . \quad (2.44)$$

Der Übergang ins Stoßparameterbild ist nun vollzogen. Multiplikation von (2.42) mit dem Phasenfaktor $G(b) = b^{2i\nu}$ liefert die Übergangsamplitude für die Transferionisation, mit Berücksichtigung der internuklearen Wechselwirkung

$$\tilde{a}_{ci}(\vec{b}) = \tilde{A}_{ci}(\vec{b}) b^{2i\nu} . \quad (2.45)$$

Vor dem Hintergrund der nahezu vollständigen Entkoppelung der Übergänge im

Bild des IEM erscheint eine weitere Annahme plausibel: die Wechselwirkungen, die einen bestimmten Übergang (Ionisation oder Einfang eines Elektrons) vermitteln, hängen in ihrer Stärke nicht davon ab, ob der Übergang im ersten oder im zweiten Schritt erfolgt:

$$v_{I1} \approx v_{I2} \equiv v_I \quad (2.46)$$

$$v_{c1} \approx v_{c2} \equiv v_c \quad , \quad (2.47)$$

Dann folgt auch, dass die Ein-Elektronen-Beiträge $\tau_{xj}(\vec{q}_{jr})$ für diesen Übergang gleich sind

$$\begin{aligned} \tau_{c1}(\vec{q}_{jr}) &= \tau_{c2}(\vec{q}_{jr}) \equiv \tau_c(\vec{q}_{jr}) \\ \tau_{I1}(\vec{q}_{jr}) &= \tau_{I2}(\vec{q}_{jr}) \equiv \tau_I(\vec{q}_{jr}) \quad . \end{aligned} \quad (2.48)$$

Diese Annahme vereinfacht insbesondere den Ausdruck für die Übergangsamplitude, so dass sich die Anzahl der auszuführenden Summationen halbiert. Übergangsmatrixelement und Übergangsamplitude erhalten bezogen auf den CI-Ansatz die Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)} &= \frac{1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \tilde{N}_{zd}^2 \sqrt{2} \int d\vec{\eta}_{2d} \tau_c^{(nl-m)_{He}}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{2d}) \tau_I^{(nlm)_{He}}(\vec{\eta}_{2d}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \int d\vec{\eta}_{2k} \tau_I^{(nlm)_{He}}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{2k}) \tau_c^{(nl-m)_{He}}(\vec{\eta}_{2k}) \end{aligned}$$

und

$$\tilde{a}_{ci}(\vec{b}) = \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} a_c^{(nl-m)_{He}}(\vec{b}) a_I^{(nlm)_{He}}(\vec{b}) b^{2i\nu} \quad (2.49)$$

Im wasserstoffähnlichen Fall, als auch bei Hartree-Fock reduziert sich die Summe auf lediglich einen Term mit $\delta_{n1} \delta_{l0} \delta_{m0}$ und $c_{10} = 1$. Die Auswertung für den

Eckart-Ansatz liefert

$$\begin{aligned}
\tilde{T}_{\alpha\beta}^{(DS)}(\vec{q}) = & N_{\alpha\beta} \frac{\sqrt{2}}{2} \left\{ \tilde{N}_{zd}^2 \int d\vec{\eta}_{2d} [\tau_c^{(100)\alpha_{He}}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{2d}) \tau_I^{(100)\beta_{He}}(\vec{\eta}_{2d}) \right. \\
& + \tau_c^{(100)\beta_{He}}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{2d}) \tau_I^{(100)\alpha_{He}}(\vec{\eta}_{2d})] \\
& + \int d\vec{\eta}_{2k} [\tau_I^{(100)\alpha_{He}}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{2k}) \tau_c^{(100)\beta_{He}}(\vec{\eta}_{2k}) \\
& \left. + \tau_I^{(100)\beta_{He}}(\vec{\eta} - \vec{\eta}_{2k}) \tau_c^{(100)\alpha_{He}}(\vec{\eta}_{2k})] \right\} \quad (2.50)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_{ci}(\vec{b}) = & \sqrt{2} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} N_{\alpha\beta} \left[a_c^{(100)\alpha_{He}}(\vec{b}) a_I^{(100)\beta_{He}}(\vec{b}) \right. \\
& \left. + a_c^{(100)\beta_{He}}(\vec{b}) a_I^{(100)\alpha_{He}}(\vec{b}) \right] b^{2i\nu} \quad , \quad (2.51)
\end{aligned}$$

da dann

$$\tilde{a}_{c1I2}(\vec{b}) = \tilde{a}_{I1c2}(\vec{b})$$

ist.

Um zu einer Formulierung zu kommen, die derjenigen von Crothers (1.96) analog ist, bildet man das Amplitudenquadrat von (2.43) und vernachlässigt die Interferenzterme. So erhält man den von Crothers et al. angegeben Ausdruck multipliziert mit dem Gewichtungsfaktor und dem Faktor $\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}
P_{ci} = & \frac{1}{g(E, \overline{E}_z)^2} \tilde{P}_{ci} = \frac{1}{g(E, \overline{E}_z)^2} |\tilde{A}_{ci}(\vec{b})|^2 \\
\approx & \frac{1}{g(E, \overline{E}_z)^2} \frac{1}{2} \left(|a_{c2}(\vec{b})|^2 |a_{i1}(\vec{b})|^2 + |a_{c1}(\vec{b})|^2 |a_{i2}(\vec{b})|^2 \right) \quad .
\end{aligned}$$

Der Faktor $\frac{1}{2}$ wird durch die Näherung des vollständigen Satzes an Zwischenzuständen durch zwei vollständige Sätze an Zwischenzuständen ins Spiel gebracht, in denen sich das aktive Elektron nach einem ersten Übergang entweder gebunden im Wasserstoffatom oder im Kontinuum befindet (2.13).

2.4 Berechnung der Einfangkompente

Die Übergangsamplituden der Eielektronenbeiträge für den Einfang wurden im Rahmen der CDW-Näherung mit dem von Belkic, Gayet und Salin publizierten Code berechnet [4], [5], [6].

Die Struktur der Ein-Elektronenbeiträge $\tau_c^{(nlm)H_e}(\vec{q}_{jr})$ in (2.48) ist störungstheoretisch von erster Ordnung, falls, wie dort angegeben, als Endzustand des Übergangs ein reiner Wasserstoffzustand angesetzt wird. Bei der CDW-Näherung handelt es sich nicht um eine Näherung in erster Ordnung im Sinne der Bornschen Reihenentwicklung: die Wellenfunktion der in der Übergangsamplitude eingeschlossenen asymptotischen Zustände (1.92) enthält, wie bereits in Abschnitt (1.4.3) beschrieben, auch Anteile des Kontinuums in der Wellenfunktion und geht damit über die erste Ordnung hinaus. Die Gültigkeit der hier gemachten Näherungen bleibt prinzipiell davon unberührt, da die Entkopplung der Übergänge erhalten bleibt, denn die Änderung betrifft nur den Anteil der Wellenfunktion, der von den Koordinaten des eingefangenen Elektrons abhängt.

In dem verwendeten Code wird die Übergangsamplitude $a_{if}(\vec{b})$ als Fouriertransformierte des Übergangs-Matrixelements $t_{if}(\vec{\eta})$ berechnet. Ausgehend von der Prior-Formulierung (1.93) hat man nach einer Variablentransformation

$$\begin{aligned}
t_{if}^-(\vec{\eta}) &= N\left(\frac{Z'_T}{v}\right) N\left(\frac{Z_P}{v}\right) I_f^\beta(\vec{\eta}) J_i^\alpha(\vec{\eta}) \\
I_f^\beta &= \int d\vec{s} e^{i\vec{\rho}_P \cdot \vec{s}} \phi_f^{\beta*}(\vec{s}) \nabla_s F\left(i\frac{Z_P}{v}, 1, i v s + \vec{v} \cdot \vec{s}\right) \\
J_i^\alpha &= \int d\vec{x} e^{i\vec{\rho}_T \cdot \vec{x}} F\left(i\frac{Z'_T}{v}, 1, i v x + \vec{v} \cdot \vec{x}\right) \nabla_x \varphi_i^\beta(\vec{x}) \\
\rho_{P/T} &= \pm\vec{\eta} - \left(\frac{v}{2} \pm \frac{(\epsilon_i - \epsilon_f)}{v}\right) \hat{e}_z \\
N\left(\frac{Z_k}{v}\right) &= e^{\frac{\pi Z_k}{2}} \Gamma\left(1 - i\frac{Z_k}{v}\right); \quad k = P, T \quad , \quad (2.52)
\end{aligned}$$

wobei die Ladung Z'_T gegeben ist durch (1.94). Hierbei bezeichnet $\varphi_i^\beta(\vec{x})$ den gebundenen Zustand des Elektrons im Heliumatom, der das Elektron vor dem Stoß beschreibt, und ϕ_f^β den Zustand des nun im atomaren Wasserstoff gebundenen eingefangenen Elektrons nach dem Stoß.

Entwickelt man den Ortsanteil des Ein-Teilchen-Orbitals nach Slater-ähnlichen

Orbitalen (STOs⁷), läßt sich ein großer Anteil der Berechnungen analytisch ausführen, wenn man die STOs in parabolischen Koordinaten ausdrückt. Dann lassen sich alle Integrationen über die parabolischen Koordinaten (ϕ, η, ξ) in den Coulombintegralen, die STOs enthalten, I_f^β und J_i^α , abwickeln, da es sich hier samt und sonders um bekannte Integrale handelt. Konkret treten hier auf

- bei der Integration über die parabolische Koordinate ϕ Besselintegrale⁸,
- bei der Integration über die parabolische Koordinate η ein Integral der Formelsammlung von Gradstheyn und Ryzhik [77],
- bei der Integration über die parabolische Koordinate ξ ein Nordsiekintegral [79].

Daher ist die Anwendbarkeit des Codes an die Bedingung geknüpft, die Ein-Teilchen-Orbitale in Form von STOs darzustellen und außerdem an den Energiebereich, in dem die Orbitalgeschwindigkeiten des Elektrons vor und nach dem Stoß kleiner als die Stoßgeschwindigkeit sind. Ein Kriterium hierfür ist

$$E_P \left[\frac{keV}{Nukleon} \right] > 50 \sup\{|\epsilon_i| |\epsilon_f|\} \quad . \quad (2.53)$$

Hier ist darauf zu achten, dass die Orbitalenergien des elektronischen Anfangs- und des Endzustands, ϵ_i und ϵ_f , hier in atomaren Einheiten angegeben werden müssen. Diese Bedingung ist bei den betrachteten Stoßenergien sehr gut erfüllt. Details findet man in [4], [5], [6].

Die Winkelabhängigkeit der Amplitude für den Einfang beschränkt sich auf einen Phasenfaktor, der nur von den magnetischen Quantenzahlen der Zustände vor und nach dem Einfang abhängt

$$a_c^{nlm}(\vec{b}) = a_c^{nlm}(b) e^{i(m-m_f)\varphi_b} \quad . \quad (2.54)$$

2.4.1 Technische Aspekte

Die Berechnung der Einfangsamplitude erfordert sehr viele numerische Verfahren, die in der angegebenen Referenz beschrieben wurden. Hier werden nur sol-

⁷Slatertype Orbitals

⁸siehe [77], §7.421/4, §8.941/5, §8.471/1

che Aspekte erwähnt, welche den Zuschnitt des Codes auf die auszuführenden Berechnungen betreffen.

Die Berechnung der Einfangsamplitude erfordert eine Fouriertransformation für den Übergang aus dem Streuwinkelbild in das Stoßparameterbild. Die Integrationen, die im Rahmen der Fouriertransformation auszuführen sind, beschränken sich auf die Integration über den Impulsübertrag senkrecht zur Einfallrichtung η , da die Integration über den winkelabhängigen Anteil analytisch ausgeführt werden kann. Sie wird mit Hilfe einer Gauss-Laguerre-Integration berechnet, die für die Rechnungen in dieser Arbeit bezüglich der Sensitivität des Ergebnisses gegenüber der Anzahl und der Lage der Stützstellen optimiert wurde. Die Güte der Darstellung einer Funktion durch ein Fourierintegral wird durch den praktisch berücksichtigten Integrationsbereich, der eigentlich von $-\infty$ bis $+\infty$, hier aber aufgrund der Symmetrieeigenschaften der Funktion von 0 bis $+\infty$ läuft, bestimmt, und setzt voraus, dass die zu transformierende Funktion bis zur Integrationsgrenze gegen Null abfällt. Dies erfordert die Berücksichtigung sehr kleiner Amplitudenwerte, so dass die Grenzen der numerischen Darstellbarkeit zum Teil überschritten werden. Eine Strategie, die hier verfolgt wird, beruht auf dem Kenntnis des asymptotischen Verhaltens der stoßparameterabhängigen Wahrscheinlichkeit $P(b)$ und darauf, dass die Hauptbeiträge zur Fouriertransformation aus dem Bereich für kleine b kommen. Der Bereich, in dem numerisch induzierte Oszillationen auftreten, wird einfach durch den bekannten asymptotischen linearen Abfall in der halblogarithmischen Darstellung $\lim_{b \rightarrow \infty} P(b) \sim e^{-kb}$ auf der Amplitudenebene ersetzt, so dass

$$a(b) = A^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{kb}{2}} (\cos(\omega b + \varphi_c); \sin(\omega b + \varphi_c)) \quad . \quad (2.55)$$

Der Exponent k , der die Stärke des exponentiellen Abfalls definiert, läßt sich aus dem logarithmischen Abfall von $P(b)$ im bereits asymptotischen Bereich vor der Stelle b_{opt} bestimmen, an der die Umstellung erfolgt, gemäß

$$k = -\frac{\Delta \ln(P(b))}{\Delta b} \quad , \quad (2.56)$$

während die Variable ω aus der Lage der Punkte gleicher Phase ermittelt werden kann. Die Amplitude der Schwingung A wird, ebenso wie die Nullphase φ_c aus den Anschlußbedingungen an der Stelle gewonnen, an der die Berechnung von

$P(b)$ umgestellt wird auf den nurmehr analytisch vorgegebenen exponentiellen Abfall

$$A = e^{k b_{opt}} P(b_{opt}) \quad (2.57)$$

$$\varphi_c = \arccos \left[\frac{e^{\frac{k b_{opt}}{2}}}{A^{\frac{1}{2}}} \operatorname{Re}(a(b_{opt})) \right] - \omega b_{opt} \quad . \quad (2.58)$$

2.5 Berechnung der Ionisationskomponente

Die vom Impuls des emittierten Elektrons \vec{k}^e und dem Stoßparameter abhängige Übergangsamplitude $a_I^{nlm}(\vec{b}, \vec{k}^e)$ für die Ionisation wird aus dem T-Matrixelement⁹ $t_I^{nlm}(\vec{\eta}, \vec{k}^e)$ berechnet, das in erster Bornscher Näherung [10] angegeben werden kann zu

$$t_I^{nlm}(\vec{\eta}, \vec{k}^e) = \frac{4\pi}{q^2} \int d\vec{x} \chi_{k^e}^*(\vec{x}) e^{i\vec{q}\vec{x}} \varphi^{nlm}(\vec{x}) \quad . \quad (2.61)$$

Ihre Berechnung basiert auf einem Programmcode, der mir von A. Salin freundlicherweise zur Verfügung gestellt wurde und den ich meinen Bedürfnissen entsprechend weiter entwickelt habe. Details hierzu finden sich in der Arbeit von Salin zur Ionisation [86]. In den Rechnungen, die dem Programmcode zugrunde liegen, wird davon ausgegangen, dass

- es sich bei den Helium-Ein-Teilchen-Orbitalen um Hartree-Fock-Orbitale der Form

$$\varphi^{nlm}(\vec{x}) = \frac{u_{nl}(x)}{x} Y_{lm}(\hat{x}) \quad (2.62)$$

handelt

⁹ Vom Projektil wird der Impuls

$$\vec{q} = q (\cos(\varphi_q) \sin(\theta_q), \sin(\varphi_q) \sin(\theta_q), \cos(\theta_q)) = \vec{K}_\alpha - \vec{K}_\beta = \vec{q}_{||} - \vec{\eta} \quad (2.59)$$

übertragen. Für die Komponenten $\vec{q}_{||}$ und $\vec{\eta}$ gilt mit der Annahme kleiner Impulsüberträge und Streuwinkel $\theta_P \ll 1$, $|\vec{K}_\alpha| \approx |\vec{K}_\beta|$

$$|\vec{q}_{||}| = \frac{\epsilon_i - E_e}{v} \quad |\vec{\eta}| = \mu v \sin(\theta_p), \quad E_e = \frac{k_e^2}{2} \quad . \quad (2.60)$$

- die Verzerrung der Wellenfunktion des emittierten Elektrons durch das geladene Projektil vernachlässigt werden kann: die Freisetzung eines Elektrons aus einem gebundenen Zustand des Targets wird als Anregung eines Elektrons in einen hochliegenden Eigenzustand des Targets aufgefasst.

Um zu gewährleisten, dass nur Übergänge aufgrund der Wechselwirkung zum Wirkungsquerschnitt beitragen, stellt Orthogonalität hinsichtlich des elektronischen Anfangszustands $\varphi^{nlm}(\vec{x})$ eine Anforderung an die Kontinuumwellenfunktion χ_{k^e} dar. Daher wählt man die Kontinuumwellenfunktion des emittierten Elektrons χ_{k^e} als Lösung der gleichen effektiven Target-Ein-Teilchen-Schrödinger-Gleichung zu positiver Energie.

Da der Programmcode speziell für Anfangszustände, die auf Hartree-Fock-Niveau beschrieben werden, geschaffen wurde, stellt die Implementierung des Hartree-Fock-Ansatzes (HF) kein Problem dar. Im Fall des Hartree-Fock-Ansatzes wird als effektives Targetpotential eine analytische Näherung an das Hartree-Fock-Potential verwendet, die auch in der Originalversion des Codes eingesetzt und von Opradolce et al. [81] vorgeschlagen wurde

$$V_{eT}^{HF}(x) = - \left(1 + (1 + 1.665x) e^{-3.36x} \right) \frac{1}{x} \quad . \quad (2.63)$$

Sein asymptotisches Verhalten wird durch die Ladung des einfachionisierten Heliumatoms für große Entfernungen vom Kern bestimmt

$$\lim_{x \rightarrow \infty} V_{eT}^{HF}(x) = -\frac{1}{x} \quad . \quad (2.64)$$

Da das Potential von der reinen Coulombform abweicht und in einen langreichweitigen Coulombanteil und einen kurzreichweitigen Nicht-Coulomb-Anteil zerlegbar ist, wird eine Partialwellenentwicklung für χ_{k^e} angesetzt [82], die mit Auswertung des Additionstheorems für Kugelflächenfunktionen angegeben werden kann zu

$$\chi_{k^e}^-(\vec{x}) = k_e^{-\frac{1}{2}} \sum_L i^L e^{-i\delta_L} \frac{u_{eL}}{x} \sum_M Y_{LM}^*(\hat{k}_e) Y_{LM}(\hat{x}) \quad . \quad (2.65)$$

Der Radialanteil der Wellenfunktion für das emittierte Elektron $u_{E_e L}(x)$ stellt also, ebenso wie derjenige für das anfänglich gebundene Elektron, eine Lösung

der radialen Schrödinger-Gleichung

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{L(L+1)}{x^2} - V(x) + k_e^2 \right] u_{E_e L}(x) = 0 \quad (2.66)$$

dar und wird so gewählt, dass sein asymptotisches Verhalten durch

$$\lim_{x \rightarrow \infty} u_{E_e L}(x) = \left(\frac{2}{\pi k_e} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(k_e x - \frac{L\pi}{2} - \frac{1}{k_e} \ln(2k_e x) + \sigma_L(E_e) + \xi_L(E_e) \right) \quad (2.67)$$

beschrieben werden kann. Hier ist σ_L die Phasenverschiebung aufgrund des Coulombpotentials und ξ_L die Phasenverschiebung aufgrund des kurzreichweitigen Anteils. Die Kontinuumswellenfunktion χ_{k_e} genügt der Randbedingung einer einlaufenden Streuwelle und einer auslaufenden ebenen Welle $\chi_{k_e}^-$ und ist in üblicher Form auf der k_e -Skala normiert

$$\int \chi_{k'}^*(\vec{x}) \chi_k(\vec{x}) d\vec{x} = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad . \quad (2.68)$$

Für eine Targetbeschreibung, deren Ein-Teilchen-Orbitale auf HF-Basis konstruiert sind, kann man analog verfahren. Im Fall eines wasserstoffähnlichen Ansatzes ändert sich lediglich die Form des Potentials: hier handelt es sich um ein reines Coulombpotential und die Phasenverschiebung ξ_L , die durch den kurzreichweitigen Potentialanteil verursacht wird, fällt weg. Für den Eckart-Ansatz aber ist ein solcher Weg im Hinblick auf eine wünschenswert konsistente Verwendung des effektiven Ein-Teilchen-Potentials, welches aus den Orbitalenergien generiert werden könnte, ein Problem. Man hätte es dann nämlich mit zwei verschiedenen Potentialen zu tun, da sich die verwendeten Orbitalenergien unterscheiden. Deshalb wird hier anders verfahren. Da das emittierte Elektron in ausreichender Entfernung vom Kern ein abgeschirmtes Potential von $-\frac{Z}{x} = -\frac{1}{x}$ sieht, wird, um die Kontinuumswellenfunktion zu gewinnen, jenes als effektives Ein-Teilchen-Potential in der Schrödinger-Gleichung verwendet. Jetzt hat man ebenfalls ein reines Coulombproblem, dessen Lösung analytisch bekannt ist [15]. Anfangs- und Endzustand des Elektrons werden mit

$$\chi_{k_e}^o(\vec{x}) = \chi_{k_e}(\vec{x}) - \int d\vec{x}' \varphi^{nlm*}(\vec{x}') \chi_{k_e}(\vec{x}') \varphi^{nlm}(\vec{x}) \quad (2.69)$$

orthogonalisiert.

Einsetzen von (2.65) in (2.61), Entwicklung von $e^{i\vec{q}\vec{x}}$ nach Kugelflächenfunktionen

$$e^{i\vec{q}\vec{x}} = 4\pi \sum_{\lambda,\mu} i^\lambda j_\lambda(qx) Y_{\lambda\mu}(\hat{x}) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{q}) \quad , \quad (2.70)$$

Auswertung der Gauntformel¹⁰

$$\begin{aligned} \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{1m_i}(\hat{\mathbf{r}}) &= (-1)^m \int d\hat{\mathbf{r}} Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l-m}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{1m_i}(\hat{\mathbf{r}}) \\ &= \frac{(-1)^m}{\sqrt{4\pi}} \begin{bmatrix} l & \lambda & l_i \\ -m & \mu & m_i \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.71)$$

und die Abkürzung

$$\begin{bmatrix} L & \lambda & l \\ -M & \mu & m \end{bmatrix} = ((2L+1)(2\lambda+1)(2l+1))^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} L & \lambda & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & \lambda & l \\ -M & \mu & m \end{pmatrix} \quad ,$$

liefert das T-Matrixelement in erster Bornscher Näherung

$$\begin{aligned} t_I^{nlm}(\vec{q}, \vec{k}^e) &= \frac{(4\pi)^{\frac{3}{2}}}{q^2} \sum_{LM} \sum_{\lambda\mu} k_e^{-\frac{1}{2}} i^{-L} e^{i\sigma_L} Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{q}}) i^\lambda \\ &(-1)^M \begin{bmatrix} L & \lambda & l \\ -M & \mu & m \end{bmatrix} R_{\epsilon_{nl}L\lambda}(q) \end{aligned} \quad (2.72)$$

mit der Fourier-Bessel-Transformierten $R_{\epsilon_{nl}L\lambda}(q) = \int_0^\infty dx u_{E_e L}(x) j_\lambda(qx) u_{nl}(x)$.
Unter Berücksichtigung der Auswahlregeln $\mu + m - M = 0$ und¹¹

$$\int \frac{R_{\epsilon_{nl}L\lambda}(q)}{q^2} Y_{\lambda\mu}^*(\hat{\mathbf{q}}) e^{i\vec{\eta}\vec{b}} d\vec{\eta} = (-1)^\mu e^{-i\mu\varphi_b} 2\pi i^{|\mu|} \int \eta d\eta \frac{R_{\epsilon_{nl}L\lambda}(q)}{q^2} \tilde{P}_{\lambda(\mu)}(\theta_q) J_{|\mu|}(\eta b)$$

ergibt sich mit (2.44) daraus die Ionisationsamplitude zu

$$\begin{aligned} a_i^{nlm}(\vec{b}, \vec{k}^e) &= 2\pi \left(\frac{16\pi}{v} \right)^{\frac{1}{2}} (-1)^m k_e^{-\frac{1}{2}} \sum_L i^{-L} e^{i\sigma_L} \sum_M Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}^e) i^{|M-m|} e^{-i(M-m)\varphi_b} \\ &\sum_\lambda i^\lambda \begin{bmatrix} L & \lambda & l \\ -M & M-m & m \end{bmatrix} A_{L\lambda(M-m)}^{nl}(b, k^e) \end{aligned} \quad (2.73)$$

¹⁰In der Darstellung handelt es sich um Wigner -3j-Symbole.

¹¹Die Berechnung dieses Integrals kann im Anhang (E) nachgelesen werden.

Der Term $A_{L\lambda(M-m)}^{nl}(b, k^e)$ stellt die Hankeltransformierte von

$$\tau_{\lambda(M-m)}^{nl}(\eta) = \frac{R_{\epsilon_{nl}L\lambda}(q)}{q^2} \tilde{P}_{\lambda(M-m)}(\theta_q)$$

dar

$$\begin{aligned} A_{L\lambda M-m}^{nl}(b, k^e) &= \int \eta d\eta \frac{R_{\epsilon_{nl}L\lambda}(q)}{q^2} \tilde{P}_{\lambda(M-m)}(\theta_q) J_{|M-m|}(\eta b) \\ \tilde{P}_{\lambda\mu}(\theta) &= Y_{\lambda\mu}(\theta) e^{-i\mu\varphi} \quad . \end{aligned} \quad (2.74)$$

Sie hängt gemäß Fußnote (9), Kapitel 2 über

$$q = \sqrt{\frac{\Delta E}{v} + \eta^2}$$

von η ab.

2.5.1 Technische Aspekte

Die zur Berechnung von (2.73) in dem Programmcode eingesetzten numerischen Verfahren werden in [86] näher beschrieben. Die Anpassung des Codes an die Aufgabenstellung dieser Arbeit betrifft die Berechnung der Hankeltransformation: Da die Berechnung von (2.74) die Programmlaufzeit stark beansprucht, wurden verschiedene Methoden eingesetzt und verglichen:

- ein semianalytisches Verfahren, das von Miraglia et al. [85] entwickelt wurde
- die direkte Integration von (2.74) nach der Methode von Burlich und Stoer [83]

Das Konzept der semianalytischen Methode von Miraglia et al. [85] beruht auf folgender Strategie: man entwickelt die Funktion, deren Hankeltransformierte man sucht

$$\tau_{\mu}(\eta) = \int db b A_{\mu}(b) J_{\mu}(\eta b) = \sum_k c_k \mathcal{M}_{k\mu}(\eta) \quad , \quad (2.75)$$

nach einem Satz orthogonaler Funktionen, deren Hankeltransformierte man kennt

$$\mathcal{M}_{k\mu}(\eta) = \int db b \mathcal{L}_{k\mu}(b) J_{\mu}(\eta b) \quad (2.76)$$

und erhält dann die gesuchte Hankeltransformierte als Entwicklung nach den Hankeltransformierten des Funktionensystems

$$\begin{aligned} A_{\mu}(b) &= \int d\eta \eta \tau_{\mu}(\eta) J_{\mu}(\eta b) \\ &= \sum_k c_k \int d\eta \eta \mathcal{M}_{k\mu}(\eta) J_{\mu}(\eta b) = \sum_k c_k \mathcal{L}_{k\mu}(b) \quad . \end{aligned} \quad (2.77)$$

Das sind in diesem Fall die sogenannten Larmorfunktionen, die von Salin [86] zuerst verwendet wurden und deren Hankeltransformierte die Laguerrefunktionen multipliziert mit einem Polynom sind. Sie hängen von dem Parameter a ab, über den die Konvergenzgeschwindigkeit der Entwicklung beeinflußt werden kann, also

$$\begin{aligned} A_{L\lambda(M-m)}^{nl}(b, a) &= \sum_j A_j \mathcal{L}_{j(M-m)}(b, a) \\ \mathcal{L}_{j\mu}(b, a) &= b^{\mu} e^{-\frac{ab}{2}} L_j^{2\mu+1}(ab) \\ A_j^{\mu}(a) &= \frac{j!}{(j+2\mu+1)!} a^{2(\mu+1)} \int \mathcal{M}_{j\mu}^*(\eta, a) \tau_{\lambda(M-m)}^{nl}(\eta) \eta d\eta \end{aligned} \quad (2.78)$$

Der Vorteil dieses Verfahrens liegt in der Unabhängigkeit der Entwicklungskoeffizienten von dem Stoßparameter. Die Integration über η zur Berechnung der Entwicklungskoeffizienten wurde sowohl mit dem Verfahren von Burlisch und Storer [83] ausgeführt, als auch durch Interpolation des Integranden mit Splines und einer sich daran anschließenden, nun analytisch durchführbaren Integration. Bei letzterer wurden sowohl Anzahl und Verteilung der Stützstellen in Abhängigkeit von der Ordnung der Larmorfunktionen j und vom Betrag der Impulskomponente η variiert. Darüberhinaus wurde ebenfalls eine Gauss-Laguerre-Integration [84] eingesetzt. Vergleicht man diese Verfahren, so zeigt sich, dass die direkte Integration von (2.74), bedingt dadurch, dass sie für alle Stoßparameter durchgeführt werden muß, die größte Programmlaufzeit erfordert, während die Variationen des semianalytischen Verfahrens ungefähr die gleiche Zeit in Anspruch nehmen. Daher wurde in dieser Arbeit die Hankeltransformation mit einem semianalytischen Verfahren berechnet.

Weitere wesentliche Aspekte, die die Berechnung der Amplituden betreffen, sind

- die Anzahl der mitgenommenen Partialwellen in der Entwicklung
- die Anzahl der mitgenommenen Terme in der Entwicklung nach Larmorfunktionen.

Das Konvergenzverhalten beider Entwicklungen hängt von der elektronischen Emissionsenergie ab. Je höher die Energie des freigesetzten Elektrons ist, desto mehr Terme in der Entwicklung nach Larmorfunktionen als auch Partialwellen müssen berücksichtigt werden. Für eine Elektronenemissionsenergie von 1.0 keV wurde für alle drei Ansätze eine Anzahl von 33 Partialwellen mitgenommen, während 25 Terme in der Entwicklung nach Larmorfunktionen berücksichtigt wurden. Beide Entwicklungen sind damit auskonvergiert.

2.6 Die Extraktion der Observablen

Eine experimentell zugängliche und im Hinblick auf den c-KTI aussagekräftige Observable ist der differentielle Wirkungsquerschnitt. Man erhält ihn 5-fach differentiiell in der üblichen Form [10] zu

$$\frac{\partial^5 \sigma_{ci}}{\partial \Omega_p \partial \Omega_e \partial E_e} = k_e \frac{\mu^2}{(2\pi)^2} \frac{k_f}{k_i} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} |T_{ci}(\vec{\eta}, \vec{k}_e)|^2 d\varphi_\eta \quad . \quad (2.79)$$

Hier ist μ die reduzierte Masse des Systems (1.59). Die Gleichung (2.79) für den differentielle Wirkungsquerschnitt gilt im Schwerpunktsystem. Die Transformation ins Laborsystem gelingt nach Rille et al. [99], in dem man für kleine Streuwinkel θ_P in (2.79) die reduzierte Masse durch die Masse des Projektils m_P und den Impulsübertrag senkrecht zur Einschussrichtung $\eta = \mu \theta_P v$ durch $\eta = m_P \theta_P^L v$ ersetzt. Die Geschwindigkeit v steht für die Relativgeschwindigkeit zwischen Projektil und Target und entspricht für eine gegebene Stoßenergie E_P der Projektilgeschwindigkeit $v = \sqrt{2 m_P E_P}$.

Da eine durch Projektil mit nicht ausgerichtetem Spin induzierte Streureaktion rotationssymmetrisch um die Einfallsrichtung ist, wird der differentielle Wirkungsquerschnitt über den azimuthalen Streuwinkelanteil des Projektils φ_η integriert angegeben. Die Strategie (2.79) zu ermitteln, verläuft dann so: Die Über-

gangsamplitude für die Transferionisation (2.49) wird aus den Ein-Teilchen-Amplituden für einen Einfang und Ionisation berechnet.

Sie kann für einen Konfigurationsmischungsansatz, einen wasserstoffähnlichen und einen Hartree-Fock-Ansatz – letztere stellen Spezialfälle der für den Konfigurationsmischungsansatzes hergeleiteten Gleichung dar¹²– angegeben werden zu

$$\tilde{a}_{ci}^{CI}(\vec{b}, \vec{k}^e) = \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{(2l+1)^{\frac{1}{2}}} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} \sqrt{2} a_c^{(nl-m)_{He}}(\vec{b}) a_i^{(nlm)_{He}}(\vec{b}, \vec{k}^e) b^{2i\nu} \quad ,$$

beziehungsweise formuliert für den Eckart-Ansatz (2.51)

$$\begin{aligned} \tilde{a}^{Eck}(\vec{b}, \vec{k}^e) &= \sqrt{2} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} N_{\alpha\beta} \left[a_c^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{b}) a_i^{(100)_{He}^\beta}(\vec{b}, \vec{k}^e) \right. \\ &\quad \left. + a_c^{(100)_{He}^\beta}(\vec{b}) a_i^{(100)_{He}^\alpha}(\vec{b}, \vec{k}^e) \right] b^{2i\nu} \quad . \end{aligned}$$

Das T-Matrixelement gewinnt man als Fouriertransformierte der Übergangsamplitude

$$\tilde{T}_{ci}(\vec{\eta}, \vec{k}^e) = v \int \tilde{a}_{ci}(\vec{b}, \vec{k}^e) e^{-i\vec{\eta}\vec{b}} d\vec{b} \quad (2.80)$$

und erhält daraus den mit einem Faktor (2.22) $\frac{1}{g(E, E_z)^2}$ gewichteten Wirkungsquerschnitt für die Transferionisation. Die stoßparameterabhängige Amplitude lautet mit (2.73) und (2.54) und der Beschränkung auf Einfang in den Grundzustand für den wasserstoffähnlichen/HF-/CI-Ansatz

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{ci}^{CI}(\vec{b}, \vec{k}^e) &= \left(\frac{32\pi}{v} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{2\pi}{k^e \frac{1}{2}} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{(2l+1)^{\frac{1}{2}}} \sum_L i^{-L} e^{i\sigma_L} \\ &\quad \sum_M (-1)^m Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}^e) i^{|M-m|} e^{-iM\varphi_b} \\ &\quad \sum_\lambda i^\lambda \begin{bmatrix} L & \lambda & l \\ -M & M-m & m \end{bmatrix} \\ &\quad \times A_{L\lambda(M-m)}^{(nlm)}(b, k^e) a_c^{(nl-m)}(b) b^{2i\nu} \quad (2.81) \end{aligned}$$

¹²Im Fall des wasserstoffähnlichen und des Hartree-Fock-Ansatzes reduziert sich (2.80) in der üblichen Weise auf nur einen Term, wobei $\tilde{a}_{hyd/HF}(\vec{b}, \vec{k}^e) = \tilde{a}_{ci}(\vec{b}, \vec{k}^e) \delta_{n1} \delta_{l0} \delta_{m0}$ und $c_{10} = 1$.

und für den Eckart-Ansatz unter Ausnutzen von Drehimpulsalgebra

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{ci}^{Eck}(\vec{b}, \vec{k}^e) &= \left(\frac{32\pi}{v} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{2\pi}{k^e \frac{1}{2}} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} N_{\alpha\beta} \sum_L i^{-L} e^{i\sigma_L} \sum_M Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}^e) \\ & i^{|M|} e^{-iM\varphi_b} (-1)^M i^L (A_{LLM}^{(100)\alpha}(b, k^e) a_c^{(100)\beta}(b) \\ & + A_{LLM}^{(100)\beta}(b, k^e) a_c^{(100)\alpha}(b)) b^{2i\nu}, \end{aligned} \quad (2.82)$$

denn

$$\begin{bmatrix} L & \lambda & 0 \\ -M & M & 0 \end{bmatrix} = (-1)^M \delta_{L\lambda}. \quad (2.83)$$

Die Transformation ins Streuwinkelbild gemäß (2.80) liefert über das Fourierintegral den Faktor¹³

$$2\pi (-1)^{\tilde{m}} i^{|\tilde{m}|} J_{\tilde{m}}, \quad \tilde{m}^{CI} = M, \quad \tilde{m}^{Eck} = M \quad (2.84)$$

und damit haben die T-Matrixelemente die folgende Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{ci}^{CI}(\vec{\eta}, \vec{k}_e) &= (2\pi)^2 \left(\frac{32\pi v}{k^e} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{(2l+1)^{\frac{1}{2}}} \\ & \sum_L i^{-L} e^{i\sigma_L} \sum_M (-1)^{M+m} Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) i^{|M-m|} i^{|M|} e^{-iM\varphi_\eta} \\ & \sum_\lambda i^\lambda \begin{bmatrix} L & \lambda & l \\ -M & M-m & m \end{bmatrix} \mathcal{B}_{L\lambda(M-m)(M)}^{nlm}(\eta, k^e) \quad , \end{aligned} \quad (2.85)$$

mit

$$\mathcal{B}_{L\lambda\mu\tilde{m}}^{nlm}(\eta, k^e) = \int db J_{|\tilde{m}|}(\eta b) A_{L\lambda\mu}^{(nlm)}(b, k_e) a_c^{(nl-m)}(b) b^{2i\nu+1} \quad , \quad (2.86)$$

¹³Mit der Integraldarstellung der Besselfunktionen (E.1) im Anhang hat man

$$\begin{aligned} \int d\varphi e^{-i\omega \cos(\varphi-\varphi')} \cdot e^{-i\mu\varphi} &= \int d\varphi e^{i\omega \cos(\varphi-\varphi'-\pi)} \cdot e^{-i\mu\varphi} \\ &= e^{-i\mu(\varphi'+\pi)} J_{|\mu|}(\omega) \cdot 2\pi \cdot i^{|\mu|} = e^{-i\mu\varphi'} (-1)^\mu \cdot 2\pi \cdot i^{|\mu|} \cdot J_{|\mu|}(\omega) \quad . \end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{ci}^{Eck}(\vec{\eta}, \vec{k}_e) &= (2\pi)^2 \left(\frac{32\pi v}{k^e} \right)^{\frac{1}{2}} N_{\alpha\beta} \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2} \sum_L i^{-L} e^{i\sigma_L} \sum_M Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) \\ &\quad i^L e^{-iM\varphi_\eta} \tilde{\mathcal{B}}_{LLMM}^{100}(\eta, k^e) \end{aligned} \quad (2.87)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{B}}_{L\lambda\mu\tilde{m}}^{100}(\eta, k^e) &= \int db b^{2i\nu+1} J_{|\tilde{m}|}(\eta b) \\ &\quad \times \left(A_{L\lambda\mu}^{(100)\alpha}(b, k_e) a_c^{(100)\beta}(b) + A_{L\lambda\mu}^{(100)\beta}(b, k_e) a_c^{(100)\alpha}(b) \right) . \end{aligned}$$

Um den differentiellen Wirkungsquerschnitt anhand von Gleichung (2.79) zu gewinnen, ist zunächst das Quadrat von (2.85) und (2.87) zu bilden. Die sich daran anschließende Integration über den azimuthalen Streuwinkelanteil des Projektils φ_η liefert eine zusätzliche Auswahlregel für die magnetischen Quantenzahlen: $\tilde{m} = \tilde{m}'^{14}$. Da im Kleinwinkelstreubereich das Projektil vorwiegend am Elektron gestreut wird, ist infolge des Massenunterschieds zwischen Projektil und Elektron der Betrag des Projektilimpulses vor und nach dem Stoß ungefähr gleich. Der Wirkungsquerschnitt ist dann mit (2.79), der Setzung

$$\frac{1}{\tilde{g}(E, \overline{E}_z)^2} \equiv \frac{\tilde{N}_{zd}^2 + 1}{2g(E, \overline{E}_z)^2} , \quad (2.88)$$

¹⁴Die Auswahlregel entfernt die azimuthale Abhängigkeit im elektronischen Emissionsverhalten in (2.89) und (2.90), da $Y_{L',M}^*(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) = \tilde{P}_{L'}(\cos(\theta_e)) \tilde{P}_L(\cos(\theta_e))$, wobei $\tilde{P}_{\lambda\mu}(\theta) = Y_{\lambda\mu}(\theta) e^{-i\mu\varphi}$.

und $k_f \approx k_i$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^5 \sigma_{ci}}{\partial \Omega_p \partial \Omega_e \partial E_e}^{CI} &= \frac{32\pi}{\tilde{g}(E, \overline{E}_z)^2} \mu^2 v (2\pi)^2 \sum_{nn'} \sum_{ll'} c_{nl} c_{n'l'} \\
&\sum_{mm'} \frac{(-1)^{l-m+l'-m'}}{(2l+1)^{\frac{1}{2}} (2l'+1)^{\frac{1}{2}}} \sum_{LL'} i^{L'-L} e^{i(\sigma_L - \sigma_{L'})} \\
&\sum_M (-1)^{m+m'} Y_{L'M}^*(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) i^{|M-m|-|M-m'|} \\
&\sum_{\lambda\lambda'} i^{\lambda-\lambda'} \begin{bmatrix} L & \lambda & l \\ -M & M-m & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L' & \lambda' & l' \\ -(M) & M-m' & m' \end{bmatrix} \\
&\mathcal{B}_{L\lambda(M-m)M}^{nlm}(\eta, k^e) \mathcal{B}_{L'\lambda'(M-m')M}^{n'l'm'*}(\eta, k^e) \quad (2.89)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^5 \sigma_{ci}}{\partial \Omega_p \partial \Omega_e \partial E_e}^{Eck} &= \frac{32\pi}{\tilde{g}(E, \overline{E}_z)^2} \mu^2 v N_{\alpha\beta}^2 (2\pi)^2 \sum_{LL'} (-1)^{L'-L} e^{i(\sigma_L - \sigma_{L'})} \\
&\sum_M Y_{L'M}^*(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) \\
&\tilde{\mathcal{B}}_{LLMM}^{100*}(\eta, k^e) \tilde{\mathcal{B}}_{L'L'MM}^{100}(\eta, k^e) \quad , \quad (2.90)
\end{aligned}$$

beziehungsweise für den wasserstoffähnlichen und den Hartree-Fock-Ansatz

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^5 \sigma_{ci}}{\partial \Omega_p \partial \Omega_e \partial E_e}^{HF/HYD} &= \frac{32\pi}{\tilde{g}(E, \overline{E}_z)^2} \mu^2 v (2\pi)^2 \sum_{LL'} i^{L'-L} e^{i(\sigma_L - \sigma_{L'})} \\
&\sum_M Y_{L'M}^*(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) \\
&\mathcal{B}_{LLMM}^{100}(\eta, k^e) \mathcal{B}_{L'L'MM}^{100*}(\eta, k^e) \quad . \quad (2.91)
\end{aligned}$$

Der differentiellen Wirkungsquerschnitt wurde mit einer Programmstruktur ermittelt, die in ihrer ursprünglichen Form von A. Salin und R. Gayet stammt und von den Autoren zur Berechnung der Transferionisation im IPM eingesetzt wurde¹⁵. Diese Struktur wurde entsprechend (2.89), (2.90) und (2.91) erweitert.

¹⁵siehe dazu auch Kapitel 1.4.3 und die Referenz [69].

2.6.1 Technische Aspekte

Aus den Gleichungen (2.89), (2.90) und (2.91) ist erkennbar, dass die Laufzeit des Programms zur Errechnung des differentiellen Wirkungsquerschnitts stark von der Anzahl der berücksichtigten Partialwellen abhängt, und da das Integral im Rahmen der semianalytischen Berechnung der Hankeltransformierten als Entwicklung nach Laguerrefunktionen gegeben ist, auch von der Anzahl dieser Terme. Daher ist es eine wirkungsvolle Strategie, um die Rechenzeit zu begrenzen, möglichst viele Schritte parallel auszuführen. Die Umsetzung dieses Konzeptes führte zur Aufspaltung der elektronischen Energieschleife: Pro Durchlauf des Programms wird der differentielle Wirkungsquerschnitt für nur eine Elektronenemissionsenergie berechnet. Somit können alle Programmläufe nun gleichzeitig ausgeführt werden.

In jedem Programmdurchlauf wird als Input eine Vorstufe der Ionisationsamplitude $a_i(b, k^e)$, nämlich die stoßparameterunabhängigen Koeffizienten in der Entwicklung von $A_{L\lambda(M-m)}^{nl}(b, k^e)$ nach Laguerrefunktionen (2.78), und die Einfangsamplituden $a_c(b)$ eingelesen. $a_i(b, k^e)$ wird im Code selbst berechnet. Daraus wird der differentielle Wirkungsquerschnitt bestimmt. Die Berechnung des Integrals (2.86), beziehungsweise (2.88) erfolgt mit dem Verfahren von Burlisch und Stoer. Ein anderes Problem ist das Auftreten von Instabilitäten in der Asymptotik der Transferionisationswahrscheinlichkeit in Abweichung vom dort erwarteten exponentiellen Abfall. Die Ursache liegt in der Größenordnung der berechneten Daten, die an der Grenze des numerischen Darstellungsbereiches liegen. Um trotzdem eine gute Darstellung der beim Übergang ins Streuwinkelbild zu transformierenden Funktion durch das Transformationsintegral (2.85), beziehungsweise (2.87) zugewährleisten, wurde der exponentielle Abfall der differentiellen stoßparameterabhängigen Wahrscheinlichkeit $\frac{dP(b)}{d\Theta_e dE_e}$ vorgegeben, in vollständiger Analogie zur Strategie, die bei der Berechnung der Einfangswahrscheinlichkeit verfolgt wurde. Theoretisch dehnt sich der Integrationsbereich von $b_{min} = 0$ bis zu $b_{max} = +\infty$ aus, bei der praktischen Umsetzung jedoch, kann der oberen Integrationsgrenze b_{max} nur ein endlicher Wert zugewiesen werden. Um diesen von der Emissionsenergie abhängigen Wert richtig zu wählen, wurde der Integrationsbereich so weit ausgedehnt, bis das Ergebnis unabhängig von der gewählten oberen Grenze b_{max} ist.

Neben dem differentiellen Wirkungsquerschnitt wurde eine Reihe teilintegrierter Wirkungsquerschnitte und der totale Wirkungsquerschnitt berechnet. Die Integrationen wurden mit folgenden Standardmethoden durchgeführt:

- Gauss-Legendre
- Interpolation des Integranden mit Splines und anschließende nun analytisch durchzuführende Integration

Teil III

Dynamische Eigenschaften der Transferionisation

Inhalt dieses Teils ist die Ausarbeitung der dynamischen Charakteristika der Transferionisation. In zweierlei Hinsicht ist dies von großem Nutzen: einerseits wird so eine Grundlage zur Identifizierung der zur Transferionisation beitragenden Prozesse im Experiment geschaffen, andererseits liefert dies die Basis für ein Verständnis der experimentell beobachteten Emissionsmerkmale aus der Sicht der Erhaltungssätze. Dabei wird der Frage nachgegangen werden, ob sich aus den Erhaltungssätzen bereits Bedingungen ableiten lassen, die die Emission sämtlicher Emittenten He^{2+} , H^0 , e^- in die durch Einschuss- und Streurichtung des Projektils definierte Ebene erklären.

Zunächst werden in Kapitel 3 die zu erwartenden Impulsprofile für eine Transferionisation auf der Basis der Erhaltungssätze in einer allgemeinen Form abgeleitet. Im Anschluss daran behandelt Kapitel 4 die Beiträge zur Transferionisation in Einzeldarstellung unter Angabe ihrer dynamischen Charakteristika, also der sich aus den Erhaltungssätzen ableitenden Signaturen: zunächst werden diejenigen beschrieben, in denen Ionisation und Einfang durch zwei unabhängige Wechselwirkungen mit dem Projektil zustandekommen und anschließend diejenigen, in denen die maßgeblichen Wechselwirkungen auf interelektronischer Korrelation beruhen und die beiden elektronischen Übergänge insofern voneinander abhängen. Den Abschluss des Kapitels 4 bildet die nach dem Auftreten im Energiebereich geordnete Zusammenstellung möglicher Mechanismen nebst einer kurzen Zusammenfassung der vorhandenen Messungen.

Kapitel 3

Die Stoßdynamik

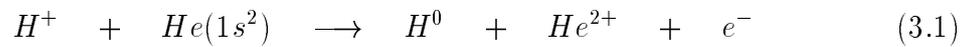
In den Experimenten zur Transferionisation am Stoßsystem ($H^+; He$) wurden differentielle Wirkungsquerschnitte gemessen. Um Rückschlüsse auf die zugrundeliegenden Mechanismen aus der Struktur der Messdaten ableiten zu können, ist die Dynamik des Prozesses eindeutig zu bestimmen. Dazu sind insgesamt 9 Freiheitsgrade experimentell zu ermitteln: je 3 Freiheitsgrade des Rückstoßions He^{2+} , des Wasserstoffatoms und des emittierten Elektrons. Da die Stoßdynamik die Gültigkeit der Impuls- und Energieerhaltungssätze impliziert, reduziert sich die Anzahl der zu bestimmenden Freiheitsgrade um 4 auf insgesamt 5: Mit der Messung von 5-fach-differentiellen Wirkungsquerschnitten hat man die Dynamik des Prozesses vollständig fixiert. Für den hier vorliegenden Fall, dass der Projektilstrahl nicht spinpolarisiert ist, ist der Wirkungsquerschnitt rotationssymmetrisch um die Einfallrichtung und man hat in Wirklichkeit 4-fach differentielle Querschnitte.

Ein solches kinematisch vollständiges Experiment wurde von Mergel [62] auf der Basis einer koinzidenten Messung des Impulsvektors des zurückgestoßenen Targetions und von zwei Impulskomponenten des Projektils mit der COLTRIMS-Technik durchgeführt. Die in dieser Arbeit berechneten Wirkungsquerschnitte, werden vorwiegend mit den Ergebnissen der Arbeit von Mergel verglichen. Sichtet man das weitere vorliegende experimentelle Datenmaterial, findet man Messungen an diesem Stoßsystem, in denen differentielle Querschnitte im Hinblick auf den Projektilstreuwinkel, den elektronischen Streuwinkel, die Energie des emittierten Elektrons gemessen wurden. Bei diesen Experimenten wurden jedoch nicht alle kinematischen Parameter bestimmt, so daß Aussagen über die zur Transfer-

ionisation führenden Mechanismen nicht eindeutig getroffen werden können.

Mit dem Ziel einer Interpretation des experimentellen Datenmaterials in Teil (IV), wird im nun Folgenden zunächst eine Ableitung der zu erwartenden Impulsprofile eines jeden der am Stoß beteiligten Partner gegeben, noch ohne auf spezielle Mechanismen einzugehen. Den Abschluss dieses Kapitels bildet die Erörterung der Frage, ob die beobachtete Beschränkung der Emission auf die Streuebene durch die Erhaltung des Drehimpulses begründet ist. Die Konzentration wird dann in den nachstehenden Kapiteln auf die beitragenden Mechanismen gelenkt sein.

Die dynamischen Eigenschaften der zur Transferionisation



beitragenden Kanäle können auf der Basis der Erhaltungssätze für Energie und Impuls

$$\begin{aligned} E^i &= E_P^i + E_T^i = E_P^f + E_T^f + E_e^f = E^f \\ \vec{P}^i &= \vec{K}_P^i + \vec{K}_T^i = \vec{K}_P^f + \vec{K}_T^f + \vec{k}^e = \vec{P}^f \quad . \end{aligned} \quad (3.2)$$

analysiert werden. Hier bezeichnet

- E^σ die Gesamtenergie – der Index $\sigma = i, f$ gibt an, ob für die Situation vor oder nach dem Stoß –,
- E_τ^σ die Energie des Projektil-, beziehungsweise Targetsystems und die des Elektrons, hier kenntlich gemacht durch den Index $\tau = P, T, e$,
- \vec{P}^σ den Gesamtimpuls,
- \vec{K}_τ^σ den Impuls des Projektils H^+ , beziehungsweise des Targets $He(1s^2)$,
- \vec{k}^e den Impuls des emittierten Elektrons.

Vor und nach dem Stoß sind die beteiligten Stoßpartner noch weit voneinander entfernt, so dass die innere Struktur der Stoßpartner keine Rolle spielt. Man kann den Prozess daher als einen inelastischen Stoß zwischen einem geladenen Projektil und einem neutralen Target beschreiben. Vor dem Stoß umfasst die Energie

E_T^i des Targetsystems infolgedessen die kinetische Energie T_T^i des atomaren Heliumtargets und die Bindungsenergien der Elektronen. Die Energie des Projektilsystems E_P^i entspricht der kinetischen Energie T_P^i des einlaufenden H^+ -Projektils und damit der Stoßenergie.

Nach dem Stoß entspricht E_T^f der kinetischen Energie T_T^f des verbleibenden He^{2+} -Ions, während die Projektilenergie E_P^f zusätzlich zur kinetischen Energie T_P^f noch die Bindungsenergie ϵ_f des eingefangenen Elektrons enthält. Zieht man in Betracht, dass

1. die kinetische Energie des Targets bei Verwendung eines gekühlten Gasjets, wie dies bei den COLTRIMS-Experimenten der Fall ist¹, verglichen mit der kinetischen Energie des Projektils vernachlässigbar ist,
2. und die potentielle Energie des emittierten Elektrons im Feld von Projektil und Target verglichen mit seiner kinetischen Energie klein ist, so dass die Energie des Kontinuumelektrons E_e gut durch seine kinetische Energie angenähert werden kann,

geht (3.2) über in

$$E^i = T_P^i + \sum_j^2 \epsilon_j = T_P^f + \epsilon^f + T^e = E_f \quad . \quad (3.3)$$

Um die Impulsprofile² der Komponenten des Stoßsystems abschätzen zu können, nutzt man aus, dass für kleine Streuwinkel der Impuls überwiegend in Einschußrichtung des Projektilstrahls übertragen wird. Die kinetische Energie nach dem Stoß ist dann

$$T_P^i = \frac{(K_P^i)^2}{2m_P} \approx \frac{(K_{Pz}^f)^2}{2(m_P + 1)} \quad . \quad (3.4)$$

Die Energie, die zur Änderung der inneren Struktur umgesetzt wurde, beträgt $\Delta\epsilon = \sum_j^2 \epsilon_j^i - \epsilon_f$ und man erhält mit Auswertung der Energieerhaltung (3.3) für

¹Details zur experimentellen Methodik findet man bei [62] .

²In der Arbeit von V. Mergel findet sich eine Herleitung der Impulsprofile, die in analoger Form mit einem relativistischen Ansatz durchgeführt wurde [62].

die Longitudinalkomponente des Projektilimpulses nach dem Stoß

$$K_{P_z}^f = K_{P_z}^i \cdot (\pm 1) \cdot \left(1 + \frac{1}{m_P} + \frac{2(\Delta\epsilon - T_e)}{(K_{P_z}^i)^2} (m_P + 1) \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (3.5)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Änderung der elektronischen Energien klein verglichen mit der Stoßenergie ist

$$\frac{2|\Delta\epsilon - T_e|}{(K_{P_z}^i)^2} (m_P + 1) \approx \frac{|\Delta\epsilon - T_e|}{E_p} \ll 1 \quad (3.6)$$

und dass

$$\frac{1}{m_P} \ll 1 , \quad (3.7)$$

erhält man den Impuls, den das Projektil während des Stoßes überträgt als Funktion von Einschussenergie, kinetischer Energie des emittierten Elektrons und der inneren Struktur der beteiligten, hier atomaren Systeme

$$q_z = K_{P_z}^i - K_{P_z}^f = - \left(\frac{v}{2} + \frac{(\Delta\epsilon - T_e)}{v} \right) . \quad (3.8)$$

Um (3.8) zu erhalten, wurde die Wurzel entwickelt und alle Terme ab der quadratischen Ordnung vernachlässigt. Zusätzlich dazu wurde nur der positive Wurzelterm berücksichtigt, da derjenige mit dem negativen Vorzeichen einer Rückstreuung des Projektils entspricht.

Den Impulsübertrag kann man noch in die Beiträge durch Ionisation und Einfang aufteilen

$$\begin{aligned} q_z &= q_z^{Einfang} + q_z^{Ionisation} \\ q_z^{Einfang} &= - \left(\frac{v}{2} + \frac{\Delta\epsilon_c}{v} \right), \quad \Delta\epsilon_c = \epsilon_1^i - \epsilon^f \\ q_z^{Ionisation} &= - \frac{(\epsilon_2^i - T_e)}{v} . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Das Impulsprofil der anderen Fragmente im Endzustand kann jetzt mit Hilfe des

Impulserhaltungssatzes

$$\vec{q} = \Delta\vec{K}_T + \vec{k}^e \quad (3.10)$$

errechnet werden, falls man die Impulse im Anfangszustand des Projektils \vec{K}_P^i und des Targets \vec{K}_T^i kennt. Hier ist $\Delta\vec{K}_T = \vec{K}_T^f - \vec{K}_T^i$ der Impuls der auf den Targetkern übertragen wurde.

Für kleine Streuwinkel stellt $|\vec{K}_P^f| \approx |\vec{K}_P^i| = m_p v$ eine gute Näherung dar. Damit ist der Impulsübertrag (3.10) für einen Einschuß des Projektils in z-Richtung gleich

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} -K_P^i \sin\theta_P \cos\varphi_P \\ -K_P^i \sin\theta_P \sin\varphi_P \\ q_z \end{pmatrix} . \quad (3.11)$$

Im Experiment wurde beobachtet, dass alle Stoßfragmente in einer Ebene, nämlich der Streuebene, emittiert werden. Hier könnte die Erhaltungseigenschaft des Drehimpulses eine Rolle spielen. Liefert der Drehimpulserhaltungssatz Bedingungen, die die Emission von vornherein auf die Emission in die Streuebene einschränken, ohne dass weitere Faktoren, wie Korrelation, maßgeblich zu sein brauchen? Dazu betrachtet man den Drehimpulserhaltungssatz

$$\vec{L}_P^i + \vec{L}_T^i = \vec{L}_T^f + \vec{L}_P^f + \vec{L}_e . \quad (3.12)$$

Hier bezeichnet \vec{L}_P^i den Drehimpuls des Projektils H^+ , \vec{L}_P^f den Drehimpuls des Wasserstoffatoms H , \vec{L}_T^i den Drehimpuls des Heliumatoms $He(1s^2)$, \vec{L}_T^f den des verbleibenden Targetions He^{2+} und \vec{L}_e den Drehimpuls des emittierten Elektrons.

In den angeführten Experimenten von Mergel [62] wurde das Heliumatom in den Grundzustand präpariert und senkrecht zur Einschussrichtung des Projektils in den Projektilstrahl eingeleitet

$$\vec{K}_T^i = \begin{pmatrix} 0 \\ K_{Ty}^i \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (3.13)$$

Wählt man als Bezugspunkt einen Punkt auf dem geradlinigen Teil der Tar-

getrajektorie, der infolgedessen mindestens im Abstand des Stoßparameters b vom Kreuzungspunkt von Projektil- und Tragetstrahlrichtung entfernt liegt, so besitzt das Heliumatom vor dem Stoß relativ zu diesem Punkt einen Gesamtdrehimpuls gleich Null, da die Bewegungsrichtung des Targetschwerpunkts parallel zur Verbindungslinie zwischen Bezugspunkt und Targetschwerpunkt liegt und die Summe der elektronischen Drehimpulse im Grundzustand in Bezug auf den Schwerpunkt ebenfalls Null ist. Nach dem Stoß hat das verbleibende Heliumion infolge des Rückstoßes einen Drehimpuls ungleich Null. Das Projektil besitzt in Bezug auf den gewählten Punkt, ebenso wie das emittierte Elektron, einen Drehimpuls ungleich Null, sowohl vor als auch nach dem Stoß, und man hat

$$\vec{L}_P^i - \vec{L}_P^f = \vec{L}_T^f + \vec{L}_e \quad . \quad (3.14)$$

Emission in die Streuebene bedeutet, dass die zugehörigen Impuls- und Ortsvektoren der Fragmente hinsichtlich des sich ebenfalls in der Streuebene befindenden Bezugspunktes in der Streuebene liegen. Die Streuebene wird durch die Impulsvektoren des Projektils vor und nach dem Stoß definiert, die auf der linken Seite von (3.14) stehen, so dass der Differenzvektor der beiden Drehimpulse senkrecht zur Streuebene liegen muss. Aus der Drehimpulserhaltung folgt also nur, dass die Summe der Drehimpulsvektoren auf der rechten Seite senkrecht zur Streuebene stehen muss. Damit hat man allerdings noch keine Erklärung für das beobachtete Verhalten der beiden Emittenten, α -Teilchen und Elektron, denn in der Konsequenz bedeutet dies, dass jeder der beiden Drehimpulsvektoren ebenfalls senkrecht zur Streuebene stehen muss.

Kapitel 4

Schrittweise und abhängig ablaufende Transferionisation

4.1 Schrittweise Transferionisation

In diesem Abschnitt werden die Beiträge zur Transferionisation erläutert, von denen man annimmt, dass die beiden elektronischen Übergänge vergleichsweise unabhängig voneinander stattfinden. Einfang und Ionisation können über verschiedene elementare Prozesse ablaufen. Daher tragen verschiedene Kanäle zum Wirkungsquerschnitt der unabhängigen Prozesse bei, die aus einer Kombination möglicher Einfangs- und Ionisationskanäle gebildet werden.

Als Ergebnis der Messungen werden differentielle Wirkungsquerschnitte angegeben. Aussagekräftige Variablen in Bezug auf die dynamischen Eigenschaften sind die zu erwartenden Impulsprofile der Emittenten, die anhand der Impulsüberträge abgeleitet werden können. Infolgedessen liegt der Akzent des Kapitels auf der Angabe der mit einem bestimmten Prozess verknüpften Impulsüberträge.

Da insbesondere die Emissionscharakteristik relativ zur Streuebene interessiert, ist es angemessen an die Geometrie des Streusystems angepasste Koordinaten zu verwenden: mit der willkürlichen Setzung $\varphi_p = 0$ definiert die Streuebene des Stoßsystems die x/z-Ebene des Koordinatensystems. Die Impulsüberträge

ergeben sich damit zu

$$\vec{q} = \begin{pmatrix} -m_P v \sin \theta_P^L \\ 0 \\ q_z \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

$$\Delta \vec{K}_T = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L + k^e \sin \theta_e^L \cos \varphi_e \\ k^e \sin \theta_e^L \sin \varphi_e \\ \left(\frac{v}{2} + \frac{\Delta \epsilon - T_e}{v}\right) + k^e \cos \theta_e^L \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

$$\vec{k}^e = \begin{pmatrix} k^e \sin \theta_e^L \cos \varphi_e \\ k^e \sin \theta_e^L \sin \varphi_e \\ k^e \cos \theta_e^L \end{pmatrix} . \quad (4.3)$$

Die Information über die Emissionscharakteristik des Elektrons relativ zur Streuebene steckt im Azimut φ_e . Nach der Beschreibung der Komponenten der beitragenden Prozesse Einfang und Ionisation in Einzeldarstellung, werden die aus der Kombination von Einfang und Ionisation resultierenden Signaturen zusammengestellt.

4.1.1 Der Einfang

Man kann sich verschiedene elementare Prozesse für einen Einfang von Elektronen durch geladene Ionen vorstellen, die im Bereich kleiner Projektilstreuungswinkel eine Rolle spielen. Wesentlich für alle Mechanismen ist der Wechsel des Bezugssystems: Damit ein Elektron in das Bezugssystem des Projektils wechseln kann¹, muss es seine eventuell vorhandene überschüssige kinetische Energie relativ zum Projektilsystem, verlieren. In der Art, wie diese Energie abgegeben wird, unterscheiden sich die verschiedenen Mechanismen. Zu erwähnen sind hier:

Der Kinematische Einfang (KC²): Die quantenmechanische Impulsverteilung des Elektrons vor dem Stoß, gebunden im Target, enthält Impuls-komponenten, die dem Projektilimpuls entsprechen. Infolgedessen kann das Elektron vom Projektil mitgerissen werden, ohne dass ein zusätzlicher Impulsübertrag auf das Elektron erfolgt, so dass der Impuls auf das Target als

¹Siehe dazu auch Abschnitt 1.3.1.

²Kinematical Capture

dritten Stoßpartner übertragen wird. Da die hohen Impulskomponenten in der Impulsverteilung der Wellenfunktion des gebundenen Elektrons, die der Projektilgeschwindigkeit entsprechen, mit zunehmender Höhe der Projektilgeschwindigkeit abnehmen, dominiert der kinematische Einfang im Bereich unterer und mittlerer Energien. Aus Rechnungen in erster Bornscher Näherung³ [40] sind die Skalierungseigenschaften im Grenzwert für sehr hohe Projektilgeschwindigkeiten bekannt

$$\sigma_{KC}(1s \rightarrow 1s) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \pi \frac{2^{18}}{5} Z_P^5 Z_T^5 \left(\frac{1}{v}\right)^{12} . \quad (4.4)$$

Der Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus (NET⁴): Dieser Mechanismus, der von L.H. Thomas 1927, [21], vorgeschlagen wurde, beruht ebenso wie der ee-Thomas-Prozess (1.4.1) auf einer konsekutiven Folge zweier binärer Stöße, die in diesem Fall nur zu einem Einfang führt. Damit der Einfang zustandekommt, wird das Projektil in einem ersten Stoß unter einem Winkel von $\theta_p^{NET^L} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{1}{m_p}$ an einem Targetelektron gestreut. Für den Fall eines Protonprojektils ist das ein Winkel von $\theta_p^{NET^L} = 0.47$ mrad. Das Elektron läuft unter einem Winkel von 60° bezüglich der Projektil-Einflugrichtung mit einer Geschwindigkeit in Richtung des Targetkerns aus, die dem Betrag nach der Projektilgeschwindigkeit entspricht. An diesem wird es in einem zweiten Stoß so gestreut, dass das Elektron parallel zum Projektil und ohne seine Geschwindigkeit zu ändern, aus dem Target emittiert wird. Der Winkel zwischen vorheriger Flugrichtung und Emissionsrichtung muß für diese zweite Streuung daher ebenfalls 60° betragen. Durch diesen Doppelstreuungsprozess wird die überschüssige Energie an den dritten beteiligten Partner, den Targetkern, abgegeben. Auch hier läßt sich ein Skalierungsverhalten des totalen Wirkungsquerschnitts für asymptotisch hohe Stoßenergien angeben, was sowohl aus dem klassischen Ansatz von Thomas als auch aus

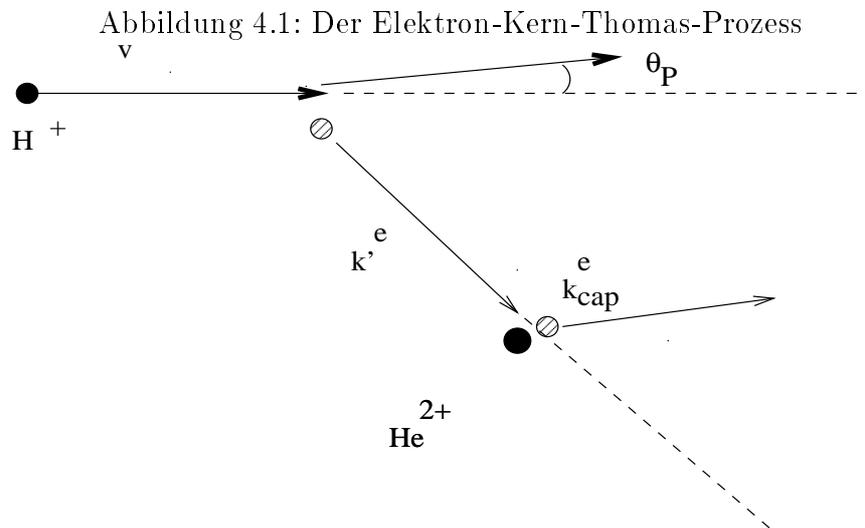
³Hier handelt es sich um Berechnungen der Übergangsamplitude für den Elektroneneinfang, die unter dem Namen Oppenheimer-Brinkmann-Kramers-Näherung OBK1 [92], [93] bekannt sind.

⁴Nuclear Electron Thomas

den quantenmechanischen Arbeiten [71], [94], [40] ableiten läßt:

$$\sigma_{NET}(1s \rightarrow 1s) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \pi^2 2^7 \frac{Z_P^5 Z_T^5}{Z_P + Z_T} \left(\frac{1}{v}\right)^{11} . \quad (4.5)$$

Aufgrund des asymptotischen Verhaltens dominieren die Doppelstreumechanismen trotz ihrer sehr kleinen Werte für den Wirkungsquerschnitt im Bereich höherer Energien über die Prozesse erster Ordnung.



Der Strahlungseinfang (REC⁵): Diesem Mechanismus ist zu eigen, dass die überflüssige kinetische Energie des Elektrons im Target relativ zum Projektilsystem durch Abstrahlung eines Photons abgeführt wird. Man kann ihn als zeitinvertierten Photoeffekt auffassen. Die Wirkungsquerschnitte für radiative Einfangprozesse sind relativ klein verglichen mit den nicht-radiativen Prozessen [17]. Aus theoretischen Arbeiten [40] kennt man ein Skalierungsverhalten des totalen Wirkungsquerschnitts für asymptotische Stoßgeschwindigkeiten

$$\sigma_{rec}(1s \rightarrow 1s) \xrightarrow{v \rightarrow \infty} \pi \frac{2^7}{3} Z_P \left(\frac{1}{v}\right)^5 . \quad (4.6)$$

⁵Radiative Electron Capture

Das asymptotische Verhalten des totalen Wirkungsquerschnitts fällt für nichtradiative Mechanismen nach (4.4) mit v^{-12} für Prozesse erster Ordnung (KC) ab und mit v^{-11} für Doppelstreuungsprozesse, die allerdings erst bei höheren Energien überwiegen. So kann der radiative Einfang aufgrund seines asymptotischen Verhaltens trotz der Kleinheit seiner Wirkungsquerschnitte für sehr hohe Energien dominieren, die für Stöße zwischen leichten Ionen in der Größenordnung von $10 \frac{MeV}{a.m.u.}$ liegen. Daher spielen radiative Einfangmechanismen für die betrachteten Stoßenergien keine Rolle.

Für den Einfang eines im Heliumatom gebundenen Elektrons in einen gebundenen Zustand des Projektils, liefert die Kinematik für den Impuls, den das Projektil überträgt,

$$\vec{q}^{Einfang} = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L \\ 0 \\ \frac{v}{2} + \frac{\Delta \epsilon_e}{v} \end{pmatrix} . \quad (4.7)$$

In (4.7) treten die Bindungsenergien der Elektronen vor und nach dem Stoß auf. Die elektronische Bindungsenergie im Heliumgrundzustand hängt davon ab, ob bereits ein Elektron abgelöst wurde oder nicht. Folgende Ionisationsenergien hat man experimentell beobachtet:

- für die Ablösung eines Elektrons aus dem Heliumgrundzustand He $IP1 = 0.904$ a.u.,
- für die Ablösung eines Elektrons aus dem niedrigsten Niveau von He^+ $IP2 = 2.0$ a.u..

Im Experiment wurde nur die Ladung und nicht der Zustand der Elektronen des Wasserstoffejektiles bestimmt. Der Wert für ϵ^f liegt also zwischen dem ebenfalls bekannten Ionisationspotential zur Ablösung des Elektrons aus dem niedrigsten Niveau des Wasserstoffgrundzustands von $IP = 0.5$ a.u. und der Seriengrenze hin, je nachdem in welchen Zustand das Elektron eingefangen wurde. Damit liegt der Wert für die Longitudinalkomponente des Impulsübertrags zwischen $\frac{v}{2} - \frac{1.5}{v}$ und $\frac{v}{2} - \frac{0.404}{v}$ für Einfang in den Grundzustand und zwischen $\frac{v}{2} - \frac{2.0}{v}$ und $\frac{v}{2} - \frac{0.904}{v}$ als Grenzwert für einen Einfang in hochangeregte Rydbergzustände.

Den Impulsübertrag auf das Targetion He^{2+} liefert der Impulserhaltungssatz (3.10) zu

$$\begin{aligned}\Delta\vec{K}_T &= \vec{q} \\ &= - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L \\ 0 \\ \frac{v}{2} + \frac{\Delta\epsilon_c}{v} \end{pmatrix} .\end{aligned}\quad (4.8)$$

Da im betrachteten Energiebereich nur die nichtradiativen Mechanismen eine Rolle spielen, können mit (4.7) und (4.8) alle oben angeführten Mechanismen beschrieben werden. Beim Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus wird das Projektils in einem Winkel von $\theta_P^{thL} = 0.47$ mrad gestreut. Mit dieser zusätzlichen Bedingung wird (4.7) und (4.8) zu

$$\Delta\vec{K}_T = - \begin{pmatrix} m_P v \theta_P^{thL} \\ 0 \\ \frac{v}{2} + \frac{\Delta\epsilon_c}{v} \end{pmatrix} .\quad (4.9)$$

Hier wird berücksichtigt, dass für kleine Winkel $\sin \phi \approx \phi$ ist.

4.1.2 Die Ionisation

Ionisation ist bei höheren Stoßgeschwindigkeiten der dominierende inelastische Prozess [54]. Für eine Ionisation ist nach (3.9) ein Impulsübertrag von

$$\vec{q}^{ionisation} = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L \\ 0 \\ \frac{(\epsilon^i - T_e)}{v} \end{pmatrix}\quad (4.10)$$

zu erwarten. Dies impliziert im Rahmen der Annahmen von (3) und eingedenk der Vernachlässigung der elektronischen Impulse im Heliumgrundzustand, nach (3.10) einen Impulsübertrag auf das Targetion von

$$\Delta\vec{K}_T = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L - k_x^e \\ k_y^e \\ \frac{(\epsilon^i - T_e)}{v} - k_z^e \end{pmatrix} ,\quad (4.11)$$

wobei

$$\vec{k}^e = \begin{pmatrix} k^e \sin \theta_e^L \cos \varphi_e \\ k^e \sin \theta_e^L \sin \varphi_e \\ k^e \cos \theta_e^L \end{pmatrix} . \quad (4.12)$$

Entsprechend den Ausführungen in (4.1.1) ist für die Bindungsenergie ϵ_i das Ionisationspotential $IP1 = 0.904$ a.u. oder $IP2 = 2.0$ a.u. einzusetzen, je nachdem ob die Ionisation des Elektrons aus dem niedrigsten Niveau des Heliumatoms oder des He^+ -Ions erfolgt. Für die Freisetzung eines Elektrons aus dem gebundenen Zustand eines Targets wurden eine Reihe verschiedener elementarer Prozesse vorgeschlagen. Hierzu zählen:

Der binäre Stoß des Projektils mit dem Elektron (BEE⁶): die Freisetzung der Elektronen erfolgt bei diesem Mechanismus durch einen direkten harten Stoß zwischen Elektron und Projektil. Man erwartet infolgedessen hochenergetische Elektronen. In einem einfachen klassischen Bild kann der BEE als elastischer Stoß zwischen Projektil und ruhendem quasifreiem Elektron behandelt werden. Aus der Zwei-Teilchen-Kinematik kann man klassisch sowohl den maximal zu erwartenden Streuwinkel für das Projektils abschätzen zu

$$\sin(\theta_p^{maxL}) = \frac{m_e}{m_p} \approx \theta_p^{maxL} = 0.54 \text{ mrad} \quad (4.13)$$

als auch den mit diesem Streuwinkel verknüpften elektronischen Emissionswinkel zu 45° und die maximale resultierende Emissionsenergie des Elektrons, die für eine feste Stoßenergie vom Streuwinkel des emittierten Elektrons abhängt,

$$T_e(\theta_e^L) = 2 v^2 \cos^2(\theta_e^L) + \epsilon^i \quad (4.14)$$

Diese Funktion bezeichnet man auch als kinematischer Rücken erster Ordnung. Der BEE-Mechanismus wird für grosse Stossenergien in den differentiellen Wirkungsquerschnitten $\frac{\partial \sigma}{\partial E_e \partial \theta_e^L}$ als eine breite Peakstruktur sichtbar. Die Form dieses Peaks spiegelt die Impulsverteilung des Elektrons gebunden

⁶Binary Encounter Electrons

im Target wieder. Für niedrigere Stoßenergien oder für große elektronische Emissionswinkel verschmilzt der Peak mit dem Rest des Spektrums.

Für die Ionisation durch den binären Stoß des Elektrons mit dem Projektil kann man (4.10) verwenden und findet mit

$$k_e = \sqrt{2 T_e}$$

und

$$k_{ez} = \sqrt{2 T_e} \cos \theta_e^L \quad ,$$

dass der Longitudinalimpuls für das verbleibende Targetion für alle möglichen Winkel zwischen

$$\frac{-\epsilon_i}{2v} \leq K_{Tz}^f \leq \frac{-\epsilon_i}{v} \quad (4.15)$$

liegen muss [62]. Für den elektronischen Impuls erwartet man im Mittel

$$\vec{k}^e = 2v \cos \theta_e^L \begin{pmatrix} \sin \theta_e^L \cos \varphi_e \\ \sin \theta_e^L \sin \varphi_e \\ \cos \theta_e^L \end{pmatrix} . \quad (4.16)$$

Drei-Körper-Stoß-Elektronen (TBEE⁷) und langsame Elektronen (SE⁸):

Im Bereich niedriger elektronischer Emissionsenergien resultieren die emittierten Elektronen aus entfernteren schwächeren Stößen mit dem Projektil. Infolge der niedrigen Emissionsenergien spielen im Bereich niedriger und mittlerer Stoßenergien Zwei-Zentren-Effekte eine Rolle: auf die Bewegung des Elektrons nimmt sowohl das elektrische Feld des Targetions, als auch das des Projektils Einfluß und man hat Drei-Körper-Elektronen. Im Bereich der höheren Energien spielt nur das Targetfeld eine Rolle. Im Allgemeinen wird die Verteilung der Elektronen im Bereich niedriger Emissionsenergien bei einer Energie von 0 eV maximal und sinkt mit anwachsender Emissionsenergie exponentiell ab [96]. Mit einer TBEE-Ionisation sollte aufgrund von (4.11) ein sehr kleiner Targetionenimpuls verknüpft sein.

⁷Three-Body-Encounter Electrons

⁸Soft Electrons

Einfang von Elektronen ins Kontinuum des Projektils (ECC⁹): Zentriert um eine Emissionsenergie bei der die mit der kinetischen Energie des emittierten Elektrons verknüpfte Geschwindigkeit der Projektilgeschwindigkeit entspricht, tritt eine weitere Peakstruktur im Spektrum des differentiellen Wirkungsquerschnitts $\frac{\partial\sigma}{\partial E_e \partial\theta_e^L}$ auf, die bei niedrigen und mittleren Stoßenergien eine Rolle spielt. Diese Struktur wird durch den Einfang von Targetelektronen in einen niedrigliegenden Zustand des Projektils verursacht. Infolgedessen ist in diesem Fall die Geschwindigkeit der emittierten Elektronen im Ruhesystem des Projektils klein und die Emission erfolgt in Vorwärtsrichtung bei einem Emissionswinkel der dem Projektilstreuwinkel entspricht [97]. Die Longitudinalkomponente des Targetionenimpulsübertrags liegt daher im Mittel um einen Wert von

$$\Delta\vec{K}_T \approx - \begin{pmatrix} m_P v \sin\theta_P^L \\ 0 \\ \frac{e^i}{v} - \frac{v}{2} + v \cos\theta_P^L \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

und für den Impuls des Elektrons erwartet man im Mittel

$$\vec{k}^e \approx v \begin{pmatrix} \sin\theta_P^L \\ 0 \\ \cos\theta_P^L \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

da $k^e \approx v$, $\theta_e^L \approx \theta_P^L$, $\varphi_e \approx \varphi_P = 0$ und mit Auswertung des Massenunterschiedes zwischen Elektron und Proton.

4.1.3 Einfang und Ionisation kombiniert

Allgemein kann man sagen, dass während im Bereich kleiner Stoßenergien der Einfang der dominierende Prozess ist, die Ionisation mit höheren Stoßenergien an Bedeutung gewinnt. Im Bereich mittlerer Stoßenergien liefern Einfang und Ionisation beide ähnliche Beiträge.

Aus der Kombination von Ionisation und Einfang zur Transferionisation ist anhand der Kinematik ein Impulsübertrag von (4.1) zu erwarten. Alle Kombinations-

⁹Electron Capture to Continuum

nen aus kinematischem Einfang (KC) und Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus (NET) mit Drei-Körper-Elektronen (TBEE), Einfang eines Elektrons ins Projektilkontinuum (ECC) und Ionisation durch einen binären Stoß mit dem Projektil (BEE) sind grundsätzlich möglich. Im unteren und mittleren Energiebereich sollten Kombinationen aus TBEE, ECC, BEE mit einem Kinematischen Einfang überwiegen, während im Bereich höherer Stoßenergie Kombinationen aus SE, ECC, BEE und einem NET eine Rolle spielen sollten¹⁰. Vernachlässigt man die Bindungsenergien, so sind für die verschiedenen Kombinationen im Mittel zu erwarten:

- ECC und Einfang

$$\Delta \vec{K}_T = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L \\ 0 \\ v \cos \theta_P^L \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

mit (4.17), und $\vec{k}^e \approx \vec{v}_P$, $\theta_e^L \approx \theta_P^L$, $\varphi_e \approx \varphi_P = 0$ und einer Emissionsenergie $T_e = \frac{v^2}{2} = \frac{E_P}{m_P}$.

- BEE und Einfang

$$\Delta \vec{K}_T = -v \begin{pmatrix} m_P \sin \theta_P^L + 2 \cos \theta_e^L \sin \theta_e^L \cos \varphi_e \\ 2 \cos \theta_e^L \sin \theta_e^L \sin \varphi_e \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

und

$$\vec{k}^e = 2v \cos \theta_e^L \begin{pmatrix} \sin \theta_e^L \cos \varphi_e \\ \sin \theta_e^L \sin \varphi_e \\ \cos \theta_e^L \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

mit (4.14) und Vernachlässigung der elektronischen Bindungsenergie ϵ^i , woraus folgt, dass der elektronische Impulsbetrag genähert werden kann durch $k^e \approx 2v \cos \theta_e^L$ und Vernachlässigung des Targetrückstoßes durch die Ionisation.

¹⁰V. Mergel weist in [62] jedoch darauf hin, dass im betrachteten Energiebereich kein NET beobachtet werden konnte (S.87).

- TBEE/SE und Einfang

$$\Delta \vec{K}_T = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L \\ 0 \\ \frac{v}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

mit $k^e \approx 0$.

In (4.19), (4.20), (4.21) und (4.22) wurde vereinfachend angenommen, dass die Streuung des Projektils um den kleinen Winkel $\theta_P^{L'}$, die durch die zu einem Übergang führenden Wechselwirkungen verursacht wird, dem Streuwinkel des Projektils θ_P^L in etwa entspricht, der ein Resultat der Kombination der zu Einfang und Ionisation führenden Wechselwirkungen ist. Diese Annahme dürfte für kleine Winkel vertretbar sein. Der Einfang liefert hier nur die Verschiebung des Longitudinalimpulses um $\frac{v}{2}$ unabhängig davon, ob es sich um einen kinematischen Einfang oder um einen Elektron-Kern-Thomas-Prozess handelt. Das Impulsprofil des emittierten Elektrons sollte für den hier betrachteten Fall unabhängig voneinander ablaufender Übergänge nicht allzu sehr von dem einer einfachen Ionisation abweichen, falls Korrelation vernachlässigt werden kann.

4.2 Transferionisation durch abhängige Prozesse

Bei Transferionisationsprozessen, deren Teilübergänge abhängig voneinander ablaufen, spielt immer die interelektronische Korrelation eine Rolle. Zu nennen sind hier die sogenannten Shake-Prozesse. Es handelt sich dabei um einen Mehr-Elektronen-Prozess, bei dem gleichzeitig mit dem Übergang eines Elektrons das zweite Elektron in einen Kontinuumszustand angeregt wird oder in einen gebundenen Zustand des Projektils wechselt. Anschaulich läßt sich die Ursache für einen Shake-Prozess so erklären: Ändert sich das Potential, in dem das Elektron propagiert, durch den Übergang eines Elektrons, so ist die Wellenfunktion des verbleibenden Elektrons keine exakte Eigenfunktion des Atoms mehr. Dann gibt es einen starken Überlapp der alten mit den neuen Eigenzuständen derart, dass in der Regel Zustände besetzt werden, deren Quantenzahlen mit denen der alten Eigenzustände übereinstimmen. Zusätzlich dazu gibt es einen Überlapp, wenn auch gering, mit anderen Zuständen. Einen Beitrag zur Transferionisation liefern

könnte der Überlapp mit

1. einem gebundenen Zustand des Projektils beim Shake-Over¹¹
2. Kontinuumzuständen, so dass eine Ionisation durch Shake-Off zustandekommen kann, die in Verbindung mit einem Einfang zur Transferionisation führt.

Allerdings spielt Shake-Over bei den hier betrachteten Stoßenergien keine Rolle [62]. Die Wahrscheinlichkeit für einen Shake-Off-Prozess läßt sich aus dem Überlappintegral der Endzustandswellenfunktion mit der Wellenfunktion bestimmen, die den Eigenzustand des verbleibenden Elektrons nach dem Übergang des ersten charakterisiert. Man geht davon aus, dass die mit einem Shake-Off verknüpften Impulsüberträge auf das Elektron sehr klein sind und dass daher die Impulsverteilung der durch diesen Prozess ins Kontinuum emittierten Elektronen derjenigen im Anfangszustand entsprechen sollten. Daher erwartet man für einen Übergang aus dem Grundzustand sehr kleine elektronische Impulse, als auch eine radialsymmetrische Emission der Elektronen.

In Kombination mit einem kinematischen Einfang oder einem Elektron-Kern-Thomas-Prozess sollte der im Mittel zu erwartende Targetrückstoß für sehr kleine elektronische Impulse analog zu (4.22) liegen. Da der Shake-Prozess eine schnelle Änderung des Potentials erfordert, kann man davon ausgehen, dass Ionisation durch Shake-Off erst bei höheren Energien eine wahrnehmbare Rolle spielt. McGuire et al. [98] geben dafür einen Schwellenwert für die Projektilgeschwindigkeit von $v \geq 5$ an. Dies entspricht einer Energie von 625 keV.

Ein weiterer Prozess der in die Sparte der abhängigen Prozesse gehört, ist der bereits in (1.4.1) angeführte ee-Thomas-Prozess (EET). Der EET-Prozess ist charakterisiert durch die Emission eines Elektrons in einem Winkel von $\theta_e^L = 90^\circ$ mit einem Impuls von

$$\vec{k}^e = \begin{pmatrix} -v \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (4.23)$$

¹¹Infolgedessen hat man eine erhöhte Wahrscheinlichkeit für einen Einfang in einen gebundenen Projektilzustand, falls gleichzeitig eine Ionisation erfolgt.

und der Streuung eines Protons in einem Winkel von $\theta_P^L = \frac{1}{m_P} = 0.55$ mrad. Da auf das Targetion kein Impuls übertragen wird, gilt

$$\Delta \vec{K}_T = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (4.24)$$

Aus den theoretischen Rechnungen in zweiter Bornscher Näherung [71] lassen sich die Skalierungseigenschaften für asymptotisch hohe Projektilgeschwindigkeiten angeben

$$\sigma_{EET} \xrightarrow{v_P \rightarrow \infty} \pi^2 2^4 \frac{Z_T^3 Z_P^5}{Z_P + \sqrt{2} Z_T} \left(\frac{1}{v}\right)^{11} . \quad (4.25)$$

Ebenso wie sein Pendant, der Elektron-Kern-Thomas-Prozess, zeigt der EET eine v^{-11} -Abhängigkeit und sollte daher bei höheren Energien dominieren.

4.3 Zusammenfassende Anordnung der Prozesse auf der Energieskala und existierende Messungen

Die Anordnung der diskutierten Prozesse auf der Energieskala ist nicht einfach und bleibt etwas verschwommen, da in der Realität eines Experimentes nur das Nebeneinander konkurrierender Mechanismen vermessen werden kann. Dieser Sachverhalt erschwert die Zuordnung eines Merkmals im Spektrum zu einem bestimmten Mechanismus. Zudem ist anzumerken, dass die hier diskutierten Mechanismen keine erschöpfende Zusammenstellung der insgesamt möglichen Mechanismen sein müssen. Dies ist auch deswegen der Fall, da sie auf der menschlichen Vorstellungskraft beruhen, die durch den Stand und den Blickwinkel der Theorie beeinflusst wird.

Vor diesem Hintergrund ist die hier vorgenommene Zusammenstellung möglicher Mechanismen und ihre Einteilung in die verschiedenen Energiebereiche zu sehen: Der untere und mittlere Energiebereich, wird nach Bransden et al. [17] nach oben hin begrenzt durch das Verhältnis $\frac{v_e}{v} \geq 4$ a.u.. Dies entspricht einer Pro-

jektilenergie von 400 keV für den Fall eines Protons. In diesem Bereich sollten Kombinationen aus einem kinematischen Einfang KC und Ionisationsmechanismen wie

- Erzeugung von Drei-Körper-Stoß-Elektronen TBEE
- Einfang ins Projektilkontinuum ECC

dominieren, während im höheren Energiebereich Kombinationen aus

- einem kinematischen Einfang KC
- Elektron-Kern-Thomas-Prozess NET

und

- langsamen Elektronen SE
- Ionisation durch einen binären Stoß BEE
- Shake-Off SO,

ebenso wie Beiträge durch den ee-Thomas-Prozess EET überwiegen sollten.

Untersucht man die Prozesse im Hinblick auf eine mögliche Emission in die Streuebene, so zeigt die Auswertung des zu erwartenden Impulsübertrag auf das Targetion

$$\Delta \vec{K}_T = - \begin{pmatrix} m_P v \sin \theta_P^L + k_x^e \\ k_y^e \\ \frac{v}{2} + \frac{\Delta \epsilon - T_\epsilon}{v} + k_z^e \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

dass genau dann alle Fragmente in die Streuebene emittiert werden, wenn

$$-k_y^e = 0 \quad .$$

Grundsätzlich kann man annehmen, dass

$$k_y^e \approx 0 \quad ,$$

wenn niederenergetische Elektronen zu erwarten sind. Das ist für die Elektronen der Fall, die durch streifende Stöße mit dem Projektil freigesetzt werden (TBEE, SE) und für diejenigen, die durch Shake-Off emittiert werden. Experimentell wurde aber die Emission von Elektronen mit hohen Emissionsenergien beobachtet. Höherenergetische Elektronen liefern der Einfang von Elektronen ins Projektilkontinuum und die Freisetzung von Elektronen infolge eines binären Stoßes mit dem Projektil. Die ECC-Elektronen werden in der Streuebene und in Richtung des auslaufenden Projektils

$$\theta_e^L \approx \theta_p^L$$

emittiert; für die BE-Elektronen wird dies nur dann der Fall sein, wenn zusätzlich zum BE weitere Faktoren eine Rolle spielen, die eine Emission in die Streuebene erzwingen. Ein solcher Faktor könnte die interelektronische Korrelation im Heliumtarget sein. Was die bevorzugte Emission in einer zum auslaufenden Projektil entgegengesetzten Richtung anbetrifft, so lässt keiner der hier betrachteten Mechanismen ein derartiges Verhalten erwarten.

Sichtet man das experimentelle Datenmaterial, so gibt es neben den Messungen von Mergel [62] insgesamt nur wenige Messungen an diesem Stoßsystem. Hierunter fällt zum Beispiel eine Messung, die von Palinkas et al. [89] durchgeführt wurde. Palinkas et al. bestimmten zweifach differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial^3 \sigma}{\partial E_e \partial \Omega_e}$. Sie fanden eine Erhöhung des Wirkungsquerschnitts bei einem Emissionswinkel von 90° und einer Emissionsenergie von 600 eV. Dieser Wert entspricht ungefähr der für den EET nach (4.23) mit Vernachlässigung der Bindungsenergien erwarteten kinetischen Energie.

Zu nennen ist hier ebenfalls die experimentelle Datenerhebung von Horsdal et al. [90]. Sie bestimmten das Verhältnis des einfachdifferentiellen Wirkungsquerschnitts für eine Transferionisation zur Summe der Wirkungsquerschnitte für Transferionisation und Einfang in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel

$$\frac{\frac{d\sigma^{TI}}{d\theta_P}}{\frac{d\sigma^{TI}}{d\theta_P} + \frac{d\sigma^{CAP}}{d\theta_P}}$$

und fanden eine Erhöhung des differentiiellen Wirkungsquerschnitts bei dem von Thomas prognostizierten Projektilstreuwinkelwert von $\theta_P^{th} = 0.55$ mrad. Die Deutung dieser Beobachtung ging in Richtung des EET. Sowohl die Ergebnisse der

Rechnungen von Gayet und Salin [69], als auch die Messungen von V. Mergel [62] legen allerdings nahe, dass es sich hier nicht um eine Konsequenz des EET handelt, sondern um eine Struktur, die durch Beiträge zur Transferionisation zustandekommt, von denen man annimmt, dass die beiden elektronischen Übergänge vergleichsweise unabhängig voneinander stattfinden.

Zur Verfügung stehen darüberhinaus experimentelle Daten von Bernardi et al. [91]. Die Autoren bestimmten ebenfalls zweifach differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial^3 \sigma}{\partial E_e \partial \Omega_e}$, allerdings nur für eine Stoßenergie von 70 keV und für drei verschiedene Emissionswinkel in Vorwärtsrichtung bezüglich der Flugrichtung des einfallenden Projektilstrahls: $\theta_e = 0^\circ, 20^\circ, 50^\circ$.

Die Ergebnisse der Messungen werden in den Abschnitten 4.4, 4.5 und 4.6 zusammen mit den theoretischen Resultaten besprochen.

Teil IV

Vergleich von Theorie und Experiment

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln die Transferionisation aus theoretischer Sicht beschrieben und ihre Identifizierung im Experiment beleuchtet wurde, soll es in diesem Teil um die Darstellung der Ergebnisse gehen.

Ein Ziel dieser Arbeit ist, die experimentell beobachteten Strukturen im Rahmen der Theorie zu verstehen. Mit Verstehen ist hier folgende methodische Vorgehensweise gemeint: aus der theoretischen Beschreibung durch Vergleich mit den experimentellen Daten ein repräsentatives Bild des Stoßgeschehens abzuleiten. Speziell werden die Resultate der Messungen am $(H^+; He)$ -Stoßsystem mit den Ergebnissen der in dieser Arbeit vorgenommenen Rechnungen verglichen.

Zunächst soll die in der entwickelten Modellstruktur vertretene Auffassung des Stoßgeschehens nochmals zusammenfassend dargelegt und begründet werden. Die Modellstruktur basiert auf folgenden wesentlichen Annahmen:

Die Beschreibung des Stoßprozesses über einen störungstheoretischen Zugang ist angemessen. Dem liegt die Überlegung zugrunde, dass man es hier mit einem niedrig geladenen leichten Projektil und mit einem schnell ablaufenden Prozess zu tun hat: untersucht wurde ein Stoßenergiebereich von 300 keV bis 1000 keV. Dies entspricht einem Geschwindigkeitsfenster von 3.5 a.u. - 6.3 a.u.. Es handelt sich also um den Bereich mittlerer und hoher Stoßenergie. Da es sich ebenfalls um einen sehr schwach ausgeprägten Prozess handelt – die Wirkungsquerschnitte liegen in der Größenordnung von höchstens 10^{-18} cm^2 – ist eine störungstheoretische Behandlung adäquat.

Ein weiteres Element des hier gewählten Ansatzes ist die Behandlung der Übergänge unabhängig voneinander. Die Motivation für die Annahme, dass zur Transferionisation unabhängig ablaufende Elektronenübergänge massgeblich beitragen, basiert auf den Messungen von Mergel¹² [62] und den Rechnungen von Gayet und Salin¹³ [69]. In beiden Veröffentlichungen wurde gezeigt, dass die Erhöhung

¹²Die Impulsverteilung der emittierten Elektronen im Energiebereich zwischen 0.3 MeV und 0.63 MeV (s. auch die Abbildungen (4.3), (4.4), (4.5)) zeigt, dass das Maximum des differentiellen Wirkungsquerschnitts im Bereich des kritischen Winkels, in dem die abhängigen Prozesse zu erwarten sind, auf dem kinematischen Rücken erster Ordnung liegt. Dies deutet darauf hin, dass unabhängig voneinander ablaufende Prozesse hier eine Rolle spielen.

¹³Gayet und Salin [69] berechneten im Rahmen einer Beschreibung im IPM das Verhältnis von Transferionisation zur Summe aus Transferionisation und Einfacheinfang

$$\frac{\frac{d\sigma^{c_i}}{d\theta_P}}{\frac{d\sigma^{c_i}}{d\theta_P} + \frac{d\sigma^c}{d\theta_P}}$$

des differentiellen Wirkungsquerschnitts bei dem von Thomas prognostizierten Projektilstreuwinkelwert von $\theta_P^{th} = 0.55 \text{ mrad}$ bei niedrigeren Stoßenergien bis zu etwa 0.5 MeV nicht und bei höheren Energien nicht ausschließlich durch den EET verursacht wird¹⁴.

Die Modellstruktur beinhaltet eine Beschreibung des Einfangs mit der etablierten CDW-Näherung und der Ionisation in erster Bornscher Näherung. Die Beschreibung mit Hilfe der ersten Bornschen Näherung setzt voraus, dass

- Effekte zweiter Ordnung für die Ionisation vernachlässigbar sind,
- die Wirkung des Projektilfeldes auf das emittierte Elektron vernachlässigt werden kann (keine PCI¹⁵) und man es mit einer Ein-Zentren-Target-Emission zu tun hat, so dass das emittierte Elektron durch einen hochliegenden Eigenzustand des Targets repräsentiert werden kann.

Mit der Entscheidung zugunsten einer CDW-Näherung zur Beschreibung des Einfangs geht man davon aus, dass

- sich die Langreichweitigkeit der Coulombwechselwirkung durch die geladenen Aggregate vor und nach dem Stoß in einer Verzerrung der asymptotischen Anfangs- und Endzustände äußert und in dieser Form in den Randbedingungen berücksichtigt werden kann¹⁶,
- Effekte höherer Ordnung, die über die zweite Ordnung hinausgehen, vernachlässigt werden können. Effekte zweiter Ordnung, und zwar die Ankopplung der elektronischen Zwischenzustände an das Kontinuum, werden berücksichtigt. Der hierdurch entstehende Fehler liegt in der nicht exakten Berücksichtigung der kinetischen Energie des Elektrons im Endkanal und sollte zu vernachlässigen sein.

Diese Annahmen sind im betrachteten Energiebereich und aufgrund der Neutralität des Projektils nach dem Stoß für die dominierenden Beiträge zum Wirkungsquerschnitt vertretbar [97], [102].

und fanden ebenfalls eine Überhöhung beim im Bereich des kritischen Winkels.

¹⁴Siehe dazu auch Abschnitt 4.3.

¹⁵Post Collisional Interaction

¹⁶Details findet man in Abschnitt 1.4.3.

Anhand dieses Modells sollten daher alle Kombinationen der nachstehend aufgelisteten, für Ionisation und Einfang vorgeschlagenen und in den Abschnitten 4.1.1 und 4.1.2 referierten Mechanismen beschrieben werden:

1. der binäre Stoß des Projektils mit dem Elektron BE,
2. der Zwei-Zentren-Fall an Drei-Körper-Stoß-Elektronen TBEE und die Emission langsamer Elektronen SE, da die Wirkung des Projektilfeldes im Endkanal vernachlässigt wurde,
3. der kinematische Einfang KC,
4. der Elektron-Kern-Thomas-Mechanismus NET.

Aus den angeführten Gründen kann man in der Konsequenz davon ausgehen, dass die entwickelte theoretische Modellstruktur zur Wiedergabe massgeblicher Beiträge zum Wirkungsquerschnitt der Transferionisation geeignet ist. Zu diskutieren bleibt die Beschreibung der Targetstruktur, i.e. des Heliumgrundzustands. Um die Sensitivität des Modells gegenüber der Wahl der Helium-Grundzustandswellenfunktion zu untersuchen, wurden in der vorliegenden Arbeit drei verschiedene Ansätze implementiert: ein einfacher wasserstoffähnlicher Ansatz, ein Hartree-Fock- und ein Eckart-Ansatz. Die ersten beiden gehören zu den Ansätzen, die den Grundzustand auf dem Niveau des *Modells der unabhängigen Teilchen* beschreiben, während man mit dem Eckart-Ansatz über das effektive Ein-Teilchen-Bild hinausgeht. Während Hartree-Fock die beste Näherung im Rahmen des *Modells der unabhängigen Teilchen* bietet, stellt der wasserstoffähnliche Ansatz die einfachst mögliche Form einer Beschreibung dar. Dies legt auch die Gliederung des Kapitels fest: entlang zunehmender Komplexität der implementierten Ansätze.

Für jeden der Ansätze wurden die relevanten Observablen mit der entwickelten Modellstruktur berechnet und die Ergebnisse mit den experimentellen Daten verglichen. In der Diskussion wird dann der Frage nachgegangen, in welcher Hinsicht die hier entwickelte Modellstruktur die experimentellen Messungen und damit das Stoßgeschehen richtig beschreibt. Jeder Abschnitt gliedert sich entsprechend der gemessenen beziehungsweise berechneten Observablen.

Folgende Auswahl an Observablen, die im Experiment gemessen wurden, wurden berechnet:

1. streuwinkelabhängige differentielle Wirkungsquerschnitte,
2. energie-, emissionswinkel- und streuwinkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte bei verschiedenen Stoßenergien, (0.3, 0.63, 1.0) MeV, die die Impulsverteilung der emittierten Elektronen wiedergeben,
3. totale Wirkungsquerschnitte.

4.4 Ergebnisse der Rechnungen mit einem wasserstoffähnlichen Ansatz

Der implementierte wasserstoffähnliche Ansatz (2.1)

$$\begin{aligned}\Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \varphi_{1s}^\lambda(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\lambda(\vec{x}_2) \\ \varphi_{1s}^\lambda(\vec{x}) &= \left(\frac{\lambda^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\lambda x}, \quad \lambda = \frac{27}{16}\end{aligned}$$

stellt die einfachste der verwendeten Näherungen für den Heliumgrundzustand dar. Der Einfluss der elektronischen Bewegung, der durch das Feld des jeweils anderen Elektrons ins Spiel gebracht wird, wird nur gemittelt berücksichtigt: in Form einer für beide Elektronen identischen konstanten effektiven Ladung, also eines konstanten Abschirmungseffektes. Das effektive Targetpotential, in dem sich jedes der beiden Elektronen bewegt, ist in diesem Fall ein reines Coulombpotential. Beide Elektronen bewegen sich in diesem Bild völlig entkoppelt.

Der hier vorgenommene Vergleich von Experiment und Theorie berücksichtigt die streuwinkelabhängige Verteilung des neutralen Projektils nach dem Stoß und das Emissionsverhalten des freigesetzten Elektrons.

4.4.1 Streuwinkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte

Abbildung (4.2) zeigt die berechneten einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte (DWQ¹⁷) in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel und der Stoßenergie in Gegenüberstellung mit den experimentellen Beobachtungen.

¹⁷Differentieller Wirkungsquerschnitt

Aus Abschnitt 2.3.1 geht hervor, dass die Lage der berechneten Wirkungsquerschnitte auf der Energieskala durch den Gewichtungsfaktor $\frac{1}{(E-\bar{E}_z)}$ bestimmt ist. Dieser Gewichtungsfaktor hängt von der Gesamtenergie E und der mittleren Energie der Zwischenzustände \bar{E}_z ab. Da die berechneten Querschnitte infolgedessen nicht im Hinblick auf ihren absoluten Wert mit dem Experiment verglichen werden können, wurden sie auf den experimentellen Wert normiert. Aufgrund der Größenordnung der Wirkungsquerschnitte kann man davon ausgehen, dass die Messgenauigkeit für die hier berücksichtigten Stoßenergien um so größer ist, je niedriger die Stoßenergie ist. Für die Theorie erwartet man einen gegenläufigen Trend: die Brauchbarkeit eines auf der Störungsrechnung beruhenden Ansatzes ist bedingt durch die längere Stoßzeit für niedrigere Energien am ehesten in Frage zu stellen. Daher wurde der theoretisch erhaltene Wert der mittleren der drei betrachteten Stoßenergien (0.63 MeV) für den Streuwinkelort des experimentellen Maximums auf den experimentellen Wert eben dort normiert.

Betrachtet man den qualitativen Verlauf des Wirkungsquerschnitts in Abhängigkeit vom Streuwinkel, treten die größten Abweichungen im Bereich kleiner Streuwinkel auf. Auch stimmt die Lage des Maximums nicht überein. In beiden Fällen, Experiment und Theorie, erkennt man ein Schmalwerden der Peak-Struktur mit zunehmender Stoßenergie und eine damit einhergehende leichte Verschiebung des Peaks zu kleineren Streuwinkeln hin. Ansonsten bleibt die Lage der Peak-Struktur relativ unabhängig von der Stoßenergie.

Verstehen lässt sich dieses Verhalten aufgrund der Stoßparameterabhängigkeit von Einfang und Ionisation und der Verknüpfung beider Prozesse: Für höhere Stoßenergien – betrachtet man den Stoßprozess im klassischen Bild – kommen die größten Beiträge zum Einfang aus Stoßparameterbereichen, in denen sowohl die Elektronendichte am größten¹⁸ als auch die internukleare Wechselwirkung nicht von Bedeutung ist. Daher sind, je höher die Stoßenergie ist, im Mittel stärkere Beiträge durch Stöße mit größeren Stoßparametern und damit kleineren Streuwinkeln zu erwarten. Die strukturgebenden Eigenschaften der Ionisation im Hinblick auf den Wirkungsquerschnitt sind in diesem Bereich eher vernachlässigbar, da die Ionisationswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit vom Stoßparameter sehr langsam abfällt und bei großen Stoßparametern nahezu konstant ist. Die streuwinkeldifferentiellen Querschnitte gehen für Streuwinkel von 0.0 mrad gegen

¹⁸eine Anmerkung dazu findet man in Abschnitt 1.3.1

Null, da sie mit dem Sinus des Streuwinkels $\sin(\theta_p)$ gewichtet wurden.

Darauf, dass die internukleare Wechselwirkung nicht von ausschlaggebendem Einfluss zu sein scheint, deutet ebenfalls die relativ konstante Lage des Maximums trotz Änderung der Projektilgeschwindigkeit hin: Die Unabhängigkeit der Lage des Maximums von der Stoßenergie und damit verknüpft auch von der Dauer des Stoßes, macht es wahrscheinlich, dass die internukleare Wechselwirkung zumindest in einem Streuwinkelbereich bis circa $\theta_p = 0.8$ mrad keine Rolle spielt, sondern dass dort der Einfluß der Projektil-Elektron-Wechselwirkung dominiert. Dies legt nahe, dass die Hauptbeiträge durch sehr schnell ablaufende Prozesse zustande kommen. In der Konsequenz ist dies ein Indiz dafür, dass zumindest bis zu einem Streuwinkel von $\theta_p = 0.8$ mrad, die Beschreibung des Übergangs im Rahmen eines störungstheoretischen Verfahrens angemessen zu sein scheint.

An Bedeutung gewinnen Kern-Kern-Streuprozesse im Bereich größerer Streuwinkel und höherer Energien (ab ca. $\theta_p = 0.8$ mrad bei $E_p = 0.63$ MeV und $E_p = 1.0$ MeV). Hier zeigt sich eine Abflachung des Steigungsverhaltens, die für 1.0 MeV besonders stark ausfällt und in der theoretischen Beschreibung erst bei größeren Streuwinkeln wiedergegeben wird. Eine Ursache könnte der zunehmende Einfluss der internuklearen Wechselwirkung sein. Im Fall der Stoßenergie von 1.0 MeV ist allerdings auch mit sichtbaren Beiträgen durch den ee-Thomas-Prozess zu rechnen.

Der Blick auf Abbildung (4.2) zeigt, vergleicht man die Stoßenergieabhängigkeit von Experiment und Theorie am Streuwinkelort des Maximums, dass es hier Abweichungen gibt: Der Verlauf der experimentellen Querschnitte in Abhängigkeit vom Streuwinkel wird in quantitativer Hinsicht weder für eine Stoßenergie von 0.3 MeV, noch für 1.0 MeV richtig wiedergegeben. Für die niedrigste der betrachteten Stoßenergien, 0.3 MeV, wird der Wirkungsquerschnitt überschätzt, für eine Stoßenergie von 1.0 MeV unterschätzt. Natürlich kann die Ursache hierfür in der nicht berücksichtigten zusätzlichen Stoßenergieabhängigkeit des Gewichtsfaktors liegen. Die Abhängigkeit der berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte von der Stoßenergie ist allerdings äußerst komplex und wird auch über die Wahl der Targetbeschreibung beeinflusst. Eine solche Aussage kann an dieser Stelle daher nicht eindeutig getroffen werden.

Welche Gründe gibt es, die Unterschiede gegenüber dem Experiment zu erklären? Da die Gültigkeit eines störungstheoretischen Ansatzes nicht in Frage steht, kann

die Art der Targetbeschreibung von Bedeutung sein. Diesen Sachverhalt jedenfalls legt das Ergebnis einer Untersuchung von Belkic und Gayet [41] nahe. Die Autoren untersuchten die Sensitivität des CDW-Ansatzes gegenüber der Wahl der Targetwellenfunktion: auf der Basis der Berechnung totaler Wirkungsquerschnitte für den Einfacheinfang am Proton-Helium-Stoßsystem zeigte sich eine deutliche Sensitivität des berechneten Querschnitts gegenüber der Targetwellenfunktion.

Wasserstoffaehnlicher Ansatz

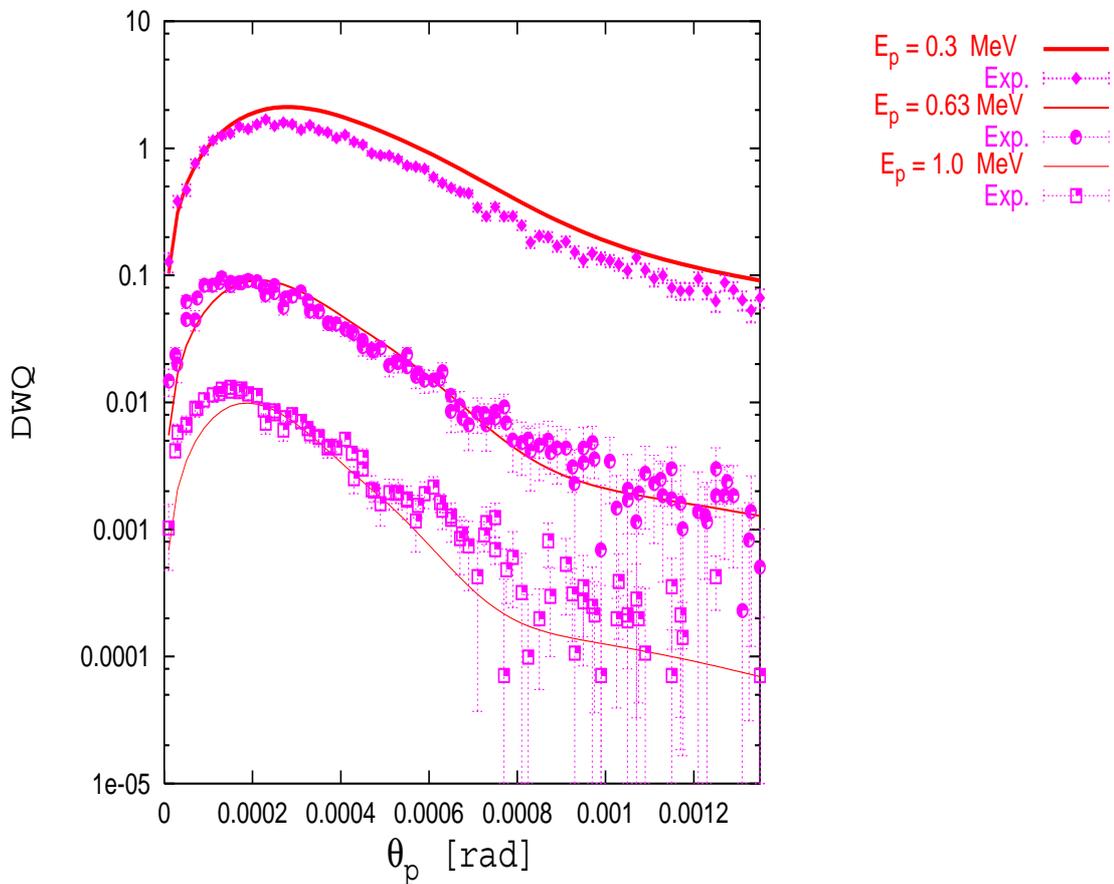


Abbildung 4.2: Vergleich gemessener und berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{a_0^2}{rad}]$ für verschiedene Projektilenergien. Wasserstoffähnlicher Ansatz. Die Werte wurden auf den experimentellen Wert bei $\theta_p = 0.19$ mrad und 0.63 MeV normiert.

4.4.2 Das Emissionsverhalten in verschiedenen Streuwinkelbereichen

Thema dieses Abschnitts sind die Eigenschaften der elektronischen Emission. Informationen diesbezüglich stecken in den berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitten (2.89), (2.90), (2.91). Trägt man den impulsdifferentiellen Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von den elektronischen Impulskomponenten parallel und senkrecht zur Einfallrichtung des Projektils für verschiedene Stoßenergien und verschiedene Streuwinkelbereiche auf, so gewinnt man Impulsprofile der emittierten Elektronen, die mit entsprechenden Messungen von Mergel [62] verglichen werden können. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind Gegenstand dieses Abschnitts.

Die Abbildungen (4.6 – 4.18) zeigen die berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte für drei verschiedene Stoßenergien 0.3 MeV, 0.63 MeV, 1.0 MeV, die Abbildungen (4.3, 4.4, 4.5) die entsprechenden Messergebnisse. Über die im Titel der Darstellung angezeigten Streuwinkelintervalle als auch über den Azimutwinkel der Emissionsrichtung φ_e wurde jeweils integriert. Multiplikation mit dem Sinus des Polarwinkels der elektronischen Emissionsrichtung liefert den emissionsenergie- und emissionswinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\left. \frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \right|_{\theta_p^<}^{\theta_p^>} , \quad (4.27)$$

der dem impulsdifferentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\left. \frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \right|_{\theta_p^<}^{\theta_p^>} \quad (4.28)$$

direkt entspricht.¹⁹

Zur Präsentation der berechneten differentiellen Wirkungsquerschnitte wurden zwei verschiedene Darstellungsformen gewählt:

- Typ I (Abb. 4.6 – Abb. 4.14): Darstellung des differentiellen Wirkungsquerschnitts in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\hat{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion der Impuls-

¹⁹Dies folgt aus dem Übergang der Darstellung in ebenen Polarkoordinaten (k^e, θ_e) in ein kartesisches Koordinatensystem $(k_{\perp}^e, k_{\parallel}^e)$ und $E^e = \frac{k^e{}^2}{2}$.

komponenten des emittierten Elektrons senkrecht und parallel zur Einschussrichtung des Projektils anhand von Höhenlinien. Lage und Anzahl der Höhenlinien und die Größe des von den Grafiken erfassten Ausschnitts der Wirkungsquerschnittskala wurden so gewählt, dass die wesentliche Struktur des Impulsprofils durch die Darstellung möglichst gut wiedergegeben wird, ohne dass Konturen sichtbar werden, die durch Berechnungen in numerisch problematischen Zahlenbereichen ins Spiel kommen. Hierbei ist die Höhe der berechneten Wirkungsquerschnitte farbcodiert und die Skalierung linear. Sowohl die Zuordnung der Farben zu den Zahlenwerten als auch die Schrittweite der Farbskala ist nicht einheitlich und geht aus der links stehenden Legende jeder Grafik hervor. Diese Darstellungsvariante wurde in Anlehnung an die Präsentationsform der experimentellen Ergebnisse gewählt.

- Typ II (Abb. 4.15 – Abb. 4.18): Darstellung des differentiellen Wirkungsquerschnitts in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des Emissionswinkels für verschiedene Emissionsenergien oder des elektronischen Impulsbetrages für verschiedene Emissionswinkel. In Ermangelung experimenteller Daten könne diese Darstellungen nicht direkt mit dem Experiment verglichen werden.

Beim Vergleich der theoretisch gewonnenen Spektren mit dem Experiment ist ein Sachverhalt zu berücksichtigen: der differentielle Wirkungsquerschnitt enthält weder eine azimuthale Abhängigkeit in der elektronischen Emission (siehe dazu Fussnote 14 im Abschnitt 2.6), noch in der Emission des Projektils. Die Integration über den Azimutwinkel φ_e beziehungsweise φ_p liefert jeweils den Faktor 2π . Aufgründdessen sind nur noch die Impulskomponenten senkrecht und parallel zur Strahlachse $k_{\perp}^e = k^e \sin \theta_e$ und $k_{\parallel}^e = k^e \cos \theta_e$ zugänglich. Dahingegen weisen die experimentell gewonnenen Verteilungen die Information bezüglich des Azimuths auf. Da die Elektronenemission nahezu auf die Streuebene des Projektils beschränkt ist, entspricht ein Datenpunkt der theoretisch gewonnenen Grafiken (4.6– 4.14) somit der Summe der bezüglich der k_z^e -Achse symmetrischen Messpunkte im entsprechenden experimentellen Spektrum (4.3, 4.4, 4.5).

Ein Kommentar zu den Ergebnisdarstellungen der Experimente soll an dieser Stelle gegeben werden: Diese wurden der Arbeit von Mergel ([62], Abb. 6.15, S. 124, Abb. A.17, S. 126, Abb. A.15, S. 152) in unveränderter Form entnommen.

Die senkrechten Linien links des Ursprungs geben die Transversalkomponente des Impulses, der vom Projektil durch den Stoß übertragen wird (4.1), an den Grenzen des jeweiligen Streuwinkelintervalls an. So kann unter Berücksichtigung der Impulserhaltung (3.10) auf die Aufteilung des Impulsübertrags vom Projektil auf Targetion und Elektron rückgeschlossen werden. Die durchgezogene und die gestrichelte Kreislinie²⁰ geben die zu erwartende Longitudinalkomponente als Funktion der Transversalkomponente des elektronischen Impulses unter der Bedingung eines binären Stoßes des Elektrons mit dem Projektil (BEE) (4.14) an. Beide Linien unterscheiden sich hinsichtlich der Berücksichtigung der Bindungsenergien: die gestrichelte Linie bezeichnet die für den BEE erwartete Longitudinalkomponente unter Berücksichtigung der Bindungsenergien, die volle Linie die Longitudinalkomponente mit ihrer Vernachlässigung. In beiden Fällen hat man das Bild einer unabhängig vom Einfang ablaufenden Ionisation, die durch einen binären Stoß zwischen Elektron und Projektil verursacht wurde. Die punktierte Kreislinie gibt die Longitudinalkomponente des elektronischen Impulses an, wie sie sich aus den mit dem kinematischen Rücken zweiter Ordnung verknüpften Bedingung (1.104) und (4.1) ableitet

$$\vec{q} + \vec{k}_f^e = -\Delta\vec{K}_T = 0$$

und beschreibt somit die für eine Transferionisation in zweiter Ordnung der Störungstheorie zu erwartenden elektronischen Impulse.

Folgende Beobachtungen lassen sich im Experiment (4.3, 4.4, 4.5) respektive der Stoßenergie- und Streuwinkelabhängigkeit der Emission machen (siehe dazu auch [62]):

Den größten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt liefern erwartungsgemäß Elektronen mit niedrigen Energien, wobei die meisten aus dem Streuwinkelbereich $\theta_p \in [0.0, 0.25]$ mrad kommen. Dies zeigt die Ähnlichkeit der integralen Verteilung (4.6a, 4.9a, 4.12a) mit (4.6b, 4.9b, 4.12b).

In Abhängigkeit von der Stoßenergie erkennt man eine immer stärkere Strukturierung der Verteilungen mit zunehmender Stoßenergie. Dieses Verhalten wiederholt sich in der Abhängigkeit vom Streuwinkelbereich: Je stärker das Projektil gestreut wird, desto ausgedehnter und weniger symmetrisch zeigt sich das betref-

²⁰Die Länge des Kreisradius gibt die Projektilgeschwindigkeit wieder.

fende Impulsspektrum. Auch der Bereich der stärksten Emission erstreckt sich ab einem Wert von $\theta_p = 0.45$ mrad mit zunehmendem Streuwinkel über einen immer größeren langezogenen Bereich (Bergkammstruktur). Im Streuwinkelbereich von $\theta_p \in [0.65, 0.95]$ mrad findet man ein zweites Maximum und ausserdem sehr hart gestreute Elektronen mit infolgedessen hohen Emissionsenergien. Eine Abweichung von diesem systematischen Gang zeigt sich dann im nächst größeren Streuwinkelbereich: Hier ist das Emissionsverhalten weniger strukturiert und nahezu symmetrisch um die k_z^e -Achse.

Betrachtet man die Emissionsrichtung entlang der Einschussachse, so fällt die ausgeprägte Rückwärtsemission ins Auge: In allen über den berücksichtigten Streuwinkelbereich integrierten Verteilungen liegt das Maximum im Bereich negativer Longitudinalimpulskomponenten. Das Elektron wird also verstärkt in entgegengesetzter Richtung zum auslaufenden, nunmehr neutralen Projektil emittiert.

Man entnimmt den Grafiken in Abhängigkeit vom betrachteten Streuwinkelintervall insgesamt folgendes Verhalten: Bei sehr kleinen Projektilstreuwinkeln $\theta_p \leq 0.25$ mrad entstehen für alle drei Stoßenergien die meisten der rückwärts gestreuten Elektronen.

Im sich daran anschließenden Streuwinkelbereich beobachtet man im Intervall $\theta_p \in [0.25, 0.45]$ mrad eine Verschiebung der bevorzugten Emissionsrichtung zugunsten positiverer Longitudinalimpulskomponenten, die sich in Abhängigkeit von der Stoßenergie etwas abschwächt.

Der Streuwinkelbereich $\theta_p \in [0.45, 0.65]$ mrad ist der Bereich der Thomas-Streuung erwartet wird. Hier liegt zudem der klassisch maximal zu erwartende Projektilstreuwinkel von $\theta_p^{max^L} = 0.54$ mrad für die Elektronen, die durch eine Ionisation infolge eines binären Stoßes (BEE) entstehen. Da bei der Transferionisation zusätzlich zu einer Ionisation ein Einfang stattfindet und somit zwei Streuungen erfolgen, kann der Streuwinkel durchaus größer sein.

Die Lage des Emissionsmaximums in den gemessenen Impulsverteilungen für 0.3 MeV und 0.63 MeV wird in diesem Streuwinkelfenster durch die durchgezogene Kreislinie gut beschrieben und besitzt damit die für einen unabhängig ablaufenden Prozess, den KCBE, erwarteten Emissionsmerkmale. Erst bei 1 MeV liegt das Maximum bei $k_z^e = 0$ auf der punktierten Kreislinie: Ein Hinweis darauf, dass der ee-Thomas-Prozess jetzt eine zunehmende Rolle spielt. Die Emission zeigt einen langezogenen Ausläufer, der sich entlang dem durch den punktierten

Kreis angedeuteten kinematischen Rücken zweiter Ordnung bis in den Bereich negativer Longitudinalkomponenten erstreckt.

Ab $\theta_p > 0.65$ mrad zeigen alle Verteilungen zwei Maxima, von denen jeweils eines mit der Emission relativ schneller hart gestreuter Elektronen verknüpft ist. Mit Ausnahme des Impulsspektrums der niedrigsten betrachteten Projektilenergie 0.3 MeV – hier liegt eines der beiden Maxima im Bereich der Vorwärtsstreuung – zeigt keines der beiden Maxima das für einen binären Stoß erwartete Verhalten: Bei höheren Projektilenergien liegen die Spitzen sämtlicher Maxima im Rückwärtsstreubereich. Mit steigender Stoßenergie verstärkt sich die Emission in negativer k_z^e -Richtung. Auch im nächsten Streuwinkelbereich $\theta_p \in [0.65, 0.95]$ bleibt die Emission überwiegend rückwärts ausgerichtet.

Inwieweit gelingt es nun, das experimentell beobachtete Emissionsverhalten mit dem Modellansatz zu reproduzieren? Betrachtet man die berechneten Verteilungen (4.6 – 4.14), lässt sich Folgendes feststellen:

Auch in diesem Fall tragen Elektronen mit niedrigen Energien unabhängig von der Stoßenergie den größten Anteil zum Wirkungsquerschnitt bei, wobei ebenfalls die Emission am stärksten im Streuwinkelbereich $\theta_p \in [0.0, 0.25]$ mrad ist.

Betrachtet man die Symmetrie der Verteilung senkrecht zur Einschussrichtung, so fällt auf, dass die Verteilung umso asymmetrischer wird, je größer die Emissionsenergie der Elektronen ist. In der Umgebung des Ursprungs $k^e = 0$ hingegen treten symmetrisch zur k_\perp^e -Achse (senkrecht zur Einschussachse des Projektils) und nahezu unabhängig vom Streuwinkelbereich und von der Stoßenergie mehrere Maxima auf, die sich in ihrer Ausprägung je nach Streuwinkelbereich unterscheiden. Ein weiteres Maximum liegt nahezu direkt auf der Achse selbst und tritt bevorzugt bei höheren Stoßenergien auf. Einen detaillierteren Einblick in die Emissionswinkelabhängigkeit und damit in die Symmetrie der Verteilung geben die Abbildungen (4.15, 4.16). Sie legen die Verteilung der emittierten Elektronen in Abhängigkeit vom Emissionswinkel für die Stoßenergien 0.3 MeV und 1.0 MeV dar. Deutlich ist eine mit zunehmender Elektronenenergie sich verstärkende Asymmetrie bezüglich der Richtung senkrecht zur Einschussachse zu erkennen: Die winkelabhängige Verteilung wird, je höher die Elektronenenergie ist, hinsichtlich Vorwärts- und Rückwärtsrichtung zunehmend asymmetrisch.

Dieses Verhalten lässt sich aus der Interferenz der Terme verschiedener Drehimpulsquantenzahlen L in der Partialwellenentwicklung verstehen [43]. Die Interfe-

renz der Partialwellen bestimmt die Winkelabhängigkeit des Emissionsspektrums und damit auch die Symmetrieeigenschaften des Impulsspektrums. Maßgeblich ist hierbei das Zusammenspiel der Phasendifferenz $e^{i(\sigma_L - \sigma_{L'})}$ zwischen den jeweils interferierenden Paartermen und der Gewichtung der Terme mit dem Produkt der Kugelflächenfunktionen $Y_{L'M}^*(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e)$. Anhand der Zerlegung von (2.91) in Diagonal- und Interferenzterme bezüglich L wird dies verständlich

$$\begin{aligned} \frac{\partial^5 \sigma_{ci}}{\partial \Omega_p \partial \theta_e \partial E_e} &= \frac{32\pi}{\tilde{g}(E, \overline{E}_z)^2} \mu^2 v (2\pi)^3 \sin \theta_e \left[\sum_L \sum_M |Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) \mathcal{B}_{LLMM}^{100}(\eta, k^e)|^2 \right. \\ &\quad + \sum_{L \neq L'} i^{L'-L} e^{i(\sigma_L - \sigma_{L'})} \sum_M Y_{L'M}^*(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e) \\ &\quad \left. \mathcal{B}_{LLMM}^{100}(\eta, k^e) \mathcal{B}_{L'L'MM}^{100*}(\eta, k^e) \right] . \end{aligned} \quad (4.29)$$

Die Asymmetrie in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung entsteht also alleine durch das Vorhandensein von Interferenztermen²¹ in der Summe. Im Falle konstruktiver Interferenz für einen festen Elektronenwinkel resultiert eine Peak-Struktur. Je mehr Partialwellen beitragen, desto enger wird dieses Maximum. Interferieren die Terme destruktiv, ist die Emission in der entsprechenden Richtung unterdrückt. Ist die Energie der emittierten Elektronen klein, so tragen aufgrund ihres geringen Drehimpulses nur wenige Partialwellen zur Summe in (4.29) bei. Das erklärt die Zunahme der Varianz der Verteilung, je stärker die Emissionsenergie der Elektronen ansteigt. Dass Interferenzterme schwächer beitragen, je geringer die Emissionsenergie ist, darauf deutet die zunehmende Symmetrie der Verteilung bezüglich der Richtung senkrecht zur Einschussachse hin.

Man findet im Gegensatz zum Experiment einen von der Stoßenergie relativ unabhängigen Grad der Strukturierung der Impulsverteilungen, während sich das Erscheinungsbild der Verteilung in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel deutlich ändert. Ab einer Stoßenergie von 0.63 MeV treten ab einem Streuwinkel von 0.25 mrad weitere Maxima auf. Diese Maxima treten sehr ausgeprägt im Streuwinkelintervall $\theta_p \in [0.45, 0.65]$ mrad auf, liegen entlang eines Halbkreises angeordnet und können als Konsequenz der Emission infolge eines binären Stoßes zwischen Projektil und Elektron BEE interpretiert werden.

²¹Beim Bilden des Betragsquadrats der Kugelflächenfunktionen mit gleichem L, M fällt die azimutale Winkelabhängigkeit weg und es bleibt $|Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}_e)|^2 = |P_{LM}(\cos \theta_e)|^2$. Dieser Ausdruck ist für beide Winkel θ_e und $\theta_e + \pi$ identisch.

Für Projektilstreuwinkel bis zu 0.95 mrad erstreckt sich die Emission um so langgezogener in den Bereich zunehmender transversaler und *positiver* longitudinaler Impulskomponenten, je stärker das Projektil gestreut wird und je größer die Stoßenergie ist.

Der Effekt entspricht dem von Manson et al. [97] beschriebenen “Peakingverhalten” der Emissionsspektren: Die winkelabhängige Verteilung ändert sich wesentlich mit zunehmender Emissionsenergie von einer relativ flachen Verteilung im Niedrigenergiebereich bis hin zu einer stark gepeakten Verteilung. Dies tritt um so ausgeprägter in Erscheinung, je größer der Streuwinkel als auch die Stoßenergie ist.

Besonders klar erkennbar wird dies, betrachtet man die in den Abbildungen (4.15, 4.16) zur Darstellung gebrachte Verteilung der emittierten Elektronen in Abhängigkeit vom Emissionswinkel für die Stoßenergien 0.3 MeV und 1.0 MeV. Wie zuvor bereits erwähnt, entsteht eine Peak-Struktur aus der konstruktiven Interferenz der beitragenden Partialwellen. Das Peakingverhalten wird aber auch aus einer klassischen Perspektive verständlich, wenn man bedenkt, dass klassisch der Endzustand eines vor dem Stoß ruhenden Elektrons nach einem binären Stoß vollständig bestimmt ist. Damit entspricht der BEE-Peak einer Deltafunktion in der winkelabhängigen Verteilung, die im Realfall aufgrund der Geschwindigkeitsverteilung des im Target gebundenen Elektrons als Peak-Struktur endlicher Breite sichtbar wird. Je größer die durch den Stoß auf das Elektron übertragene Energie verglichen mit der Bindungsenergie des Elektrons ist, desto schmaler erscheint die Peak-Struktur. Dies ist auch in Abbildung (4.15, 4.16) zu sehen. Die Verschiebung des Peaks in Richtung kleinerer Emissionswinkel, je höher die Emissionsenergie ist, ist nach Gleichung (4.14) zu erwarten.

Einen Einblick in die Streuwinkelabhängigkeit der Emission geben die Abbildungen (4.17, 4.18). Sie haben die Verteilung der emittierten Elektronen auf die verschiedenen Energien bzw. Impulsbeträge für Stoßenergien von 0.3 MeV und 0.63 MeV zum Inhalt. Deutlich erkennt man das unterschiedliche Emissionsverhalten in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung bezogen auf die Einschussachse des Projektils. Für Emissionswinkel im Bereich der Rückwärtsstreuung (hier $\theta_e = 135^\circ, 175^\circ$) ist das Emissionsverhalten nahezu unabhängig vom Projektilstreuwinkel. Der Wirkungsquerschnitt fällt sehr schnell mit zunehmender elektronischer Energie ab, obwohl sich eine leichte Erhöhung des Anteils von Elek-

tronen mit höheren Impulsbeträgen, bei größeren Projektilstreuwinkeln erkennen lässt. Betrachtet man nun die Emission in Vorwärtsrichtung (hier $\theta_e = 5^\circ, 45^\circ$), so zeigt sich hier sehr wohl eine Streuwinkelabhängigkeit im Emissionsverhalten: Je stärker das Projektil gestreut wird, also je enger die Stöße werden und je größer die Stoßenergie ist, desto stärker erhöht sich der Anteil hochenergetischer Elektronen. Besonders ausgeprägt sichtbar wird dies im Streuwinkelbereich von $\theta_p \in [0.45, 0.95]$ mrad, während sich der Effekt für noch größere Projektilstreuwinkel abschwächt. Dass der Anteil hochenergetischer Elektronen in diesem Streuwinkelbereich ansteigt, korrespondiert mit dem Ergebnis einer Untersuchung von Gayet und Salin [69], dass Projektilstreuwinkel um 0.5 mrad einem Maximum der mittleren elektronischen Energie entsprechen.

Teilweise ist im hochenergetischen Bereich bei Emissionswinkeln von 5° , beziehungsweise 45° ein lokales Maximum der Emission zu erkennen, das zwischen Projektilstreuwinkeln von 0.45 mrad und 0.95 mrad relativ zum niederenergetischen Anteil der emittierten Elektronen besonders ausgeprägt auftritt. Der Lage dieses Maximums entnimmt man, dass es sich um ein Resultat der Emission aufgrund eines binären Stoßes zwischen Projektil und Elektron handelt: nach (4.16) erwartet man für einen binären Stoßes zwischen Projektil und Elektron einen Impulsbetrag von

$$k^e = 2 v \cos\theta_e \quad (4.30)$$

für das freigesetzte Elektron, falls die Bindungsenergie des Elektrons vernachlässigt wird. Wird das Elektron in einem Winkel von 5° emittiert, leitet sich daraus für eine Projektilenergie von 0.3 MeV ein Impulsbetrag von 6.9 a.u. ab, für 45° hat man einen Wert von 4.9 a.u. zu erwarten. Entsprechend ergeben sich nach (4.30) folgende Werte für eine Stoßenergie von 0.63 MeV: 10.0 a.u. für einen Emissionswinkel von 5° und 7.1 a.u. für 45° .

Aus den Darstellungen (4.3, 4.4, 4.5) geht hervor, dass in der experimentellen Impulsverteilung lediglich im Bereich negativer Longitudinalimpulse Schnittgeraden bestimmter Emissionswinkel existieren, die es erlauben, in der entsprechenden energiedifferentiellen Darstellung zwei Maxima zu finden. Für den Fall des wasserstoffähnlichen Targetansatzes treten jedoch mehrere Maxima lediglich in Vorwärtsrichtung auf. Im Bereich der Rückwärtsstreuung gibt es weder ein zweites Maximum, wie es im Experiment beobachtet wurde, noch erhöht sich

der Anteil hochenergetischer Elektronen in diesem Streuwinkelbereich. Insgesamt überwiegt die Emission in Richtung positiver Longitudinalimpulsanteile und damit in Vorwärtsrichtung bezogen auf die Einschussrichtung des Projektils.

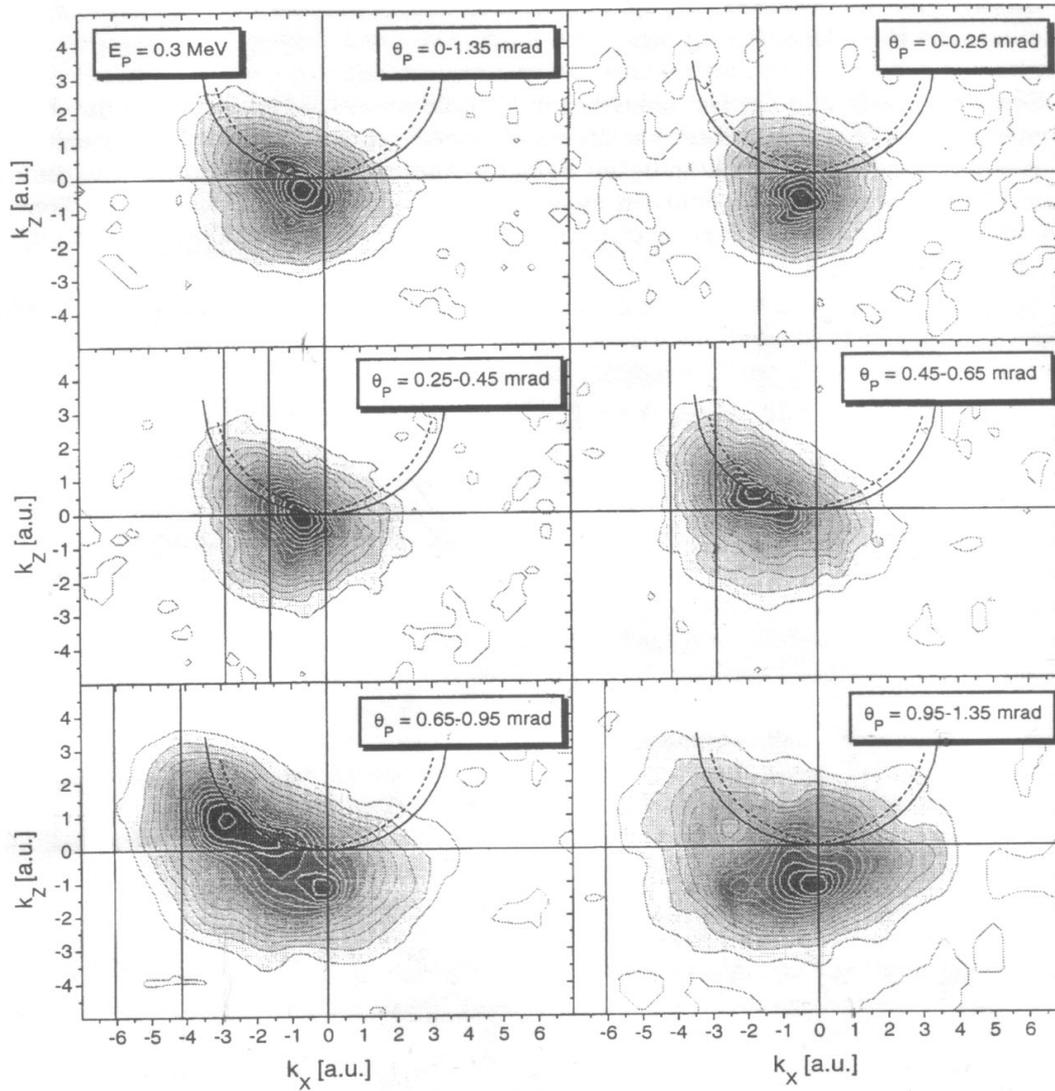


Abbildung 4.3: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_x^e \partial k_z^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ für $E_p = 0.3$ MeV. Über das angegebene Streuwinkelintervall wurde jeweils integriert. Experimentelle Daten von Mergel, Abb. 6.15, S. 124 seiner Arbeit [62].

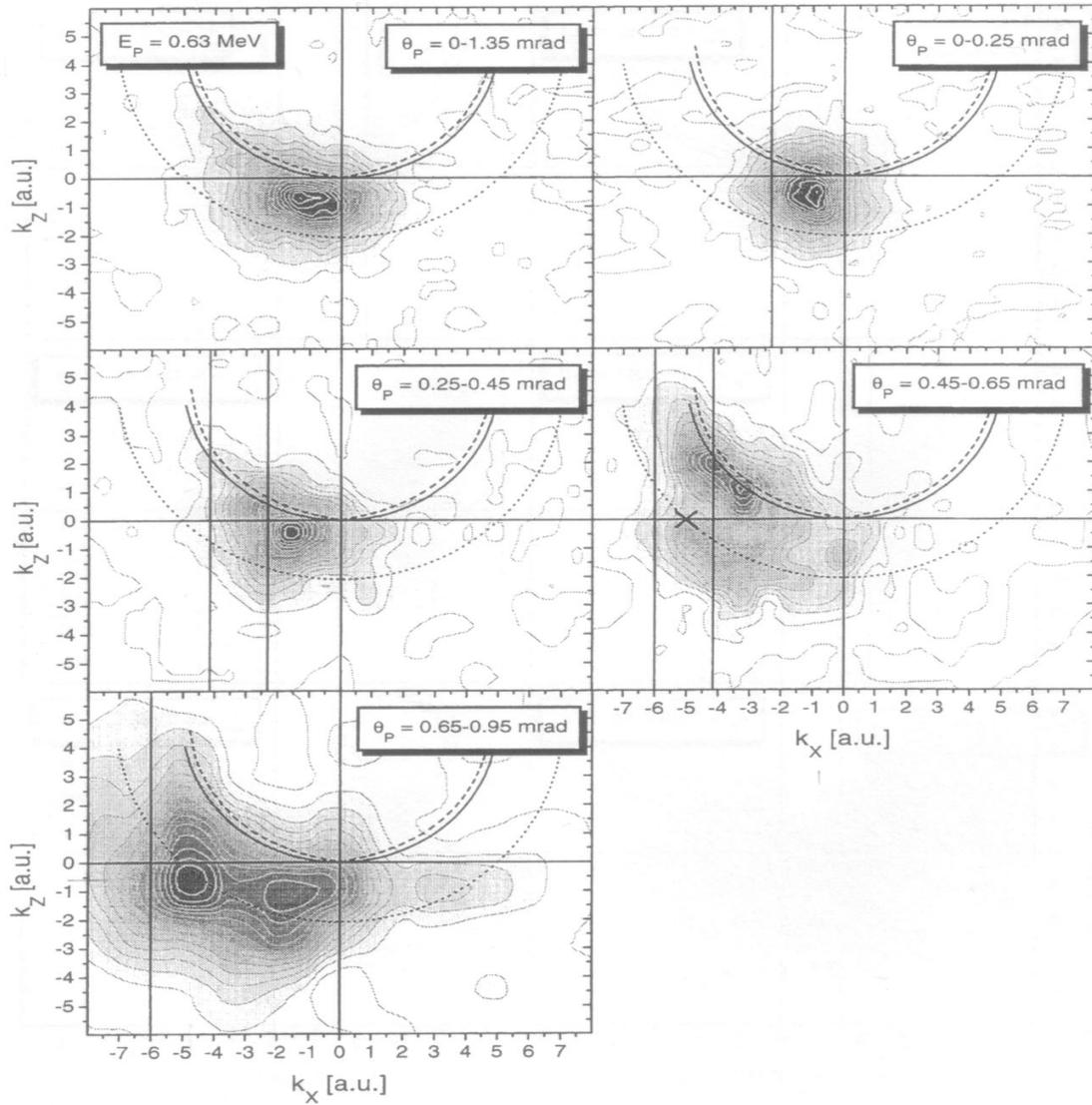


Abbildung 4.4: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_x^e \partial k_z^e} \Big|_{\theta_p^e}$ für $E_p = 0.63$ MeV. Über das angegebene Streuwinkelintervall wurde jeweils integriert. Experimentelle Daten von Mergel, Abb. A.15, S. 152 seiner Arbeit [62].

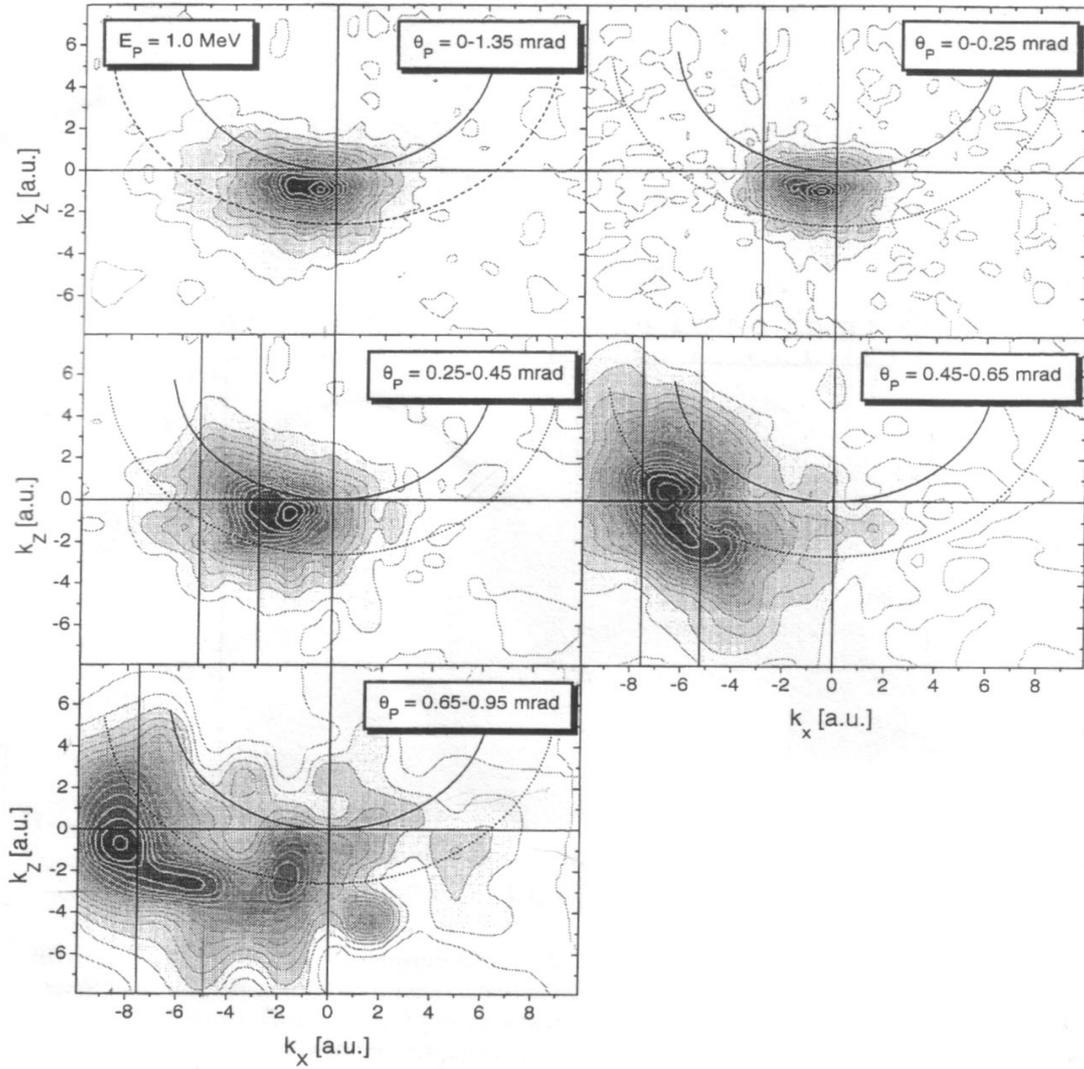


Abbildung 4.5: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_x^e \partial k_z^e} \Big|_{\theta_p^e}$ für $E_p = 1.0$ MeV. Über das angegebene Streuwinkelintervall wurde jeweils integriert. Experimentelle Daten von Mergel, Abb. 6.17, S. 126 seiner Arbeit [62].

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

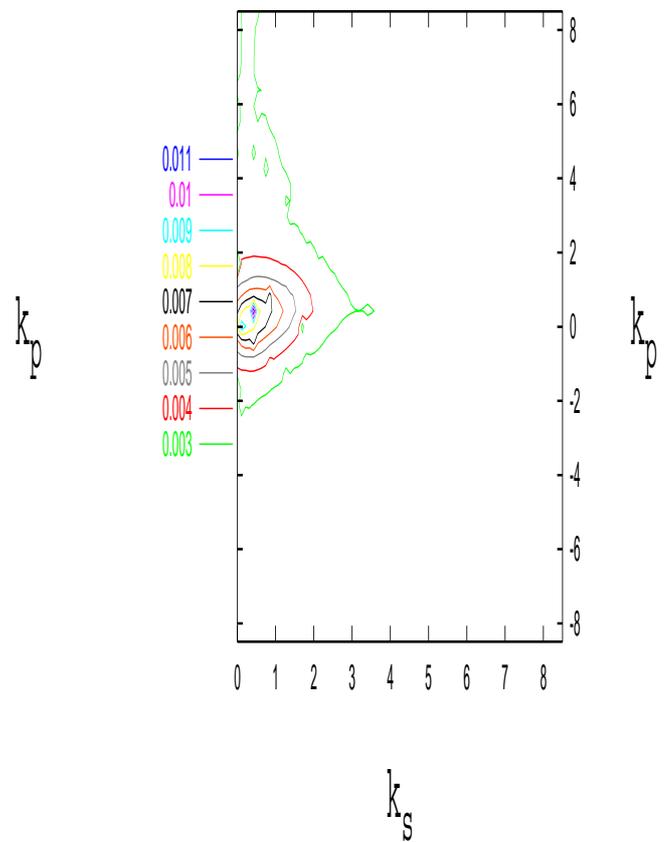
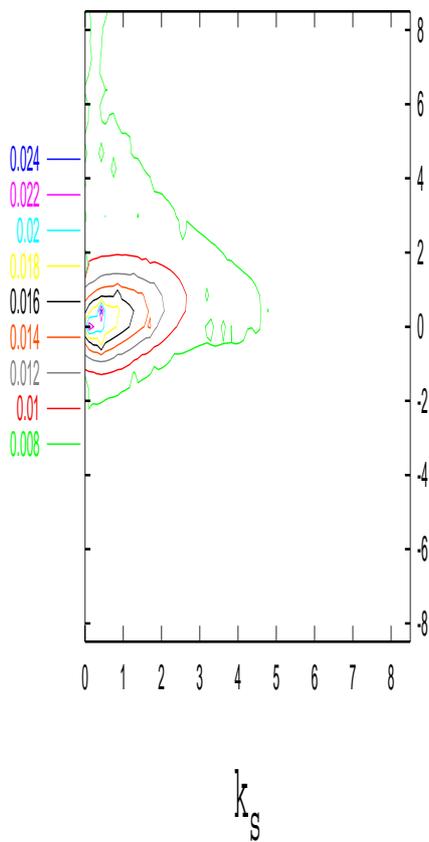


Abbildung 4.6: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

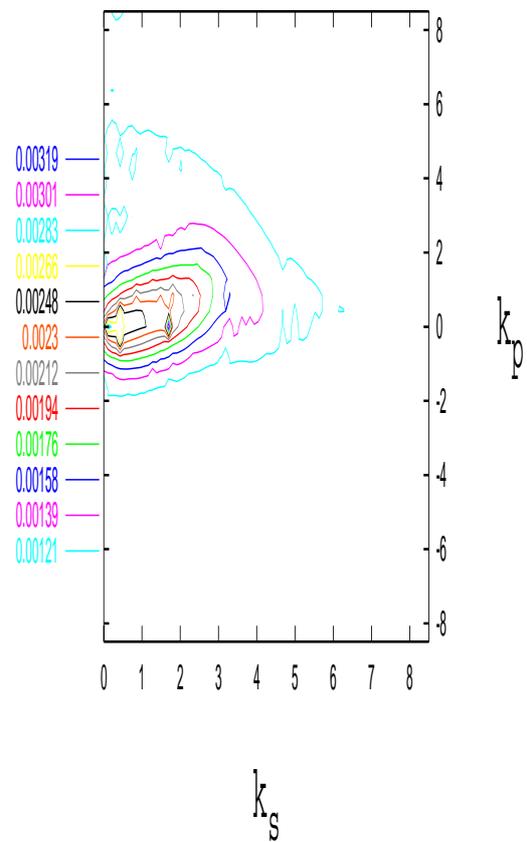
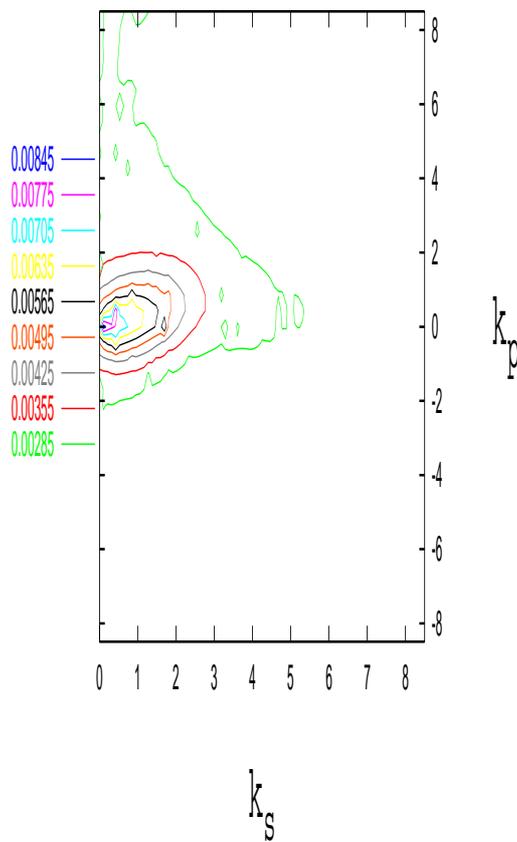


Abbildung 4.7: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^{\epsilon} \partial k_{\parallel}^{\epsilon}} \Big|_{\theta_p^{\epsilon}}^{\theta_p^{\epsilon}}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

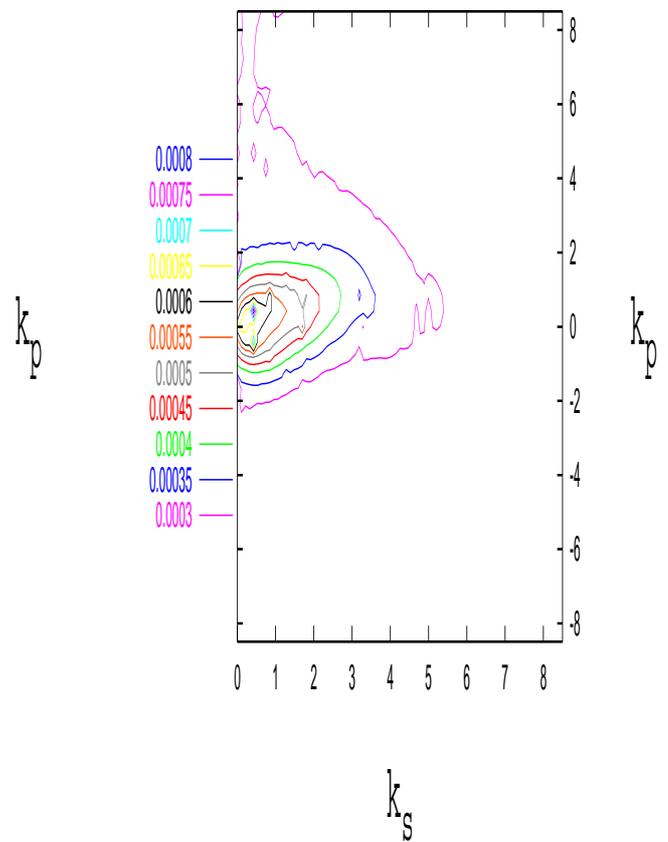
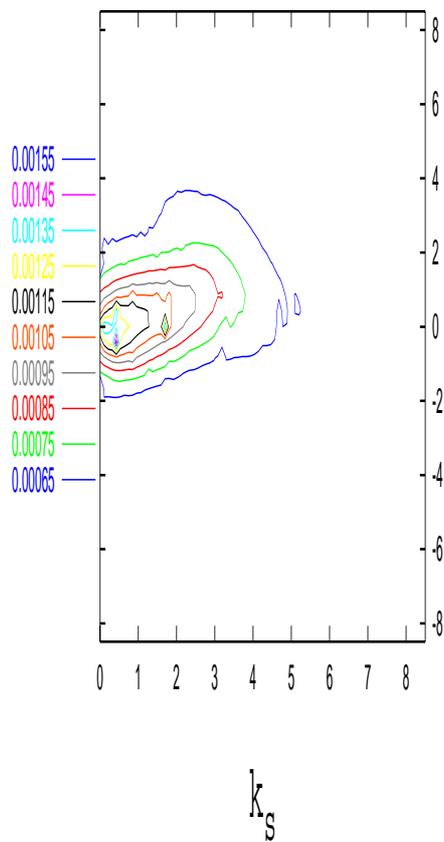


Abbildung 4.8: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

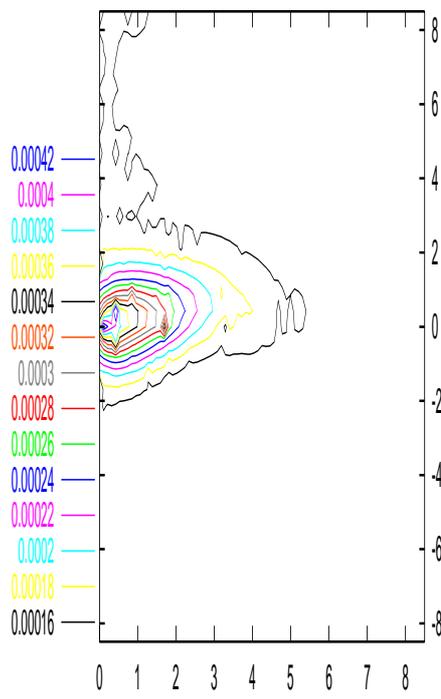
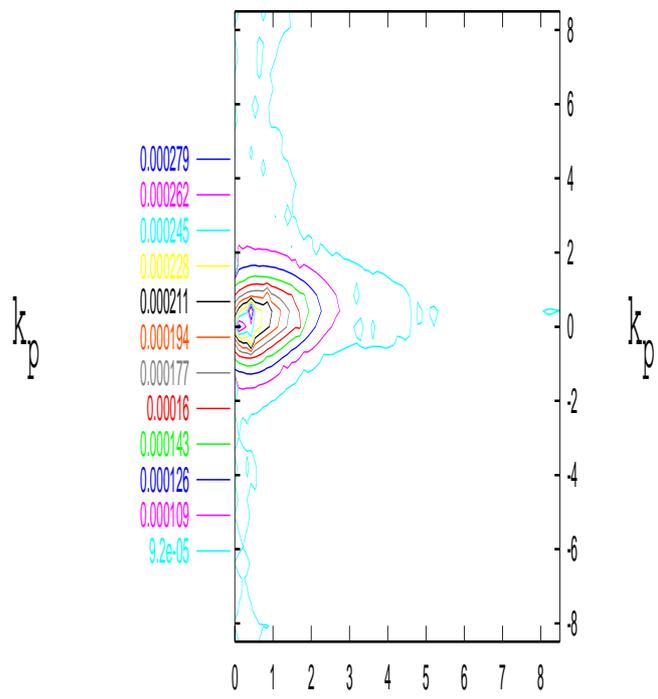

 k_s

 k_s

Abbildung 4.9: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^{\epsilon} \partial k_{\parallel}^{\epsilon}} \Big|_{\theta_p^{\epsilon}}^{\theta_p^{\epsilon}}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

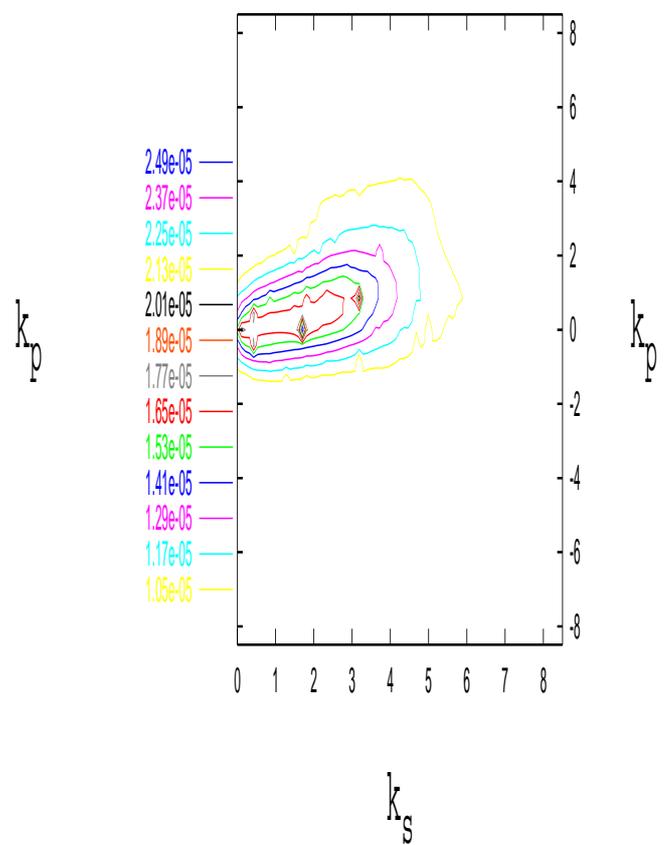
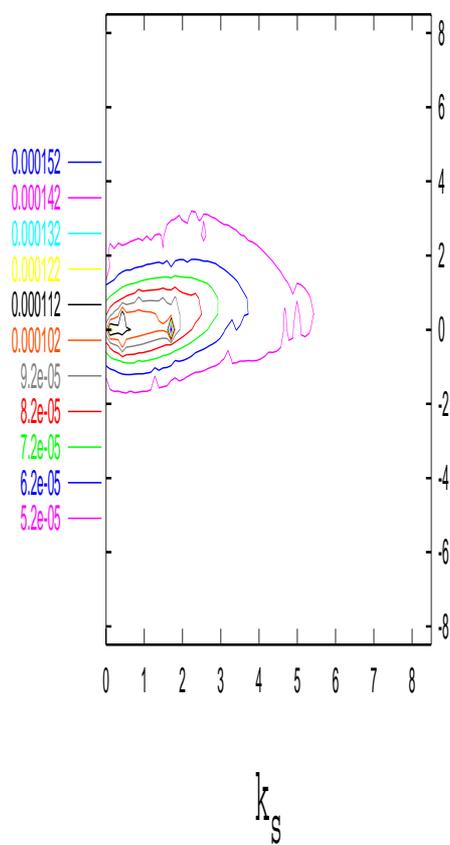


Abbildung 4.10: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

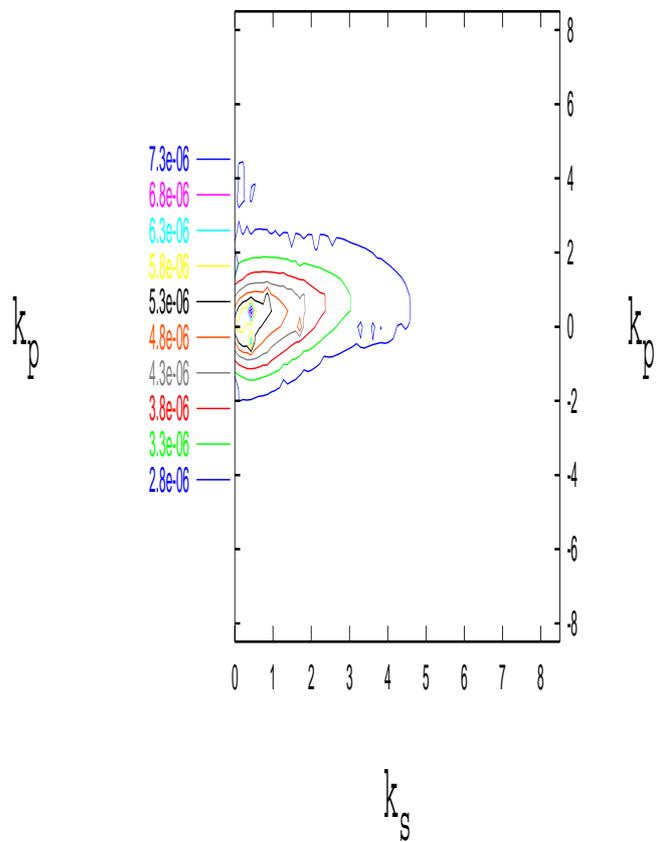
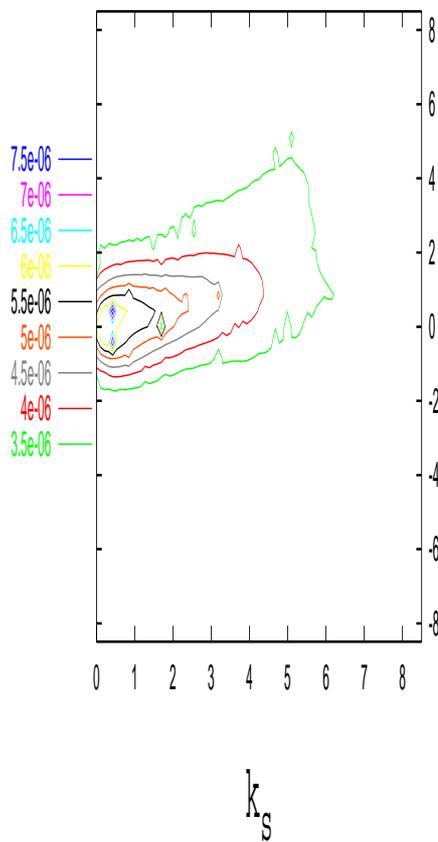


Abbildung 4.11: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

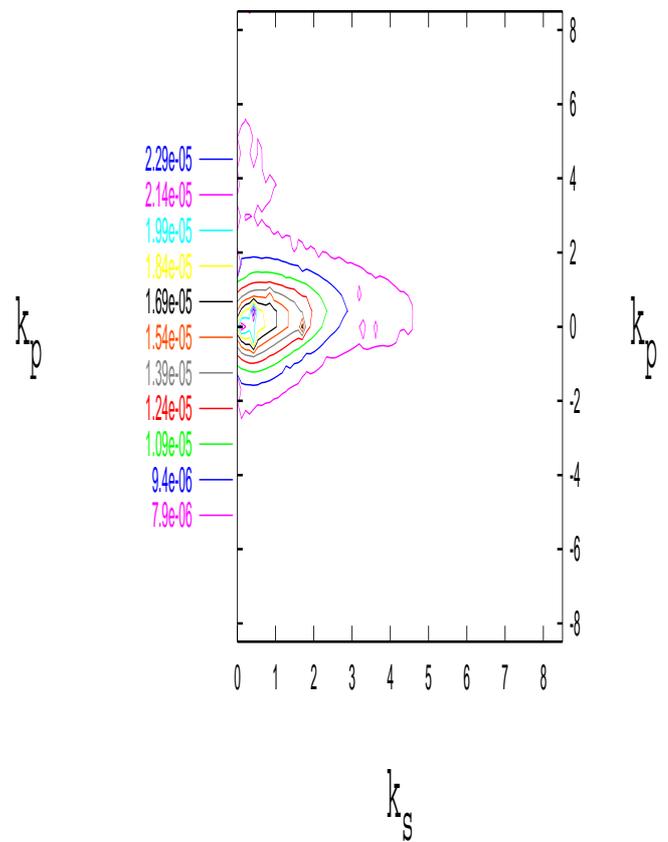
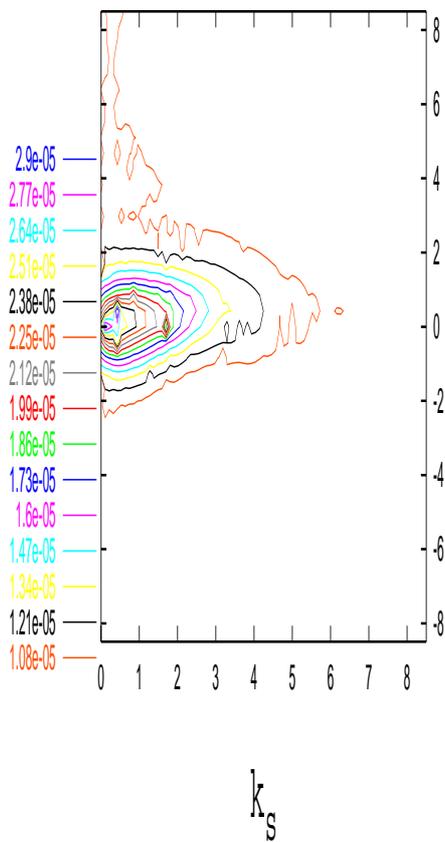


Abbildung 4.12: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

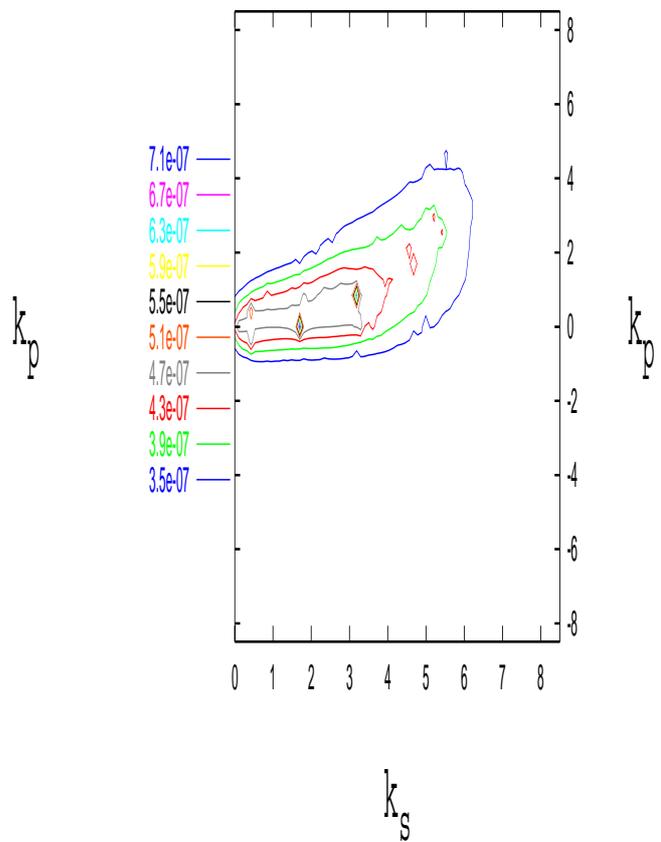
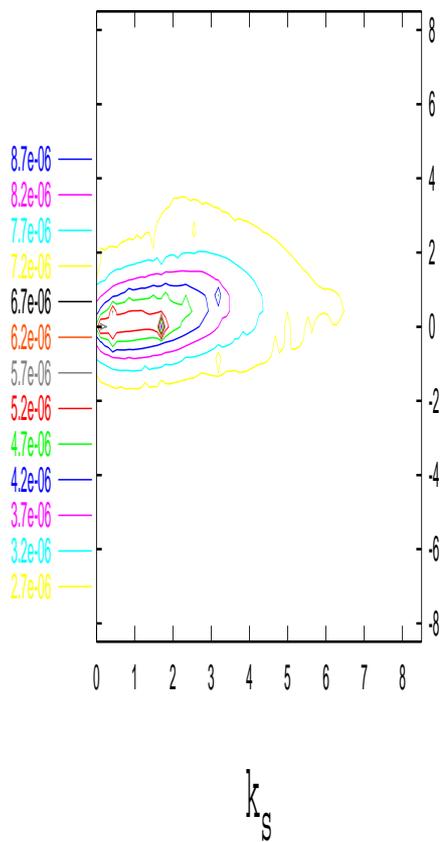


Abbildung 4.13: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

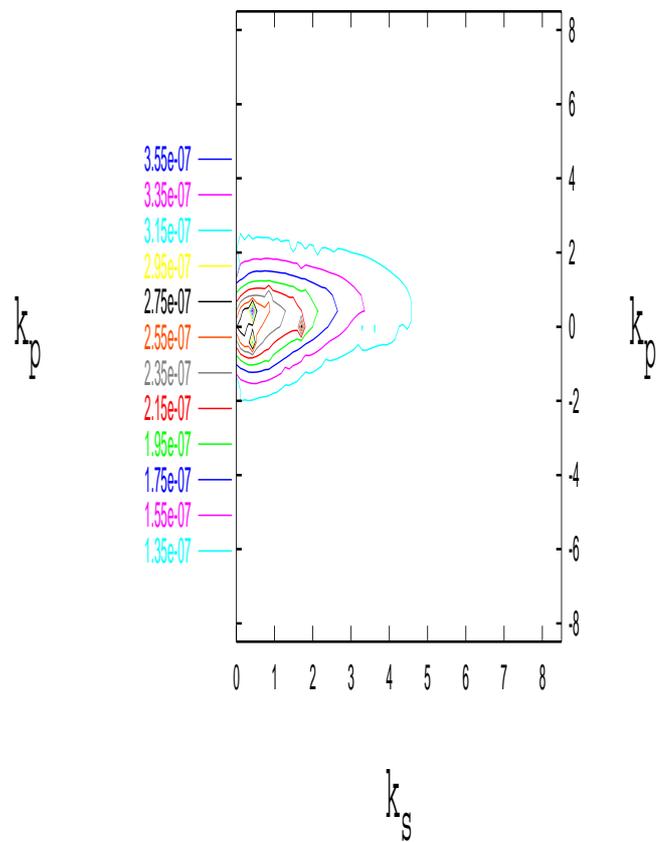
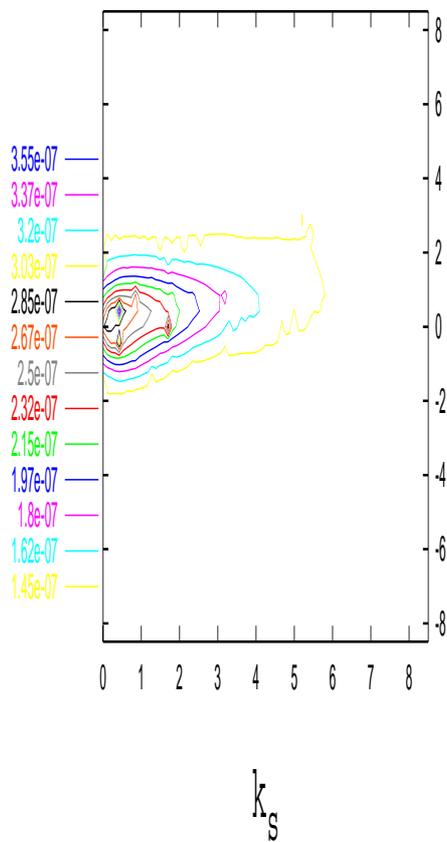


Abbildung 4.14: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

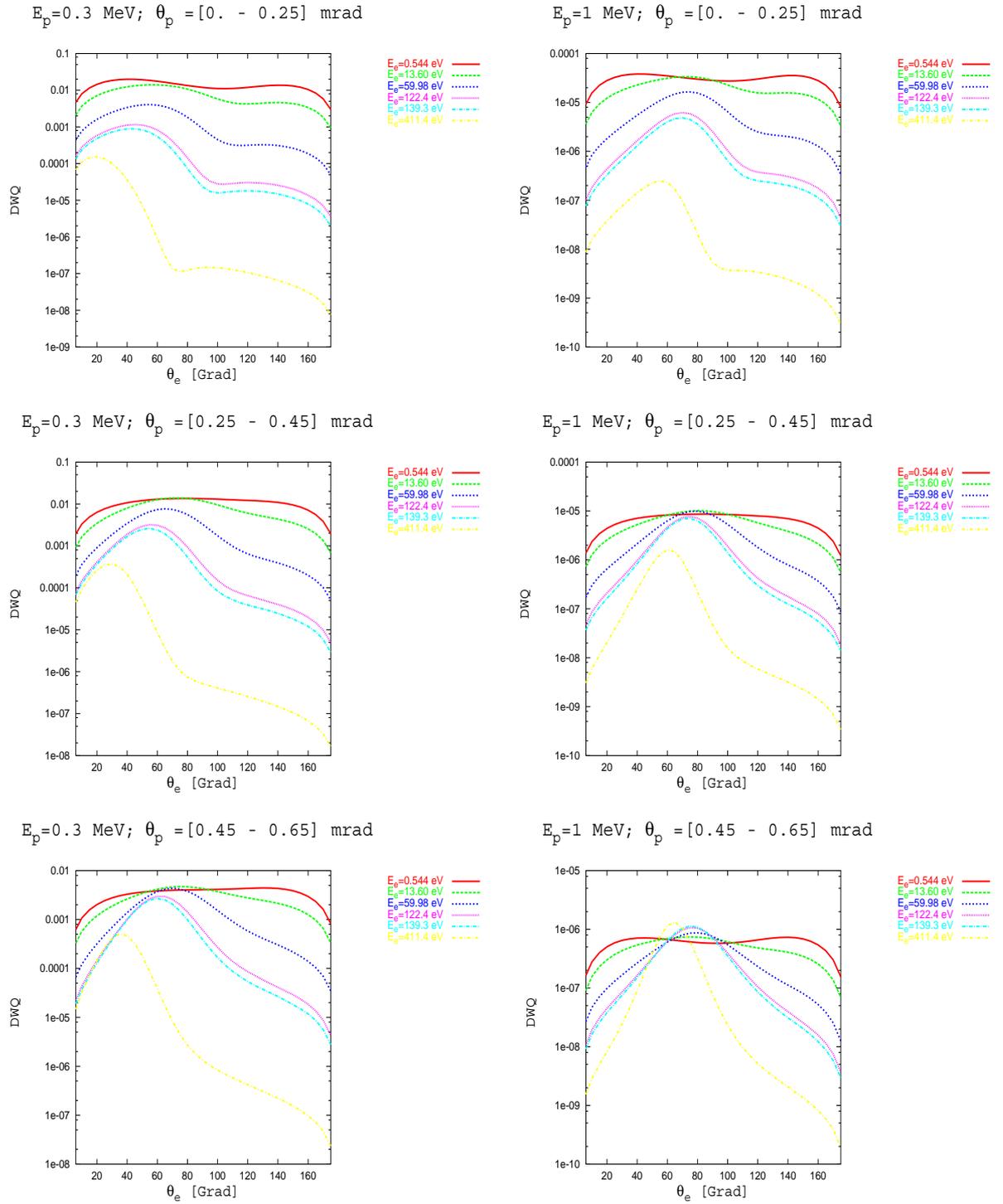


Abbildung 4.15: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}\right]$ als Funktion des Emissionswinkels. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

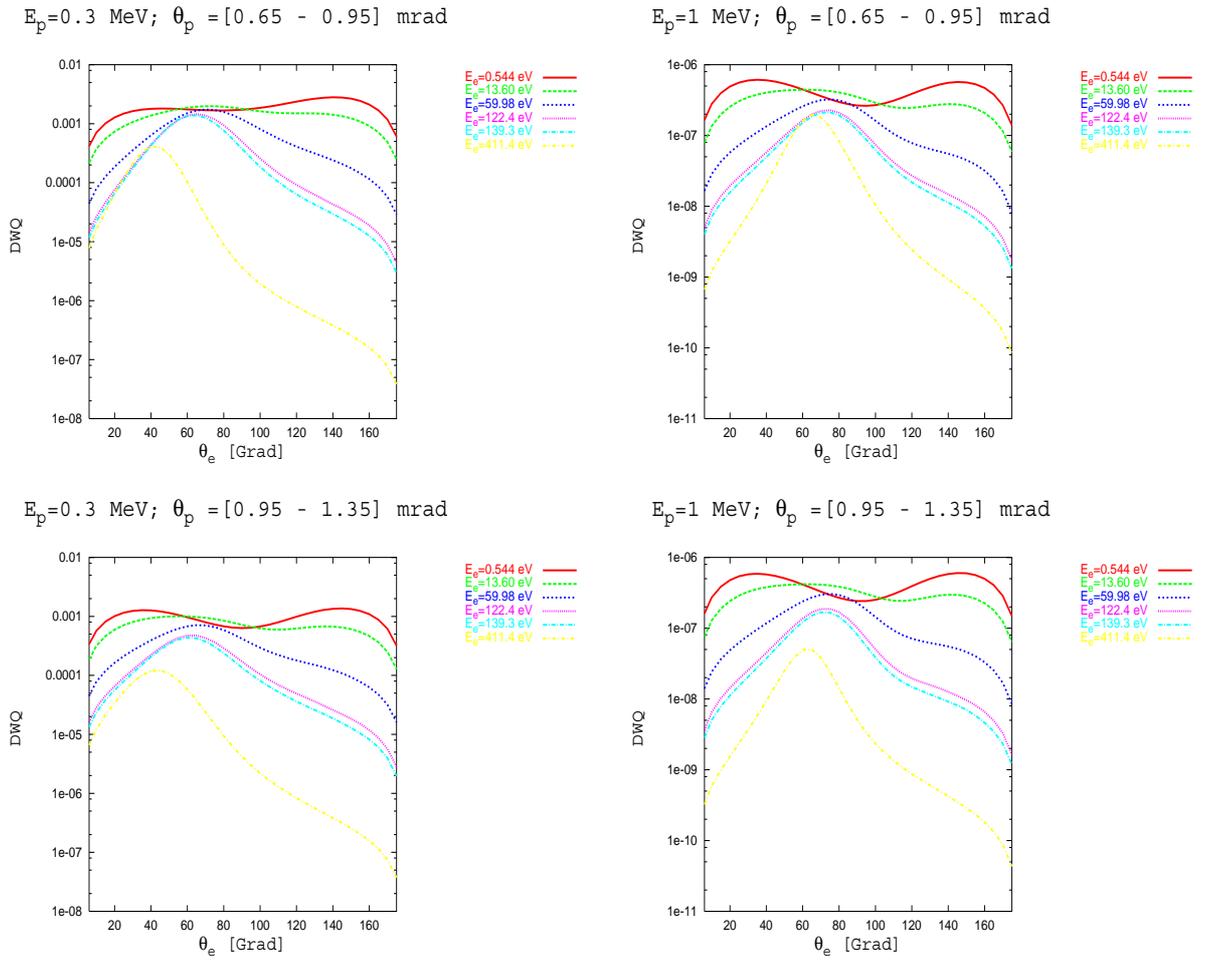


Abbildung 4.16: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des Emissionswinkels. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

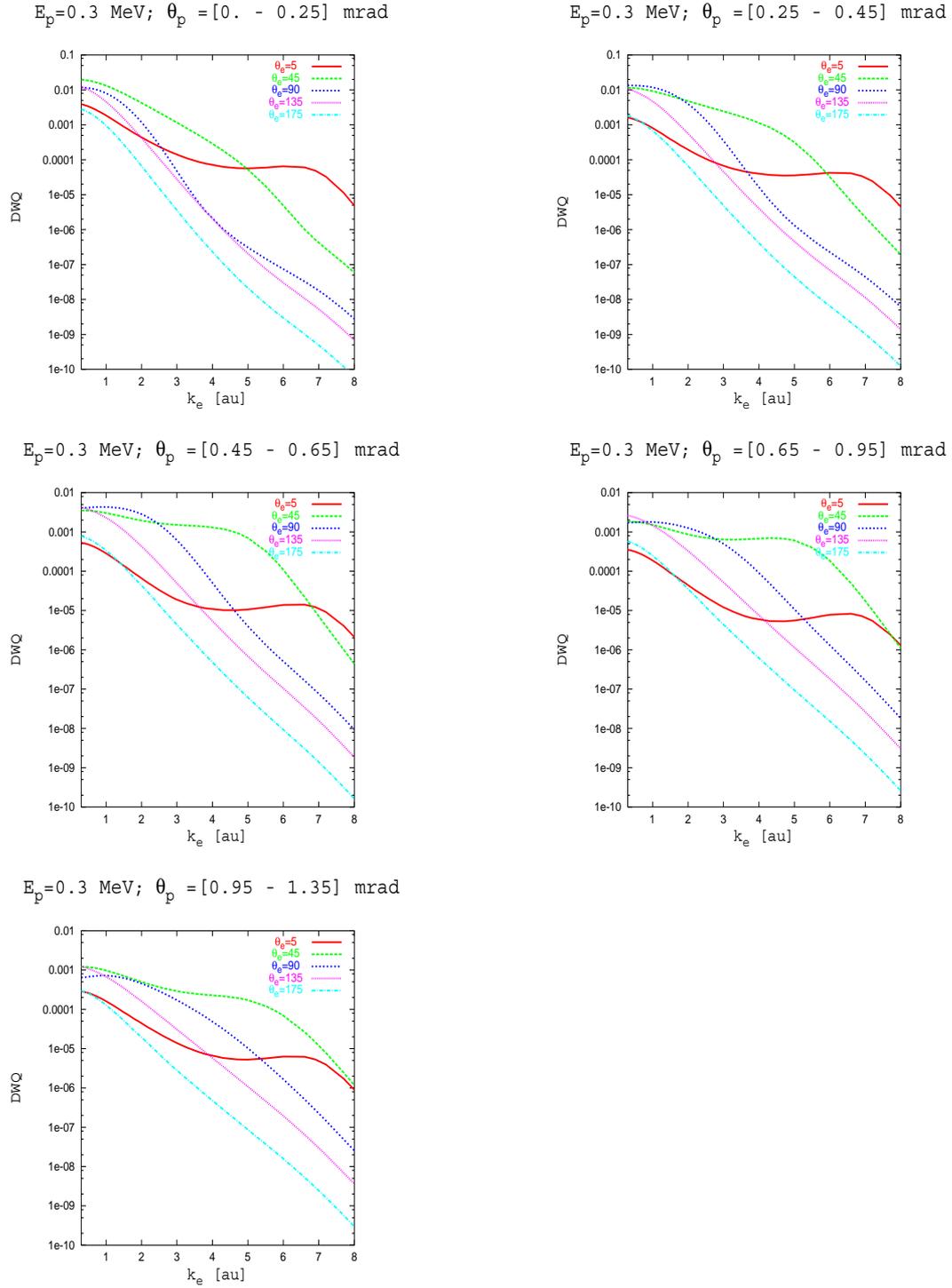


Abbildung 4.17: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{grad } E_H}]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E_e}$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

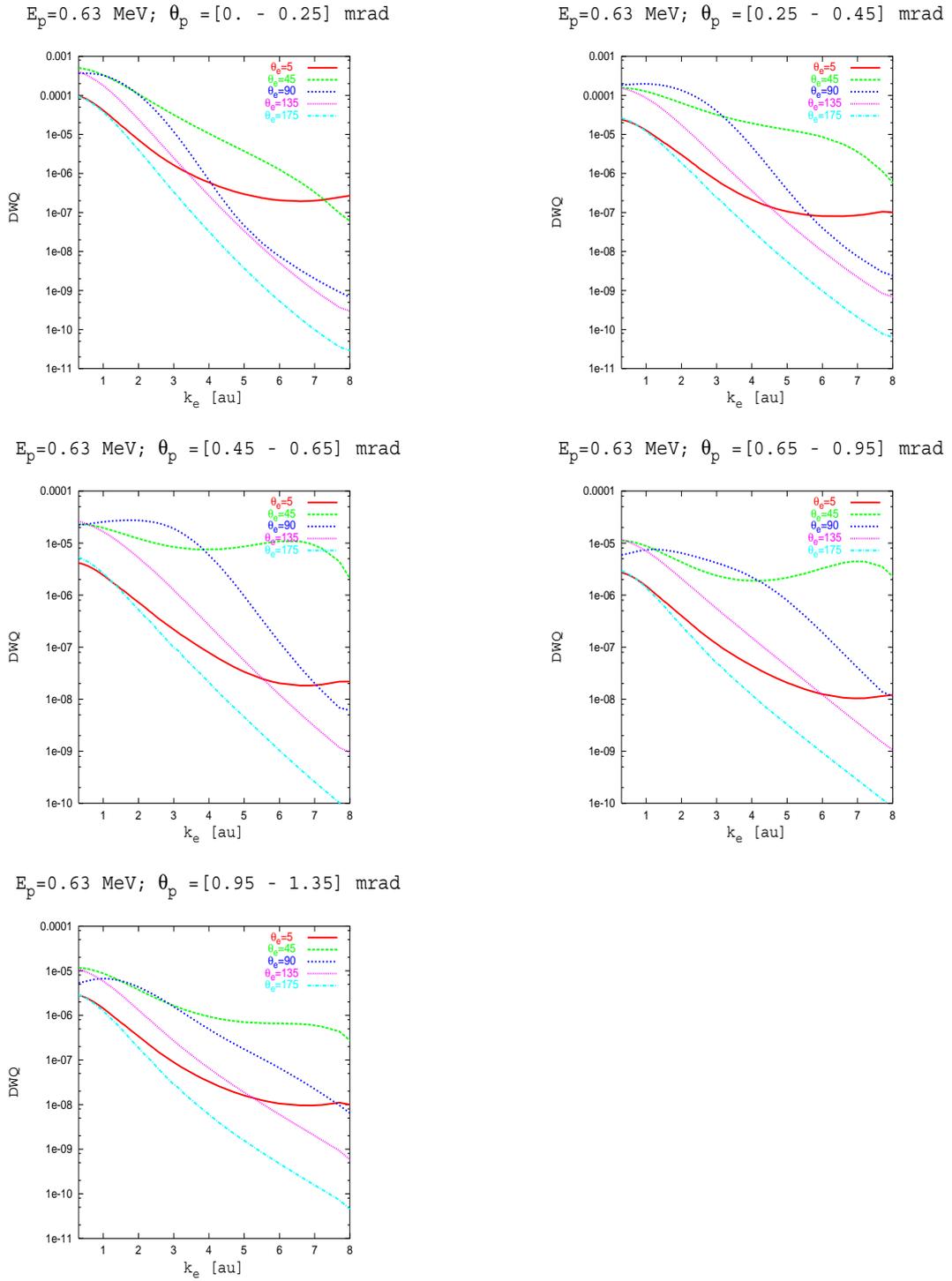


Abbildung 4.18: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial\sigma}{\partial E^e \partial\theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{grad } E_H}]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E^e}$. Wasserstoffähnlicher Ansatz.

4.4.3 Bewertung der Ergebnisse

Insgesamt betrachtet, stellt sich die Situation beim Vergleich der theoretischen Daten mit dem Experiment so dar:

Experimentell fällt ab $\theta_p > 0.65$ mrad die Emission von Elektronen mit vergleichsweise hohen Energien auf. Obwohl in keinem der theoretisch gewonnenen Spektren im Bereich der Rückwärtstreuung das Auftreten eines hochenergetischen Emissionsmaximums zu erkennen ist, findet man in den berechneten Verteilungen ab einem Streuwinkel von $\theta_p > 0.45$ mrad verstärkt schnellere Elektronen. Diese werden besonders in Vorwärtsrichtung um einen Wert von $\theta_e = 45^\circ$ emittiert. Sie folgen damit der für eine Ionisation infolge eines binären Stoßes erwarteten Emissionscharakteristik.

Die experimentell beobachtete Dominanz der Rückwärtsemission bezogen auf die Einschussachse wird mit dem verwendeten Ansatz nicht wiedergegeben. Im Gegensatz zum Experiment findet man insgesamt eine verstärkte Emission in Vorwärtsrichtung. Dies zeigt sich sowohl in den über den gesamten berücksichtigten Streuwinkelbereich $[0.0, 1.35]$ mrad integrierten Verteilungen als auch in allen anderen Streuwinkelbereichen (4.6 – 4.14).

Natürlich hängt die winkelabhängige Verteilung der Elektronen auch von der Struktur des Matrixelementes $\mathcal{B}_{L'L'MM}^{100}(\eta, k^e)$ in (4.29) und damit von der Struktur der Wellenfunktion ab. Im vorliegenden Fall besitzt der Ansatz zur Konstruktion der Targetwellenfunktion auf der Grundlage des Variationsprinzips die einfachstmögliche Struktur: die eines wasserstoffähnlichen Atoms im Grundzustand. Daher stellt sich hier die Frage, wie sensitiv die Winkelabhängigkeit der Emission auf die Targetbeschreibung ist. Dass die Auswahl der Targetbeschreibung eine wichtige strategische Entscheidung im Hinblick auf die Vorhersagekraft des Modells sein kann, darauf deutete schon die Diskussion der streuwinkelabhängigen Wirkungsquerschnitte hin. Eine einfache Möglichkeit, den Einfluss der Targetstruktur zu untersuchen, bietet die Implementation eines Hartree-Fock-Ansatzes in das Modell. Die Analyse der Ergebnisse für einen Hartree-Fock-Ansatz soll der Inhalt des nächsten Abschnitts sein.

4.5 Ergebnisse der Rechnungen mit einem Hartree-Fock-Ansatz

Gegenstand dieses Abschnitts ist ein Vergleich der experimentellen Daten mit den Prognosen des Modells unter Verwendung des Hartree-Fock-Ansatzes (2.3) zur Beschreibung des Heliumtargets

$$\Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \varphi_{1s}(\vec{x}_1) \varphi_{1s}(\vec{x}_2) \quad . \quad (4.31)$$

Mit der Verwendung eines Satzes wasserstoffähnlicher Grundzustandsfunktionen hat man im Rahmen der wasserstoffähnlichen Targetbeschreibung sehr starke Einschränkungen bezüglich der Struktur der Wellenfunktion gemacht. Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung wird der Erwartungswert des exakten Hamiltonoperators nach den Ein-Teilchen-Orbitalen variiert. Somit findet man die beste Ein-Teilchen-Funktion unter der Bedingung, dass man lediglich eine Slater-Determinante als Ansatz für die Zwei-Teilchen-Funktion verwendet. Der Hartree-Fock-Ansatz stellt daher die beste erzielbare Näherung im Bereich des Modells unabhängiger Teilchen dar und ist damit eine echte Fortentwicklung gegenüber dem einfachen wasserstoffähnlichen Ansatz.

Ein wesentlicher Unterschied gegenüber dem wasserstoffähnlichen Fall besteht in der Form des Potentials in dem sich ein Elektron bewegt: beim Hartree-Fock-Potential hat man kein reines Coulombpotential mehr. Vielmehr setzt sich das Potential aus einem kurzreichweiten Anteil und einem langreichweitigen Coulombpotential zusammen²². Dieser Umstand drückt sich nicht nur in Form eines gegenüber dem wasserstoffähnlichen Fall veränderten Radialanteils der Wellenfunktion aus, sondern auch durch das Auftreten einer zusätzlichen Phasenverschiebung $\xi_L(E_e)$ in der asymptotischen Wellenfunktion des emittierten Elektrons, da es als Eigenzustand des Targets beschrieben wird.

Dieser Abschnitt gliedert sich analog zu 4.4.

²²siehe Abschnitt 2.5

4.5.1 Streuwinkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte

In Abbildung (4.19) wird ein Vergleich zwischen den berechneten, auf das Experiment normierten streuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitten, die mit einer Hartree-Fock-Wellenfunktion gewonnen wurden, und dem Experiment gezogen. Sie entspricht Darstellung (4.2).

Auf Anhieb fällt die starke Übereinstimmung von Theorie und Experiment für die höheren Stoßenergien auf: sowohl die Lage der Maxima als auch der Bereich kleiner Streuwinkel werden sehr viel besser wiedergegeben.

Bei großen Streuwinkeln zeigt sich auch hier übereinstimmend mit dem Experiment die in Abbildung (4.2) für den wasserstoffähnlichen Fall beobachtete Abflachung der Kurve. Für 1.0 MeV wird der Wirkungsquerschnitt tendenziell leicht unterschätzt, möglicherweise eine Folge des mit diesem Modell nicht erfassten ee-Thomas-Prozesses.

Was die Stoßenergieabhängigkeit betrifft, so sieht man hier ebenfalls eine stärkere Entsprechung mit dem Experiment: die Höhe der experimentellen Werte wird durch die normierten streuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitte bei 0.3 MeV und bei 1.0 MeV gegenüber den mit einem wasserstoffähnlichen Ansatz erzielten Werten sehr viel besser beschrieben. Aus der veränderten Targetbeschreibung resultiert eine zusätzliche Stoßenergieabhängigkeit, die den experimentell beobachteten Zusammenhang auch ohne Berücksichtigung eines stoßenergieabhängigen Gewichtungsfaktors weitgehend erfasst.

Vergleicht man mit den Ergebnissen der Rechnung unter Annahme einer wasserstoffähnlichen Targetbeschreibung (Abb. (4.20)) wird deutlich, dass Hartree-Fock durchweg höhere differentielle Querschnitte liefert. Die Ursache hierfür findet man nicht in der Höhe der angenommenen Bindungsenergie²³, liegt doch der Wert für ein wasserstoffähnliches Target mit -0.8775 a.u. höher als der für das Hartree-Fock-Target gewählte Wert von -0.9042 a.u.. Das in einem wasserstoffähnlichen Target gebundene Elektron sollte also etwas schwächer gebunden sein. Hier müssen andere Faktoren, wie zum Beispiel die Form der zugrundeliegenden Radialfunktion, von Bedeutung sein.

Insgesamt deuten die Ergebnisse auf einen korrigierenden Einfluss der veränder-

²³Wie in den Abschnitten 2.2.2 bereits erwähnt, wird als Bindungsenergie die Eigenenergie des Elektrons im jeweiligen Ein-Teilchen-Bild verwendet.

ten Targetbeschreibung hin. Aufgrund des integralen Charakters der Wirkungsquerschnitte, zeigt sich die Tauglichkeit des Hartree-Fock-Ansatzes jedoch erst in einer Analyse der differentiellen Querschnitte. Zumindest eine Aussage lässt sich treffen: die Eigenschaften der streuwinkelabhängigen Verteilung sind sensitiv im Hinblick auf die Targetbeschreibung.

HF - Ansatz

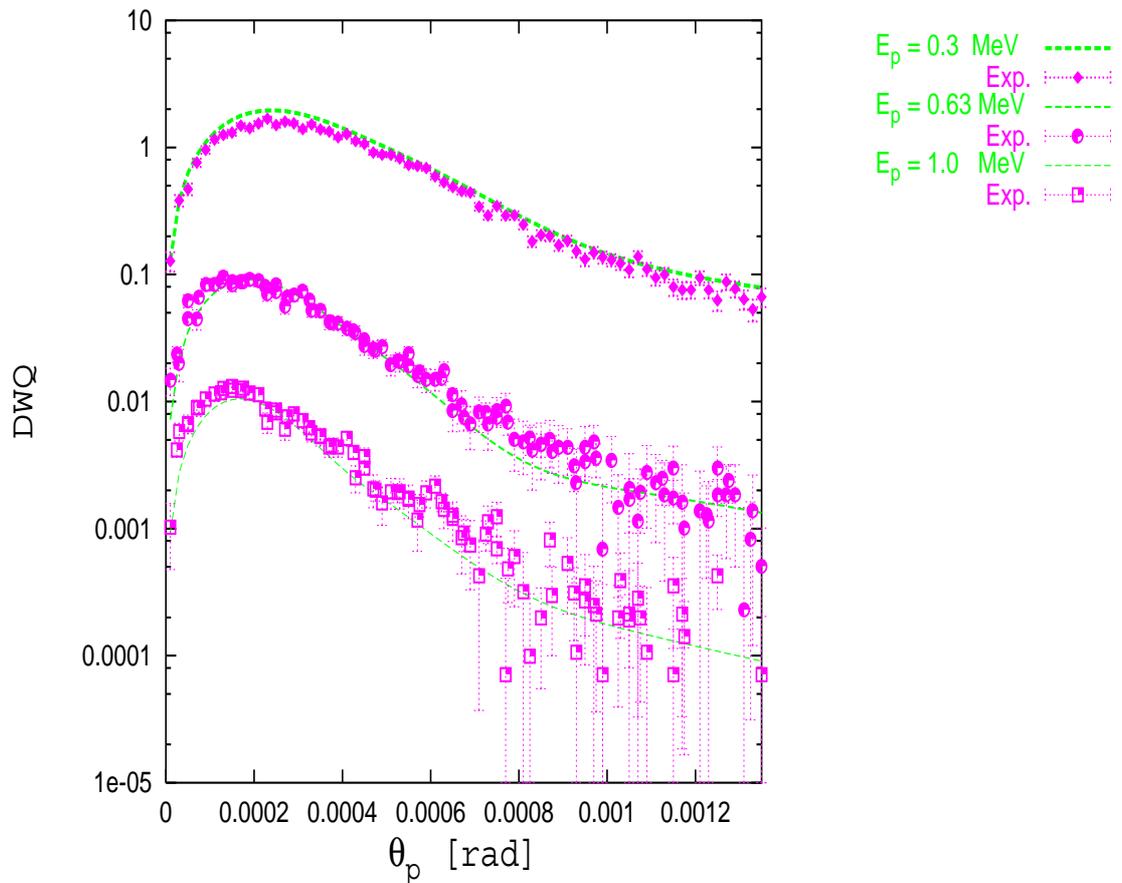


Abbildung 4.19: Vergleich gemessener und berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{\sigma_0^2}{rad}]$ für verschiedene Projektilenergien. HF-Ansatz. Die Werte wurden auf den experimentellen Wert bei $\theta_p = 0.19$ mrad und 0.63 MeV normiert.

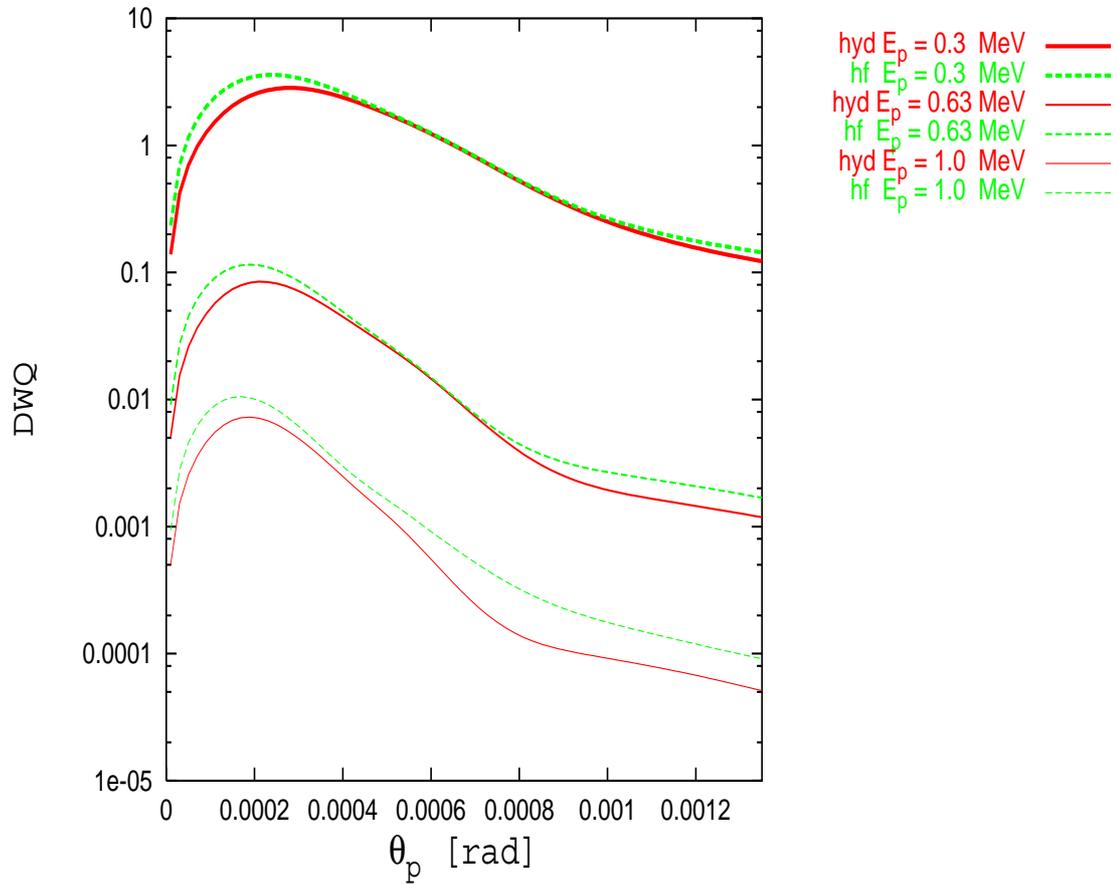


Abbildung 4.20: Vergleich berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $\left[\frac{a_0^2}{\dot{q}(E, E_z) \text{ rad}}\right]$ für verschiedene Projektilenergien. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

4.5.2 Das Emissionsverhalten in verschiedenen Streuwinkelbereichen

Die Abbildungen (4.21 – 4.29) geben die Impulsverteilungen der emittierten Elektronen wieder, wie sie sich aus dem Modell mit einem Hartree-Fock-Ansatz ableiten. Zieht man einen Vergleich mit dem wasserstoffähnlichen Fall, stellt man zunächst fest, dass auch hier im Einklang mit dem Experiment der größte Beitrag zum Wirkungsquerschnitt aus dem Streuwinkelbereich $\theta_p \in [0.0, 0.25]$ mrad kommt.

Die in den Abbildungen (4.21 – 4.29) und (4.30 – 4.31) dargestellten Verteilungen wirken auf den ersten Blick recht ähnlich. Man hat ebenfalls eine Vorwärts-Rückwärts-Asymmetrie der Emission und auch hier treten symmetrisch zur k_{\perp}^e -Achse und nahezu unabhängig vom Streuwinkelbereich und von der Stoßenergie mehrere Maxima auf. Im Hartree-Fock-Fall zeigt die Emission niederenergetischer Elektronen verglichen mit den Vorhersagen der wasserstoffähnlichen Rechnung zunehmend asymmetrische Züge. Die Hartree-Fock-Variante des Modells prognostiziert sogar eine verstärkte Emission von langsamen Elektronen in Rückwärtsrichtung. Insgesamt treten bei kleinen Emissionsenergien die größten Unterschiede auf, während das Emissionsprofil bei hohen Emissionsenergien starke Anklänge an den wasserstoffähnlichen Fall zeigt. Diesen Sachverhalt belegen die Abbildungen (4.32 – 4.41), die einen direkten Vergleich der beiden Rechnungen erlauben.

Bei kleinen Emissionsenergien (0.54 eV) wird der Hartree-Fock-Wirkungsquerschnitt in jedem Streuwinkelbereich und bei beiden Stoßenergien im Gebiet der Rückwärtsstreuung maximal. Minima der Emission treten hier im Vergleich zur wasserstoffähnlichen Rechnung bei kleineren Emissionswinkeln auf und liegen damit im Gebiet der Vorwärtsstreuung. Die Differenzen zwischen beiden Rechnungen zeigen eine leichte Emissionsrichtungsabhängigkeit: im Bereich der Rückwärtsstreuung weichen die Emissionsprofile für niedrige Emissionsenergien am stärksten voneinander ab, obwohl es auch im Vorwärtsemissionsbereich Differenzen gibt.

Bei hohen Emissionsenergien ist der Verlauf der Hartree-Fock-Kurve in qualitativer Hinsicht dem Gang der wasserstoffähnlichen Variante sehr stark angepasst. Die Lage der Extrema stimmt nahezu überein. Für eine Stoßenergie von 0.3 MeV

hat man in Vorwärtsrichtung sogar stellenweise eine quantitative Entsprechung. Ursache für die vergleichsweise starken Abweichungen im Bereich kleiner Energien sind Nicht-Coulombanteile des Hartree-Fock-Potentials, die sich als zusätzliche Phasenverschiebung der asymptotischen Wellenfunktion gegenüber der freien Lösung äußern. Die Potentialanteile, die hierfür verantwortlich sind, sind nur von endlicher Reichweite. Für Partialwellenterme mit großen Drehimpulsen L und der damit verknüpften Stärke des Zentrifugalpotentials, verschiebt sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons in einen Bereich, in dem der Einfluss des kurzreichweitigen Potentials nicht mehr spürbar ist. In der Folge verschwindet die zusätzliche Phasenverschiebung: $\xi_L(k^e) \rightarrow 0$. Daher zeigen die Emissionsprofile für höhere Emissionsenergien zumindest qualitativ, also was den Gang der Kurven anbetrifft, keine großen Unterschiede mehr. Abweichungen werden dort ausschliesslich durch Unterschiede im Radialanteil der Wellenfunktion und der Coulombphase verursacht.

Die insbesondere für kleine Emissionsenergien schwächer ausgeprägte Symmetrie der Hartree-Fock-Spektren hinsichtlich der Achse senkrecht zur Einschussrichtung des Projektil weist daraufhin, dass hier Interferenzterme stärker beitragen als im Fall der wasserstoffähnlichen Rechnung. Dies dürfte eine Konsequenz der vom Coulombpotential abweichenden Form des Hartree-Fock-Potentials sein.

Ferner fällt auf, dass die wasserstoffähnliche Rechnung einen stärkeren Abfall des Wirkungsquerschnitts mit zunehmender Stoßenergie voraussagt als Hartree-Fock. Obwohl die wasserstoffähnlichen Rechnungen stellenweise höhere Wirkungsquerschnitte für die Maxima prognostizieren – dies tritt ab einem Projektilstreuwinkel von $\theta_p = 0.45$ mrad bei einer Stoßenergie von 0.3 MeV auf und zeigt sich bei hohen Emissionsenergien bis zu Streuwinkeln von $\theta_p = 1.35$ mrad – liegen sie generell unterhalb der Wirkungsquerschnitte der Hartree-Fock-Rechnung.

Interessant ist auch, das Emissionsverhalten bei großen Emissionswinkeln zu betrachten. In allen Projektilstreuwinkelbereichen, für alle betrachteten Emissions- und Stoßenergien liegen die Ergebnisse der Hartree-Fock-Rechnung im Bereich der Rückwärtsstreuung über den mit einem wasserstoffähnlichen Ansatz erzielten Querschnitten. Bei niedrigen Emissionsenergien wird der Wirkungsquerschnitt in diesem Bereich zumindest lokal maximal. Hier sagen beide Rechnungen einen Anstieg des Wirkungsquerschnitts voraus. Bei höheren Emissionsenergien ($\geq 59.98eV$) erkennt man bei kleinen Projektilstreuwinkeln bis 0.25 mrad einen

Anstieg des Wirkungsquerschnitts im Bereich der Rückwärtsstreuung. Dieses Anwachsen des differentiellen Wirkungsquerschnitts schwächt sich in den anschließenden Streuwinkelbereichen $\theta_p \in [0.25, 0.45]$ mrad zunächst ab. Bei $\theta_p \in [0.45, 1.35]$ mrad nimmt die Rückwärtsemission wieder zu. Diese Projektilstreuungswinkelabhängigkeit prägt sich mit dem Anwachsen der Stoßenergie deutlicher aus. Insgesamt gibt es auch hier eine Abschwächung mit der Emissionsenergie: je höher die Emissionsenergie ist, desto schwächer ausgeprägt sind die Maxima.

Die Abbildungen (4.42, 4.43) geben die Emissionsverteilungen als Funktion der Emissionsenergie für Stoßenergien von 0.3 MeV und 0.63 MeV wieder. Vergleicht man die Darstellungen mit den Abbildungen (4.17, 4.18) für den wasserstoffähnlichen Ansatz, so fällt auch hier die bereits angesprochene Ähnlichkeit jeweils analoger Emissionsprofile am rechten hochenergetischen Rand der Spektren auf. Die Spektren unterscheiden sich im Bereich hoher elektronischer Energien nicht strukturell, sondern lediglich in der Höhe der Werte. Sie weisen ebenfalls das für einen binären Stoß zwischen Elektron und Projektil erwartete lokale Maximum hochenergetischer Elektronen aus. Dieses Maximum tritt im Streuwinkelfenster $\theta_p \in [0.45, 0.95]$ mrad deutlich zutage, betrachtet man die Emission in Vorwärtsrichtung (hier $\theta_e = 5^\circ, 45^\circ$).

Bei sehr kleinen Emissionsenergien hat man tatsächlich eine, verglichen mit der Emission in den Vorwärtsbereich, überwiegende Emission in den Rückwärtsbereich, sowohl bei 0.3 MeV als auch bei der höheren Stoßenergie 0.63 MeV.

Um die Differenzen im Bereich kleiner Emissionsenergien klarer ins Bild zu bringen, stellen die Grafiken (4.44, 4.45) einen gesonderten Ausschnitt des niederenergetischen Teils des Spektrums im direkten Vergleich mit den wasserstoffähnlichen Daten dar. Man findet eine unterschiedliche Lage des Emissionsmaximums für Emissionswinkel kleiner als 90° , also bei Streuung des Elektrons in Richtung des einlaufenden Projektilstrahls: während die Ergebnisse der wasserstoffähnlichen Rechnung die Emission der meisten Elektronen bei sehr kleinen Energien²⁴ erwarten lassen, wird der Wirkungsquerschnitt der Hartee-Fock-Rechnung um einen Impulswert von 0.5 a.u. herum maximal.

Die Verschiebung des Maximums nach rechts zu etwas höheren elektronischen Energien hin entspricht den experimentellen Impulsverteilungen insofern, als dass

²⁴Die kleinste im Rahmen dieser Arbeit berechnete Emissionsenergie liegt bei 0.136 eV. Dies entspricht einem Impulsbetrag von $k^e = 0.1$ a.u. .

auch dort die Lage des Maximum der elektronischen Emission immer bei elektronischen Impulsbeträgen größer als 0.5 a.u. auftritt. In der Mehrheit der Fälle handelt es sich im Experiment allerdings um rückwärts gestreute Elektronen. Die Verschiebung des Maximums ist verknüpft mit dem Überwiegen der niederenergetischen Emission in Rückwärtsrichtung verglichen mit den wasserstoffähnlichen Ergebnissen, denn sie tritt lediglich im Bereich der Emissionswinkel auf, die kleiner als 90° sind.

Betrachtet man Streuung um Winkel größer als 90° , erkennt man auch in den Abbildungen (4.44, 4.45) das relative Überwiegen der Emission von Elektronen mit sehr kleinen Energien bei Hartree-Fock trotz einer identischen Lage des Emissionsmaximums bei beiden Varianten. Eine systematische Abhängigkeit von der Stoßenergie tritt nicht zutage.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

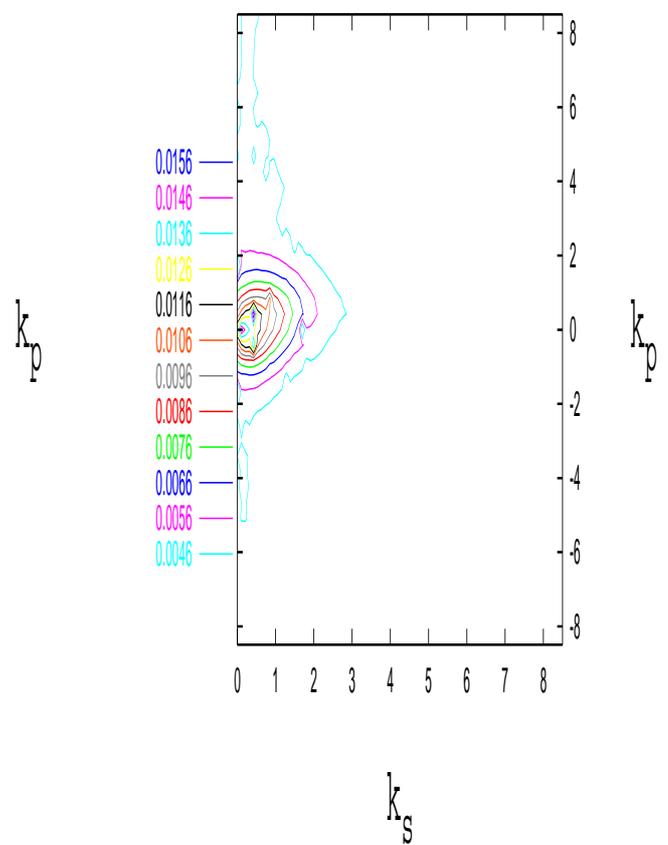
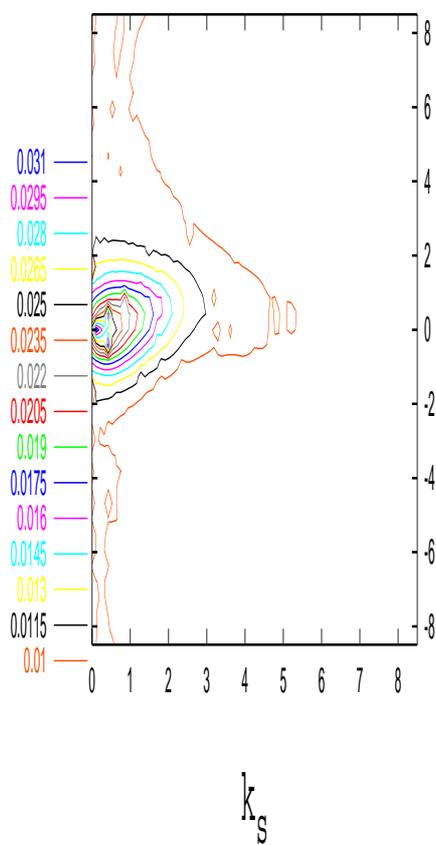


Abbildung 4.21: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

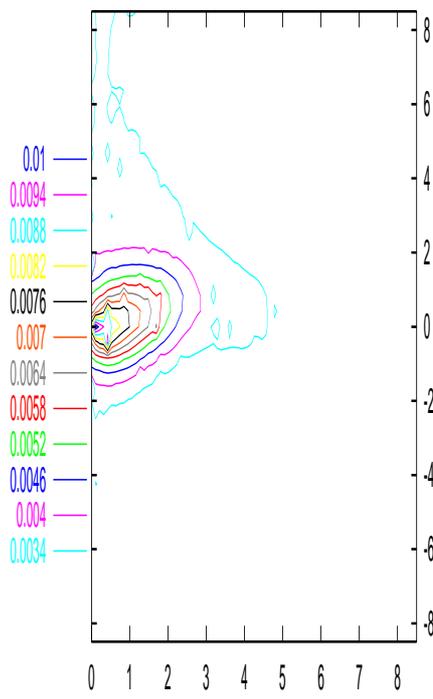
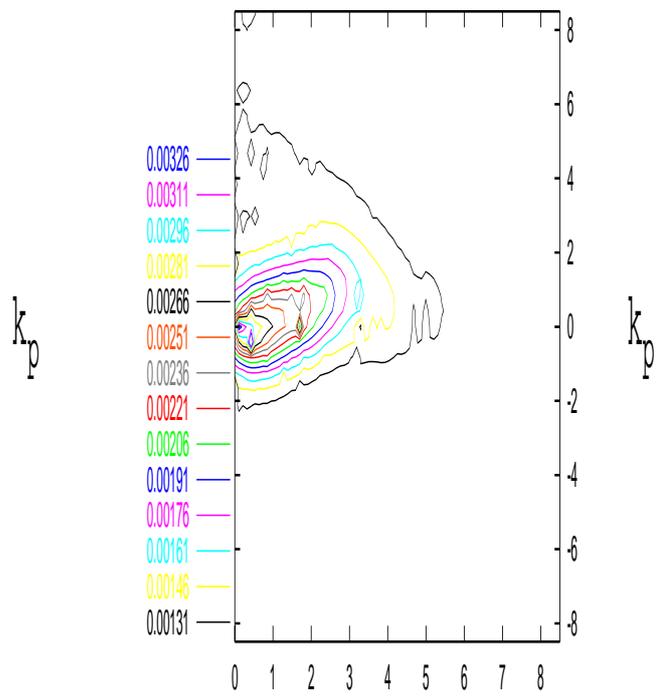

 k_s

 k_s

Abbildung 4.22: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

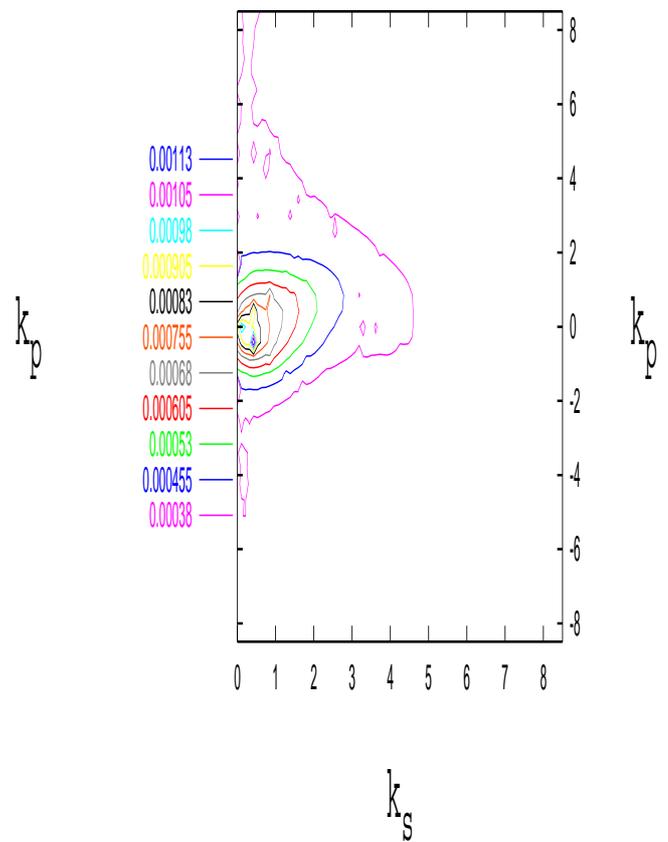
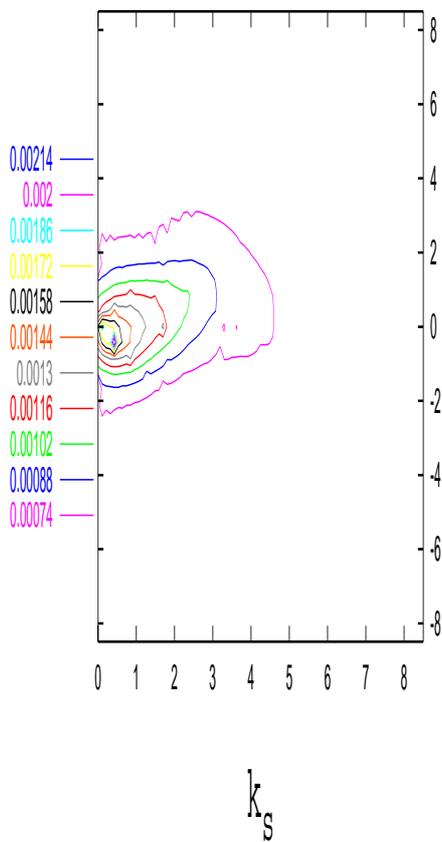


Abbildung 4.23: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

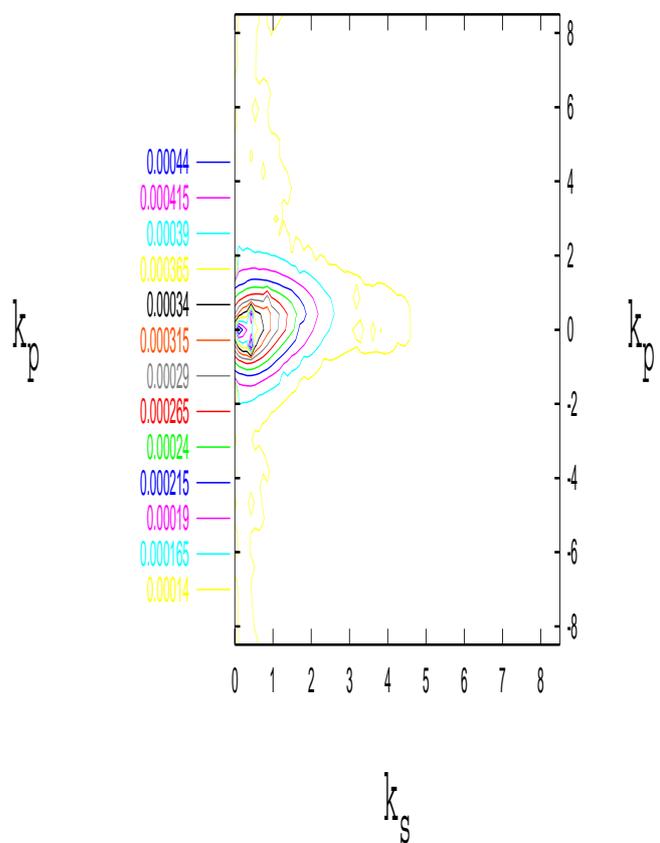
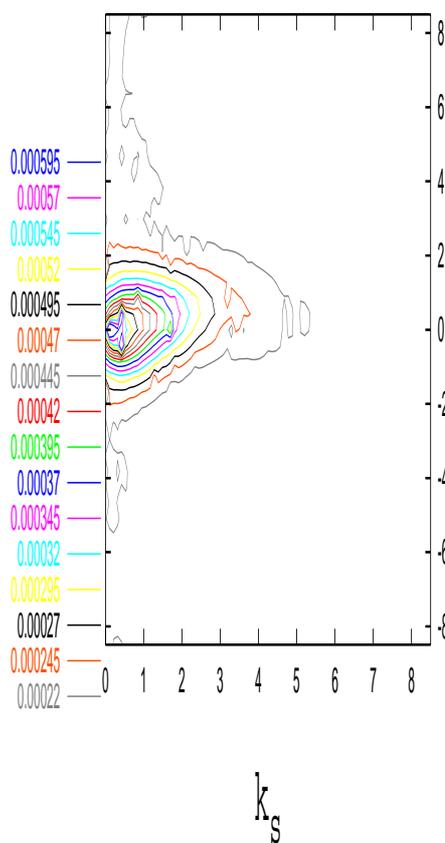


Abbildung 4.24: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

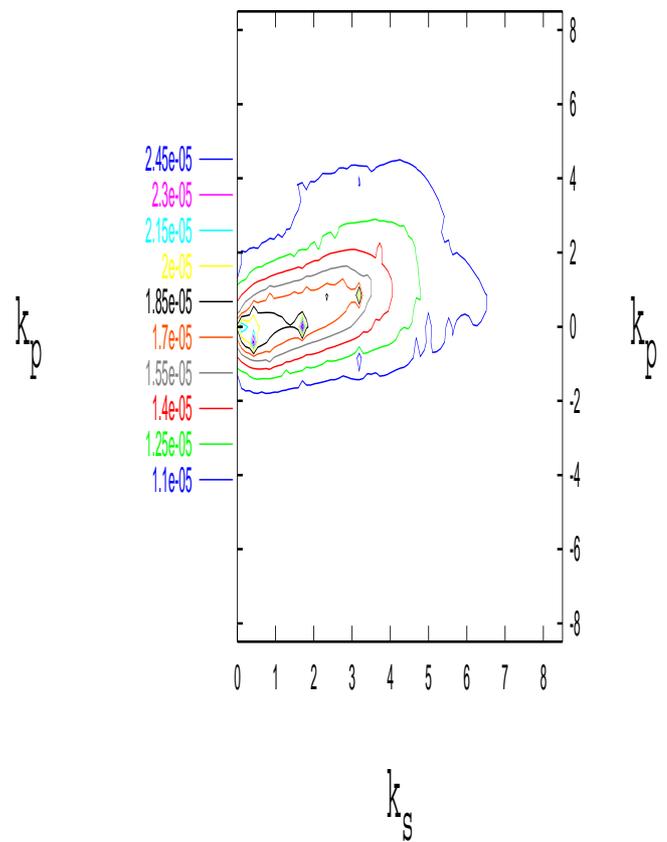
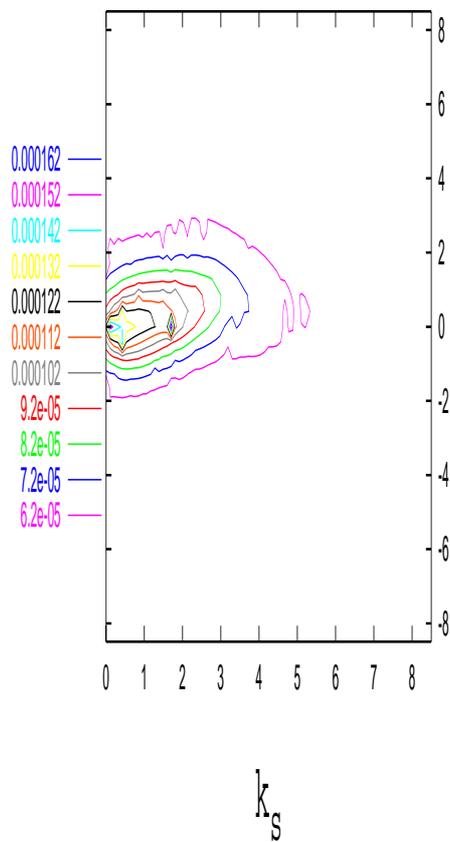


Abbildung 4.25: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

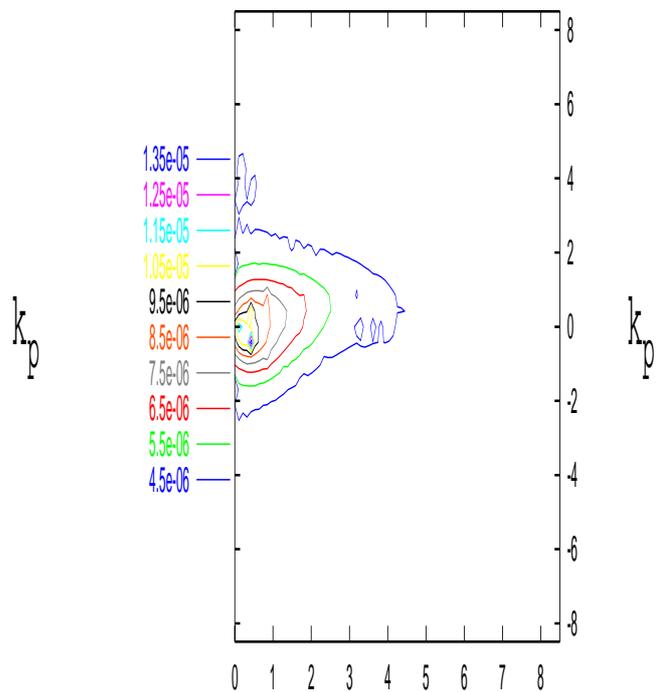
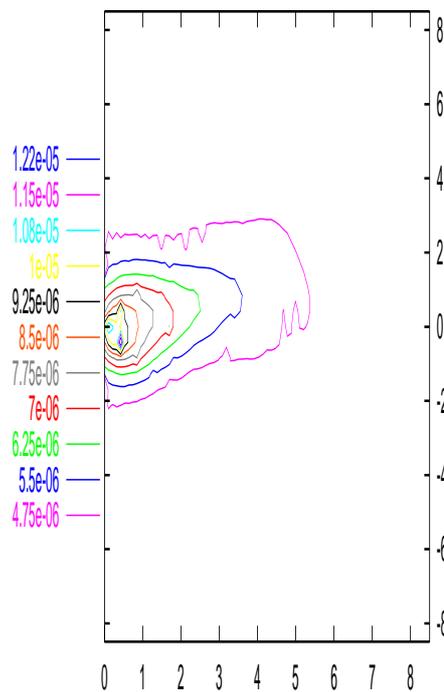

 k_s
 k_s

Abbildung 4.26: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

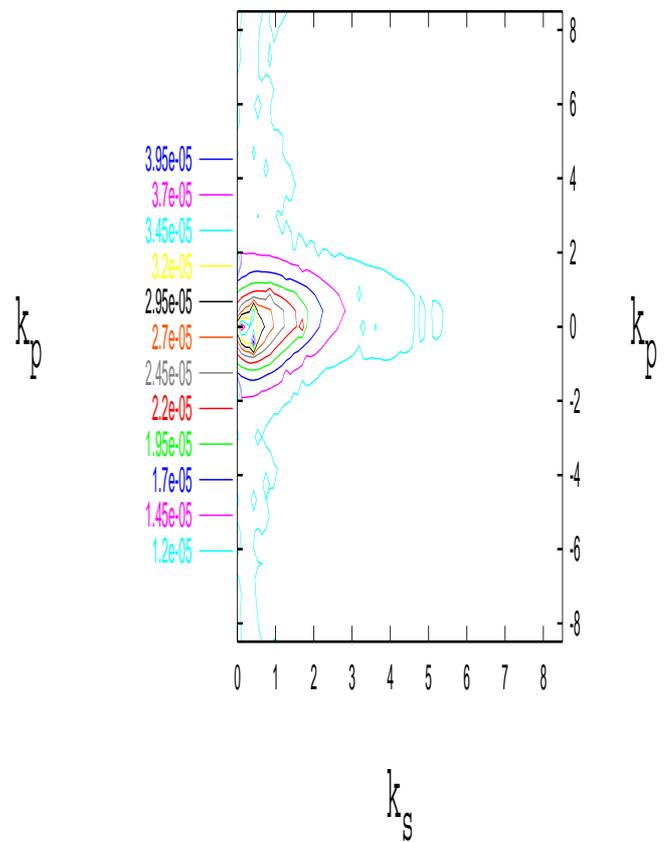
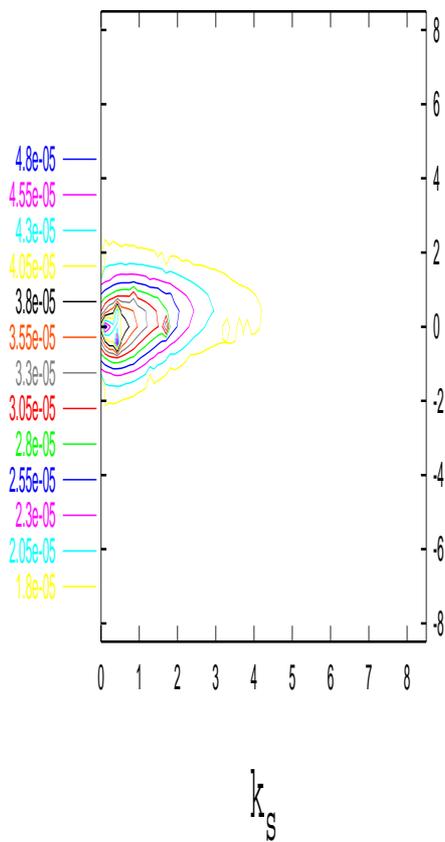


Abbildung 4.27: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

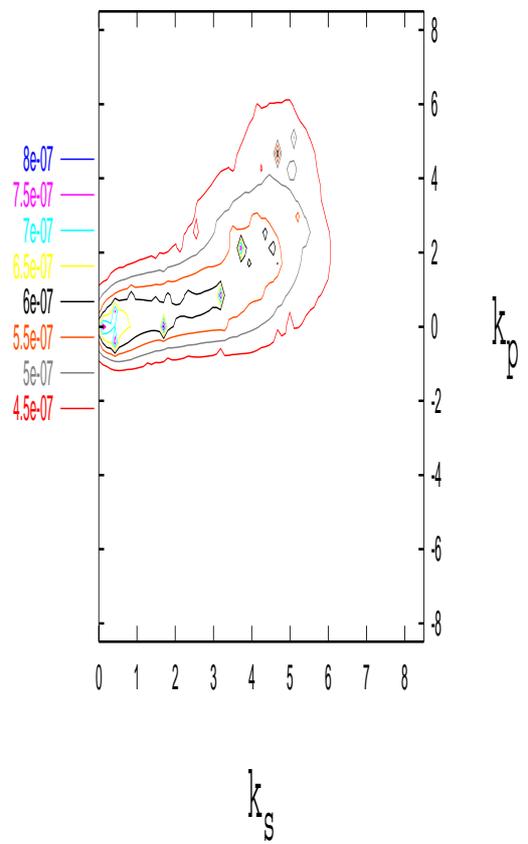
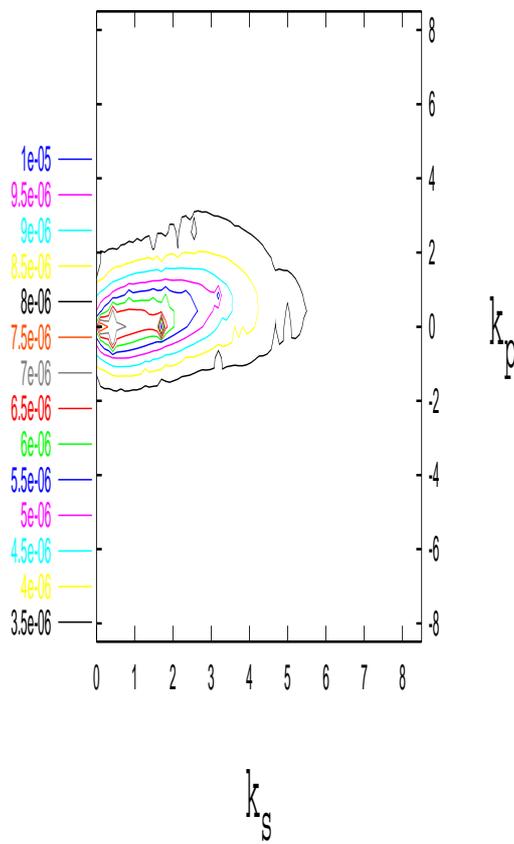


Abbildung 4.28: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

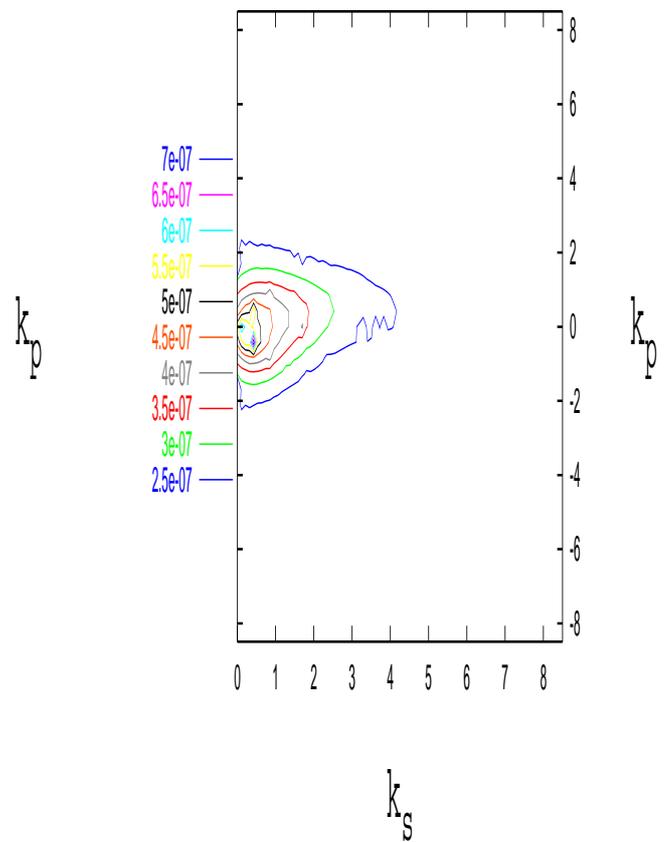
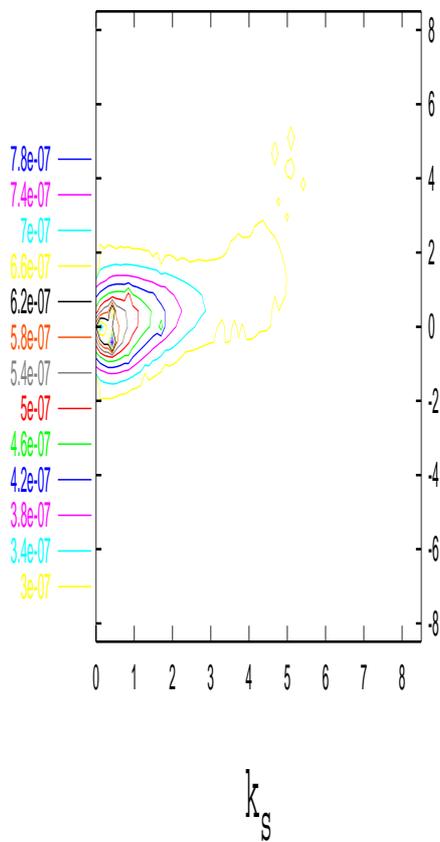


Abbildung 4.29: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. HF-Ansatz.

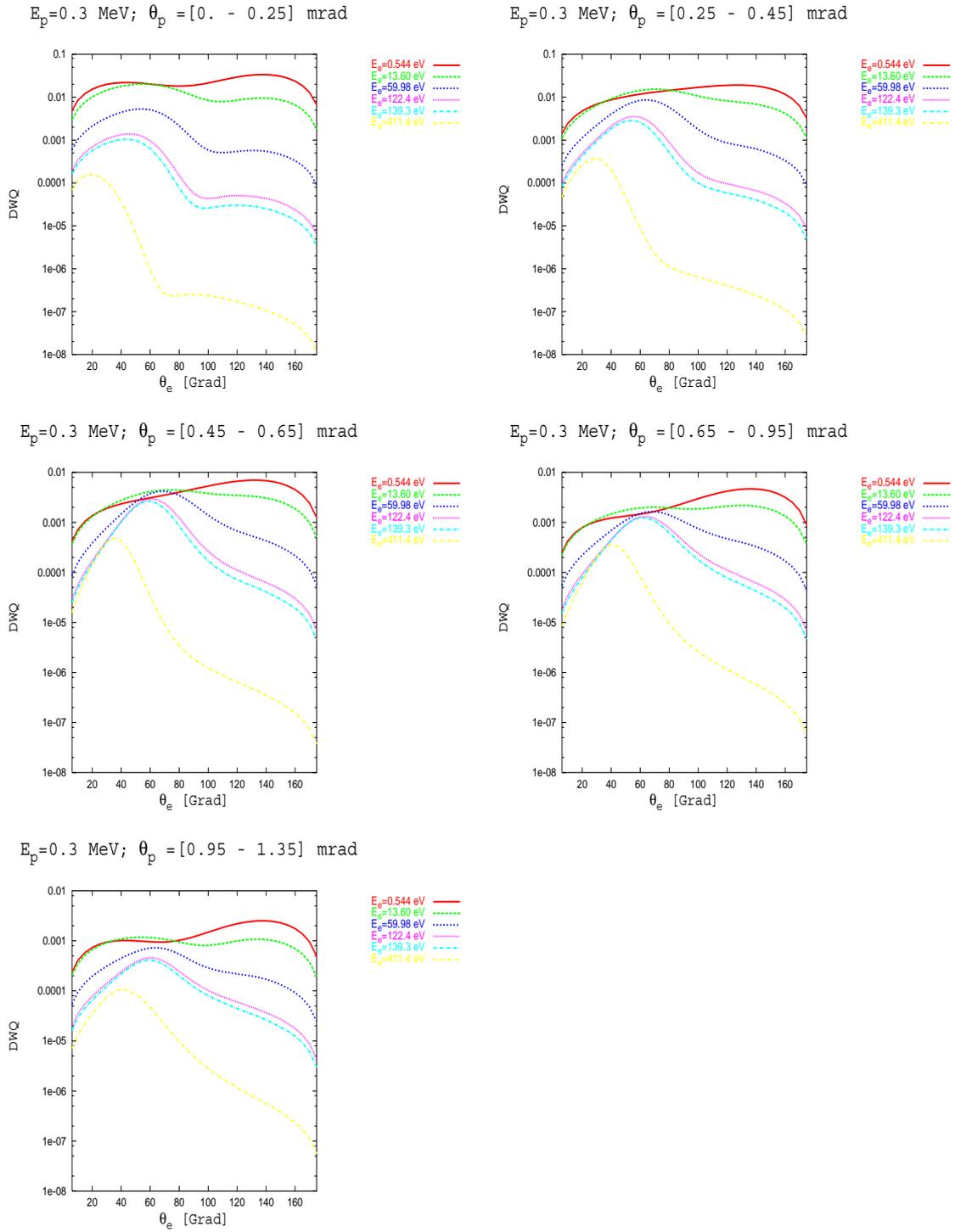


Abbildung 4.30: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\left. \frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \right|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H} \right]$ als Funktion des Emissionswinkels für eine Stoßenergie von 0.3 MeV. HF-Ansatz.

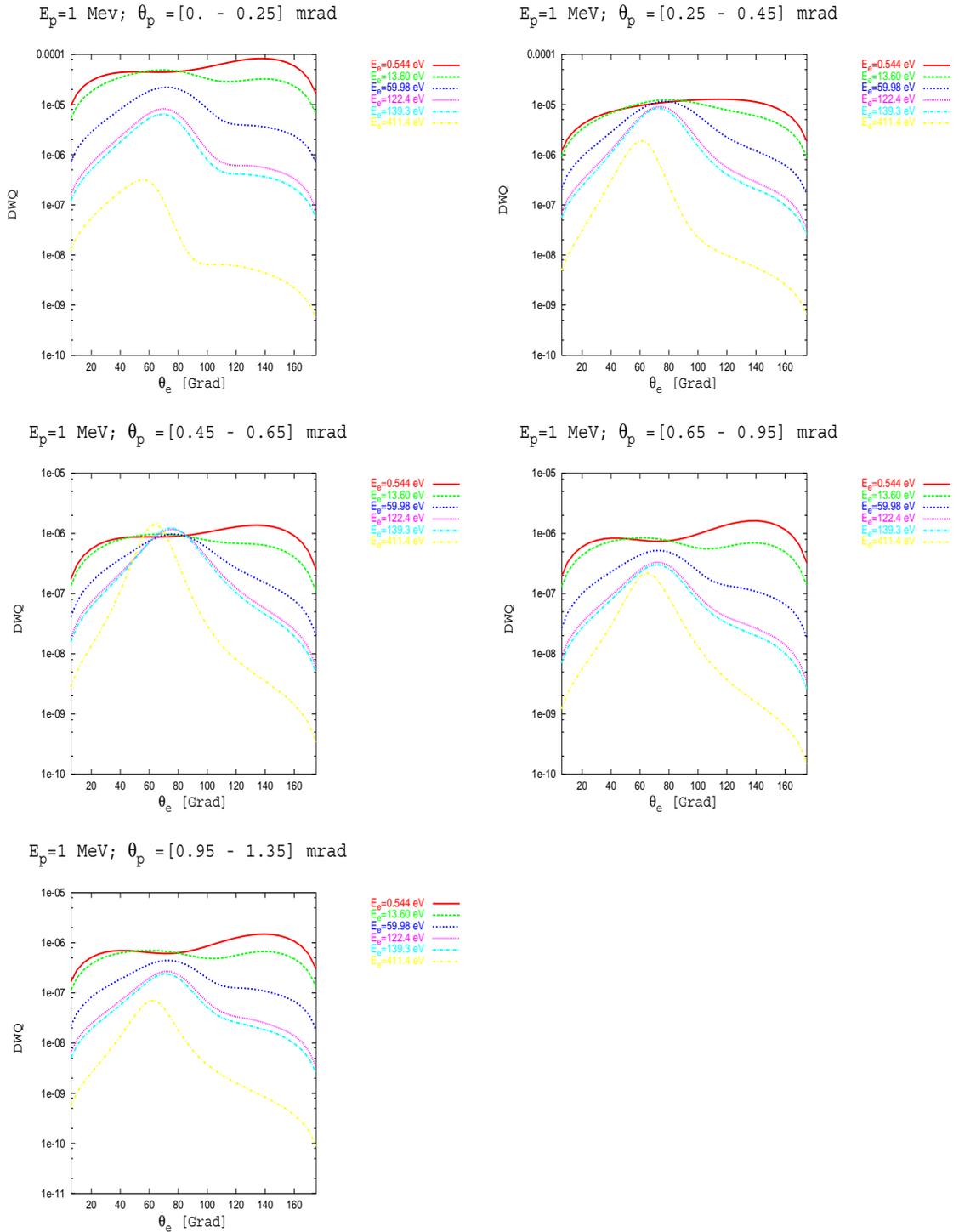


Abbildung 4.31: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des Emissionswinkels für eine Stoßenergie von 1.0 MeV. HF-Ansatz.

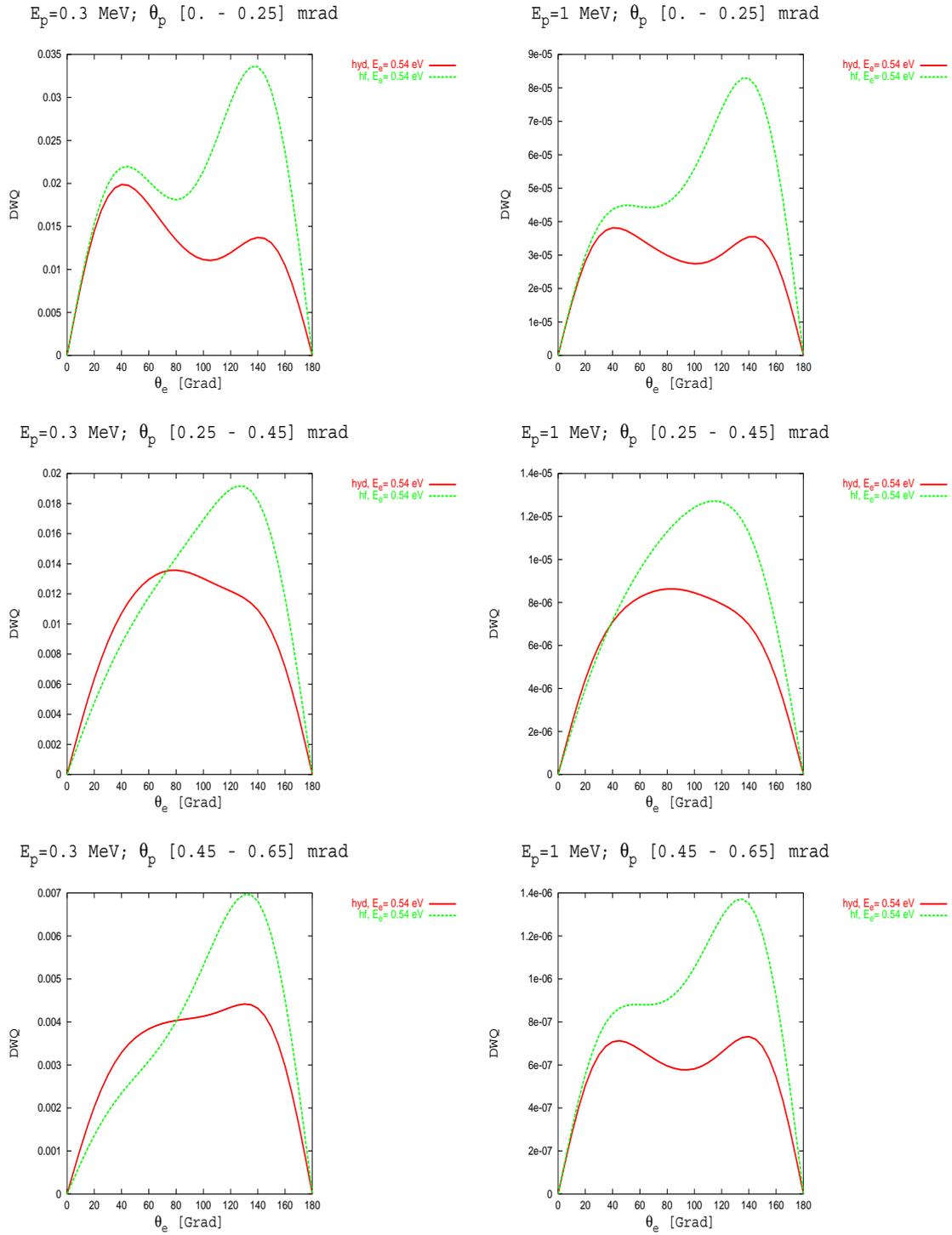


Abbildung 4.32: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

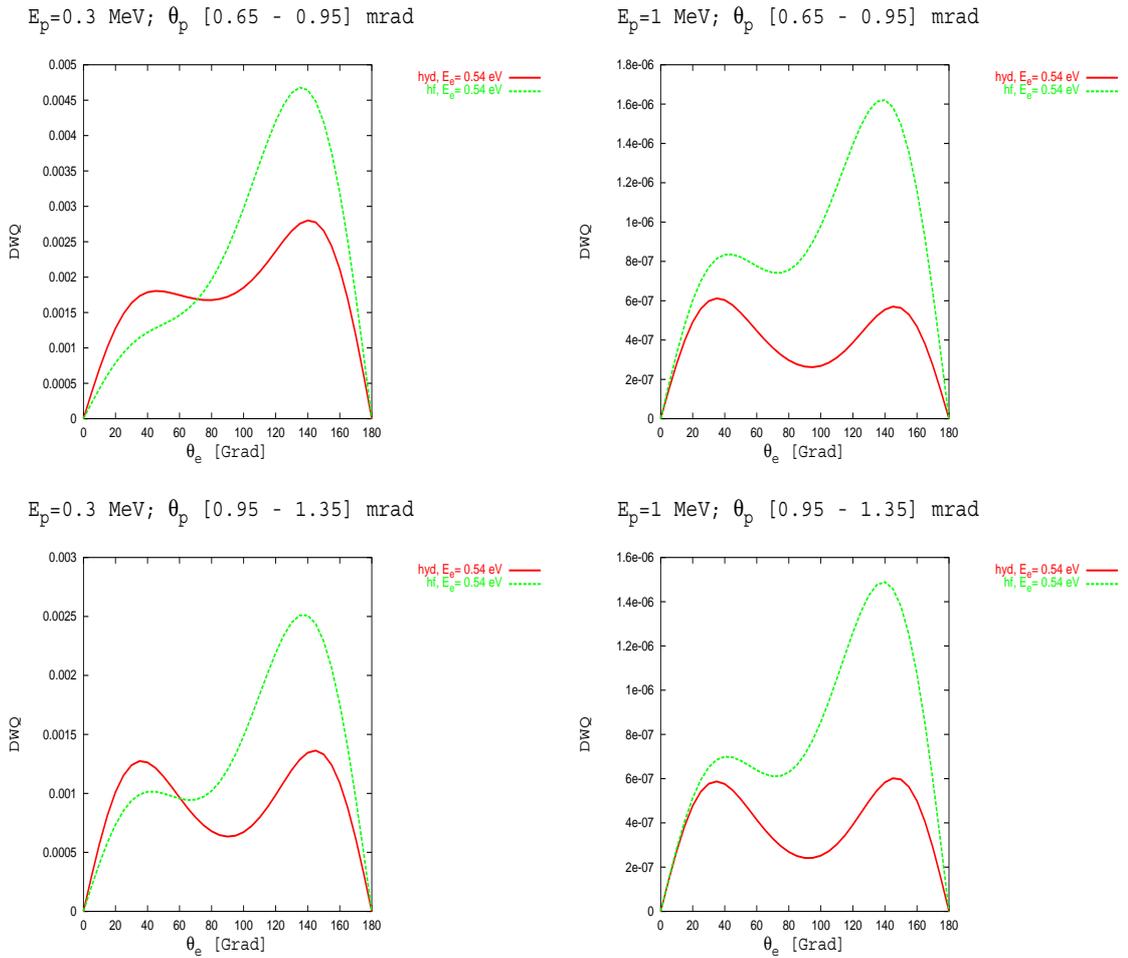


Abbildung 4.33: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{q}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

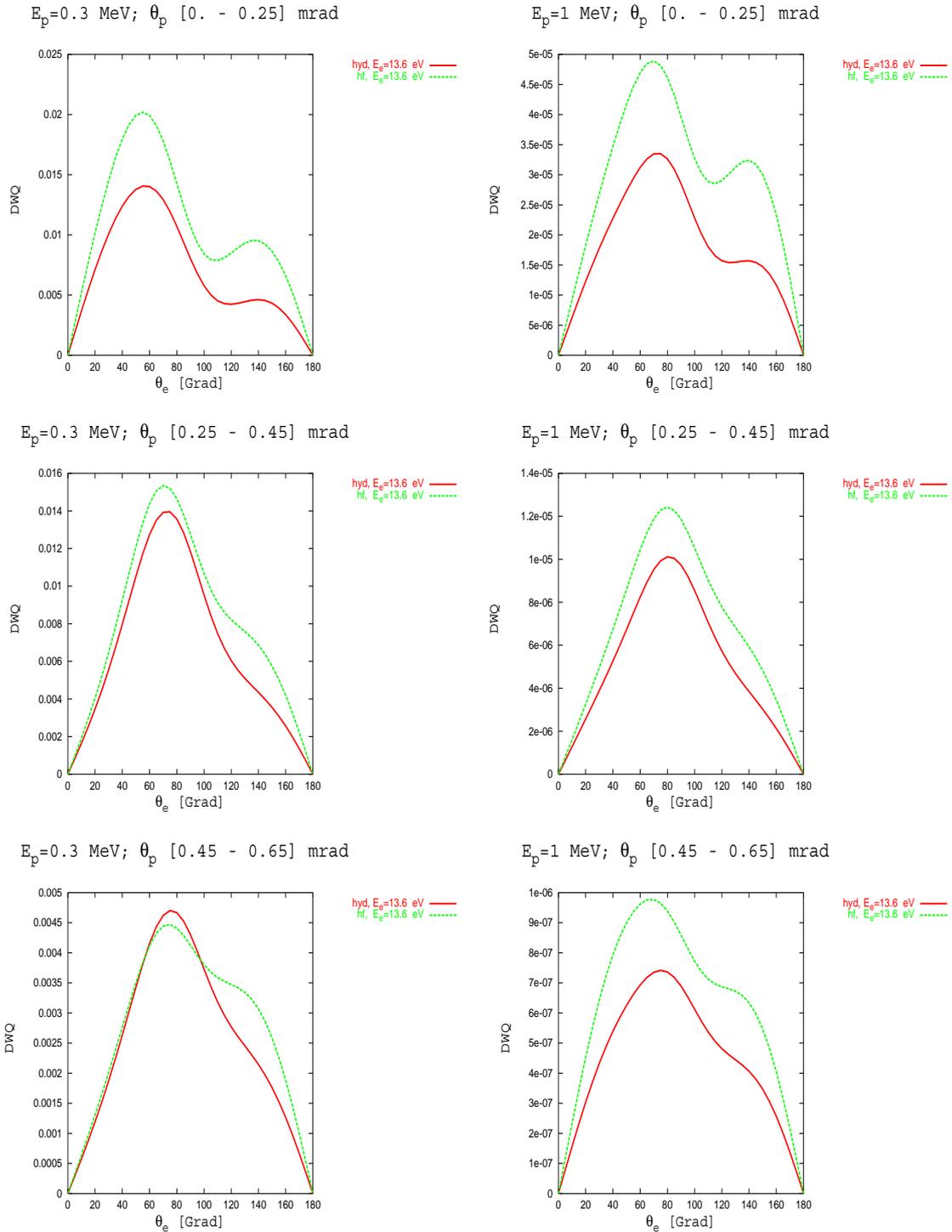


Abbildung 4.34: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}\right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

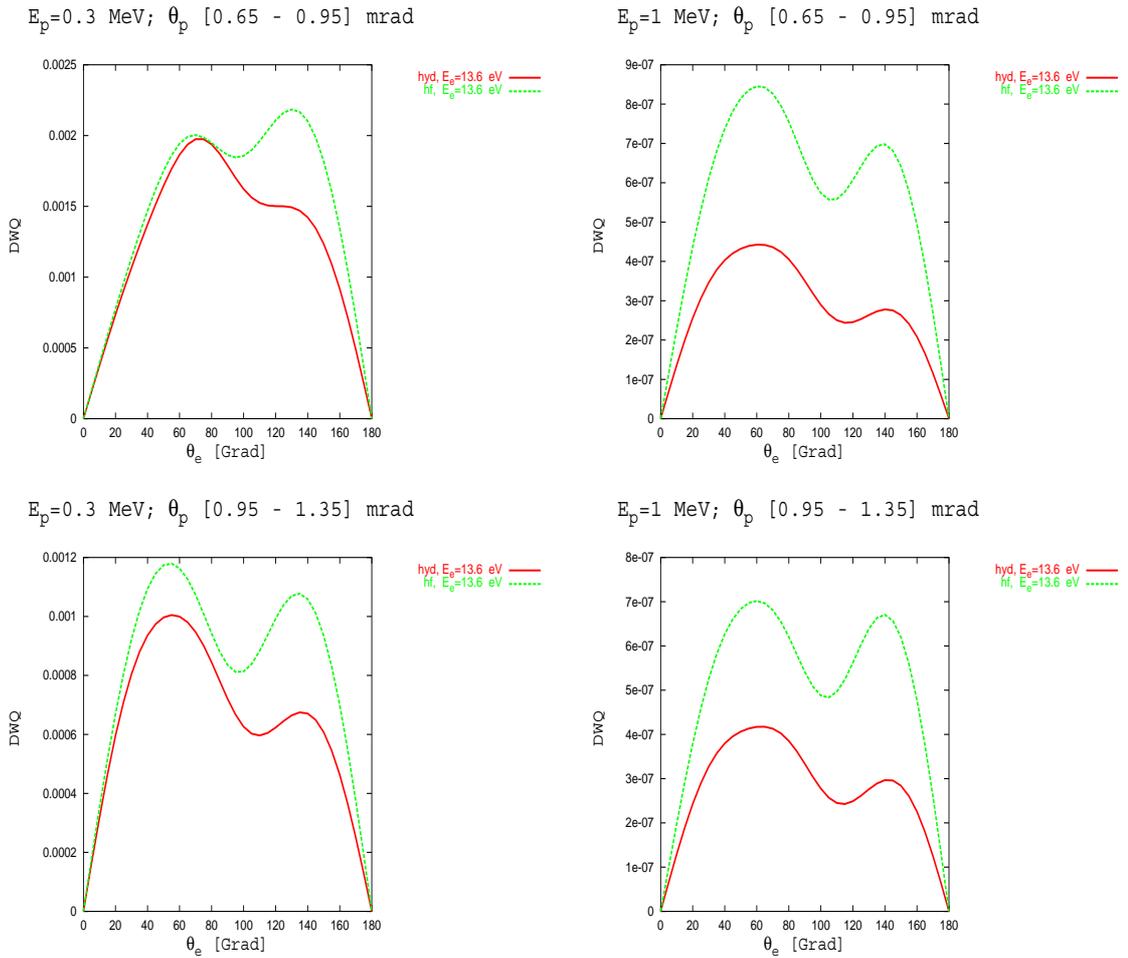


Abbildung 4.35: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{q}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

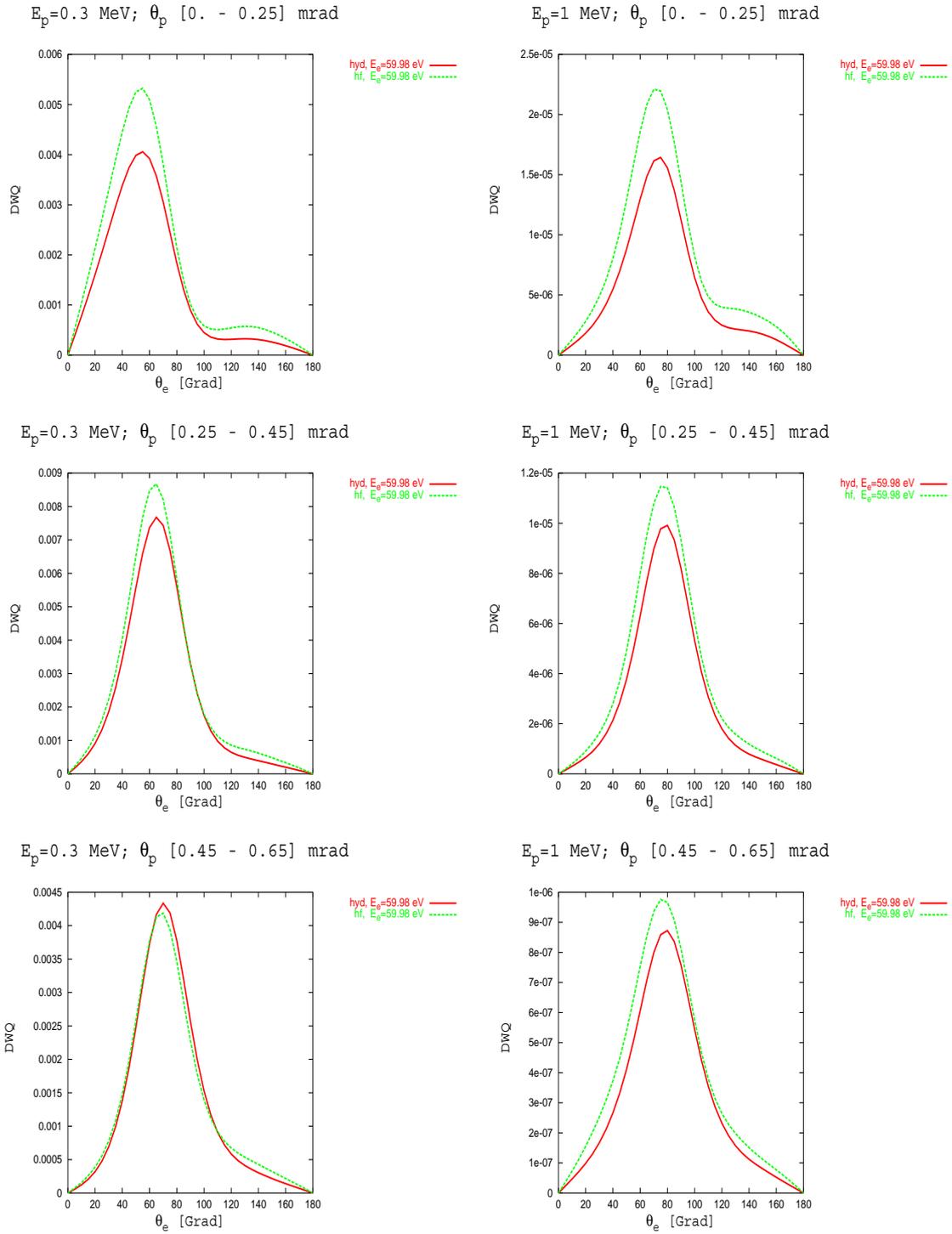


Abbildung 4.36: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

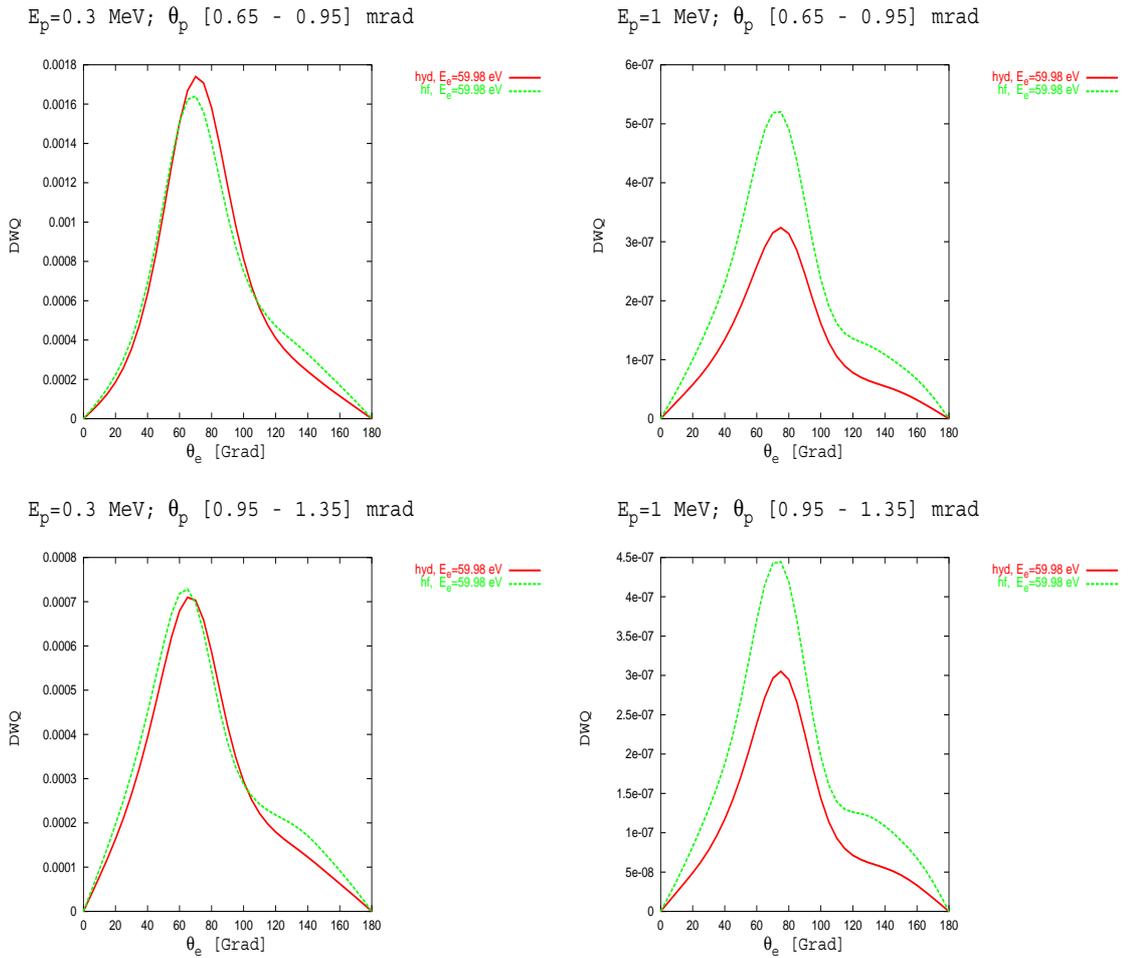


Abbildung 4.37: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{q}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

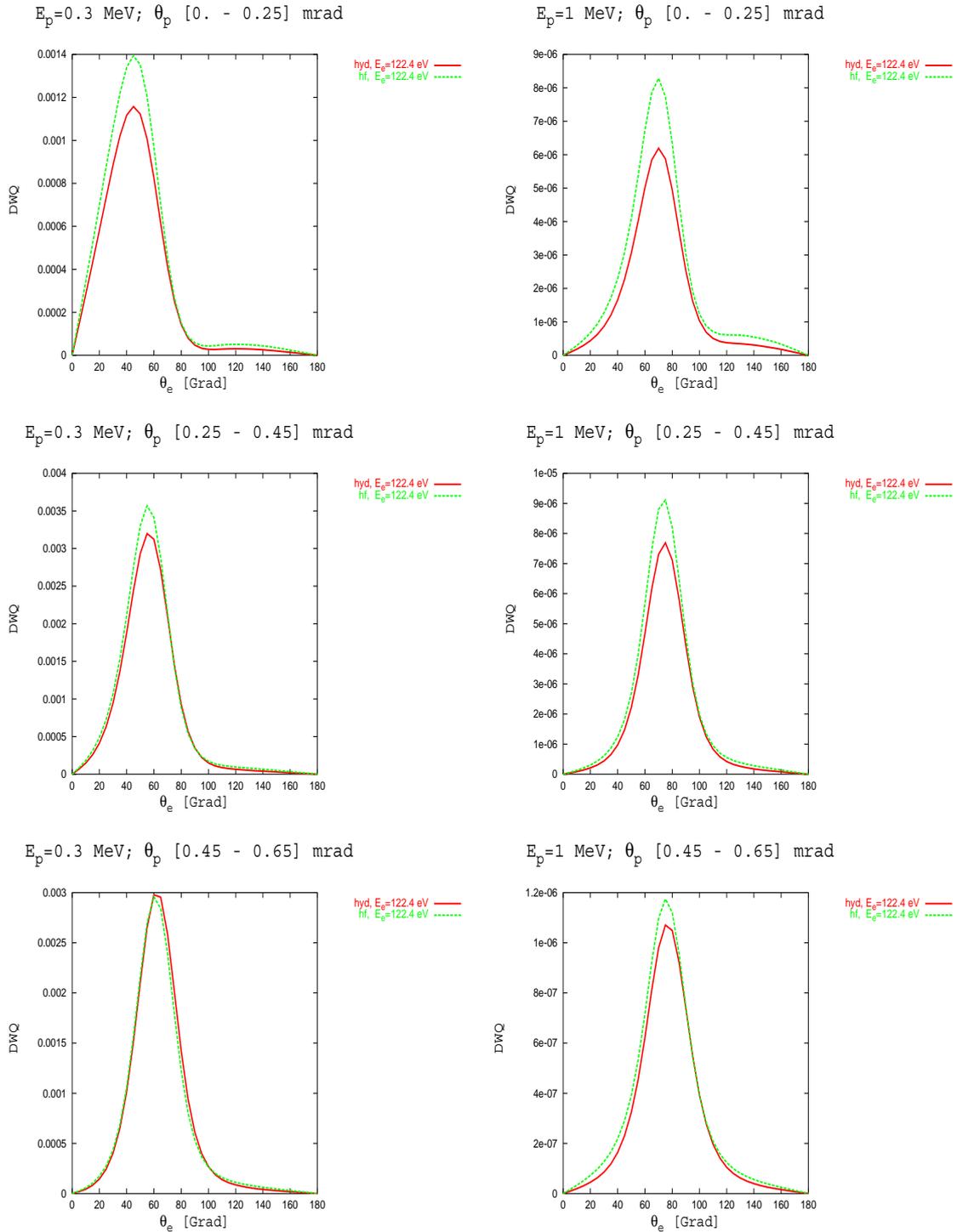


Abbildung 4.38: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}\right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

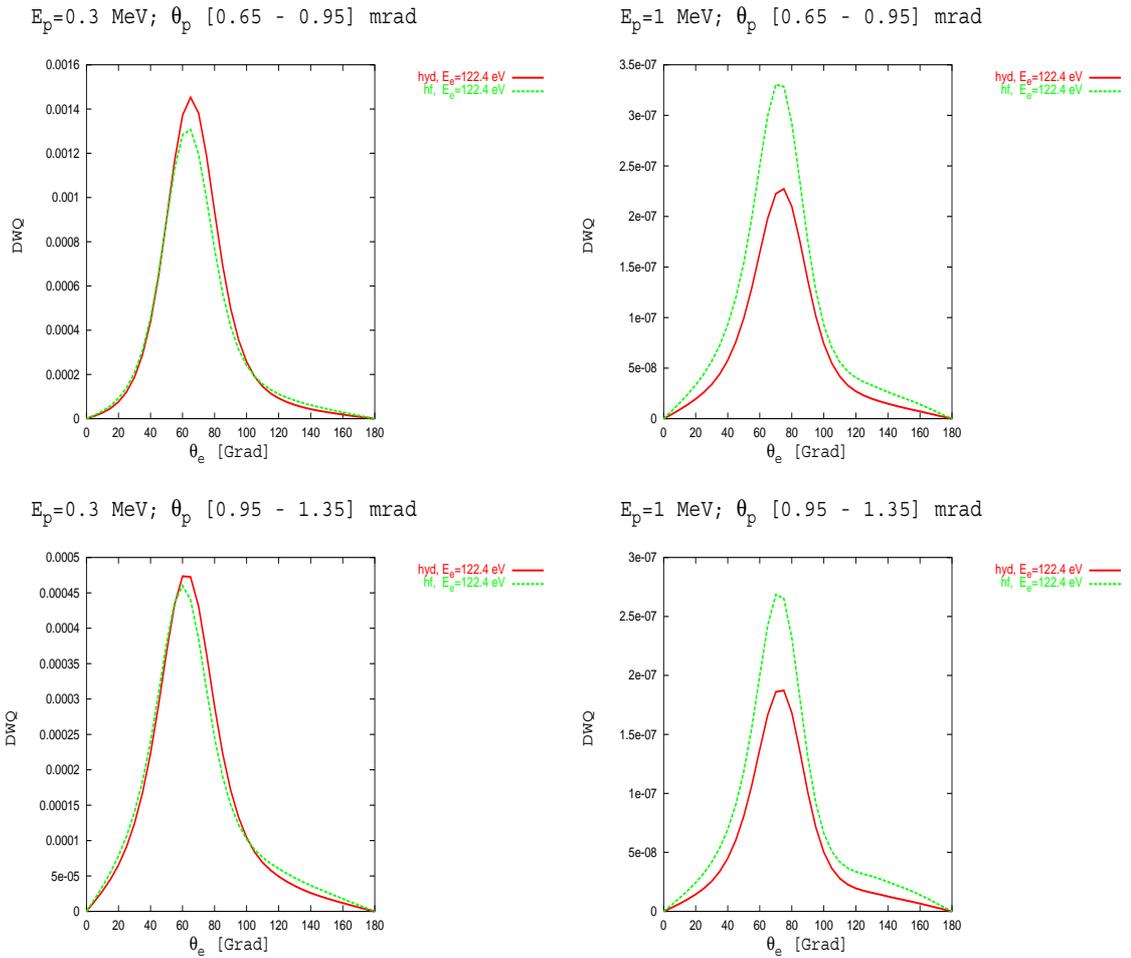


Abbildung 4.39: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{q}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

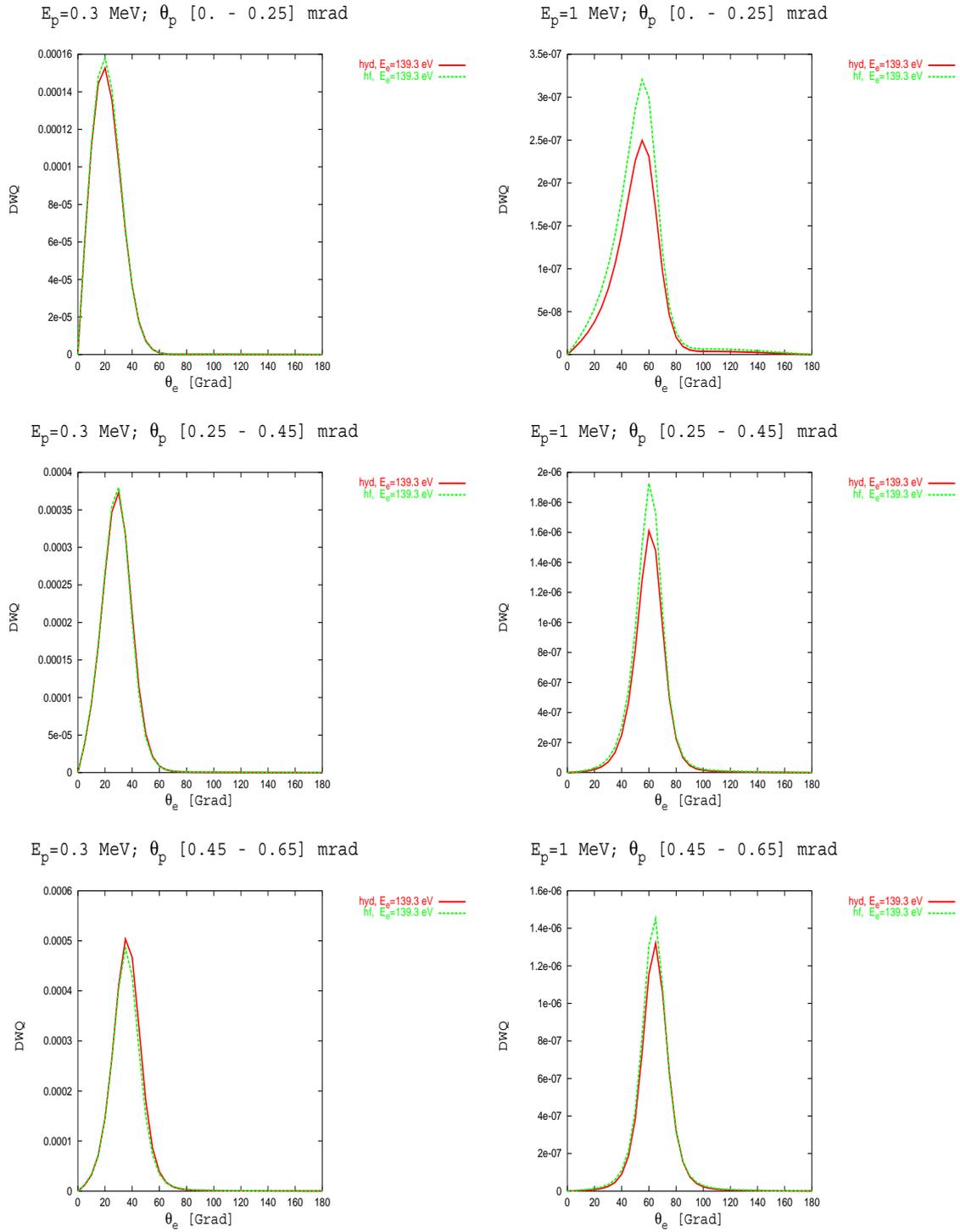


Abbildung 4.40: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

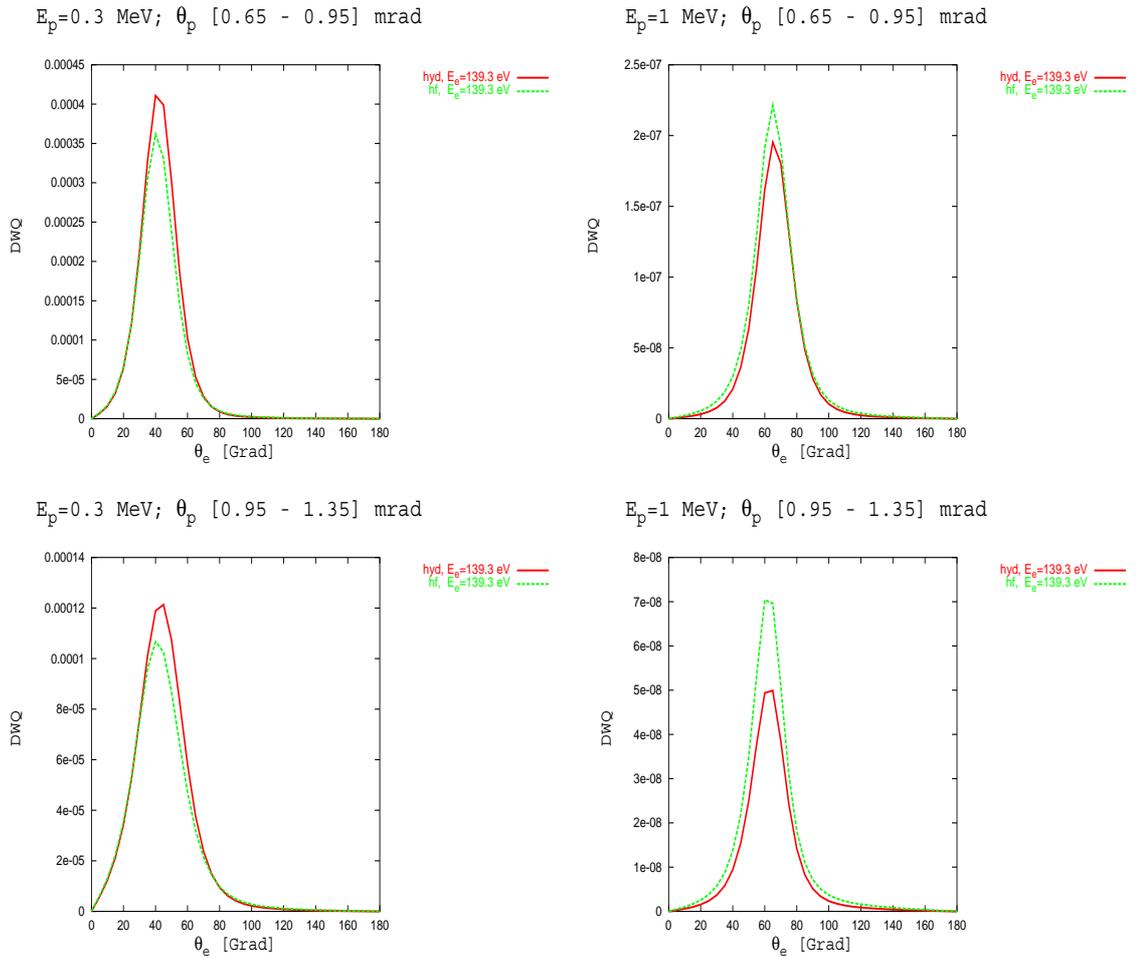


Abbildung 4.41: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{q}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher und HF-Ansatz.

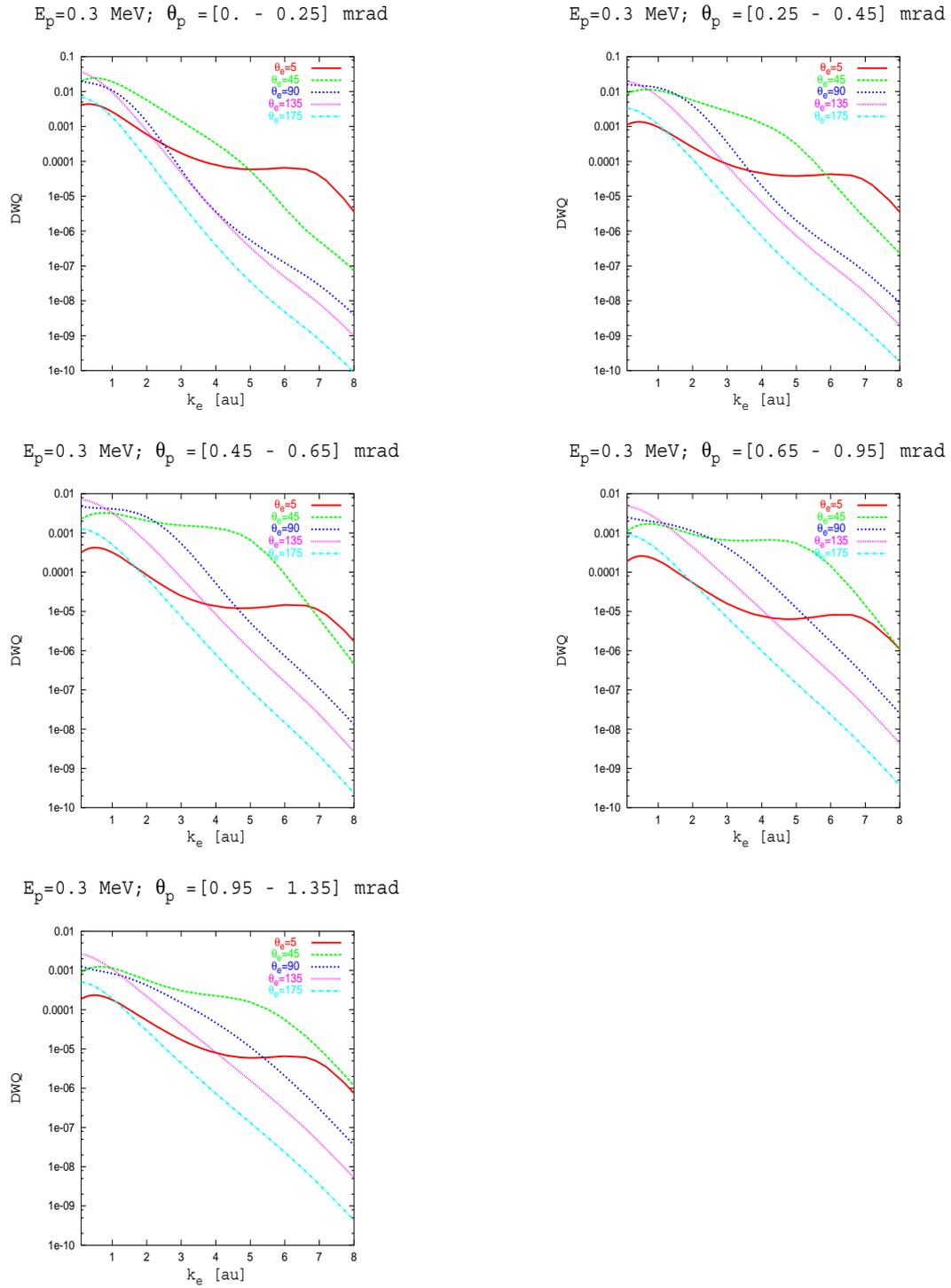


Abbildung 4.42: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E^e}$. HF-Ansatz.

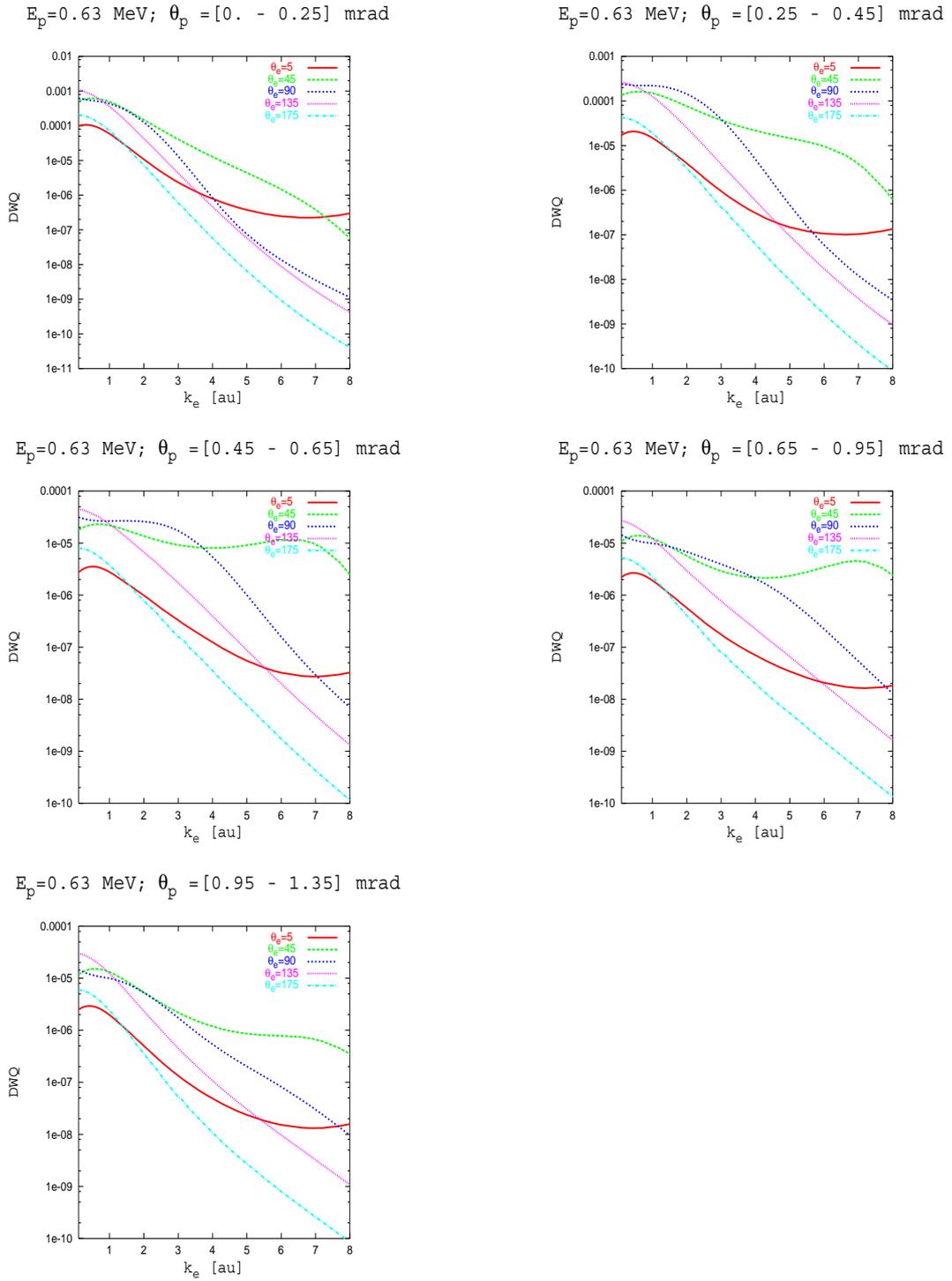
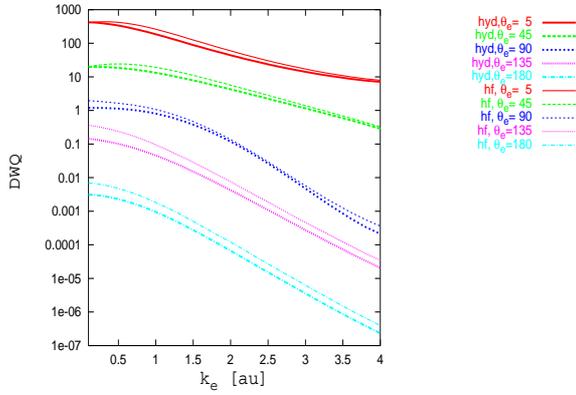
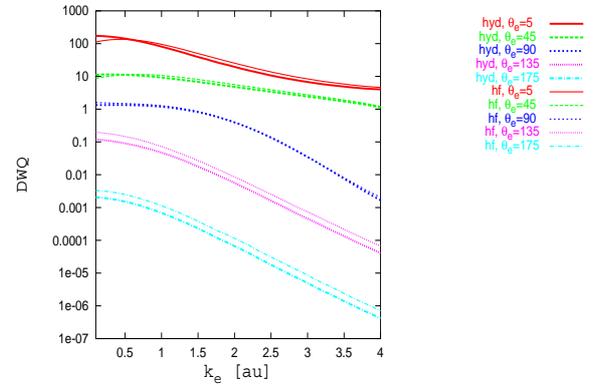


Abbildung 4.43: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial\sigma}{\partial E^e \partial\theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2E_e}$. HF-Ansatz.

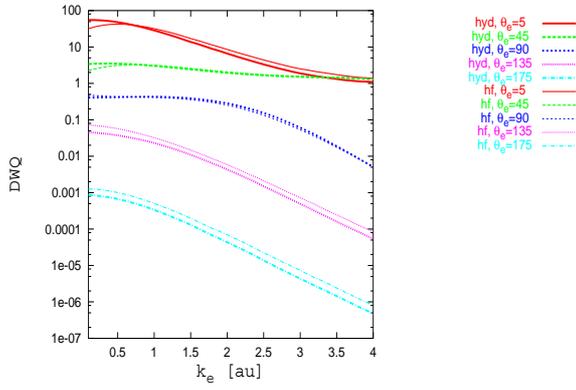
$E_p=0.3$ MeV; $\theta_p = [0. - 0.25]$ mrad



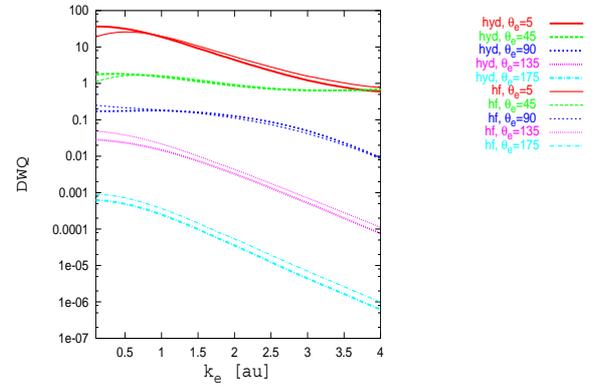
$E_p=0.3$ MeV; $\theta_p = [0.25 - 0.45]$ mrad



$E_p=0.3$ MeV; $\theta_p = [0.45 - 0.65]$ mrad



$E_p=0.3$ MeV; $\theta_p = [0.65 - 0.95]$ mrad



$E_p=0.3$ MeV; $\theta_p = [0.95 - 1.35]$ mrad

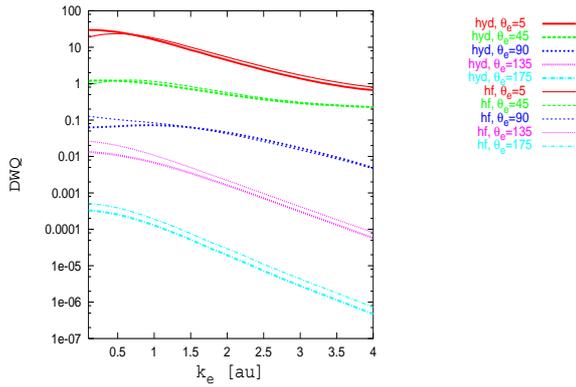
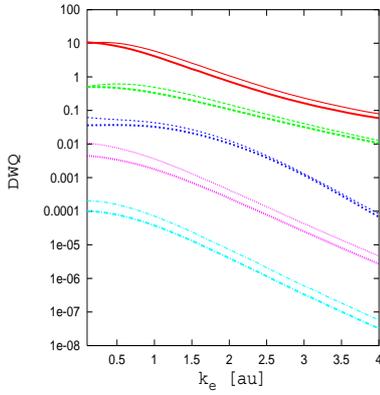
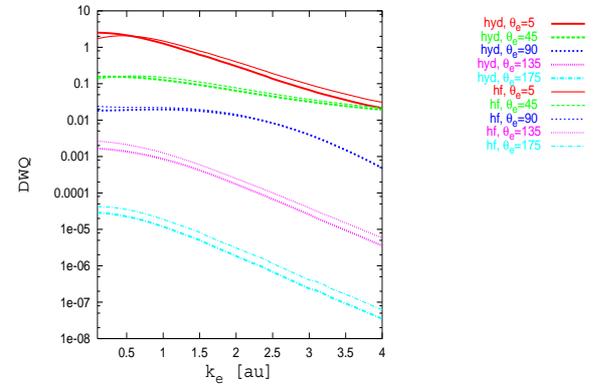


Abbildung 4.44: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^\theta}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E_e}$. Die Werte wurden skaliert: $\times 10^5$ für $\theta_e = 5^\circ$, $\times 10^3$ für $\theta_e = 45^\circ$, $\times 10^2$ für $\theta_e = 90^\circ$, $\times 10$ für $\theta_e = 135^\circ$. HF- und wasserstoffähnlicher Ansatz.

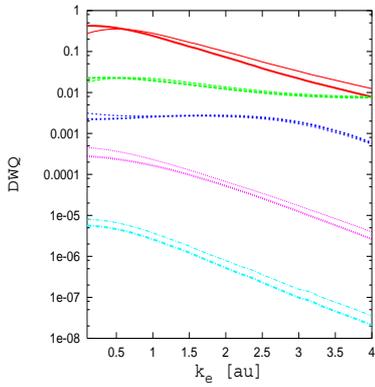
$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0. - 0.25] \text{ mrad}$



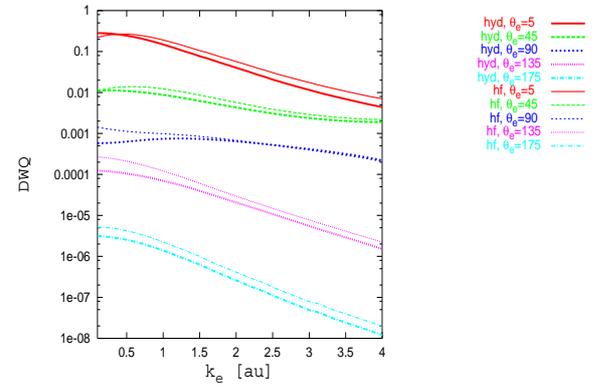
$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$



$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$



$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$

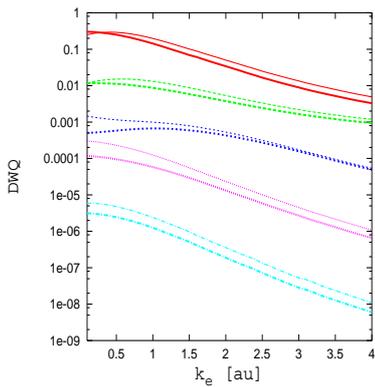


Abbildung 4.45: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\hat{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E_e}$. Die Werte wurden skaliert: $\times 10^5$ für $\theta_e = 5^\circ$, $\times 10^3$ für $\theta_e = 45^\circ$, $\times 10^2$ für $\theta_e = 90^\circ$, $\times 10$ für $\theta_e = 135^\circ$. HF- und wasserstoffähnlicher Ansatz.

4.5.3 Bewertung der Ergebnisse

Die Aufgabe, die sich nun stellt, betrifft die Bewertung der Änderungen respektive des Experimentes, die aus der Implementation des Hartree-Fock-Ansatzes in das Modell gegenüber der wasserstoffähnlichen Rechnung resultieren. Die für das Experiment wesentlichen Differenzen gegenüber der wasserstoffähnlichen Variante sowie deren positive Trends, die sich bei Hartree-Fock fortsetzen, lassen sich zusammengefasst auflisten:

1. Die mit Hartree-Fock-Targetbeschreibung gewonnenen streuwinkeldifferentiellen Querschnitte zeigen eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment für die höheren Stoßenergien, was die Lage der Maxima und den Bereich kleiner Streuwinkel anbetrifft.
2. Das Emissionsverhalten in verschiedenen Streuwinkelbereichen ist im Bereich der niederenergetischen Elektronenemission verglichen mit den Vorhersagen der wasserstoffähnlichen Rechnung asymmetrischer. Eine immer stärkere Strukturierung der Verteilungen mit zunehmender Stoßenergie, wie sie im Experiment beobachtet wird, zeigt sich hier nicht.
3. Man findet ein Überwiegen der Emission langsamer Elektronen in Rückwärtsrichtung. Die Rückwärtsemission schwächt sich jedoch mit zunehmender Emissionsenergie im Gegensatz zum Experiment ab. Insgesamt hat man bezogen auf das Gebiet der Vorwärtsemission ($\theta_e \leq 90^\circ$) relativ mehr rückwärts emittierte Elektronen verglichen mit den Prognosen des wasserstoffähnlichen Falls. Die Emission schnellerer Elektronen bleibt unabhängig von der Stoßenergie vorwärts ausgerichtet und entspricht im wesentlichen dem wasserstoffähnlichen Fall.
4. Auch hier findet man weitere lokale Maxima an Elektronen mit hoher Energie, und ebenfalls im Gegensatz zu den experimentellen Messungen, lediglich in Vorwärtsrichtung. Die Emission im Bereich der Rückwärtsstreuung ist auch im Fall von Hartree-Fock nicht vermehrt von hochenergetischen Elektronen geprägt.

Welcher Schluss läßt sich hieraus ziehen? Klar hat sich gezeigt, dass die Art der Targetbeschreibung von wesentlicher Bedeutung für die Winkelabhängigkeit

der Emission ist. Die Implementation einer verbesserten Beschreibung des Targetanfangszustandes geht eindeutig in die richtige Richtung, da die ausgeprägte Rückwärtsemission zu den auffallendsten Merkmalen der experimentellen Emissionsverteilungen gehört. Leider werden auch hier wesentliche Züge des Experiments nicht wiedergegeben. Hierzu gehört die verstärkte Rückwärtsemission von Elektronen mit höheren Energien, die insbesondere bei höheren Stoßenergien mit negativen Longitudinalimpulsen emittiert werden. Welche Ursachen können hierfür verantwortlich sein?

Natürlich ist die Beschreibung des Helium-Grundzustandes mit Hartree-Fock nicht exakt. Es ist das Fehlen jeglicher Form interelektronischer Korrelation, das den Hauptmangel dieser Wellenfunktion ausmacht. Da die Implementation einer anderen, besseren Beschreibung des Targets in das Modell bereits zu einer echten Korrektur der berechneten Daten geführt hat, kann davon ausgegangen werden, dass die verfolgte Strategie, als Ansatzpunkt für eine richtigere Beschreibung des Experimentes die Beschreibung des Targetatoms zu nehmen, in die richtige Richtung führt.

Da die interelektronische Korrelation im Heliumatom in Radial- und Winkelanteile aufgegliedert werden kann, besteht der nächste Schritt in einer Hinzunahme der Radialkorrelation in die Wellenfunktion. Ein Ansatz, der ausschliesslich radiale Anteile in der Wellenfunktion enthält, ist der Eckart-Ansatz. Die Analyse der Ergebnisse, die mit diesem Ansatz erzielt wurden, sind Gegenstand des nächsten Abschnitts.

4.6 Ergebnisse der Rechnungen mit einem Eckart-Ansatz

Als Ansatz der radiale Korrelationsanteile umfasst, unterscheidet sich der in das Modell implementierte Eckart-Ansatz²⁵

$$\begin{aligned}
 \Psi_{1s^2}^{1S}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= N_{\alpha\beta} [\varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_2) + \varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_2) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_1)] \\
 \varphi_{1s}^\lambda(\vec{x}) &= \left(\frac{\lambda^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\lambda x} \quad \lambda = \alpha, \beta \\
 N_{\alpha\beta} &= \frac{1}{[2(1+c^2)]^{\frac{1}{2}}} \quad c = \frac{8(\alpha\beta)^{\frac{3}{2}}}{(\alpha+\beta)^3} \quad . \quad (4.32)
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \alpha_{opt} &= 2.14 & \beta_{opt} &= 1.19 \\
 N_{\alpha_{opt}\beta_{opt}} &= 0.53 & c_{opt} &= 0.88 \\
 E_{1s^2}(\alpha_{opt}, \beta_{opt}) &= 2.8775 \text{ a.u.} \quad . \quad (4.33)
 \end{aligned}$$

wesentlich von den zuvor beschriebenen Ansätzen. Die Elektronen bewegen sich nun nicht mehr in einem gemeinsamen Potential, sondern in jeweils verschiedenen Coulombpotentialen.

Der folgende Abschnitt beschließt den Vergleich von Theorie und Experiment. Neben einer Analyse der streuwinkelabhängigen Verteilung des Projektils nach dem Stoß und der Emissionscharakteristik des freigesetzten Elektrons enthält dieser Abschnitt als letzten Teil zusätzlich einen Vergleich der mit den drei betrachteten Ansätzen gewonnenen totalen Wirkungsquerschnitte und dem Experiment.

4.6.1 Streuwinkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte

Der Übergang von wasserstoffähnlichem Ansatz zu Hartree-Fock hatte, verglichen mit dem Experiment, eine eindeutige Verbesserung für die berechneten einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte erbracht. Abbildung (4.46) zeigt die einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel

²⁵Details findet man in den Abschnitten 1.2.4 und 2.2.3.

und der Stoßenergie, wie sie sich aus der Verwendung einer Eckart-Beschreibung der Targetstruktur aus dem Modellansatz ergeben. Sie weist aus, dass sich dieser Trend für den Eckart-Ansatz fortsetzt.

Insgesamt beobachtet man bei allen Stoßenergien – betrachtet man die Lage des Maximums und den Bereich kleiner Streuwinkel und vergleicht mit den wasserstoffähnlichen Daten und der Hartree-Fock-Rechnung –, dass das Experiment durch die Eckart-Rechnung besser beschrieben wird. Im Bereich größerer Streuwinkel hingegen wird die Streuwinkelabhängigkeit bei der niedrigsten betrachteten Stoßenergie von 0.3 MeV allerdings nicht ganz richtig wiedergegeben. Dies betrifft die Änderung des Steigungsverhaltens der experimentellen Werte für Streuwinkel ab 0.3 mrad. Gleichfalls erkennt man, dass der Gang der Kurve bei den beiden höheren Stoßenergien – bei 0.63 MeV circa ab 0.4 mrad, bei 1.0 MeV circa ab 0.3 mrad – nicht mehr so gut reproduziert wird: während die Prognosen des wasserstoffähnlichen Ansatzes und des Hartree-Fock-Ansatzes den Streuwinkelbereich bis zu einem Streuwinkel von circa 0.5 mrad, zwar tendenziell etwas unterschätzend, aber dennoch relativ gut wiedergeben, fällt der Wirkungsquerschnitt bei Eckart zu stark ab und zeigt bei circa 0.5 mrad, also in der Nähe des für den ee-Thomas-Prozess (EET) typischen Winkels, eine lokale Überhöhung der Werte. Dies geht aus dem Vergleich der Abbildungen (4.47, 4.48, 4.49) deutlich hervor, die die auf den experimentellen Maximalwert normierten Querschnitte zeigen.

Abbildung (4.50) zeigt einen Vergleich der differentiellen Querschnitte, wie sie mit den drei verschiedenen Targetansätzen gewonnen wurden. Der Eckart-Ansatz liefert im Vergleich mit den anderen Ansätzen die höchsten Querschnitte. Die Annahme, die Ursache für die Höhe der Wirkungsquerschnitte bei Eckart sei ein Resultat der verwendeten Bindungsenergien beider Elektronen (2.80), -2.29 a.u. und -0.70805 a.u., ist sicher falsch. Auch beim Vergleich der Prognosen mit einer wasserstoffähnlichen Beschreibung und Hartree-Fock wurde dies als Ursache ausgeschlossen. Wäre dies der Fall würde man eine damit einhergehende Asymmetrie von Begünstigung und Erschwernis einer Ablösung eines Elektrons im Vergleich zu den anderen Targetansätzen erwarten können. Dies würde genau dann einen zu hohen Querschnitt liefern, wenn durch den geringeren Betrag der Bindungsenergie der Übergang des entsprechenden Elektrons sehr stark erleichtert wird, während die Ablösung des zweiten Elektrons über seine höhere Bindungs-

energie nicht in gleichem Maße erschwert wird.

Was die Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte von der Projektilenergie anbetrifft, so geht aus Abbildung (4.46) hervor, dass die absolute Höhe der experimentellen Wirkungsquerschnitte durch die auf die Lage des Maximums bei 0.63 MeV normierten theoretischen Daten gut wiedergegeben wird. Analog zu den mit Hartree-Fock gewonnenen Ergebnissen wird auch hier die Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte von der Stoßenergie durch die veränderte Beschreibung des Targets mit dem Eckart-Ansatz besser erfasst. Dies deutet darauf hin, dass die Abhängigkeit des Gewichtungsfaktors von der Energie des Projektils nur schwach ausgeprägt ist, sofern es keine Faktoren im Rahmen des Modellansatzes gibt, die zu einer Verschleierung der Effekte führen, die aus den nichtberücksichtigten Anteilen der Stoßenergieabhängigkeit entstehen. Dieser Punkt wird ausführlicher bei der Diskussion der totalen Wirkungsquerschnitte (Abschnitt 4.6.3) besprochen, da dort die Stoßenergieabhängigkeit besonders deutlich zutage tritt.

Eckart-Ansatz

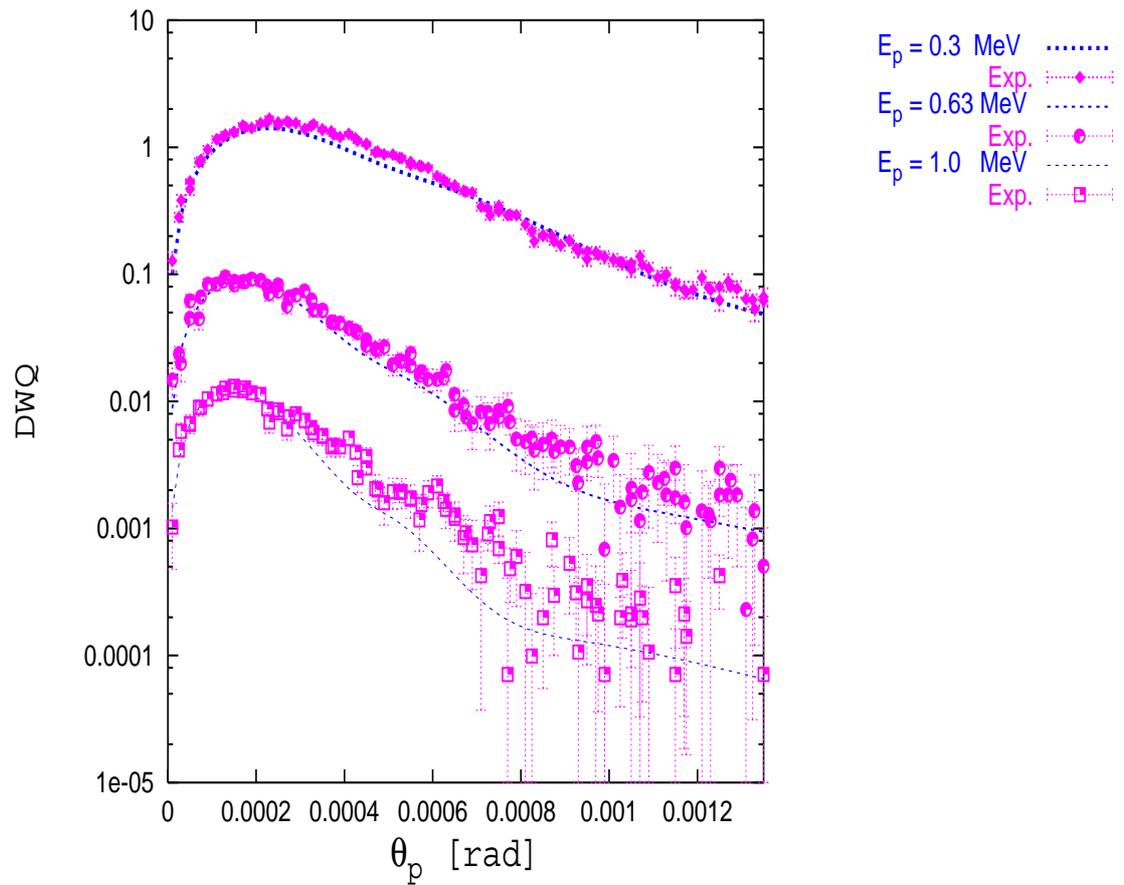


Abbildung 4.46: Vergleich gemessener und berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{a_0^2}{rad}]$ für verschiedene Projektilenergien. Eckart-Ansatz. Die Werte wurden auf den experimentellen Wert bei $\theta_p = 0.19$ mrad und 0.63 MeV normiert.

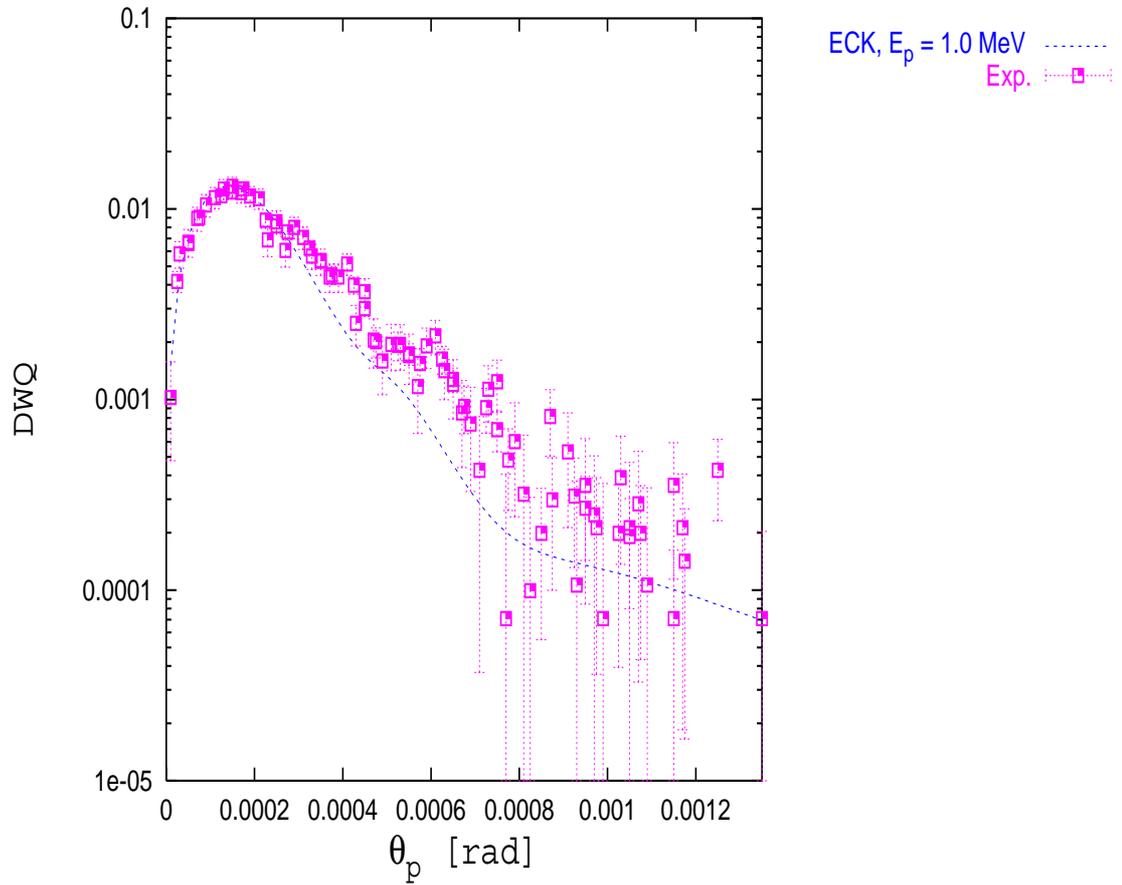


Abbildung 4.47: Vergleich gemessener und berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{a_0^2}{rad}]$. Eckart-Ansatz. Die Werte wurden auf den experimentellen Wert bei $\theta_p = 0.19$ mrad und 0.63 MeV normiert.

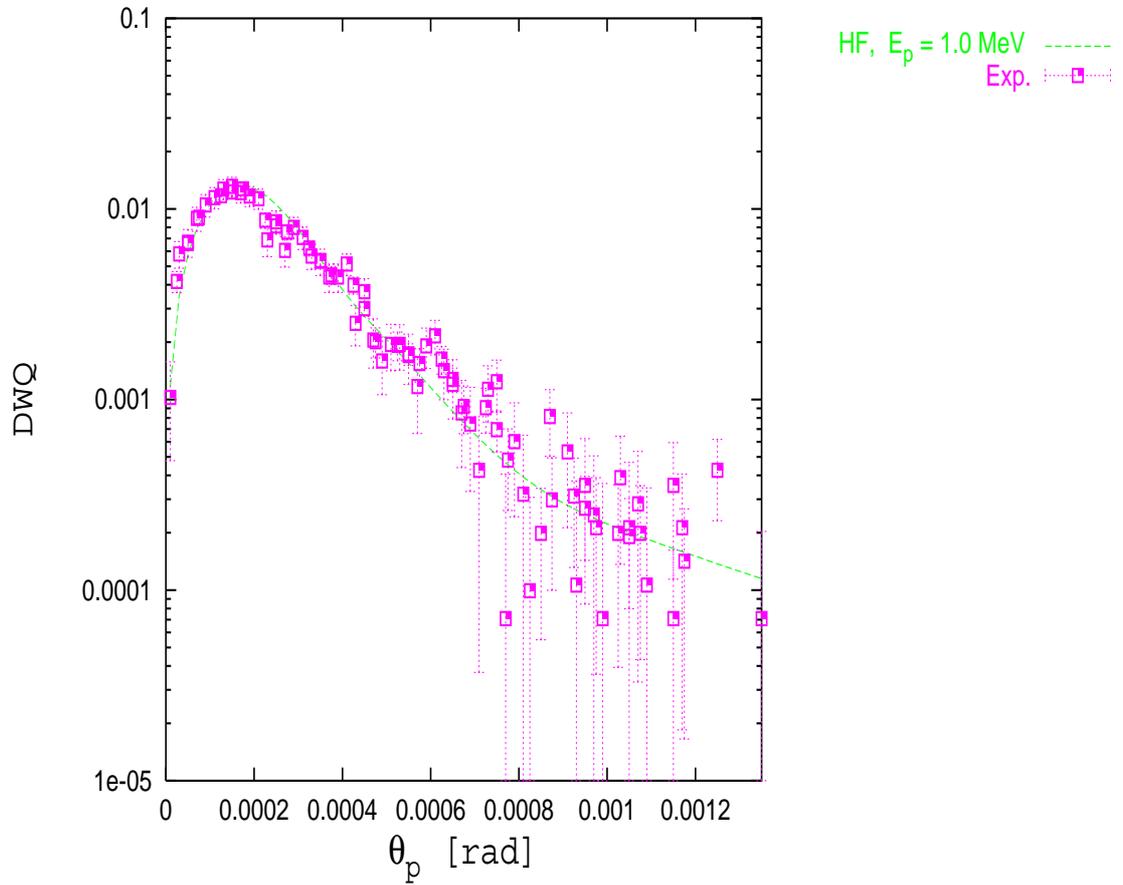


Abbildung 4.48: Vergleich gemessener und berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{a_0^2}{rad}]$. Hartree-Fock-Ansatz. Die Werte wurden auf den experimentellen Wert bei $\theta_p = 0.19$ mrad und 0.63 MeV normiert.

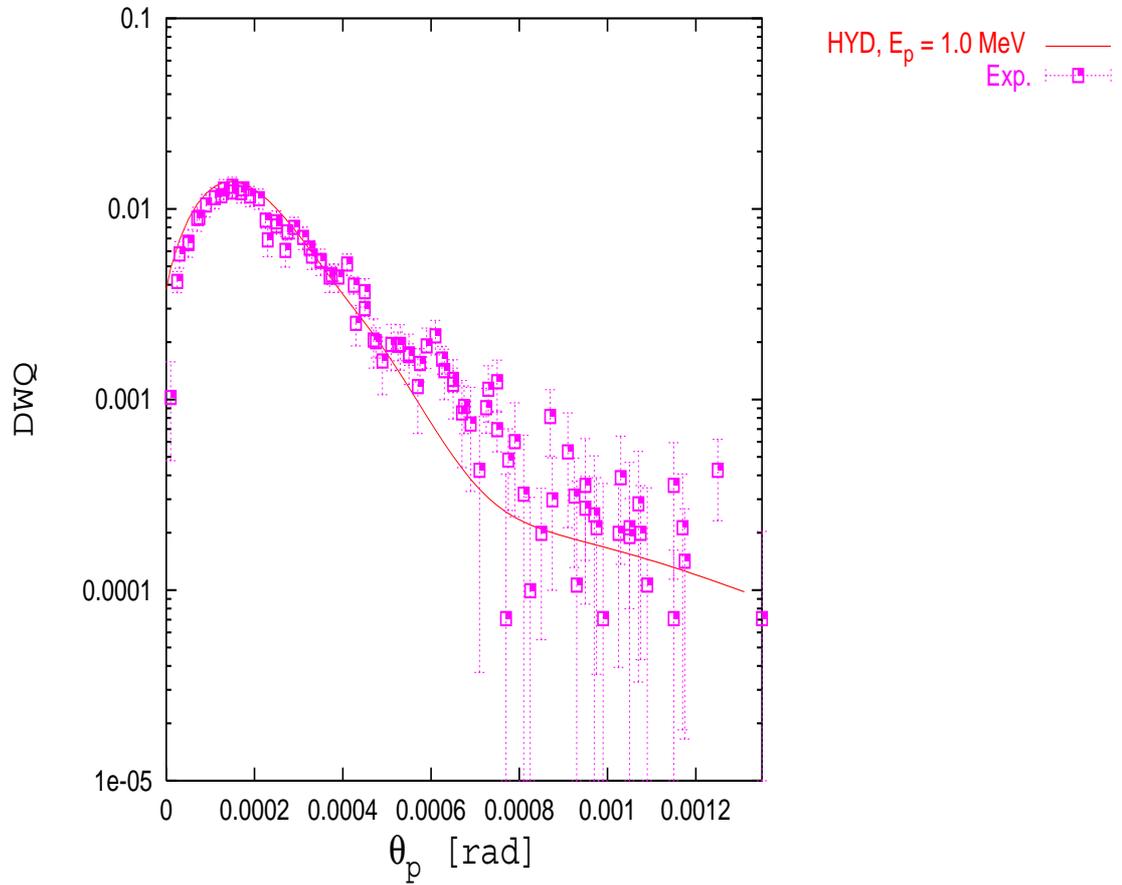


Abbildung 4.49: Vergleich gemessener und berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{a_0^2}{rad}]$. Wasserstoffähnlicher Ansatz. Die Werte wurden auf den experimentellen Wert bei $\theta_p = 0.19$ mrad und 0.63 MeV normiert.

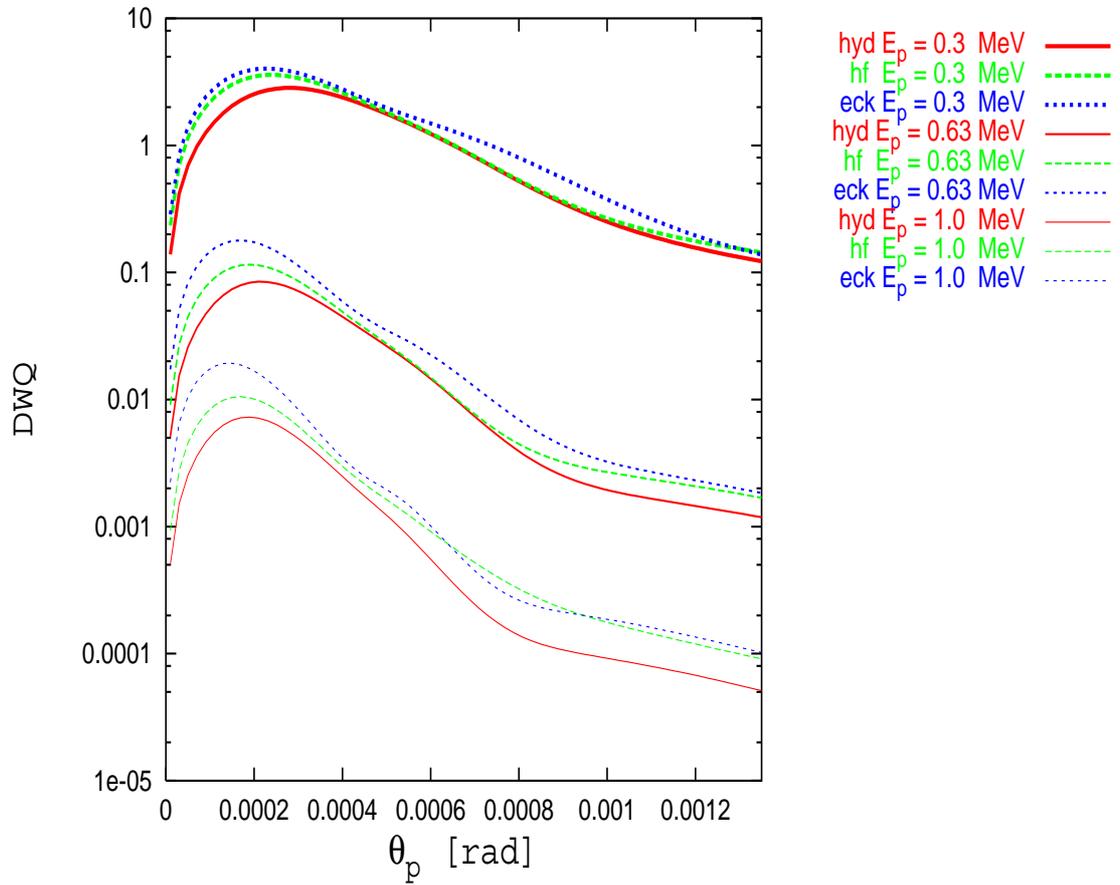


Abbildung 4.50: Vergleich berechneter einfach-differentieller Wirkungsquerschnitte $\frac{d\sigma}{d\theta_p}$ in Einheiten von $[\frac{a_0^2}{\dot{y}(E, E_z) \text{ rad}}]$. Eckart-, Hartree-Fock- und wasserstoffähnlicher Ansatz.

4.6.2 Das Emissionsverhalten in verschiedenen Streuwinkelbereichen

Im Folgenden werden die Impulsverteilungen der emittierten Elektronen, die sich aus der Implementation eines Eckart-Ansatzes in den Modellansatz ergeben, analysiert.

Aus den Abbildungen (4.51– 4.59) entnimmt man, vergleicht man mit den Ergebnissen der beiden anderen Rechnungen (wasserstoffähnlicher Ansatz (Abb. 4.6 – Abb. 4.14) und Hartree-Fock-Ansatz (Abb. 4.21 – Abb. 4.29)), ein deutlich anderes Verhalten der differentiellen Wirkungsquerschnitte. Welche Trends sind hier zu erkennen?

Auch in diesem Fall tragen Elektronen mit niedrigen Energien unabhängig von der Stoßenergie den größten Anteil zum Wirkungsquerschnitt bei, wobei ebenfalls die Emission am stärksten im Streuwinkelbereich $\theta_p \in [0.0, 0.25]$ mrad ist.

Auffällig ist, betrachtet man die Emissionsrichtung entlang der Einschussachse, das Erstarren der Rückwärtsemission: Insbesondere bei höheren Emissionsenergien treten Impulswerte mit negativen Komponenten parallel zur Einschussrichtung auf.

Im Gebiet kleinerer Emissionsenergien unterscheidet sich die Eckart-Verteilung von den bisher betrachteten Ansätzen: Man hat hier zwar ebenfalls unabhängig von Stoßenergie und Streuwinkelbereich auftretende Maxima, diese liegen jedoch fast direkt auf der k_{\perp}^e -Achse. Dazu gesellt sich im klassisch für den maximal zu erwartenden Streuwinkelbereich für einen binären Stoßes von Projektil und Elektron, $\theta_p \in [0.25 - 0.95]$ mrad, ein drittes Maximum bei ca 1.8 a.u, dessen Intensität sich mit zunehmender Stoßenergie verstärkt. Dieses Maximum tritt bei allen Verteilungen auf. Es entspricht aufgrund seiner Lage der für einen binären Stoß erwarteten Emissionscharakteristik, die man ebenfalls in der betonten Ausdehnung der Verteilung im Gebiet zwischen Emissionswinkeln von 45° und 90° erkennen kann. Im Vergleich zu Hartree-Fock und dem wasserstoffähnlichen Ansatz zeigt sich das für einen BE typische Verhalten nur noch abgeschwächt. Der Blick auf die Abbildungen (4.60 – 4.61), die die Details der Emissionseigenschaften wiedergeben, was Stoßenergie- und Streuwinkelabhängigkeit anbetrifft, bestätigt diesen Eindruck: Das Peakingverhalten tritt nur noch in einer reduzierten Form auf und zwar umso stärker, je höher Stoßenergie und Emissionsenergie

sind.

Die Abbildungen (4.62 – 4.73) zeigen die differentiellen Wirkungsquerschnitte als Funktion des Emissionswinkels in direktem Vergleich mit den Ergebnissen der beiden anderen Targetansätze.

Bei kleinen Emissionsenergien ähnelt die Impulsverteilung derjenigen, die anhand einer wasserstoffähnlichen Targetbeschreibung gewonnen wurde. Die Verteilung ist allerdings nicht so symmetrisch. Diese Ähnlichkeit wird mit zunehmender Emissionsenergie und wachsendem Streuwinkel schwächer. Man erkennt, dass bei den kleineren Emissionsenergien (Abb. (4.62 – 4.65)) Rückwärtsstreuung eher weniger ausgeprägt auftritt, als im Fall einer wasserstoffähnlichen Targetstruktur oder einer Targetbeschreibung auf Hartree-Fock-Basis.

Die Profile der höheren Emissionsenergien entnimmt man den Abbildungen (4.66 – 4.73). Die mit einer Eckart-Wellenfunktion prognostizierte Emission weicht im höherenergetischen Bereich stark von den Vorhersagen der anderen Verteilungen ab.

Die Ergebnisse des Eckart-Ansatzes prognostizieren im Mittel mehr als ein lokales Maximum. Im Gegensatz hierzu tritt in den Profilen der beiden anderen Ansätze (wasserstoffähnlicher und Hartree-Fock-Ansatz) in den meisten Fällen ein einziges Maximum auf, das mit zunehmender Energie eine immer stärker gepeakte Struktur besitzt und aufgrund seiner Lage im klassischen Bild als Folge einer BE-Emission interpretiert werden kann. Auch in den Eckart-Ergebnissen ist ein lokales Maximum bei einem ähnlichen Emissionswinkel sichtbar, hier jedoch in einer etwas anderen Ausprägung, vergleicht man mit der Stärke der Emission in den Bereichen abseits dieses von allen drei Ansätzen prognostizierten Peaks: häufig überwiegt die Emission in einer anderen Richtung. Zudem existiert der Peak stellenweise nur noch angedeutet. Während die Hartree-Fock- und die wasserstoffähnlichen Ergebnisse beim Vergleich untereinander keine allzu großen Unterschiede zeigen, weicht der Gang der Emissionswinkelabhängigkeit des mit dem Eckart-Ansatz gewonnenen Wirkungsquerschnitts in den Gebieten abseits des Peaks stark von den anderen Ansätzen ab. Dies gilt insbesondere für das Emissionsverhalten bei sehr großen und zum Teil auch sehr kleinen Winkeln. In vielen Spektren steigt der Wirkungsquerschnitt für sehr große Emissionswinkel erneut stark an. Mit zunehmender Stoß- und Emissionsenergie beobachtet man dieses Verhalten auch bei kleinen Emissionswinkeln, welches sich in diesem Fall

mit wachsendem Streuwinkel zunächst etwas verstärkt und dann bei sehr großen Streuwinkeln wieder etwas abschwächt.

Die Ursachen für die starken Differenzen zwischen den Eckart-Prognosen und denen der anderen Ansätze kommen durch die Art der Wellenfunktion zustande. Hier wirkt sich der strukturierte Radialanteil der Eckart-Wellenfunktion aus, der als Gewichtungsfaktor die Interferenz der Terme verschiedener Drehimpulsquantenzahlen L in der Partialwellenentwicklung beeinflusst, so dass Interferenzterme insgesamt stärker beitragen. Er ist damit verantwortlich für die Winkelabhängigkeit des Emissionsspektrums. Als weitere Ursache muss man natürlich in Betracht ziehen, dass zu wenig Partialwellen in der Rechnung berücksichtigt wurden. Dies wurde für die betrachteten Emissionsenergien ausgeschlossen: die Rechnungen sind bezüglich der Anzahl an Partialwellen gut auskonvergiert.

In den Abbildungen (4.74, 4.75) ist die Abhängigkeit der Emissionsverteilung vom Betrag des elektronischen Impulses für verschiedene Streuwinkelbereiche dargestellt.

Es deutet sich an, dass sich der Kurvenverlauf über den Energiebereich viel stärker als in den vergleichbaren Spektren, (Abb. 4.17, Abb. 4.18, Abb. 4.42, Abb. 4.43), und auch bei hohen Energien noch ändert. Aufgrund der erforderlichen Rechenzeit war es jedoch nicht möglich die Datenpunktdichte angemessen zu erhöhen.

Betrachtet man den funktionalen Verlauf, so fällt auf, dass die Kurven im Gegensatz zu den Prognosen bisher untersuchter Ansätze eine starke Strukturierung aufweisen. Es treten sehr viele Extrema auf. Die Ausprägung der Extrema nimmt mit der Stoßenergie als auch im Bereich der Rückwärtsstreuung zu. So werden vermehrt rückwärts emittierte Elektronen mit Impulsbeträgen um 3.0 a.u. prognostiziert. Hier überwiegt der Wirkungsquerschnitt verglichen mit der Emission in Vorwärtsrichtung. Daneben tritt ein zweites, schwächer ausgeprägtes Maximum bei etwas höheren Emissionsenergien auf, dessen Lage leicht stoßenergieabhängig ist. Auch bei sehr hohen Emissionsenergien deutet sich ein erneuter Anstieg des Wirkungsquerschnittes besonders im Bereich der Rückwärtsstreuung an. Die Anzahl der Extrema im Bereich der Rückwärtsstreuung ist insgesamt größer als bei Emissionswinkeln kleiner als 90° .

Untersucht man die Kurvenverläufe auf die Streuwinkelabhängigkeit hin, stellt man fest, dass sich auch hier der relative Anteil hochenergetischer Elektronen für

die Emissionswinkel 45° und 90° erhöht. Auch der Gang der beiden Kurven ähnelt sich sehr. Dahingegen hat das Emissionsverhalten bei 5° einen anderen Verlauf: die Abhängigkeit vom Streuwinkel des Projektils zeigt sich in einer Betonung des zweiten Maximums verglichen mit dem ersten. Diese Eigenschaft ist ausgeprägter bei einer Stoßenergie von 1.0 MeV zu sehen. Eine Streuwinkelabhängigkeit im Rückwärtsstreubereich ist kaum erkennbar. Das Emissionsverhalten in Abhängigkeit von der Emissionsenergie ist nahezu unabhängig vom Streuwinkelbereich. Die Profile sind sehr viel strukturierter als die vergleichbaren Emissionsprofile für die wasserstoffähnliche Targetbeschreibung und den Hartree-Fock-Ansatz. Der Grad der Strukturierung nimmt mit wachsender Stoßenergie und zunehmendem Projektilwinkel zu.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

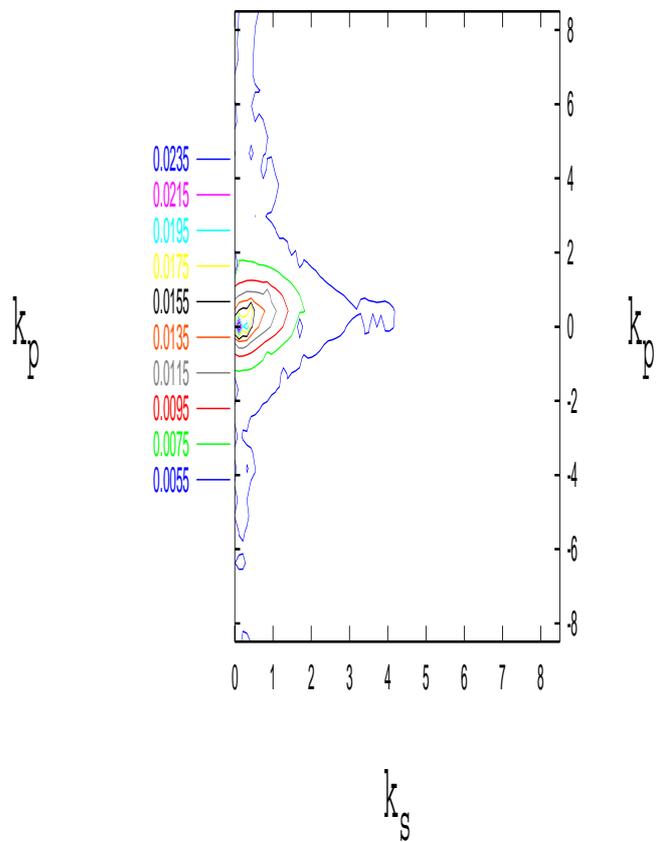
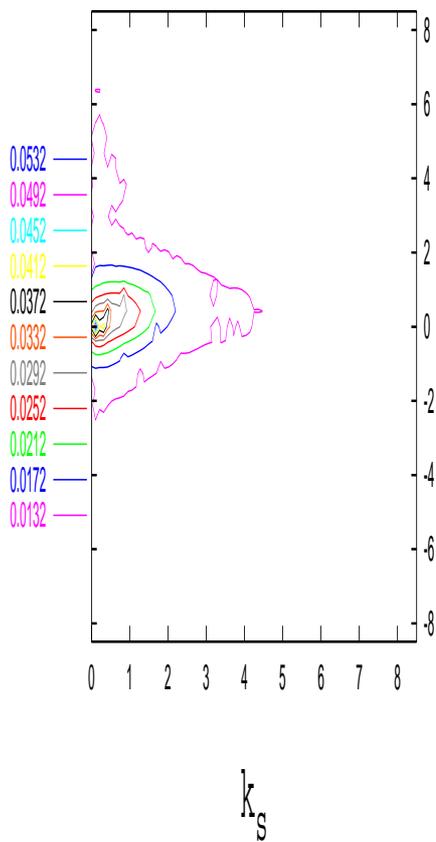


Abbildung 4.51: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$

$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$

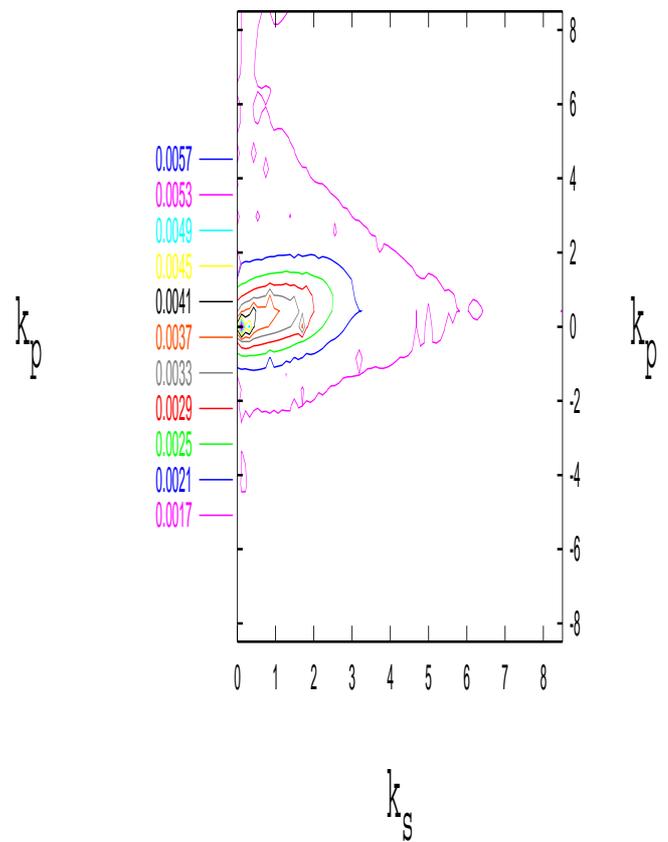
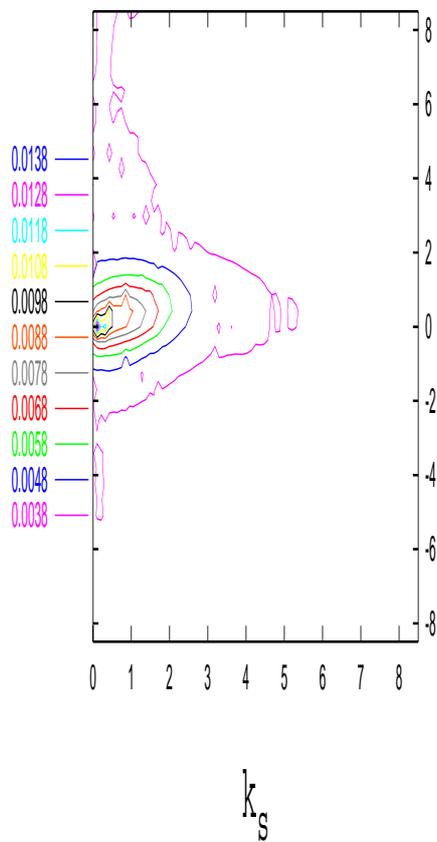


Abbildung 4.52: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

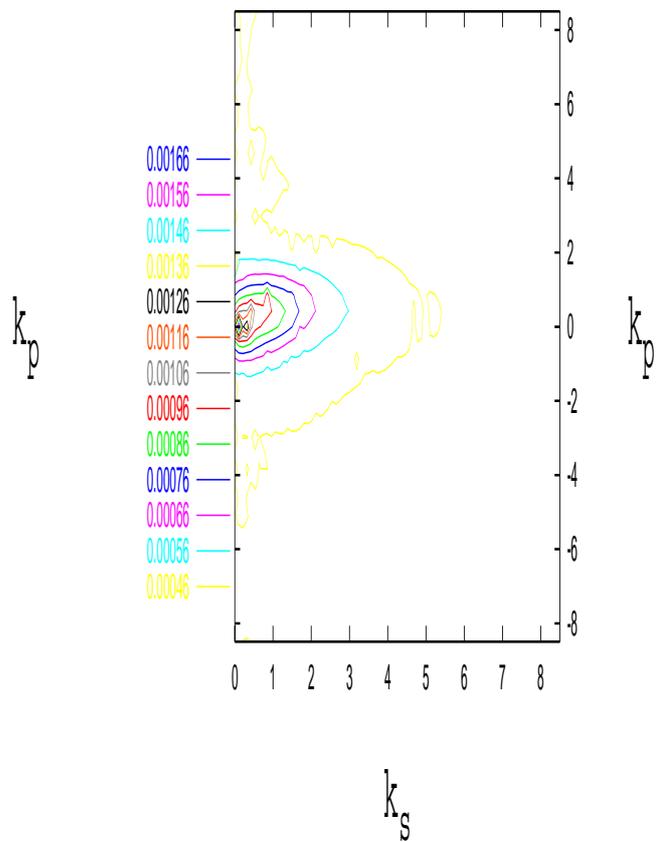
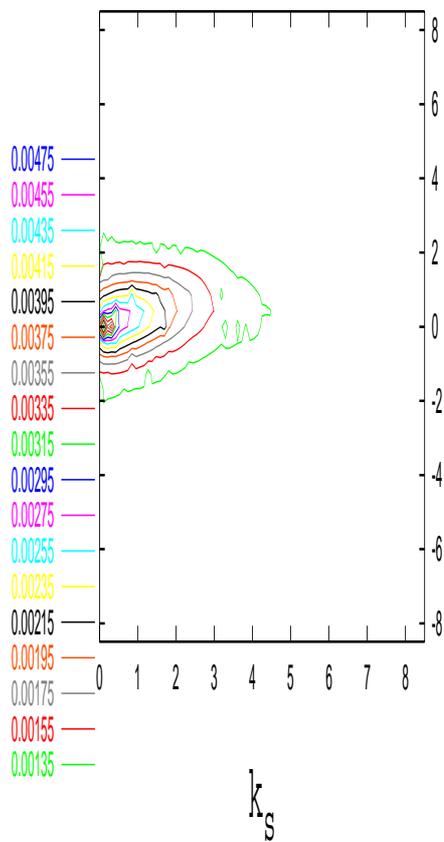


Abbildung 4.53: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

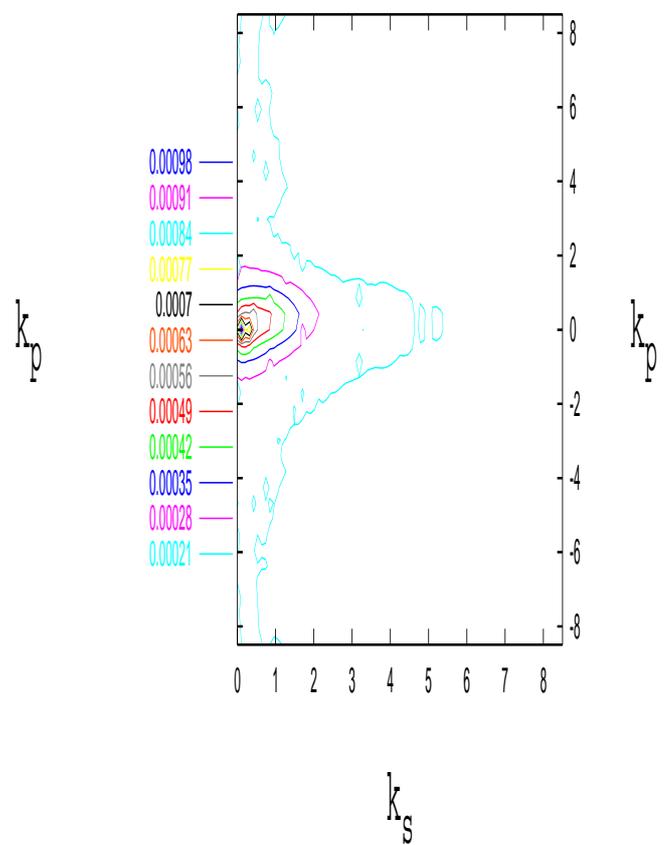
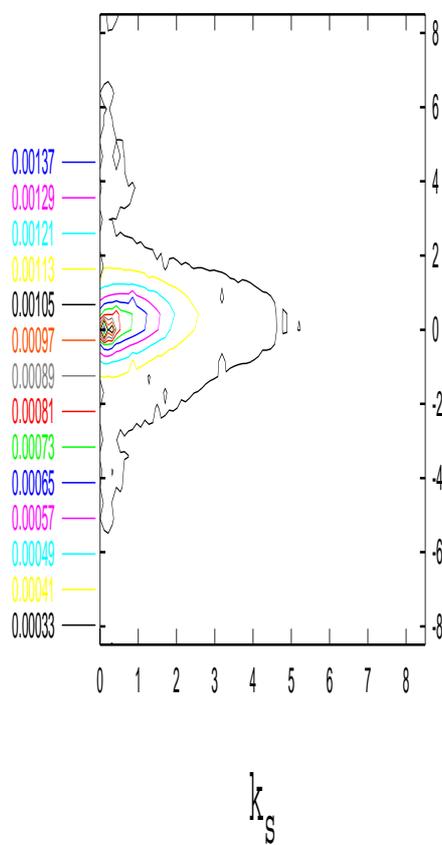


Abbildung 4.54: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

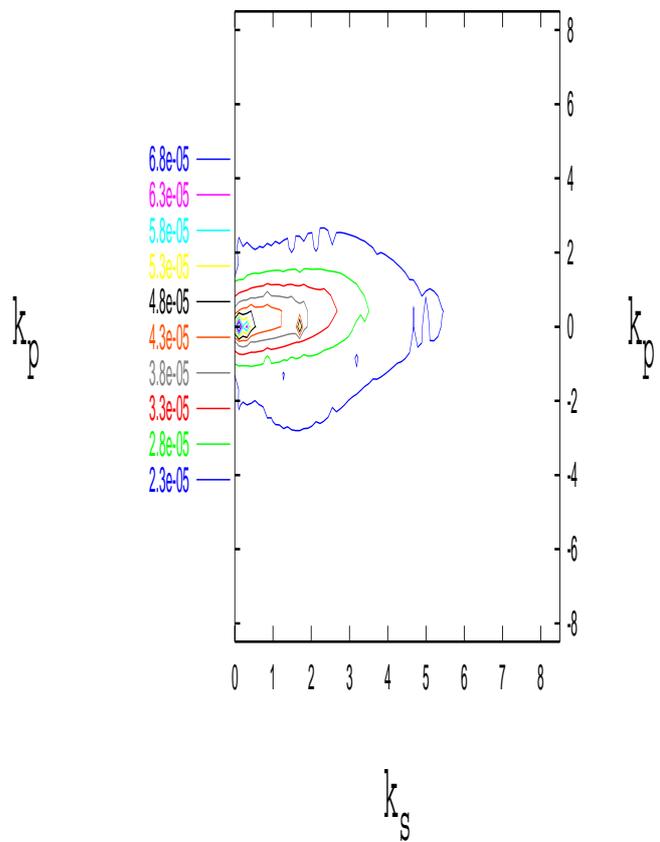
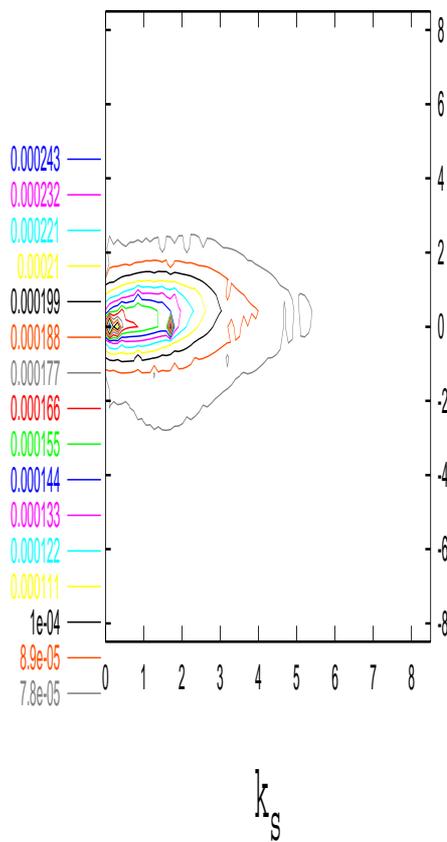


Abbildung 4.55: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 0.63 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

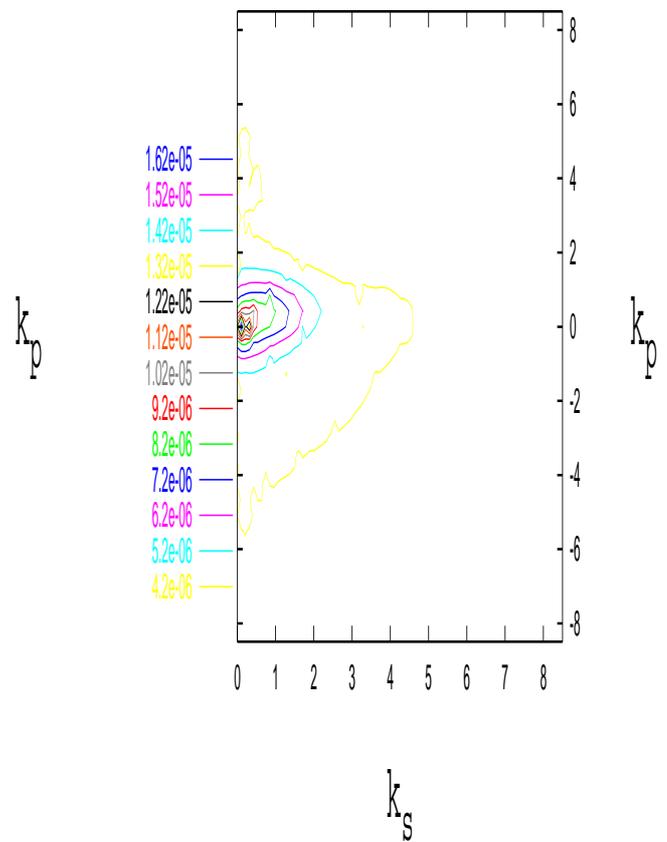
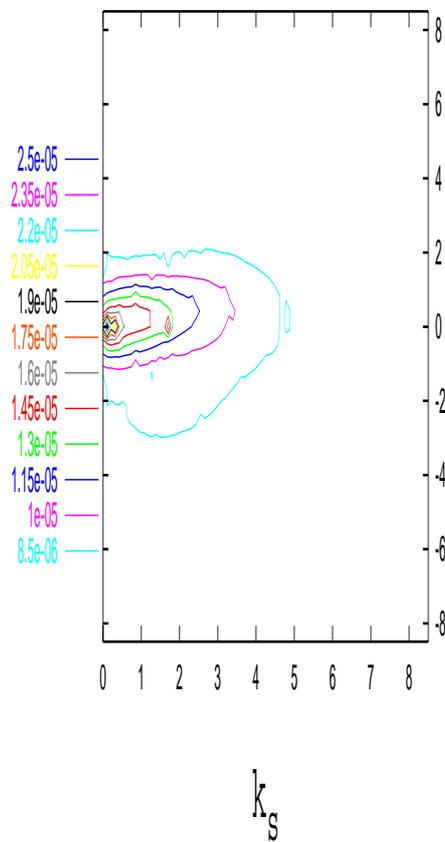


Abbildung 4.56: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 1.35] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.00 - 0.25] \text{ mrad}$$

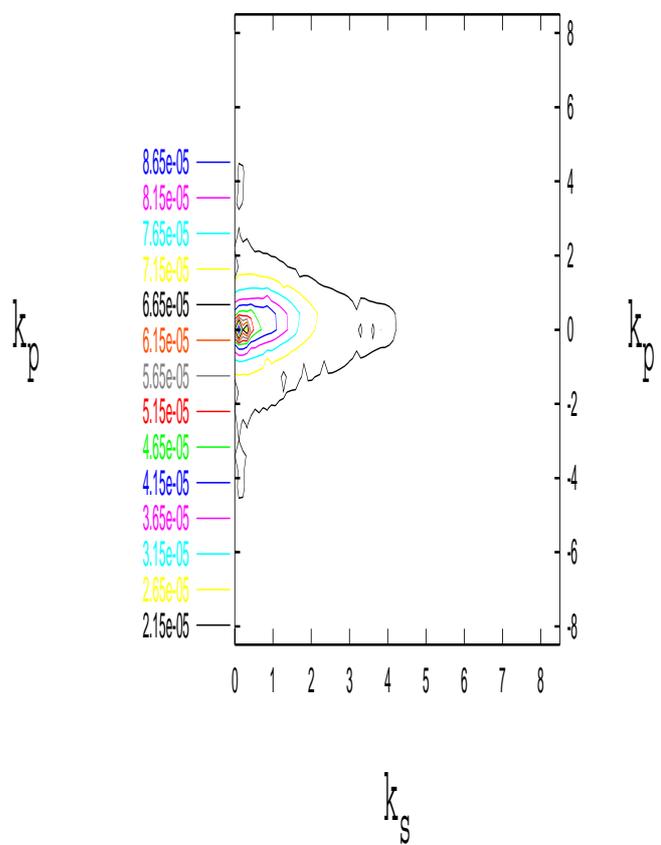
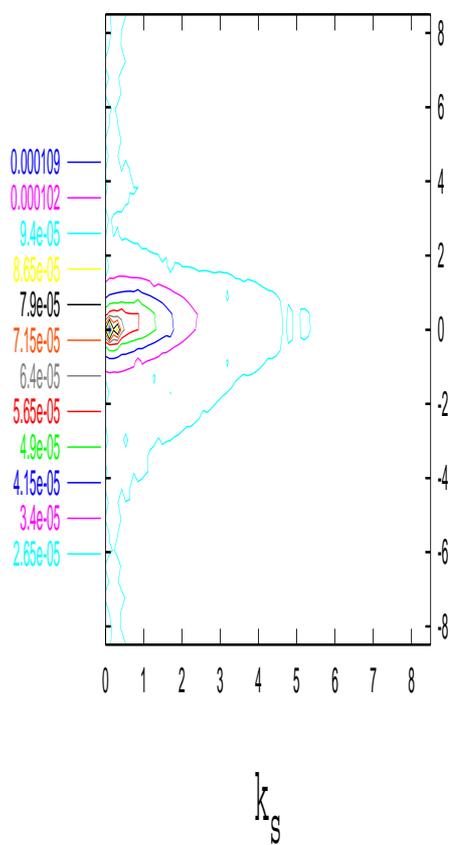


Abbildung 4.57: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.25 - 0.45] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.45 - 0.65] \text{ mrad}$$

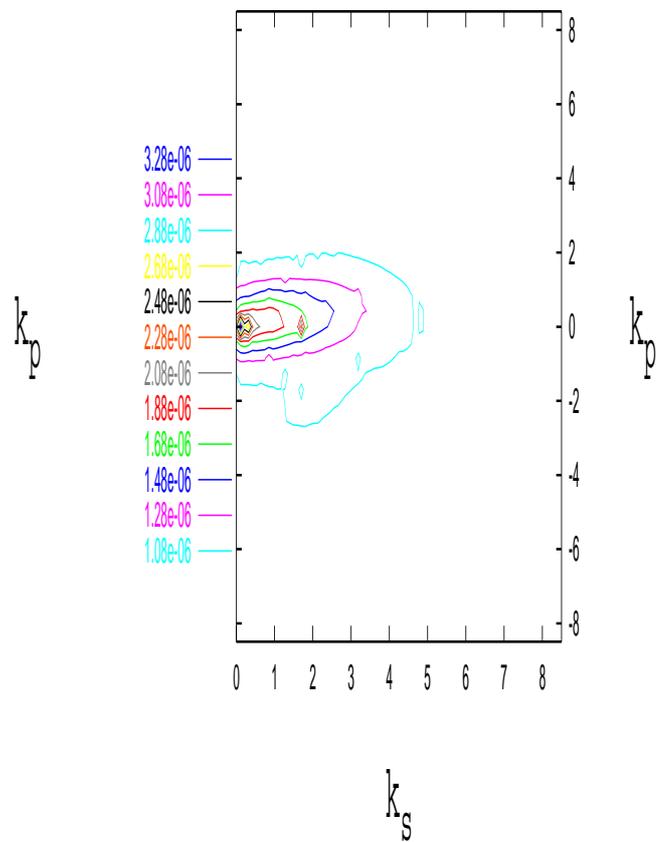
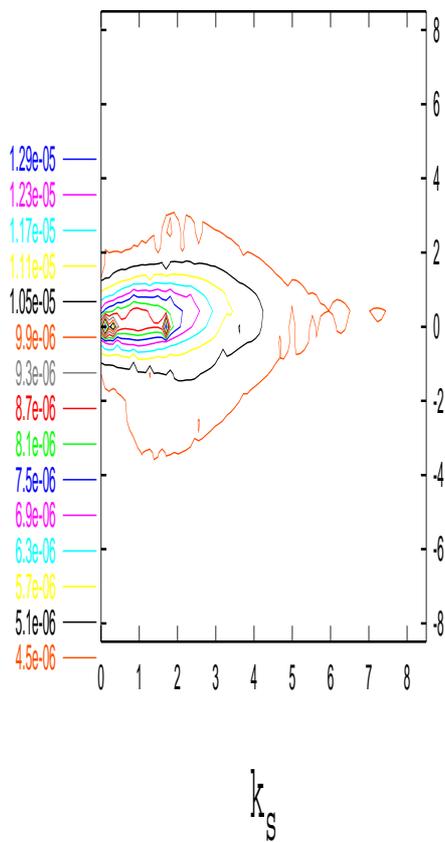


Abbildung 4.58: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, \bar{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$$

$$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$$

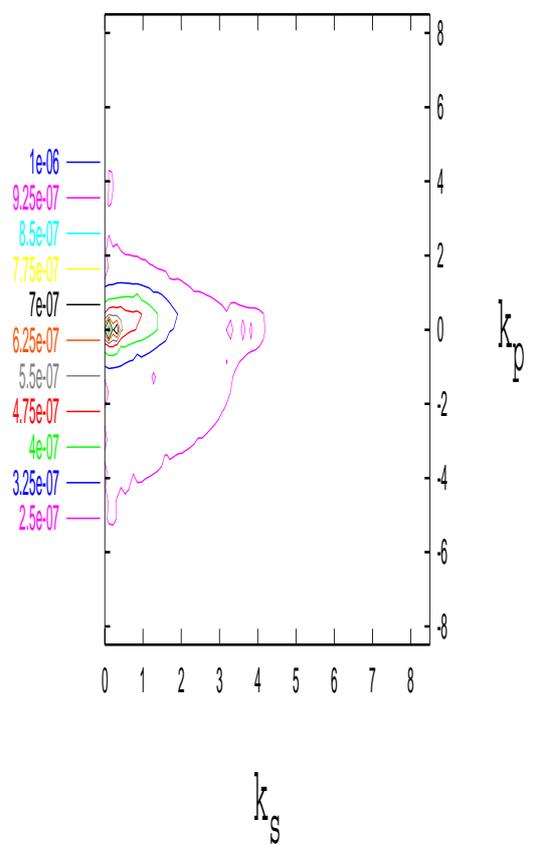
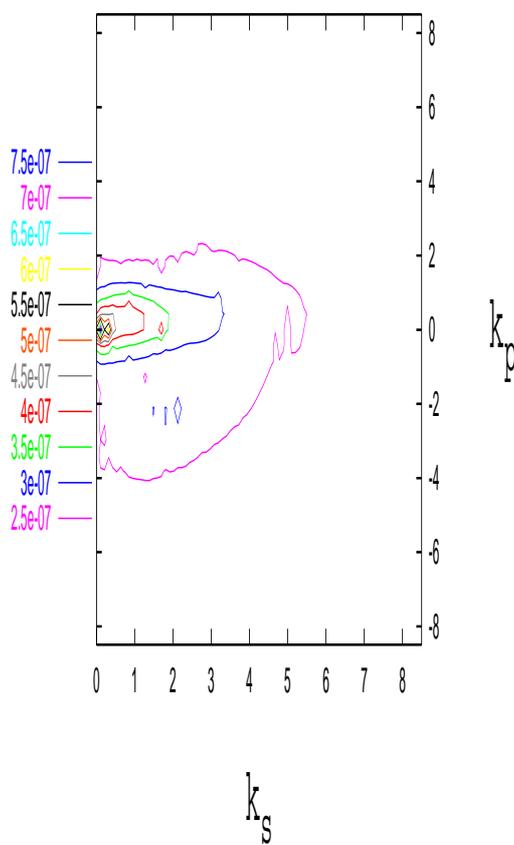


Abbildung 4.59: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial k_{\perp}^e \partial k_{\parallel}^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \overline{E}_z) \text{ grad } E_H}]$. Eckart-Ansatz.

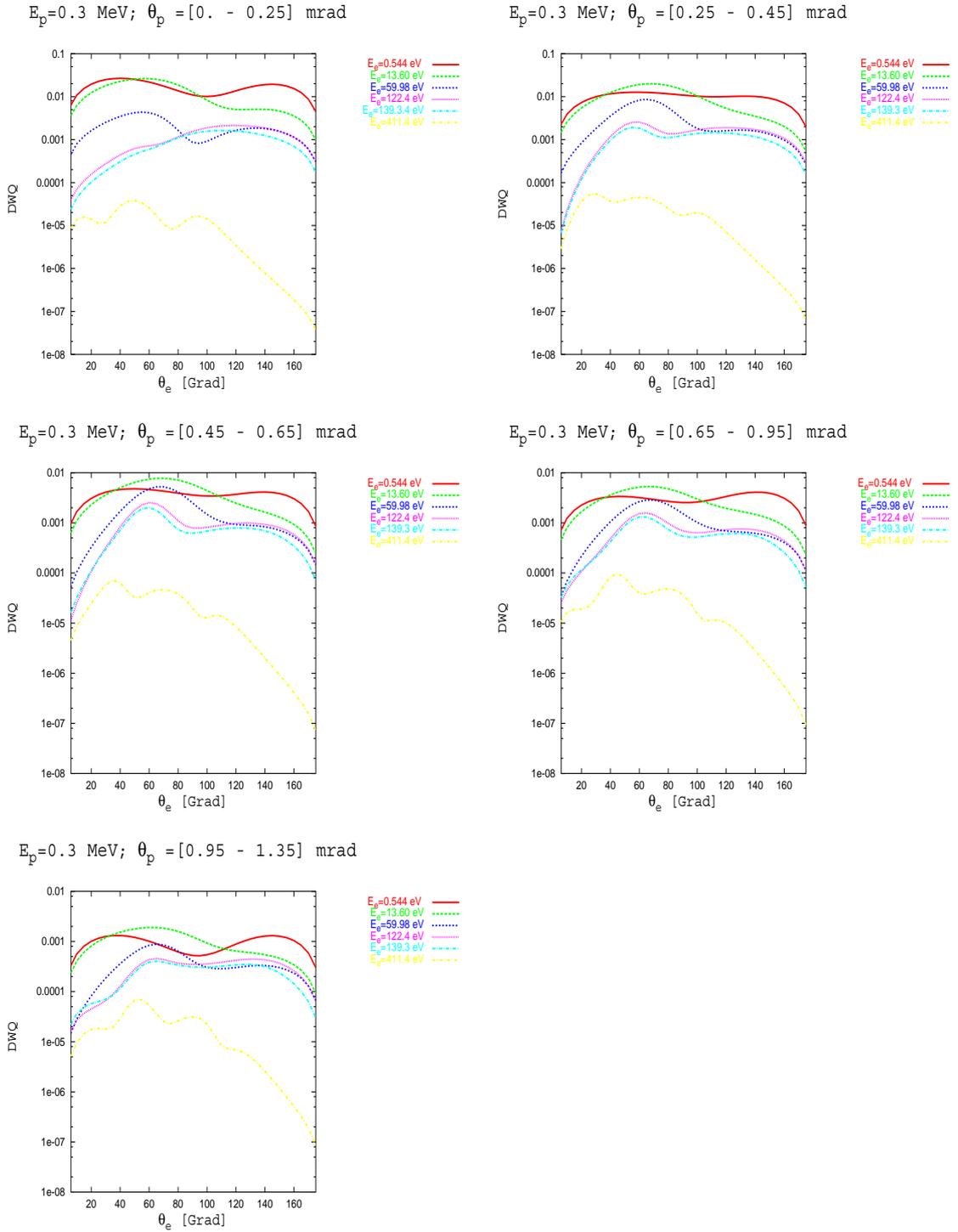


Abbildung 4.60: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\bar{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ als Funktion des Emissionswinkels. Eckart-Ansatz.

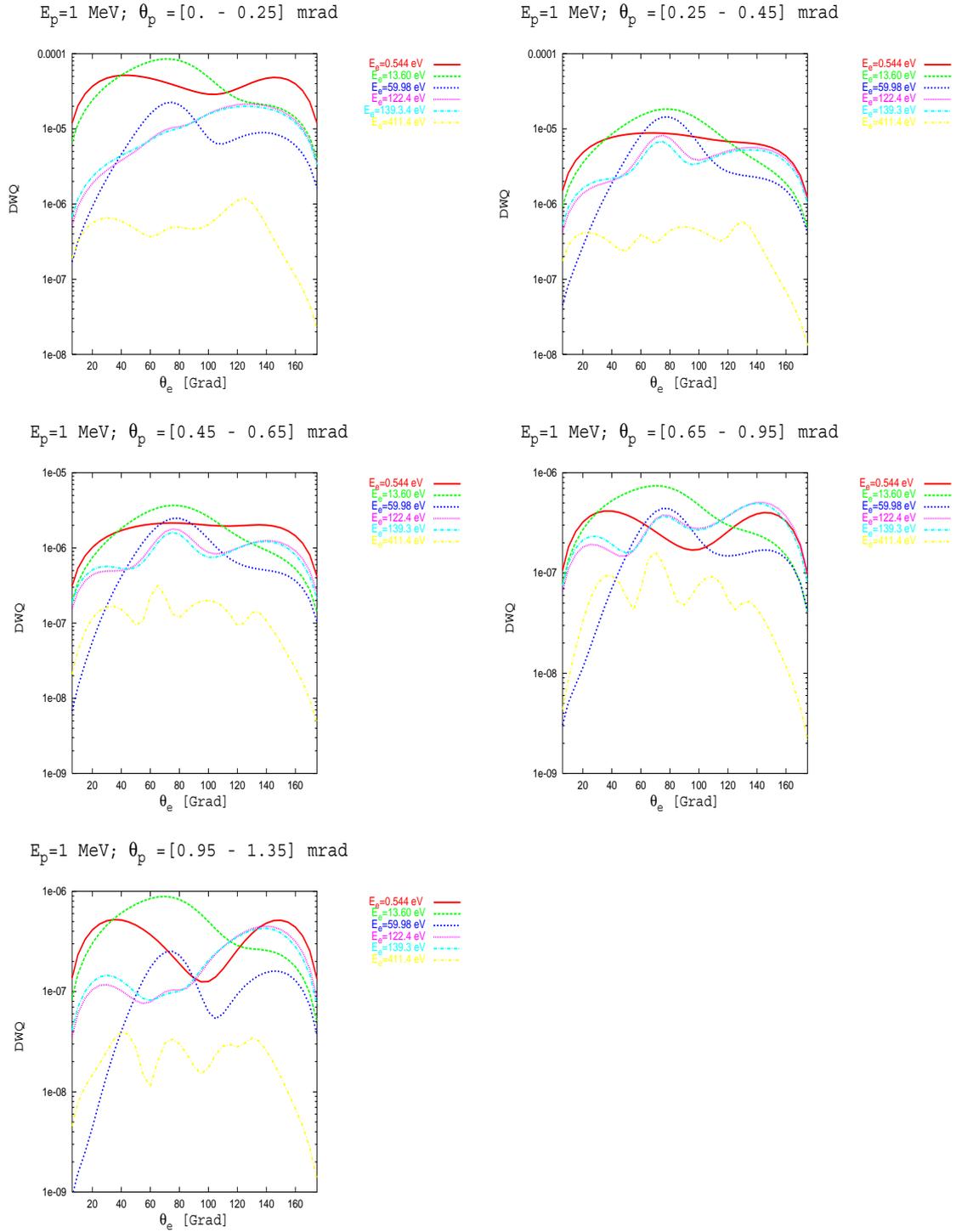


Abbildung 4.61: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{g(E, E_z) \text{ grad } E_H}\right]$ als Funktion des Emissionswinkels. Eckart-Ansatz.

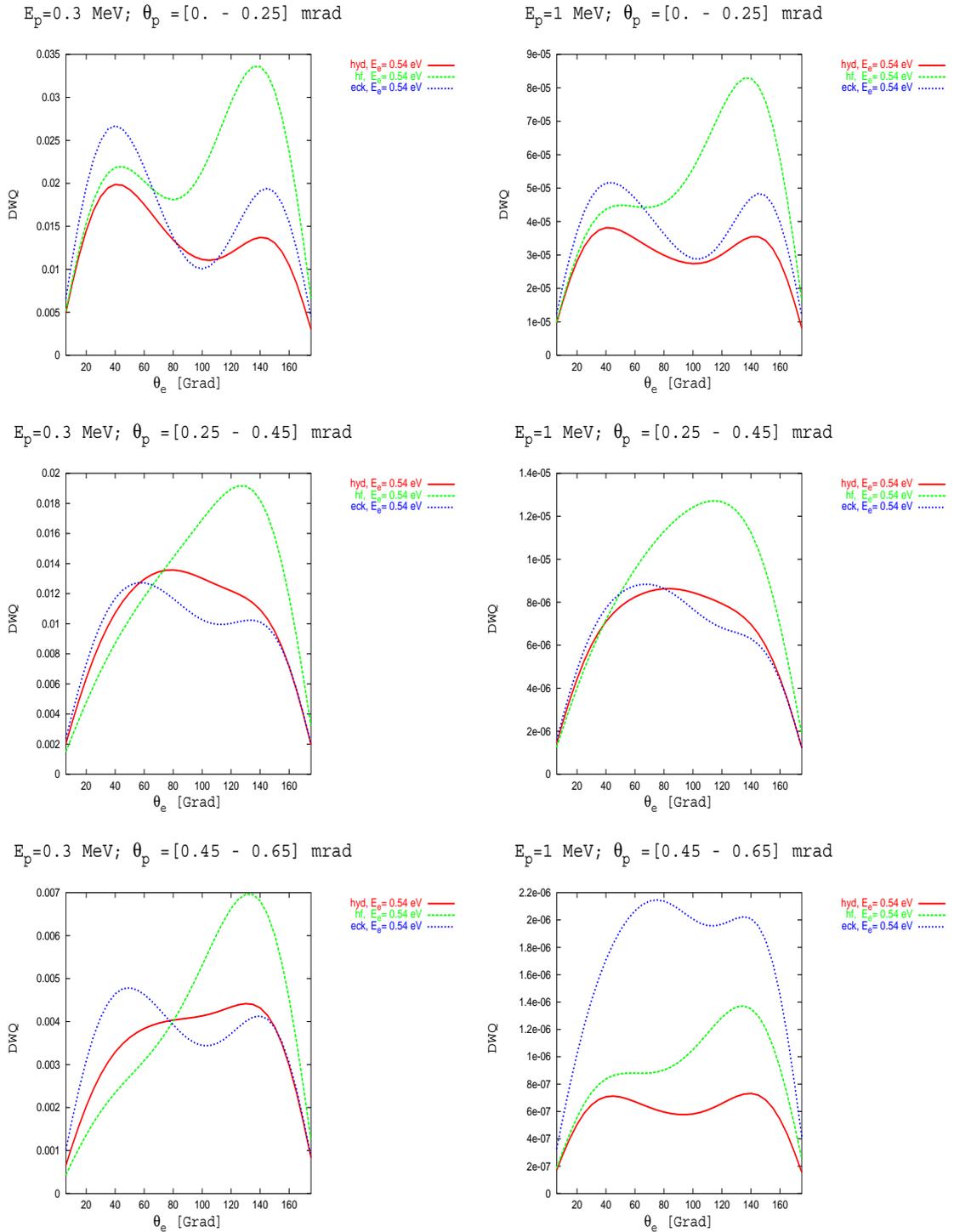
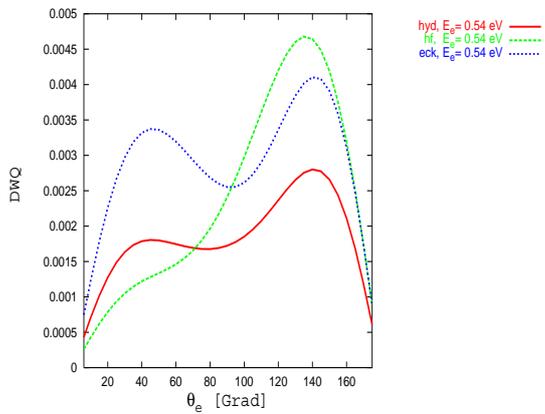
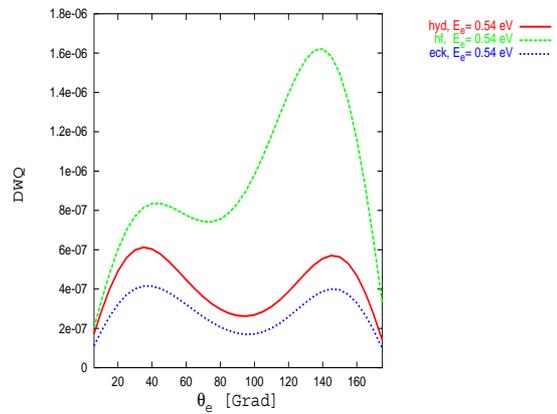


Abbildung 4.62: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

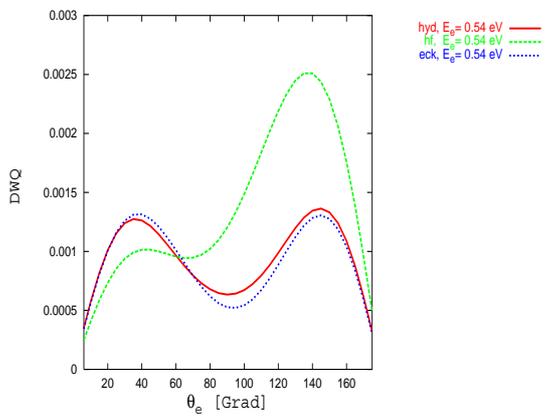
$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$

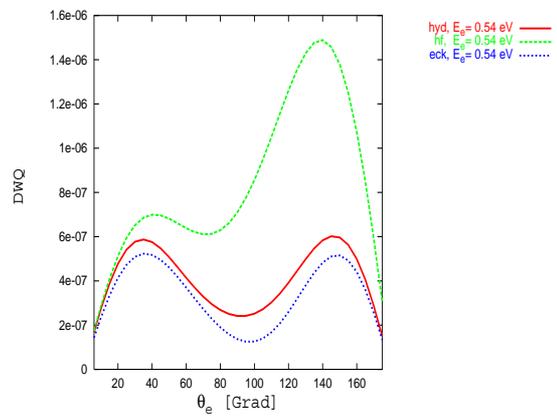


Abbildung 4.63: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

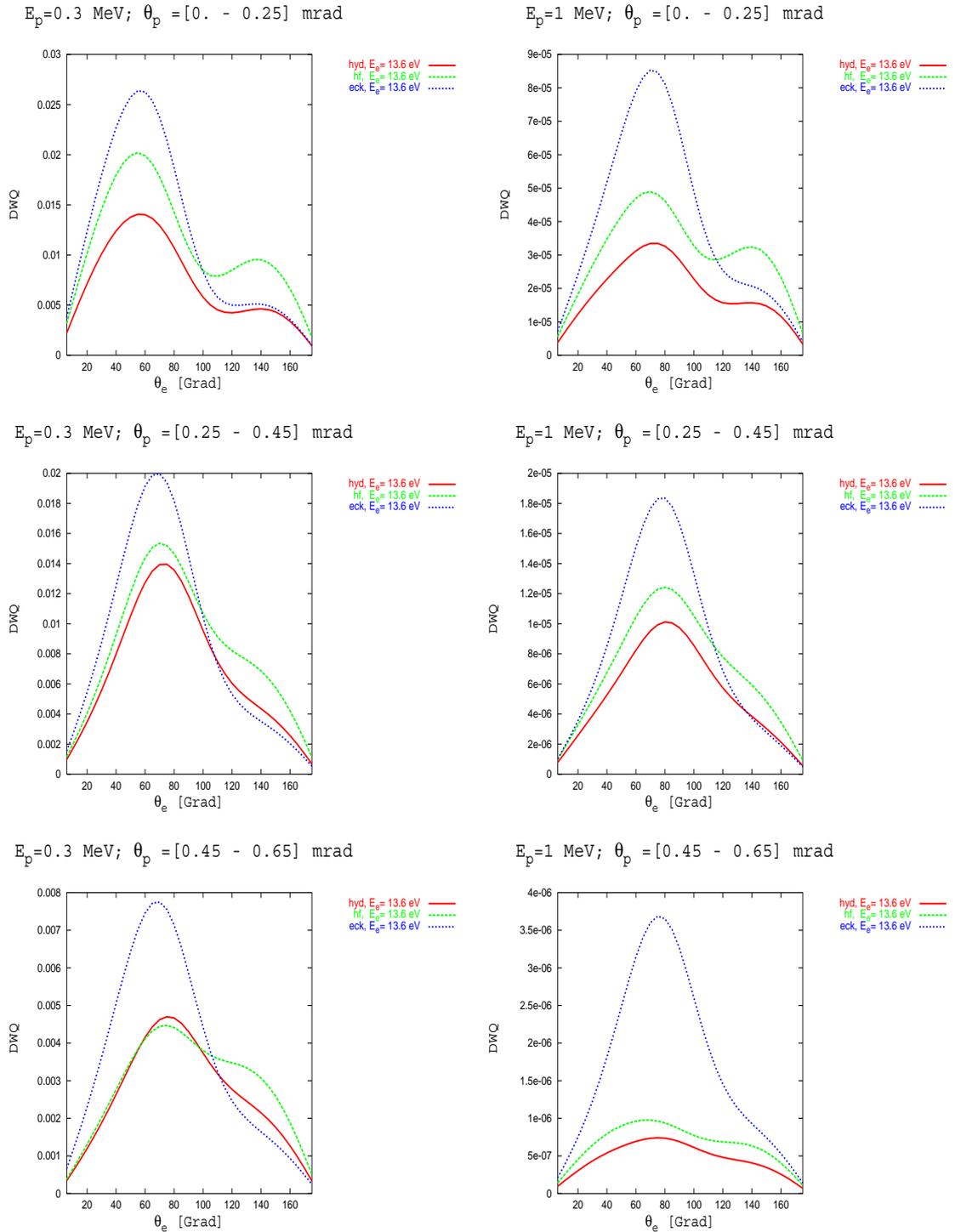
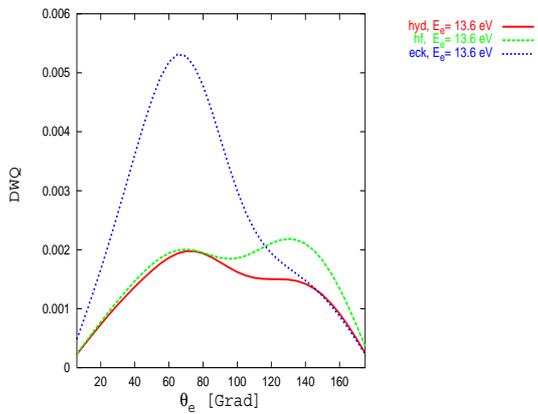
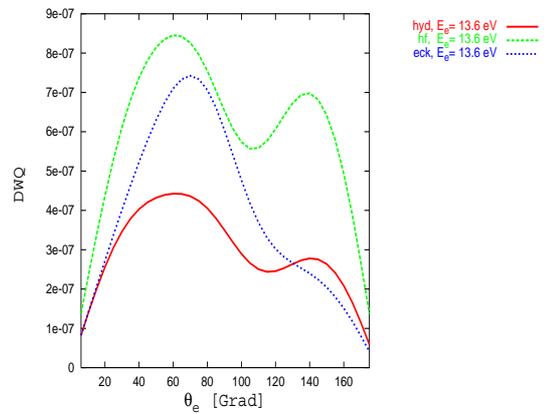


Abbildung 4.64: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

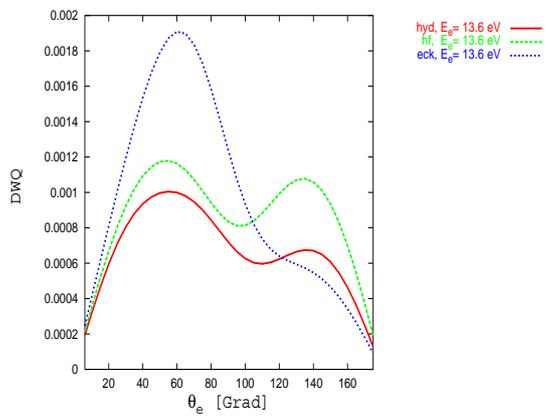
$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$

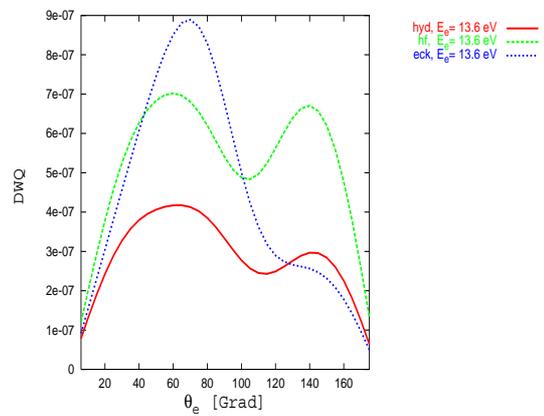


Abbildung 4.65: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\left. \frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \right|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H} \right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

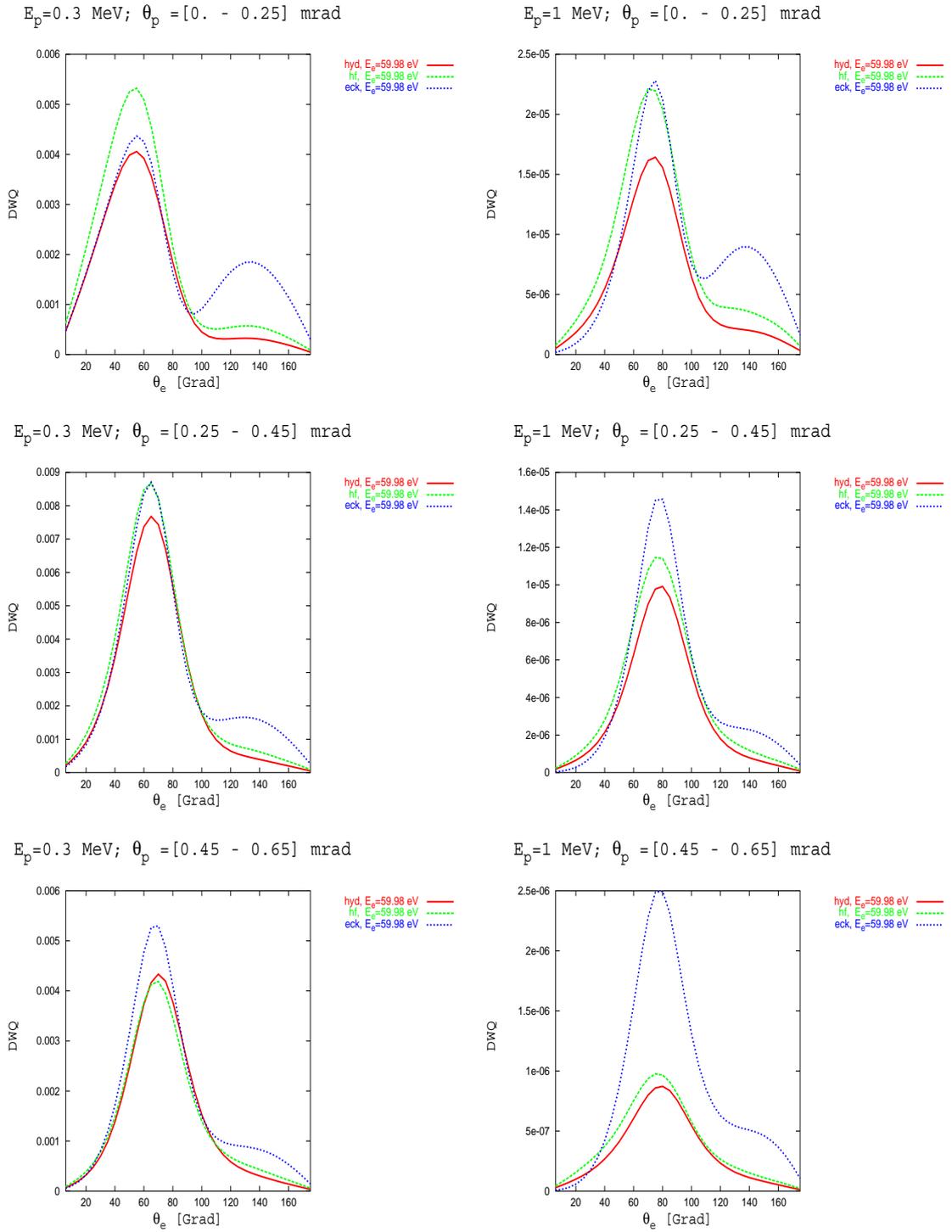
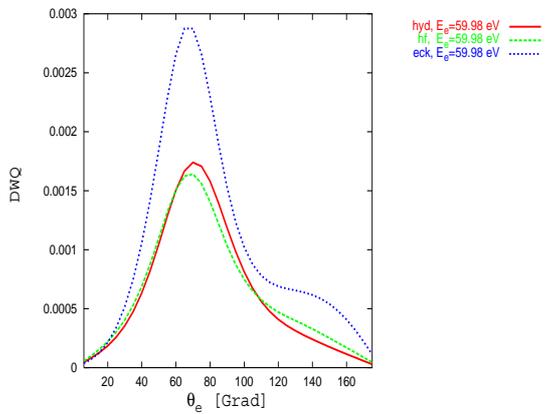
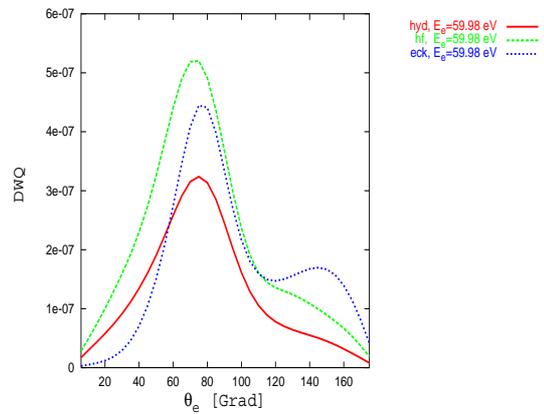


Abbildung 4.66: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

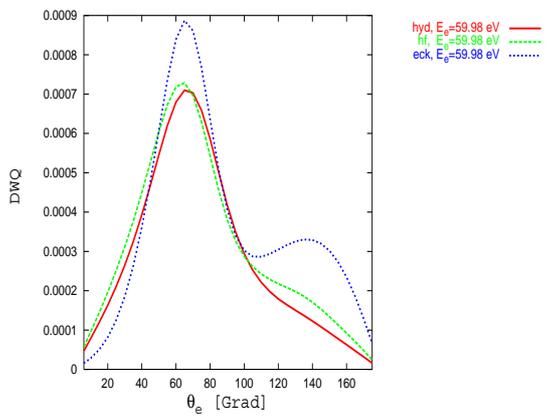
$E_p=0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p=1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p=0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$



$E_p=1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$

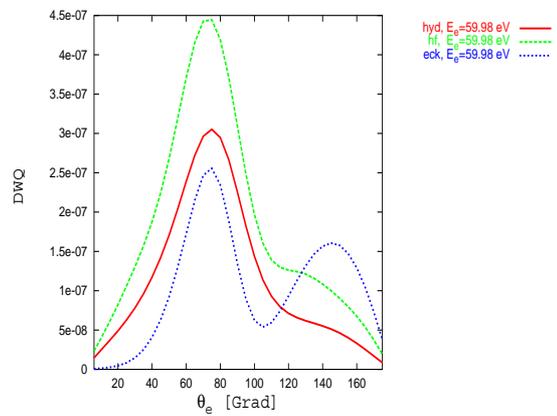


Abbildung 4.67: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\left. \frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \right|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H} \right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

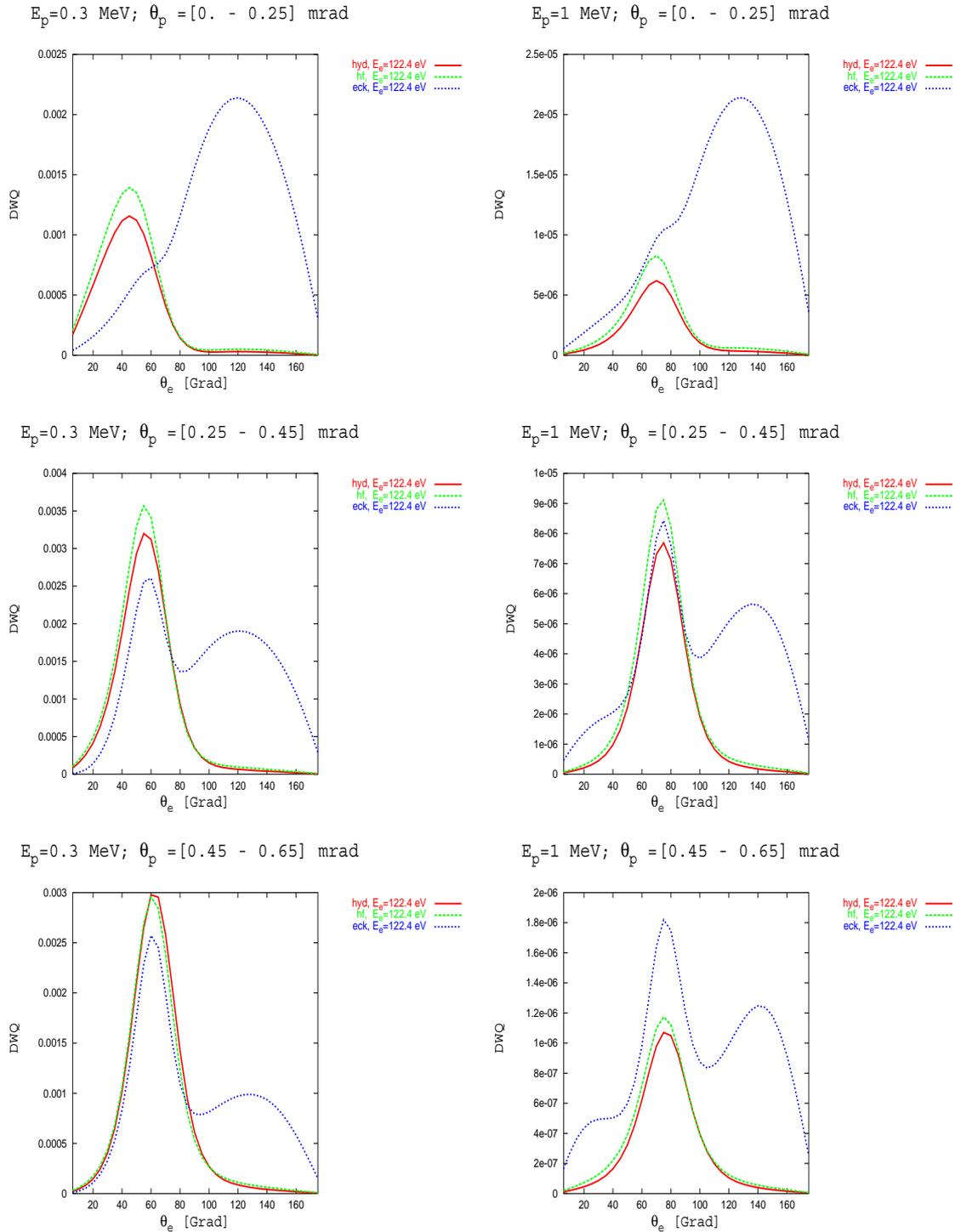
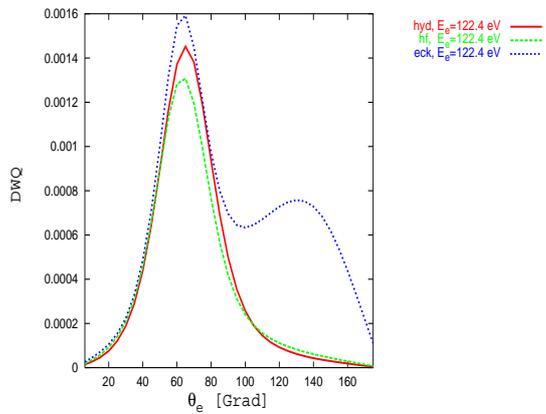
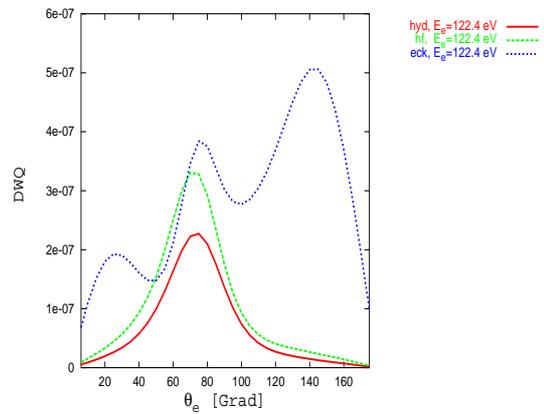


Abbildung 4.68: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

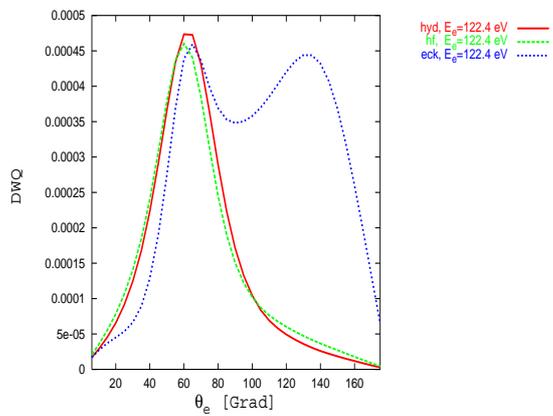
$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$

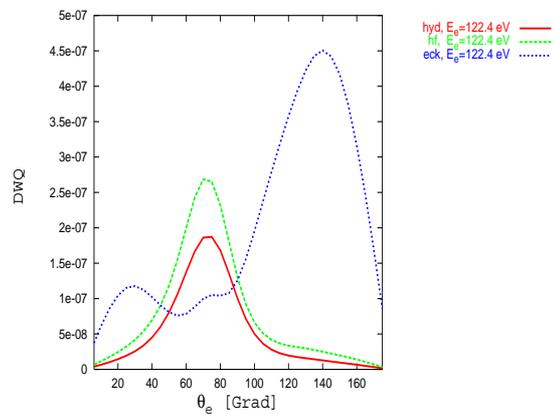


Abbildung 4.69: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\left. \frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \right|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H} \right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

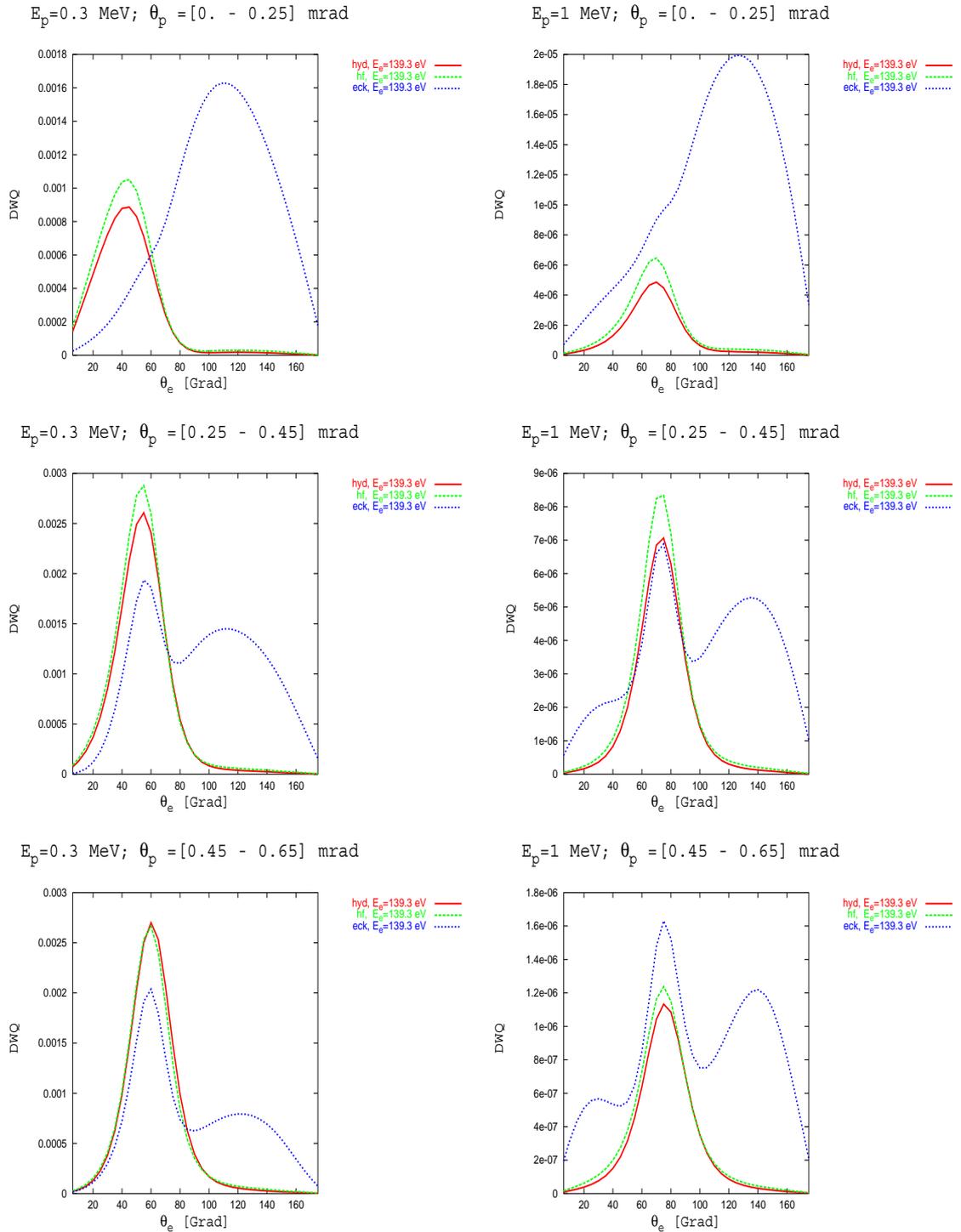
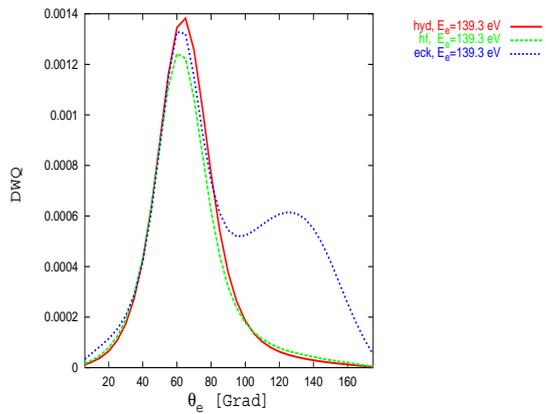
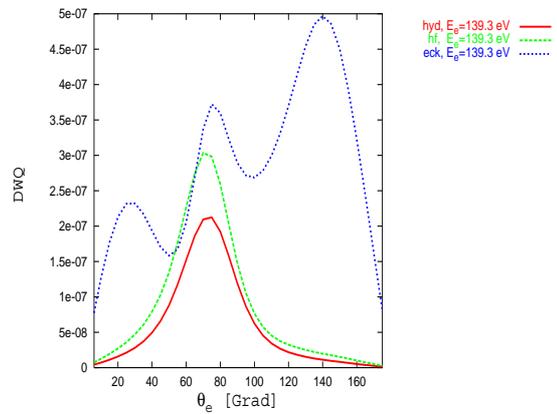


Abbildung 4.70: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

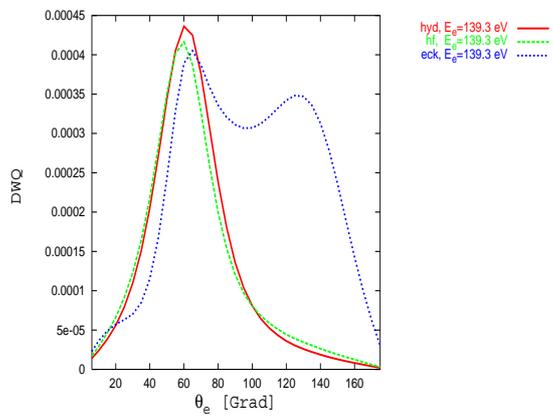
$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.65 - 0.95] \text{ mrad}$



$E_p = 0.3 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$



$E_p = 1 \text{ MeV}; \theta_p = [0.95 - 1.35] \text{ mrad}$

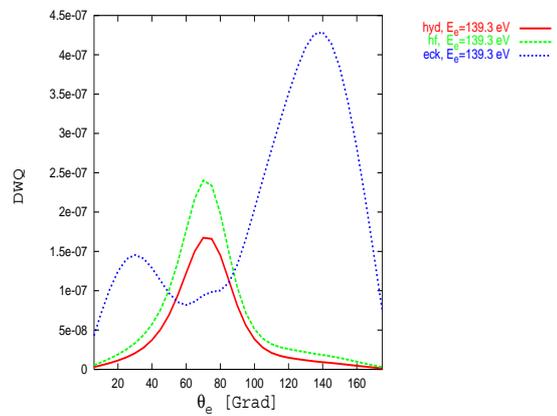


Abbildung 4.71: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\left. \frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \right|_{\theta_p^<}^{\theta_p^>}$ in Einheiten von $\left[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H} \right]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

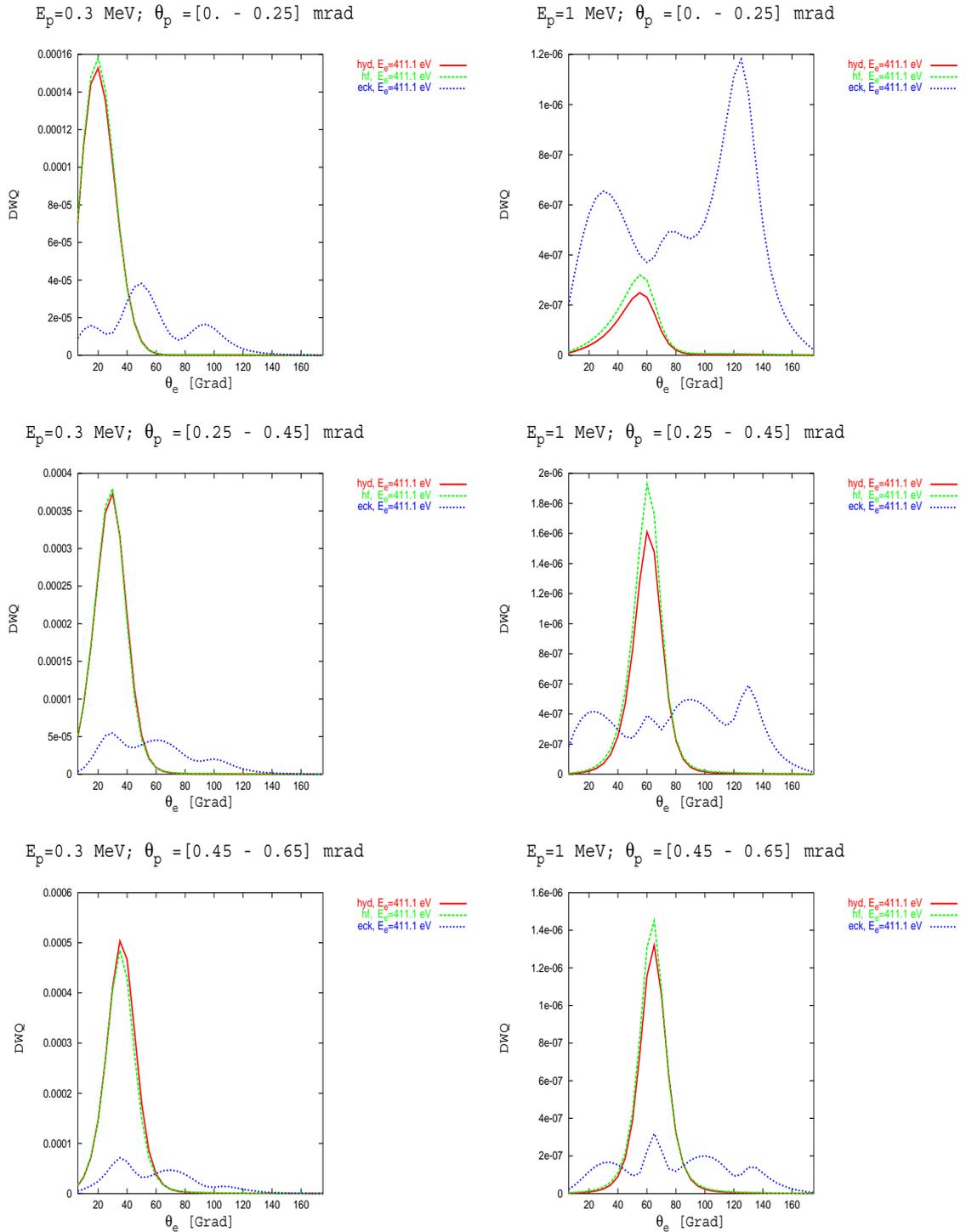


Abbildung 4.72: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

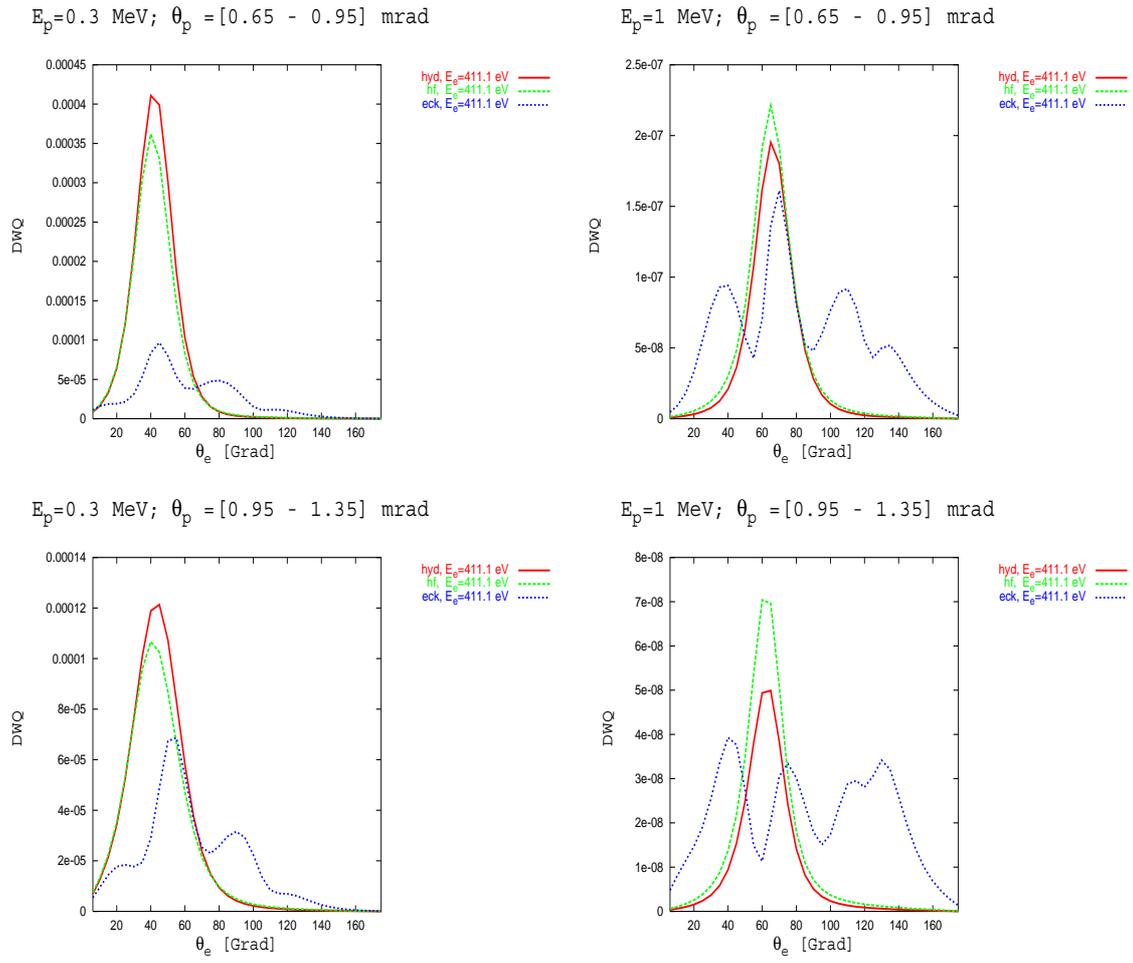


Abbildung 4.73: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ in verschiedenen Streuwinkelintervallen. Wasserstoffähnlicher, HF- und Eckart-Ansatz.

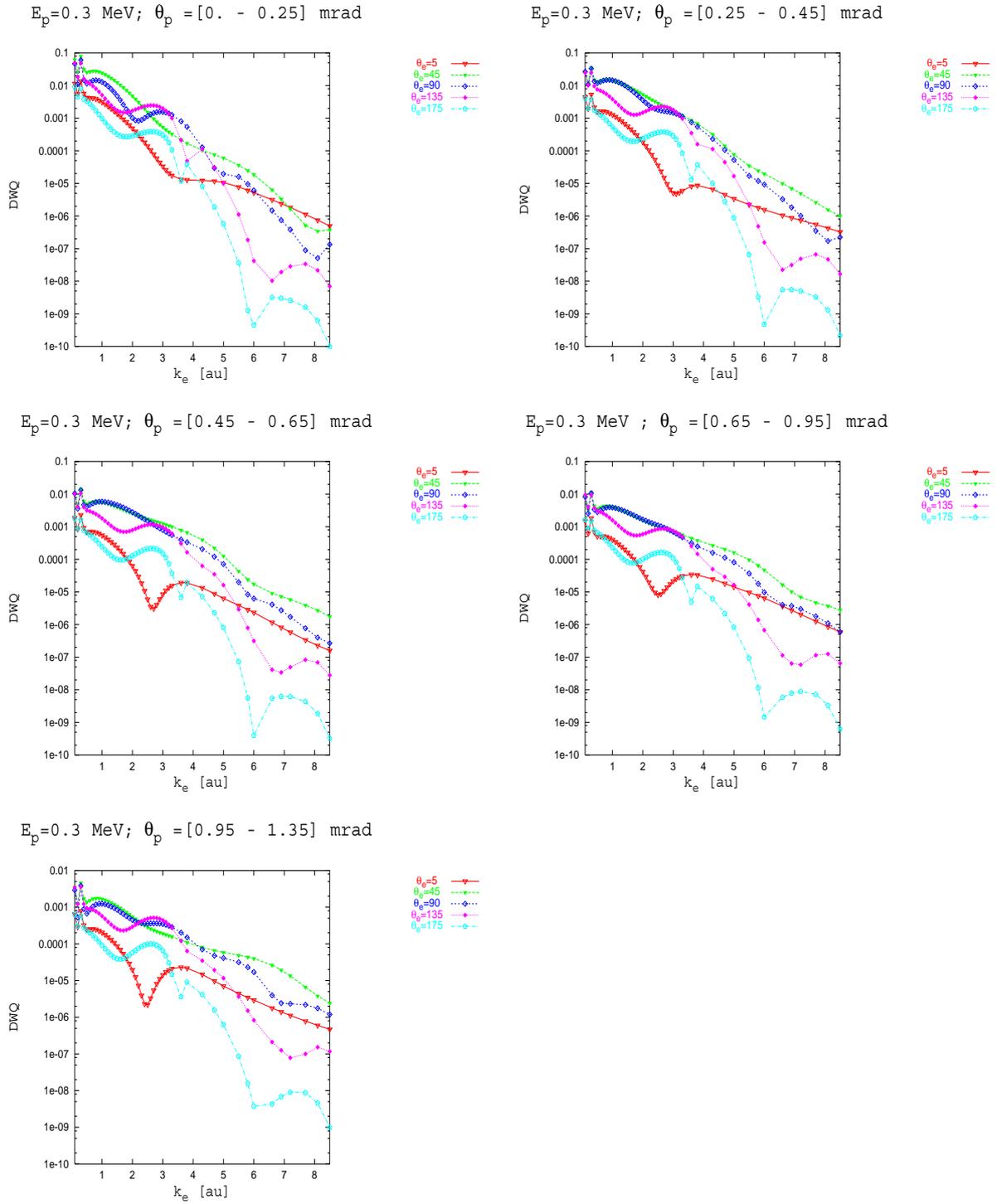


Abbildung 4.74: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^> \theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, E_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E^e}$. Eckart-Ansatz.

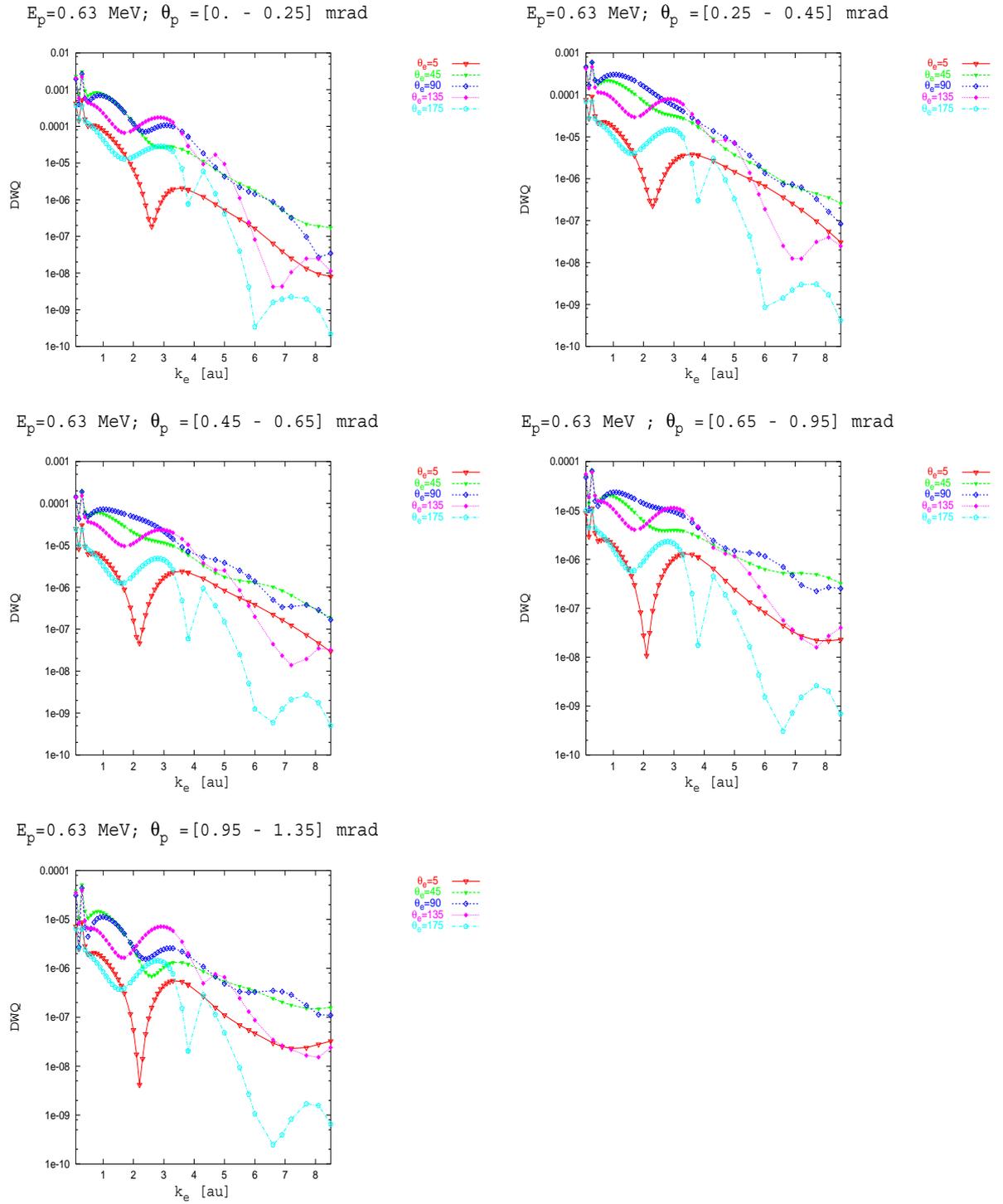


Abbildung 4.75: Differentielle Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial \sigma}{\partial E^e \partial \theta^e} \Big|_{\theta_p^>}^{\theta_p^<}$ in Einheiten von $[10^{-2} \frac{a_0^2}{\tilde{g}(E, \vec{E}_z) \text{ grad } E_H}]$ als Funktion des elektronischen Impulses $k^e = \sqrt{2 E_e}$. Eckart-Ansatz.

4.6.3 Totale Wirkungsquerschnitte

Thema dieses Abschnitts ist ein Vergleich der im Rahmen dieser Arbeit mit den verschiedenen Target-Ansätzen gewonnenen totalen Wirkungsquerschnitte sowohl mit dem Experiment, als auch, da für diese Observable Rechnungen anderer Autoren existieren, mit den Ergebnissen von Gayet und Salin [67] sowie Dunseath und Crothers²⁶ [3].

Die totalen Wirkungsquerschnitte für die Transferionisation wurden durch Integration über die differentiellen Wirkungsquerschnitte $\frac{\partial\sigma}{\partial E^e \partial\theta^e \partial\theta_p}$ erhalten und ebenfalls auf den für eine Stoßenergie von 0.63 MeV experimentell erhaltenen Wert normiert. Sie werden in Abbildung (4.76) zusammen mit dem experimentellen Datenmaterial und weiteren theoretischen Prognosen anderer Autoren dargestellt. In der Legende kennzeichnet IEM-Pluv die von Crothers und Dunseath mit dem IEM-Ansatz erhaltenen Querschnitte – das Target wurde in diesem Modell durch eine Wellenfunktion von Pluvinage beschrieben – und CDW-Born, CDW-Medoc etikettieren die im Rahmen des IPM-Ansatzes von Gayet und Salin gewonnenen Ergebnisse.

Aufgrund der Normierung der im Rahmen dieser Arbeit berechneten Wirkungsquerschnitte kann der Vergleich mit dem Experiment und den Rechnungen anderer Autoren lediglich die Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte von der Stoßenergie berücksichtigen. Da sich das Steigungsverhalten zwischen 0.3 MeV und 0.63 MeV stark ändert, wurde zusätzlich der totale Wirkungsquerschnitt für 0.4 MeV berechnet.

Während die Stoßenergieabhängigkeit im Bereich kleiner Stoßenergien bis etwa 0.4 MeV in qualitativer Hinsicht relativ gut durch IEM-Pluv wiedergegeben wird, prognostizieren die im Rahmen dieser Arbeit verfolgten Ansätze unabhängig von der verwendeten Targetbeschreibung in diesem Bereich ein eher zu flaches Absinken der totalen Wirkungsquerschnitte mit der Energie des Projektils. Ab 0.4 MeV fällt der experimentelle Wirkungsquerschnitt wesentlich schwächer ab, als von theoretischer Seite insgesamt prognostiziert wird. Es kommt sogar zu einer Unterschätzung der experimentellen Querschnitte. Das ist insofern nicht verwunderlich, als dass in keinem der Daten liefernden Ansätze bestimmte Prozesse, die bei höheren Energien eine merkliche Rolle spielen können, enthalten sind. Zu nen-

²⁶Die Details der Rechnungen findet man in den Abschnitten 1.4.3 und 1.4.4.

nen sind hier Prozesse höherer Ordnung, wie zum Beispiel der EET-Prozess, und Prozesskombinationen in denen Shake-Prozesse Bestandteil sind. Für den sehr steilen Abfall bis zu einer Stoßenergie von etwa 0.7 MeV ist das allerdings keine Erklärung, da den Abbildungen (4.3,4.4,4.5) zu entnehmen ist, dass der Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt durch den EET-Prozess bei Stoßenergien bis zu etwa 0.7 MeV nicht massgeblich ist, [62]. Zudem sollten den Ausführungen in Abschnitt 4.2 zufolge in diesem Energiebereich weder die Shake-Prozesse noch Strahlungsprozesse in wesentlicher Anzahl auftreten. Daher liegt es nahe, dass in diesem Energiebereich diejenigen unabhängige Prozesse, die in den Rechnungen dieser Arbeit und der anderen Autoren erfasst sind, von tragender Bedeutung sind. Damit muss man den Schluss ziehen, dass die Stoßenergieabhängigkeit durch die hier betrachtete Auswahl theoretischer Ansätze nicht richtig wiedergegeben wird.

Dieses Verhalten beobachtet man nicht nur bei den im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Wirkungsquerschnitten. Aus Abbildung (4.76) geht hervor, dass die theoretischen Prognosen IEM-Pluv, CDW-Born und CDW-Medoc die experimentell bestimmten totalen Querschnitte bei kleinen Stoßenergien stark überschätzen und bei hohen Stoßenergien, infolge eines zu stark ausfallenden Abfallverhaltens, zum größten Teil unterschätzen. Für die ausgeprägte Überschätzung des experimentellen Wertes im Bereich kleiner Stoßenergien ist nach Crothers ([53], [3]) die CDW-Näherung verantwortlich. Grundlegend sei hier der Umstand, dass die Wellenfunktionen des CDW-Matrixelementes (1.92, 1.90) aufgrund des enthaltenen Kontinuumanteils nicht richtig normiert seien. Das Ausmaß der Abweichung fällt bei IEM-Pluv am stärksten aus, obwohl abgesehen von der absoluten Höhe der Querschnitte die Stoßenergieabhängigkeit bis zu 0.4 MeV richtig wiedergegeben wird, während CDW-Born und CDW-Medoc vergleichbare Ergebnisse liefern. Als Grund für die Höhe der IEM-Pluv-Daten kommt wohl der zweifache Einsatz des CDW-Verfahrens im Rahmen dieser Rechnung – sowohl für den Einfang, als auch für die Ionisation – und der infolgedessen zweifach vorhandene CDW-Normierungseffekt in Betracht. Da sich die Überhöhung der Werte am stärksten im Bereich niedriger Stoßenergien auswirkt, hat man infolgedessen ein zu steiles Abfallverhalten.

Natürlich stellt sich hier ebenfalls die Frage, inwieweit ein störungstheoretischer Zugang bei diesen Stoßenergien angemessen ist, da die Anwendbarkeit eines stö-

rungstheoretischen Zugangs für niedrigere Energien am ehesten in Frage steht. Einen Anhaltspunkt diesbezüglich liefert der Vergleich zwischen CDW-Born und CDW-Medoc. Beide Rechnungen unterscheiden sich in der Behandlung der Ionisation: im Rahmen der CDW-Medoc wird die Ionisationsamplitude nicht störungstheoretisch berechnet. Die Differenz zwischen CDW-Medoc und CDW-Born gibt also in gewisser Weise wieder, inwiefern ein störungstheoretischer Ansatz für die betreffende Stoßenergie gerechtfertigt ist. Dass die Abweichungen vom experimentellen Wert mit CDW-Medoc kleiner werden, wurde daher von Gayet und Salin als Anzeichen dafür gewertet, dass die Diskrepanzen im Bereich kleiner Energien aus der Anwendung einer perturbativen Methode resultieren können. Allerdings muss man hier in Betracht ziehen, dass Gayet und Salin unabhängig von der Emissionsenergie lediglich vier Partialwellen in der CDW-Born-Rechnung berücksichtigt²⁷ haben. Die Differenz zwischen CDW-Medoc und CDW-Born kann daher aus einer Konvergenzproblematik resultieren. Dafür spricht auch die Auswertung der streuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitte (Abschnitt 4.4.1): sie lieferte Hinweise dafür, dass die Hauptbeiträge zur Transferionisation durch sehr schnell ablaufende Prozesse zustande kommen, so dass ein störungstheoretischer Zugang daher als angemessen erscheint.

Natürlich ist zu fragen, welche Rolle der nicht berücksichtigte Gewichtungsfaktor bei der beobachteten Stoßenergieabhängigkeit spielen kann. Der zu flache Abfall des Wirkungsquerschnitts bis zu 0.4 MeV, den die in dieser Arbeit berechneten Wirkungsquerschnitte aufweisen, kann eine Konsequenz der Abhängigkeit des Gewichtungsfaktors von der Energie des Projektils sein. Zu einem solchen Resultat führt die folgende Überlegung: der Energienenner des Gewichtungsfaktors besteht im wesentlichen aus der mittleren kinetischen Energie der Elektronen. Man kann annehmen, dass die mittlere kinetische Energie der Elektronen je kleiner die Stoßenergie ist, um so niedriger liegt. Daher steht zu erwarten, dass der Gewichtungsfaktor bei der niedrigsten Energie den größten Wert annehmen sollte, während die Stoßenergieabhängigkeit des Gewichtungsfaktors mit wachsender Energie zu einem relativ zu den Ergebnissen der niedrigeren Energien sinkenden Wirkungsquerschnitt führen sollte. Der Effekt der Nichtberücksichtigung des Gewichtungsfaktor sollte sich also in einer relativen Erniedrigung der Wirkungsquerschnitte bei niedrigeren Energien und in einer relativen Erhöhung der Querschnitte bei

²⁷Siehe dazu Abschnitt 1.4.3.

höheren Energien niederschlagen. Damit hat man einen verflachenden Effekt auf der ganzen energetischen Bandbreite.

Tatsächlich ist zu beobachten, dass auch die Resultate von Gayet und Salin (CDW-Born) gemessen dazu einen steileren Abfall des Wirkungsquerschnitts mit zunehmender Stoßenergie aufweisen. Ein Vergleich mit der IEM-Pluv-Rechnung kann leider in Ermangelung von Daten höherer Stoßenergien und der geringen Datendichte, was die anderen Rechnungen anbetrifft, nicht gezogen werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird ebenfalls die CDW-Näherung zur Berechnung der Einfangsamplitude verwendet. Dies deutet daraufhin, dass das flache Abfallverhalten zum Teil durch die vernachlässigte Stoßenergieabhängigkeit des Gewichtsfaktors verursacht sein kann. Trotzdem hat man unabhängig davon einen zusätzlichen verflachenden Effekt, der durch die Targetbeschreibung ins Spiel gebracht wird. Abbildung (4.76) zeigt allerdings, dass das Ausmaß der Abweichung zum Abfallverhalten der experimentellen Daten abhängig von der theoretischen Beschreibung ist: der Vergleich der Rechnungen dieser Arbeit zeigt, dass sich mit steigender Komplexität der verwendeten Targetbeschreibung der Abfall der Kurve verflacht. Somit kann die Feststellung getroffen werden, dass die Targetbeschreibung auch hier einen wichtigen Einfluss auf die Stoßenergieabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte besitzt: die Hinzunahme von Radialkorrelation bewirkt eine in qualitativer Hinsicht verbesserte Prognose der totalen Wirkungsquerschnitte.

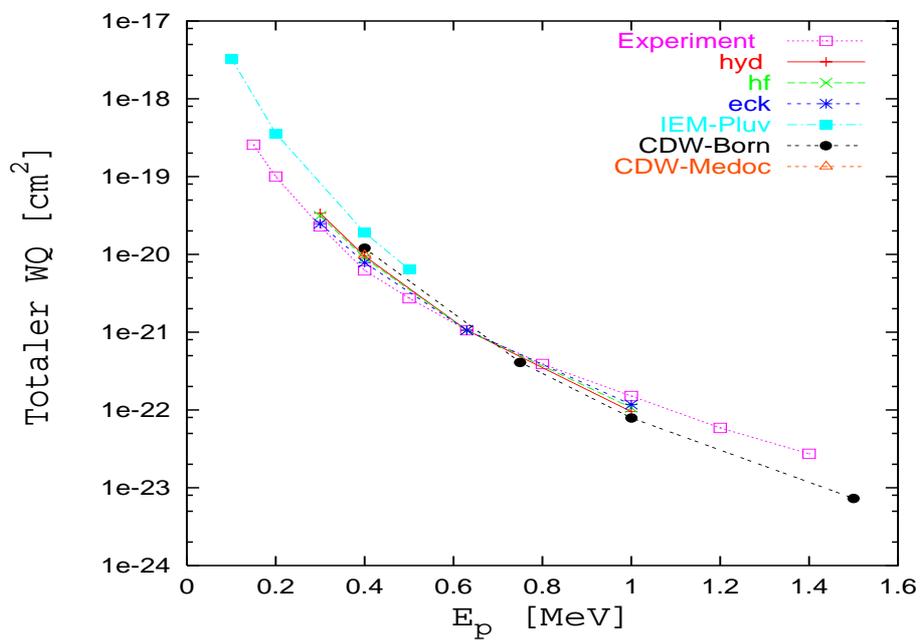


Abbildung 4.76: Totale Wirkungsquerschnitte als Funktion der Stoßenergie, hyd: wasserstoffähnliche WF (eigene Rechnung); hf: Hartree-Fock-WF (eigene Rechnung); eck: Eckart-WF (eigene Rechnung); IEM-Pluv: Dunseath/Crothers; CDW-Born, CDW-Medoc: Gayet/Salin.

4.6.4 Bewertung der Ergebnisse

Die Implementation des Eckart-Ansatzes in das Modell hat zu einigen Änderungen im Hinblick auf den Vergleich mit dem Experiment geführt. Die nachstehende Liste fasst die wesentlichen Punkte nochmals zusammen:

1. Die Berechnung der einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel und der Stoßenergie hat mit dem Eckart-Ansatz hinsichtlich der Lage der Maxima und was den Bereich kleiner Streuwinkel anbetrifft, zu einer verbesserten Beschreibung geführt.
2. Das prognostizierte Emissionsverhalten wird durch Implementation eines Eckart-Ansatzes in das Modell wesentlich verändert. Insgesamt erscheint das Emissionsprofil sehr viel asymmetrischer und reicher an Details verglichen mit dem wasserstoffähnlichen Fall und mit Hartree-Fock.
3. Auch der Eckart-Ansatz liefert die im Experiment beobachtete Rückwärtsmission in einer gegenüber der Hartree-Fock-Prognose betonten Form. Sie weist allerdings etwas andere Züge auf: während bei Hartree-Fock eher langsame Elektronen von der Rückwärtsmission betroffen sind, werden nach Eckart vorwiegend schnelle Elektronen in Rückwärtsrichtung emittiert.
4. Das mit Hilfe des Eckart-Ansatzes gewonnene Emissionsspektrum zeigt mehr als ein Emissionsmaximum, im Gegensatz zum Experiment jedoch auch mehr als zwei. Diese treten im gesamten Energiebereich auf. Experimentell wird das Auftreten zweier Maxima im energiedifferentiellen Spektrum nur bei Emissionswinkeln größer als 90° beobachtet. Wenn auch die Anzahl der Maxima im Eckart-Fall nicht der Beobachtung entspricht, so treten dennoch übereinstimmend mit dem Experiment mit einer Eckart-Targetbeschreibung im Rückwärtsstrebereich mehr Maxima auf als im Bereich der Vorwärtstreuung.

Im Experiment wurde das Auftreten hart gestreuter Elektronen beobachtet. Was die Maxima hart gestreuter Elektronen im Eckart-Ansatz anbetrifft, so kommen diese schnellen Elektronen überwiegend aus der Rückwärtsrichtung, hier mit deutlich größeren Longitudinalimpulsen als experimentell beobachtet. Analog zu den Ergebnissen der wasserstoffähnlichen als auch der

Hartree-Fock-Rechnung, steigt der relative Anteil hochenergetischer Elektronen für die Emissionswinkel 45° und 90° an.

5. Experimentell wurde beobachtet, dass der totale Wirkungsquerschnitt bei mittleren Energien, wo unabhängige Prozesse eine Rolle spielen, schwächer abfällt, als von theoretischer Seite vorausgesagt wird. Vergleicht man die drei Varianten der Targetbeschreibung miteinander, so beobachtet man, angefangen von einer wasserstoffähnlichen Wellenfunktion über Hartree-Fock hin zu einer Eckart-Targetbeschreibung, einen zunehmend schwächeren Abfall des totalen Wirkungsquerschnitts mit steigender Stoßenergie. Je komplexer die zugrundeliegende Targetbeschreibung ist, desto stärker verflacht sich also der Kurvenabfall. Die insbesondere bei höheren Stoßenergien hieraus resultierende Änderung der Stoßenergieabhängigkeit der totalen Wirkungsquerschnitte mindert tendenziell die Differenzen zwischen Experiment und Theorie.

Zusammenfassend läßt sich der Schluss ziehen, dass die Hinzunahme von Radialkorrelation Strukturen im Emissionsverhalten erzeugt, die bei Hartree-Fock- und wasserstoffähnlichem Ansatz nicht entstehen. Klar ist erkennbar, dass die Beschreibung der elektronischen Emission über die Wahl der Targetwellenfunktion weitreichend beeinflusst werden kann. Die Berücksichtigung von Radialkorrelation erlaubt es, einige Aspekte der experimentell beobachteten Emission im Ansatz zu beschreiben, die durch Implementation von Targetansätzen, die frei von interelektronischer Korrelation sind, nicht erfasst werden. Hierzu gehört das Auftreten der Emissionsmaxima überwiegend rückwärts gestreuter Elektronen.

Allerdings werden nicht alle Eigenschaften auch im Vergleich zu Hartree-Fock richtig beschrieben: die Emission langsamer Elektronen zum Beispiel ist bei Eckart vorwärts gerichtet, das Auftreten mehrerer Maxima im energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitt.

Teil V

Zusammenfassung und Schlußbetrachtung

Motiviert durch experimentelle Untersuchungen wurde in der vorliegenden Arbeit das Ziel verfolgt, das experimentell beobachtete markante Emissionsverhalten einer Transferionisation am Proton-Helium-Stoßsystem zu verstehen.

Nach einer ausführlichen Einführung stand an erster Stelle die Analyse der Emissionseigenschaften aus der Sicht der Erhaltungssätze, sowohl unter dem Gesichtspunkt einer Identifizierung der zur Transferionisation beitragenden Prozesse im Experiment als auch im Hinblick auf die Frage, inwieweit das beobachtete Emissionsverhalten durch die Erhaltungssätze bestimmt ist. Dazu wurden zunächst die zu erwartenden Impulsprofile in allgemeiner Form aus den Erhaltungssätzen abgeleitet und anschließend für die beitragenden Mechanismen spezifiziert. Dies umfasste zunächst eine Zusammenstellung der Kanäle, die zu einer Transferionisation an diesem Stoßsystem beitragen: so dominieren im unteren und mittleren Energiebereich Kombinationen aus einem kinematischen Einfang (KC) und verschiedenen Ionisationsmechanismen. Hierzu gehören die Erzeugung von Dreikörper-Stoß-Elektronen (TBEE) und der Einfang ins Projektilkontinuum (ECC). Im höheren Energiebereich hat man vorwiegend Kombinationen aus einem kinematischen Einfang KC und dem Elektron-Kern-Thomas-Prozess (NET) und den folgenden Ionisationsmechanismen: Erzeugung langsamer Elektronen (SE), Ionisation durch einen binären Stoß (BEE) und Shake-Off (SO). Darüberhinaus spielen Beiträge durch den ee-Thomas-Prozess (EET) eine Rolle.

Den dynamischen Eigenschaften dieser Mechanismen konnte entnommen werden, dass im Fall unabhängig ablaufender Übergänge die Emissionseigenschaften durch den Einfang nicht beeinflusst werden. Der Einfang äußert sich nur in Form eines zusätzlichen Impulsübertrags in longitudinaler Richtung auf das Targetion. Aus diesem Grund sind zum Verständnis der Emissionseigenschaften in erster Linie die Ionisationsmechanismen relevant.

Was die Emission schneller Elektronen anbetrifft, lassen sowohl die Freisetzung von Elektronen infolge eines binären Stoßes mit dem Projektil (BE) als auch der Einfang derselben ins Projektilkontinuum (ECC) Elektronen mit höheren kinetischen Energien erwarten. Da der Hauptanteil der Elektronen experimentell aber nicht in Richtung des auslaufenden Projektils emittiert wird, kommt der ECC als möglicher Mechanismus für eine Ionisation nicht in Betracht. Auch der BE erklärt nicht die rückwärts zum Projektil gerichtete Emission.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass keiner der jeweiligen Mecha-

nismen die experimentell beobachteten Emissionscharakteristika erwarten lässt. Darüberhinaus konnte gezeigt werden, dass die im Experiment beobachtete Bevorzugung der Emission aller Stoßfragmente in die durch Einschuss- und Streurichtung des Projektils definierte Ebene nicht durch die Drehimpulserhaltung begründet ist.

Insgesamt betrachtet legt dies den Schluss nahe, dass andere Faktoren eine Rolle spielen müssen. Ein solcher Faktor könnte die interelektronische Korrelation sein. Vor dem Hintergrund dieses Sachverhalts wurde daher versucht, das experimentell beobachtete Verhalten im Rahmen einer angemessenen theoretischen Beschreibung zu erfassen. Dazu wurde eine Modellstruktur entwickelt, die beide elektronische Übergänge unabhängig voneinander beschreibt. In dieser Hinsicht entspricht das entwickelte Modell den Annahmen des Modells der unabhängigen Ereignisse.

Das Modellgefüge baut auf mehreren grundlegenden Annahmen auf. Dazu gehören:

- Die Bandbreite der untersuchten Stoßenergien – 0.3 MeV bis 1.4 MeV – beschränkt sich auf den Gültigkeitsbereich nichtrelativistischer Näherungen. Aufgrund des geringen Gewichts sowohl des Protons als auch des Targetkerns kann ebenfalls davon ausgegangen werden, dass relativistische Korrekturen der Hamilton-Operatoren des Target-, sowie des Projektilsystems in sehr guter Näherung vernachlässigt werden können und somit keine spinabhängigen Wechselwirkungen auftreten. Da darüberhinaus keine externen zeitabhängigen Kräfte auftreten, werden die T-Matrixelemente auf der Basis der stationären Viel-Teilchen-Schrödinger-Gleichung berechnet, wobei lediglich der Ortsraumanteil zu berücksichtigen ist.
- Die kinetische Energie der Relativbewegung der Kerne ist bei den betrachteten Stoßenergien groß gegenüber der Änderung der kinetischen Energie der Elektronen. Aufgründessen entkoppeln elektronische und nukleonische Bewegung, sodass die beim betrachteten Stoßsystem auftretenden Viel-Teilchen-Effekte nur das elektronische System betreffen. Dies begründet auch die Anwendung der Stoßparameternäherung. Somit können aus den T-Matrixelementen in semiklassischer Näherung stoßparameterabhängige Übergangsamplituden erhalten werden und umgekehrt.

- Eine exakte Beschreibung des Prozesses ist infolge ihrer Viel-Teilchen-Problematik nicht möglich. Daher müssen adäquate Näherungen entwickelt werden. Die experimentellen Daten deuten daraufhin, dass das beobachtete Emissionsverhalten durch Prozesse zustande kommt, die näherungsweise voneinander unbeeinflusst ablaufen. Dieser Sachverhalt bildet die Grundlage für die unabhängige Behandlung der beiden Teilübergänge im Rahmen der Theorie. Viel-Teilchen-Effekte werden bei diesem Zugang in Form von Korrelationseffekten im ungestörten Heliumatom berücksichtigt. Um eine Entkopplung der beiden Übergänge zu erreichen, wurde den Zwischenzuständen im Rahmen der Closure-Näherung eine mittlere Energie zugewiesen. Dies hat zur Folge, dass man nun mit dem in Gleichung (2.22) angegebenen Faktor gewichtete T-Matrixelemente erhält. Dieser Faktor hängt von der Gesamtenergie und den mittleren Energien der Zwischenzustände ab.

Aus dem so erhaltenen T-Matrixelement wurden die für ein Streuexperiment relevanten Observablen berechnet. Neben fünffach-differentiellen Wirkungsquerschnitten als Funktion von elektronischem Impuls und dem Streuwinkel des Projektils waren dies in diesem Fall projektilstreuwinkeldifferentielle und totale Wirkungsquerschnitte, die durch Integration der fünffach-differentiellen Querschnitte gewonnen wurden (Gl. 2.89, Gl. 2.90, Gl. 2.91).

Ein Schwerpunkt der Untersuchung wurde auf die Rolle der Targetstruktur im Zusammenhang mit den sich hieraus ergebenden Emissionseigenschaften gelegt. Hier interessierten sowohl der Einfluss der Struktur der zur Targetbeschreibung verwendeten Wellenfunktion auf das resultierende Emissionsverhalten, als auch die Rolle der interelektronischen Korrelation. Dazu wurden zwei Ansätze, eine wasserstoffähnliche und eine Hartree-Fock-Beschreibung, implementiert. Beide bilden die Targetstruktur auf der Basis des Modells unabhängiger Teilchen ab. Der Einbau einer Eckart-Wellenfunktion in das Modell lieferte die Basis für die Untersuchung, welche Bedeutung interelektronischer Korrelationseffekte für die Emission haben. Die mit den verschiedenen Varianten der Targetbeschreibung gewonnenen Observablen konnten dann untereinander verglichen und dem Experiment gegenübergestellt werden. Bedingt durch die Gewichtung der Wirkungsquerschnitte konnten keine Absolutwerte miteinander verglichen werden. Daher wurden die Wirkungsquerschnitte auf das Experiment normiert. Dies betraf die

streuwinkeldifferentiellen und die totalen Querschnitte, da sie direkt mit dem Experiment verglichen wurden.

Inwieweit die Struktur der Wellenfunktion bei der Targetbeschreibung für das resultierende Emissionsverhalten und die streuwinkeldifferentiellen Querschnitte von Bedeutung sind, zeigte der systematische Vergleich der Ergebnisse, die durch Implementation der Targetansätze auf IPM-Niveau gewonnen wurden. Die beste Näherung im Rahmen des Modells der unabhängigen Teilchen, erhält man durch Implementation eines Hartree-Fock-Ansatzes in die Targetbeschreibung. Bereits einige Züge des experimentell beobachteten Emissionsverhaltens werden hiermit abgebildet, welche die wasserstoffähnliche Variante in dieser Form nicht aufweist. So geben die mit einer Hartree-Fock-Targetbeschreibung erzielten streuwinkeldifferentiellen Querschnitte die Lage der Maxima, und den Bereich kleiner Streuwinkel sehr viel besser für die höheren Stoßenergien wieder, als dies für eine wasserstoffähnliche Beschreibung der Fall ist.

Auch im Fall der experimentell beobachteten in Rückwärtsrichtung überwiegenen Emission, die sich mit zunehmender Stoßenergie verstärkt, drückt sich der korrigierende Einfluss der verbesserten Targetbeschreibung aus. Im Experiment sind sowohl Elektronen mit niedrigen, als auch diejenigen mit hohen Emissionsenergien betroffen. Dies ist für Letztere insbesondere bei Stoßenergien größer als 0.3 MeV der Fall. Während man im wasserstoffähnlichen Fall insgesamt eine Dominanz der Emission in Vorwärtsrichtung, also in Richtung positiver Longitudinalimpuls-komponenten findet, überwiegt bei Hartree-Fock die Emission langsamer Elektronen in Rückwärtsrichtung. Die Emission schnellerer Elektronen bleibt allerdings auch in der Hartree-Fock-Beschreibung unabhängig von der Stoßenergie vorwärts ausgerichtet.

Ein weiterer Zug der experimentell ermittelten Verteilungen ist das Auftreten zweier Emissionsmaxima. Sie treten im energiedifferentiellen Wirkungsquerschnitt ab $\theta_p > 0.65$ mrad bei bestimmten Emissionswinkeln auf und befinden sich bei Stoßenergien größer als 0.3 MeV lediglich im Bereich der Rückwärtstreuung. Übereinstimmend sagen beide Ansätze ein zweites lokales Maximum hochenergetischer Elektronen voraus, die jedoch in beiden Fällen im Gegensatz zur Beobachtung mit positiven Longitudinalimpulsen emittiert werden.

Es konnten Indizien dafür gefunden werden, dass für die durch Implementation einer Hartree-Fock-Targetbeschreibung erzielte Korrektur der Impulsverteilungen

insbesondere kurzreichweitige Nichtcoulombanteile des Potentials ausschlaggebend sind. Diese Potentialanteile führen zu einer Phasenverschiebung der asymptotischen Wellenfunktion des emittierten Elektrons gegenüber der freien Lösung und haben somit eine stärkere Asymmetrie der Emission im niederenergetischen Bereich zur Folge.

Insgesamt betrachtet kann man feststellen, dass sich durch den Einbau einer qualitativ besseren Wellenfunktion, die Qualität der Prognosen zwar verbessert hat, aber dennoch auf Hartree-Fock-Niveau unbefriedigend bleibt: charakteristische Anteile des Emissionsverhaltens, wie die ausgeprägte Rückwärtsemission und deren Feinheiten, werden auch mit Hartree-Fock nicht richtig wiedergegeben.

Die Ergebnisse belegen, dass die Art der Targetbeschreibung die Winkelabhängigkeit der Emission stark beeinflusst. Da beide Varianten des IPM per Definition keine interelektronische Korrelation enthalten, wurden die Ergebnisse der IPM-Ansätze anschliessend mit Wirkungsquerschnitten verglichen, die anhand einer Eckart-Wellenfunktion erhalten werden. Der Eckart-Ansatz schliesst radiale Anteile der interelektronischen Korrelation mit ein. Die Auswertung dieser Gegenüberstellung deutet daraufhin, dass die Berücksichtigung der Wechselbeziehung zwischen den Elektronen sehr wichtig ist, um das Stoßgeschehen korrekt zu beschreiben.

So hat der mit Berücksichtigung von radialen Anteilen elektronischer Korrelation verknüpfte räumlich diffusere Radialanteil der Wellenfunktion des Eckart-Ansatzes zu wesentlichen Veränderungen im prognostizierten Emissionsverhalten geführt. Im Vergleich mit dem Experiment hat er sich in mancher Hinsicht als fruchtbar erwiesen. Zu nennen ist hier die gegenüber der Hartree-Fock-Rechnung bevorzugte Emission von Elektronen mit negativen Longitudinalimpulsen, wovon im Eckart-Fall allerdings insbesondere die schnellen Elektronen betroffen sind. Übereinstimmend mit dem Experiment liegt die Anzahl der Maxima im energiedifferentiellen mit Eckart-Spektrum im Bereich der Vorwärtsstreuung niedriger als im Rückwärtsstrebereich.

Der positive Effekt der Eckart-Beschreibung wird auch beim Vergleich der normierten einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit vom Projektilstreuwinkel und der Stoßenergie sichtbar. So wird die Streuwinkelabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts, was die Lage der Maxima und den Bereich kleiner Streuwinkel anbetrifft, durch die mit einem Eckart-Ansatz berechneten

Querschnitte besser beschrieben.

In diese Richtung weist auch der Vergleich der normierten totalen Querschnitte mit dem Experiment, in den ebenfalls die Ergebnisse der Rechnungen anderer Autoren mit eingeflossen sind. Aus den experimentellen Messungen geht hervor, dass der totale Wirkungsquerschnitt mit der Energie des Projektils schwächer abfällt, als dies die theoretischen Rechnungen prognostizieren. Anhand der Gegenüberstellung des funktionalen Verlaufs der Wirkungsquerschnitte konnte herausgestellt werden, dass über die Wahl der Targetbeschreibung systematisch eine Verflachung des Wirkungsquerschnittsabfallverhaltens mit ins Spiel gebracht wird. Dieser verflachende Effekt zeigt einen systematischen Gang: je komplexer die zugrundeliegende Targetbeschreibung ist, desto weniger stark fällt der Wirkungsquerschnitt mit der Energie ab, so dass die experimentell beobachtete Stoßenergieabhängigkeit im Trend besser wiedergegeben wird.

Vor diesem Hintergrund liegt der Schluß nahe, dass das Konzept der Korrelation eminent wichtig ist, um die experimentellen Messungen zu verstehen. Gleichsam hat man mit den von Mergel et al. an diesem Stoßsystem durchgeführten Messungen ein Experiment gefunden, anhand dessen die interelektronische Korrelation, die man theoretisch über den Begriff der Korrelationsenergie als Differenz zwischen exaktem Energieeigenwert des nicht-relativistischen N-Teilchen-Hamilton-Operators und der Hartree-Fock-Energie fasst, manifest wird. Auf die Wichtigkeit von Korrelation bei Vielfach-Übergängen deuten auch Untersuchungen zur Doppelionisation hin. So hat sich erwiesen, dass Korrelationseffekte bei Doppelionisationsprozessen eine größere Rolle spielen, als in Prozessen in denen lediglich eine Elektron ionisiert wird [103].

Trotzdem werden auch mittels einer Eckart-Wellenfunktion nicht alle Züge des Emissionsverhaltens richtig wiedergegeben. Während gemäß der Eckart-Prognose vor allem schnelle Elektronen rückwärts emittiert werden, findet man langsame Elektronen eher in Winkeln, die kleiner als 90° sind. Im Gegensatz zum Experiment prognostiziert die Eckart-Rechnung im gesamten Emissionswinkelbereich mehr als zwei Maxima im energiedifferentiellen Spektrum. Auch die Berechnung der projektilstreuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitte hat mit dem Eckart-Ansatz nicht generell zu einer befriedigenden Beschreibung geführt, da die Streuwinkelabhängigkeit im Bereich größerer Projektilwinkel nicht ganz richtig wiedergegeben wird.

Der Eckart-Ansatz bildet lediglich radiale Korrelationsanteile der Targetstruktur ab. Da ein Viel-Teilchen-Problem auch des einfachsten Typs sehr viele Freiheitsgrade besitzt, ist es vorstellbar, wenn die Bewegung der Komponenten gegenseitig voneinander abhängt, dass ein radialsymmetrischer Ansatz zur Beschreibung des Viel-Teilchen-Systems Helium nicht in der Lage ist, die experimentell zu beobachtende Emission von Elektronen in einer Vorzugsrichtung zutreffend zu beschreiben.

Daher liegt es nahe, neben den radialen Anteilen von Korrelation auch Winkelkorrelation zu berücksichtigen. Die logische Erweiterung des Modells in dieser Richtung ist die Implementation eines Konfigurationsmischungs-Ansatzes. Ein erster Schritt wäre hier der Einbau eines vereinfachten Ansatzes zur Darstellung des Heliumgrundzustandes, der in Ortsdarstellung von der Form (siehe 1.50)

$$\Psi^{00}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{(2l+1)^{\frac{1}{2}}} \varphi_{nlm}(\vec{x}_1) \varphi_{nl-m}(\vec{x}_2)$$

ist.

Das Problem des Konfigurationsmischungsverfahrens liegt vor allem in der Auswahl der verwendeten Konfigurationen. Eine mögliche Strategie bestünde darin, nur die beitragsstärksten Konfigurationen zu berücksichtigen. Allerdings muss dabei beachtet werden, dass die winkelabhängigen Anteile von Korrelation ausschliesslich von Konfigurationen kommen, die aus Orbitalen mit Drehimpulsquantenzahlen $l > 0$ aufgebaut sind. Eine in dieser Hinsicht zusammengestellte Auswahl könnte im einfachsten Fall die Konfigurationen $1s^2$, $2s^2$ und $2p^2$ umfassen, denn neben der $1s^2$ -Konfiguration, die mit 99.2 % den Hauptbeitrag stellt, liefern die $2s^2$ - (0.38 %) und die $2p^2$ -Beimischung (0.38 %) wesentliche Beiträge zum Grundzustand. Die $2p^2$ -Konfiguration dominiert gegenüber allen Beimischungen mit winkelabhängiger Verteilung der Elektronen um den Kern. Sie stellt daher hinsichtlich winkelabhängiger Korrelationsanteile den wichtigsten Beitrag dar.

Allgemein weist der Befund dieser Arbeit auf die Bedeutung interelektronischer Korrelation selbst vor dem Hintergrund unabhängig ablaufender Teilübergänge hin. Es besteht daher berechnete Hoffnung, dass eine in dieser Hinsicht ausgestattete zukünftige Rechnung das charakteristische Emissionsverhalten in weiten Teilen erklären kann.

Teil VI

Anhang

Anhang A

Abkürzungen

Abb.	Abbildung
AO-CC	Atomic Orbital -Close Coupling
BE	Binary Encounter
BEE	Binary Encounter Electrons
CDW	Continuum Distorted Wave
CDW-Born	Continuum Distorted Wave -Born
CDWEIS	Continuum Distorted Wave Eikonal Initial State
CDW-Medoc	Continuum Distorted Wave-Multipol Expansion Defined on One Center
CI	Configuration Interaction
cKTI	correlated Kinematical Transfer Ionisation
COLTRIMS	Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy
CTMC	Classical Trajectory Monte Carlo
dCTMC	dynamical Screening Classical Trajectory Monte Carlo
DWBA	Distorted Wave Born Approximation
DWQ	Differentieller Wirkungsquerschnitt
ECC	Electron Capture to Continuum
EET	Electron Electron Thomas
Gl.	Gleichung
HF	Hartree-Fock
IEM	Independent Event Model
IEM-Pluv	Independent Event Model-Pluvinage
IPM	Independent Particle Model

KC	Kinematical Capture
MEDOC	Multipol Expansion Defined on One Center
MO-CC	Molecular Orbital -Close Coupling
NET	Nuclear Electron Thomas
OBKn	Oppenheimer Brinkmann Kramers n, n=1, 2
PWBA	Plane Wave Born Approximation
REC	Radiative Electron Capture
SCA	Semiclassical Approximation
SE	Soft Electrons
SO	Shake Off
STOs	Slatertype Orbitals
TBEE	Three Body Encounter Electrons

Anhang B

Die genäherten Zwischenzustände

In diesem Kapitel werden Normierung und Struktur der Zwischenzustände beschrieben. Sie werden durch Eigenzustände der Operatoren des Anfangs- und des Endkanals (1.70), (1.73) approximiert. Es gibt zwei verschiedene Zwischenzustandstypen, die hier auftreten können: die Zustände nach erfolgtem Einfang und die Zustände nach erfolgter Ionisation. Die Bedeutung der Koordinaten geht aus Abbildung (1.1 in Abschnitt 1.3.2) hervor.

Zustände nach erfolgtem Einfang

Der Zustand nach einem erfolgten Einfang wird durch einen Eigenzustand von \hat{H}_β (1.73) approximiert: das eingefangene Elektron befindet sich somit in einem gebundenen Zustand des Wasserstoffatoms ($n_2 l_2 m_2$), während das zweite Elektron in einem gebundenen Zustand des Helium-Ions verbleibt ($n_1 l_1 m_1$):

$$He^+(n_1 l_1 m_1) + H(n_2 l_2 m_2)$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{R}, \vec{s}_1, \vec{x}_2 | \beta_{zd} \rangle_S &= \langle \vec{R}, \vec{s}_1, \vec{x}_2 | \vec{K}_{zd}; (n_1 l_1 m_1)_{He^+}; (n_2 l_2 m_2)_H \rangle_S \\ &= \tilde{N}_{zd} e^{i \vec{K}_{zd} \vec{R}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi(n_2 l_2 m_2)(\vec{s}_1) \tilde{\varphi}(n_1 l_1 m_1)(\vec{x}_2) + \right. \\ &\quad \left. \Phi(n_2 l_2 m_2)(\vec{s}_2) \tilde{\varphi}(n_1 l_1 m_1)(\vec{x}_1) \right) \\ &= \tilde{N}_{zd} \Psi_{zd}(\vec{R}, \vec{s}_1, \vec{x}_2) = e^{i \vec{K}_{zd} \vec{R}} \beta_{zd}^{el}(\vec{s}_1, \vec{x}_2) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

mit $\vec{s}_2 = \vec{x}_2 - \vec{R}$, $\vec{x}_1 = \vec{s}_1 + \vec{R}$. Hierbei beschreibt $\beta_{zd}^{el}(\vec{s}_1, \vec{x}_2)$ den elektronischen und $e^{i\vec{K}_{zd}\vec{R}}$ den nukleonischen Anteil der Wellenfunktion, wobei \vec{K}_{zd} den Impuls der nukleonischen Bewegung bezeichnet. Der nukleonische Anteil der Wellenfunktion ist normiert gemäß¹

$$\langle \vec{K}_{zd} | \vec{K}'_{zd} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{K}_{zd} - \vec{K}'_{zd}) \quad . \quad (\text{B.2})$$

Orbitale

Die elektronischen Ein-Teilchen-Zustände sind die folgenden gebundenen Zustände:

- $\langle \vec{x} | (nlm)_{He^+} \rangle = \tilde{\varphi}(nlm)(\vec{r}) = R_{nl}^{2,1}(r) Y_{lm}(\Omega)$ ist ein gebundener wasserstoffähnlicher Zustand des He^+ -Ions.
- $\Phi(nlm)(\vec{r}) = R_{nl}^{1,1}(r) Y_{lm}(\Omega)$ ist ein gebundener Wasserstoffzustand (siehe Endzustand)

mit

- $\langle (nlm)_{He^+} | (n'l'm')_{He^+} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$
- $\langle (nlm)_H | (n'l'm')_H \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad .$

Die Hochindizes der Radialfunktion $R_{nl}^{Z,n_e}(r)$ stehen für die Kernladungszahl Z des betreffenden Ions oder Atoms und die Anzahl n_e der an diesen Kern gebundenen Elektronen.

Normierung der gesamten Wellenfunktion

Die elektronischen Zustände beziehen sich auf verschiedene atomare Zentren. Um die gesamte Wellenfunktion richtig normieren zu können, müssen daher die intraatomaren Koordinaten zunächst auf ein gemeinsames Zentrum bezogen werden. Mit der Wahl des Targetsystems als Bezugssystem lässt sich der Wasserstoffanteil der Wellenfunktion formulieren zu

$$\tilde{\Phi}(nlm)(\vec{x}) = R_{nl}^{1,1}(s(\vec{x}, \vec{R})) Y_{lm}(\hat{\mathbf{e}}_s(\vec{x}, \vec{R})) \quad . \quad (\text{B.3})$$

¹Siehe dazu auch Fußnote 16 in Abschnitt 1.3.1.

Einsetzen von (B.1) in das Normierungsintegral mit Berücksichtigung von (B.3) und (B.2) liefert

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \tilde{N}_{zd}^2 \int d\vec{R} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \Psi_{zd}^*(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \Psi_{zd}(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \\
&= \tilde{N}_{zd}^2 (1 + \mathfrak{N}_{zd}^2) \stackrel{!}{=} 1 \\
\Rightarrow \tilde{N}_{zd} &= \frac{1}{\sqrt{(1 + \mathfrak{N}_{zd}^2)}} \quad . \quad (B.4)
\end{aligned}$$

Der Normierungsfaktor \mathfrak{N}_{zd} ergibt sich aus dem Überlapp der atomaren Zentren

$$M_{n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \tilde{\varphi}_{n_1 l_1 m_1}^*(\vec{x}) \tilde{\Phi}_{n_2 l_2 m_2}(\vec{s}(\vec{R}, \vec{x}))$$

zu

$$\mathfrak{N}_{zd}^2 = \int d\vec{R} M_{n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2}^*(\vec{R}) M_{n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2}(\vec{R})$$

Der aus dem elektronischen Anteil resultierende Überlappfaktor $M_{n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2}(\vec{R})$ geht für asymptotisch große internukleare Abstände gegen "Null"

$$M_{n_1 l_1 m_1 n_2 l_2 m_2}(\vec{R}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0 \quad .$$

Damit lautet die normierte gesamte Wellenfunktion

$$\begin{aligned}
\tilde{N}_{zd} \Psi_{zd}(\vec{s}_1, \vec{x}_2) &= e^{i\vec{K}_{zd}\vec{R}} \beta_{zd}^{el}(\vec{s}_1, \vec{x}_2) \\
&= e^{i\vec{K}_{zd}\vec{R}} \frac{1}{\sqrt{1 + \mathfrak{N}_{zd}^2}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi(n_2 l_2 m_2)(\vec{s}_1) \tilde{\varphi}(n_1 l_1 m_1)(\vec{x}_2) \\
&\quad + \Phi(n_2 l_2 m_2)(\vec{s}_2) \tilde{\varphi}(n_1 l_1 m_1)(\vec{x}_1)) \quad . \quad (B.5)
\end{aligned}$$

Zustände nach erfolgter Ionisation

Der Zustand nach einer ersten Ionisation, wird durch einen Eigenzustand von \hat{H}_α (1.70) genähert: Das ionisierte Elektron befindet sich in einem Kontinuumszustand $(\vec{k}_z^e)_{He^+}$ im Feld des He^+ -Ions, während das zweite Elektron in einem gebundenen Zustand des He^+ -Ions $(n_1 l_1 m_1)$ verbleibt:

$$H^+ + He^+(n_1 l_1 m_1) + e_{\vec{k}_z^e}^-$$

$$\begin{aligned}
\langle \vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \alpha_{zk} \rangle_S &= \langle \vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \vec{K}_{zk}; (n_1 l_1 m_1)_{He^+}; (\vec{k}_z^e)_{He^+} \rangle_S \\
&= \tilde{N}_{zk} e^{i \vec{K}_{zk} \vec{R}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_{\vec{k}_z^e}(\vec{x}_1) \tilde{\varphi}(nlm)(\vec{x}_2) + \chi_{\vec{k}_z^e}(\vec{x}_2) \tilde{\varphi}(nlm)(\vec{x}_1) \right) \\
&= \tilde{N}_{zk} \Psi_{zk}(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) = e^{i \vec{K}_{zk} \vec{R}} \alpha_{zk}^{el}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \quad (\text{B.6})
\end{aligned}$$

Hierbei beschreibt $\Psi_{zk}^{el}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ den elektronischen und $e^{i \vec{K}_{zk} \vec{R}}$ den nukleonischen der Wellenfunktion. Der nukleonische Anteil ist normiert gemäß

$$\langle \vec{K}_{zk} | \vec{K}'_{zk} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{K}_{zk} - \vec{K}'_{zk}) \quad .$$

Orbitale

- $\chi_{\vec{k}_z^e}(\vec{r})$ ist ein Streuzustand des Elektrons im Feld von He^+ und ist normiert auf der \vec{k}_z^e -Skala $\int d\vec{r} \chi_{\vec{k}_z^e}^*(\vec{r}) \chi_{\vec{k}_z^{e'}}(\vec{r}) = \delta(\vec{k}_z^e - \vec{k}_z^{e'})$.
- $\langle \vec{x} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle = \tilde{\varphi}(nlm)(\vec{r}) = R_{nl}^{2,1}(r) Y_{lm}(\Omega)$ ist ein gebundener wasserstoffähnlicher orthonormierter Zustand des He^{2+} -Ions.

Normierung der gesamten Wellenfunktion

In dieser Näherung gehören beide Zustände $|(nlm)_{He^+}\rangle$ und $|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle$ zum Spektrum des Heliumatoms und sind somit orthogonal zueinander. Mit

$$\langle (nlm)_{He^+} | (\vec{k}_z^e)_{He^+} \rangle = 0$$

und

$$\begin{aligned}
&\int d\vec{R} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \Psi_{zk'}^*(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \Psi_{zk}(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \\
&= (2\pi)^3 \delta(\vec{K}_{zk} - \vec{K}'_{zk}) \delta(\vec{k}_z^e - \vec{k}_z^{e'}) \delta_{n_1 n_1'} \delta_{l_1 l_1'} \delta_{m_1 m_1'} \quad , \quad (\text{B.7})
\end{aligned}$$

ergibt sich der Normierungsfaktor aus dem Normierungsintegral

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \tilde{N}_{zd}^2 \int d\vec{R} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \Psi_{zk}^*(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) \Psi_{zk}(\vec{R}, \vec{x}_1, \vec{x}_2) = \tilde{N}_{zd}^2 \stackrel{!}{=} 1 \\
\Rightarrow \tilde{N}_{zd} &= 1 \quad . \quad (\text{B.8})
\end{aligned}$$

Anhang C

Untersuchung der Beiträge zur Transferionisation

In diesem Kapitel werden die Beiträge der einzelnen Reaktionswege zum gesamten Prozess untersucht. Das T-Matrixelement für die Transferionisation

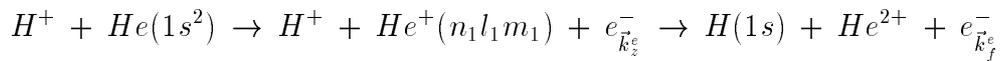
$$\begin{aligned} \sum_{n_1 l_1 m_1} \left[\int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2 l_2 m_2} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \right. \\ \left. + \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e t_{c2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \right] \end{aligned} \quad (C.1)$$

mit

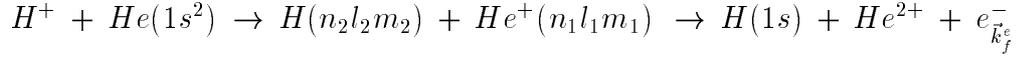
$$\begin{aligned} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) &= \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_{zd} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}} {}_S \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \beta_{zd}^{el} \rangle_S \\ t_{c1}(\vec{q}_{1d}) &= \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zd}) \cdot \vec{R}'} {}_S \langle \beta_{zd}^{el} | V_\alpha | \alpha_i^{el} \rangle_S \\ t_{c2}(\vec{q}_{2k}) &= \int d\vec{R} e_S^{i(\vec{K}_{zk} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}} \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \alpha_{zk}^{el} \rangle_S \\ t_{I1}(\vec{q}_{1k}) &= \int d\vec{R}' e_S^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}'} \langle \alpha_{zk}^{el} | V_\alpha | \alpha_i^{el} \rangle_S \end{aligned} \quad (C.2)$$

beinhaltet die beiden Abfolgemöglichkeiten:

1. Ionisation (I1) gefolgt von Einfang (c2)



2. Einfang (c1) gefolgt von Ionisation (I2)



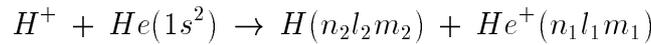
Die Beiträge zu den Teilschritten $t_{xj}(\vec{q}_{jr})$, $x = I, c$, $j = 1, 2$, $r = d, k^1$ werden in den folgenden Unterkapiteln im Hinblick auf mögliche Einschränkungen der Übergänge analysiert. Die Beiträge zum ersten Schritt unterscheiden sich in Abhängigkeit von der Beschreibung des Targets.

C.1 Einfang gefolgt von Ionisation

Der Teil des T-Matrixelementes, der die Abfolge *Einfang gefolgt von Ionisation* beschreibt, hat die Form

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1l_1m_1} \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2l_2m_2} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \\ = & \sum_{n_1l_1m_1} \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2l_2m_2} \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_{zd} - \vec{K}_\beta) \vec{R}} {}_S \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \beta_{zd}^{el} \rangle_S \\ & \times \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zd}) \vec{R}'} {}_S \langle \beta_{zd}^{el} | V_\alpha | \alpha_i^{el} \rangle_S \quad . \end{aligned} \quad (C.3)$$

C.1.1 Einfang als erster Übergang



Da die Wechselwirkung im Kanal α als Summe der Projektil-Elektron-Wechselwirkungsterme $V_\alpha = v_{ep}(1) + v_{ep}(2)$ darstellbar ist, zerfällt der Einschrittbeitrag $t_{c1}(\vec{q}_{1d})$ für den Einfang aus einer Grundzustandskomponente² $c_{nl}|nl, nl, 0\rangle$, in einen Satz definierter Zwischenzustände

$$\sum_{zd} |\beta_{zd}^{el}\rangle_S = \sum_{n_1l_1m_1} \sum_{n_2l_2m_2} |(n_1l_1m_1)_{He^+}(n_2l_2m_2)_H\rangle_S$$

¹Die Indizes bezeichnen jeweils: x kennzeichnet den Übergangstyp (I=Ionisation, c=Einfang), j die Reihenfolge (1=erster Übergang, 2= zweiter Übergang) und r den Typ des Zwischenzustands des aktiven Elektrons (d=diskret, k=kontinuierlich).

²Jede Komponente ist bereits zum richtigen Gesamtdrehimpuls gekoppelt: $L = M = 0$.

in Eielektronenbeiträge $\tau_{xj}(\vec{q}_{jr})$, die im Folgenden hergeleitet werden. Aufgrund der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen

$$\langle (n_1 l_1 m_1)_{He^+} | (nl \pm m)_{He^{00}} \rangle = r^{2,1/2,2}(n_1 n l_1) \delta_{l_1} \delta_{\pm m m_1} \quad (C.4)$$

resultiert ein Satz von Auswahlregeln, wodurch die möglichen Übergänge reduziert werden. Es werden zusätzlich dazu nur solche Beiträge berücksichtigt, die über eine Wechselwirkung zu einem Einfang führen. Dies entspricht der Annahme, dass

$$\langle (n_2 l_2 m_2)_H | (nlm)_{He^{00}} \rangle \longrightarrow 0 \quad . \quad (C.5)$$

Hier ist

$$r^{2,1/2,2}(n_1 n l_1) = \int R_{n_1 l_1}^{2,1/2,2}(r) R_{n l_1}^{2,1/2,2}(r) r^2 dr \quad . \quad (C.6)$$

Der Wert dieses Integrals kann für wasserstoffähnliche Orbitale analytisch berechnet werden

$$r^{2,1/2,2}(110) = \frac{8(2Z_{eff})^{\frac{3}{2}}}{(Z_{eff} + 2)^{\frac{3}{2}}} \quad . \quad (C.7)$$

Um die Beiträge zu den Teilschritten zu bestimmen, ist es zunächst ausreichend, das Augenmerk nur auf den elektronischen Anteil des Einschrittbeitrages $t_{xj}(\vec{q}_{jr})$ zu richten. Er unterscheidet sich je nach Beschreibung des Targets und man bekommt als Beitrag

1. für den Konfigurationsmischungsansatz

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \alpha_i^{el} \rangle_S = \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \varphi_{nlm}(\vec{x}_1) \varphi_{nl-m}(\vec{x}_2)$$

betrachtet man den Einfeld aus einer Komponente des Grundzustands

$$\begin{aligned}
& c_{nl} \langle \beta_{zd}^{el} | V_\alpha | nl, nl, 0 \rangle_S \\
= & c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \frac{2}{\sqrt{2}} \tilde{N}_{zd} \\
& \times \left[\langle (n_2 l_2 m_2)_H | v_{ep} | (nlm)_{He^{00}} \rangle \langle (n_1 l_1 m_1)_{He^+} | (nl-m)_{He^{00}} \rangle \right. \\
& \left. + \langle (n_2 l_2 m_2)_H | (nlm)_{He^{00}} \rangle \langle (n_1 l_1 m_1)_{He^+} | v_{ep} | (nl-m)_{He^{00}} \rangle \right] \\
= & c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \tilde{N}_{zd} \\
& \langle (n_2 l_2 m_2)_H | v_{ep} | (nlm)_{He^{00}} \rangle r^{2,1/2,2} (n_1 nl) \delta_{l_1} \delta_{m-m_1} \tag{C.8}
\end{aligned}$$

2. für den wasserstoffähnlichen Ansatz

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \alpha_i^{el} \rangle_S = \varphi_{1s}^\Lambda(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\Lambda(\vec{x}_2)$$

einen einzigen Term der Summe (C.8), wobei $\delta_{n_1} \delta_{l_0} \delta_{m_0}$ und $c_{10} = 1$, da es lediglich eine Konfiguration gibt.

3. für den Hartree-Fock-Ansatz

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \alpha_i^{el} \rangle_S = \varphi_{1s}^{hf}(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^{hf}(\vec{x}_2)$$

analog zum wasserstoffähnlichen Fall lediglich einen Term der Summe (C.8), wobei $\delta_{n_1} \delta_{l_0} \delta_{m_0}$ und $c_{10} = 1$ ist.

4. für den Eckart-Ansatz

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2 | \alpha_i^{el} \rangle_S = N_{\alpha\beta} [\varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_2) + \varphi_{1s}^\alpha(\vec{x}_1) \varphi_{1s}^\beta(\vec{x}_2)]$$

folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned}
& {}_S\langle\beta_{zd}^{el}|V_\alpha|\alpha_i^{el}\rangle_S \\
&= N_{\alpha\beta} \frac{2}{\sqrt{2}} \tilde{N}_{zd} \left[\langle(n_2l_2m_2)_H|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\alpha\rangle \langle(n_1l_1m_1)_{He^+}|(100)_{He^{00}}^\beta\rangle \right. \\
&\quad + \langle(n_2l_2m_2)_H|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\beta\rangle \langle(n_1l_1m_1)_{He^+}|(100)_{He^{00}}^\alpha\rangle \\
&\quad + \langle(n_2l_2m_2)_H|(100)_{He^{00}}^\alpha\rangle \langle(n_1l_1m_1)_{He^+}|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\beta\rangle \\
&\quad \left. + \langle(n_2l_2m_2)_H|(100)_{He^{00}}^\beta\rangle \langle(n_1l_1m_1)_{He^+}|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\alpha\rangle \right] \\
&= \sqrt{2} N_{\alpha\beta} \tilde{N}_{zd} \left[\langle(n_2l_2m_2)_H|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\alpha\rangle r_\beta^{2,1/2,2}(n_1l_1)\delta_{0l_1}\delta_{0m_1} \right. \\
&\quad \left. \times \langle(n_2l_2m_2)_H|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\beta\rangle r_\alpha^{2,1/2,2}(n_1l_1)\delta_{0l_1}\delta_{0m_1} \right] . \quad (C.9)
\end{aligned}$$

Hier wurde (C.4), (C.5) und (C.6) verwendet.

Also tragen nur die Zwischenzustände bei, deren Drehimpuls- und magnetische Quantenzahl derjenigen der Komponente der Grundzustandsmischung entspricht. Man bekommt als die Einschnittbeiträge für den Einfang aus dem gesamten Grundzustand

1. CI-/wasserstoffähnlicher/Hartree-Fock-Ansatz

$$\begin{aligned}
\sum_{n_1l_1m_1} \sum_{n_2l_2m_2} t_{c1}(\vec{q}_{1d}) &= \sum_{n_1l_1m_1} \sum_{n_2l_2m_2} \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zd}) \cdot \vec{R}} {}_S\langle\beta_{zd}^{el}|V_\alpha|\alpha_i^{el}\rangle_S \\
&= \sum_{n_2l_2m_2} \sum_{n_1l_1m_1} \sum_{nl} c_{nl} \tilde{N}_{zd} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \tau_{c1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1d}) \\
&\quad \times r^{2,1/2,2}(nn_1l)\delta_{ll_1}\delta_{m-m_1} \quad (C.10)
\end{aligned}$$

2. Eckart-Ansatz

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_1l_1m_1} \sum_{n_2l_2m_2} t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \\
&= \sum_{n_1l_1m_1} \sum_{n_2l_2m_2} N_{\alpha\beta} \sqrt{2} \tilde{N}_{zd} \left[\tau_{c1}^{(100)_{He^{00}}^\alpha}(\vec{q}_{1d}) r_\beta^{2,1/2,2}(n_1nl_1)\delta_{0l_1}\delta_{0m_1} \right. \\
&\quad \left. + \tau_{c1}^{(100)_{He^{00}}^\beta}(\vec{q}_{1d}) r_\alpha^{2,1/2,2}(n_1nl_1)\delta_{0l_1}\delta_{0m_1} \right] \quad (C.11)
\end{aligned}$$

Hier ist

$$\tau_{cl}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1d}) = \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_a - \vec{K}_{zd}) \vec{R}} \langle (n_2 l_2 m_2)_H | v_{ep} | (nlm)_{He^{00}} \rangle . \quad (C.12)$$

C.1.2 Ionisation nach erfolgtem Einfang

$$H(n_2 l_2 m_2) + He^+(n_1 l_1 m_1) \rightarrow H(1s) + He^{2+} + e_{\vec{k}_f}^-$$

Hier ist das T-Matrixelement für Ionisation aus einem definierten Zwischenzustand

$$|\beta_{zd}^{el}\rangle_S = |(n_1 l_1 m_1)_{He^+} (n_2 l_2 m_2)_H\rangle_S$$

in den Endzustand

$$|\beta_f^{el}\rangle_S = |(\vec{k}_f^e)_{He^{2+}} (n_f l_f m_f)_H\rangle_S$$

zu betrachten. Der symmetrisierte Wechselwirkungs-Operator im Endkanal V_β^S ist als Summe von Einteilchenwechselwirkungstermen darstellbar.

$$V_\beta^S = \frac{1}{2}(v_{ep}(1) + v_{et}(2) + v_{et}(1) + v_{ep}(2)) = \frac{1}{2}(V_\beta(1, 2) + V_\beta(2, 1)) = \hat{S}^\dagger V_\beta \hat{S}$$

Der Index s bezeichnet die Symmetrisierung und \hat{S} ist der Symmetrisierungs-Operator. Er ist im Zwei-Teilchenfall $\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{P}_{12} + 1)$. Da

$${}_s\langle \beta | \hat{V}_S | \gamma \rangle_S = \langle \beta | \hat{S}^\dagger \hat{V}_S \hat{S} | \gamma \rangle = \langle \beta | \hat{S}^\dagger \hat{S}^\dagger \hat{V} \hat{S} \hat{S} | \gamma \rangle = {}_s\langle \beta | \hat{V} | \gamma \rangle_S \quad (C.13)$$

denn \hat{S} ist hermitesch $\hat{S} = \hat{S}^\dagger$ und es gilt $\hat{S}^2 = \hat{S}$, kann hier

$$\begin{aligned}
& S \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \beta_{zd}^{el} \rangle_S \\
= & \frac{1}{2} \tilde{N}_{zd} \left[\langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | v_{ep} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \right. \\
& + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | v_{et} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \\
& + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{ep} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \\
& + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{et} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \\
& + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | v_{ep} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \\
& + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | v_{et} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \\
& + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{ep} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \\
& \left. + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{et} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \right] \quad (C.14)
\end{aligned}$$

berechnet werden. Mit

$$\langle (n_f l_f m_f)_H | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle = \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \quad (C.15)$$

und den Annahmen, dass nur solche Beiträge berücksichtigt werden, die über eine Wechselwirkung zu einem Einfang oder einer Ionisation führen,

- $\langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \longrightarrow 0$
- $\langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | (n_2 l_2 m_2)_H \rangle \longrightarrow 0$
- $\langle (n_f l_f m_f)_H | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \longrightarrow 0,$

vereinfacht sich das Matrixelement zu

$$\begin{aligned}
& S \langle \beta_f^{el} | V_\beta | \beta_{zd}^{el} \rangle_S \\
= & \frac{1}{2} \tilde{N}_{zd} \left[\langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | v_{ep} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \right. \\
& \left. + \langle (\vec{k}_f^e)_{He^2+} | v_{et} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \right] \quad (C.16)
\end{aligned}$$

so dass

$$t_{I2}(\vec{q}_{2d}) = \tilde{N}_{zd} \tau_{I2}^{(n_1 l_1 m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \quad . \quad (C.17)$$

Hier ist

$$\tau_{I2}^{(n_1 l_1 m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) = \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_{zd} - \vec{K}_\beta) \cdot \vec{R}'} \frac{1}{2} \langle (\vec{k}_f^e)_{He^{2+}} | v_{ep} + v_{et} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \quad (C.18)$$

der Ein-Elektronenbeitrag zur Ionisation nach erfolgtem Einfang. Es tragen also nur Übergänge des Elektrons in solche Wasserstoff-Zwischenzustände zum Gesamtwirkungsquerschnitt der Transferionisation bei, deren Quantenzahlen denen des Endzustands entsprechen.

Die Kombination aus (C.10) beziehungsweise (C.11) und (C.17) integriert über den Impuls der nukleonischen Relativbewegung im Zwischenzustand liefert den Beitrag für einen zuerst stattfindenden Einfang und anschließende Ionisation.

Für den CI-/wasserstoffähnlichen/Hartree-Fock-Ansatz erhält man

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2 l_2 m_2} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \\ = & \sum_{n_2 l_2 m_2} \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zd} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \tilde{N}_{zd}^2 \frac{(-1)^{l-m}}{2l+1} r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \sqrt{2} \\ & \times \tau_{c1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1d}) \delta_{l_1 l} \delta_{m_1 - m} \tau_{I2}^{(n_1 l_1 m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \\ = & \sum_{n_1} \int d\vec{K}_{zd} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \tilde{N}_{zd}^2 \frac{(-1)^{l-m}}{2l+1} r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \sqrt{2} \\ & \times \tau_{c1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1d}) \tau_{I2}^{(n_1 l - m)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) \end{aligned} \quad (C.19)$$

beziehungsweise für einen Eckart-Ansatz

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zd} \sum_{n_2 l_2 m_2} t_{I2}(\vec{q}_{2d}) t_{c1}(\vec{q}_{1d}) \\
= & \sum_{n_2 l_2 m_2} \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zd} \tilde{N}_{zd}^2 N_{\alpha\beta} \sqrt{2} [r_{\beta}^{2,1/2,2}(n_1 1 l_1) \tau_{c1}^{(100)_{He^{00}}\alpha}(\vec{q}_{1d}) \\
& + r_{\alpha}^{2,1/2,2}(n_1 1 l_1) \tau_{c1}^{(100)_{He^{00}}\beta}(\vec{q}_{1d})] \tau_{I2}^{(n_1 l_1 m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) \delta_{n_f n_2} \delta_{l_f l_2} \delta_{m_f m_2} \delta_{n_1 1} \delta_{l_1 0} \delta_{m_1 0} \\
= & \sum_{n_1} \int d\vec{K}_{zd} \tilde{N}_{zd}^2 N_{\alpha\beta} \sqrt{2} [r_{\beta}^{2,1/2,2}(n_1 1 0) \tau_{c1}^{(100)_{He^{00}}\alpha}(\vec{q}_{1d}) \\
& + r_{\alpha}^{2,1/2,2}(n_1 1 0) \tau_{c1}^{(100)_{He^{00}}\beta}(\vec{q}_{1d})] \tau_{I2}^{(n_1 0 0)_{He^+}}(\vec{q}_{2d}) \quad . \quad (C.20)
\end{aligned}$$

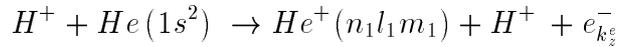
C.2 Ionisation gefolgt von Einfang

Die Abfolge *Ionisation gefolgt von Einfang* beschreibt der Teil

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e t_{e2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \\
= & \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e \int d\vec{R} e_S^{i(\vec{K}_{zk} - \vec{K}_{\beta}) \vec{R}} \langle \beta_f^{el} | V_{\beta} | \alpha_{zk}^{el} \rangle_S \\
& \times \int d\vec{R}' e_S^{i(\vec{K}_{\alpha} - \vec{K}_{zk}) \vec{R}'} \langle \alpha_{zk}^{el} | V_{\alpha} | \alpha_i^{el} \rangle_S \quad (C.21)
\end{aligned}$$

des T-Matrixelementes (C.1).

C.2.1 Ionisation als erster Übergang



Die Ionisation erfolgt aus einer Grundzustandskomponente $c_{nl} |nl, nl, 0\rangle$ in einen Satz definierter Zwischenzustände

$$\sum_{zk} |\alpha_{zk}^{el}\rangle_S = \int d\vec{k}_z^e \sum_{n_1 l_1 m_1} |(n_1 l_1 m_1)_{He^+}; (\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle_S \quad .$$

Den Einschnittbeitrag $t_{I1}(\vec{q}_{1k})$ für eine erste Ionisation erhält man wiederum durch Einsetzen der verschiedenen Ansätze in

$${}_S\langle\alpha_{zk}^{el}|V_\alpha|\alpha_i^{el}\rangle_S \quad . \quad (\text{C.22})$$

1. Die Berechnung von (C.22) liefert für den CI-Ansatz

$$\begin{aligned} & c_{nl} {}_S\langle\alpha_{zk}^{el}|V_\alpha|nl, nl, 0\rangle_S \\ = & c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \frac{2}{\sqrt{2}} \\ & \times \left[\langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|v_{ep}|(nlm)_{He^{00}}\rangle \langle(n_1 l_1 m_1)_{He^+}|(nl-m)_{He^{00}}\rangle \right. \\ & \left. + \langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|(nlm)_{He^{00}}\rangle \langle(n_1 l_1 m_1)_{He^+}|v_{ep}|(nl-m)_{He^{00}}\rangle \right] \end{aligned}$$

Hier werden die möglichen Übergänge wiederum durch die Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen (C.4) und der Annahme, dass $\langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|(nl \pm m)_{He^{00}}\rangle \rightarrow 0$, auf

$$\begin{aligned} c_{nl} {}_S\langle\alpha_{zk}^{el}|V_\alpha|nl, nl, 0\rangle_S & = c_{nl} \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \frac{2}{\sqrt{2}} \langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|v_{ep}|(nlm)_{He^{00}}\rangle \\ & \times r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \delta_{l_1} \delta_{m-m_1} \quad (\text{C.23}) \end{aligned}$$

eingeschränkt.

2. Bei Einsetzen des wasserstoffähnlichen beziehungsweise des Hartree-Fock-Ansatzes reduziert sich (C.23) auf einen Term mit $\delta_{n_1} \delta_{l_0} \delta_{m_0}$ und $c_{l_0} = 1$.
3. Geht man mit dem Eckart-Ansatz in (C.22) ein, erhält man mit (C.4) und der Annahme, dass $\langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|(100)_{He^{00}}^\gamma\rangle \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} {}_S\langle\alpha_{zk}^{el}|V_\alpha|\alpha_i^{el}\rangle_S & = N_{\alpha\beta} \frac{2}{\sqrt{2}} \left[\langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\alpha\rangle r_\beta^{2,1/2,2}(n_1 10) \delta_{0l_1} \delta_{0m_1} \right. \\ & \left. + \langle(\vec{k}_z^e)_{He^+}|v_{ep}|(100)_{He^{00}}^\beta\rangle r_\alpha^{2,1/2,2}(n_1 10) \delta_{0l_1} \delta_{0m_1} \right] \quad (\text{C.24}) \end{aligned}$$

Die Einschnittbeiträge für die verschiedenen Ansätze zum T-Matrixelement für eine Ionisation aus dem Grundzustand ergeben sich damit zu:

- CI-/wasserstoffähnlicher/Hartree-Fock-Ansatz

$$\begin{aligned}
\int d\vec{k}_z^e \sum_{n_1 l_1 m_1} t_{I1}(\vec{q}_{1k}) &= \int d\vec{k}_z^e \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}} {}_S \langle \beta_{zk}^{el} | V_\alpha | \alpha_i^{el} \rangle_S \\
&= \int d\vec{k}_z^e \sum_{n_1 l_1 m_1} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \tau_{I1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) \\
&\quad \times r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \delta_{l l_1} \delta_{m-m_1} \tag{C.25}
\end{aligned}$$

mit

$$\tau_{I1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) = \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}} \langle (\vec{k}_z^e)_{He^+} | v_{ep} | (nlm)_{He^{00}} \rangle$$

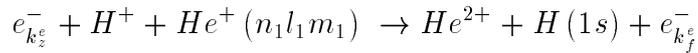
- Eckart-Ansatz

$$\begin{aligned}
&\int d\vec{k}_z^e \sum_{n_1 l_1 m_1} t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \\
&= \int d\vec{k}_z^e \sum_{n_1 l_1 m_1} N_{\alpha\beta} \frac{2}{\sqrt{2}} \left[\tau_{I1}^{(100)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r_\beta^{2,1/2,2}(n_1 1 l_1) \delta_{0 l_1} \delta_{0 m_1} \right. \\
&\quad \left. + \tau_{I1}^{(100)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r_\alpha^{2,1/2,2}(n_1 1 l_1) \delta_{0 l_1} \delta_{0 m_1} \right] \tag{C.26}
\end{aligned}$$

mit

$$\tau_{I1}^{(100)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) = \int d\vec{R} e^{i(\vec{K}_\alpha - \vec{K}_{zk}) \cdot \vec{R}} \langle (\vec{k}_z^e)_{He^+} | v_{ep} | (100)_{He^{00}}^\gamma \rangle \quad .$$

C.2.2 Einfang nach erfolgter Ionisation



Die Amplitude für einen Einfang, nachdem im ersten Schritt eine Ionisation stattgefunden hat, besitzt die allgemeine Form:

$$\begin{aligned}
{}_S\langle\beta_f^{el}|V_\beta|\alpha_{zk}^{el}\rangle_S &= \frac{1}{2}\left[\langle\vec{k}_f^e|v_{ep}|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle\right. \\
&+ \langle\vec{k}_f^e|v_{et}|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle \\
&+ \langle\vec{k}_f^e|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|v_{ep}|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle \\
&+ \langle\vec{k}_f^e|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|v_{et}|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle \\
&+ \langle\vec{k}_f^e|v_{ep}|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle \\
&+ \langle\vec{k}_f^e|v_{et}|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle \\
&+ \langle\vec{k}_f^e|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|v_{ep}|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle \\
&+ \left.\langle\vec{k}_f^e|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle\langle(n_f l_f m_f)_H|v_{et}|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle\right] .
\end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung von

$$\langle(\vec{k}_f^e)_{He^{2+}}|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle = \delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) \quad (C.27)$$

und mit Vernachlässigung von Beiträgen, die ohne eine Wechselwirkung zu einer Ionisation oder einem Einfang führen,

- $\langle\vec{k}_f^e|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle \longrightarrow 0$
- $\langle(n_f l_f m_f)_H|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle \longrightarrow 0$
- $\langle(n_f l_f m_f)_H|(\vec{k}_z^e)_{He^+}\rangle \longrightarrow 0,$

reduziert sich der allgemeine Ausdruck auf

$${}_S\langle\beta_f^{el}|V_\beta|\alpha_{zk}^{el}\rangle_S = \frac{1}{2}\langle(n_f l_f m_f)_H|v_{ep} + v_{et}|(n_1l_1m_1)_{He^+}\rangle\delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) .$$

Damit ist

$$t_{c2}(\vec{q}_{2k}) = \tau_{c2}^{(n_1l_1m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2k})\delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) ,$$

wobei

$$\begin{aligned} & \tau_{c2}^{(n_1 l_1 m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \\ = & \int d\vec{R}' e^{i(\vec{K}_{zk} - \vec{K}_\beta) \vec{R}'} \frac{1}{2} \langle (n_f l_f m_f)_H | v_{ep} + v_{et} | (n_1 l_1 m_1)_{He^+} \rangle \quad . \quad (C.28) \end{aligned}$$

Die Gesamtamplitude für eine zunächst erfolgte Ionisation und einen anschließend stattfindenden Einfang setzt sich aus den beiden Teilamplituden (C.25), beziehungsweise (C.26) und (C.28) zusammen. Es ergibt sich also:

1. CI-/wasserstoffähnlicher/Hartree-Fock-Ansatz

$$\begin{aligned} & \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e t_{c2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \\ = & \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \\ & \tau_{I1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \delta_{ll_1} \delta_{m-m_1} \\ & \tau_{c2}^{(n_1 l_1 m_1)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) \\ = & \sum_{n_1} \int d\vec{K}_{zk} \sum_{nl} c_{nl} \sum_m \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{2} \\ & \tau_{I1}^{(nlm)_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r^{2,1/2,2}(n_1 nl) \tau_{c2}^{(n_1 l-m)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \quad (C.29) \end{aligned}$$

2. Eckart-Ansatz

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e t_{c2}(\vec{q}_{2k}) t_{I1}(\vec{q}_{1k}) \\
= & \sum_{n_1 l_1 m_1} \int d\vec{K}_{zk} \int d\vec{k}_z^e N_{\alpha\beta} \sqrt{2} \\
& \left[\tau_{I1}^{(100)^\alpha_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r_\beta^{2,1/2,2}(n_1 1 l_1) \delta_{0l_1} \delta_{0m_1} \right. \\
& \tau_{c2}^{(n_1 00)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) \\
& + \tau_{I1}^{(100)^\beta_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r_\alpha^{2,1/2,2}(n_1 1 l_1) \delta_{0l_1} \delta_{0m_1} \\
& \left. \tau_{c2}^{(n_1 00)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \delta(\vec{k}_f^e - \vec{k}_z^e) \right] \\
= & \sum_{n_1} \int d\vec{K}_{zk} N_{\alpha\beta} \sqrt{2} \\
& \left[\tau_{I1}^{(100)^\alpha_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r_\beta^{2,1/2,2}(n_1 10) \tau_{c2}^{(n_1 00)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \right. \\
& \left. + \tau_{I1}^{(100)^\beta_{He^{00}}}(\vec{q}_{1k}) r_\alpha^{2,1/2,2}(n_1 10) \tau_{c2}^{(n_1 00)_{He^+}}(\vec{q}_{2k}) \right] . \quad (C.30)
\end{aligned}$$

Anhang D

Transformation der Amplituden vom Streuwinkel- ins Stoßparameterbild

Die Herleitung des Transformationsverhaltens der Übergangsamplituden, die den gesamten Prozess beschreiben, beruht auf der Forderung, dass der Wert einer Observablen nicht vom Beschreibungszugang abhängig ist. Bewegt man sich im Gültigkeitsbereich der semiklassischen Näherung, kann der Wirkungsquerschnitt im Rahmen der Stoßparameternäherung gewonnen werden. Allgemein lässt sich aber auch ein rein quantenmechanischen Ansatz formulieren.

Ausgehend von der Stoßparameternäherung erhält man den impulsdifferentiellen Wirkungsquerschnitt für eine Transferionisation aus den stoßparameterabhängigen Übergangsamplituden zu

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \vec{k}^e} = \int |A(\vec{b}, \vec{k}^e)|^2 d\vec{b} \quad . \quad (\text{D.1})$$

In der quantenmechanischen Behandlung ergibt er sich aus dem Quadrat des T-Matrixelementes,

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \vec{k}^e} = \left(\frac{\mu}{2\pi}\right)^2 \int |T_{if}(\eta, \vec{k}^e)|^2 d\Omega_P \quad , \quad (\text{D.2})$$

wobei über das Raumwinkelement $d\Omega_P$ integriert wird. Hier wird angenommen, dass der Betrag des Projektilimpulses vor und nach dem Stoß infolge des Mas-

senunterschieds zwischen Projektil und Elektron ungefähr gleich ist: $k_f \approx k_i$. Der Gesamtimpulsübertrag senkrecht zur Einschussrichtung¹ ist bei kleinen Streuwinkeln ungefähr gleich $\eta = \mu \theta_P v$. So kann die Integration über den Projektilstreuungswinkel ersetzt werden durch eine Integration über $\vec{\eta} = \mu v \theta_P$

$$d\Omega_P \approx \theta_P d\theta_P d\varphi_P = \frac{\eta}{(\mu v)^2} d\eta d\varphi_\eta \quad . \quad (\text{D.3})$$

Nun ist φ_P der Azimutwinkel des Projektilimpulses und φ_η der Azimutwinkel einer Komponente des Impulses, welchen das Projektil überträgt. Somit gilt bei spezieller Wahl der z-Achse des Koordinatensystems² $\varphi_P = \varphi_\eta$. Der Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt (D.2) läßt sich damit umschreiben zu

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\vec{k}^e} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{v^2} \int |T_{if}(\eta, \vec{k}^e)|^2 d\vec{\eta} \quad . \quad (\text{D.4})$$

Es sei eine zweidimensionale Fouriertransformierte für die Übergangsamplitude $A(\vec{b}, \vec{k}^e)$ definiert

$$R(\vec{\eta}, \vec{k}^e) = \int A(\vec{b}, \vec{k}^e) e^{-i\vec{\eta}\vec{b}} d\vec{b} \quad (\text{D.5})$$

$$A(\vec{b}, \vec{k}^e) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int R(\vec{\eta}, \vec{k}^e) e^{i\vec{\eta}\vec{b}} d\vec{\eta} \quad , \quad (\text{D.6})$$

denn es gilt $\vec{\eta}\vec{v} = \vec{b}\vec{v} = 0$. Daraus gewinnt man durch Einsetzen der Fouriertransformierten (D.5) in (D.1) und der bekannten Darstellung der Deltafunktion

$$\delta(\vec{\eta} - \vec{\eta}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{b} e^{i(\vec{\eta}' - \vec{\eta})\vec{b}} \quad (\text{D.7})$$

einen Ausdruck für den im Rahmen der Stoßparameternäherung gewonnenen differentiellen Wirkungsquerschnitt, der sich nun mit der rein quantenmechanischen

¹Siehe dazu Fußnote (9) in Kapitel 2.5.

²Man definiert die z-Achse des Koordinatensystems durch die Richtung des einlaufenden Projektils.

Formulierung vergleichen läßt

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \vec{k}^e} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vec{\eta} \int d\vec{\eta}' R^*(\vec{\eta}, \vec{k}^e) R(\vec{\eta}', \vec{k}^e) \int d\vec{b} e^{i(\vec{\eta}' - \vec{\eta}) \cdot \vec{b}} \quad (\text{D.8})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{\eta} |R(\vec{\eta}, \vec{k}^e)|^2 \quad . \quad (\text{D.9})$$

Mit Hilfe von (D.4) und (D.8) identifiziert man

$$R(\vec{\eta}, \vec{k}^e) = \frac{T_{if}(\eta, \vec{k}^e)}{v} \quad . \quad (\text{D.10})$$

Die Amplituden für den gesamten Übergang lassen sich also anhand der Fouriertransformierten von $\frac{T_{if}(\eta, \vec{k}^e)}{v}$ gewinnen.

Anhang E

Berechnung des Fourier-Bessel-Integrals

Die Berechnung des Integrals $\int \frac{R_{\epsilon_i l \lambda}(q)}{q^2} Y_{\lambda \mu}^*(\vec{q}) e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{b}} d\vec{\eta}$ basiert auf

1. der Zerlegung des Impulsübertrags in Anteile parallel und senkrecht zur Einschussrichtung des Projektils gemäß $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f = \vec{q}_{||} - \vec{\eta}$. Weist die Komponente $\vec{q}_{||}$ parallel zur Eingangsrichtung des Projektils in Richtung der z-Achse des Koordinatensystems, hängen der Azimuthwinkel des Impulsübertragsvektors \vec{q} und der Azimuthwinkel des Vektors $\vec{\eta}$, der den Impulsübertrag senkrecht zur Eingangsrichtung des Projektils angibt, folgendermassen zusammen $\varphi_q = \varphi_\eta + \pi$.
2. der Umschreibung der Kugelflächenfunktion gemäß

$$\begin{aligned} \left[Y_{\lambda \mu}(\vec{q}) \right]^* &= \left[\tilde{P}_{\lambda \mu}(\theta_q) e^{i\mu\varphi_q} \right]^* \\ &= \tilde{P}_{\lambda \mu}(\theta_q) e^{-i\mu\varphi_q} \\ &= \tilde{P}_{\lambda \mu}(\theta_q) e^{-i\mu(\varphi_\eta + \pi)} \\ &= \tilde{P}_{\lambda \mu}(\theta_q) e^{-i\mu\varphi_\eta} (-1)^\mu \quad , \end{aligned}$$

3. der Integraldarstellung der Besselfunktionen¹

$$\begin{aligned} \int d\varphi e^{i\omega \cos(\varphi-\varphi')} e^{-i\mu\varphi} &= e^{-i\mu\varphi'} \int d\varphi e^{i\omega \cos(\varphi-\varphi')} e^{-i\mu(\varphi-\varphi')} \\ &= e^{-i\mu\varphi'} 2\pi i^{|\mu|} J_{|\mu|}(\omega) \quad . \end{aligned}$$

Setzt man dies in das zu berechnende Integral ein, erhält man mit der Darstellung in Zylinderkoordinaten

$$\begin{aligned} \int \frac{R_{\epsilon;l\lambda}(q)}{q^2} Y_{\lambda\mu}^*(\vec{q}) e^{i\vec{\eta}\vec{b}} d\vec{\eta} &= (-1)^\mu \int \eta d\eta \frac{R_{\epsilon;l\lambda}(q)}{q^2} \tilde{P}_{\lambda\mu}(\theta_q) \int d\varphi_\eta e^{i\vec{\eta}\vec{b}} e^{-i\mu\varphi_\eta} \\ &= (-1)^\mu e^{-i\mu\varphi_b} 2\pi i^{|\mu|} \int \eta d\eta \frac{R_{\epsilon;l\lambda}(q)}{q^2} \tilde{P}_{\lambda\mu}(\theta_q) J_{|\mu|}(\eta b) \quad . \end{aligned}$$

¹siehe Gradstheyn und Ryzhik [77]

Literaturverzeichnis

- [1] D. S. F. Crothers u. R. McCarroll, J. Phys. B 20: 2835-2842, 1987
- [2] N. C. Deb u. D. S. F. Crothers, J. Phys. B 24: 2359-2365, 1991
- [3] K. M. Dunseath u. D. S. F. Crothers, J. Phys. B 24: 5003-5022, 1991
- [4] Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin, Comp. Phys. Comm. 23: 153, 1981
- [5] Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin, Comp. Phys. Comm. 30: 193, 1983
- [6] Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin, Comp. Phys. Comm. 32: 385, 1984
- [7] J. S. Briggs, J. Phys. B 10: 3075, 1977
- [8] J. M. Feagin, J. S. Briggs, T. M. Reeves, J. Phys. B 17: 1057, 1984
- [9] M. Kleber et al., Nucl. Phys. A 252: 152, 1975
- [10] M. R. C. McDowell, J. P. Coleman, Introduction to the Theory of Ion-Atom-Collisions, Amsterdam (North-Holland), 1970
- [11] C. Eckart, Phys. Rev. 36: 878, 1930
- [12] V. Mergel et al., Phys. Rev. Lett. 86: 2257, 2001
- [13] H. R. J. Walters, J. Phys. B 21: 1277, 1988
- [14] Elke Wagner, Diplomarbeit, Frankfurt, 2000
- [15] B. H. Bransden, C. J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Longman, Harlow (Essex), 1997

- [16] F. E. Harris et al., Algebraic and Diagrammatic Methods in Many-Fermion Theory, Oxford University Press, New York, 1992
- [17] B. H. Bransden, M. H. McDowell, Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom-Collisions, Oxford University Press, New York, 1992
- [18] Shah et al., J. Phys. B20: 3501, 1987
- [19] R. Olson, A. Salop, Phys. Rev. A16: 531, 1977
- [20] P. J. Marchalant, Dissertation, The Queen's University of Belfast, 1996
- [21] L. H. Thomas, Proc. Roy. Soc. (London) Series A 114: 561, 1927
- [22] H. J. Lüdde, Dissertation, Frankfurt am Main, 1981
- [23] R. McCarroll, A. Salin, J. Phys. B 1: 163, 1968
- [24] I. M. Cheshire, Proc. Roy. Soc. (London) 84: 89, 1964
- [25] T. Kato, Commun. Pure Appl. Math. 10: 151, 1957
- [26] C. Myers, C. Umrigar et al., Phys. Rev. A 44: 5537, 1993
- [27] Antoine Salin, private Mitteilung.
- [28] K. Frankowski, C. L. Pekeris, Phys. Rev. 146: 46, 1966
- [29] E. A. Hylleraas, Z. Phys. 54: 347, 1929
- [30] C. Roothan, Rev. Mod. Phys. 23: 69, 1951;
C. Roothan, P. Bagus, Methods Comput. Phys. 2: 47, 1963
- [31] E. Clementi, C. Roetti, Atom. Data Nucl. Data Tables 14: 177-478
- [32] C. Froese-Fischer, Comput. Phys. Commun. 1: 151-166, 1966; 4: 107-116, 1974
- [33] K. Bartschat, Computational Atomic Physics, Springer Verlag (New York), 1996
- [34] Löwdin, Rev. Mod. Phys. 32: 328, 1960

- [35] C. J. Joachain, R. Vanderpoorten, *Physica* 46: 333, 1969
- [36] J. H. McGuire, O. L. Weaver, *Phys. Rev. A* 16: 41, 1977
- [37] K. Dettmann, *Springer Tracts Mod. Phys.* 58: 119, 1971
- [38] K. Dettmann, G. Leibfried, *Z. Phys.* 218: 1, 1969
- [39] K. Dettmann, G. Leibfried, *Z. Phys.* 210: 43, 1968
- [40] R. Shakeshaft, L. Spruch, *J. Phys. B* 11: L457, 1978
- [41] Dz. Belkic, R. Gayet, *J. Phys. B* 10: 1923, 1978
- [42] Dz. Belkic, A. Salin, *J. Phys. B* 11: 3905, 1978
- [43] N. Stolterfoht, R. D. DuBois, R. D. Rivarola, *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions*, Springer Verlag (Heidelberg), 1997
- [44] J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* 31: 349, 1928
- [45] H. C. Brinkman, H. A. Kramers, *Proc. Acad. Sci. Amsterdam* 33: 973, 1930
- [46] D. R. Schultz, C. O. Reinhold, *J. Phys. B* 23: L9, 1990
- [47] D. R. Schultz, L. Meng, R. E. Olson, *J. Phys. B* 25: 4601, 1992
- [48] J. F. Reading, A. L. Ford, E. G. Fitchard, *Phys. Rev. Lett.* 36: 573, 1976
- [49] A. L. Ford, J. F. Reading, E. G. Fitchard, *Phys. Rev. A* 16: 133, 1977
- [50] T. G. Winter, *Phys. Rev. A* 33: 3382, 1986
- [51] Dz. Belkic, *J. Phys. B* 11: 3529, 1978
- [52] D. S. F. Crothers, J. F. McCann, *J. Phys. B* 16: 3229, 1983
- [53] D. S. F. Crothers, *J. Phys. B* 15: 2061, 1982
- [54] R. K. Janev, L. P. Presnyakov, V. P. Shevelko, *Physics of Highly Charged Ions*, Springer Verlag, 1985
- [55] M. L. McKenzie, R. E. Olson, *Phys. Rev. A* 35: 2863, 1987

- [56] R. E. Olson, A. E. Wetmore, M. L. McKenzie, *J. Phys. B* 19: L629, 1986
- [57] D. R. Bates, R. A. Mapleton, *Proc. Phys. Soc.* 87: 657, 1966
- [58] T. Kinoshita, *Phys. Rev.* 105: 1490, 1956
- [59] C. Bunge, *Theo. Chim. Acta* 16: 126, 1970
- [60] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* 115: 1216, 1959;
Phys. Rev. 126: 1470, 1962
- [61] C. L. Kirschbaum, L. Wilets, *Phys. Rev. A* 21: 834, 1980
- [62] V. Mergel, Dissertation, Frankfurt am Main, 1996
- [63] J. Palinkas, R. Schuch, H. Cederquist, O. Gustafsson, *Phys. Rev. Lett.* 22:
2464, 1989
- [64] R. Shingal, C. D. Lin, *J. Phys. B* 24: 251, 1991
- [65] G. Viktor, et al., *J. Phys. B* 28: 3915, 1995
- [66] V. A. Sidorovich, V. S. Nicolaev, J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* 31: 2193, 1985
- [67] R. Gayet, A. Salin, *J. Phys. B* 20: L571-L576, 1987
- [68] R. Gayet, *Journal de Physique*, C1: 53, 1989
- [69] R. Gayet, A. Salin, *subm. to J. Phys. B*, 1989
- [70] I. M. Cheshire, *Proc. Phys. Soc.* 84: 89, 1964
- [71] J. S. Briggs, K. Taulbjerg, *J. Phys. B* 12: 2565, 1979
- [72] S. G. Tolmanov, J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* 62: 032711, 2000
- [73] T. Ishihara, J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* 38: 3310, 1988
- [74] P. Pluvinaige, *Ann. Phys. New York* 5: 145, 1950
- [75] Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin, *Phys. Rep.* 56: 279, 1979
- [76] Dz. Belkic, I. Mancev, V. Mergel, *Phys. Rev. A*: 378, 1996

- [77] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals*, Academic Press, New York, 1965
- [78] Dz. Belkic, *J. Phys. B* 16: 2773, 1983
- [79] Dz. Belkic, *J. Phys. B* 14: 1907, 1981
- [80] E. Oset, L. L. Salcedo, *J. Comput. Phys.* 57: 361, 1985
- [81] L. Opradolce, P. Valiron, R. McCarroll, *J. Phys. B* 16: 2017, 1983
- [82] C. J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, Elsevier Publishing, New York, 1975
- [83] R. Burlisch, J. Stoer, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer Verlag, New York, 1980
- [84] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, B. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Cambridge University Press, Cambridge, 1992
- [85] J. Miraglia, R. Piacentini, R. Rivarola, *Comput. Phys. Comm.* 19: 299, 1980
- [86] A. Salin, *J. Phys. B* 22: 3901, 1989
- [87] R. Dörner et al., *Phys. Rep* 330: 95, 2000
- [88] V. Mergel et al., *Phys. Rev. Lett.* 86: 2257, 2001
- [89] J. Palinkas, R. Schuch, H. Cederquist, O. Gustafsson, *Phys. Rev. Lett.* 63: 2464, 1989
- [90] E. Horsdal, B. Jensen, K. Nielsen, *Phys. Rev. Lett.* 57: 1414, 1986
- [91] G. Bernardi, P. Focke, A. Gonzalez, S. Suarez, D. Fregenal, *J. Phys. B* 32: L451, 1999
- [92] H. C. Brinkmann, H. A. Kramers, *Proc. Akad. Sci.* 33: 973, 1930
- [93] J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* 31: 349, 1928
- [94] R. M. Drisko, *Doktorarbeit*, Carnegie Institute of Technology, 1955
- [95] A. Niehaus, *Comments At. Mol. Phys.* 9: 153, 1980

- [96] M. E. Rudd, T. Jorgensen, Phys. Rev. 131: 666, 1963
- [97] S. Manson, L. Toburen, D. Madison, N. Stolterfoht, Phys. Rev. A 12: 60, 1975
- [98] J. McGuire, N. Berrah, R. Bartlett, J. Samson, J. Tanis, C. Cocke, A. Schlachter, J. Phys. B 28: 913, 1995
- [99] E. Rille et al., Phys. Rev. Lett. 49: 1819, 1982
- [100] M. Shah, P. McCallion, H. Gilbody, J. Phys. B 22: 3077, 1989
- [101] L. D. Dodd, K. R. Greider, Phys. Rev. 146: 675, 1966
- [102] Dz. Belkic, R. McCarroll, J. Phys. B 10: 1933, 1977
- [103] V. D. Rodriguez, Y. D. Wan, C. D. Lin, J. Phys. B 28: L471, 1995
- [104] L. Tribedi, P. Richard, Y. Wang, C. Lin, R. Olson, L. Gulyas, Phys. Rev. A 58: 3626, 1998
- [105] Paul Klee, Über die moderne Kunst, Benteli Verlag, Bern, 1979

Danksagung

Mein persönlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. Reiner Dreizler für die vorbehaltlose Aufnahme in seine Arbeitsgruppe, für seine kontinuierliche Hilfs- und Diskussionsbereitschaft, die mir sehr geholfen hat, die formale Seite der vorliegenden Arbeit zu durchdringen, für die Schaffung eines finanziellen Rahmens, der es mir zum ersten Mal während meiner Studienzzeit erlaubt hat, mich meinem Studium über einen großen Zeitraum hinweg widmen zu können, ohne einer weiteren Erwerbstätigkeit nachgehen zu müssen. Darüberhinaus danke ich ihm ebenso wie Herrn Prof. Dr. Horst Schmidt-Böcking für die Möglichkeit dieses Themengebiet bearbeiten zu können.

Bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Horst Schmidt-Böcking für die fruchtbaren Diskussionen, die mir das Verständnis der experimentellen Seite erleichtert haben. Seine spürbare Faszination für die Physik hat mich sehr motiviert und angeregt.

Meinen besonderen Dank möchte ich Herrn Prof. Dr. Hans Jürgen Lüdde für seine engagierte fachliche und persönliche Unterstützung ausdrücken. Seine freundschaftliche Bereitschaft zur Diskussion sowie seine daraus resultierenden konstruktiven Kommentare haben wesentlich zum Zustandekommen dieser Arbeit beigetragen.

Herr Dr. Hans Jörg Ast hat mich in der Anfangsphase dieser Arbeit bei der Ausarbeitung der thematischen Konzeption begleitet und unterstützt. Dafür möchte ich mich herzlich bei ihm bedanken.

Bei Herrn Prof. Dr. Reinhard Dörner bedanke ich mich für sein Bemühen, die sprachliche Kluft zwischen theoretisch und experimentell forschenden Physikern zu überbrücken.

Herrn Dr. Volker Mergel danke ich für die Überlassung der experimentellen Daten

sowie für seine Einführung in den experimentellen Datenbestand.

Herrn Prof. Dr. Antoine Salin danke ich für die Überlassung des Programmcodes und seine unglaublich schnelle Reaktion bei bezogen auf den Programmcode auftretenden Problemen.

Mein besonderer Dank gebührt meiner Freundin Elke Wagner. Ihr beständiges Interesse an der Physik und ihr stets offenes Ohr hat Misserfolgen die Spitze genommen und die Freude an Erfolgen verstärkt.

Bei Alexander Achenbach bedanke ich mich herzlich für seine Hilfsbereitschaft, was computertechnische Fragestellungen anbetrifft.

Für ihren beharrlichen Einsatz bei der Entdeckung von Fehlern in der Kommasetzung als auch bezüglich der Rechtschreibung danke ich Wolfgang Steingäß, Elke Wagner und Marlene Helmes.

Für ihren Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit und die offene, freundschaftliche Atmosphäre in der Arbeitsgruppe möchte ich mich bei allen Mitgliedern, ehemaligen wie aktuellen, bedanken, sowie bei Edda Vogel, Dr. Pascal Marchaland und Dr. Jimena Diaz-Gorfinkiel.

Ohne die Unterstützung meiner Liebsten wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen. Horst, Max und Gregor gilt mein besonderer Dank, da ihre Gelassenheit, ihr Humor und ihre seelische, sowie lebenspraktische Unterstützung eine Grundlage für diese Arbeit geschaffen hat.

Nicht zuletzt gilt mein Dank meinen Eltern, die durch ihre Hilfestellung und unermüdliche Bestärkung mein Studium ermöglicht haben. Insbesondere danke ich meiner Mutter, die stets in schwierigen Situationen eingesprungen ist und Max betreut hat.

Allen meinen lieben Freunden danke ich sehr für ihre seelische Unterstützung und ihr Verständnis dafür, dass über viele Jahre hinweg so wenig Zeit für sie da war.

Lebenslauf

Barbara Helmes

Geb. am 26.04.1963 in Polch, Kreis Mayen/Koblenz

- 08/1969-07/1972 Grundschule Rohrerhof in Koblenz
- 07/1972-07/1982 Staatliches Hilda-Gymnasium in Koblenz
- 07/1982 Abitur in den Fächern Chemie, Biologie, Englisch und Gemeinschaftskunde
- 04/1983-10/1986 Rheinische Friedrich Wilhelms-Universität Bonn und Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main. Fachbereich Chemie.
- 10/1986-02/1995 Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main. Fachbereich Physik.
- 11/1988 Vordiplom
- 08/1992-08/1993 Diplomarbeit: Anwendung eines diffusiven Lotka-Volterra-Gleichungssystems auf die klimainduzierte Verschiebung von Tundra- und Wald
- 06/1993 Geburt meines Sohnes
- 03/1995 Studienabschluss
- seit 07/1997 Promotionsstudium am Institut für Theoretische Physik der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

Meine akademischen Lehrer waren:

R. Becker, R. M. Dreizler, K. Bethge, Th. Elze, W. Kegel, H. Klein, G. Kohlmaier, R. Kulze, J. Kummer, H. J. Lüdde, W. Martinssen, E. Mohler, W. Pohlit, H. Schmidt-Böcking, D. Schubert, G. Soff