

**Zustandsselektive Untersuchung der
Elektroneneinfangprozesse in hochgeladene Uranionen
durch Nachweis der charakteristischen
Projektilstrahlung**

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

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

von
Andreas Oršić Muthig
aus Hanau

Frankfurt 2004
(DF1)¹

¹(D F 1 : D = Dissertation / F 1 = Bibliothekskennzeichen)

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

Dekan: Prof. Dr. Wolf Aßmus

Gutachter: Prof. Dr. Thomas Stöhlker

Prof. Dr. Horst Schmidt-Böcking

Datum der Disputation: 25. November 2004

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Struktur und Dynamik	5
2.1	Wasserstoffähnliche Systeme	6
2.2	Heliumähnliche Systeme	10
2.3	Quantenmechanische Übergänge	12
2.3.1	Übergangswahrscheinlichkeiten	12
2.3.2	Auswahlregeln	13
2.4	Alignment	16
2.4.1	Winkelverteilung	17
2.4.2	Polarisation	19
2.4.3	Differentielles Alignment	20
2.5	Kaskaden	22
3	Inelastische Stoßprozesse	25
3.1	Strahlender Elektroneneinfang	27
3.1.1	Strahlende Rekombination	29
3.1.2	Dipol-Näherung nach Stobbe	30
3.1.3	Relativistische Theorie	31
3.2	Kinematischer Einfang	33
3.2.1	Klassische Methoden	35
	Thomas-Modell	35

	(<i>n</i>)CTMC	36
3.2.2	Wellenmechanische Methoden	39
	OBK-Näherung	41
	Eikonalnäherung	42
	CDW-Näherung	44
4	Experimenteller Aufbau	47
4.1	Die Beschleunigeranlage	47
4.1.1	Experimentierspeicherring (ESR)	49
4.1.2	Der Elektronenkühler	52
	Elektronenkühlung	52
	Schottkyspektrometrie	53
4.2	ESR-Experimentierplatz	54
4.2.1	Das Überschallgastarget	55
4.2.2	Die Targetkammer	57
	Die Röntgendetektoren	57
	Der segmentierte Röntgendetektor	58
4.2.3	Die Teilchendetektoren	59
4.3	Relativistische Transformationen	60
5	Datenauswertung	63
5.1	Analyse der List-Mode-Daten	63
5.2	Umrechnung der Querschnitte	65
5.3	Berücksichtigung der Kaskade	66
5.4	Kurvenanpassung	67
6	Ergebnisse	69
6.1	Totale Einfangquerschnitte	71
6.2	Röntgenspektren	74
6.3	Anisotropie und Alignment	82
6.4	Einfluß der Kaskade	87

6.5	Multipolmischung	90
6.5.1	Bestimmung der Strukturfunktion	91
6.5.2	Messung des Übergangsamplitudenverhältnisses	96
6.6	Simulation von Grenzkurven	97
6.6.1	Systematische Untersuchung des Alignmenttransfers	97
6.6.2	Entfaltung des Anfangsalignments	99
6.7	Vergleich mit Einfang in U^{91+}	101
6.8	Abschließende Betrachtungen	102
6.9	Zukünftige Entwicklungen	105
6.9.1	Polarisation	105
6.9.2	Zweiphotonenkoinzidenzen	105
7	Zusammenfassung	107
	Anhang A	111
A.1	Bahngeschwindigkeiten	111
A.2	Einfluß der Kaskade	112
A.3	n, ℓ -Verteilung der REC-Querschnitte	112
A.4	Anisotropieparameter	113

Kapitel 1

Einleitung

Den Schwerpunkt dieser Arbeit stellt die Untersuchung von Elektronentransferreaktionen in Stößen zwischen Schwerionen und Targetatomen. Erst moderne Beschleunigeranlagen ermöglichen es, atomphysikalische Wechselwirkungen nicht nur mit leichten Elementen zu studieren, sondern Untersuchungen von Reaktionsvorgängen mit den schwersten zur Verfügung stehenden Projektilen zu betreiben. Durch den Einsatz von schweren Projektilen in sehr hohen Ladungszuständen, wie beispielsweise vollständig ionisiertes Uran, eröffnet sich die Möglichkeit, den Einfluß relativistischer und quantenelektrodynamischer Effekte in sehr starken Feldern auf die Struktur und Dynamik atomarer Prozesse zu studieren [EM95, War03]. So erfährt beispielsweise das K -Schalenelektron im wasserstoffähnlichen Uran eine elektrische Feldstärke von $2 \cdot 10^{16}$ V/cm im Vergleich zu $1 \cdot 10^{10}$ V/cm beim atomaren Wasserstoff [SBG98]. Diese hohe Feldstärke führt im Hinblick auf die Struktur dieses Systems zu einem deutlichen Einfluß von relativistischen Effekten auf die Bindungsenergien. Aufgrund der daraus resultierenden starken Feinstrukturaufspaltung kann erstmals für schwere Ionen der Einfangprozeß zustandsselektiv nach (n, ℓ, j) untersucht werden; durch Auswertung der Winkelverteilung der $\text{Ly}\alpha$ -Strahlung sogar m_j -spezifisch für den Einfang in das $2p_{3/2}$ -Niveau. Das Spektrum der dabei untersuchten Prozesse deckt sehr unterschiedliche Vorgänge ab. Denn neben dem – sehr elementaren – Übergang eines einzelnen Elektrons können auch mehrere Elektronen bei der Wechselwirkung übertragen werden. Alternativ dazu können auch Reaktionen wie Anregung oder Ionisation stattfinden.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Messungen zum Elektroneneinfang in hochgeladene, sehr schwere Projektilionen vorgestellt. Durch Untersuchung der Emissionscharakteristik der bei diesen Prozessen emittierten

Röntgenquanten sollen Informationen über die Dynamik der Besetzungsprozesse gewonnen werden. Dazu wurden am Experimentierspeicherring ESR der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) gespeicherte hochgeladene Uranionen mit einem Überschallgastarget in Wechselwirkung gebracht. Der Nachweis des Elektroneneinfangs erfolgte durch Spektroskopie der in diesem Prozeß emittierten Röntgenstrahlung. Durch eine Analyse der Winkelabhängigkeit der Emission dieser Strahlung wurden (n, ℓ, j, m_j) -zustandsselektive Informationen über die Vorgänge während respektive nach der Wechselwirkung gewonnen. Die Untersuchung der Einfangprozesse bezüglich der magnetischen Unterzustände ist von großer Wichtigkeit, da die m_j -differentiellen Wirkungsquerschnitte besonders sensitiv auf die theoretische Beschreibung sind. Hier sei zudem eine weitere Besonderheit der durchgeführten Untersuchungen erwähnt: die Abbremsung der nackten Uranionen auf Energien, die weit von der Gleichgewichtsenergie für U^{92+} entfernt sind. Dies ermöglichte die Untersuchung der Einfangprozesse im Bereich extremer Störung, der normalerweise dem Experiment nicht zugänglich ist. Während bei Röntgenübergängen in leichten Systemen nahezu ausschließlich elektrische Dipolstrahlung beobachtet wird, spielen bei hohen Kernladungen höhere Multipolübergänge eine zunehmend wichtige Rolle. Ohne deren Berücksichtigung können die experimentellen Ergebnisse nur unzureichend interpretiert werden.

Bei energiereichen atomaren Stößen zwischen hochgeladenen Schwerionen und leichten Targetatomen findet eine Vielzahl von Einfangprozessen statt. Den wesentlichen Beitrag liefern die Prozesse des strahlenden und des strahlungslosen Elektroneneinfangs, REC¹ und NRC². In Schwerionenstößen bei sehr viel höheren Energien gewinnt die Elektron-Positron-Paarbildung große Bedeutung, diese wird in dieser Arbeit nicht untersucht. Der Elektroneneinfang bei schnellen Stößen zwischen nackten, hochgeladenen Ionen und niedriggeladenen Targetatomen ist dominiert vom radiativen Elektroneneinfang REC, der Zeitumkehrung des Photoeffekts. Dieser wurde theoretisch schon in den dreißiger Jahren des letzten Jahrhunderts von M. Stobbe [Sto30] und F. Sauter [Sau32] studiert. Stobbe [Sto30] berechnete den Prozeß der radiativen Rekombination in einer nichtrelativistischen Dipolnäherung unter Anwendung des Prinzips des detaillierten Gleichgewichts. Sauter führte dann die erste relativistische Berechnung durch [Sau32]. Die ersten Messungen zum radiativen Elektroneneinfang datieren deutlich jünger. Raisbeck und Yiou [RY71], Schnopper *et al.* [SBD72], und Kienle *et al.* [KKP73] fanden

¹RADIATIVE ELECTRON CAPTURE

²NONRADIATIVE ELECTRON CAPTURE

erste experimentelle Hinweise für diesen Prozeß. Nach diesen ersten Beobachtungen rückte der radiative Elektroneneinfang in den Mittelpunkt sowohl experimenteller als auch theoretischer Untersuchung. Bei den anfänglich untersuchten Stoßsystemen mit relativ kleinen Projektilordnungszahlen fallen relativistische Effekte noch nicht ins Gewicht. Erst die Untersuchung dieses Prozesses an dem Experimentierspeicherring der GSI durch Stöhlker *et al.* [SKM95, SLB99] konnte in den Bereich hoher Kernladungszahlen vordringen. Bei geringeren Geschwindigkeiten spielt der strahlungslose Elektroneneinfang die wichtigste Rolle. Dieser ist aufgrund seiner Mehrkörpurnatur ein bei weiterem komplizierterer Umladungsmechanismus als der radiative Einfang. Aufgrund dieser Komplexität ist im allgemeinen die Beschreibung der experimentellen Daten nur unzureichend. Die Erforschung dieses Prozesses geht auf die Frühzeit der Quantenmechanik zurück. Der kinematische Einfang wurde schon in den zwanziger Jahren von Thomas [Tho27], Oppenheimer [Opp28] und von Brinkman und Kramers [BK30] beschrieben.

Eine der ersten Veröffentlichungen über die Umladung von α -Teilchen wurde von Henderson 1923 publiziert [Hen23]. Zahlreiche Messungen an unterschiedlichen Stoßsystemen wurden seitdem durchgeführt, exemplarisch seien hier für Messungen an schwereren Systemen Meyerhof *et al.* [MAE85], für Messungen an einer EBIT Prior *et al.* [PHS93] und für COLTRIMS-Messungen Cocke *et al.* [AWW98] genannt. Durch die Messung des Q-Wertes mittels Rückstoßionenimpulsspektroskopie können (n, ℓ, j) -differentielle Untersuchungen vorgenommen werden; Informationen über die magnetischen Unterzustände sind aufgrund deren energetischer Entartung durch Q-Wertmessungen nicht zugänglich.

Da bei abnehmender Stoßenergie die Stärke der Störung, die das hochgeladene Ion für das Target darstellt, stark zunimmt, stellt die Beschreibung dieser Systeme eine große Herausforderung an die Theorie dar. Neben diesem Grundlagenaspekt haben diese Untersuchungen eine große Bedeutung für den Betrieb von Schwerionenbeschleunigeranlagen. Auch bei der Planung und Durchführung von Experimenten, speziell bei dem Betrieb des Gastargets, müssen die Strahllebensdauern und Umladungsraten bekannt sein.

Durch die starke Geschwindigkeitsabhängigkeit der Elektroneneinfangwahrscheinlichkeit spielt dieser Prozeß eine wichtige Rolle beim Abbremsen hochgeladener Ionenstrahlen und bei deren Transport.

In den Kapiteln zwei und drei dieser Arbeit werden die grundlegende atomare Struktur und radiative Übergänge hochgeladener Schwerionen sowie die Stoßdynamik der Rekombinationsprozesse REC und NRC vorgestellt. Zuerst wird die Besonderheit der Atomphysik starker Felder diskutiert. Sie

erfordert neben der Notwendigkeit einer relativistischen Beschreibung dieser quantenmechanischen Systeme auch die Berücksichtigung quantenelektrodynamischer Beiträge. Neben den Bindungsenergien werden die Lebensdauern angeregter Zustände und der Übergang von der LS -Kopplung der Drehimpulse zur jj -Kopplung erläutert. Dies ist Voraussetzung zum Verständnis der beobachtbaren charakteristischen Strahlung. Im folgenden ist die Stoßdynamik näher erläutert, was die Prozesse des radiativen und des strahlungslosen Elektroneneinfangs umfaßt; hierbei werden die Methoden zu deren theoretischer Beschreibung eingeführt.

Im vierten Kapitel wird der Aufbau des Experiments an der Experimentieranlage ESR der GSI beschrieben. Diese Anlage ist die weltweit einzige, die in der Lage ist, hochgeladene Schwerionen für Strukturuntersuchungen und Stoßexperimente zur Verfügung zu stellen.

Die Kinematik der Emission aus bewegten Projektilen wird diskutiert. Aufgrund der hohen Geschwindigkeit des Emittersystems kommt es zum Dopplereffekt, das heißt, daß im Laborsystem je nach Beobachtungswinkel eine Rot- respektive Blauverschiebung der Strahlung festgestellt wird. Darüberhinaus unterliegen der Emissionswinkel und der Raumwinkel einer relativistischen Transformation.

Die Erläuterung der Vorgehensweise bei der Datenauswertung erfolgt in Kapitel 5. Das verwendete Analyseprogramm, die Berücksichtigung von Kaskadenprozessen und die Kurvenanpassung werden vorgestellt.

Eine ausführliche Diskussion aller gewonnenen Informationen findet sich in Kapitel 6. Neben den totalen Wirkungsquerschnitten werden die Röntgenspektren wasserstoffartiger Uranionen gezeigt und interpretiert. Der zentrale Punkt der Untersuchung ist die nichtstatistische Besetzung der magnetischen Unterzustände des $2p_{3/2}$ -Niveaus, das sogenannte „Alignment“. Die Beeinflussung dieser Größe durch die Zerfallskaskade wird eingehend untersucht. Die verbleibende Diskrepanz zwischen Vorhersage und Messung kann durch die Berücksichtigung von Strahlungsbeiträgen höherer Multipolordnung erklärt werden. Dies deckt den Einfluß dieser bisher unterschätzten Interferenzeffekte auf. Durch die Verwendung abgebremster Ionenstrahlen im ESR mit dort bisher unerreicht kleinen Geschwindigkeiten ist es möglich gewesen, den kinematischen Einfang von Elektronen in hochgeladene schwere Ionen zu studieren. Hierbei zeigt sich eine starke Abweichung in der Drehimpulsabhängigkeit der Einfangquerschnitte von der, die vom strahlenden Elektroneneinfang bekannt ist.

In dem abschließenden siebten Kapitel sind die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefaßt dargestellt.

Kapitel 2

Struktur und Dynamik schwerer, hochgeladener Ionen

In den folgenden Abschnitten wird die atomare Struktur von wasserstoff- und heliumähnlichen Schwerionen erläutert. Danach werden die den atomaren Übergängen zugrundeliegenden Auswahlregeln und Übergangswahrscheinlichkeiten eingeführt. Anschließend wird das sogenannte „Alignment“ behandelt, das heißt die Abweichung von statistisch gleichverteilten Besetzungswahrscheinlichkeiten der magnetischen Unterzustände. Als Abschluß des Kapitels werden die Kaskaden beschrieben, die bei einem Zerfall angeregter Zustände auftreten. Die angeregten Zustände können dabei aus einem radiativen Einfangprozeß (REC), Abschnitt 3.1, oder aus strahlungslosem Elektroneneinfang (NRC), Abschnitt 3.2, stammen oder aus einer Coulombanregung resultieren.

Wichtige charakterisierende Größen eines Atoms sind in erster Linie die Bindungsenergien der Hüllenelektronen und die Lebensdauern angeregter Zustände. Nach Bohr hängen die Bindungsenergien eines wasserstoffartigen Ions, abgesehen von dessen Ordnungszahl Z , nur von der Hauptquantenzahl n ab. Schon früh fiel auf, daß die beobachteten Bindungsenergien von dieser einfachen Formel nicht korrekt wiedergegeben werden. Die korrekte Formulierung erfolgt durch die Quantenelektrodynamik, die sowohl relativistische als auch feldtheoretische Aspekte abdeckt. Leichte Systeme wurden mit einer außerordentlich hohen Präzision von $2 \cdot 10^{-14}$ vermessen [NHR00] und bestätigen die theoretischen Vorhersagen. Beim Übergang zu sehr schweren Systemen, bei denen das Produkt $Z\alpha$ ($\alpha = 1/137,036$ ist die Feinstrukturkonstante) in die Größenordnung von 1 gelangt, stößt die bei leichten Systemen bewährte Reihenentwicklung in Potenzen von $Z\alpha$ an ihre (Konvergenz-)Grenzen.

Durch die extremen Felder bei hohen Kernladungszahlen ändert sich auch die atomare Dynamik. Werden die Zerfallsprozesse angeregter Zustände in Schwerionen betrachtet, so treten hier, verglichen mit leichten Systemen, Übergänge höherer Multipolordnung verstärkt auf.

2.1 Wasserstoffähnliche Systeme

Die elektronischen Bindungsenergien in wasserstoffähnlichen Ionen in Abhängigkeit von der Kernladungszahl Z und der Hauptquantenzahl n werden durch die seit Anfang des letzten Jahrhunderts bekannte Rydberg-Formel

$$E_B(n) = -\text{Ry} \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.1)$$

beschrieben, wobei $\text{Ry} \approx 13.6\text{eV}$ die Rydbergkonstante ist. Aus der Gleichung (2.1) ist ersichtlich, daß die Bindungsenergie nur von der Hauptquantenzahl n abhängt. Die ebenfalls zur Beschreibung des Wasserstoffatoms dienende Quantenzahl des Drehimpulses ℓ ($\ell = 0, \dots, n-1$) und deren Projektionsquantenzahl m_ℓ ($m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$) haben in dieser einfachen Beschreibung keinen Einfluß auf die Bindungsenergie. Die Entartung nach ℓ ist begründet durch die $(1/r)$ -Abhängigkeit des Coulombpotentials (Fock-Symmetrie). Die Zentralsymmetrie des Problems liefert eine zusätzliche Entartung nach m_ℓ . Mit diesem Ansatz kann die beim Wasserstoffatom experimentell beobachtete Feinstrukturaufspaltung nicht erklärt werden. Erst durch die Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung in der theoretischen Beschreibung wird diese Entartung aufgehoben. Hierzu ist es notwendig, den Elektronenspin \vec{s} einzuführen, welcher in der nichtrelativistischen Quantenmechanik nicht enthalten ist. Damit läßt sich unter Verwendung von zusätzlichen Spin-Bahn-Wechselwirkungstermen, Darwin-Term und einer ersten relativistischen Korrektur die Feinstruktur erklären, wenngleich dies als ein *ad hoc* Ansatz angesehen werden kann.

Im Rahmen der Dirac-Formulierung, das heißt der relativistischen Beschreibung quantenmechanischer Systeme [Stö98], ergibt sich der Spin des Elektrons zwangsläufig. Hier wird die Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses \vec{j} als sogenannte „gute“ Quantenzahl herangezogen. Der Gesamtdrehimpuls \vec{j} ist definiert als die Summe aus Bahndrehimpuls $\vec{\ell}$ und Spin \vec{s}

$$\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s} \quad (2.2)$$

Für $|j|$ ergeben sich bei wasserstoffähnlichen Systemen die möglichen Werte $\ell \pm \frac{1}{2}$. Die Projektionsquantenzahl m_j läuft dabei von $-j \dots j$ und kann $2j+1$

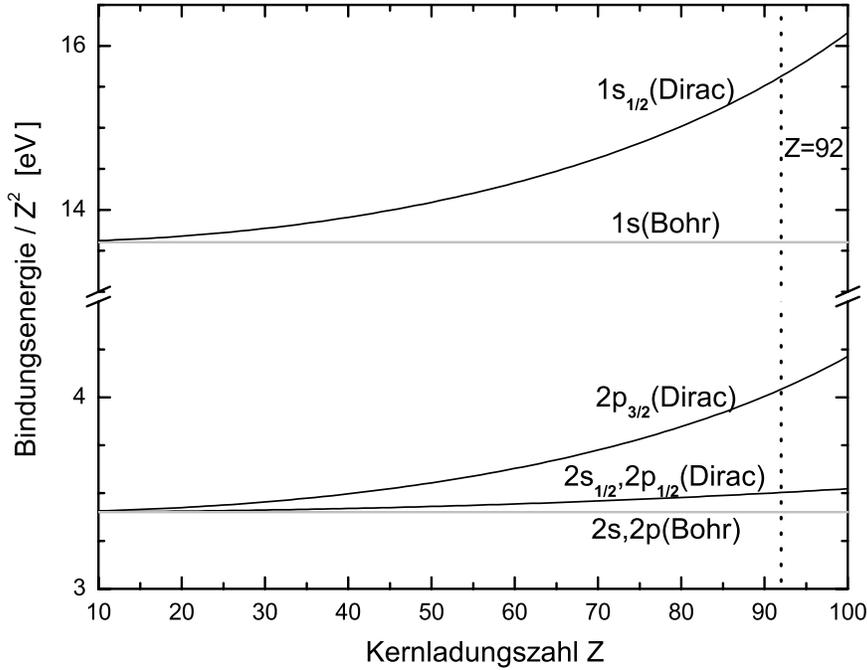


Abbildung 2.1: Bindungsenergien in Abhängigkeit der Kernladungszahl Z . Die grauen Kurven entsprechen den nichtrelativistischen Werten, die schwarzen Kurven sind Werte aus der relativistischen Beschreibung nach Dirac. Für das in dieser Arbeit untersuchte U^{91+} -Ion wird die starke Abweichung von der Bohrschen Energieformel durch die punktierte vertikale Linie hervorgehoben.

unterschiedliche Werte annehmen.

Aus der Dirac-Theorie unter der vereinfachenden Annahme eines unendlich schweren Kerns ergeben sich die Energieeigenwerte eines wasserstoffähnlichen Atoms:

$$E_{n,j} = m_0 c^2 / \sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - |j + 1/2| + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2}, \quad (2.3)$$

wobei Z die Kernladungszahl, m_0 die Ruhemasse des Elektrons, c die Lichtgeschwindigkeit und α die Feinstrukturkonstante ist.

Die Entartung der Bindungsenergie bezüglich unterschiedlicher Drehimpulse, die noch in der nichtrelativistischen Formulierung vorhanden war, ist in der relativistisch korrekten Beschreibung aufgehoben. Zustände mit unterschiedlichem Bahndrehimpuls ℓ , aber gleichem Gesamtdrehimpuls j weisen die gleiche Bindungsenergie auf (siehe Abbildung 2.1). Dies steht im Widerspruch zu den experimentellen Beobachtungen. Willis E. Lamb und Robert

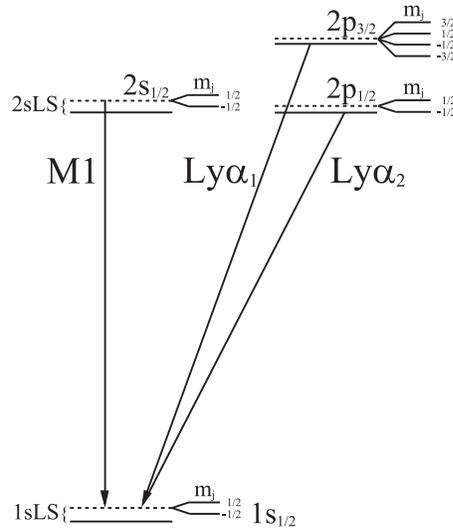


Abbildung 2.2: Das Termdiagramm der niedrigsten Niveaus eines wasserstoffähnlichen Uranions, wie es aus der Dirac-Theorie folgt. Die Lambverschiebungskorrekturen (LS) sind gestrichelt eingezeichnet (nicht maßstäblich), die magnetischen Unterzustände sind ebenfalls eingezeichnet (diese sind energetisch entartet und nur aus Gründen der Anschaulichkeit gespreizt dargestellt).

C. Retherford stellten in ihren wegweisenden Experimenten fest, daß die beiden Niveaus $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ um etwa 1000 MHz aufgespalten sind [LR47]. Diese Energiedifferenz wird als Lambverschiebung oder Lamb shift (LS) bezeichnet. Abbildung 2.2 zeigt das Termdiagramm eines wasserstoffartigen Ions, die Lamb-Verschiebung ist ebenfalls eingezeichnet. Kurze Zeit nach Veröffentlichung dieser Beobachtung wurde von Hans A. Bethe eine erste theoretische Erklärung durch Abschätzung der Selbstenergiekorrekturen publiziert [Bet47].

Übergang	M1	Ly α_2	Ly α_1
	$2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$
Energie	97686 eV	97610 eV	102173 eV

Tabelle 2.1: Energie der Röntgenphotonen, welche aus den Übergängen von der L- in die K-Schale im wasserstoffähnlichen Uran stammen [Stö98].

Die Aufhebung der j -Entartung kann durch die Einführung radiativer Korrekturen (Selbstenergie, Vakuumpolarisation) und Berücksichtigung von Kerneffekten erklärt werden.

Die Selbstenergie kann man anschaulich dadurch erklären, daß das gebundene Elektron ein virtuelles Photon emittiert und anschließend reabsorbiert. Während des kurzen durch die Heisenbergsche Unschärferelation ermöglichten Zeitintervalls kann sich das Elektron in einem beliebigen Energiezustand („off-shell“) befinden. Hierdurch ändert sich die Stärke der Wechselwirkung mit dem Atomkern und es resultiert eine effektive Lockerung der Bindungsenergie.

Zur Erklärung der Vakuumpolarisation nimmt man an, daß in dem starken Feld des Atomkerns kurzzeitig virtuelle Elektron-Positron-Paare entstehen und vergehen. Dieser Polarisationseffekt führt zu einer stärkeren Bindung des Elektrons.

Die Eigenschaften des Atomkerns wie Masse, Ausdehnung und Struktur tragen ebenfalls zur Änderung der Bindungsenergie der Elektronen bei, vor allem bei zunehmender Kernladungszahl. Die endliche Masse des Kerns schlägt sich in der *reduzierten Masse* nieder, die relativistisch korrekt von Artemyev, Shabaev und Yerokhin [ASY95] berechnet wurde. Der Einfluß der endlichen Ausdehnung des Kerns rührt von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit her, die das gebundene Elektron im Innern des Kerns hat. Berechnungen, die den mittleren quadratischen Radius eines sphärisch symmetrischen Kerns mit einbeziehen, werden in [PS99] vorgestellt. Darüber hinausgehend ergeben sich noch weitere Korrekturen, wenn man berücksichtigt, daß der Kern nicht strukturlos ist. Der Überlapp der Elektronenwellenfunktion mit dem Kern kann zur Anregung dessen innerer Freiheitsgrade führen. Die daraus entstehende Energieverschiebung (Reduzierung der Bindungsenergie) wird als Kernpolarisation (nuclear polarization) bezeichnet [PS95].

Der Betrag der Lambverschiebung ΔE_{LS} läßt sich durch folgende Gleichung ausdrücken [JS85]:

$$\Delta E_{LS} = \frac{\alpha (Z\alpha)^4}{\pi n^3} \cdot \mathcal{F}(Z\alpha) \cdot mc^2, \quad (2.4)$$

mit der nur schwach mit Z variierenden Korrekturfunktion \mathcal{F} . An dieser Formel läßt sich die starke Z -Abhängigkeit ($\sim Z^4$) der Korrekturen ablesen. Mit dieser Korrektur ergeben sich für die später näher untersuchten Übergänge $L \rightarrow K$ die in Tabelle 2.1 aufgeführten Werte.

Im allgemeinen werden die Übergänge in die K -Schale als *Lyman*-Serie bezeichnet. Erfolgt der Übergang aus der L -Schale, so spricht man von $\text{Ly-}\alpha$ -Übergängen; dementsprechend bezeichnet man mit $\text{Ly-}\beta, \gamma, \dots$ einen

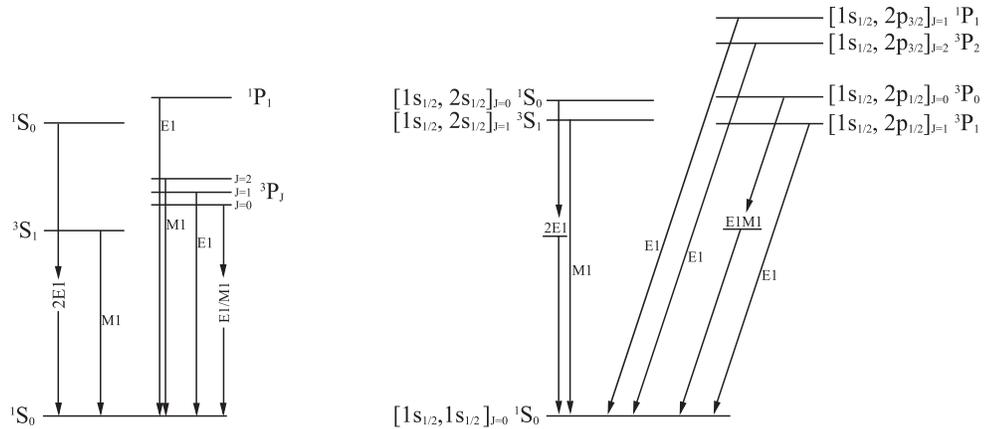


Abbildung 2.3: Das Termdiagramm eines heliumähnlichen Ions der Hauptquantenzahl $n = 1, 2$, im linken Teil für Helium, rechts für ein Schwerion.

Übergang aus der M, N, \dots -Schale. Ähnlich erfolgt die Namensbildung für Übergänge in die L -Schale, die als *Balmer-Serie* bezeichnet werden.

2.2 Heliumähnliche Systeme

Im Unterschied zu den zuvor diskutierten wasserstoffähnlichen Systemen tritt bei der Beschreibung heliumähnlicher Ionen als den einfachsten mehrelektronischen Systemen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf. Das Schema der Energieniveaus heliumähnlicher Ionen besteht aus zwei unabhängigen Termen: Singulett und Triplett. Diese unterscheiden sich in der Art, wie die Einzeldrehimpulse zum Gesamtdrehimpuls zusammengesetzt werden. In Abbildung 2.3 ist das Termschema der niedrigstgelegenen Zustände abgebildet. Im linken Teil ist das Niveaudiagramm für ein leichtes Ion (LS -Kopplung) abgebildet, rechts für ein schweres Ion wie beispielsweise U^{90+} , bei dem die jj -Kopplung der Drehimpulse angewendet werden muß. Deutlich wird hier die völlig veränderte Struktur.

Die einzelnen Drehimpulse koppeln zu einem Gesamtdrehimpuls \vec{J} ; die dabei auftretenden unterschiedlichen Kopplungstypen werden bezeichnet als:

- *LS-Kopplung* oder *Russel-Saunders-Kopplung*: Diese tritt auf, wenn die elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen größer ist als die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Es werden zunächst die Bahndrehimpulse zu einem Gesamtbahndrehimpuls \vec{L} addiert, analog wird der Gesamtspin \vec{S} gebildet. Der Gesamtdrehimpuls ergibt sich dann durch

Kopplung von \vec{L} und \vec{S} : $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Diese Art der Kopplung tritt bei leichten Elementen auf, das heißt bei kleinen Kernladungszahlen.

- *jj-Kopplung* wird benutzt, um die Situation im Bereich hoher Ordnungszahlen zu beschreiben. Hier ist die elektrostatische Wechselwirkung kleiner als die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Es werden Bahndrehimpuls und Spindrehimpuls jedes Elektrons addiert ($\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$), der Gesamtdrehimpuls entspricht dann der Summe $\vec{J} = \sum \vec{j}_i$.
- *Intermediäre Kopplung*: Diese Art von Kopplung ist im Übergangsbereich von leichten zu schweren Elementen anzutreffen. Das bedeutet, daß sowohl *LS*- als auch *jj*-Kopplung niemals in reiner Form auftreten; also hat die Kopplung bei kleinem Z vorwiegend *LS*-Charakter, bei Schwerionen überwiegend *jj*-Eigenschaften.

Die Bezeichnung der Zweielektronenzustände erfolgt durch die Angabe der beiden Elektronenzustände $n_i \ell_i j_i$, gefolgt von Multiplizität $2S + 1$, Bahndrehimpuls L und Gesamtdrehimpuls J : $[n_1 \ell_{1j_1}, n_2 \ell_{2j_2}]_J^{2S+1} L_J$

Der Grundzustand, in dem sich beide Elektronen in der $1s$ -Schale befinden, wird demnach mit $[1s_{1/2}, 1s_{1/2}]_{J=0}^1 S_0$ bezeichnet. Die ersten angeregten Zustände, bei denen sich ein Elektron im $1s_{1/2}$ -Niveau befindet und das andere in einem $n = 2$ -Zustand ist, sind: $[1s_{1/2}, 2s_{1/2}]_{J=0}^1 S_0$, $[1s_{1/2}, 2s_{1/2}]_{J=1}^3 S_1$. Im Gegensatz zur Beschreibung wasserstoffähnlicher Systeme, für die die Diracgleichung exakt gelöst werden kann, ist es bei der Zweiteilchenproblematik der heliumähnlichen Systeme nicht möglich, eine exakte analytische oder numerische Lösung zu finden. Zur näherungsweise Lösung kommen verschiedene Verfahren zur Anwendung. Bei schweren Systemen werden beispielsweise störungstheoretische Ansätze oder MCDF¹-Rechnungen verwendet.

Die Stärke der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen ist der Kernladungszahl Z proportional, die Spin-Bahn-Wechselwirkung skaliert hingegen mit Z^4 . Dies führt dazu, daß das Termschema heliumartiger Ionen bei hohen Kernladungszahlen Z durch *jj*-Kopplung beschrieben wird, siehe hierzu Abschnitt 2.2.

Im Falle relativistischer mehrelektronischer Systeme kommt zur Coulombwechselwirkung noch die Breit-Wechselwirkung hinzu, welche die Strom-Strom-Wechselwirkung zwischen bewegten Ladungen sowie die Retardierung berücksichtigt.

¹MULTI CONFIGURATION DIRAC FOCK

2.3 Quantenmechanische Übergänge

Die beobachtbare charakteristische Strahlung eines bestimmten Elements resultiert aus strahlenden elektronischen Übergängen zwischen den möglichen Zuständen des Ions. Die Energie der Strahlung ist durch die Differenz der Energien von Anfangs- und Endzustand gegeben:

$$\omega_{i \rightarrow f} = (E_i - E_f)/\hbar \equiv ck \quad . \quad (2.5)$$

2.3.1 Übergangswahrscheinlichkeiten

Die Art der radiativen Übergänge zwischen zwei atomaren Energieniveaus teilt sich in zwei Typen: zum einen elektrische Multipolübergänge $\mathbf{E}\kappa$ der Ordnung κ , zum anderen magnetische Multipolübergänge $\mathbf{M}\kappa$. Bei einem elektrischen Multipolübergang trägt das Photon den Drehimpuls $\hbar\kappa$ und besitzt die Parität $(-1)^\kappa$, bei einem magnetischen Multipolübergang hat das Photon ebenfalls den Drehimpuls $\hbar\kappa$ aber die Parität $(-1)^{\kappa+1}$.

Die grundlegende Formel für die Wahrscheinlichkeit dA des Übergangs vom Zustand $|i\rangle$ nach $|f\rangle$ unter Emission eines Photons in das Raumwinkelement $d\Omega$ ist gegeben durch [BKS97]:

$$dA = \frac{e^2\omega}{2\pi\hbar c} |\langle f | \alpha \epsilon e^{-i\vec{k}\vec{r}} | i \rangle|^2 d\Omega \quad (2.6)$$

mit dem Impuls \vec{k} , der Wellenzahl ω und dem Polarisationsvektor ϵ des Photons aus dem Übergang $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$.

In den Fällen, in denen für den Exponenten $\vec{k} \cdot \vec{r}_i \ll 1$ gilt, läßt sich die Entwicklung der Exponentialfunktion (die sogenannte Retardierung [SBB79])

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} = 1 - i\vec{k} \cdot \vec{r}_i + \dots \quad (2.7)$$

nach dem ersten Glied abbrechen. Dies ist insbesondere bei leichten Elementen eine hervorragende Näherung, die auch als „nichtrelativistische elektrische Dipolnäherung“ (Abschnitt 2.3.2) bezeichnet wird. Man erhält damit die Übergangswahrscheinlichkeit für einen $\mathbf{E1}$ -Übergang

$$A = \frac{4}{3} \frac{e^3\omega^3}{c^2} |\langle f | \vec{r} | i \rangle|^2 \quad . \quad (2.8)$$

Für Übergänge in den Grundzustand sehr schwerer Ionen ist diese Näherung nicht mehr zur Beschreibung geeignet, ist doch die Photonenenergie (und

damit auch \vec{k}) um den Faktor Z^2 größer, die typische Ausdehnung der Wellenfunktion wird aber nur um den Faktor Z kleiner. Bricht man die Entwicklung der Exponentialfunktion nicht nach dem ersten Term ab, so erhält man Strahlung höherer Multipolarität.

Für die Übergangswahrscheinlichkeiten in wasserstoffartigen Ionen lassen sich die folgenden Skalierungen angeben [MM78]:

- $A_{\mathbf{E}\kappa} \sim \alpha(Z\alpha)^{2\kappa+2} mc^2 / \hbar$
- $A_{\mathbf{M}\kappa} \sim \alpha(Z\alpha)^{2\kappa+4} mc^2 / \hbar$.

Eine Ausnahme stellt der „*verbotene*“ magnetische Dipolübergang (**M1**) dar; für diesen gilt (für $\Delta n \neq 0$):

- $A_{\mathbf{M1}} \sim \alpha(Z\alpha)^{10} mc^2 / \hbar$.

Wie man an diesen Skalierungsgesetzen sehen kann, ist für schwere Elemente eine deutliche Zunahme der Intensität der Multipolstrahlung höherer Ordnung zu erwarten.

Die relativen Verhältnisse der Übergangsraten skalieren demnach mit Potenzen von $(Z\alpha)$; ist der erste erlaubte Übergang vom Typ **E1**, so ist der nächstmögliche vom Typ **M2** mit einer um $(Z\alpha)^4$ schwächeren Intensität. Der darauffolgende **E3**-Übergang hat wiederum die gleiche Intensität wie der magnetische Quadrupolübergang.

2.3.2 Auswahlregeln

Die Auswahlregeln für atomare Übergänge geben die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein bestimmter Übergang aufgrund der Symmetrieeigenschaften von Anfangs- und Endzustand stattfindet. Man unterscheidet zwischen elektrischen (**E κ**) und magnetischen (**M κ**) Übergängen in den verschiedenen Multipolordnungen κ . Ein wichtiger Punkt ist die Parität und deren Erhaltung bei elektromagnetischen Übergängen. Die Parität P spiegelt die Symmetrie einer Wellenfunktion wider und hat als ein rein quantenmechanisches Konzept kein klassisches Analogon. Weist die in einem Übergang emittierte Strahlung eine *gerade* Parität auf, so darf sich bei diesem Übergang die Parität des Emitters *nicht* ändern; ist die Parität der Strahlung *ungerade*, so *muß* sich die Parität des Emitters ändern.

Im **allgemeinen** lauten die Auswahlregeln für Übergänge der Multipolarität κ [BKS97]:

$$\begin{aligned} \Delta P &= \begin{cases} (-1)^\kappa & \text{für } \mathbf{E}\kappa\text{-Übergänge} \\ (-1)^{\kappa+1} & \text{für } \mathbf{M}\kappa\text{-Übergänge} \end{cases} \\ \Delta J &= 0, \pm 1, \dots, \pm \kappa, \quad J + J' \geq \kappa \\ \Delta M &= 0, \pm 1, \dots, \pm \kappa, \end{aligned} \quad (2.9)$$

wobei die Hauptquantenzahl n keinen Einschränkungen unterliegt.

Im folgenden werden die niedrigsten Übergänge in wasserstoffartigen Systemen ausführlicher besprochen. Diese sind für die Untersuchungen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, von großer Wichtigkeit.

- Für einen Übergang $np_{3/2} \rightarrow n's_{1/2}$ (wie beispielsweise $\text{Ly}\alpha_1$) gilt, daß $\Delta P = -1$ ist; somit muß κ für elektrische Übergänge ungerade, für magnetische Übergänge gerade sein. Mit $J + J' = 2 \geq \kappa$ folgt $\kappa = 1, 2$; also sind **E1**- und **M2**-Übergänge möglich.
- Für den $\text{Ly}\alpha_2$ -Übergang $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ gilt:

$$\left. \begin{array}{l} \Delta P = -1 \\ \kappa \leq 1 = J + J' \end{array} \right\} \text{ nur } \mathbf{E1}\text{-Übergang erlaubt.}$$

Die Photonen weisen bei diesem $j = 1/2$ nach $j = 1/2$ Übergang eine isotrope Winkelverteilung auf.

- Im Falle des Übergangs $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ gilt $\Delta P = 1$, mit $J + J' = 1 \geq \kappa$ folgt $\kappa = 1$, und somit ist der einzig erlaubte Übergang der **M1**-Übergang. Dieser magnetische Dipolübergang ist bei U^{91+} nur 76 eV von der $\text{Ly}\alpha_2$ -Linie entfernt und kann experimentell aufgrund des Auflösungsvermögens der verwendeten Detektoren nicht von dieser Linie getrennt werden.

Da es sich auch um einen Übergang von ($j = 1/2$) nach ($j = 1/2$) handelt, emittiert dieser ebenfalls isotrop. Somit ist die Emissionscharakteristik der Linie, die sich aus $\text{Ly}\alpha_2$ - und **M1**-Übergang zusammensetzt, ebenfalls isotrop. Eine Besonderheit im Bereich hoher Kernladungszahlen ist, daß es überhaupt möglich ist, diesen Übergang zu beobachten, da er doch als ($\Delta l = 0$)-Übergang nicht erlaubt ist. Im Wasserstoffatom ist dieser Zustand *metastabil* und kann nur durch Emission von zwei Photonen zerfallen (**2E1**-Übergang).

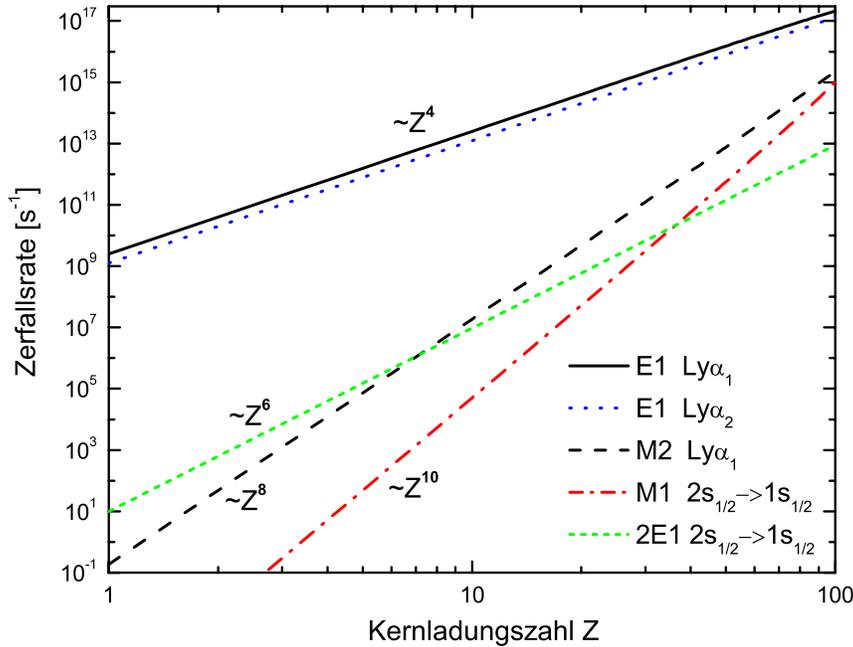


Abbildung 2.4: Zerfallsraten der $(n = 2)$ nach $(n = 1)$ -Übergänge aufgeschlüsselt nach Multipolaritäten, summiert über alle erlaubten Quantenzahlen m_j . Dominierend sind die elektrischen Dipolübergänge der $\text{Ly}\alpha_1$ - und $\text{Ly}\alpha_2$ -Strahlung. Mit wachsender Kernladungszahl nimmt die relative Bedeutung des Zweiphotonenzerfalls $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ und der magnetischen Quadrupolstrahlung der $\text{Ly}\alpha_1$ -Strahlung zu. Noch stärker ist die Zunahme bei dem magnetischen Dipolübergang $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$.

Eine weitere wichtige Eigenschaft dieser Übergänge ist die in Abschnitt 2.3.1 angegebene Skalierungseigenschaft der Übergangsraten [MM78]. Für den **2E1**-Übergang weist die Rate eine Z^6 -Abhängigkeit auf, während die **M1**-Rate mit Z^{10} skaliert. Damit spielen im Bereich hoher Kernladungszahlen auch Übergänge höherer Multipolarität verstärkt eine Rolle, wie in Abbildung 2.4 deutlich wird. Die Graphik zeigt die Zerfallsraten der $(n = 2) \rightarrow (n = 1)$ -Übergänge. Der Übergang von $2s_{1/2}$ nach $1s_{1/2}$ kann ein magnetischer Dipolübergang (**M2**) oder ein Zweiphotonenzerfall **2E1** sein. Bei leichten Elementen trägt der Zweiphotonenzerfall fast ausschließlich zur Zerfallsrate bei. Im Falle von Uran hingegen ist die Zerfallsrate des **M2** schon etwa zwei Größenordnungen höher als die des **2E1**.

Im Fall eines wasserstoffähnlichen Ions in einer **nichtrelativistischen Dipolnäherung** lassen sich die Energieeigenfunktionen u_{nlm} in sphärischen

Polarkoordinaten ausdrücken:

$$u_{nlm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R_{nl}(r) \cdot P_{lm}(\vartheta) \cdot e^{im\phi} \quad (2.10)$$

mit der Radialfunktion $R_{nl}(r)$ und den Legendrepolyomen $P_{lm}(\vartheta)$. Das Matrixelement \mathfrak{z} bei einem Übergang von nlm nach $n'l'm'$ ist:

$$\begin{aligned} \mathfrak{z}_{nlm}^{n'l'm'} &= \int u_{n'l'm'}^* \mathfrak{z} u_{nlm} d\tau = \int_0^\infty r^2 dr R_{n'l'}(r) \cdot r \\ &\times \int_0^\pi P_{l'm'}(\vartheta) P_{lm}(\vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \cdot \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Für $m \neq m'$ verschwindet das Integral über φ , und man erhält die Auswahlregel für die magnetische Quantenzahl, welche Strahlung mit Polarisation parallel zur z-Koordinate beschreibt:

$$\Delta m \equiv m - m' = 0. \quad (2.12)$$

Die Auswertung des ϑ -Integrals über die Orthogonalitätsrelationen von zugeordneten Legendrefunktionen ergibt die Auswahlregel der Drehimpulsquantenzahl:

$$\Delta l \equiv l - l' = \pm 1. \quad (2.13)$$

2.4 Alignment

Bei Ionisations-, Anregungs- und Einfangprozessen kann der angeregte Zustand $|n, \ell, j\rangle$ des betreffenden Ions „Alignment“ aufweisen. Dieses ist Folge einer nichtstatistischen Besetzung der magnetischen Unterzustände m_j des Gesamtdrehimpulses j . Gilt dabei $\sigma(|n, \ell, j, m_j\rangle) = \sigma(|n, \ell, j, -m_j\rangle)$, so bezeichnet man den Zustand $(|n, \ell, j\rangle)$ als „aligned“. Dieses Alignment kann durch Messung der Winkelverteilung oder der Polarisation der emittierten Photonen nachgewiesen werden. Da das Alignment sensitiv auf die Dynamik des Stoßes ist, bietet sich hier ein guter Ausgangspunkt, um unser Verständnis der Stoßtheorie zu überprüfen.

In den letzten dreißig Jahren stand das Alignment im Mittelpunkt der Untersuchungen, siehe beispielsweise die Untersuchung von Innerschalenvakanzen in [BBH97]. Ein Hauptgrund für das Interesse am Alignment ist, daß darin zusätzliche Informationen über den Stoßprozeß enthalten sind, die über das hinausgehen, was durch konventionelle Messungen des Wirkungsquerschnittes zugänglich ist. Die quantitative Übereinstimmung der Vorhersage

des Alignments mit Meßdaten in einem weiten Energiebereich zeigt, daß der Stoßprozeß theoretisch gut beschrieben werden kann [Kab94]. Allerdings sind bei kleinen Stoßgeschwindigkeiten und schweren Projektilen, das heißt im Bereich starker Störungen, noch viele Fragen offen.

Der Stärke des Alignments läßt sich durch einen Satz von Alignmentparametern $\mathcal{A}_k, k \leq 2j$ beschreiben. Weist man das gestreute Teilchen nicht nach und sind sowohl Projektil als auch Target nicht polarisiert, sind nur die Alignmentparameter geraden Ranges von Null verschieden [EIS98]:

$$\mathcal{A}_k, \quad k = 0, 2, 4, \dots, 2j . \quad (2.14)$$

Die Alignmentparameter sind für einen Zustand $|n, \ell, j\rangle$ wie folgt definiert (in jedem Fall gilt $\mathcal{A}_0 \equiv 1$):

- für $j = 3/2$

$$\mathcal{A}_2 = \frac{\sigma(\pm 3/2) - \sigma(\pm 1/2)}{\sigma(\pm 3/2) + \sigma(\pm 1/2)} \quad (2.15)$$

- für $j = 5/2$

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{\sqrt{14}} \frac{5\sigma(\pm 5/2) - \sigma(\pm 3/2) - 4\sigma(\pm 1/2)}{\sigma(\pm 5/2) + \sigma(\pm 3/2) + \sigma(\pm 1/2)} \quad (2.16)$$

$$\mathcal{A}_4 = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{14}} \frac{\sigma(\pm 5/2) - 3\sigma(\pm 3/2) + 2\sigma(\pm 1/2)}{\sigma(\pm 3/2) + \sigma(\pm 3/2) + \sigma(\pm 1/2)} \quad (2.17)$$

In der hier verwendeten Notation wurden ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Quantenzahlen n, ℓ und j weggelassen, so daß $\sigma(\pm m_j) \equiv \sigma(|n, \ell, j, \pm m_j\rangle)$ gilt.

2.4.1 Winkelverteilung

Auf das Alignment eines angeregten Zustandes kann durch die Untersuchung der Winkelverteilung der in einem Abregungsprozeß emittierten Photonen geschlossen werden. Aus der Winkelverteilung der Photonen wird der Anisotropieparameter β_A entnommen. Für die Winkelverteilung eines Übergangs $j = \frac{3}{2}$ nach $j = \frac{1}{2}$ erhält man

$$W_\gamma(\theta) \propto (1 + \beta_A P_2(\cos \theta)) , \quad (2.18)$$

wobei θ der Winkel relativ zur Projektillflugrichtung ist; $P_2(\cos \theta)$ ist das Legendrepolynom zweiter Ordnung. Der sich ergebende Anisotropieparameter ist ein Maß für die Abweichung der Intensitätsverteilung der emittierten

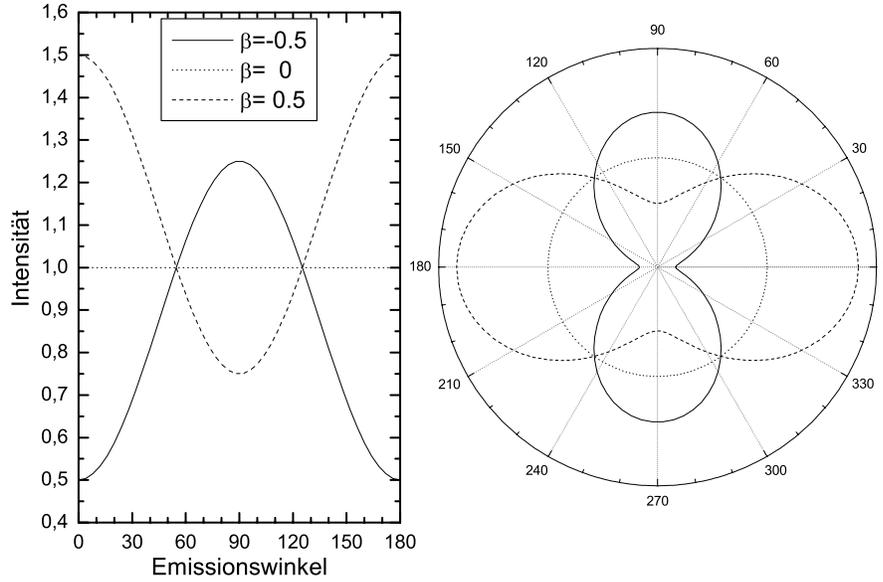


Abbildung 2.5: *Emissionscharakteristik im Emittersystem für drei verschiedene Anisotropieparameter.*

Photonen von einer räumlich isotropen Verteilung. Zur Illustration des β_A -Parameters enthält Abbildung 2.5 Beispiele für Intensitätsverteilungen für $\beta_A = -0,5; 0; 0,5$.

Der allgemeine Ausdruck für die Winkelkorrelation ist

$$W_\gamma(\theta) \propto \sum_{n=0(gerade)}^{2K} A_n P_n(\cos \theta) , \quad (2.19)$$

wobei K die Multipolordnung angibt; $P_n(\cos \theta)$ sind Legendrepolynome der Ordnung n und A_n sind die bei Berezhko und Kabachnik [BK77] angegebenen Entwicklungskoeffizienten.

Der theoretische Anisotropiekoeffizient β_ν , mit dem der gemessene Anisotropieparameter β_A verglichen wird, ist definiert als

$$\beta_\nu = \frac{A_\nu}{A_0} . \quad (2.20)$$

Die Anisotropie und damit auch das Alignment läßt sich unabhängig von n und ℓ durch die Wirkungsquerschnitte $\sigma(j, m_j) \equiv \sigma(|n, \ell, j, m_j\rangle)$ darstellen. So gilt beispielsweise im Fall eines Dipolübergangs zwischen $j = \frac{3}{2}$ und $j = \frac{1}{2}$, bei dem lediglich \mathcal{A}_2 (natürlich neben \mathcal{A}_0) einen von Null verschiedenen Wert

aufweist:

$$\beta_2 = \frac{1}{2} \mathcal{A}_2 = \frac{1}{2} \frac{\sigma(\frac{3}{2} \frac{3}{2}) - \sigma(\frac{3}{2} \frac{1}{2})}{\sigma(\frac{3}{2} \frac{3}{2}) + \sigma(\frac{3}{2} \frac{1}{2})}. \quad (2.21)$$

Für einen Quadrupolübergang zwischen $j = \frac{3}{2}$ und $j = \frac{1}{2}$ gilt

$$\beta_2 = -\frac{1}{2} \mathcal{A}_2 = -\frac{1}{2} \frac{\sigma(\frac{3}{2} \frac{3}{2}) - \sigma(\frac{3}{2} \frac{1}{2})}{\sigma(\frac{3}{2} \frac{3}{2}) + \sigma(\frac{3}{2} \frac{1}{2})}. \quad (2.22)$$

Der Anisotropiekoeffizient β_2 kann ausgedrückt werden als [BK77]

$$\beta_2 = \alpha \cdot \mathcal{A}_2 \quad (2.23)$$

mit der Proportionalitätskonstante α . Die α -Koeffizienten sind für eine Reihe von Übergängen zwischen Zuständen mit den Drehimpulsen j und j' in Tabelle 2.2 aufgelistet; für den Ly α_1 -Übergang gilt $\alpha = \frac{1}{2}$.

j	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
j'	$\frac{7}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
α	$\sqrt{\frac{1}{56}}$	$-\frac{8}{5\sqrt{14}}$	$\sqrt{\frac{7}{50}}$	$\frac{1}{10}$	$-\frac{2}{5}$	$\frac{1}{2}$	0	0

Tabelle 2.2: Werte des α -Koeffizienten für unterschiedliche Werte von Anfangs- und End-Drehimpulsen

2.4.2 Polarisation

Ein alternativer Zugang zur Bestimmung des Alignments besteht in der Messung der linearen Polarisation der emittierten Strahlung. Dieser Weg wird bei der Untersuchung leichter Stoßsysteme beschrieben, beispielsweise bei dem Stoß von Protonen mit Heliumatomen [HFK87].

Zur Zeit wird an der GSI ein Polarimeter entwickelt, das es erlaubt, unter Ausnutzung des Comptoneffekts und dessen Polarisationsabhängigkeit, die Polarisation der nachgewiesenen Photonen zu bestimmen [TSB02, TSB03]. Der hierbei verwendete segmentierte Germanium-Halbleiterzähler kann bevorzugt bei hohen Photonenenergien eingesetzt werden, wie sie beispielsweise bei Photonen aus radiativem Elektroneneinfang (siehe nächstes Kapitel) anzutreffen sind. Ob für die charakteristische Strahlung (Lyman-Serie)

von Schwerionen eine ausreichende Sensitivität erreicht werden kann, muß noch in entsprechenden Experimenten gezeigt werden. Wegen der Energieabhängigkeit des Comptoneffekts wird erwartet, daß nur bei ausreichend hohen Photonenenergien die Polarisation der emittierten Strahlung bestimmt werden kann. Bei niedrigen Energien dominiert die Photoabsorption, die die Comptonstreuung vollkommen überlagert. Die Photonenenergie beispielsweise der Ly α -Strahlung läßt sich nur über die Dopplerverschiebung aufgrund der Projektilgeschwindigkeit unter Vorwärtswinkeln erhöhen.

Das Funktionsprinzip des Polarimeters läßt sich anhand der Klein-Nishina-Formel [KN29] verdeutlichen. Diese gibt den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Comptonstreuung eines Photons der Energie $\hbar\omega$ an:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \left(\frac{\hbar\omega'}{\hbar\omega}\right)^2 \left(\frac{\hbar\omega'}{\hbar\omega} + \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega'} - 2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi\right), \quad (2.24)$$

mit der Energie des gestreuten Photons $\hbar\omega'$, dem Photonenstreuwinkel θ und dem Winkel ϕ zwischen dem Polarisationsvektor des Photons vor der Streuung und der Ausbreitungsrichtung des gestreuten Photons. Die Polarisation wird dann aus dem koinzidenten Nachweis zweier Ereignisse in verschiedenen Segmenten des Detektors ermittelt.

Die lineare Polarisation P wird über die Stokesparameter $P_{1,2}$ beschrieben:

$$\begin{aligned} P_1 &= \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}} \\ P_2 &= \frac{I_{45^\circ} - I_{135^\circ}}{I_{45^\circ} + I_{135^\circ}} \end{aligned} \quad (2.25)$$

mit I_{\parallel} und I_{\perp} den Intensitäten mit der Polarisationsrichtung parallel und senkrecht zur Stoßebene; $I_{45^\circ, 135^\circ}$ sind die Intensitäten jeweils um 45° aus der Stoßebene hinaus. Die Stoßebene wird durch die Richtung des einfallenden Ionenstrahls und die Richtung des emittierten Photons aufgespannt.

2.4.3 Differentielles Alignment

In den vorangegangenen Ausführungen wurde die Intensitätsverteilung von Photonen untersucht. Experimentell wurden Winkelverteilungen von REC-Photonen oder der charakteristischen Ly α -Strahlung voneinander getrennt untersucht, das heißt, ohne daß die Korrelation zwischen diesen Übergängen berücksichtigt wurde. Weist man koinzident neben der charakteristischen

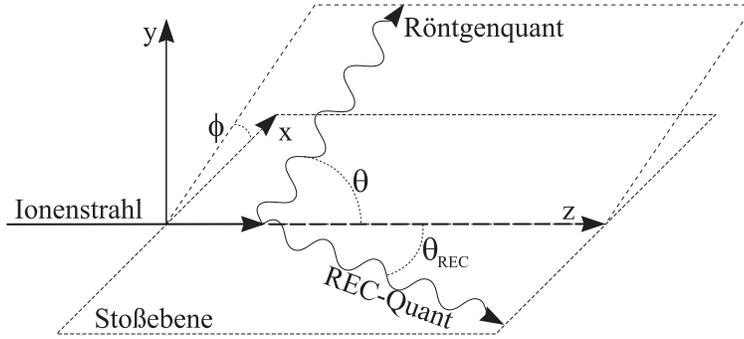


Abbildung 2.6: Die Geometrie eines Stoßexperimentes zur Bestimmung des differentiellen Alignments.

Strahlung noch ein REC-Quant nach, führt man also ein $(e, 2\gamma)$ -Experiment durch, so kann sich für die Winkelabhängigkeit der Intensitätsverteilung ein anderes Bild ergeben [SFS02]. Auch spielt es für die beobachtbare Anisotropie der Intensitätswinkelverteilung unter Umständen eine Rolle, ob das Röntgenquant in der Stoßebene, die von Projektil und REC-Photon aufgespannt wird, nachgewiesen wird (planare Geometrie) oder ob das Röntgenquant außerhalb dieser Ebene nachgewiesen wird.

Das sich aus dieser Untersuchung ergebende Alignment der $\text{Ly}\alpha_1$ -Strahlung wird als differentielles Alignment bezeichnet. Es ist möglich, zwischen verschiedenen Populationsmechanismen zu unterscheiden. So kann man durch den koinzidenten Nachweis eines L -REC-Photons und der dazugehörigen $\text{Ly}\alpha$ -Strahlung eine kaskadenbedingte Beeinflussung der gemessenen Anisotropie ausschalten.

Im Experiment ist es aus apparativen Gründen nicht möglich, das „erste“ Photon mit dem vollen Raumwinkel nachzuweisen. Die Detektion der Photonen erfolgt vielmehr unter bestimmten festen Beobachtungswinkeln; daher entfällt bei diesen die Mittelung über alle Emissionsrichtungen. Dies schlägt sich bei der Berechnung des Alignments darin nieder, daß das Alignment abhängig von dem Beobachtungswinkel des ersten Photons ist. In Abbildung 2.6 wird die Geometrie eines solchen Zweiphotonenkoinzidenzexperimentes erläutert. Das Photon aus der radiativen Rekombination wird unter dem Winkel θ_{REC} in der Stoßebene nachgewiesen. Die Stoßebene wird durch die Richtung des Ionenstrahls (genauer durch den Impulsvektor des einlaufenden Elektrons) und durch die Richtung des emittierten Photons aufgespannt. Die Richtung des nachfolgend in einem Abregungsprozeß emittierten Röntgenquantens wird durch die Angabe zweier Winkel charakterisiert: durch den Polarwinkel θ und den Azimutalwinkel ϕ .

Da durch den gleichzeitigen Nachweis zweier Photonen die Axialsymmetrie des Stoßes gebrochen wird, ist das Alignment, das heißt die Intensitätsverteilung als Funktion des Winkels θ , nun abhängig von dem Azimutalwinkel ϕ .

In Abbildung 2.7 ist die Winkelverteilung der $\text{Ly}\alpha_1$ -Photonen nach radiativem Elektroneneinfang in die L -Schale bei Stoßenergien von 1 MeV/u und 220 MeV/u gezeigt. Der REC-Emissionswinkel relativ zur Strahlrichtung nimmt dabei die Werte $\theta_{REC} = 0^\circ, 15^\circ, 30^\circ$ und 90° an. Die Ebene, in die die $\text{Ly}\alpha_1$ -Strahlung emittiert wird, ist um $\phi_{Ly} = 0^\circ, 45^\circ$ und 90° gegenüber der Stoßebene verkippt.

Die Emissionscharakteristik des $\text{Ly}\alpha_1$ -Übergangs hängt stark von dem Winkel ab, unter dem das REC-Photon nachgewiesen wurde. Geht man zu einer nichtplanaren Geometrie ($\phi_{Ly} \neq 0$) über, ergeben sich Winkelverteilungen, die stark von denen abweichen, die in einer planaren ($\phi = 0$) Detektoranordnung erwartet werden.

Wird das REC-Photon in Vorwärtsrichtung emittiert $\theta_{REC} = 0^\circ$, so ist die $\text{Ly}\alpha_1$ -Intensitätsverteilung symmetrisch bezüglich dem Emissionswinkel 90° .

2.5 Kaskaden

Durch die für diese Arbeit relevanten Populationsprozesse, den strahlenden und den strahlungslosen Elektroneneinfang, wird nicht nur ein einzelner atomarer Zustand besetzt, sondern eine Vielzahl verschiedener Niveaus bevölkert. Bei dem Einfang eines Elektrons in einen angeregten Zustand zerfällt diese Besetzung im allgemeinen in kurzer Zeit, bei dem im Experiment untersuchten Uran U^{91+} typischerweise innerhalb von $\sim 10^{-14}$ Sekunden. Wenn die Besetzung angeregter Zustände erfolgt, die nicht direkt in den Grundzustand übergehen können sondern über Zwischenzustände zerfallen, dann spricht man bei den auftretenden Zerfallsketten dieser angeregten Zustände von Kaskadenzerfällen.

Zur formalen Quantifizierung solcher Übergangskaskaden benutzt man die Raten-Gleichungen [LM87]:

$$\frac{dN_i}{dt} = - \sum_j^{<} \lambda_{ij} N_i + \sum_k^{>} \lambda_{ki} N_k \quad , \quad (2.26)$$

λ_{ij} ist die Übergangsrate für einen Übergang von $|i\rangle$ nach $|j\rangle$, für die An-

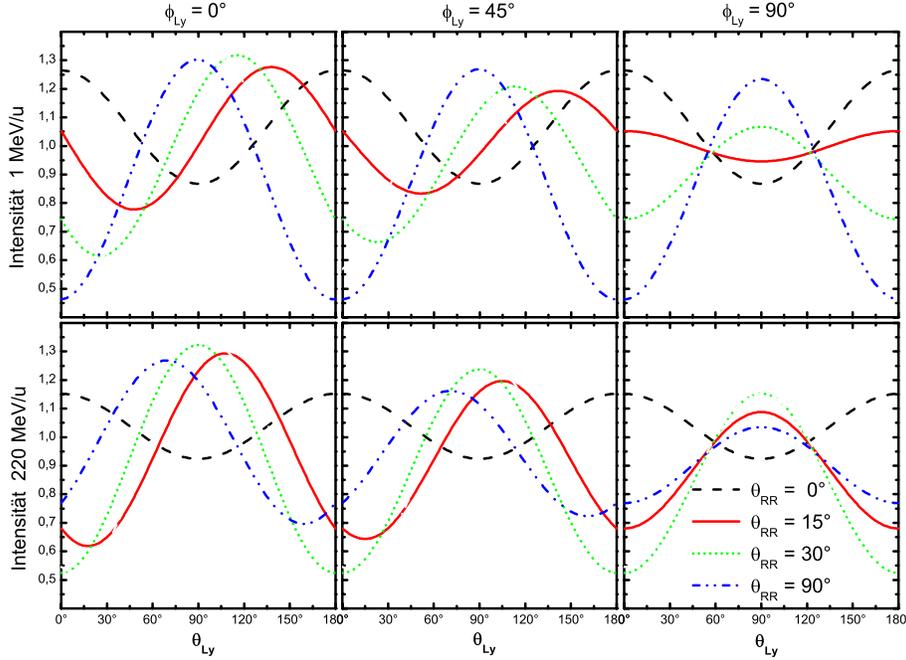


Abbildung 2.7: Die Winkelverteilungen der $Ly\alpha_1$ -Photonen bei einer Zweiphotonenkoinzidenz zwischen radiativem Einfang und charakteristischer Strahlung.

fangspopulation gilt $N_i \propto \sigma_{nljm_j}$. Die erste Summation erfolgt über alle j , für die $E_j < E_i$ gilt, der Index k des zweiten Summenzeichens läuft über alle Zustände mit $E_k > E_i$. Bei jedem hier aufsummierten Übergangsprozeß wird ein Röntgenquant ausgesandt, welches im Experiment nachgewiesen werden kann.

In Abbildung 2.8 sind schematisch die Vorgänge in einer Zerfallskaskade illustriert. Die Übergangswahrscheinlichkeit $A_{n'n}$ ist um so größer, je größer die Energiedifferenz $\Delta E_{n'n}$ zwischen dem Anfangs- und Endzustand ist [BS57]:

$$A_{n'n} \propto \Delta E_{n'n}^3 . \quad (2.27)$$

Das bedeutet, daß ein Zustand $|n, \ell\rangle$ bevorzugt in ein Niveau mit der niedrigstmöglichen Hauptquantenzahl n' zerfällt, die unter Berücksichtigung der Auswahlregeln möglich ist (Zerfälle a in Abbildung 2.8). Für einen $(\Delta\ell = 1)$ -Übergang bedeutet dies, daß $\ell' = \ell - 1$ ist und damit ist die Hauptquantenzahl des Endzustandes $n' = \ell' + 1 = \ell$. Hierbei wurde beachtet, daß der maximalmögliche Drehimpuls ℓ_{max} für einen Zustand mit der Hauptquantenzahl n gegeben ist durch: $\ell_{max} = n - 1$.

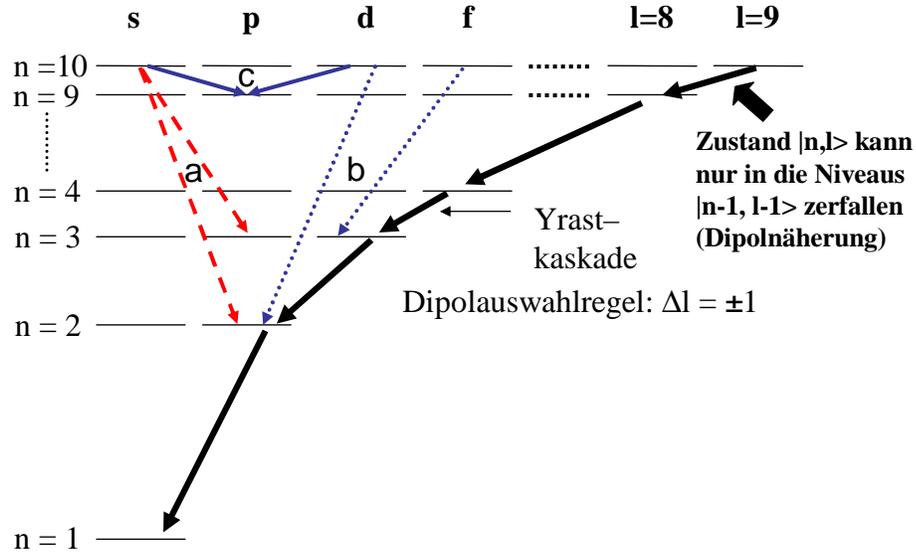


Abbildung 2.8: Eine schematische Darstellung der Vorgänge während einer Zerfallskaskade.

Hat das Elektron den Zustand $|n, \ell\rangle$ mit $\ell = n - 1$ erreicht (Zerfälle b), befindet es sich auf der sogenannten *Yrast-Linie*. Die Zerfallskette erfolgt jetzt in n Einzelschritten (über $n' = n - 1$, $\ell' = \ell - 1$, dann $n'' = n - 2$, $\ell'' = \ell - 2$, ...) bis in den Grundzustand (Yrast-Kaskade). Dieser schrittweise Zerfall führt bei Einfängen in Rydbergzustände, wie sie bei der radiativen Rekombination (siehe Abschnitt 3.1.1) auftreten können, zusammen mit den langen Lebensdauern dieser hochangeregten Zustände zu Problemen bei der Interpretation der beobachteten Röntgenspektren.

Bei einem Dipolübergang, für den $\ell' = \ell \pm 1$ gilt, wird beobachtet, daß der Übergang $\ell \rightarrow \ell - 1$ viel wahrscheinlicher als ein Übergang mit $\ell \rightarrow \ell + 1$ ist, (Zerfälle c), auch wenn beide Endzustände die gleiche Hauptquantenzahl aufweisen. Gemittelt über die möglichen m_ℓ ist das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten für einen Übergang $|n, l\rangle \rightarrow |n', l - 1\rangle$ zu $|n, l\rangle \rightarrow |n', l + 1\rangle$ gegeben durch, siehe beispielsweise [BS57]:

$$\frac{A_{n\ell}^{n'\ell-1}}{A_{n\ell}^{n'\ell+1}} = \frac{\ell}{\ell + 1} \cdot \left(\frac{R_{n\ell}^{n'\ell-1}}{R_{n\ell}^{n'\ell+1}} \right)^2. \quad (2.28)$$

Die Größen $R_{n\ell}^{n'\ell'}$ sind Integrale über die radialen Eigenfunktionen $\int_0^\infty R_{n\ell}(r)R_{n'\ell'}(r)r^3 dr$. Deren Berechnung erfolgt bei Bethe und Salpeter unter Verwendung hypergeometrischer Funktionen [BS57, Glg. 63.2]. Diese Radialintegrale geben den Ausschlag zugunsten des kleineren Drehimpulses.

Kapitel 3

Inelastische Stoßprozesse

In den folgenden Ausführungen werden die beiden zentralen in dieser Arbeit vorkommenden inelastischen Stoßprozesse näher erläutert: strahlender (radiativer) und strahlungsloser (kinematischer) Elektroneneinfang. Zunächst wird der strahlende Einfang als zeitinverser Prozeß der Photoionisation beschrieben: als radiative Rekombination. Dieses Bild ist im Rahmen der Stoßnäherung (*impulse approximation*) gültig. Danach wird die relativistische Beschreibung vorgestellt.

Darauffolgend wird der kinematische Einfang besprochen. Zuerst werden die beiden auf einer klassischen Prinzipien beruhenden Beschreibungsmethoden vorgestellt: das Thomas-Modell und die Monte-Carlo-Methode mit klassischen Teilchenbahnen (CTMC¹). Danach folgen quantenmechanische Methoden. Die erste Bornsche Näherung nach Oppenheimer, Brinkman und Kramers (OBK) wird vorgestellt, dann die Eikonalnäherung und schließlich die Bornsche Näherung mit verzerrten Wellen (CDW²).

Aus diesen Betrachtungen werden Skalierungsgesetze für die Wirkungsquerschnitte abgeleitet. Diese erlauben es einerseits, das beobachtete Verhalten in Abhängigkeit der Stoßenergie oder der Kernladungszahlen von Projektil oder Target auf noch unbekannte Stoßsysteme zu übertragen. Andererseits kann man an diesen Skalierungen ablesen, daß in bestimmten Stoßenergiebereichen oder Stoßsystemen nur ein Prozeß das Geschehen dominiert.

Nach der Beschreibung der Struktur und Dynamik einzelner Atome ist der nächste Schritt die Untersuchung der unterschiedlichen Wechselwirkungen dieser Atome mit anderen Atomen.

¹CLASSICAL TRAJECTORY MONTE CARLO

²CONTINUUM DISTORTED WAVE

Bei der inelastischen Wechselwirkung eines Projektilions mit dem Targetatom ist im Rahmen dieser Arbeit der Prozeß der Umladung des Projektils durch Einfang eines Elektrons aus dem Target in das Projektil relevant.

Bei sogenannten Umordnungsprozessen (*rearrangement-collisions*) ändert sich die elektronische Konfiguration des Stoßsystems, es werden entweder Elektronen zwischen den Stoßpartnern ausgetauscht und/oder der Anregungszustand eines oder mehrerer Elektronen ändert sich.

Bei der Kollision eines *nackten* Projektilions mit dem Target kann als einzig möglicher Prozeß ein Targetelektron vom Projektil eingefangen werden, so daß dieses in einem wasserstoffähnlichen gebundenen Zustand ist. Die beiden wichtigsten Einfangmechanismen sind die im folgenden vorgestellten Prozesse des radiativen und des strahlungslosen Elektroneneinfangs. Je nach Stoßgeschwindigkeit und Kernladungszahlen des Projektils Z_P und des Targets Z_T spielen sie unterschiedlich wichtige Rollen.

Die theoretische Behandlung der radiativen und der strahlungslosen Prozesse stellt die Elektronen in den Mittelpunkt, die Atomkerne fungieren im wesentlichen als Träger der Elektronen und als Ursprung der sich ändernden elektromagnetischen Potentiale. Um den komplizierten Berechnungen im Fall, daß ein Stoßpartner über mehrere Elektronen verfügt, zu entgehen, findet die „Ein-Elektronen-Näherung“ Anwendung. Hierfür muß die Elektron-Elektron-Wechselwirkung klein gegen die Elektron-Kern-Wechselwirkung sein. In dieser Näherung bezeichnet man das Elektron, an dessen Verhalten man interessiert ist, als das „aktive Elektron“.

Bei einem Übergang des Elektrons von dem Target in das Projektilion erfolgt ein Impulsübertrag Δp . Die hierbei auftretende Energiedifferenz ΔE , auch als Q-Wert der Reaktion bezeichnet, bestimmt den Schwellenwert des minimalen Impulsübertrags $\Delta p_{min} = \Delta E/v$ für diese Reaktion [EM95].

Die Geschwindigkeit, mit der das Projektil auf das Target trifft, entscheidet darüber, welche Arten von Wechselwirkungsprozessen stattfinden. Bei einem sehr langsamen Stoß haben die Orbitale genügend Zeit, sich auf die veränderten Potentiale einzustellen; es entsteht eine Art molekularer Zustand. Innerhalb dieses komplexen Stoßsystems ist die Wahrscheinlichkeit für Umordnungsprozesse hoch.

Erfolgt der Stoß hingegen schnell, können die Orbitale nicht folgen. Aus diesem Grund kann ein Ladungsübertrag nur durch einen Mechanismus beschrieben werden, bei dem die Geschwindigkeit des aktiven Elektrons der Stoßgeschwindigkeit entsprechen muß. Diese kinematische Bedingung ist bei hohen Stoßgeschwindigkeiten nur schwer zu erfüllen.

Die Geschwindigkeit, mit der die Stoßgeschwindigkeit v_P verglichen werden

muß, ist die Bahngeschwindigkeit der Elektronen des Targets. Diese ist für einen Bohrorbit mit der Hauptquantenzahl n gegeben durch $v_n = (Z\alpha/n)c$. Der Sommerfeldparameter

$$\nu = \frac{Z \cdot e^2}{n\hbar v_P} \quad (3.1)$$

vergleicht diese beiden Größen. Er ist zugleich ein Maß für die Stärke der Coulombwechselwirkung relativ zur Stoßenergie. $\nu \ll 1$ bezeichnet schnelle Stöße, während der Bereich niedriger Stoßgeschwindigkeiten durch einen großen ν -Parameter ($\nu > 1$) gekennzeichnet ist.

Mit Hilfe des Sommerfeldparameters läßt sich der Adiabasieparameter $\eta = \nu^{-2}$ definieren, welcher die Stärke der Ablenkung der Teilchen durch die Coulombwechselwirkung beschreibt. $\eta \gg 1$ ist Voraussetzung für eine klassische Beschreibung, bei $\eta < 1$ ist das System besser durch die Anwendung des Wellenbildes beschrieben.

3.1 Strahlender Elektroneneinfang

Kommt es bei Stößen zwischen hochgeladenen Schwerionen und leichten Targetatomen zu einem Übertrag von Elektronen vom Target auf das Projektil bei gleichzeitiger Photonenemission, spricht man von einem radiativen Elektroneneinfang (REC). Da hier ein im Targetatom gebundenes Elektron eingefangen wird, spricht man von radiativem Einfang (REC) im Gegensatz zur Rekombination, bei der freie Elektronen in einen gebundenen Zustand übergehen. Können die im Targetatom gebundenen Elektronen als „quasi-frei“ angesehen werden, so sind beide Prozesse äquivalent. Diese vereinfachende Annahme wird im Rahmen der Stoßnäherung (IA³) benutzt [KJ75], und läßt sich anwenden, wenn der Impuls $\gamma m_e v$ eines Elektrons, welches Projektilgeschwindigkeit besitzt, groß im Vergleich zu den internen Impulsen der Targetelektronen ist:

$$\frac{v_i}{v_P} = \left[\frac{E_B^T}{E_{kin}} \right]^{1/2} \ll 1, \quad (3.2)$$

v_i ist die Bahngeschwindigkeit des i -ten Elektrons, v_P die Projektilgeschwindigkeit und E_B^T die Bindungsenergie im Target.

Der Prozeß der radiativen Rekombination ist seinerseits der inverse Prozeß zur Photoionisation. Da sich durch die Untersuchung detaillierte Informationen über die Photoionisation gewinnen lassen [EIS95, SMK97], ist die

³IMPULSE APPROXIMATION [CW52, EP70]

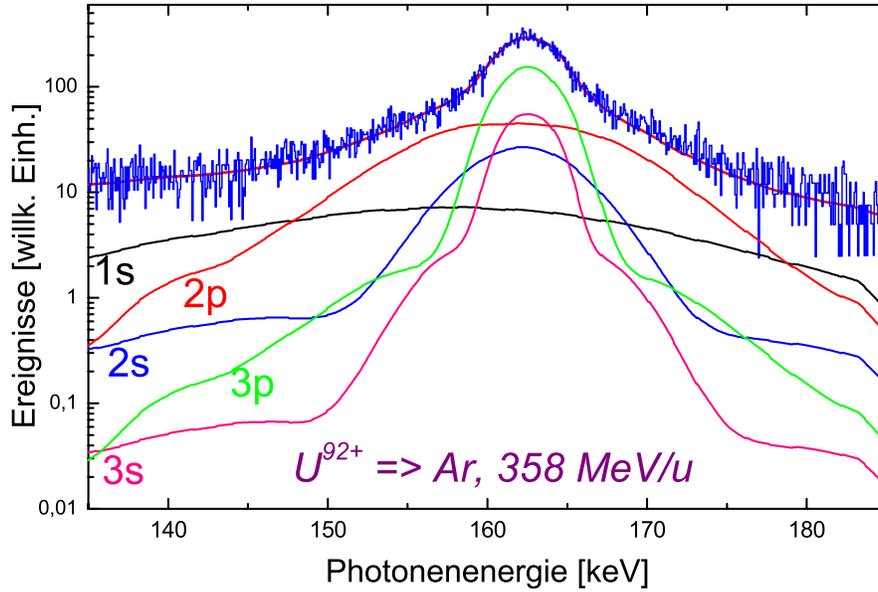


Abbildung 3.1: *K-REC-Linie*, aufgenommen unter 132° bei 358 MeV/u $U^{92+} \rightarrow \text{Ar}$. Die Beiträge von Comptonprofilen verschiedener Schalen des *Ar*-Targets sind separat eingezeichnet (unterbrochene Linien), die durchgezogene Kurve ist deren Summe [SLR98].

Erforschung dieses Prozesses Gegenstand sowohl experimenteller als auch theoretischer Untersuchungen. Erste experimentelle Untersuchungen wurden von Raisbeck und Yiou [RY71], Schnopper *et al.* [SBD72] und Kienle *et al.* [KKP73] durchgeführt.

Die Targetelektronen weisen aufgrund ihrer Bindung eine intrinsische Impulsverteilung auf, das sogenannte Comptonprofil $q(v_i)$. Ihre Energie im Projektilsystem ist

$$E = \frac{m_e(\vec{v}_P + \vec{v}_i)^2}{2} + V_T = E_{kin} - E_B^T + m_e \vec{v}_P \vec{v}_i \quad (3.3)$$

Die Forderung nach Energieerhaltung liefert die Energie der REC-Photonen

$$E_{REC} = E_{kin} + E_f - E_i + \vec{v}_P \vec{p}_i \quad , \quad (3.4)$$

oder relativistisch

$$E_{REC} = (\gamma - 1)m_e c^2 + E_f - \gamma E_i + \vec{\beta} \gamma c \vec{p}_i \quad . \quad (3.5)$$

Das Comptonprofil führt also aufgrund des Produkts $\vec{v}_P \vec{p}_i$ zur Verbreiterung der REC-Linien. Bei der Auswertung der experimentell gewonnenen

REC-Linien muß dies durch Faltung der Linie aus der radiativen Rekombination, siehe Abschnitt 3.1.1, mit den entsprechenden Targetcomptonprofilen berücksichtigt werden. Dies ist in Abbildung 3.1 dargestellt; hier sind die Beiträge der Comptonprofile der einzelnen Targetelektronen eingezeichnet. Die Summe der Einzelbeiträge deckt sich mit der gemessenen Verteilung.

3.1.1 Strahlende Rekombination

Der Einfang eines *freien* Elektrons aus einem Kontinuumszustand in den gebundenen Zustand eines Atoms wird als „Rekombination“ bezeichnet. Diese geschieht durch drei konkurrierende Prozesse: strahlende Rekombination (RR⁴), dielektronische Rekombination (DR⁵) und Dreikörperrekombination (TR⁶).

Bei der strahlenden oder radiativen Rekombination, welche der nichtresonante Übergang eines freien Elektrons aus einem Kontinuumszustand $|i\rangle$ in einen gebundenen Projektilezustand $|f\rangle$ ist, kommt es wegen der Energieerhaltung zur Emission eines Photons. Dieses Photon hat die Energie

$$\hbar\omega = E_{kin} + E_f, \quad (3.6)$$

wobei E_{kin} die kinetische Energie des Elektrons vor dem Einfang und E_f die Bindungsenergie des Zustands ist, in den es eingefangen wurde. Dieser Prozeß kann somit als die Zeitumkehrung des elementaren Prozesses der Photoionisation angesehen werden [Sto30]. Eine ausführlichere Betrachtung folgt in Abschnitt 3.1.2.

Die dielektronische Rekombination ist die Zeitumkehrung des Augereffekts. Bei diesem resonanten Prozeß wechselwirkt das Kontinuumselektron mit einem gebundenen Elektron, wodurch das freie Elektron in einen gebundenen Zustand $|i\rangle$ eingefangen wird. Die Energiedifferenz wird strahlungslos auf das andere Elektron im Zustand $|j\rangle$ übertragen, welches damit in einen höheren Zustand $|k\rangle$ angeregt wird.

$$\Delta E = E_k + E_j = E_{kin} + E_i, \quad (3.7)$$

Schließlich hat man einen doppeltangeregten Zustand vorliegen, der dann entweder über die Emission zweier Photonen oder über einen Augerprozeß zerfällt.

⁴RADIATIVE RECOMBINATION

⁵DIELECTRONIC RECOMBINATION

⁶THREE BODY RECOMBINATION

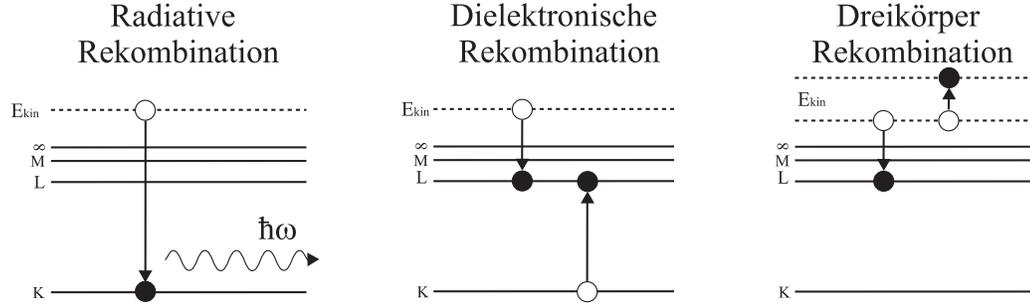


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Rekombinationsmechanismen für nackte und wasserstoffähnliche Ionen.

Die Dreikörperrekombination kann als inverse Elektronenstoßionisation angesehen werden. Im Unterschied zur dielektronischen Rekombination wird hier die Energiedifferenz auf ein anderes freies Elektron übertragen.

Als direkte Folge der Impuls- und Energieerhaltung stellt die radiative Rekombination den einzigen möglichen Prozeß dar, mittels dessen ein einzelnes freies Elektron in ein nacktes Ion eingefangen werden kann. In einem reinen Zwei-Körper-Prozeß, also ohne Entsendung eines Photons, kann ein Elektron nicht rekombinieren. Die Übergangsamplitude ist

$$T_{if}^{RR} = \langle i | \mathfrak{D} | f \rangle \quad (3.8)$$

mit dem Übergangsoperator \mathfrak{D} , welcher meist der Dipoloperator ist. Bethe und Salpeter [BS57] geben einen Querschnitt für die radiative Rekombination in einer nichtrelativistischen Näherung an. Es konnte gezeigt werden, daß die Dipolnäherung bis hin zu Energien von einem GeV/u die totalen Wirkungsquerschnitte in guter Übereinstimmung mit den Messungen wiedergibt [SKL92]. Bei schnellen Stößen zwischen nackten Projektilen der Kernladung Z_P und freien Elektronen skaliert der Wirkungsquerschnitt der radiativen Rekombination [SKM95] wie

$$\sigma^{RR} \propto \frac{1}{n^3} \cdot \frac{Z_P^5}{E_{kin}^{3/2}} \quad (3.9)$$

3.1.2 Dipol-Näherung nach Stobbe

Eine erste Näherung zur Abschätzung der Wirkungsquerschnitte für radiative Rekombination wurde von Stobbe durchgeführt. Unter den Annahmen $\hbar\omega \ll$

mc^2 und $\alpha Z \ll 1$ folgt nach [Sto30] für den Einfang in ein nacktes Ion:

$$\sigma_{nl}^{Stobbe} = \frac{\pi^2}{3} \alpha^3 a_0^2 \left(\frac{\nu^3}{1 + \nu^2} \right)^2 \left((\ell + 1) [C_{n\ell}^{\ell+1}(\nu)]^2 + \ell [C_{n\ell}^{\ell-1}(\nu)]^2 \right). \quad (3.10)$$

Es ist $\nu = \alpha Z/n\beta$ der Sommerfeldparameter, a_0 der Bohrsche Bahnradius und $\beta = \frac{v}{c}$ die Stoßgeschwindigkeit. Die Größen $C_{n\ell}^{\ell\pm 1}(\nu)$ sind die Übergangsmatrixelemente für den Dipolübergang eines Elektrons aus einem Kontinuumszustand mit dem Drehimpuls $\ell \pm 1$ in einen gebundenen Zustand $(|n, \ell\rangle)$. Das Skalierungsverhalten der Gleichung (3.10) wurde in [MH91] untersucht. Bei kleinen Stoßgeschwindigkeiten skaliert der Wirkungsquerschnitt etwa mit $1/n$, bei hohen Geschwindigkeiten gilt eine Abhängigkeit $\sim 1/n^3$. Dies hat zur Folge, daß bei der Interpretation der Ergebnisse von Rekombinationsexperimenten am Elektronenkühler des ESR, bei denen die Relativgeschwindigkeit der Elektronen zu den Ionen sehr gering ist, Wirkungsquerschnitte bis hin zu sehr hohen Hauptquantenzahlen berücksichtigt werden müssen.

Um den REC-Wirkungsquerschnitt aus dem der radiativen Rekombination zu erhalten, ist σ^{Stobbe} lediglich mit der Anzahl der (quasifreien) Targetelektronen Z_T zu multiplizieren [KJ75]. Betrachtet man nur K -Schaleneinfang, vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\sigma_{1s}^{Stobbe} = 9,165 \cdot \left(\frac{\nu^3}{1 + \nu^2} \right)^2 \frac{\exp(-4\nu \arctan(\nu^{-1}))}{1 - \exp(-2\pi\nu)} 10^{-21} \text{cm}^2 \quad (3.11)$$

Die Stobbesche Näherung ist nur gültig, solange $v \ll c$ ist und es genügt, lediglich Dipolübergänge zu berücksichtigen (siehe hierzu die zuvor erwähnten Skalierungsvorschriften der Multipol-Amplituden). Es zeigt sich beim Vergleich der exakten Photoionisationswirkungsquerschnitte mit der hier vorgestellten nichtrelativistischen Dipolnäherung eine überraschende Übereinstimmung bei Energien unterhalb von einem GeV/u [SKL92]. Ebenso sind die theoretischen Vorhersagen im Einklang mit den experimentellen Befunden, was in Abbildung 3.3 auf der nächsten Seite zu sehen ist.

3.1.3 Relativistische Theorie

Schon kurze Zeit nach der Einführung der relativistischen Quantenmechanik durch Dirac wurde die radiative Rekombination von F. Sauter in erster Ordnung in $(Z\alpha)$ berechnet [Sau32]. Er erhielt einen analytischen Ausdruck, der für schwere Ionen ($Z\alpha \approx 1$) nicht mehr gültig ist. Eine Erweiterung um Terme höherer Ordnung in $(Z\alpha)$ erfolgte durch Pratt, Ron und Tseng [PRT73].

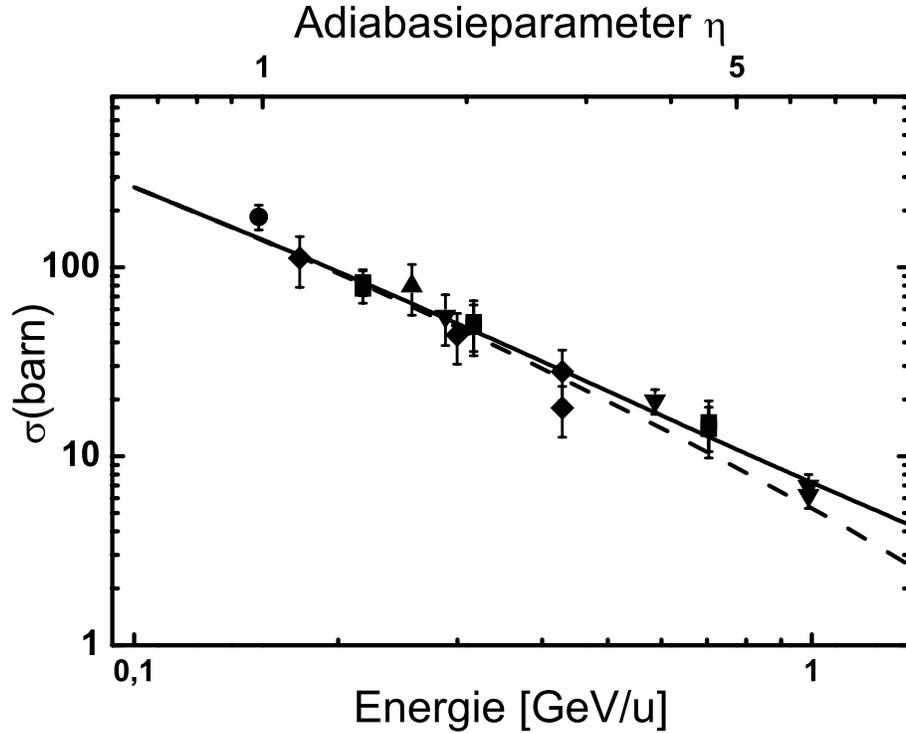


Abbildung 3.3: *Totale Elektroneneinfangquerschnitte pro Targetelektron gemessen mit nackten Schwerionen ($Z_P \geq 54$) aufgetragen gegen den Adiabasieparameter η . Die Ergebnisse werden mit einer relativistisch exakten Theorie (gestrichelte Linie) und mit einer nichtrelativistischen Dipolnaherung (durchgezogene Linie) verglichen [SKL92]. Die angegebene Stoenergie auf der unteren Skala bezieht sich auf Goldionen als Projektil.*

Zur vollstandigen, relativistisch korrekten Berechnung zerlegt man den Vorgang der radiativen Rekombination in mehrere Einzelschritte [SKM95].

- Zuerst werden im Rahmen der Dirac-Theorie unter Verwendung exakter Wellenfunktionen die Photoionisationsquerschnitte relativistisch korrekt berechnet [ISE94]. Der Kontinuumsendzustand wird dabei durch eine Partialwellenentwicklung beschrieben.
- Durch Annahme „detaillierten Gleichgewichts“ berechnet man aus den Photoionisationsquerschnitten die Wirkungsquerschnitte des inversen Prozesses [EM95].

$$\frac{d^2\sigma_{RR}(E, \theta)}{dE d\Omega} = (2j + 1) \left(\frac{\hbar\omega}{m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{\beta^2 \gamma^2} \frac{d^2\sigma_{ph}(E, \theta)}{dE d\Omega} \quad (3.12)$$

- Dann erfolgt eine relativistisch vollständige Faltung mit der Impulsverteilung des gebundenen Targetelektrons unter Verwendung von Roothaan-Hartree-Fock-Wellenfunktionen [CR74], siehe die entsprechenden Ausführungen in Abschnitt 3.2.2 auf Seite 40.
- Der letzte Schritt ist dann die Transformation in das Laborsystem. Diese erfolgt unter Verwendung der Gleichungen (4.7)-(4.9).

Das oben angesprochene Prinzip des detaillierten Gleichgewichts läßt Aussagen über Prozesse und ihre Umkehrprozesse zu. Detailliertes Gleichgewicht ist erfüllt, wenn

$$\mathcal{N}(a) \cdot \alpha(a \rightarrow b) = \mathcal{N}(b) \cdot \alpha(b \rightarrow a) \quad (3.13)$$

gilt, wobei $\mathcal{N}(a)/\mathcal{N}(b)$ das Verhältnis der Phasenraumdichten, $\alpha(a \rightarrow b)$ und $\alpha(b \rightarrow a)$ die Prozeßraten sind.

3.2 Kinematischer Einfang

Beim „kinematischen Einfang“ wird kein Photon emittiert, sondern Energie und Impuls werden zwischen Projektil und Target aufgeteilt. Da dieser Vorgang strahlungslos ist, wird er auch als nichtradiativer Elektroneneinfang (NRC⁷) bezeichnet.

Die Energiedifferenz zwischen dem gebundenen Targetanfangszustand und dem gebundenen Endzustand im Projektil wird in Bewegungsenergie der Stoßpartner umgewandelt:

$$E_{kin} = E_i - E_f . \quad (3.14)$$

Bei mittleren Stoßenergien $\eta < 1$ und asymmetrischen Stoßsystemen $Z_P > Z_T$ erfolgt der Einfang der am stärksten gebundenen Targetelektronen in einen angeregten Projektilzustand.

Erste theoretische Untersuchungen gehen auf Thomas [Tho27], Oppenheimer [Opp28], Brinkman und Kramers [BK30] zurück. Schon in dieser nichtrelativistischen Näherung läßt sich die allgemeine Skalierung dieses Prozesses herleiten [DE94]:

$$\sigma^{NRC} \propto Z_P^5 Z_T^5 \frac{1}{E^6} . \quad (3.15)$$

Dieser Wirkungsquerschnitt, gewonnen im Rahmen einer Störungstheorie erster Ordnung, ist proportional zu v^{-12} . Rechnungen in Störungstheorie

⁷NONRADIATIVE ELECTRON CAPTURE

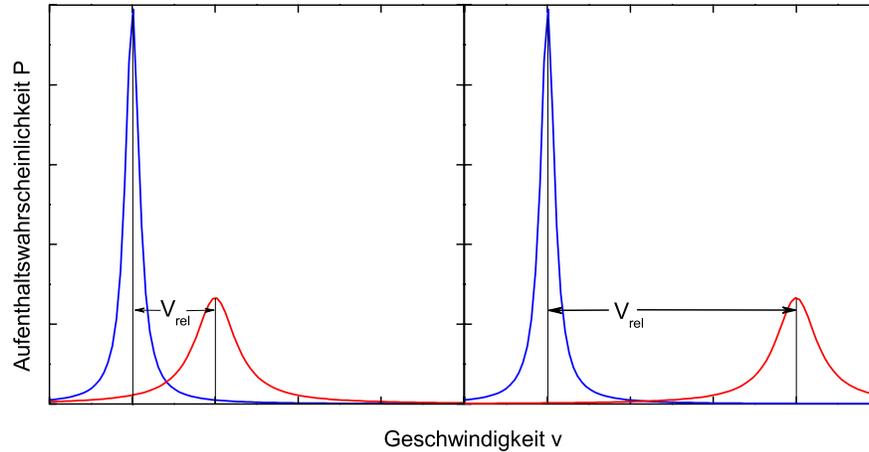


Abbildung 3.4: *Überlapp der Impulsraumwellenfunktionen bei unterschiedlichen Relativgeschwindigkeiten v_{rel}*

zweiter Ordnung ergeben eine v^{-11} -Abhängigkeit, woraus folgt, daß Effekte höherer Ordnung eine wichtige Rolle spielen.

Aus einer relativistischen Behandlung [EM95] ergibt sich eine asymptotische Energieabhängigkeit von $\sim E^{-1}$. In einer klassischen relativistischen Rechnung des Terms zweiter Ordnung anhand des Thomas-Modells [Sha79] wird ein E^{-3} -Abfall gefunden. Dies bedeutet eine asymptotische Dominanz des Terms erster Ordnung, dies steht im Gegensatz dazu, was von Umordnungsreaktionen erwartet wird. Es kann gezeigt werden [JAA80], daß hier eine Asymptotik von $\sim (\ln E)^2/E$ vorliegt, die durch Abschirmung durch Nachbaratome (*density effect*) wieder $\sim 1/E$ ergibt.

Diese starke Geschwindigkeitsabhängigkeit beruht auf dem mit steigender Relativgeschwindigkeit kleiner werdenden Überlapp der Anfangs- und Endzustandswellenfunktionen im Impulsraum, siehe hierzu Abbildung 3.4. Anschaulich gesprochen muß das Elektron, welches im Targetatom gebunden ist, ein seiner Geschwindigkeit entsprechendes Orbital finden. Die Comptonprofile sind um den Relativimpuls der Stoßpartner $m_e v$ verschoben, was zu einer Änderung des Überlapps führt.

Der langsamere Abfall des relativistischen Wirkungsquerschnitts mit steigender Energie liegt begründet in der Lorentzkontraktion der Elektronenortswellenfunktion in Strahlrichtung. Deswegen erfahren die Ausläufer der Elektronenimpulswellenfunktion eine Lorentzenerweiterung; dies führt zu einem langsamer fallenden Überlapp.

Im Fall des kinematischen Einfangs tritt ein Dreikörperproblem mit Coulombwechselwirkung auf, das nicht allgemein gelöst werden kann. Deshalb

muß auf Näherungsmethoden zurückgegriffen werden. Der Ladungstransferprozeß ist nur dann ein *reiner* Dreikörperprozeß, wenn lediglich ein Elektron und zwei Kerne beteiligt sind. Sind noch weitere Elektronen vorhanden, können diese näherungsweise als passive Beobachter behandelt werden, deren Berücksichtigung erfolgt dann durch die Verwendung abgeschirmter Potentiale.

3.2.1 Klassische Methoden

Die Beschreibung des kinematischen Elektroneneinfangs durch klassische Verfahren beruht auf der Lösung der Bewegungsgleichungen nach Hamilton. Naturgemäß können solche Verfahren Interferenzeffekte nicht wiedergeben, da diese quantenmechanische Phänomene sind. Allerdings erhält man durch die zuerst vorgestellte Beschreibung nach Thomas eine in einem weiten Energiebereich gültige Skalierungsvorschrift. Das zweite angegebene Verfahren, ein Monte-Carlo-Ansatz mit klassischen Teilchenbahnen (CTMC), liefert erfahrungsgemäß sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment.

Thomas-Modell

Bei der Beschreibung des Elektronentransfers gibt es Rechnungen, die sowohl auf klassischen als auch auf quantenmechanischen Methoden beruhen. Der Elektroneneinfang nach Thomas [Tho27] nach einem klassischen Modell ist eine der ersten theoretischen Arbeiten zu diesen Problem überhaupt und wird hier erwähnt, da sich an diesem einfachen klassischen Ansatz schon die korrekte Energieabhängigkeit des Prozesses ablesen läßt. Hierbei wird ein Targetelektron zunächst am Projektil und dann am Targetkern gestreut. Die erste Wechselwirkung führt zur Emission des Elektrons in Vorwärtsrichtung unter dem Winkel ϑ . Die zweite Streuung um den Winkel $-\vartheta$ führt dazu, daß das Elektron unter 0° ausläuft und somit die gleiche Bewegungsrichtung wie das Projektil hat, wodurch es von diesem eingefangen werden kann. Der Wirkungsquerschnitt für diese Doppelstreuung ist gegeben durch [Tho27]:

$$\sigma \propto Z_T^2 Z_P^{7/2} v_P^{-11} \quad , \quad (3.16)$$

was in Übereinstimmung mit den Resultaten aus den quantenmechanischen Rechnungen ist.

(n)CTMC

Die Classical-Trajectory-Monte-Carlo(CTMC)-Methode ist eine klassische Methode zur Simulation von Stoßprozessen zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten. Sie wurde erstmals von Abrines und Percival [AP66] zur Beschreibung eines Dreikörperproblems vorgeschlagen. Danach wurde diese Methode von R. Olson und A. Salop [OS77] weiterentwickelt und zur Beschreibung von Systemen mit mehreren Elektronen erweitert.

Hier wurde gezeigt, daß die Trajektorie des Elektrons eines wasserstoffähnlichen Ions durch eine Keplerbahn beschrieben werden kann. Die Forderung, daß das Modellatom stabil sein soll und die Bindungsenergie korrekt wiedergegeben werden soll, führt zur mikrokanonischen Verteilung. Zur Initialisierung wird die Bindungsenergie E_B festgelegt und eine Exzentrizität ϵ gewählt. Dann wird daraus Startort und Geschwindigkeit ermittelt und der Ellipse mittels Eulertransformationen eine zufällige Orientierung gegeben, das heißt E_B ist fest für ein bestimmtes n , die zufälligen Parameter sind $\epsilon, \alpha, \theta, \phi$ und η .

Die Vorgehensweise ist wie folgt:

- Im ersten Schritt werden wie zuvor beschrieben die Anfangsbedingungen für den Stoß geschaffen: die Modellierung des Targetatoms, das heißt die Erzeugung der Anfangsverteilung der Targetelektronen.
- Danach wird der eigentliche Stoßprozeß simuliert. Hierzu werden nach der Wahl des Stoßparameters b die klassischen Bewegungsgleichungen der zuvor initialisierten Stoßteilnehmer numerisch integriert.
- In einem letzten Schritt nimmt man die Klassifikation der unterschiedlichen Prozesse nach dem Stoß vor. Dabei kann es zu folgenden Endzuständen kommen:
 - Das Elektron befindet sich nicht mehr im Potential des Targets und seine kinetische Energie ist kleiner als seine potentielle Energie im Feld des Projektils: das Elektron wurde in das Projektil eingefangen.
 - Die Bewegungsenergie des Elektrons ist größer als seine potentielle Energie: das Elektron wurde ionisiert.
 - Die durch den Stoß auf das Elektron übertragene Energie ist kleiner als seine Bindungsenergie: das Elektron wurde angeregt.

Die (n)CTMC-Methode beruht auf den Evolutionsgleichungen der klassischen Mechanik gemäß der Hamiltonschen Formulierung. Hiernach bewegen sich die gebundenen Elektronen in Keplerbahnen um den gemeinsamen Schwerpunkt mit dem Kern. Zur Lösung der Bewegungsgleichung benötigt man die Hamiltonfunktion des Systems und den Phasenraumvektor zum Zeitpunkt $t = t_0$.

Die n CTMC-Variante [OUSB87] stellt eine Weiterentwicklung der CTMC-Methode dar [OS77, Ols83] und berücksichtigt explizit alle Elektronen in dem Stoß, das heißt, es werden die Kräfte zwischen dem als nackt angenommenen Projektilion und dem Targetkern sowie dessen Elektronen eingeschlossen. Ausgenommen sind Elektron-Elektron-Wechselwirkungen, die sich näherungsweise im Einsatz von effektiven Kernladungen widerspiegeln.

Die Hamiltonfunktion der klassischen Mechanik der drei Teilchen (Target \mathbf{T} , Projektil \mathbf{P} und Elektron \mathbf{e}) ist gegeben durch [Gol91, Ols83]:

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{T} + \mathfrak{V} = \frac{p_P^2}{2m_P} + \frac{p_T^2}{2m_T} + \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i=1}^N \frac{z_P z_i}{R_{Pi}} + \sum_{i=1}^N \frac{z_T z_i}{R_{Ti}} + \frac{z_P z_T}{R_{PT}} \quad (3.17)$$

mit N der Anzahl der Targetelektronen, $m_{T,P,e}$ den Massen der Teilchen Target, Projektil und Elektron, p_i und q_i deren Impulsen und Koordinaten und V den Coulombpotentialen zwischen den Punktladungen. Daraus ergeben sich $6(N + 2)$ gekoppelte Differentialgleichungen

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (3.18)$$

und

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (3.19)$$

Mit Zufallszahlen werden die Trajektorien initialisiert, der Stoßparameter, die Ebene und die Exzentrizität der Elektronenbahn bestimmt.

Die Elektronen weisen beim Start eine mikrokanonische Verteilung auf, die sich aus den sequentiellen Bindungsenergien unter Berücksichtigung von Abschirmungseffekten des Targetatoms ergibt, was eine korrekte Gesamtenergie gewährleistet. Die Exzentrizitäten ergeben sich aus Phasenraumbetrachtungen [Ols81]. Da ein derart initialisiertes Atom zeitlich nicht stabil ist, wird nach der Methode von Kirschbaum und Wilets durch die Wahl eines geeigneten Potentials der Kollaps verhindert [MO87].

Da die klassische Beschreibung des Stoßvorgangs kontinuierliche Werte für die Gesamtenergie und den Drehimpuls zuläßt, müssen diese noch in

„klassische“ Quantenzahlen umgewandelt werden [POB01]. Die klassische Hauptquantenzahl n_c ergibt sich aus

$$n_c = \frac{q}{\sqrt{2E}} \quad (3.20)$$

mit q der Ladung des Projektilions und E der Energie des Elektrons bezüglich des Projektils. Die Hauptquantenzahl erhält man aus der Beziehung:

$$\left[(n-1)\left(n-\frac{1}{2}\right)n \right]^{1/3} \leq n_c \leq \left[n\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1) \right]^{1/3}. \quad (3.21)$$

Der klassische Drehimpuls ℓ_c ist gegeben durch

$$\ell_c = [(xy - yx)^2 + (xz - zx)^2 + (yz - zy)^2]^{1/2} \quad (3.22)$$

woraus sich mit

$$\ell \leq \ell_c \leq \ell + 1 \quad (3.23)$$

die Drehimpulsquantenzahl ℓ ermitteln läßt.

Die Bestimmung der magnetischen Quantenzahl m_j erfolgt durch die Projektion des Gesamtdrehimpulses j auf die Quantisierungsachse [Fio04].

Der Wirkungsquerschnitt eines bestimmten Prozesses σ_P ergibt sich aus

$$\sigma_P = \pi b_{max}^2 \left(\frac{N_P}{N} \right) \quad (3.24)$$

mit der Gesamtzahl berechneter Trajektorien N für Stoßparameter kleiner als b_{max} und N_P der Anzahl derjenigen Trajektorien, die zu dem gewünschten Prozeß gehören. In der Regel werden einige Tausend Bahnen berechnet.

Es wird schnell klar, daß diese Methode nicht auf Prozesse mit einem sehr kleinen Wirkungsquerschnitt angewendet werden sollte. Denn für den Fehler gilt

$$\Delta\sigma_P = \sigma_P \sqrt{\frac{N - N_P}{NN_P}} \approx \sigma \sqrt{1/N_P}, \quad (3.25)$$

das heißt: wenn man für einen Prozeß, der mit einer Wahrscheinlichkeit k auftritt, einen relativen Fehler $\Delta\sigma/\sigma$ fordert, muß man $N = (1 - k)/(k \cdot (\Delta\sigma/\sigma)^2)$ Bahnen berechnen. Bei angenommenen Werten für $k = 1\%$ und $\Delta\sigma/\sigma = 1\%$ ergeben sich rund 10^6 Trajektorien.

3.2.2 Wellenmechanische Methoden

Im Unterschied zu den zuvor besprochenen klassischen Ansätzen folgt in diesem Abschnitt die Diskussion quantenmechanischer Lösungsansätze. Zuerst wird die diesen zugrundeliegende Bornsche Näherung eingeführt, danach folgt die Erläuterung der in dieser Arbeit angesprochenen Umsetzungen dieser Näherung.

Allgemeines über Näherungsmethoden Das quantenmechanische n -Teilchensystem kann nichtrelativistisch durch die zeitabhängige Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n, t)$ in der Ortsdarstellung beschrieben werden. Hierbei ist \vec{r}_i der Ort des i -ten Teilchens, σ_i dessen Spin, und t ist die Zeit. Die Entwicklung von Ψ gehorcht der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(\mathfrak{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi = 0 . \quad (3.26)$$

\mathfrak{H} ist der Hamiltonoperator des Systems

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{T} + \mathfrak{V}(\vec{r}, t) \quad (3.27)$$

mit dem Operator der kinetischen Energie \mathfrak{T} und dem des Potentials $\mathfrak{V}(\vec{r}, t)$. Für zeitunabhängige Potentiale faktorisiert die Schrödingergleichung in einen zeitabhängigen und einen zeitunabhängigen Teil. Die Wellenfunktion läßt sich dann als

$$\Psi = \psi e^{-iEt} \quad (3.28)$$

darstellen. Hier sind ψ die Eigenfunktionen der stationären Schrödingergleichung mit den Eigenwerten E .

Ein häufig zu findender Ansatz zur quantenmechanischen Behandlung von Streuproblemen ist die Störungsrechnung, bei der der Hamiltonoperator \mathfrak{H} aufgeteilt wird in

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_0 + \mathfrak{V} , \quad (3.29)$$

wobei \mathfrak{H}_0 das ungestörte System beschreibt und \mathfrak{V} der Störung entspricht, die einen Übergang des Systems ($\psi_i \rightarrow \psi_f$) initiieren kann. Die $\psi_{i,f}$ sind Lösung des vollständigen Systems \mathfrak{H} .

Eine Darstellungsmöglichkeit ist die *Bornsche Reihe*. Die Theorie liefert dann Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Anfangszustand ψ_i in den Endzustand ψ_f . Diese beiden Zustände sind auch Eigenzustände von \mathfrak{H}_0 , da die Störung lokalisiert ist und für $r \rightarrow \pm\infty$ verschwunden ist.

Mit $\phi(\vec{k})$ als Eigenzustand zu \mathfrak{H}_0 mit dem Energieeigenwert E ergibt sich aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung [LS50] die Bornsche Reihe des Übergangsmatrixelementes $\mathcal{T}_{\vec{k},\vec{k}'}$ [Jel88]:

$$\mathcal{T}_{\vec{k},\vec{k}'} = \underbrace{\langle \phi(\vec{k}') | \mathfrak{V} | \phi(\vec{k}) \rangle}_{1.\text{Ordnung}} - \underbrace{\frac{\langle \phi(\vec{k}') | \mathfrak{V} | \phi(\vec{k}'') \rangle \langle \phi(\vec{k}'') | \mathfrak{V} | \phi(\vec{k}) \rangle}{E'' - E - i\epsilon}}_{2.\text{Ordnung}} + \dots \quad (3.30)$$

Ist diese Störung vergleichsweise klein, so kann man die Bornsche Reihe nach dem erstem Glied abbrechen und man erhält die *erste* Bornsche Näherung. Diese läßt sich als *eine* Wechselwirkung zwischen Projektil und Target ohne Berücksichtigung eines Zwischenzustands auffassen. Der *zweiten* Bornschen Näherung entspricht eine *zweistufige* Wechselwirkung, das heißt, der Übergang erfolgt über einen Zwischenzustand [Jel88].

Ein exakt gültiges Ergebnis erhält man aber nur, wenn man alle möglichen Zwischenzustände mit beliebig vielen Mehrfachwechselwirkungen zuläßt.

Es gibt eine Vielzahl von Näherungen in unterschiedlichen Ordnungen, die sowohl absolute als auch mehrfachdifferentielle Wirkungsquerschnitte berechnen. Im folgenden werden die Näherung nach Oppenheimer-Brinkman-Kramers, die Eikonalnäherung und die Näherung mit verzerrten Kontinuumswellen (CDW) vorgestellt.

Roothaan-Hartree-Fock-Wellenfunktionen Zur besseren Beschreibung des Targets können anstelle von Wasserstoff-Wellenfunktionen Roothaan-Hartree-Fock-Wellenfunktionen benutzt werden [CR74]. Diese lassen sich schreiben als

$$\Phi = \mathfrak{A}(\phi_1, \dots, \phi_n) \quad (3.31)$$

\mathfrak{A} ist der Antisymmetrisierungsoperator, n die Anzahl der Elektronen und ϕ_n sind die Elektronenwellenfunktionen. Die Orbitale ϕ werden charakterisiert durch drei Indizes. λ repräsentiert die Symmetrie der Orbitale, α unterscheidet die nach λ entarteten Unterorbitale, i bezeichnet das i -te Orbital der Symmetrie λ . Sie lassen sich entwickeln gemäß

$$\phi_{i\lambda\alpha} = \sum_p \chi_{p\lambda\alpha} C_{i\lambda p}. \quad (3.32)$$

Der Index p bezieht sich auf die p -te Basisfunktion der Symmetrie λ . Die Basisfunktionen χ sind folgendermaßen aufgebaut:

$$\chi_{p\lambda\alpha}(r, \theta, \phi) = R_{\lambda p}(r) Y_{\lambda\alpha}(\theta, \phi) \quad (3.33)$$

mit

$$R_{\lambda p}(r) = [(2n_{\lambda p})!]^{-1/2} \cdot (2\zeta_{\lambda p})^{n_{\lambda p}+1/2} \cdot r^{n_{\lambda p}-1} \cdot e^{-\zeta_{\lambda p}r}, \quad (3.34)$$

und $Y_{\lambda\alpha}(\theta, \phi)$ sind normierte Kugelflächenfunktionen. Es gilt $n_{\lambda p} \geq \lambda + 1$, und der Exponent $\zeta_{\lambda p}$ ist durch einen Optimierungsprozeß so gewählt, daß die Bindungsenergie bestmöglich wird. Die Entwicklungskoeffizienten $C_{i\lambda p}$ werden nach Hartree-Fock-Gleichungen [Har57] iteriert.

OBK-Näherung

Eines der ersten Modelle, das die Methoden der Quantenmechanik zur Berechnung des Ladungstransfers anwandte, war die Oppenheimer-Brinkman-Kramers-Näherung [Opp28, BK30]. Sie ist eine Theorie in erster Bornscher Näherung und basiert auf zwei Grundannahmen:

- Die Relativbewegung wird durch ebene Wellen beschrieben.
- Das internukleare Potential wird nicht berücksichtigt, da dieses keinen großen Einfluß auf die Einfangwahrscheinlichkeiten haben sollte.

Der Einfangwirkungsquerschnitt für einen Übergang $n_i(Z_T) \rightarrow n_f(Z_P)$ ist gegeben durch

$$\sigma_{n_i n_f} = \frac{\pi 2^{18} (Z_P Z_T)^5 v^8}{5 n_i^5 n_f^3 \left[v^4 + 2v^2 \left(\frac{Z_T^2}{n_i^2} + \frac{Z_P^2}{n_f^2} \right) + \left(\frac{Z_T^2}{n_i^2} - \frac{Z_P^2}{n_f^2} \right)^2 \right]^5} \quad (3.35)$$

Gleichung (3.35) läßt sich für den Fall sehr hoher Energien vereinfachen zu

$$\sigma_{n_i n_f} = \frac{\pi 2^{18} (Z_P Z_T)^5}{5 n_i^5 n_f^3 v^{12}}, \quad (3.36)$$

woran sich die asymptotische Skalierung $\propto v^{-12}$ ablesen läßt, desweiteren ergibt sich die n_f^{-3} -Regel aus [Opp28]. Ebenso sind die starken Z^5 -Abhängigkeiten sowohl für die Kernladungszahl des Projektils als auch für die des Targets zu sehen.

Da die OBK1-Näherung (das bedeutet OBK-Näherung in erster Ordnung Störungstheorie) die experimentellen Ergebnisse nur unzureichend beschreibt, wurde das internukleare Potential miteinbezogen [JS53]. Das verbesserte die Übereinstimmung bei den damaligen ($H^+ \rightarrow H$)-Stoßsystemen stark. Allerdings wird für stark unsymmetrische Stoßsysteme ($Z_T \gg Z_P$)

eine noch größere Abweichung als die der OBK1-Theorie beobachtet. Geht man zur OBK2 über, das heißt zur zweiten Bornschen Näherung, so zeigt sich, daß diese eine noch schlechtere Beschreibung als die OBK1 ist. Dies ist ein Zeichen dafür, daß die OBK-Näherung das Stoßsystem nur unzureichend beschreiben kann. Bei der Wahl einer geeigneten Beschreibung sollte der Übergang zu einer Näherung höherer Ordnung mit einer Verbesserung der Vorhersage einhergehen.

Das Hauptproblem ist in der Langreichweitigkeit des Coulombpotentials zu suchen, siehe hierzu D. P. Dewangan und J. Eichler [DE87]. Werden die Coulomb-Randbedingungen nicht richtig in die Rechnung miteinbezogen, kann dies dramatische Einflüsse auf das Ergebnis der Berechnungen haben.

Erste relativistische Rechnungen [Mit64, Sha79, MS80] liefern eine asymptotische Hochenergieabhängigkeit von E^{-1} , im Einklang mit Rechnungen, die in der Stoßnäherung (IA⁸) [JAA80] durchgeführt wurden. Dies steht im Gegensatz zu den zuvor vorgestellten nichtrelativistischen Rechnungen [MC70, DE94], die einen Abfall des Wirkungsquerschnittes $\sim E^{-6}$ vorhersagen.

Eikonalnäherung

Die Eikonalnäherung liefert eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten [Eic85]. Beim Vergleich mit Meßdaten liegt die zuvor besprochene OBK-Näherung in erster Bornscher Näherung um den Faktor 10 zu hoch. Auch das Einschließen von Termen zweiter Ordnung schafft es nicht, die Vorhersagen an die Meßdaten anzunähern.

Die zuvor besprochene OBK-Näherung berücksichtigt nicht, daß sich die Wellenfunktionen des Anfangs- und Endzustandes wechselseitig beeinflussen. Der Eikonalansatz berücksichtigt dies, indem die vollständigen Coulomb-Kontinuumsfunktionen durch ihre asymptotische Form ersetzt werden, das heißt durch Einführung eines Phasen-Faktors, der von den Elektronenkoordinaten abhängt. Dieser Ansatz hat seinen Ursprung in der Optik [Mol47].

Die nichtrelativistische Eikonaltheorie [EN80, Eic81] beschreibt in der POST(PRIOR)-Version einen engen Stoß (*hard collision*) des Elektrons mit dem Target (Projektil) nach (gefolgt von) multiplen peripheren Stößen (*soft collision*) mit dem Projektil (Target). Nicht eingeschlossen sind Stöße nach dem Thomasmechanismus. Die Eikonalmethode schließt Born-Terme höherer Ordnung ein, wenngleich auch nur näherungsweise. Die damit

⁸IMPULSE APPROXIMATION

berücksichtigten Mehrfachstreubeiträge sind dabei von großer Bedeutung. Sie sorgen für die Reduzierung des Wirkungsquerschnittes unter den OBK-Wert.

Auch ist man nicht mehr beschränkt auf die Berechnung des Einfangs aus $1s$ -Anfangszuständen, welche einfacher zu behandeln sind. Der Formalismus wurde beschrieben in [CE79a, EC79, CE79b] und basiert auf den Annahmen:

- Das Projektil bewegt sich auf einer klassischen Bahn.
- Anfangs- und Endzustand sind wasserstoffähnliche Orbitale.
- Der Endzustand ist durch einen Eikonol-Phasenfaktor verzerrt. Dieser Eikonol-Phasenfaktor berücksichtigt die Coulombstörung, allerdings nur für einen der beiden Zustände vollständig.

Somit ist dieses Verfahren unsymmetrisch in Bezug auf die Beschreibung des Anfangs- beziehungsweise Endzustandes. Je nach dem, ob das Target oder das Projektil in erster Ordnung behandelt wird, spricht man von den POST-PRIOR-Varianten. In der PRIOR-Version wird die Elektron-Projektil-Wechselwirkung in erster Ordnung und die Elektron-Target-Wechselwirkung in allen Ordnungen behandelt.

Ein Kriterium, um sich für die POST- oder PRIOR-Variante zu entscheiden, liefert das sogenannte *Higher-Potential*-Kriterium. Wenn

$$\begin{aligned} Z_P < Z_T & \text{ benutze PRIOR-Variante} \\ Z_P > Z_T & \text{ benutze POST-Variante} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Dieses Kriterium führt allerdings zu Unstetigkeiten in der Beschreibung der Wechselwirkungsprozesse [RSG96].

In einer relativistischen Eikonolnäherung ergibt sich ein Skalierungsgesetz für den Übergang $1s \rightarrow 1s$ [Eic85]

$$\sigma_{1s \rightarrow 1s}^{Eikonol} = \frac{2^8 \pi Z_P^5 Z_T^5}{5v^2 (Z_T^2 + q_+^2)^5} \frac{\gamma + 1}{2\gamma^2} \frac{\pi \nu_T}{\sinh(\pi \nu_T)} \cdot e^{-2\nu_T \arctan(q_+/Z_T)} (S_{eik} + S_{mag} + S_{orb}), \quad (3.38)$$

mit $\nu_T = Z_T/v$ (Sommerfeldparameter), $q_+ = (E_i - E_f/\gamma)/v$. Der Term S_{eik} entspricht dem Wirkungsquerschnitt berechnet in relativistischer Kinematik, allerdings mit nichtrelativistischen Wellenfunktionen zur Beschreibung des Elektrons (spinloses Teilchen). In S_{mag} ist der magnetische Beitrag zum Einfangprozeß bedingt durch die Wechselwirkung des magnetischen Moments

des Elektrons mit dem Magnetfeld, welches aus der relativistischen Bewegung der Projektilladung stammt. Der Korrekturterm S_{orb} berücksichtigt relativistische Modifikationen der Elektronenorbitale und damit den Einfluß der relativistischen Spin-Bahn-Wechselwirkung. Tabellierte Wirkungsquerschnitte aus Rechnungen in der relativistischen Eikonalnäherung finden sich in [ISE93].

CDW-Näherung

Die Continuum Distorted Wave (CDW)-Näherung ist eine weitere, sehr erfolgreiche Methode, um Reaktionsquerschnitte von Dreikörperproblemen zu berechnen. Die Methode wurde erstmalig von Cheshire [Che64] zur Berechnung von resonanten ($H^+ \rightarrow H$)-Stößen beschrieben, danach von Belkić, Gayet und Salin [BGS79] weitergeführt. Der Programmcode wurde veröffentlicht in [BGS81, BGS83, BGS84].

Die Übergangsamplitude wird unter der Annahme erhalten, daß das Wechselwirkungspotential \mathfrak{U} in Gleichung (3.29) als Störung behandelt werden kann. Das Konvergenzverhalten einer Störungsreihe hängt von der Stärke der betrachteten Störung ab: je kleiner diese ist, desto schneller wird die Reihe konvergieren. Die Methode der verzerrten Wellen (DW^9) ist ein Ansatz, die Stärke dieser Störung zu reduzieren. Hierbei wird das Wechselwirkungspotential \mathfrak{V} aufgespalten in

$$\mathfrak{V} = \mathfrak{U} + \mathfrak{W} \quad (3.39)$$

und das Verzerrpotential \mathfrak{U} zum Hamiltonoperator des Anfangssystems addiert. Das Potential \mathfrak{U} muß so gewählt werden, daß es die Langreichweitigkeit des Coulombpotentials berücksichtigt. Das daraus resultierende Streuproblem $\mathfrak{H}_{DW} = \mathfrak{H}_0 + \mathfrak{U}$ wird dann *exakt* gelöst:

$$\mathfrak{H}_{DW}\chi = E\chi \quad , \quad (3.40)$$

die Wellenfunktionen χ sind verzerrte Wellen, die den Randbedingungen des Eingangs- beziehungsweise Ausgangskanals genügen. Die Wellenfunktionen χ konvergieren gegen die Lösungen des ungestörten Hamiltonoperators. Sie sind gegenüber diesen lediglich um eine Phase ζ verschoben.

Damit kann bei der störungstheoretischen Behandlung der verbliebenen schwächeren Wechselwirkung \mathfrak{W} eine schnellere Konvergenz erreicht werden. Dies bedeutet, daß eine Näherung in erster Ordnung bereits zufriedenstellende Ergebnisse liefert.

⁹DISTORTED WAVE

Für die Übergangsamplitude gilt

$$A \sim \int dt \langle \chi | \mathfrak{W} | \Psi \rangle \quad (3.41)$$

unter der Bedingung, daß

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \langle \chi | \Psi \rangle = 0 \quad (3.42)$$

gilt, das heißt, daß der Verzerr-Operator keine Übergänge bewirkt. Somit ist die Störung nicht nur im Übergangoperator \mathfrak{W} enthalten, sondern teilweise auch in den Wellenfunktionen χ , was eine realistischere Beschreibung des Streuprozesses erlaubt. Obwohl es sich genaugenommen um eine Theorie in erster Bornscher Näherung handelt, ist durch die Verwendung der gestörten Wellenfunktionen schon ein Teil der Zwischenzustände enthalten, die zur Beschreibung von Prozessen höherer Ordnung (Mehrfachstreuprozesse) notwendig sind¹⁰.

Dies erklärt auch die Probleme der OBK-Näherung. In dieser konventionellen Bornschen Näherung, bei der ungestörte Wellen zur Beschreibung der ein- und auslaufenden Elektronenzustände verwendet werden, unterbindet die Langreichweitigkeit des Coulombpotentials eine erfolgreiche Beschreibung des Stoßsystems.

Als Erste-Ordnungs-Theorie gilt sie für diabatische Stoßgeschwindigkeiten, das heißt für Stöße, die schnell sind gegen die Bahngeschwindigkeit der Elektronen. Ist die Stoßgeschwindigkeit vergleichbar mit den Orbitalgeschwindigkeiten, ist ein Störungsansatz nicht mehr zu rechtfertigen, und es bedarf einer anderen, dem Problem angemesseneren Beschreibung, beispielsweise in der *molecular orbital* (MO)-Theorie [JW85].

Bei dem kinematischen Einfang wird ein echtes Dreikörperproblem betrachtet, welches nur dann vorliegt, wenn lediglich ein Elektron und zwei nackte Atomkerne wechselwirken. Die Verallgemeinerung auf komplexere Mehrelektronentargets kann im Rahmen des „Independent Electron Model“ erfolgen, bei dem die Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch ein effektives Potential erfolgt. Das heißt aber auch, daß ein Impulsübertrag auf das Target nur auf dieses als Ganzes erfolgen kann.

Zur Aufstellung des Hamiltonoperators definiert man folgende Koordinaten: Die Ortsvektoren von Target, Elektron und Projektil sind \vec{r}_T , \vec{r}_e , \vec{r}_P . Damit

¹⁰Nach Cheshire [Che65] sind Methoden, die Übergänge in intermediäre Zustände berücksichtigen, als Methoden „zweiter Ordnung“ zu bezeichnen.

lassen sich folgende Koordinaten definieren:

$$\vec{x} = \vec{r}_e - \vec{r}_T; \quad \vec{s} = \vec{r}_e - \vec{r}_P; \quad \vec{R} = \vec{r}_P - \vec{r}_T . \quad (3.43)$$

In der Stoßparameterformulierung wird angenommen, daß sich das Projektil auf einer geraden Bahn mit konstanter Geschwindigkeit \vec{v} bewegt, während das Target ruht. Mit \vec{b} als Stoßparameter gilt $\vec{R} = \vec{b} + \vec{v} \cdot t$.

Die Entwicklung der Wellenfunktion des Stoßsystems wird durch die zeitabhängige Schrödingergleichung beschrieben

$$\mathfrak{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.44)$$

mit

$$\mathfrak{H} = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{Z_P}{s} - \frac{Z_T}{x} . \quad (3.45)$$

Der sich ergebende totale Wirkungsquerschnitt skaliert bei höheren Geschwindigkeiten mit v^{-11} , was in Übereinstimmung mit der OBK-Näherung in zweiter Ordnung ist.

Kapitel 4

Experimenteller Aufbau

In diesem Kapitel werden die Beschleunigeranlagen der Gesellschaft für Schwerionenforschung GSI vorgestellt. Der Schwerpunkt der Ausführungen liegt dabei bei dem Experimentierspeicherring ESR. Dessen Strahldiagnose und Strahlkühler werden kurz beschrieben.

Danach wird der Experimentierplatz, dessen Überschallgastarget sowie der Aufbau der Targetkammer erläutert.

Durch den Einsatz von Schwerionenspeicherringen in Kombination mit Strahlkühlung ergibt sich die Möglichkeit, Strahlen nackter hochgeladener Ionen hoher Luminosität zu nutzen, um damit einerseits hochpräzise Untersuchungen der Bindungsenergien vorzunehmen, und andererseits Stoßprozesse differentiell zu untersuchen.

Der Jettarget-Experimentierplatz am Experimentierspeicherring ESR der GSI bietet hervorragende Bedingungen für atomphysikalische Untersuchungen von Schwerionenstößen.

4.1 Die Beschleunigeranlage

Die Beschleunigeranlage der GSI ist die einzige Quelle für hochenergetische Schwerionen, die in der Lage ist, nahezu alle Ionenspezies bis hinauf zum nackten Uran mit hoher Qualität und Stromstärke zur Verfügung zu stellen.

Abbildung 4.1 zeigt eine Schemazeichnung der GSI-Beschleunigeranlagen, bestehend aus dem Linearbeschleuniger UNILAC, dem Schwerionensynchrotron SIS und dem Experimentierspeicherring ESR, sowie den Experimentierhallen nach dem Linearbeschleuniger und dem Schwerionensynchrotron.

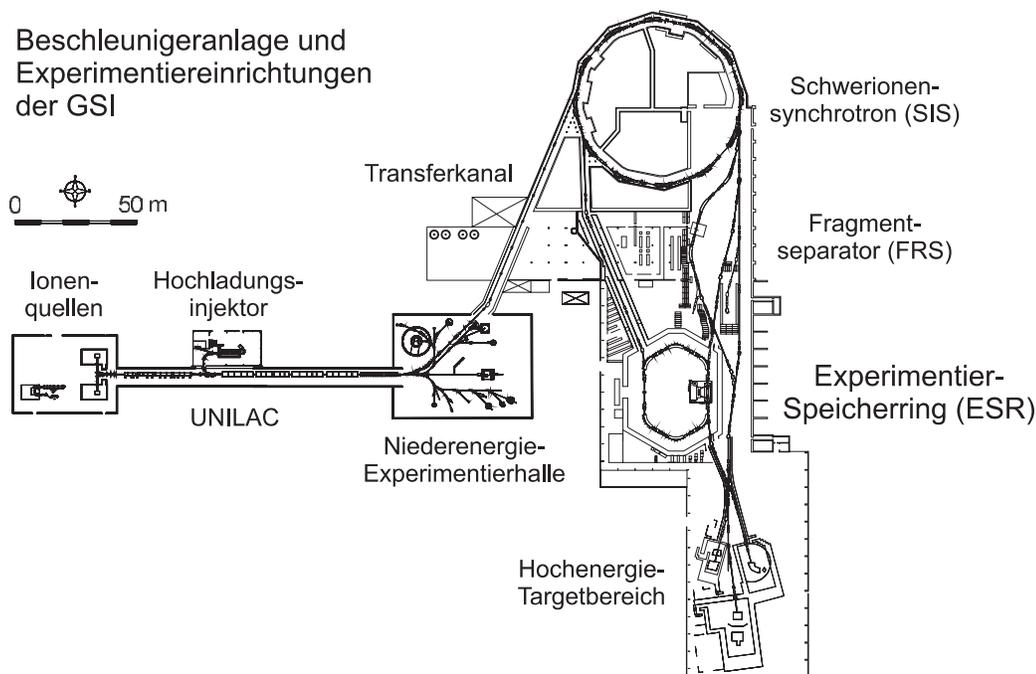


Abbildung 4.1: Schematische Übersicht über die GSI

Die Ionen werden durch die Ionenquellen (Penning- oder MEVVA-Quellen) erzeugt oder durch den Hochladungsinjektor (HLI) in den UNILAC eingeschossen. Die die Ionenquelle verlassenden Ionen haben eine Bewegungsenergie von einigen keV, bevor sie in den Linearbeschleuniger eintreten. Hier werden die Ionen beschleunigt und deren Ladungszustand durch einen Gasstripper erhöht, um diese effizienter beschleunigen zu können. Es können Schwerionen bis hin zu Uran beschleunigt werden. Die erreichbare Energie je nach Ionenart lag erst bei 10 MeV/u, seit 1982 sind 20 MeV/u möglich. Die hier vorbeschleunigten Ionen werden dann über den Transferkanal in das Schwerionensynchrotron geleitet.

Um Schwerionenstrahlen in den höchsten Ladungszuständen zu erzeugen, das heißt, um die Innerschalenelektronen zu entfernen, sind sehr hohe Energie- und Impulsüberträge nötig. Hierzu werden niedriger geladene Projektilionen auf eine Stripper-Folie geschossen [SGF91] [SG98], wobei sich ein Ladungszustand einstellt, der durch das Gleichgewicht von Einfang in das Projektil und dessen Ionisation gegeben ist. Die zur effizienten Produktion nackter Uranionen erforderliche Energie liegt beispielsweise bei mindestens 300 MeV/u.

Diese hohen Energien können im Schwerionensynchrotron SIS erreicht werden. Hier können vollständig gestrippte Schwerionenstrahlen bis hin zu U^{92+} zur Verfügung gestellt werden, wobei in diesem Fall eine Teilchenenergie von einem GeV/u für U^{92+} möglich ist. Die mittleren Ionenraten von bis zu 10^9 Teilchen/s sind durch das Raumladungslimit gegeben [BF94].

4.1.1 Experimentierspeicherring (ESR)

Im Experimentierspeicherring ESR stehen für Experimente am Ring das Überschallgastarget (*Jettarget*) und der kalte Elektronenstrahl des Elektronenkühlers zur Verfügung. Massenmessungen, auch an kurzlebigen radioaktiven Isotopen, sind mit Hilfe der Schottky-Analyse möglich.

Der ESR mit einem Umfang von 108 m ist für Experimente mit gekühlten hochgeladenen Ionen ausgelegt, welche, wie zuvor beschrieben, im SIS beschleunigt und dann in den ESR transportiert werden (schematischer Aufbau siehe Abbildung 4.2). Die Experimente können nicht nur bei der Injektionsenergie durchgeführt werden, sondern durch entsprechendes Beschleunigen oder Abbremsen bei Energien zwischen 4 und 400 MeV/u¹. Das magnetische Biegevermögen der Ringmagnete von $B\rho = 10$ Tm erlaubt es, nackte Uranionen bis zu einer maximalen Energie von 560 MeV/u zu speichern.

Um den Einfluß des Dopplereffekts bei Experimenten zu verringern, ist es wünschenswert, die Strahlenergie möglichst klein zu wählen. Da aber die geforderten hohen Ladungszustände nur bei hoher Energie effizient erzeugt werden können, müssen die schnellen Ionen wieder auf niedrige Energien abgebremst werden.

Will man Untersuchungen an hochgeladenen und abgebremsten Ionen durchführen, muß man bedenken, daß Strahlverluste aufgrund von Umladungsreaktionen auftreten. Dies ist besonders bei kleinen Ionenenergien der Fall. Die bei einer Verlangsamung des Ionenstrahls auf eine Energie von 50 MeV/u erreichte Abbrems-Effizienz liegt bei 90% [SBB97b]. Den wesentlichen Umladungsprozeß stellt der radiative Einfang (REC) dar.

Der Zusammenhang zwischen der Umladungsrate λ und dem Umladungswirkungsquerschnitt σ ist gegeben durch [SRB97]:

$$\lambda = \tau^{-1} = \rho \cdot \sigma \cdot f \quad , \quad (4.1)$$

¹Seit kurzem (Ende 2003) ist es möglich, Schwerionen auf eine Energie von 4 MeV/u abzubremsen. Diese stark verlangsamten Strahlen sollen dann, nach einer nochmaligen Verlangsamung außerhalb des Ringes bis fast zum Stillstand, in eine Falle gebracht und dort untersucht werden.

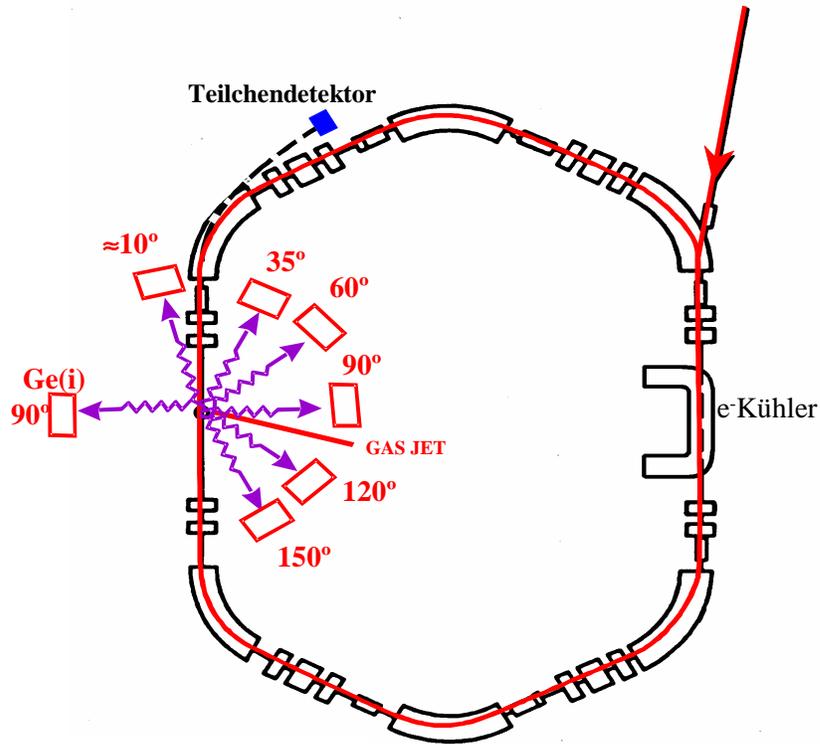


Abbildung 4.2: Eine schematische Übersicht über den ESR. Die technischen Parameter finden sich bei Franke [Fra87]

τ ist die Lebensdauer des Ionenstrahls im Speicherring, ρ die effektive Targetdicke (cm^{-2}) und f die Umlauffrequenz der Teilchen im Ring.

Bei Experimenten, welche als Target keine Festkörper, sondern Gase benutzen, existiert das Problem, daß deren relativ kleine Dichte (10^{11} Teilchen/ cm^{-3} im Vergleich zu 10^{21} Teilchen/ cm^{-3}) durch einen höheren Strahlstrom kompensiert werden muß, um akzeptable Ereignisraten zu erreichen.

Der Einsatz von Speicherringen anstelle von Linearbeschleunigern hat den Vorteil, daß die Ionen wiederkehrend mit einer Frequenz von bis zu einigen 10^6 s^{-1} das Target passieren und somit den Strahlstrom erhöhen, ohne daß ständig neue Ionen erzeugt werden müßten.

Die Zahl der Ereignisse pro Zeiteinheit erhält man aus der Beziehung

$$\frac{d}{dt}N = \sigma\mathcal{L} \quad (4.2)$$

mit der Luminosität \mathcal{L} , die die Leistungsfähigkeit des Beschleunigers angibt.

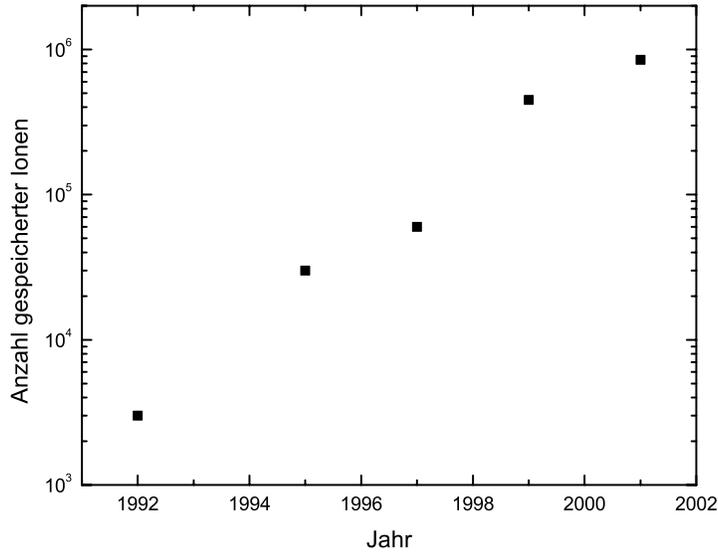


Abbildung 4.3: Die Intensität des Schwerionenstrahls am ESR im Verlauf der letzten zehn Jahre.

Für diese gilt

$$\mathcal{L} \propto \frac{fN}{s_h s_v} \quad (4.3)$$

mit der Umlauffrequenz f , der Zahl der Teilchen im Ring N und dem horizontalen und vertikalen Strahlquerschnitt $s_{h,v}$. Hohe Ströme und kleine transversale Strahlausdehnung sind demnach Bedingungen für eine hohe Luminosität. In den letzten Jahren ist es gelungen, die Anzahl gespeicherter Ionen signifikant zu steigern, siehe Abbildung 4.3.

Der Druck im Ring liegt bei $5 \cdot 10^{-11}$ mbar. Dies ermöglicht eine Lebensdauer des Ionenstrahls von einigen Stunden, je nach Ionenenergie. Bei Verwendung des Elektronenkühlers ist die Lebensdauer verkürzt, je nach Kühlerstromstärke. Mit dem Umfang des ESR von 108 m folgt eine effektive „Targetdicke“ des ESR von $1.3 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, siehe [Ley87]. Dies liegt zwei bis drei Größenordnungen unter der Targetdicke des Jettargets. Des weiteren stehen durch die Restgaszusammensetzung (79% H₂, 20% N₂ und 1% Ar) im Mittel nur ca. 5 Elektronen pro Restgasteilchen für die Rekombination zur Verfügung. Mit den 14 Elektronen bei einem Stickstofftarget ist der Ring ein um rund drei Größenordnungen dünneres Target als das Jettarget selbst.

4.1.2 Der Elektronenkühler

Die Phasenraumdichte der Ionen in einem Speicherring kann durch Strahlkühlung um einige Größenordnungen gesteigert werden. Die Strahlaufweitung durch Innerstrahlstreuung oder durch Wechselwirkung mit Teilchen im Restgas oder Gastarget wird effizient kompensiert [SBB94, WBB97]. Am ESR steht neben der stochastischen Vorkühlung ein Elektronenkühler zur Verfügung. Vor kurzem (Mai 2004) wurde ein Schwerionenstrahl durch Laserkühlung erfolgreich gekühlt.

Elektronenkühlung

Die Elektronenkühlung basiert auf der elektrostatischen Wechselwirkung der Ionen mit Elektronen im Kühlerabschnitt des ESR und führt zu einer schnellen Abnahme der Divergenz und der Energiebreite des Ionenstrahls. Die Impulsverteilung der Ionen oder Elektronen um deren Mittelwert kann als eine Temperatur verstanden werden, weshalb die Verringerung dieser Verteilung als Kühlung bezeichnet wird.

Hierzu wird dem „heißen“ Ionenstrahl im Kühlerabschnitt (siehe Abbildung 4.4) ein Elektronenstrahl der gleichen Geschwindigkeit überlagert. Dieser Elektronenstrahl muß möglichst „kalt“, das heißt monoenergetisch, sein und eine geringe Divergenz besitzen. In Strahlrichtung kann eine Temperatur von $T_{\parallel}=0.1$ meV, in transversaler Richtung $T_{\perp}=0.1$ eV erreicht werden. Die Transversaltemperatur ist durch die Kathodentemperatur von 1300 K bestimmt. In der Wechselwirkungszone übertragen die Ionen Energie auf die Elektronen. Damit läßt sich eine Verringerung der Impulsverbreiterung $\Delta p/p$ des Ionenstrahls von $\approx 10^{-3}$ auf $\Delta p/p \approx 10^{-5}$ erzielen [SBB97b]. Ein longitudinales Magnetfeld verhindert das raumladungsbedingte Auseinanderplatzen („Blow-Up“) des Elektronenstrahls.

Die Qualität des gekühlten Strahls ist durch das Gleichgewicht zwischen Kühlung und Aufheizung durch Innerstrahlstreuung gegeben [SBB94]. Dieses hängt sowohl von der Intensität des Ionenstrahls als auch von der des Elektronenstrahls ab. Durch Reduzierung der Ionenstromstärke konnte eine Abschwächung der Innerstrahlstreuung beobachtet werden [SBE96].

Die Elektronenstromstärke liegt in der Regel zwischen 0.1 und 0.5 A. Dies ist ein Kompromiß zwischen verbesserter Strahlqualität bei höheren Strömen und längerer Lebensdauer bei verminderten Strömen. Kühlerströme größer als 1 A konnten aufgrund von Instabilitäten des Elektronenstrahls nicht erreicht werden. Die maximale Energie für nacktes Uran, die durch die magne-

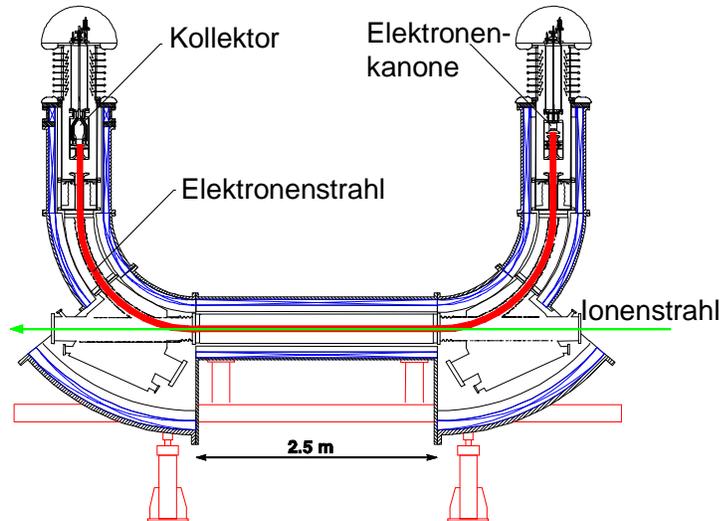


Abbildung 4.4: Schematischer Aufbau des Elektronenkühlers. Im Kühler sind Ionen und Elektronen kolinear überlagert.

tische Biegekraft bei bis zu 560 MeV/u liegt, ist durch den Elektronenkühler limitiert auf 400 MeV/u, da dessen Beschleunigungsspannung maximal 210 keV beträgt.

Schottkyspektrometrie

Die Schottkyspektrometrie ist eine zerstörungsfreie Diagnosemethode zur Messung der Umlauffrequenz der Teilchen im Ring, basierend auf der Frequenzanalyse des Strahlrauschens (Schottkyrauschen) [SBB97a]. Im ESR wird das Strahlrauschen mittels zweier gegenüberliegender Pick-Up-Elektroden aufgenommen. Jedes einzelne Teilchen bewirkt ein Signal, ein gleichförmiger Strahl (*coasting beam*) hat ein Rauschsignal zur Folge. Das Frequenzspektrum enthält alle Harmonischen λf_0 der Grundfrequenz $f_0 = v/U$ mit v der Strahlgeschwindigkeit und U der Länge der Teilchenbahn; (λ) ist ganzzahlig. Hieraus ist ersichtlich, daß ein gekühlter Strahl und damit die gleiche mittlere Geschwindigkeit aller Teilchen Voraussetzung zur Anwendbarkeit dieser Meßmethode ist. Die Breite der Linie im Schottkyspektrum ist proportional zur Impulsbreite des Strahls gemäß

$$\frac{\Delta f_0}{f_0} = \left(\frac{1}{\gamma^2} - \frac{1}{\gamma_t^2} \right) \cdot \frac{\Delta p}{p} . \quad (4.4)$$

Eine Abweichung von Sollimpuls führt zu einer Änderung der Teilchenbahn

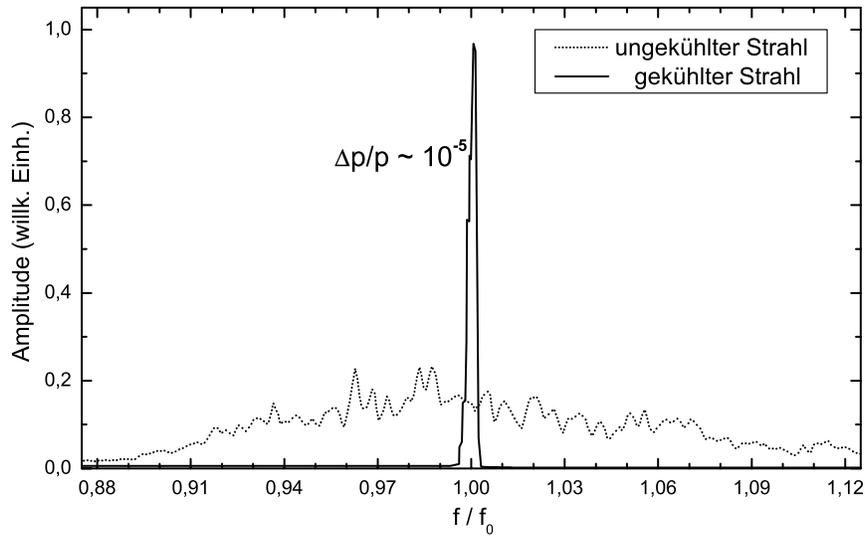


Abbildung 4.5: Ein typisches Schottkyspektrum. Zu sehen ist die Frequenzverteilung vor und nach dem Kühlvorgang. Daran läßt sich eine Impulsverteilung nach dem Kühlen von $\Delta p/p \approx 10^{-5}$ ablesen.

und dies zu einer veränderten Umlauffrequenz. Der Proportionalitätsfaktor berücksichtigt durch γ_t die sogenannte *transition energy*, das ist die Energie, bei der eine Impulsänderung keine Frequenzänderung zur Folge hat. Anhand Gleichung 4.4 wird deutlich, daß mit Hilfe des Frequenzspektrums die Impulsschärfe $\Delta p/p$ des Ionenstrahls beurteilt werden kann. In Abbildung 4.5 ist ein typisches Schottky-Spektrum zu sehen. Es zeigt die Impulsverteilung des Ionenstrahls vor und nach der Kühlung des Strahls und demonstriert, wie effizient die Elektronenkühlung die Impulsunschärfe des Ionenstrahls verbessern kann.

Darüberhinaus ermöglicht die Schottkyspektroskopie eine Massenmessung anhand des m/q -Verhältnisses sowie das Zählen von Teilchen im Ring und damit eine massenaufgelöste Lebensdauermessung.

4.2 ESR-Experimentierplatz

Während des Experimentes wurden Umladungsereignisse mittels Koinzidenztechnik am Überschallgastarget untersucht. Die Anordnung mehrerer Röntgendetektoren unter verschiedenen Beobachtungswinkeln erlaubt es, die Photonenwinkelverteilung zu vermessen. Die umgeladenen Projektile wurden

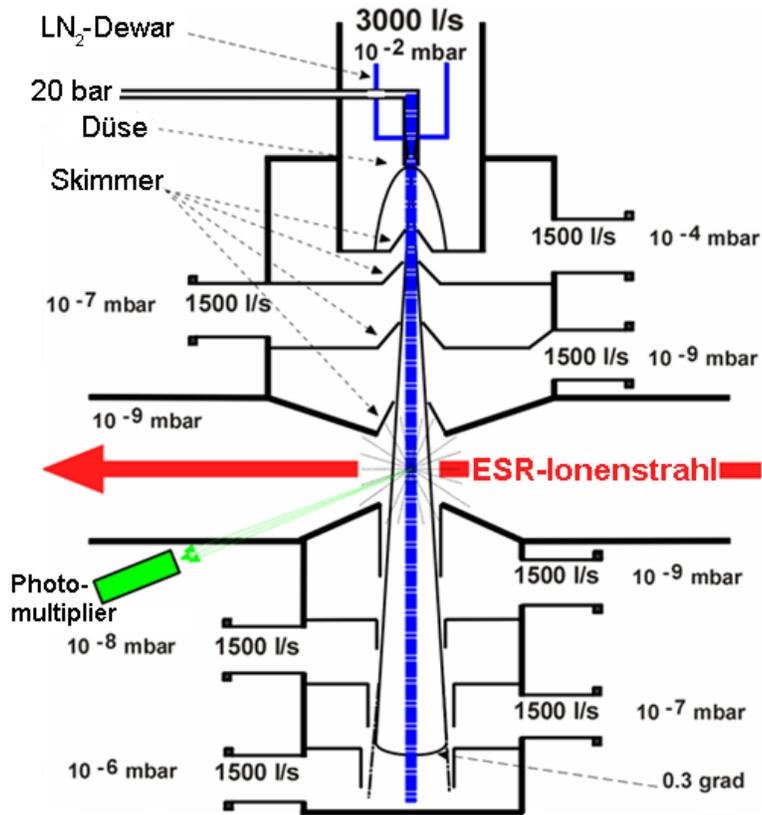


Abbildung 4.6: Schematischer Aufbau des internen Überschallgastargets am Speicherring ESR, entnommen aus [RBF97]. Die Überschallexpansion des Targetgases erfolgt im oberen Bereich, die Vernichtung des Gasstrahles im unteren. Neben den typischen Drücken in den einzelnen Pumpstufen sind auch die Saugleistungen angegeben.

mit Hilfe von Vieldrahtproportionalzählern (MWPC²) nach dem ersten Dipolmagneten nachgewiesen. Als Projektil kam Uran in den Ladungszuständen 92+ und 91+ zum Einsatz, als Target wurde Stickstoff (N₂) verwendet.

4.2.1 Das Überschallgastarget

Dieses Target ist ein Atomstrahl, der aus einer Überschallexpansion gewonnen wird. Das Targetgas expandiert durch eine Düse. Da das Ultrahochvakuum des Speicherrings ($\sim 10^{-11}$ mbar) durch den Betrieb des Targets nicht beeinträchtigt werden darf, ist einlaßseitig nach der Düse ein vierstufi-

²MULTI WIRE PROPORTIONAL COUNTER

ges differentielles Pumpsystem eingebaut (Abbildung 4.6). Ebenso wird der Jet-Sumpf differentiell gepumpt. Die einzelnen Pumpstufen sind durch Skimmer voneinander abgeteilt. Das Vakuum der ersten Stufe mit Düse und erstem Skimmer wird durch einen mehrstufigen Pumpstand erzeugt. Hier sind fünf ölfreie Wälzkolbenpumpen mit Saugvermögen von 12000 m³/h, 2000 m³/h, 500 m³/h, 200 m³/h und 40 m³/h im Einsatz. Der maximale Gasanfall darf 300 mbar l/s betragen. Die folgenden drei Stufen und die vier Stufen des Jetvernichters werden durch Turbomolekularpumpen differentiell gepumpt. Als Targetgase können N₂, H₂, Ar, Kr und Xe zum Einsatz kommen. Zur Rückgewinnung teurer Gase ist eine Recycling-Anlage vorhanden. Eine ausführliche Beschreibung ist in der Dissertation von Andreas Krämer [Krä01] zu finden.

Ein die Wechselwirkungszone beobachtender Photomultiplier kann zur Optimierung des Überlapps von Ionenstrahl und Gastarget verwendet werden. Hierzu wird durch Verlagerung des Ionenstrahls die Photonenzählrate maximiert.

In Tabelle 4.1 ist eine Übersicht der erreichten Targetdichten zusammengestellt [RBF97].

Gasart	Targetdichte [cm ⁻³]	Dicke [cm ⁻²]	Druck [mbar]
Ar	$3.1 \cdot 10^{13}$	$1.55 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{-9}$
Kr	$4.3 \cdot 10^{13}$	$2.15 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{-9}$
Xe	$\geq 5 \cdot 10^{13}$	$\geq 5 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{-9}$
N ₂	$5.5 \cdot 10^{12}$	$5.5 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{-9}$
H ₂	$\approx 2 \cdot 10^{12}$	$\approx 2 \cdot 10^{13}$	$5 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 4.1: *Dichte, Dicke und Druck des ESR-Überschallgastargets bei der Verwendung unterschiedlicher Gase.*

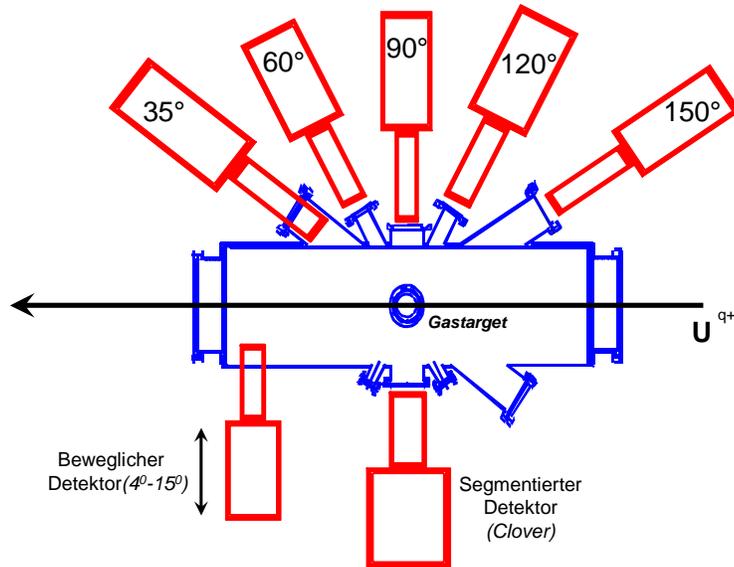


Abbildung 4.7: Schematischer Aufbau der Targetkammer am Überschallgastarget des ESR.

4.2.2 Die Targetkammer

Der Experimentierplatz umfaßt neben dem zuvor besprochenen Überschallgastarget noch die Targetkammer, um die die Detektoren zum Nachweis von Photonen angeordnet sind.

Die Röntgendetektoren

Zur Beobachtung der Röntgenstrahlung aus der Projektil-Target-Wechselwirkung sind rund um den Wechselwirkungsbereich Beobachtungsfenster in der Targetkammer angebracht (siehe Abbildung 4.7). Die Flansche sind mit Fenstern aus Beryllium (35° , 90° und 150° , Dicke $100 \mu\text{m}$) oder Edelstahl (60° , 120° , Dicke $50 \mu\text{m}$) versehen. Die Transmission liegt bei den Berylliumfenstern bei 100% ab 5 keV Röntgenenergie. Bei den Edelstahlfenstern beträgt diese 90% bei 50 keV. Am beweglichen Detektor ist ein Aluminiumfenster von 1 mm Dicke angebracht.

Die Photonendetektion erfolgt durch Halbleiterdetektoren. Zur Verringerung der Linienbreite, die durch die Dopplerverschiebung entsteht, siehe Gleichung (4.10), wurden die Fenster mit Schlitzblenden versehen. Diese dienen zur Beschränkung des Öffnungswinkels $\Delta\theta_{lab}$.

Die Nachweiseffizienz der Germanium-Halbleiterzähler ist in einem weiten

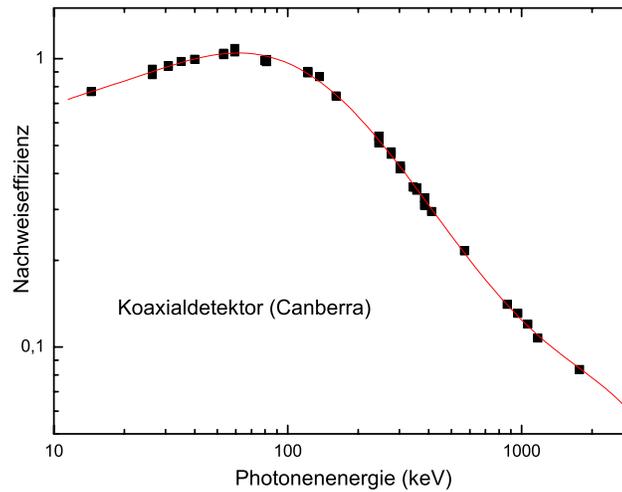


Abbildung 4.8: *Nachweiseffizienz des Germanium-Halbleiterzählers Coax-CANBERRA, Modell GX1018.*

Energiebereich oberhalb der K-Schalenkante, etwa 11 keV, nahezu konstant. Nahe der K-Schalenkante fällt die Nachweiswahrscheinlichkeit stark ab. Ebenso fällt diese bei Photonenenergien oberhalb von etwa 90 keV. In Abbildung 4.8 ist der Verlauf der Nachweiseffizienz in Abhängigkeit der Photonenenergie angegeben; die Punkte sind Messungen mit Eichquellen, die Kurve ist die Anpassung einer Modellkurve an die Meßwerte [PKS89].

Der segmentierte Röntgendetektor

Der Einsatz eines segmentierten Halbleiterdetektors (*Cloverdetektor*) ermöglicht das Studium von Photonenstreuprozessen zwischen den einzelnen Segmenten des Detektors. Dies erlaubt unter Ausnutzung der Polarisationsabhängigkeit der Streuwahrscheinlichkeiten eine Untersuchung der Polarisation der nachgewiesenen Photonen. Desweiteren eröffnet die Segmentierung die Möglichkeit einer verbesserten Dopplerkorrektur der Photonenenergien und damit der Verbesserung der Energieauflösung des Detektors.

Durch den Einsatz dieses Detektors unter einem Beobachtungswinkel von 90° (Abbildung 4.7) ergibt sich der Vorteil eines um den Faktor 100 vergrößerten Nachweisraumwinkels. Dies resultiert aus dem Einsatz eines

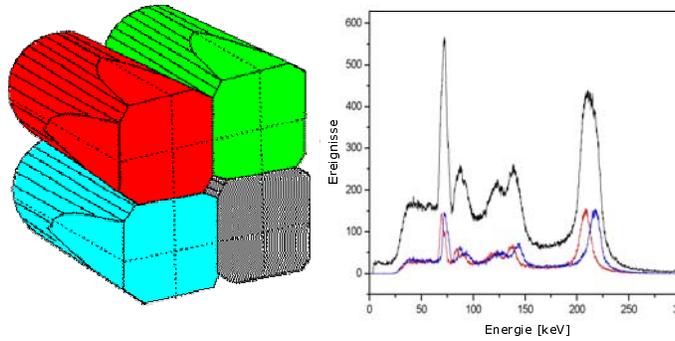


Abbildung 4.9: Der Cloverdetektor, bestehend aus vier Einzelsegmenten. Rechts im Bild ist ein experimentell gewonnenes Röntgenspektrum zu sehen, die obere Kurve ist das Summensignal, die beiden unteren Kurven sind die Energiesignale aus unterschiedlichen Segmenten; hier wird deutlich, daß die Energieauflösung durch die reduzierte Dopplerverbreiterung stark verbessert werden kann.

größeren Germaniumkristalls als bei den ansonsten eingesetzten Detektoren und aus der Möglichkeit, unter 90° einen kleineren Abstand zum Reaktionsvolumen einzuhalten.

Die Dopplerverbreiterung der gemessenen Linien wird durch eine Dopplerkorrektur, die für jedes Segment separat durchgeführt wird, deutlich reduziert, siehe Abbildung 4.9. Abgebildet sind die Photonenenergien zweier Segmente und das Summenspektrum aller vier Segmente.

4.2.3 Die Teilchendetektoren

Zum Nachweis umgeladener Projektionen sind nach dem ersten ESR-Dipolmagneten hinter der Targetkammer ortsauflösende Vieldrahtzähler (MWPC) eingebaut [KK03], siehe Abbildung 4.10. Diese besitzen eine Nachweiseffizienz von fast 100%, was für Koinzidenzmessungen von großer Bedeutung ist. Erfolgt die Umladung eines Projektils vor dem Dipolmagneten, so erfährt das Projektil im Feld des Magneten eine andere Ablenkung als die Ionen des Hauptstrahls. Aufgrund des durch die Umladung geänderten Verhältnisses von Masse zu Ladung werden Ionen, die ein oder mehrere Elektronen verloren haben, stärker zur Ringmitte abgelenkt. Ionen, die durch Elektroneneinfang umgeladen wurden, haben eine Bahn, die eine geringere Krümmung aufweist. Nach dem Magnet befinden sich die Vieldrahtzähler, mit deren Zeitsignal sich eine Photonen-Teilchen-Koinzidenzschaltung realisieren läßt.

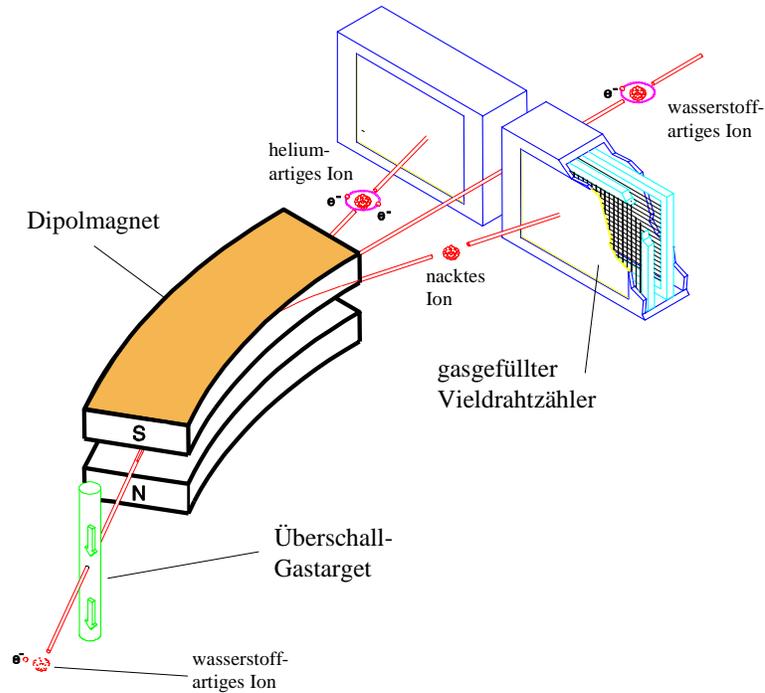


Abbildung 4.10: Anordnung der Vieldrahtzähler zum Nachweis der umgeladenen Projektile [Kle04].

4.3 Relativistische Transformationen

Um von den Meßwerten im Laborsystem auf die Werte im bewegten Emittersystem zu schließen, müssen die im Experiment beobachteten Photonenenergien und Intensitäten korrigiert werden. Die kinetische Energie $E_{kin}[\frac{MeV}{u}]$ der Ionen hängt mit dem relativistischen Gammafaktor wie folgt zusammen:

$$E_{kin} = (\gamma - 1)E_0 \quad , \quad (4.5)$$

wobei E_0 das Energieäquivalent der atomaren Masseneinheit $u = 931.494 \text{ MeV}/c^2$ darstellt. Die Geschwindigkeit in Einheiten der Lichtgeschwindigkeit $\beta = \frac{v}{c}$ erhält man aus

$$\beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2}} \quad . \quad (4.6)$$

Für Photonen, welche unter dem Winkel θ nachgewiesen werden, sind durch die Bewegung des emittierenden Ions die drei folgenden Korrekturen notwendig:

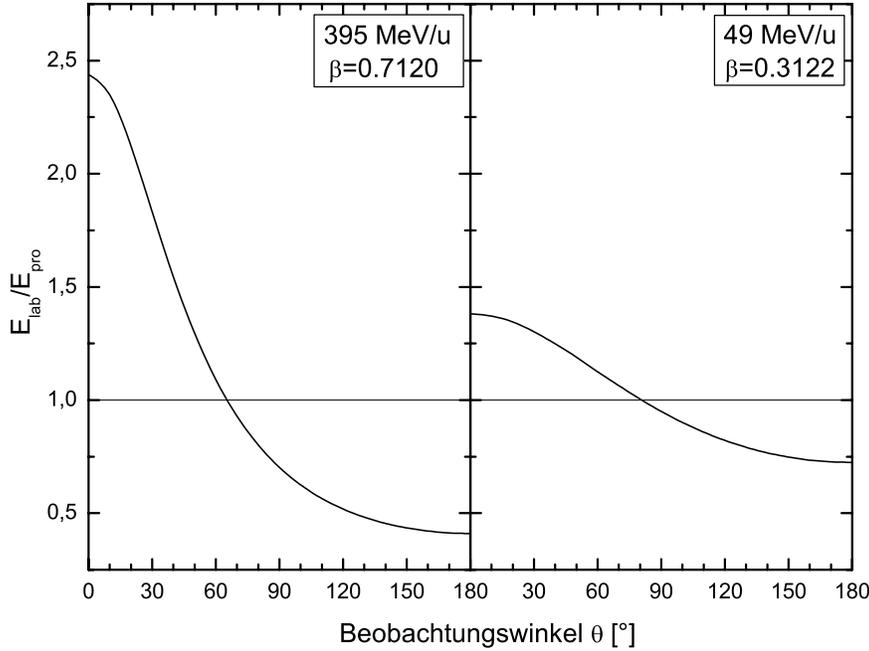


Abbildung 4.11: Dopplertransformation der Photonenenergie vom Emittersystem ins Laborsystem.

- 1.) Die Energie unterliegt der relativistischen Dopplerverschiebung:

$$E_{lab}(\theta) = \frac{E_{proj}}{\gamma(1 - \beta \cos \theta)} \quad (4.7)$$

Diese ist in Abbildung 4.11 für die niedrigste und für die höchste im Experiment verwendete Projektilenergie dargestellt.

- 2.) Die Raumwinkeltransformation lautet

$$\frac{d\Omega_{lab}}{d\Omega_{proj}} = \frac{1}{\gamma^2(1 - \beta \cos \theta_{lab})^2} \quad (4.8)$$

Dies entspricht interessanterweise dem Quadrat der Energietransformation aus Gleichung (4.7), siehe hierzu den rechten Teil von Abbildung 4.12.

- 3.) Der Beobachtungswinkel transformiert sich gemäß

$$\begin{aligned} \cos \theta_{proj} &= \frac{\cos \theta_{lab} - \beta}{1 - \beta \cos \theta_{lab}} \quad \text{oder} \\ \cos \theta_{lab} &= \frac{\cos \theta_{proj} + \beta}{1 + \beta \cos \theta_{proj}} \quad , \end{aligned} \quad (4.9)$$

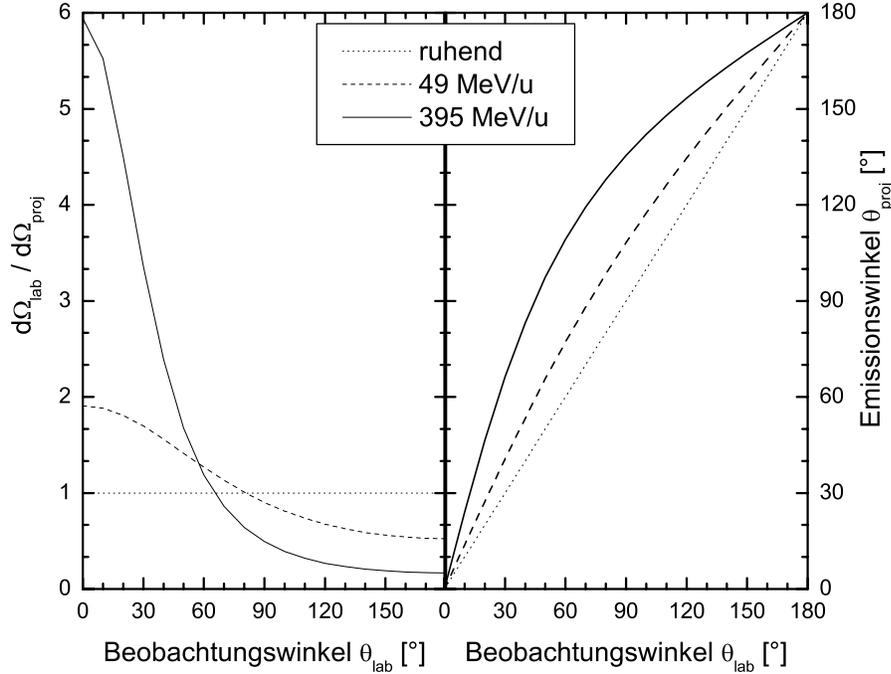


Abbildung 4.12: Transformation der Raumwinkel und Emissionswinkel vom Emitter- ins Laborsystem.

was der sogenannten *Aberration* entspricht. Dies bedeutet, daß die Ausbreitungsrichtung eines Photons in einem bewegten Bezugssystem von der in einem Ruhesystem abweicht [Hei54, p.59]. Die Winkeltransformation ist in Abbildung 4.12, linker Teil, dargestellt.

Aus Gleichung 4.7 läßt sich der Meßfehler der Photonenenergie ableiten. Diese ist gegeben durch die Unsicherheiten in der Strahlgeschwindigkeit β und dem Beobachtungswinkel θ . Es folgt für den relativen Meßfehler der Energie eines Röntgenquants:

$$\left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2 = \left(\frac{\beta \sin \theta_{lab}}{1 - \beta \cos \theta_{lab}} \Delta \theta_{lab}\right)^2 + \left(\gamma^2 \frac{\cos \theta_{lab} - \beta}{1 - \beta \cos \theta_{lab}} \Delta \beta_{lab}\right)^2. \quad (4.10)$$

Aufgrund des $(\sin \theta_{lab})$ -Terms trägt die Unsicherheit $\Delta \theta_{lab}$ unter einem Beobachtungswinkel von 0° respektive 180° nicht zu einem Meßfehler der Energie bei. Durch die Wahl der Strahlgeschwindigkeit $\beta = \cos \theta_{lab}$ kann die Unsicherheit durch $\Delta \beta$ minimiert werden, allerdings wird hier die Unsicherheit durch $\Delta \theta_{lab}$ maximal. Durch diese Betrachtung wird deutlich, daß durch eine Verringerung des Beobachtungsöffnungswinkels $\Delta \theta_{lab}$ die Linienbreite reduziert werden kann. Hierzu wurden wie zuvor erwähnt Schlitzblenden vor den Röntgendetektoren angebracht.

Kapitel 5

Datenauswertung

5.1 Analyse der List-Mode-Daten

Während des Experimentes wurden die Informationen in Form von List-Mode-Daten unter Verwendung des GSI-Datenaufnahmesystems MBS¹ gespeichert. Dieses ermöglicht dem Experimentator, das Experiment „off-line“, das heißt nach dem eigentlichen Experiment, im Computer zu wiederholen. Hierbei können durch Setzen von Bedingungen auf Zeit- und Energiebereiche bestimmte Ereignisse hervorgehoben werden. Zur Analyse wurde das neue Analyseprogramm der GSI ,GO4², verwendet, welches auf ROOT [BR97] basiert.

Die während des Experimentes aufgezeichneten Parameter sind die Photonenenergie sowie das dazugehörige Zeitsignal von den Halbleiterdetektoren sowie das Zeitsignal, das vom Projektildetektor stammt. Die Energie- und Zeitsignale werden zur anschließenden Verarbeitung digitalisiert. Zu jedem der Detektoren wird ein Energie- und ein Zeitspektrum erzeugt. Das Zeitspektrum ist ein Differenzspektrum, gebildet aus den Zeitsignalen von Projektildetektor und Photonendetektor. In Abbildung 5.1 auf der nächsten Seite ist ein solches Zeitspektrum gezeigt. Dieses wurde bei einer Projektilenergie von 132 MeV/u unter dem Beobachtungswinkel 150° aufgenommen. Die graue Kurve zeigt das Zeitdifferenzspektrum ohne weitere Bedingung. Es wird deutlich, daß bereits die Rohdaten sehr wenig zufällige Ereignisse aufweisen. Fordert man, daß das nachgewiesene Röntgenquant zur Ly α -Serie gehören muß, so ergibt sich die schwarze Kurve. Der Zeitpeak der

¹MULTI BRANCH SYSTEM

²GSI OBJECT ORIENTED ON-LINE OFF-LINE SYSTEM

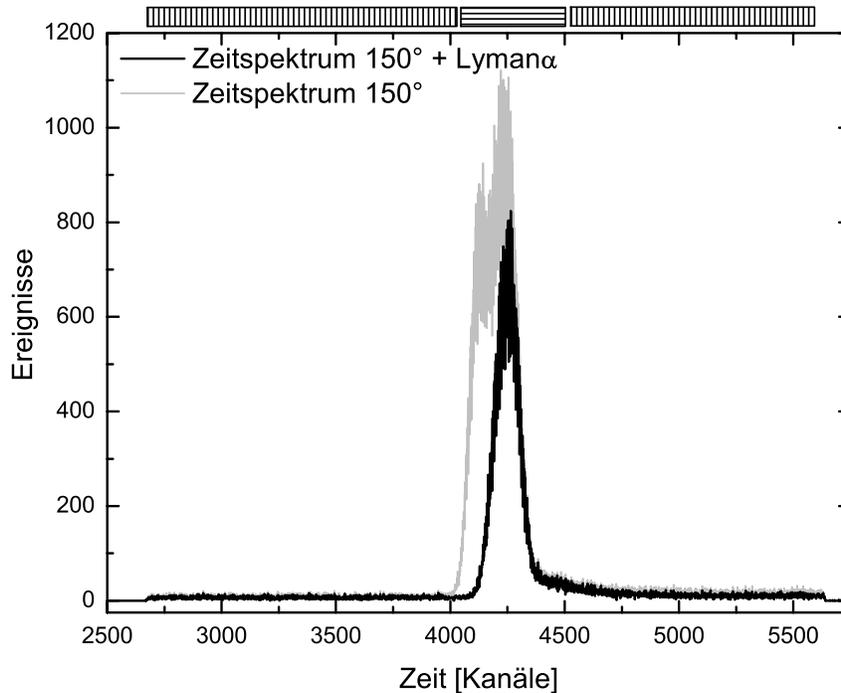


Abbildung 5.1: Das Zeitspektrum für einen Einfangprozeß bei einer Projektilenergie von 132MeV/u unter dem Beobachtungswinkel von 150° . Die graue Kurve zeigt die Zeitdifferenz zwischen Röntgenquant und umgeladenen Projektil, die schwarze Kurve unter der zusätzlichen Bedingung, daß das Röntgenquant aus einem Lyman-Übergang stammt.

Ly α -Strahlung ist etwas schmaler. Durch Setzen eines „Fensters“ auf den Peak im Zeitspektrum wurde das Zeitintervall herausgegriffen, in welchem die Lyman-Photonen nachgewiesen wurden. In der Abbildung ist das durch das horizontal schraffierte Rechteck gekennzeichnet. Dieses dient als Bedingung zur Erzeugung des PROMPT-Spektrums, das heißt des Spektrums mit den Röntgenereignissen, die zusammen mit einer Projektilumladung nachgewiesen wurden. Zum Untergrundabzug wurde ein zweites Fenster (mögliche Bereiche vertikal schraffiert) neben diesen Zeitpeak gesetzt und daraus das RANDOM-Spektrum gebildet. In Abbildung 5.2 sind die sich auf diese Art ergebenden Energiespektren gezeigt. Anschließend wurde zur Untergrundbereinigung das RANDOM-Spektrum, skaliert mit dem Verhältnis der Fenstergrößen, vom PROMPT-Spektrum abgezogen.

Die sich danach ergebenden Energiespektren wurden unter Verwendung des GO4-Fitpaketes ausgewertet. Für die Lyman-Linien wurden Gaußkurven

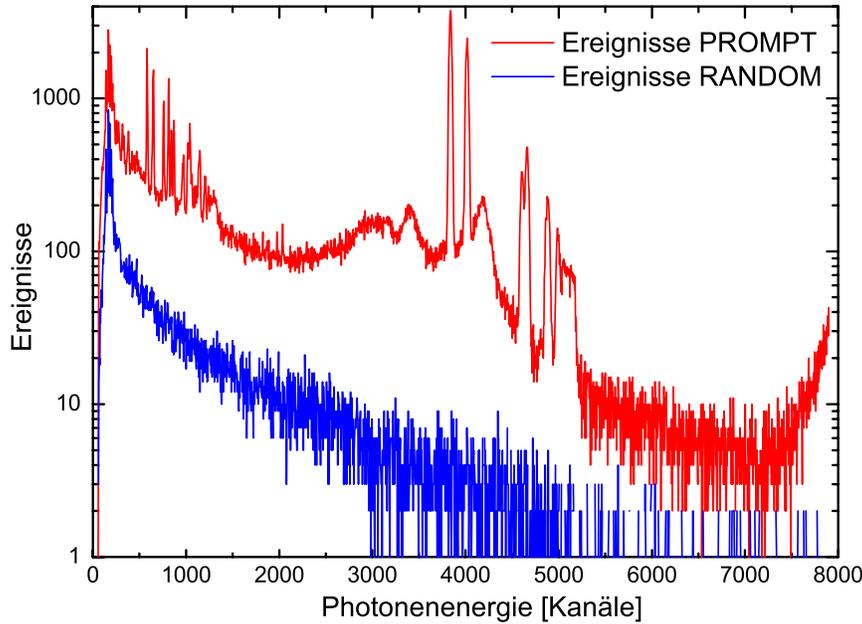


Abbildung 5.2: Das Zeitspektrum für einen Einfangprozess bei einer Projektilenergie von $132\text{MeV}/u$ unter dem Beobachtungswinkel von 35° . Die obere Kurve zeigt das Energiespektrum unter der PROMPT-Bedingung, die untere Kurve unter der RANDOM-Bedingung.

angenommen mit den Fitparametern Position, Amplitude und Halbwertsbreite. Die Berücksichtigung des Untergrundes erfolgte durch ein Polynom ersten Grades. Man erhält die Intensität der $\text{Ly}\alpha$ -Linien, das heißt die Anzahl der Ereignisse $N_{\text{Ly}\alpha_{1,2}}$. Als Meßungenauigkeit wurde $\sqrt{N_{\text{Ly}\alpha_{1,2}}}$ angenommen, wogegen die Fehler in Amplitude und Halbwertsbreite zu vernachlässigen waren. Die Nachweiseffizienz für die beiden Lyman-Linien kann, obwohl sie energetisch eng benachbart sind, unterschiedlich sein. Dies gilt besonders unter den Vorwärtswinkeln, bei denen die relative Nachweiswahrscheinlichkeit um bis zu 10% differiert. Die um die relative Nachweiseffizienz korrigierten Intensitätsverhältnisse werden benutzt, um daraus den Anisotropiekoeffizienten β_A zu bestimmen.

5.2 Umrechnung der Querschnitte

Da die berechneten Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit von n, ℓ, m_ℓ vorlagen, war es notwendig, diese in eine n, ℓ, j, m_j -Basis umzurechnen. In quantenmechanischer Hinsicht ist der Übergang von einer Kopplungsart

zur anderen eine Basistransformation. Man geht von einem Satz Koordinaten $(n, \ell, m_\ell, s, m_s)$ zu einem anderen Satz (n, ℓ, j, j_ℓ, s) über. Diese Transformation wird vermittelt durch Vektorkopplungs- oder Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Werden die beiden Drehimpulse j_1 und j_2 mit den Wellenfunktionen $|j_1 m_1\rangle$ und $|j_2 m_2\rangle$ gekoppelt, so gilt für das gekoppelte Gesamtsystem

$$|j_1 j_2 JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \quad (5.1)$$

Für die Quantenzahlen gelten hierbei folgende Einschränkungen:

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad \text{und} \quad m_1 + m_2 = M \quad . \quad (5.2)$$

Die Umrechnung geschah unter der Annahme, daß die Einfangwahrscheinlichkeit bezüglich des nicht explizit enthaltenen Spinfreiheitsgrades statistisch verteilt ist. Damit ergeben sich die Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit von n, ℓ, j, m_j aus den Querschnitten, die in Abhängigkeit von n, ℓ, m_ℓ vorliegen, mit Hilfe der Vektorkopplungskoeffizienten $(\ell m_\ell \frac{1}{2} m_s | j m_j)$, siehe Gleichung (5.1):

$$\sigma(n, \ell, j, m_j) = \frac{1}{2} \sum_{m_\ell, m_s} (\ell m_\ell \frac{1}{2} m_s | j m_j)^2 \sigma(n, \ell, m_\ell). \quad (5.3)$$

Man summiert also über alle erlaubten m_ℓ und auch über die beiden möglichen Spinorientierungen $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Da der Spin nicht als Parameter in den Wirkungsquerschnitten vorhanden ist, aber über diesen summiert wird, muß das Ergebnis noch mit $\frac{1}{2}$ multipliziert werden.

5.3 Berücksichtigung der Kaskade

Zur Simulation der Röntgenspektren wurde der Einfang in Projektilezustände bis hin zu $n = 20$, je nach den vorliegenden Wirkungsquerschnitten, berücksichtigt [Bri00]. Die Eingabe der Einfangquerschnitte erfolgt getrennt nach den jeweiligen Einfangprozessen. Durch diese Trennung ist es möglich, für jeden der Einfangprozesse separate Informationen über die Intensität der charakteristischen Strahlung zu erhalten. Die Zerfallskaskaden wurden unter Verwendung von Übergangsraten $\Gamma_{i \rightarrow f}$ durchgeführt, die mit GRASP³ berechnet wurden. Die Raten wurden von einem Zustand $i = |n, l, j\rangle$ zu allen

³GENERAL PURPOSE RELATIVISTIC ATOMIC STRUCTURE PROGRAM [DGJ89]

energetisch niedriger liegenden Zuständen $f = |n', l', j'\rangle$ berechnet. Hieraus ergibt sich dann das Verzweigungsverhältnis $V_{i \rightarrow f}$

$$V_{i \rightarrow f} = \frac{\Gamma_{i \rightarrow f}}{\sum_k \Gamma_{i \rightarrow k}} . \quad (5.4)$$

Die Linienintensität $I_{i \rightarrow f}$ ergibt sich aus

$$I_{i \rightarrow f} = \Gamma_{i \rightarrow f} . \quad (5.5)$$

Die Information über die relative Intensität und Energie eines Übergangs ist in der Eingabedatei TRANSI.DAT enthalten.

Das Vorhandensein von Zerfallskaskaden führt eine neue Problematik bezüglich des Alignments ein. Bisher war das Alignment nur als Folge des direkten Einfangs in die magnetischen Unterniveaus betrachtet worden. Durch die Kaskadenzerfälle kann dieses Anfangsalignment beeinflusst werden.

Um das Alignment zu untersuchen, war es notwendig, in das Kaskadenprogramm die magnetischen Unterzustände mit aufzunehmen. Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten $A_{n\ell j m_j}^{n'\ell' j' m'_j}$ wurde mit dem Programmpaket DIRAC [SKF04] durchgeführt. Dies ermöglicht die Berechnung von Struktur und dynamischen Eigenschaften in wasserstoffähnlichen Ionen in nichtrelativistischer und relativistischer Formulierung. Bei den berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten sind alle erlaubten Multipolordnungen bis zum **E4/M4**-Übergang enthalten.

Die um die magnetischen Unterzustände erweiterte Datei TRANSI.DAT sowie die entsprechenden Einfangwirkungsquerschnitte ermöglichen es, die durch die Kaskade erzeugte Besetzung beispielsweise des $2p_{3/2}$ -Niveaus zu ermitteln. Nach Gleichung 2.21 folgt dann der Alignmentparameter. Durch dieses Programm ist es möglich den *Übertrag* von Alignment von höheren Zuständen auf beispielsweise den $2p_{3/2}$ -Zustand zu untersuchen.

Die Konzeption des Programmes ermöglicht es, die Eingabedateien mit den Wirkungsquerschnitten gezielt zu verändern, um den Einfluß der Besetzung bestimmter atomarer Niveaus auf das Endalignment systematisch zu untersuchen.

5.4 Kurvenanpassung

Das zuvor besprochene Kaskadenprogramm liefert Intensität und Energie aller Übergänge in dem interessierenden Energiebereich.

Es können ein oder zwei Intensitätsverteilungen mit der Messung verglichen werden. Bei der Anpassung an die gemessenen Röntgenspektren werden ein zweiparametrischer Untergrund, eine ebenso zweiparametrische Energiekalibrierung, das Detektorauflösungsvermögen (FWHM) und die relativen Amplituden der Röntgenintensität variiert. Die Anpassung der im Experiment gewonnenen Spektren an die aus der Simulation stammenden Intensitäten erfolgte mit Hilfe des Programmpakets MINUIT [Min98] unter Minimierung der χ^2 -Funktion. Diese Anpassung hat den Vorteil, daß für jeden Meßwert individuell der jeweilige Fehler in die Gewichtung bei der Anpassung eingeht. Der Fehler des einzelnen Meßwertes ergibt sich aus der Quadratwurzel der Anzahl der Ereignisse.

Kapitel 6

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die experimentellen Ergebnisse zusammengefaßt. Die Prozesse auf atomarer Ebene werden einzeln besprochen, deren Verhalten untersucht und die gewonnenen Erkenntnisse zusammengeführt. Betrachtet werden Stöße zwischen nacktem und wasserstoffähnlichem Uran mit leichten Targetatomen (N_2).

Zu Beginn dieses Kapitels werden die totalen Querschnitte betrachtet, dann wird die beobachtete Balmerstrahlung mit den theoretischen Vorhersagen verglichen. Danach wird die Strahlung aus der Abregung des $2p_{3/2}$ Niveaus genauer untersucht. Die Strahlung weist im Projektilsystem – entgegen der allgemeinen Annahme – keine räumlich isotrope Intensitätsverteilung auf. Dies deutet darauf hin, daß die vier magnetischen Unterzustände des $2p_{3/2}$ -Niveaus, $m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$, je nach Wechselwirkungsprozeß mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten besetzt werden. Das bei der Besetzung auftretende Alignment wird durch zwei der verwendeten Theorien gut erklärt, die dritte unterschätzt die Anisotropie.

Die im Experiment beobachtbaren Vorgänge lassen sich prinzipiell in zwei Schritte zerlegen, zum einen in den Übergang eines Elektrons in einen gebundenen Zustand des Projektils, wobei dieser Prozeß sowohl strahlend als auch strahlungslos erfolgen kann, zum anderen in den nachfolgenden strahlenden Abregungsprozeß, wenn der Übergang zuvor nicht in den Grundzustand erfolgte [Sur03].

Der erste Schritt wird, wenn er unter Aussendung eines Photons vonstatten geht, als radiative Rekombination (RR) bezeichnet. Hiermit wird der Übergang eines freien Elektrons von einem Kontinuumszustand in einen gebundenen Zustand bezeichnet, siehe Abschnitt 3.1.1. Dieser kann beispiels-

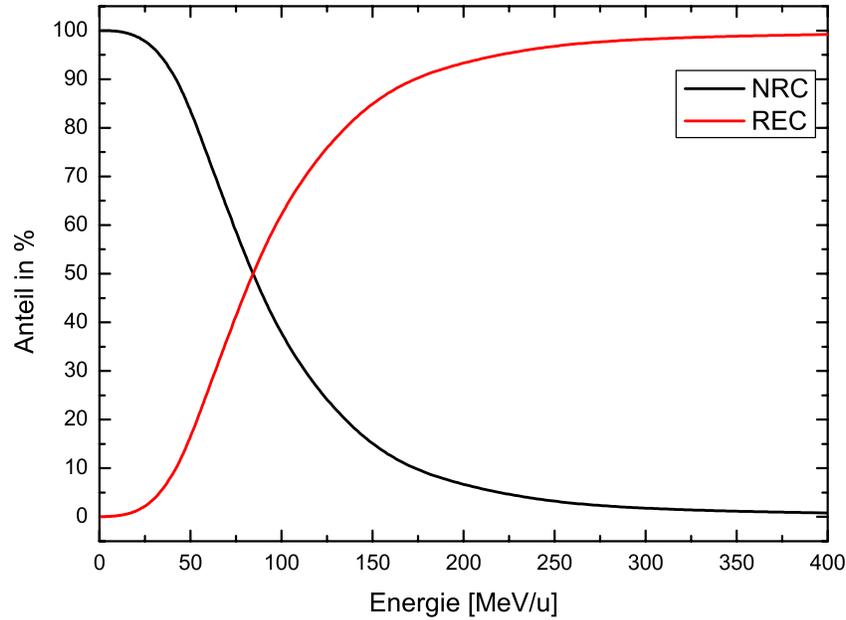


Abbildung 6.1: Die relativen Anteile der beiden Einfangprozesse NRC und REC am Gesamteinfangsquerschnitt für den Einfang in nacktes Uran mit Stickstoff als Target.

weise bei Messungen am ESR-Elektronenkühler beobachtet werden.

Stammt das Elektron aus einem gebundenen Zustand eines anderen Stoßpartners, so spricht man von radiativem Elektroneneinfang (REC). Dieser kann als radiative Rekombination aufgefaßt werden, wenn das gebundene Elektron als quasifrei angesehen werden kann [SMK91], unter der Bedingung, daß dessen Bindungsenergie im Anfangszustand klein gegen die im Endzustand ist. Bedingt durch diese Bindung weist das Elektron eine Impulsverteilung auf, das sogenannte Comptonprofil. Diese Impulsverteilung kann unter Anwendung der *impulse approximation* (IA) durch die Faltung dieses Comptonprofiles mit dem Wirkungsquerschnitt für radiative Rekombination gewonnen werden. Somit ist in der Stoßnäherung auch der REC-Prozeß die Zeitumkehrung des Photoeffekts [Opp28, Sto30].

Geschieht der erste Schritt strahlungslos [Anh85, MAE85], läßt sich keine vergleichbare Vereinfachung mehr finden. Hier trifft das Projektil auf ein Elektron, welches im Potential des Targetatoms gebunden ist und somit ebenfalls eine Impulsverteilung aufweist. Allerdings kann hier nicht von der Stoßnäherung Gebrauch gemacht werden, da eine strahlungslose Rekombination freier Elektronen nicht möglich ist. Da die Wahrscheinlichkeit des

nichtstrahlenden Ladungstransfers am größten ist, wenn das Targetelektron die Geschwindigkeit derjenigen Bahn hat, in die es eingefangen werden soll, müssen bei diesem Mechanismus neben den Projektileigenschaften jetzt auch die Eigenschaften des Targetatoms mit berücksichtigt werden.

Bei dem Einfang eines Elektrons in ein nacktes Uranion untersuchen wir das prinzipiell einfachste Stoßsystem. Im Ausgangskanal gibt es ein wasserstoffähnliches Uranion, bei dessen Beschreibung keine verkomplizierenden Elektron–Elektron–Korrelationen auftreten.

Die beiden konkurrierenden Prozesse, radiativer und kinematischer Elektroneneinfang, haben unterschiedliche Energie- und Kernladungszahl-abhängigkeiten. In Abbildung 6.1 lassen sich die Skalierungsgesetze verdeutlichen. Aufgetragen ist der relative Anteil der Einfangprozesse REC und NRC, normiert auf deren Summe.

6.1 Totale Einfangquerschnitte

Bei der Messung der totalen Umladungsquerschnitte durch Elektroneneinfang [SKM95, SLR98] ergab sich, daß die Übereinstimmung der theoretischen Erwartungen mit den Meßwerten gut ist. In einem großen Energiebereich können die totalen Querschnitte durch die nichtrelativistische Dipolnäherung Stobbes erklärt werden.

Zum Vergleich mit der Theorie wurden die totalen Querschnitte aus Tabelle 6.1 eingefügt. Dort sind die totalen Wirkungsquerschnitte für Einfang in nackte Uranionen bei verschiedenen Energien zusammengefaßt. Die CTMC-Querschnitte sind aus der Kopfzeile der jeweiligen Datei entnommen. Da die differentiellen Wirkungsquerschnitte in der Form $(n, \ell, m_\ell, \sigma_{n,\ell,m_\ell})$ nur bis $N_{max} = 10$ vorlagen, aber die Summation sich, insbesondere bei kleinen Energien, auch noch über höhere Schalen erstrecken muß, kommt eine Summation zu einem zu kleinen totalen Wirkungsquerschnitt. Dies kommt bei den CDW-Querschnitten zum Tragen. Hier wurde die Berechnung je nach Energie bei $12 \leq n \leq 20$ abgebrochen. Um den korrekten totalen Querschnitt zu erhalten, kann man die Summe mit Hilfe des Skalierungsgesetzes $\sigma \sim n^{-3}$ extrapolieren, das bedeutet, man summiert die einzelnen differentiellen Wirkungsquerschnitte σ_{n,ℓ,m_ℓ} bis zu $N = N_{max}$ auf:

$$\sigma_{tot,N} = \sum_{n=1}^N \sum_{l=0}^n \sum_{m_l=-l}^{+l} \sigma_{n,l,m_l} \equiv \sum_{n=1}^N \sigma_n \quad (6.1)$$

	$\sigma_{NRC(CTMC)}$	$\sigma_{NRC(CDW)}$	σ_{REC}
10 MeV/u	$2,36 \cdot 10^{-17}$ barn	$2,97 \cdot 10^{-17}$ barn	
20 MeV/u	$1,30 \cdot 10^{-18}$ barn	$1,95 \cdot 10^{-18}$ barn	
49 MeV/u	$3,59 \cdot 10^{-20}$ barn	$4,10 \cdot 10^{-20}$ barn	$1,11 \cdot 10^{-21}$ barn
68 MeV/u	$1,34 \cdot 10^{-20}$ barn	$1,02 \cdot 10^{-20}$ barn	$7,26 \cdot 10^{-22}$ barn
100 MeV/u	$2,56 \cdot 10^{-21}$ barn	$2,04 \cdot 10^{-21}$ barn	$4,44 \cdot 10^{-22}$ barn
132 MeV/u	$9,02 \cdot 10^{-22}$ barn	$6,50 \cdot 10^{-22}$ barn	$2,86 \cdot 10^{-22}$ barn
189 MeV/u		$1,65 \cdot 10^{-22}$ barn	$1,74 \cdot 10^{-22}$ barn
220 MeV/u			$1,40 \cdot 10^{-22}$ barn
295 MeV/u			$9,04 \cdot 10^{-23}$ barn
310 MeV/u			$8,37 \cdot 10^{-22}$ barn
360 MeV/u			$6,67 \cdot 10^{-22}$ barn
394 MeV/u			$5,77 \cdot 10^{-23}$ barn

Tabelle 6.1: Übersicht über die totalen Einfangquerschnitte, angegeben in barn. Die CDW-Werte sind extrapoliert (mit n^{-3}).

und extrapoliert dann für alle Hauptquantenzahlen

$$\sigma_{tot} = \sigma_{tot,N} + N^3 \cdot \sigma_N \cdot \sum_{k=N+1}^{\infty} k^{-3} . \quad (6.2)$$

Leider unterschätzt diese Extrapolation den totalen Querschnitt bei kleinen Energien um wenige Prozent, wie sich bei einem Test an den CTMC-Querschnitten herausstellte. Die REC-Querschnitte sind ebenso aufsummiert; die Extrapolation ist hier unnötig, da das maximale σ_n bei $n = 1$ liegt. In Tabelle 6.1 sind die berechneten Wirkungsquerschnitte aufgeführt. Es ist wichtig zu beachten, daß die REC-Querschnitte sich auf ein einzelnes einzufangendes Elektron beziehen. Deshalb muß man diese Querschnitte noch mit der Anzahl der zur Verfügung stehenden Targetelektronen Z_T multiplizieren.

In Abbildung 6.2 sind Messungen der totalen Querschnitte und theoretische Erwartungen dargestellt. Die schwarzen Punkte in Bild 6.2 sind Meßwer-

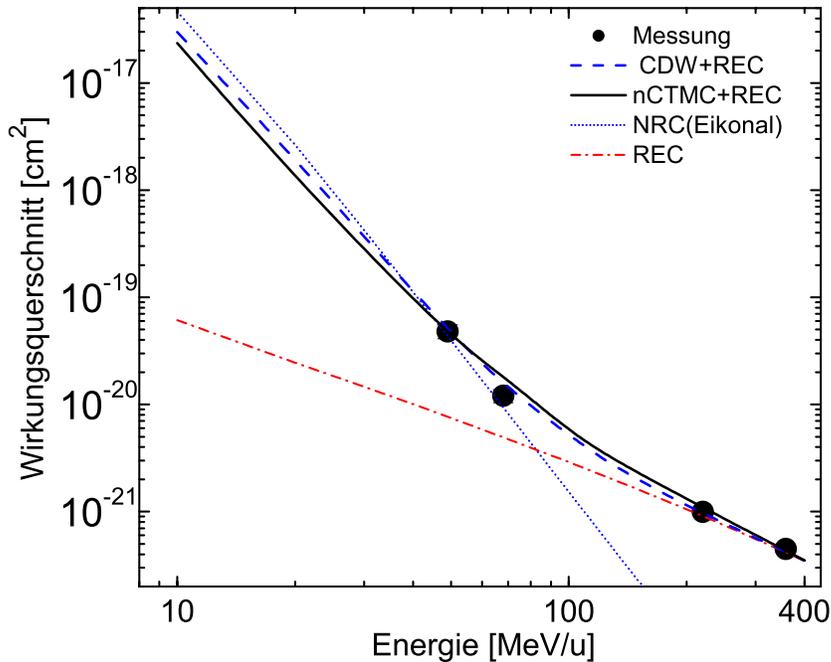


Abbildung 6.2: Vergleich der totalen Einfangquerschnitte mit verschiedenen Rechnungen. Die schwarzen Punkte sind Meßwerte (aus [SLR98]).

te, die strichpunktiierte rote Linie ist eine nichtrelativistische Dipolnäherung für radiativen Einfang [SKM95] und die punktierte blaue Linie stellt den NRC-Querschnitt in Eikonalnäherung (POST-Variante) dar [EM95, MAE85, RSG96]. Die durchgezogene Linie zeigt die CDW-Ergebnisse, die gestrichelte Linie die CTMC-Resultate (jeweils einschließlich der REC-Querschnitte).

Wie man sehen kann, ist im Hochenergiebereich, in dem der REC-Prozeß dominiert, die Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie sehr gut, was der Erfahrung mit dieser Theorie entspricht. Im Energiebereich, in dem der NRC-Prozeß zunehmend dominiert, liefert die POST-Formulierung der Eikonalnäherung gute Ergebnisse (PRIOR-Variante und Higher-Potential-Kriterium liefern schlechtere Übereinstimmung). Die Querschnitte der CDW-Theorie und der CTMC-Simulation liegen ähnlich wie die Eikonalnäherung, geben aber kleinere totale Querschnitte an.

Mit Hilfe der totalen Umladungsquerschnitte lassen sich die Lebensdauern von Ionenstrahlen in Speicherringen abschätzen. So beträgt diese für einen Strahl nackter Uranionen bei einer Energie von 400MeV/u etwa 20 Minuten, bei einer Energie von 50 MeV/u ist die Lebensdauer auf unter eine Minute gesunken. Dies ist die Folge der starken Geschwindigkeitsabhängigkeit der Umladungsquerschnitte.

6.2 Röntgenspektren

Die zuvor diskutierte Untersuchung der totalen Einfangquerschnitte ist der erste und einfachste Schritt, die experimentellen Befunde mit theoretischen Vorhersagen zu vergleichen. Zwar kann eine Theorie, die bei der Berechnung von differentiellen Querschnitten versagt, die totalen Wirkungsquerschnitte korrekt liefern, der umgekehrte Fall tritt aber nicht ein. Somit konnte das Versagen der OBK-Näherung bei der Beschreibung der totalen Querschnitte erkannt werden, was zur Entwicklung anderer Näherungen mit besserer Übereinstimmung, dann auch bei höherdifferentiellen Querschnitten, führte.

Zu einer detaillierteren Untersuchung und Vergleich mit Theorien ist es notwendig, zustandssensitivere Informationen des Einfangprozesses zu gewinnen. Dies ist beispielsweise anhand der Auswertung der Balmerstrahlung möglich, womit dann die (n, ℓ) -Verteilungen der angenommenen Wirkungsquerschnitte beurteilt werden können.

Der Einfang des Elektrons kann neben dem $1s$ -Grundzustand auch in einen angeregten Zustand erfolgen. Die bei der nachfolgenden Abregung emittierte Strahlung kann dann zum Vergleich mit den theoretischen Vorhersagen herangezogen werden. Bei der Auswertung der aufgenommenen Photonenpektren hat man zu berücksichtigen, daß die Energien je nach Beobachtungswinkel einer Dopplerverschiebung unterliegen. Gleichung 4.7 auf Seite 61 beschreibt die Umrechnung der Photonenenergie vom Emittersystem ins Laborsystem. Unter dem Beobachtungswinkel von 35 Grad (Abbildung 6.3; das Energiespektrum ist nicht dopplerkorrigiert) sieht man deutlich im Energiebereich zwischen 15 und 45 keV die Balmerlinien hervortreten. Bei 130 keV bis 170 keV (je nach Stoßenergie) liegen die $Ly\alpha$ -Linien. Man sieht deutlich, daß die Linienbreite der $Ly\alpha$ - und $Ly\beta$ -Strahlung mit zunehmender Stoßenergie zunimmt. Dies ist auf die Dopplerverschmierung der Energien aufgrund des endlichen Beobachtungswinkelbereiches zurückzuführen. Dieser Effekt wird umso kleiner, je kleiner die Geschwindigkeit des Emittersystems ist. Im Gegensatz zu den $Ly\alpha$ -Linien sind die $Ly\beta$ -Linien bei hohen Stoßenergien nicht mehr zu trennen. Nach den zuvor diskutierten Energieabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte ist es verwunderlich, daß bei der hohen Projektilenergie von 400 MeV/u die Balmerstrahlung so deutlich und mit der gleichen Amplitude wie die Lyman-Strahlung zu sehen ist. Da die Spektren nicht nachweiseffizienzkorrigiert sind und der Dopplerfaktor bei dieser Energie und Emissionswinkel bei etwa 1,7 liegt, ist durch die hohe Energie der Ly-Linien deren Nachweiseffizienz stark reduziert. Aus diesem Grund tritt die Balmerstrahlung, für die die Nachweiseffizienz bei ungefähr eins liegt,

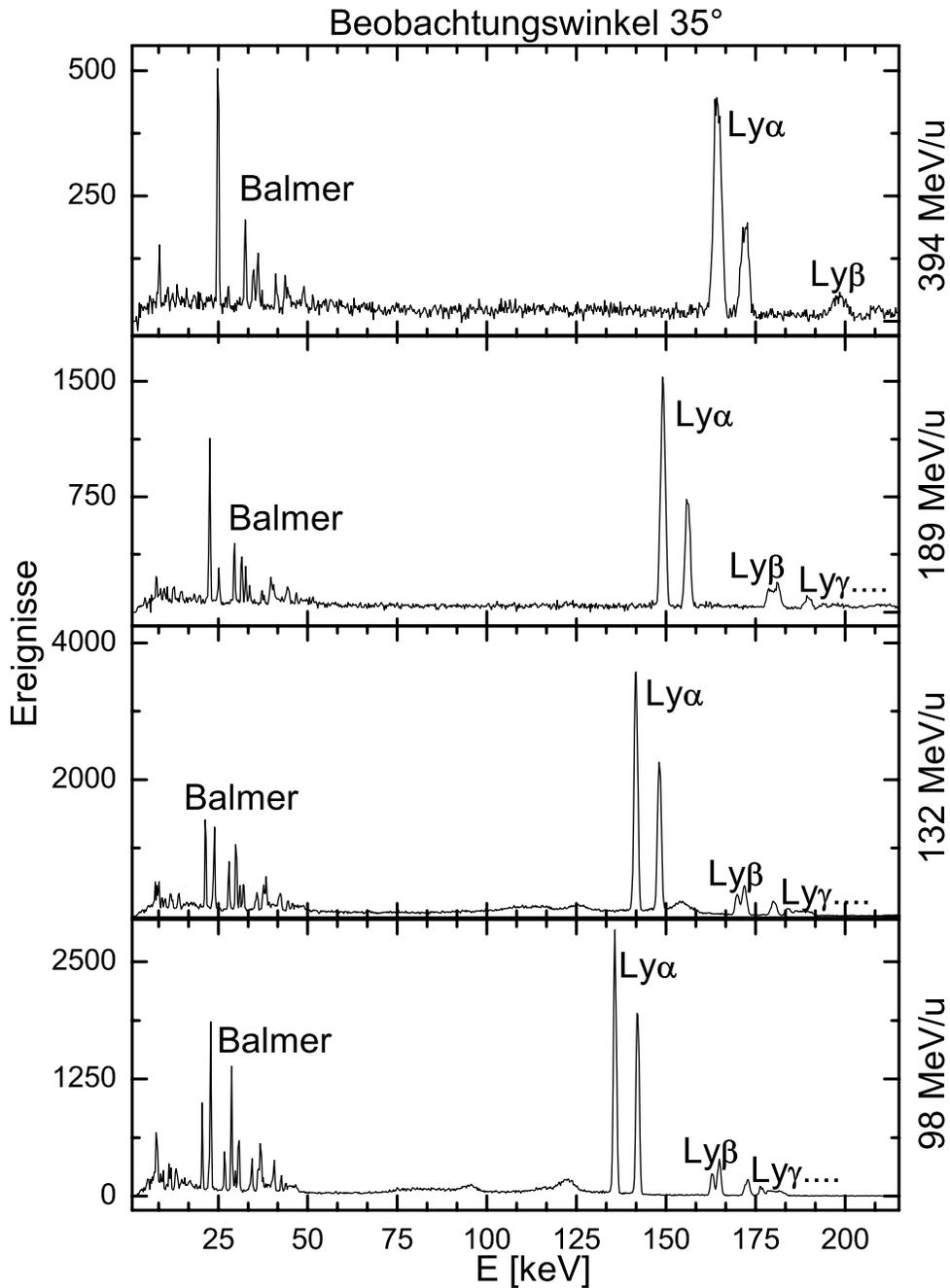


Abbildung 6.3: Photonenspektren unter 35 Grad bei unterschiedlichen Stoßenergien. Die Photonenenergien entsprechen den im Laborsystem gemessenen und sind im Vergleich zu den Energien im Emittersystem dopplerverschoben.

deutlich hervor.

Unter 120 Grad kann wegen der Dopplerverschiebung der Photonenenergien zu kleineren Energien hin die Balmerstrahlung nicht mehr nachgewiesen werden, siehe Abbildung 6.4 auf der nächsten Seite (Photonenenergie ist dopplerkorrigiert). Durch die Dopplerverschiebung zu kleineren Energien ist die Transmission der Vakuumfenster reduziert, und die Photonennachweiswahrscheinlichkeit im Bereich der Germanium-K-Kante (11.1 keV) fällt stark ab. In diesem Energiebereich wäre ein Si(Li)-Detektor besser geeignet (K-Kante liegt hier bei 1.8 keV). Dafür sind jetzt die $Ly\beta$ -Linien im oberen Energiebereich sichtbar geworden. Bei der höchsten Stoßenergie ist K-, L- und M-REC-Strahlung deutlich zu erkennen, der K-REC hat die gleiche Amplitude wie die $Ly\alpha_2$ -Linie. Mit abnehmender Stoßenergie gewinnt die charakteristische $Ly\alpha$ -Strahlung gegenüber den REC-Linien immer mehr an Bedeutung.

In Abbildung 6.5 ist der theoretische Verlauf der Einfangwirkungsquerschnitte nach Hauptquantenzahlen dargestellt. Man sieht, daß mit wachsender Stoßenergie der Wirkungsquerschnitt generell sinkt. Durch die Analyse der n -Verteilung wird deutlich, daß der NRC-Prozeß sensitiv auf die Struktur des Targets ist. Die Wirkungsquerschnitte beim REC-Prozeß sind dagegen monoton abfallend; dies ist eine Folge der Erkenntnisse zur radiativen Rekombination zusammen mit der im Modell angewendeten Stoßnäherung (*impulse approximation*)

Wie an der Verteilung der Querschnitte zu sehen ist, ist beim radiativen Einfang der Anteil des Einfangquerschnittes für $n > 2$ eher klein im Vergleich zum Einfang in $n = 1$ oder 2, es gilt die Skalierung

$$\sigma_n \simeq \sigma_{n,s} \simeq \sigma_{1s}/n^3 . \quad (6.3)$$

Anders ist die Situation beim NRC. Hier liegt bei kleinen Stoßenergien das Einfangquerschnittsmaximum bei $n > 2$, so daß in der Regel der Einfangquerschnitt in Zustände mit $n \geq 3$ den Gesamtquerschnitt dominiert.

Die Lebensdauer der wichtigsten Zerfallskanäle der angeregten Zustände liegt in der Größenordnung von 10^{-12} s bis 10^{-16} s, das heißt, sie zerfallen nahezu instantan. Leider bedeutet diese kurze Lebensdauer, daß eine Untersuchung der Zerfalldynamik experimentell nicht zugänglich ist, da solch kurze Zeiten mit den Meßmethoden am ESR-Jettarget nicht aufgelöst werden können. Gleichzeitig bedeutet dies aber auch, daß bei einer angenommenen Projektilgeschwindigkeit von $0.5c$ und einer Lebensdauer von 10^{-14} s die Abregung nach einer Flugstrecke von rund $2 \cdot 10^{-6}$ m stattgefunden hat, also noch innerhalb des Targets. Dies hat zur Folge, daß bei diesem Prozeß ausschließlich

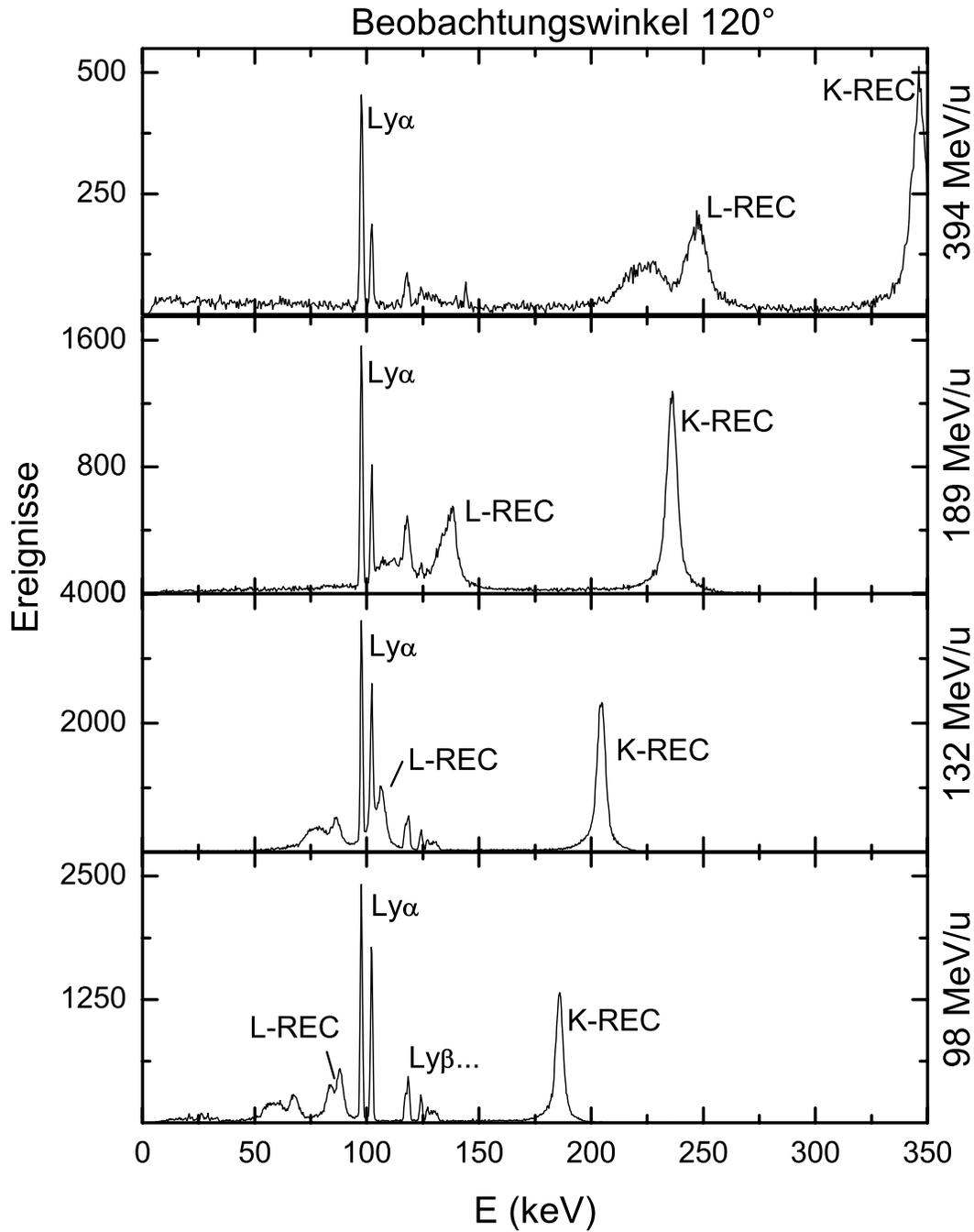


Abbildung 6.4: Die ins Emittersystem transformierten Röntgenspektren bei verschiedenen Energien unter dem Beobachtungswinkel 120°

Strahlung beobachtet wird, die aus einer Besetzung resultiert, welche alle Kaskadenbeiträge enthält. Ebenso bedeutet dies, daß keine Übergänge au-

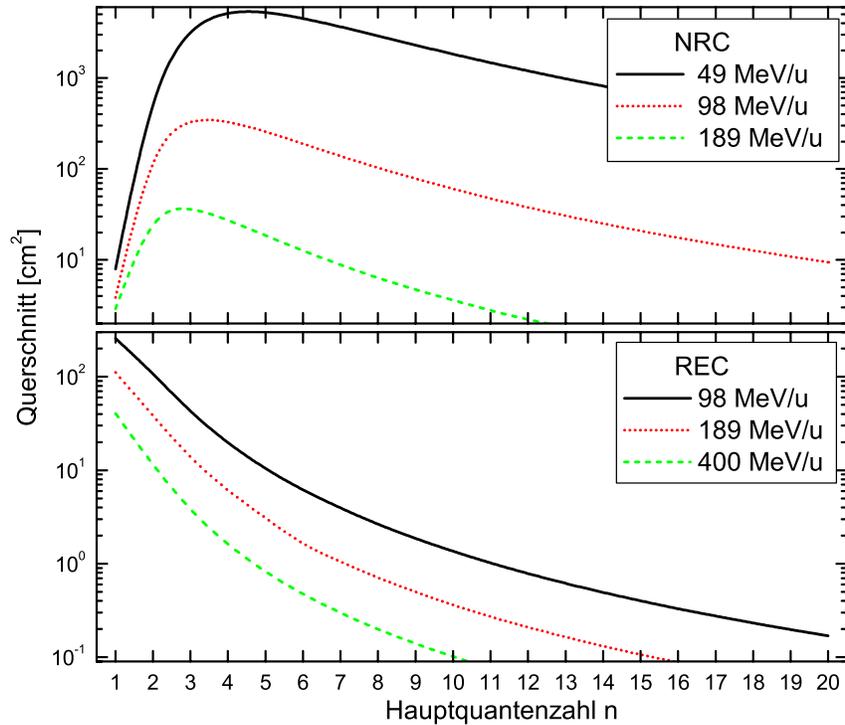


Abbildung 6.5: *Einfangwirkungsquerschnitte σ gegen n für strahlungslosen und radiativen Einfang.*

ßerhalb des beobachteten Bereiches stattfinden.

Wie aus Gleichung 6.3 ersichtlich ist, ist bei REC der Grundzustandseinfang der am häufigsten zu erwartende Prozeß. Der Einfang in $n = 2$ ist schon sehr viel seltener (etwa Faktor 8), ist aber der niedrigstmögliche Einfang, der in der nachfolgenden Abregung durch die Detektion eines Röntgenphotons nachgewiesen werden kann. Der Übergang $n = 2 \rightarrow n = 1$ wird als Lyman- α -Übergang bezeichnet und wird im Abschnitt 6.3 eingehender untersucht. Nochmals um mehr als den Faktor 3 seltener ist der Einfang in $n = 3$. Bei dem Zerfall dieses angeregten Zustandes tritt dann die sogenannte Balmerstrahlung auf, welche die Strahlung aller Übergänge $n' \rightarrow n = 2$, $n' = 3, 4, \dots$ bezeichnet.

Die Beobachtung der Balmerstrahlung erlaubt einen weitergehenden Einblick in die sich mit der Stoßenergie ändernde Stoßdynamik, spiegelt sich doch in ihr die Besetzung der höheren angeregten Zustände wider. Variieren die Linienintensitäten mit der Projektilenergie, so läßt sich daraus auf Änderungen im Besetzungsprozeß schließen. In Abbildung 6.6 ist eine Zu-

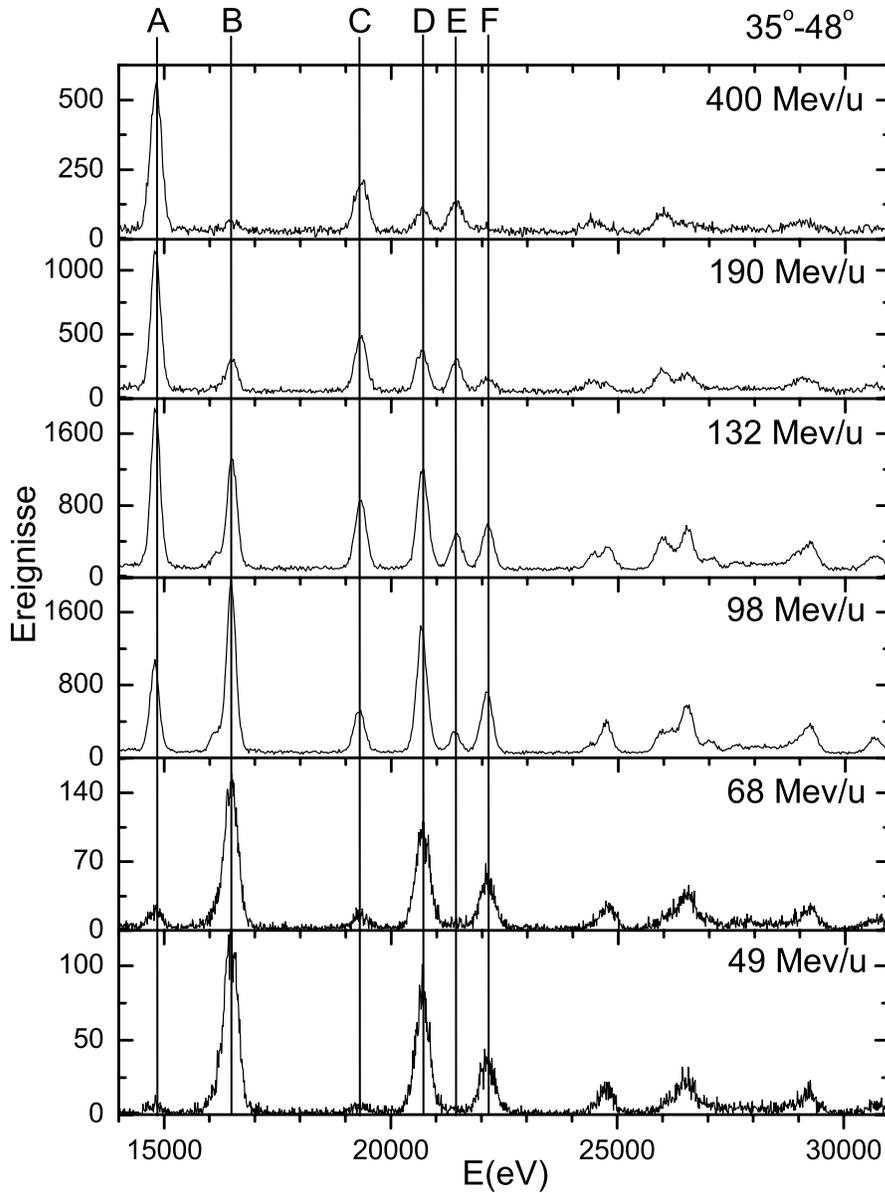


Abbildung 6.6: Balmerspektren unter einem Beobachtungswinkel von 35° - 48° .

Die mit Buchstaben bezeichneten Linien stehen für folgende Übergänge:

A: $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$

B: $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ $3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$

C: $3p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ $3s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ $3p_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$

D: $3p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ $3d_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ $3d_{5/2} \rightarrow 2s_{1/2}$

E: $4s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$

F: $4d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ $4d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ $4f_{7/2} \rightarrow 2p_{3/2}$

sammenstellung von Messungen der Balmerstrahlung bei unterschiedlichen Energien zu sehen. Hier kann man besonders gut beobachten, wie sich die einzelnen Linienintensitäten in Abhängigkeit von der Stoßenergie ändern. Der Beobachtungswinkel ist im Emittersystem nahe am sogenannten magischen Winkel (54.4°), dem Winkel, unter dem sich die Winkelabhängigkeit der beobachteten Strahlung nicht bemerkbar macht. Bei Messung unter diesem Winkel bietet sich die Möglichkeit, die Linienstärken unabhängig von ihrer jeweiligen winkelabhängigen Emissionscharakteristik zu beobachten. Im Laborsystem ist dieser Winkel zu kleineren Winkeln hin verschoben; es gilt nämlich die relativistische Winkeltransformation [Eic94]

$$\cos(\vartheta) = \frac{\cos(\vartheta_{lab}) - \beta}{1 - \beta \cdot \cos(\vartheta_{lab})}, \quad (6.4)$$

woraus folgt, daß alle Winkel des Emittersystems im Laborsystem sich in kleinere Winkel transformieren.

Durch die Transformation der Energien der Balmerstrahlung in das Emittersystem lassen sich die Intensitäten und deren Änderung wesentlich leichter verfolgen. Ein sehr deutlicher Effekt ist am Linienpaar A und B zu erkennen. Während Linie A, deren Intensität proportional zu der Besetzungswahrscheinlichkeit des $3s_{1/2}$ -Niveaus mit zunehmender Energie immer mehr an Bedeutung gewinnt, verliert Linie B ($3d_{3/2}$ und $3d_{5/2}$ -Niveaus) an Stärke. Dies verdeutlicht in anschaulicher Weise, daß bei hohen Energien bevorzugt in Niveaus kleinerer Drehimpulse eingefangen wird und umgekehrt, daß bei kleinen Energien Niveaus mit höheren Drehimpulsen favorisiert werden. Nimmt man jetzt noch die noch fehlenden $3p_{1/2}$ und $3p_{3/2}$ -Niveaus, welche sich in den Linien C und D niederschlagen, ist die Situation nicht mehr so klar, da diese Linien auch Beiträge aus den $3s$ - und $3d$ -Niveaus enthalten. Hier ist aufgrund der Auflösung der Detektoren keine Trennung in die jeweils beitragenden Linien mehr möglich.

Nach dieser eher qualitativen Betrachtung kann man zum Vergleich der Theorie mit den Meßwerten eine Kurvenanpassung durchführen. Dies geschieht in mehreren Schritten. Als erstes benötigt man die Energien und Intensitäten der Balmerlinien. Dies wird mittels eines Kaskadensimulationsprogrammes durchgeführt. Dieses Programm hat als Eingabe die differentiellen Einfangquerschnitte $\sigma(n, \ell, j, m_j)$, siehe Abschnitt 5.2.

Dann wird mittels der Verzweigungswahrscheinlichkeiten eine Zerfallskaskade durchgeführt. Das heißt, daß beginnend vom höchstliegenden Zustand alle Zustände in tieferliegende zerfallen. Dies wird fortgesetzt bis zum Grundzustand. Anschließend liegen die Intensitäten jedes Übergangs vor.

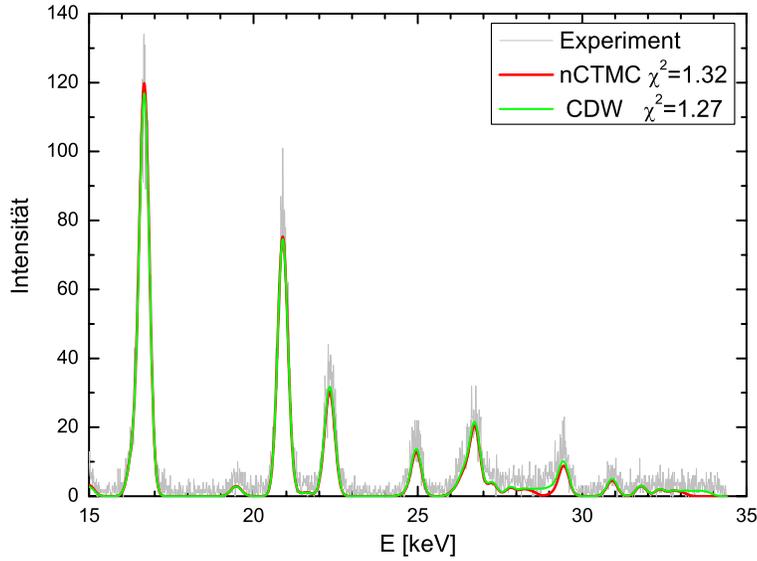


Abbildung 6.7: Anpassung des Balmerpektrums bei einer Projektilenergie von 49 MeV/u. Sowohl die CDW- als auch die nCTMC-Theorie liefern hervorragende Übereinstimmung.

Energie	49 MeV/u		68 MeV/u		98 MeV/u	
Theorie	CDW	CTMC	CDW	CTMC	CDW	CTMC
χ^2	1.27	1.32	1.49	1.58	2.16	2.76

Tabelle 6.2: Ergebnisse der Kurvenanpassung der Balmerpektren an die Simulation.

Mit diesen Informationen, gegebenenfalls für NRC und REC separat, und dem gemessenen Balmerpektrum wird dann eine Kurvenanpassung durchgeführt, wobei χ^2 minimiert wird. Als zu variierende Parameter gehen ein: zwei Kalibrationsfaktoren (Offset und Proportionalitätsfaktor), zwei Parameter zur Berücksichtigung des Untergrunds (konstanter und linearer Untergrund), das Detektoraufklärungsvermögen (FWHM) und ein oder zwei Gewichtungsfaktoren für die beitragenden Intensitätsverteilungen. Das Ergebnis der Anpassung ist exemplarisch in Abbildung 6.7 graphisch dargestellt.

Es ergab sich eine sehr gute Übereinstimmung sowohl mit der CDW- als auch mit der nCTMC-Theorie. Die beiden Theorien liefern bei jeder Energie gute Ergebnisse, die Anpassung der nCTMC-Theorie an die Meßwerte ist in jedem Falle etwas schlechter. Dies kann darauf zurückgeführt werden, daß

die n CTMC-Wirkungsquerschnitte nur bis zu $n = 10$ vorlagen, die CDW-Querschnitte bis zu $n = 20$.

6.3 Anisotropie und Alignment

Eine Möglichkeit, den Reaktionsmechanismus detaillierter zu erforschen, ergibt sich durch eine Untersuchung der Population der magnetischen Unterzustände m_j nach einem erfolgten Einfang in angeregte Zustände [SBG97, EIS98] oder nach einer Anregung. Der Einfangs- oder Anregungsprozeß führt dann zu einer bestimmten Besetzung der magnetischen Unterzustände, die durchaus von einer statistischen Verteilung abweichen kann.

Die Messung der Projekttilstrahlung am Jettarget erfolgt unter verschiedenen Beobachtungswinkeln. Hierbei zeigt sich, daß die Winkelverteilung der $\text{Ly}\alpha_1$ -Strahlung im Emittersystem von einer räumlich isotropen Verteilung abweicht.

Erfolgt der Einfang in einen angeregten Zustand, beispielsweise in das $2p_{3/2}$ -Niveau, zerfällt dieser in den $1s_{1/2}$ -Grundzustand unter Aussendung eines $\text{Ly}\alpha_1$ -Photons. Dieses trägt die Information über die Bevölkerung der magnetischen Unterzustände dieses Niveaus. Diese Information kann zum einen durch die Messung der Polarisation der emittierten Photonen erhalten werden, zum anderen aber auch aus deren Winkelverteilung.

Die Intensitäten der $\text{Ly}\alpha$ -Übergänge sind stark winkelabhängig. Ein Großteil der Winkelabhängigkeit ist bedingt durch die relativistischen Winkel- und Raumwinkeltransformationen.

Es wäre prinzipiell möglich, die Raumwinkel der einzelnen Detektoren zu vermessen, um damit die entsprechenden Korrekturen vorzunehmen. Allerdings kommt einem die $\text{Ly}\alpha_2$ -Linie zu Hilfe, denn da diese aus dem Übergang $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ stammt, hat sie im Emittersystem eine isotrope Abstrahlcharakteristik, siehe Gleichung 2.19. In direkter Nachbarschaft liegt noch die Linie aus dem Übergang $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$. Dieser Übergang ist nur etwa 76 eV von der $\text{Ly}\alpha_2$ -Linie entfernt und kann experimentell nicht aufgelöst werden. Bildet man das Verhältnis aus $\text{Ly}\alpha_1$ und $\text{Ly}\alpha_2$, so ist der Quotient ein Maß für die Abweichung der $\text{Ly}\alpha_1$ -Strahlung von der isotropen Emission. Durch die Quotientenbildung fallen die oben angesprochenen Raumwinkeleffekte weg, so daß nur noch die energieabhängige Nachweiseffizienzkorrektur vorgenommen werden muß.

In Abbildung 6.8 ist eine typische Winkelverteilung des Inten-

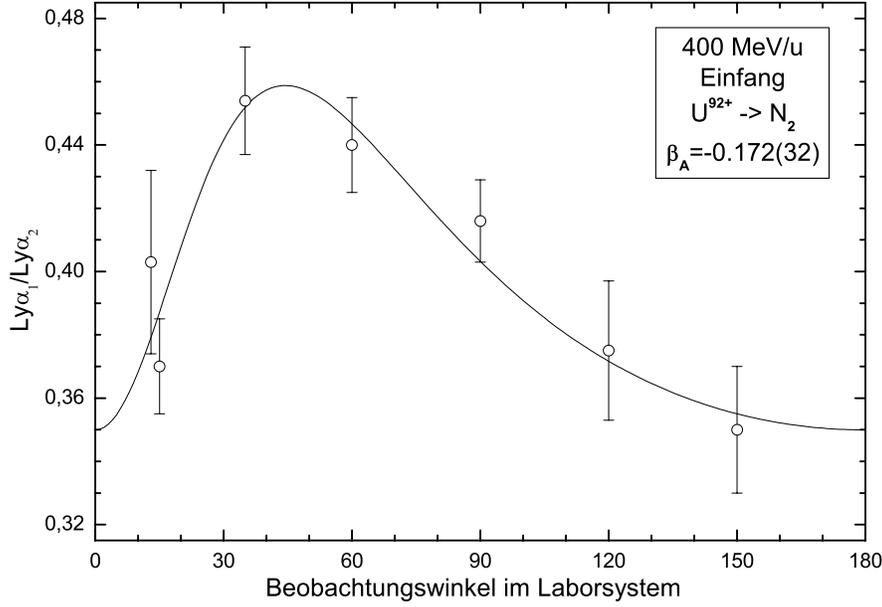


Abbildung 6.8: Die Winkelverteilung der $Ly\alpha_1$ -Photonen, normiert auf die gemessene Intensität der $Ly\alpha_2$ -Strahlung für das Stoßsystem $U^{92+} \rightarrow N_2$ bei einer Stoßenergie von 400MeV/u . Die durchgezogene Linie ist eine χ^2 -Anpassung von Gleichung 6.6.

sitätsverhältnisses $Ly\alpha_1/Ly\alpha_2$ dargestellt. Die Winkelverteilung bei dem beobachteten Übergang $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ ist gegeben durch

$$W(\theta) \propto 1 + \beta_A \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta \right) . \quad (6.5)$$

Der hiermit eingeführte Parameter β_A ist der Anisotropieparameter, welcher die Stärke der Anisotropie der Emission charakterisiert. Aus dem Vorzeichen des Anisotropieparameters läßt sich ableiten, daß bei positiver Anisotropie die Emission der Photonen vorzugsweise in Richtung der Stoßachse erfolgt, bei negativer wird senkrecht zur Stoßrichtung emittiert.

Im Laborsystem gilt für die Emission unter Berücksichtigung der Winkel- und Raumwinkeltransformationen

$$W(\theta) \propto \frac{1}{\gamma^2(1 - \beta \cos \theta)} \left[1 + \beta_A \left(1 - \frac{3}{2} \frac{\sin^2 \theta}{\gamma^2(1 - \beta \cos \theta)} \right) \right] . \quad (6.6)$$

Die durchgezogene Linie in Abbildung 6.8 ist das Resultat einer χ^2 -Kurvenanpassung von Gleichung 6.6 an die Experimentdaten [Min98]. Es wurde eine unerwartet starke Anisotropie, $\beta_A = 0,172 \pm 0,032$ beobachtet. Die-

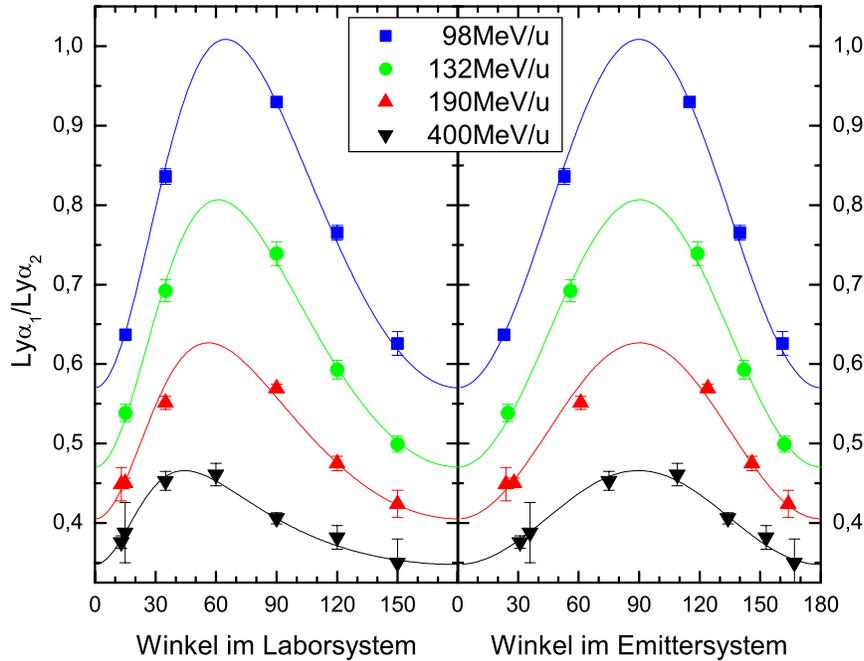


Abbildung 6.9: Winkelverteilungen der $Ly\alpha_1$ -Strahlung, normiert auf die $Ly\alpha_2$ -Intensität, bei unterschiedlichen Energien. Das Projektil war in allen Fällen U^{92+} , als Target kam Stickstoff zum Einsatz. Die Meßpunkte im linken Teil des Bildes entsprechen der Beobachtung im Laborsystem, in der rechten Hälfte wurde in das Emittersystem transformiert.

ser Befund wurde auch mit anderen Experimenten untermauert. Unter Verwendung der Formel für die Winkeltransformation, 6.4, lassen sich die Meßpunkte von den Laborsystemswinkeln in das Emittersystem umrechnen, wonach die Winkelverteilung symmetrisch um 90° ist, wie in Abbildung 6.9 zu sehen ist.

Wie man sieht, ist das Alignment durchweg negativ, denn die Kurven sind nach unten offen. Das heißt, bei dem Einfangprozeß und der nachfolgenden Kaskade wird der $2p_{3/2}$ -Zustand wie erwartet vorzugsweise in $m_j = 1/2$ bevölkert. Wie weiter unten erwähnt, wird deutlich, daß das Alignment bei 400 MeV/u (schwarze Kurve) am schwächsten ist und mit kleiner werdender Stoßenergie stark anwächst.

In Tabelle 6.3 sind in der ersten Spalte alle Anisotropie-Meßwerte des Stoßsystems $U^{92+} \rightarrow N_2$ aufgeführt. In der zweiten Spalte sind den Meßwerten die Theoriewerte (inklusive Kaskadenbeiträgen) gegenübergestellt, in der dritten Spalte der Quotient Meßwert/Theoriewert. Hier wird deutlich, daß die Meßwerte nicht mit den Vorhersagen übereinstimmen, aber es fällt auf, daß eine

	Meßwerte	Theorie	Quotient
49MeV/u	$-0.31 \pm 0,03$	-0.2542	1.22
68MeV/u	$-0.32 \pm 0,03$	-0.2568	1.25
88MeV/u	$-0.374 \pm 0,012$	-0.2562*	1.46
98MeV/u	$-0.3388 \pm 0,0083$	-0.2500	1.32
132MeV/u	$-0.323 \pm 0,043$	-0.2355	1.36
190MeV/u	$-0.267 \pm 0,015$	-0.2071	1.29
220MeV/u	$-0.23 \pm 0,02$	-0.1758	1.31
292MeV/u	$-0.27 \pm 0,09$	-0.1564	1.72
298MeV/u	$-0.204 \pm 0,05$	-0.1564	1.30
309MeV/u	$-0.225 \pm 0,017$	-0.1534	1.66
358MeV/u	$-0.18 \pm 0,03$	-0.1453	1.24
400MeV/u	$-0.185 \pm 0,026$	-0.1435	1.29
400MeV/u	$-0.165 \pm 0,04$	-0.1435	1.15

Tabelle 6.3: Gegenüberstellung der gemessenen und berechneten Anisotropie und der Quotient Meßwert/Theoriewert. (*: Wert interpoliert)

systematische Abweichung von etwa 30% vorliegt.

Der in Abschnitt 2.4 besprochene Alignmentparameter hängt mit dem Anisotropieparameter β_A gemäß

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{\alpha} \cdot \beta_A \quad (6.7)$$

zusammen [BK77]. Im Falle des hier betrachteten Übergangs $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ gilt $\alpha = \frac{1}{2}$, siehe Tabelle 2.2.

Man spricht dann von Alignment, siehe Gleichung 2.21, wenn die Paare gleichen Betrages der Projektionsquantenzahl $|m_j|$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzt werden ($\sigma(+m_j) = \sigma(-m_j)$). Sind die Querschnitte der magnetischen Unterzustände $\pm m_j$ ungleich besetzt, so spricht man von *orientierten* Zuständen [Blu81].

Das Alignment ist dann von Null verschieden, wenn die Besetzungswahr-

scheinlichkeiten der $|m_j|$ unterschiedlich sind. Der Alignmentparameter für das $2p_{3/2}$ -Niveau ist [Eic94]

$$\mathcal{A}_2 = \frac{\sigma(2p_{3/2}^{\frac{3}{2}} \pm \frac{3}{2}) - \sigma(2p_{3/2}^{\frac{3}{2}} \pm \frac{1}{2})}{\sigma(2p_{3/2}^{\frac{3}{2}} \pm \frac{3}{2}) + \sigma(2p_{3/2}^{\frac{3}{2}} \pm \frac{1}{2})}. \quad (6.8)$$

Dieser hängt nur von den Besetzungswahrscheinlichkeiten $\sigma(nl_j m_j)$ ab. Da diese wiederum von der Stoßenergie und Kernladungszahl des Projektils abhängen, wird der Alignmentparameter seinerseits ebenfalls von diesen Größen abhängen. Hat man es darüberhinaus mit mehreren konkurrierenden Einfangprozessen zu tun, gibt es für jeden Prozeß ein eigenes Alignment. Das kombinierte Alignment, allerdings nur ohne den noch zu diskutierenden Kaskadeneffekt, kann man dann leicht als Kombination der Einzelalignments darstellen. Betrachtet man beispielsweise den Einfang in das $2p_{3/2}$ -Niveau, zu dem die Prozesse REC und NRC beitragen, und den daraus resultierenden Alignmentparameter, so ist der Alignmentparameter der Gesamtreaktion die Summe der jeweiligen Alignmentparameter gewichtet mit dem relativen Anteil am Einfangwirkungsquerschnitt in das $2p_{3/2}$ -Niveau:

$$\mathcal{A}_2 = \left[\mathcal{A}_2^{NRC} \cdot \sigma_{2p_{3/2}}^{NRC} + \mathcal{A}_2^{REC} \cdot \sigma_{2p_{3/2}}^{REC} \right] / \sigma_{2p_{3/2}}^{NRC+REC} \quad (6.9)$$

Sind Übergänge aus höheren Zuständen an der Besetzung des $2p_{3/2}$ -Niveaus beteiligt, etwa durch Kaskadenübergänge, gilt dieser einfache Zusammenhang nicht mehr. Vielmehr muß man dann in einer detaillierteren Betrachtung den Übertrag des Alignments der höheren Zustände ermitteln.

Für den radiativen Einfang in das Projektilion U^{92+} hat der Alignmentparameter durchweg ein negatives Vorzeichen, wie aus Abbildung 6.10 ersichtlich ist. Dies weist auf eine bevorzugte Besetzung der Unterzustände mit $|\mu_j| = \frac{1}{2}$ hin.

Eine Besonderheit ist, daß der Betrag des Alignmentparameters für radiativen Einfang ein ausgeprägtes Minimum aufweist [EIS98]. Dieses liegt im Falle des Uran bei etwa 400 MeV/u. Zu kleineren und größeren Energien steigt der Betrag wieder deutlich an. Dieses Verhalten ist nicht nur auf den Einfang in Uran beschränkt, sondern wird auch bei anderen Kernladungszahlen erwartet. Auch für den kinematischen Einfang ist das Alignment negativ, er hat im hier vorgestellten Fall ($U^{92+} \rightarrow N_2$) ein Maximum bei etwa 100 MeV/u.

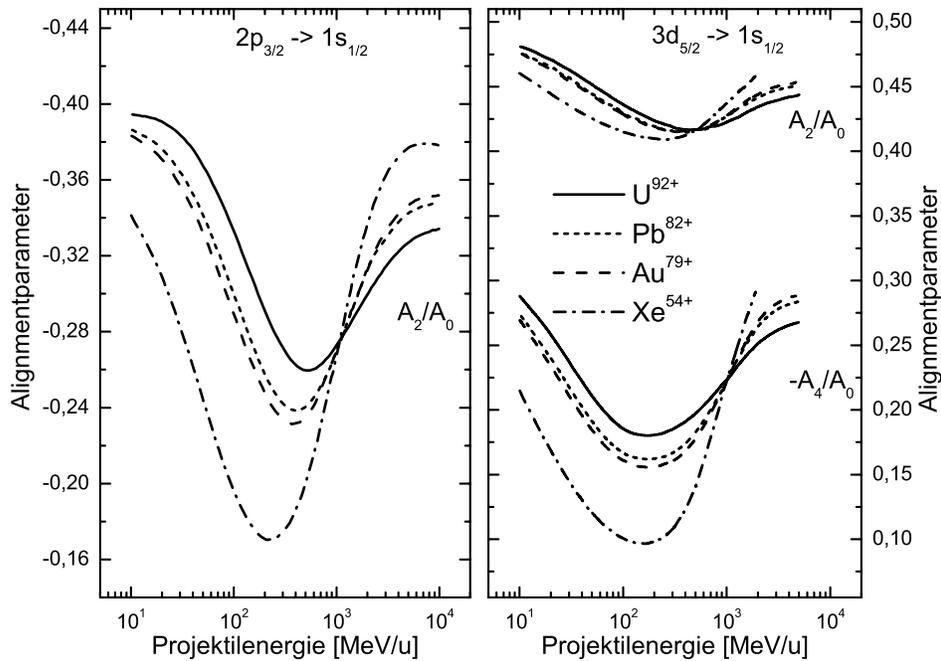


Abbildung 6.10: Der Alignmentparameter nach radiativem Einfang als Funktion der Stoßenergie für unterschiedliche Projektile [EIS98].

6.4 Einfluß der Kaskade auf das Anfangsalignment

Um dem Einfluß der Kaskade nachzugehen, verwendet man ein Simulationsprogramm, das gegenüber dem im Abschnitt 6.2 verwendeten Programm um magnetische Unterzustände erweitert ist. Die hier eingehenden Dateien sind NRC.DAT und REC.DAT, welche die Einfangwirkungsquerschnitte gemäß (n, l, j, m, σ) enthalten und TRANSI.DAT, welche die Verzweungsverhältnisse der Übergänge von Anfangs- in Endzustände enthalten. Nach dem Durchlaufen der Kaskade gibt das Programm den Alignmentparameter aus. Da notwendigerweise alle Zustände durchnummeriert sind, kann man die Kaskade bis zu einem frei wählbaren höchsten Zustand durchführen. Wählt man diesen so, daß gerade alle Zustände bis zu einer Hauptquantenzahl n_K enthalten sind, kann man auf diese Weise das Alignment in Abhängigkeit des Kaskadentiefe untersuchen.

Zur Illustration der Beiträge höherer Zustände zur Population des $2p_{3/2}$ -Zustands dient Abbildung 6.11 auf der nächsten Seite. Hier sind die Übergangsraten aller Zustände aufgeführt, die über die Kaskade zur Popula-

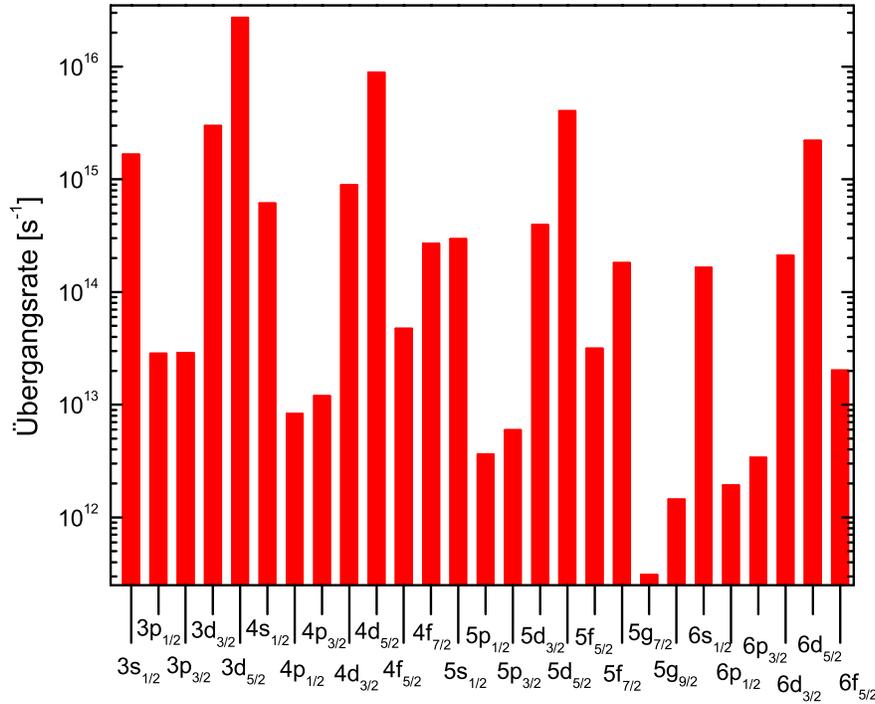


Abbildung 6.11: Zerfallsraten höherer Zustände in den $2p_{3/2}$ -Zustand. Die stärksten Beiträge zur Gesamtzerfallsrate in diesen Zustand liefern die Niveaus $nd_{5/2}$, $n = 3, 4, 5, \dots$

tion des $2p_{3/2}$ -Niveaus beitragen. Der aus Zuständen mit $n = 3$ dominierende Übergang ist der aus dem $3d_{5/2}$ -Niveau. Bei Zuständen höherer Hauptquantenzahlen n ist $nd_{5/2}$ generell derjenige, der am stärksten beiträgt.

Wie man in der linken Hälfte der Abbildung 6.12 sehen kann, kann die Kaskade beim NRC-Prozeß insbesondere bei sehr kleinen Stoßenergien einen großen Einfluß auf das direkt meßbare Alignment haben (CTMC-Ergebnisse in Abbildung A.1 auf Seite 112). Allerdings sieht man auch, daß sich bei einer bestimmten Energie das Alignment so gut wie nicht ändert; unterhalb nimmt es betragsmäßig zu, darüber nimmt der Betrag ab. Im rechten Teil der Abbildung 6.12 ist der Einfluß der Kaskade beim radiativen Einfang gezeigt. Hier kann man die pauschale Aussage treffen, daß durch die Kaskade das Anfangsalignment reduziert wird. Da die Einfangwirkungsquerschnitte nach der Hauptquantenzahl proportional zu n^{-3} abfallen, ist nur ein geringer Teil des Gesamtquerschnitts in Zuständen oberhalb $n = 2$. Dieser kleine Kaskadenbeitrag vermag es nicht, das Alignment des $2p_{3/2}$ -Niveaus stark zu beeinflussen (es zeigt sich ein Effekt von etwa 20%). Dazu kommt, daß bevor-

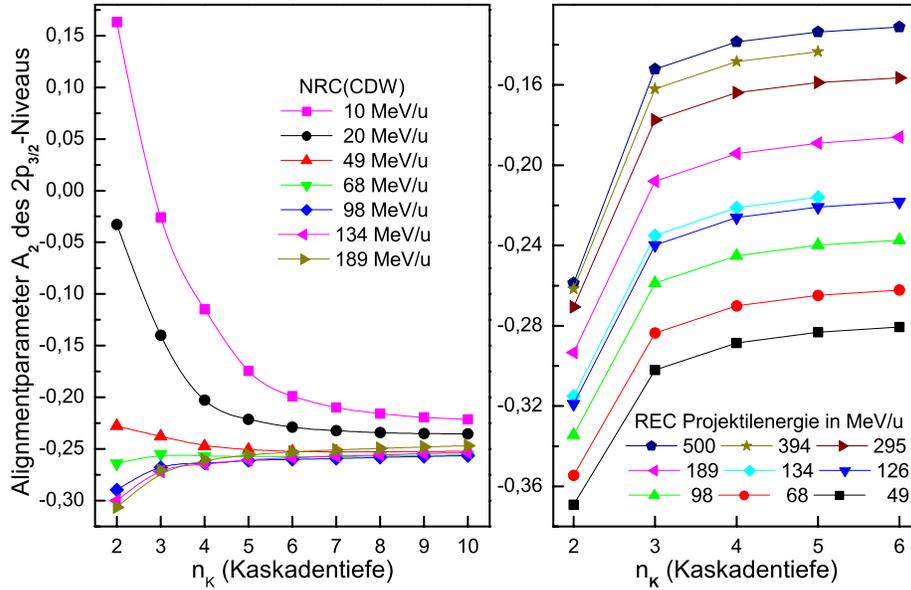


Abbildung 6.12: Der Einfluß der Kaskade auf das Alignment bei strahlungslosem Einfang (CDW-Rechnungen) und radiativem Einfang.

zugt kleine Gesamtdrehimpulse ($j = 1/2$) bevölkert werden. Diese Zustände besitzen kein Alignment und können nur zur Reduktion des Alignments in der Kaskade beitragen.

Desweiteren läßt sich ableiten, daß bei dem strahlungslosen Einfang das Alignment ab einer Kaskadentiefe von $n_K = 7$ oder $n_K = 8$ nahezu konstant bleibt. Im Fall des radiativen Einfangs gilt dies für $n_K = 5$. Es wurden also genügend höhere Zustände in die Kaskadensimulation miteinbezogen, so daß Konvergenz erreicht wurde.

In Abbildung 6.13 ist die durch strahlungslosen Einfang erzeugte Besetzung dargestellt. Aufgetragen wurde die Hauptquantenzahl n gegen den Bahndrehimpuls ℓ bei Stoßenergien von 20, 68 und 189 MeV/u. Es ist zu sehen, daß das Maximum der Verteilung bei 20 $n = 5$ und $\ell = 4$ liegt; noch höhere Zustände tragen kaum noch bei. Dies ist in Übereinstimmung mit dem Befund, daß ab $n_K = 7$ das Alignment praktisch konstant ist. Mit wachsender Stoßenergie verlagert sich das Maximum zu kleineren Quantenzahlen. Dies spiegelt ebenso wie Abbildung 6.5 die andere Kinematik dieses Einfangprozesses wider; zum Vergleich mit der (n, ℓ) -Verteilung des radiativen Einfangs befindet sich die entsprechende Darstellung im Anhang A.3.

Stellt man die experimentellen Ergebnisse den bisher diskutierten theoretischen Erwartungen unter Einbeziehung der zuvor diskutierten Kaska-

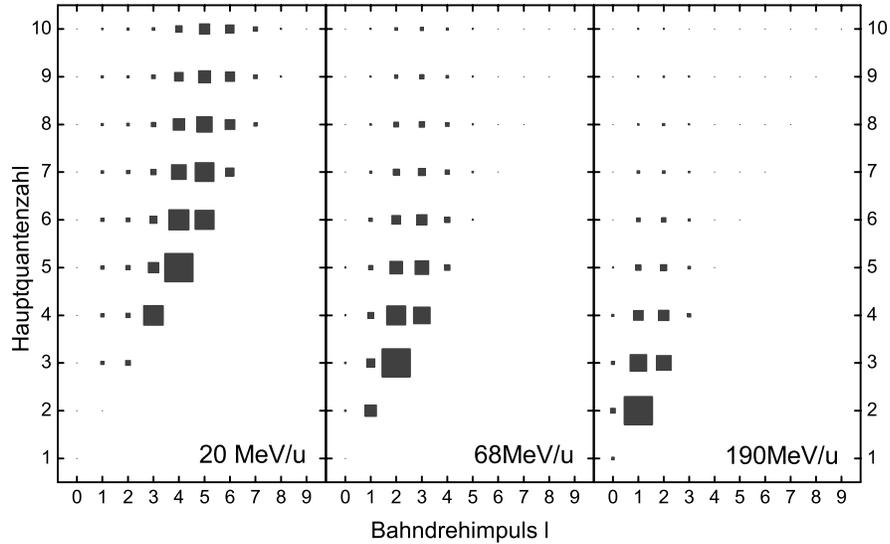


Abbildung 6.13: Anfangsbesetzungen nach CDW-Theorie bei Stoßenergien von 20, 68 und 189 MeV/u. Es ist die Hauptquantenzahl n gegen die Bahndrehimpulsquantenzahl l aufgetragen, die Symbolgröße entspricht dem Wirkungsquerschnitt, normiert auf den Maximalwert bei der jeweiligen Energie.

deneffekte gegenüber, ergibt sich eine deutliche systematische Abweichung der Theorie von etwa 30% für REC und NRC(CDW) und sogar 50% für NRC(nCTMC), siehe Abbildung 6.14. Diese Diskrepanz konnte lange Zeit nicht erklärt werden. Erst mit Berücksichtigung der Auswirkung der Mischung höherer Übergangsmultipole können Experiment und Theorie in Übereinstimmung gebracht werden.

6.5 Multipolmischung

Der dominierende Übergang in einem Atom ist normalerweise ein elektrischer Dipolübergang, d.h. er ist vom Typ **E1**. Bei großen Kernladungszahlen Z können magnetische Quadrupolübergänge **M2** nicht mehr länger vernachlässigt werden, siehe Abschnitt 2.3.1. Das Mischen von Übergängen verschiedener Multipolarität ist von γ -Übergängen aus der Kernphysik bekannt, wo aus dem Mischungsverhältnis auf die beteiligten Kernzustände geschlossen werden kann, siehe beispielsweise [KLR93].

In atomaren Systemen skaliert die **M2**-Zerfallsrate $\Gamma_{\mathbf{M2}} \propto Z^8$, die **E1**-Zerfallsrate $\Gamma_{\mathbf{E1}} \propto Z^4$. Trotz dieser sehr starken Abhängigkeit von der

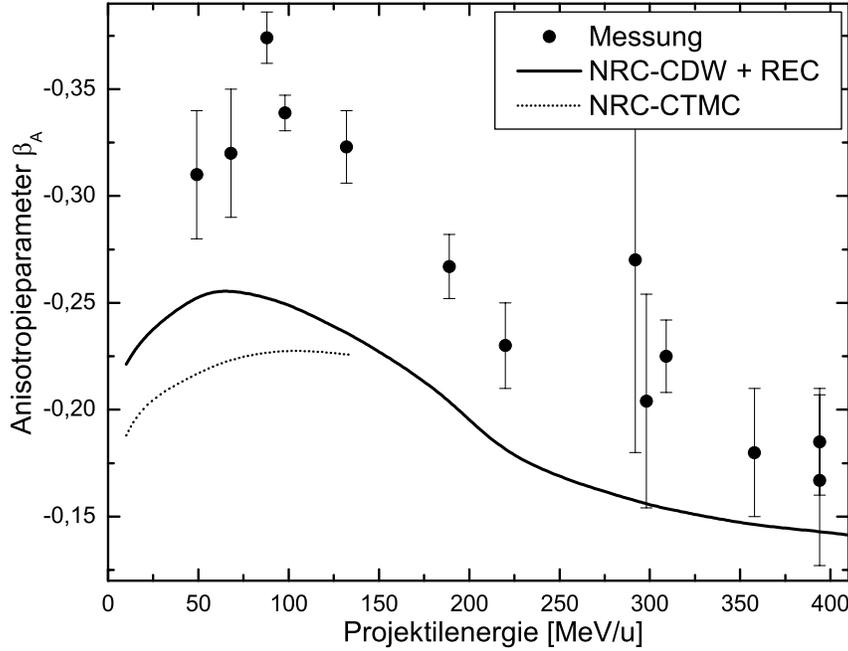


Abbildung 6.14: Vergleich der Meßwerte mit den verschiedenen Theorien.

Kernladungszahl ist, wie man auch in Abbildung 2.4 sehen kann, bei Uran ($Z = 92$) die **E1**-Übergangsrate noch zwei Größenordnungen stärker als die des **M2**-Übergangs. Dies ist der Grund dafür, daß diese kleine Beimischung bisher in der Regel vernachlässigt wurde.

6.5.1 Bestimmung der Strukturfunktion

Um dem Einfluß der Multipolmischung auf die Anisotropie nachzugehen, geht man vom Alignmentparameter \mathcal{A}_2 aus. Dieser ist mit der Winkelverteilung der $\text{Ly}\alpha_1$ -Photonen gemäß Gleichung 2.18 verbunden. Diese Formel ist aber nur gültig, solange man den magnetischen Quadrupolanteil vernachlässigt. Bezieht man diesen mit ein, so ergibt sich, daß man den experimentellen Anisotropieparameter β_A mit dem *effektiven* theoretischen Anisotropiekoeffizienten $\beta_2^{(eff)}$ vergleichen muß. Dieser steht mit dem Alignmentparameter \mathcal{A}_2 in folgendem Zusammenhang:

$$\beta_2^{(eff)} = \alpha \cdot f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2}) \cdot \mathcal{A}_2 \quad (6.10)$$

mit der Strukturfunktion $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2})$. Diese ist allein abhängig von der elektronischen Struktur des Atoms und spiegelt nicht den dem Zerfall vorangehenden Besetzungsprozeß wider. So wurden bei protonenstoßinduzierten

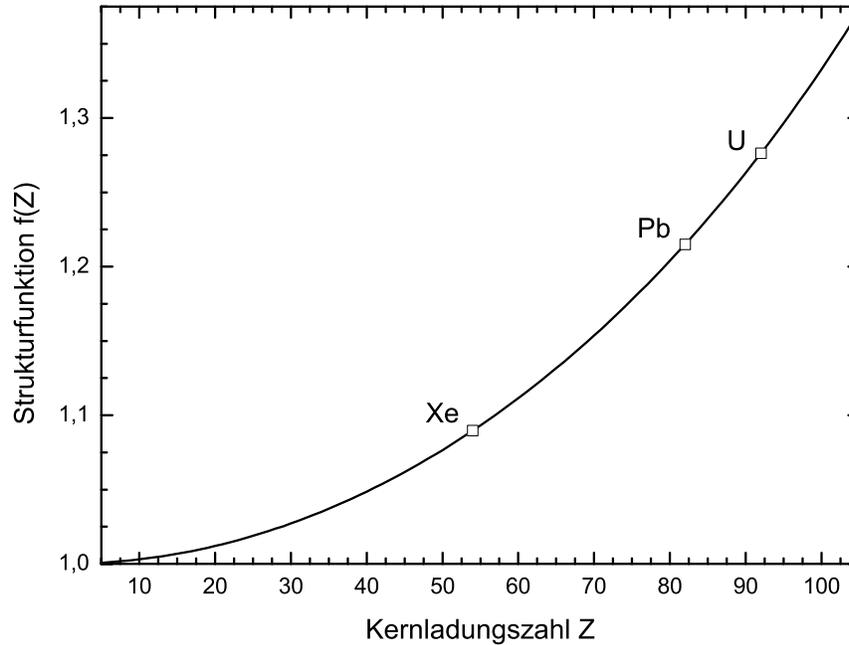


Abbildung 6.15: Der Wert der Strukturfunktion $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2})$ in Abhängigkeit der Kernladungszahl.

Vakanzen der L-Schale durch Papp *et al.* [PP88, PPS90] Hinweise auf eine solche Multipolmischung gefunden.

Durch Einführung dieses multiplikativen Korrekturfaktors kann die im letzten Abschnitt aufgezeigte Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie beseitigt werden. Mehr noch kann durch Umkehrung dieses Vorgehens das Mischungsverhältnis aus den Winkelverteilungen extrahiert werden. Somit steht ein einzigartiger Zugang zur Erforschung der Struktureffekte in hochgeladenen Schwerionen zur Verfügung, denn aufgrund der extrem hohen Zerfallsraten ist eine direkte Messung der Lebensdauern, um aus diesen auf das Mischungsverhältnis zu schließen, nicht möglich. In Abbildung 6.15 ist der Betrag der Strukturfunktion in Abhängigkeit der Kernladungszahl dargestellt. Hier wird deutlich, daß diese Methode besonders bei schweren Elementen, bei denen ein rund dreißigprozentiger Effekt zu beobachten ist, angewendet werden kann; aber auch schon bei Xenon ($Z = 54$) liegt eine neunprozentige Änderung der Anisotropie vor. Bei dem in dieser Arbeit untersuchten Lyman α_1 -Übergang in Uran liegt der theoretisch zu erwartende Betrag der Strukturfunktion bei etwa 1,28 [SFG02]. Es muß noch angemerkt werden, daß durch das Interferieren der beiden Zerfallskanäle auch die lineare Polarisation beeinflußt wird.

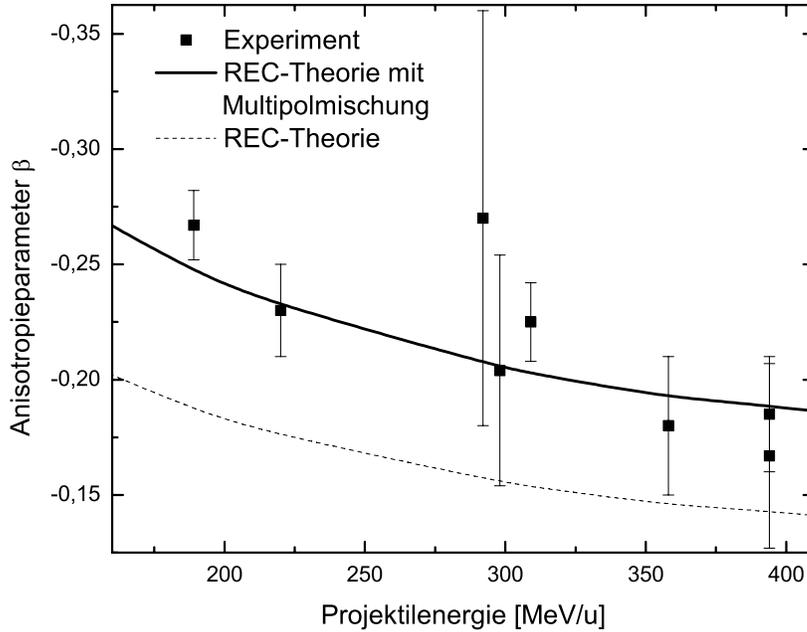


Abbildung 6.16: *Durch Berücksichtigung der Multipolmischung im REC-dominierten Bereich verbessert sich die Übereinstimmung der theoretischen Erwartung mit dem Experiment deutlich.*

Mit $\langle E1 \rangle$ und $\langle M2 \rangle$ als den elektrischen und magnetischen Übergangsamplituden ergibt sich das Verhältnis [SFG02]

$$f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2}) = \frac{\langle \mathbf{E1} \rangle^2 + 2\sqrt{3}\langle \mathbf{E1} \rangle \langle \mathbf{M2} \rangle - \langle \mathbf{M2} \rangle^2}{\langle \mathbf{E1} \rangle^2 + \langle \mathbf{M2} \rangle^2} \quad (6.11)$$

Dies entspricht näherungsweise unter der Annahme $\langle E1 \rangle \gg \langle M2 \rangle$

$$f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2}) \approx 1 + \frac{2\sqrt{3}\langle \mathbf{M2} \rangle}{\langle \mathbf{E1} \rangle} . \quad (6.12)$$

Bei der Beschränkung auf Dipolübergänge setzt man $\langle M2 \rangle \approx 0$, woraus folgt $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2}) = 1$. Wie man in Gleichung 6.12 sieht, ist der Korrekturfaktor der Dipolnäherung bestimmt durch das Verhältnis der Übergangsamplituden $\langle M2 \rangle / \langle E1 \rangle$. Für den $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ -Übergang im wasserstoffartigen Uran gilt $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2})=1,29$. Das Verhältnis der Übergangsraten mit einem Betrag von etwa 1% ist als Observable proportional zu dem Quadrat des Verhältnisses der Übergangsamplituden, weshalb das Amplitudenverhältnis etwa 10% beträgt. Aus diesem Grund kann die Photonenwinkelverteilung bei schweren Elementen stark von der Multipolmischung beeinflusst werden. Wie aus den

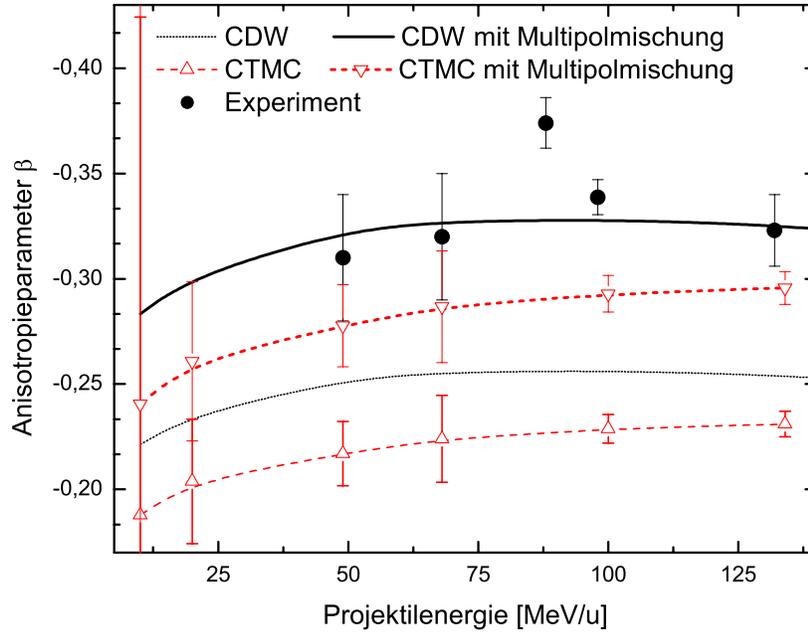


Abbildung 6.17: *Durch Berücksichtigung der Multipolmischung im NRC-dominierten Bereich zeigt sich, daß die CDW-Theorie besser als die CTMC-Simulation mit der Messung übereinstimmt.*

am Anfang dieses Abschnitts erwähnten Skalierungen $\Gamma_{M2} \propto Z^8$, $\Gamma_{E1} \propto Z^4$ hervorgeht, skaliert das Ratenverhältnis $\sim Z^4$ und damit das Amplitudenverhältnis $\sim Z^2$. Ebenso skaliert die Strukturfunktion $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2})$ mit Z^2 , ein Ergebnis, welches man aufgrund der Zerfallsratenskalierung nicht erwartet hätte. Wendet man diese Korrektur zunächst auf den REC-dominierten Energiebereich an, so wird die zuvor beobachtete 30-prozentige Diskrepanz aufgehoben, siehe Abbildung 6.16 auf der vorherigen Seite.

Im Bereich, in dem der strahlungslose Einfang dominiert, gibt es zwei unterschiedliche theoretische Vorhersagen, die beide nicht mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen. Der die Multipolmischung berücksichtigende Korrekturterm ist ein Struktureffekt und als solcher nicht von der Vorgeschichte des angeregten Zustandes abhängig. Wendet man diesen auf die beiden Theorien an, sieht man, daß nur die Vorhersage der CDW-Theorie mit den Meßwerten zusammenfällt, die CTMC-Theorie liefert eine noch immer zu geringe Anisotropie (Abbildung 6.17).

Ebenso wie für den hier diskutierten $Ly\alpha_1$ -Übergang gelten die Überlegungen prinzipiell auch für alle anderen Übergänge, bei denen neben dem dominierenden Übergang noch höhere Multipolübergänge erlaubt sind, wie beispiels-

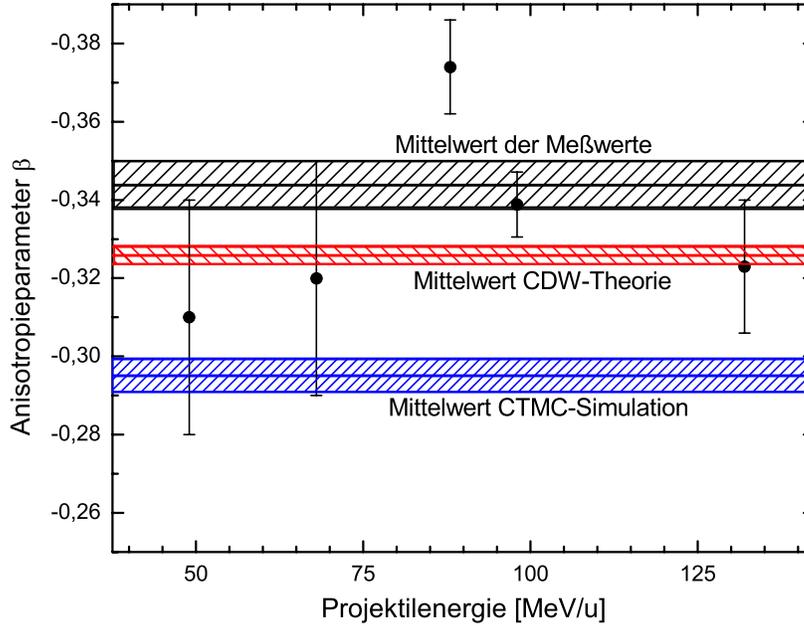


Abbildung 6.18: Mittelwert der gemessenen und berechneten Anisotropiewerte im Energiebereich zwischen 49 und 132 MeV/u.

weise bei durch dielektronische Rekombination (DR) doppeltangeregten heliumähnlichen Ionen.

Um den Wert der Strukturfunktion zu bestimmen, vergleicht man die gemessene Anisotropie mit derjenigen, die sich aus den theoretischen Wirkungsquerschnitten unter Berücksichtigung von Kaskadeneffekten ergibt. Der Quotient entspricht der Strukturfunktion. Um den Betrag der Strukturfunktion im Bereich des nichtradiativen Einfangs zu bestimmen, faßt man die die Werte zwischen 49 und 132 MeV/u zusammen. Es ergibt sich unter Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate der Mittelwert (gewichtetes Mittel) und dessen Standardabweichung $-0,3438 \pm 0,0061$. Die gleiche Methode läßt sich auf die mit der Strukturfunktion multiplizierten Vorhersage der

Experiment	CDW	CTMC
$-0,3438 \pm 0,0061$	$-0,3258 \pm 0,0022$	$-0,2951 \pm 0,0042$

Tabelle 6.4: Mittelwerte der Anisotropieparameter im Bereich des nichtradiativen Elektroneneinfangs. Aufgeführt sind Mittelwert des Meßwertes und die Mittelwerte der theoretischen Vorhersagen, jeweils mit deren Fehlern.

CTMC-Simulation anwenden, es folgt $-0,2951 \pm 0,0042$. Der Mittelwert der Ergebnisse der CDW-Rechnung ist $-0,3258 \pm 0,0022$. Vergleicht man jetzt den Meßwert mit den theoretischen Vorhersagen, so ist die Übereinstimmung der CDW-Theorie viel besser als die mit der CTMC-Vorhersage, siehe Tabelle 6.4.

6.5.2 Messung des Übergangsamplitudenverhältnisses

Führt man eine χ^2 -Anpassung aller Werte zwischen 189 und 394 MeV/u durch, so erhält man für die Strukturfunktion $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2}) = 1,3009 \pm 0,0040$ mit dem reduzierten $\chi^2 = 0,44$. Diesem Wert mit dem sehr kleinen relativen Fehler von rund 0,3% ist noch eine relative systematische Unsicherheit von 1% zuzuschlagen. Die Beschränkung auf den Bereich des radiativen Einfangs ist begründet durch die Verlässlichkeit der hier angewendeten Theorie; die Rechnungen zum kinematischen Einfang sind aufgrund dessen komplexerer Natur unsicherer. Dieser experimentell gewonnene Wert der Strukturfunktion ist lediglich 0,0247 von dem theoretisch erwarteten Wert von 1,2762 ab. Aus diesem experimentellen Resultat läßt sich das Verhältnis der magnetischen Quadrupol- zur elektrischen Dipol-Übergangsamplitude bestimmen. Mit Hilfe der Formel

$$\frac{\langle \mathbf{M2} \rangle}{\langle \mathbf{E1} \rangle} = \frac{1}{2\sqrt{3}}f - 1 \quad (6.13)$$

ergibt sich das Verhältnis der Übergangsamplituden; quadriert man das Ergebnis, so erhält man das Verhältnis der Übergangsraten $\Gamma_{\mathbf{M2}}/\Gamma_{\mathbf{E1}}$. Setzt man den Meßwert ein, so folgt ein Amplitudenverhältnis von

$$\frac{\langle \mathbf{M2} \rangle}{\langle \mathbf{E1} \rangle} = 0,0869 \pm 0,0049 \quad (6.14)$$

und daraus das Verhältnis der Übergangsraten von

$$\frac{\Gamma_{\mathbf{M2}}}{\Gamma_{\mathbf{E1}}} = 0,00755 \pm 0,00085 \quad (6.15)$$

Die theoretischen Werte sind 0,07873 für das Amplitudenverhältnis und 0,00636 für das Ratenverhältnis; die experimentellen Werte sind davon nur 1,5 Standardabweichungen entfernt. In Tabelle 6.3 auf Seite 85 sind in den ersten beiden Spalten die Meßwerte des effektiven Anisotropieparameters $\beta_A^{(eff)}$ den theoretischen Werten β_A gegenübergestellt. In der dritten Spalte ist der Quotient aus Meßwert und Theoriewert, der dem Wert der Strukturfunktion $f(\mathbf{E1}, \mathbf{M2})$ entspricht, aufgeführt.

6.6 Simulation von Grenzkurven für vollständiges Alignment

Um die bisher gewonnenen Daten besser interpretieren zu können, kann man sich anhand von Wirkungsquerschnitten, denen systematisch ein extremales Alignment verliehen wird, ein Bild davon machen, welchen Einfluß die Zerfallskaskade auf die tatsächlich beobachtbare Anisotropie hat.

6.6.1 Systematische Untersuchung des Alignmenttransfers

Die vorhandenen Wirkungsquerschnitte wurden auf unterschiedliche Weisen manipuliert. Allen Simulationen gemein ist, daß der $2p_{3/2}$ -Zustand ein Alignment von $+1$ oder -1 aufweist. In Abbildung 6.19 ist dann die beobachtbare Anisotropie dargestellt; zur besseren Vergleichbarkeit mit den Meßwerten wurde der Einfluß der Multipolmischung beim $\text{Ly-}\alpha_1$ -Übergang berücksichtigt. Bei der Theorie für den strahlungslosen Einfang wurden die CDW-Rechnungen verwendet, da diese eine bessere Übereinstimmung zeigten und dazu noch bis zu einer Energie von 189 MeV/u vorlagen. Durch den zuvor erfolgten Vergleich der CDW- und der CTMC-Rechnungen mit den gemessenen Balmerpektren hat sich gezeigt, daß beide Theorien auf der Ebene von (n, ℓ, j) -differentiellen Wirkungsquerschnitten nahezu identische Vorhersagen liefern, weshalb das Beschränken auf nur einen Typ Rechnungen gerechtfertigt ist (mit Ausnahme von Kurve **I**, bei der die Besetzung der magnetischen Unterzustände für $n \geq 3$ nicht verändert wurde).

Als erste, nächstliegende Variante wurde lediglich der $2p_{3/2}$ -Zustand vollständig "aligned". Das bedeutet, daß der gesamte Wirkungsquerschnitt dieses Zustandes zu gleichen Teilen entweder auf die magnetischen Unterzustände mit $m_j = \pm \frac{1}{2}$ oder auf die Unterzustände mit $m_j = \pm \frac{3}{2}$ verteilt wurde. Alle anderen Zustände neben dem $2p_{3/2}$ -Niveau werden nicht verändert. An diesem Beispiel wird der Kaskadeneffekt auf die beobachtbare Anisotropie herausgestellt. Der Verlauf der Anisotropie in Abhängigkeit der Energie ist in dem Kurvenpaar **I** dargestellt. Die obere Kurve ist mit anfänglich vollständigem negativen Alignment erzeugt worden, die untere mit vollständig positivem Alignment. Es fällt dabei sehr deutlich auf, daß bei kleinen Energien die beiden Kurven aufeinanderfallen. Das ist begründet durch die Eigenschaft des nichtradiativen Einfangs, der bei dieser Energie dominant ist, überwiegend in Zustände hoher Hauptquantenzahlen zu erfolgen.

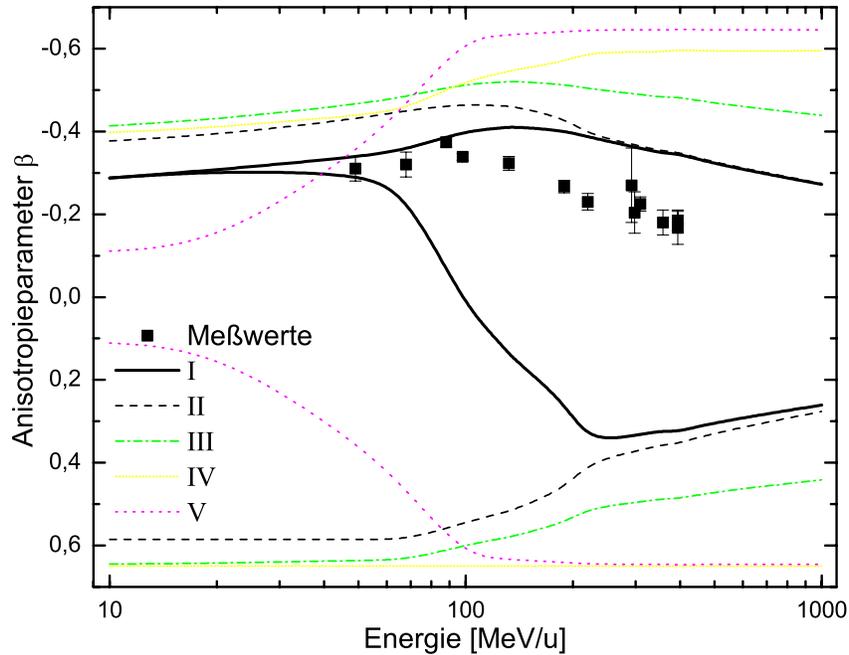


Abbildung 6.19: Vergleich der beobachteten mit der maximal beobachtbaren Anisotropie. Der Einfluß unterschiedlicher Anfangsbesetzungen wird hervorgehoben.

Da sich in diesem Fall der größte Teil des Gesamtwirkungsquerschnitts oberhalb von $n = 2$ befindet, wird die anfängliche Besetzung des $2p_{3/2}$ -Zustands total von den Kaskadenbeiträgen dominiert. Erst bei höheren Stoßenergien, wenn der Einfangwirkungsquerschnitt für $n = 2$ größer wird, verliert der Kaskadeneffekt an Bedeutung, und die beiden Kurven separieren sich. Im Dominanzbereich des radiativen Einfangs gilt die letzte Überlegung umso mehr, da hier vorwiegend in Niveaus mit kleinen Hauptquantenzahlen eingefangen wird; tatsächlich verläuft hier das Kurvenpaar **I** deutlich getrennt. Das zwischenzeitlich angenommene Maximum zeigt den Übergang von nicht-radiativem zu radiativem Einfang.

Das Kurvenpaar **II** wurde erzeugt, indem die n, ℓ, j -Verteilung der Wirkungsquerschnitte beibehalten wurde; die Querschnitte der m_j -Zustände wurden entweder in die $m_j = \pm 1$ - oder in die $m_j = \pm j$ -Niveaus umgeschichtet. Dieses Vorgehen ist sehr ähnlich zu dem für Kurve **I**, allerdings wurden hier *alle* Niveaus manipuliert. Im hohen Energiebereich fällt dann auch diese Kurve mit Kurve **I** zusammen, was darin begründet liegt, daß hier hohe Hauptquantenzahlen und Drehimpulse kaum noch besetzt werden und somit die Zustände oberhalb von $n = 2$, die ein vollständiges Alignment

aufweisen, kaum noch ins Gewicht fallen. Die Umkehrung dieses Arguments erklärt den Verlauf bei kleinen Energien; hier weicht Kurve II von Kurve I ab, weil jetzt das starke Alignment aller höhergelegenen Zustände sich über die Kaskade auf den $2p_{3/2}$ -Zustand aufprägen kann.

Kurve **III** hingegen fällt im betrachteten Energiebereich nicht mehr mit den bisher betrachteten zusammen. Bei diesem Kurvenpaar wurden die Querschnitte für n, ℓ in den Zustand $j = \ell + \frac{1}{2}$ und in die Unterzustände $m_j = \pm \frac{1}{2}$ oder $m_j = \pm j$ verteilt. Hiermit soll ein Zustand mit maximal möglichem Gesamtdrehimpuls j untersucht werden. Diesem ist es nur möglich, Schritt für Schritt, wie bei Yrast-Übergängen, den Grundzustand zu erreichen. Wieder wurden die beiden extremen Alignments in der Simulation verwendet. Bei dem stufenweisen Zerfall dieser Zustände wird aufgrund der Auswahlregeln nicht oder nur in vernachlässigbarem Umfang der Weg über einen $j = \frac{1}{2}$ -Zustand beschritten. Dies ermöglicht den Erhalt des Alignments in der Kaskade, denn beim Erreichen eines $j = \frac{1}{2}$ -Zustands, für den es gemäß Definition kein Alignment geben kann, würde der nachfolgende Zerfall statistisch auf die niedrigeren Zustände erfolgen, was das Alignment reduzieren würde. Somit ist diese sehr anschauliche Argumentation auch quantitativ untermauert.

Die Initialisierung zur Simulation der Kurve **IV** erfolgte über noch stärker zu hohen Drehimpulsen verlagerte Wirkungsquerschnitte. Hier wurde für jede Hauptquantenzahl n der maximal mögliche Bahndrehimpuls $\ell = n - 1$ und der maximale Gesamtdrehimpuls $j = \ell + \frac{1}{2}$ besetzt, die magnetischen Unterzustände wieder wie in vorangegangenen Beispiel. Auch hier wird das anfängliche Alignment durch die Kaskade kaum reduziert.

Ein letztes Beispiel ist in Kurve **V** dargestellt; hier wurde der gesamte Querschnitt für eine Hauptquantenzahl n in den $np_{3/2}$ -Zustand transferiert, wobei dann immer ein vollständiges Alignment eingestellt wurde. Bei hohen Stoßenergien bleibt dieses hohe Alignment wieder erhalten, da mit den zuvor gebrauchten Argumenten der Kaskade keine große Bedeutung zukommt. Das niedrige Alignment bei kleiner Stoßenergie kann dadurch erklärt werden, daß hier in der Kaskade sehr häufig ein $j = \frac{1}{2}$ -Zustand durchlaufen wird, was nach Obigem das Alignment reduziert.

6.6.2 Entfaltung des Anfangsalignments

Die Ergebnisse der Kurve **I** können gebraucht werden, um Rückschlüsse auf das Anfangsalignment zu ziehen. Die beiden Kurven enthalten sowohl die Information über das Anfangsalignment als auch die Beeinflussung dessen

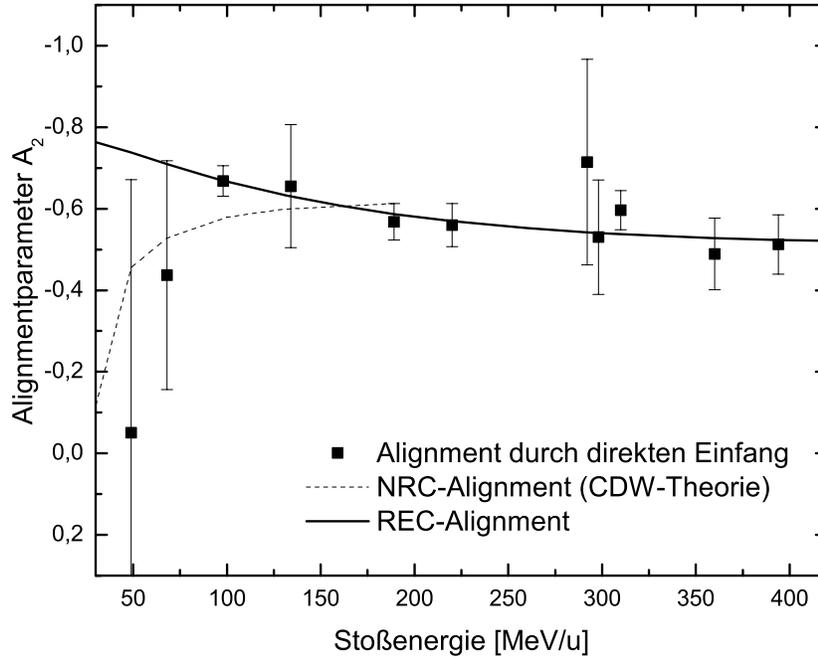


Abbildung 6.20: Das Alignment aus der Population durch Elektroneneinfang in Abhängigkeit der Energie. Die Kurve zeigt die theoretische Erwartung folgend aus der CDW-Näherung für den kinematischen Einfang (gestrichelte Linie) und aus der relativistischen Beschreibung des radiativen Einfangs (durchgezogene Linie).

durch die Kaskadeneffekte. Da die in die Simulation eingegangenen Anfangsbesetzungen ein vollständiges Alignment besitzen, kann man den durch Elektroneneinfang besetzten Zustand als Superposition dieser beiden Extremalzustände auffassen. Sind β^+ und β^- die Anisotropiewerte aus der Simulation und β der gemessene Wert, so folgt mit den beiden Koeffizienten c^+ und c^-

$$\beta = c^+ \beta^+ + c^- \beta^- \quad (6.16)$$

unter der Voraussetzung $c^+ + c^- = 1$. Der Anisotropiewert β^+ entspricht einer Anfangsbesetzung, die vollständig den $m_j = \pm \frac{3}{2}$ -Zustand des $2p_{3/2}$ -Niveaus besetzt; analog ist β^- definiert. Hat man die Koeffizienten c^+ und c^- ermittelt, so ist das Anfangsalignment gegeben durch

$$\mathcal{A}_2 = c^+ - c^- \quad (6.17)$$

Berechnet man auf diese Weise den durch direkten Elektroneneinfang erzeugten Alignmentparameter, so ergibt sich, daß bei Stoßenergien ab 100 MeV/u

und größer das Anfangsalignment durch den REC-Beitrag zum Gesamtquerschnitt bestimmt ist, siehe Abbildung 6.20. Dieses Ergebnis ist plausibel, trägt doch der radiative Einfang zu kleinen Hauptquantenzahlen bei, wobei sich der kinematische Einfang hier kaum niederschlägt.

6.7 Vergleich mit Einfang in U^{91+}

Die Untersuchung der Vorgänge in heliumähnlichen Schwerionen ist noch wenig fortgeschritten, obwohl es sich hierbei um das einfachste mehrelektronische System handelt [FSB00].

Ergänzend zu den Untersuchungen des Einfangs in nacktes Uran wurde auch ein Experiment zum Einfang in wasserstoffartiges Uran durchgeführt. Bei einer Projektilenergie von 216 MeV/u wurden U^{91+} -Ionen mit einem Stickstofftarget in Wechselwirkung gebracht. Die bei einem Elektroneneinfang auftretende $K\alpha$ -Strahlung der Übergänge $n = 2 \rightarrow n = 1$ wurde koinzident mit einem umgeladenen Projektilion nachgewiesen.

Das beobachtete Röntgenspektrum besteht aus zwei Linien, obwohl es sechs Grundzustandsübergänge aus der L -Schale gibt. Wie man Abbildung 2.3 auf Seite 10 entnehmen kann, sind die Übergänge $^1S_0 \rightarrow ^1S_0$ und $^3P_0 \rightarrow ^1S_0$ Zweiphotonenzerfälle, weswegen sie nicht als Linien im Röntgenspektrum identifiziert werden können. Aus diesem Grund besteht das Röntgenspektrum der $n = 2 \rightarrow n = 1$ -Übergänge nur aus vier Linien. Diese Linien sind paarweise sehr eng benachbart, weswegen sie bedingt durch die Detektorauflösung als zwei Linien erscheinen.

Die $K\alpha_1$ -Linie beinhaltet die Übergänge $^1P_1, ^3P_2 \rightarrow ^1S_0$, die $K\alpha_2$ -Linie besteht aus $^3S_1, ^3P_1 \rightarrow ^1S_0$. In allen Fällen können die magnetischen Unterniveaus ein Alignment aufweisen.

Die Intensitätsverteilung der beobachteten Strahlung weist keine signifikante Winkelabhängigkeit auf, wie in Abbildung 6.21 zu sehen ist. Weder die Intensität der $K\alpha_1$ - noch die der $K\alpha_2$ -Linie weist eine Winkelabhängigkeit auf, deren Quotient ebensowenig. Zum Vergleich ist die Intensitätsverteilung für den Einfang in nacktes Uran bei gleicher Stoßenergie eingezeichnet; diese weist ein starkes Alignment auf.

Eine statistische Analyse der Linienintensitäten für den Einfang in wasserstoffähnliches Uran zeigt, daß die Abweichung vom Mittelwert einer jeden Verteilung kleiner ist als die Unsicherheit der Meßwerte selbst. Man kann also von einer winkelunabhängigen Verteilung ausgehen.

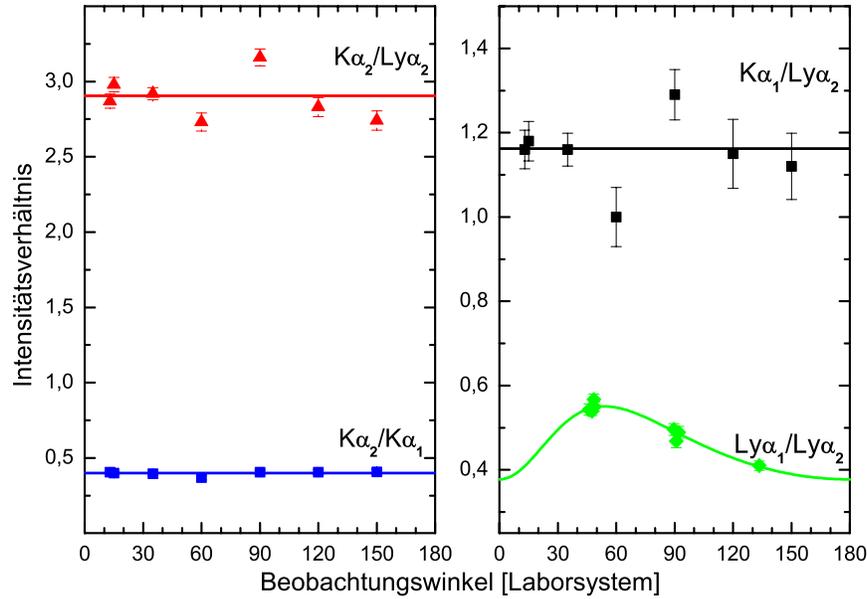


Abbildung 6.21: Die Intensitätsverteilung der $K\alpha$ -Strahlung beim Elektroneneinfang in wasserstoffartige Uranionen.

Diese Beobachtung wirft die Frage auf, weshalb lediglich durch die Anwesenheit eines weiteren Elektrons das ansonsten zu beobachtende Alignment völlig verschwindet. Die Interpretation der Winkelverteilungen wird dadurch erschwert, daß jede gemessene Linie eine Doppellinie ist und man nur die Summe der Intensitäten mißt. Für den Fall, daß jeder Übergang für sich eine anisotrope Intensitätsverteilung aufwiese, würde sich beispielsweise dann eine isotrope Verteilung ergeben, wenn die Isotropien den gleichen Betrag, aber entgegengesetztes Vorzeichen haben.

6.8 Abschließende Betrachtungen

Abschließend gesehen können die gemessenen Anisotropien durch die verwendeten theoretischen Modelle gut erklärt werden. Unter Verwendung der CDW-Rechnungen zusammen mit der REC-Theorie ergibt sich Abbildung 6.22. Die mit den Meßpunkten übereinstimmende Kurve beinhaltet die Korrektur durch die Strukturfunktion; die darunterliegende punktierte Kurve ohne die Multipolmischungskorrektur ist zum Vergleich eingezeichnet. Die obenliegende graue Kurve stellt das maximal mögliche Alignment dar.

Die gute Übereinstimmung der REC-Theorie ist schon fast zu erwar-

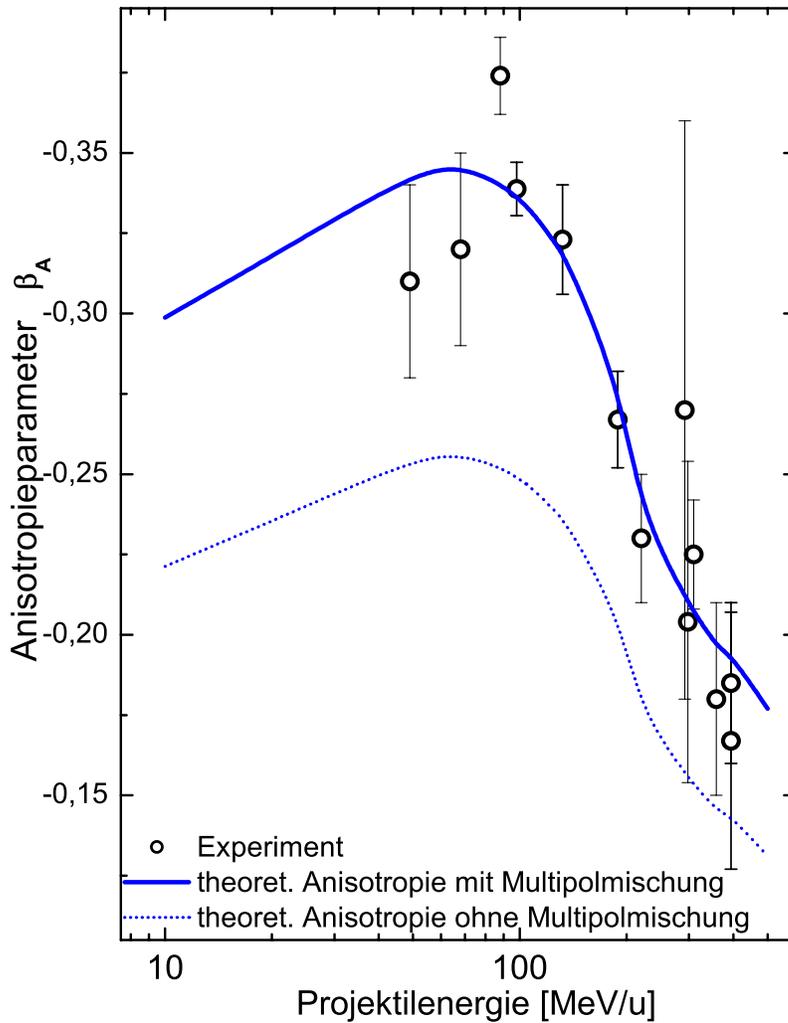


Abbildung 6.22: Die Anisotropie in Abhängigkeit der Energie. Die Kurve zeigt die theoretische Erwartung aus einer Kombination aus CDW-Näherung für den kinematischen Einfang und der relativistischen Beschreibung der radiativen Rekombination.

ten gewesen, da unabhängige Rechnungen von Eichler und von Surzhykov identische Ergebnisse liefern und die Theorie als zuverlässig angesehen werden kann. In den hohen Energiebereichen kann die Voraussetzung für die Gültigkeit der dort einfließenden Impulsnäherung als erfüllt angesehen werden.

Die gute Übereinstimmung der CDW-Theorie kann erklärt werden. Diese Theorie ist eine Beschreibung in erster Bornscher Näherung, weshalb sie

bei hohen Energien gute Vorhersagen treffen sollte. Wie in Abschnitt 3.2.2 ausgeführt wurde, beinhaltet eine Näherung in *erster* Ordnung nur *eine* einzige Projektil-Target-Wechselwirkung, was den Vorgängen bei einem Stoß bei hoher Projektilenergie entspricht. Damit ergeben sich aber Defizite bei der Beschreibung der Vorgänge bei kleinerer Stoßgeschwindigkeit. Durch die Verwendung einer Theorie mit verzerrten Projektilwellenfunktionen werden Mehrfachstreuvorgänge teilweise miteingeschlossen.

Bei niedrigeren Energien, bei denen die Stoßgeschwindigkeit vergleichbar mit der K-Schalen-Geschwindigkeit ist, liegt eine völlig andere Situation vor. Hier kommt es zu einer Kopplung von Target- und Projektilwellenfunktionen und eine Beschreibung in (Quasi-)Molekülorbitalen ist angebracht. Aus diesem Grund, zusammen mit der verlängerten Wechselwirkungsdauer kann es vermehrt zu Mehrfachwechselwirkungen kommen, weshalb die Beschreibung mittels einer Erster-Ordnungs-Theorie versagen sollte. Teilweise kompensiert wird dieses Problem durch die zuvor angesprochene implizite Berücksichtigung dieser Vorgänge durch die gestörten Wellenfunktionen.

Darüberhinaus kommt hier die Tatsache zum Tragen, daß bei den eigentlich problematischen niedrigen Energien der Elektroneneinfang in Zustände mit hohen Hauptquantenzahlen stattfindet. Bei diesen Zuständen ist aufgrund der Bahngeschwindigkeiten der Stoß als hinreichend schnell anzusehen. Wie man in Tabelle A.1 ablesen kann, markiert eine Stoßenergie von 60 MeV/u für das $2p_{3/2}$ -Niveau den Übergang von schnellen zu langsamen Stößen. Bei dieser Stoßenergie ist aber das Alignment des $2p_{3/2}$ -Niveaus stark von den Kaskadenbeiträgen höherer Zustände dominiert. Für diese Zustände wird die Beschreibung durch die CDW-Theorie wiederum eine gute Vorhersage liefern. Somit kommen eventuelle Defizite dieser Näherung nicht oder nur marginal zum Tragen.

Aufgrund des nichtrelativistischen Ansatzes der CTMC-Simulation kann erwartet werden, daß diese bei relativistischen Geschwindigkeiten keine korrekten Resultate liefert. Bei kleinen Orbital- und Stoßgeschwindigkeiten sollte es keine Probleme geben; im Gegensatz zur CDW-Näherung sollte im adiabatischen Geschwindigkeitsbereich die Vorhersage gut sein. Eine Unsicherheit resultiert aus der Quantisierung der kontinuierlichen Hamiltonschen Trajektorien.

Im Bereich kleiner Stoßenergien ist die CDW-Theorie besser in der Lage, die Meßwerte wiederzugeben, als die CTMC-Simulation. Die Probleme der CTMC-Methode sind verwunderlich, ist diese doch bei nichtrelativistischen Geschwindigkeiten sehr bewährt. Die Stoßgeschwindigkeit im Bereich von 49-134 MeV/u liegt bei $0,31 < \beta < 0,48$. Die Bahngeschwindigkeiten in ei-

nem Stickstoffatom ergibt sich zu $\beta = Z\alpha/n$, das heißt $\beta \approx \frac{1}{20n}$ und somit viel kleiner als die Stoßgeschwindigkeit. Die Bahngeschwindigkeit im Uranion sind $\beta \approx 0,67/n$, das heißt $0,34c$ für $n = 2$, $0,22c$ für $n = 3, \dots$. Hieran läßt sich auch ablesen, daß bedingt durch die verhältnismäßig kleinen Bahngeschwindigkeiten in Schalen oberhalb der L -Schale eine nichtrelativistische Beschreibung dort angemessen ist.

6.9 Zukünftige Entwicklungen

Bei zukünftigen Untersuchungen der Röntgenstrahlung bei kleineren Stoßenergien sollte nach den Ausführungen in diesem Kapitel ein größeres Augenmerk auf die durch die Kaskade verursachte Strahlung der Balmer-, Paschen-, Brackett-,...-Serien gelegt werden. Um auch hier zustandssensitive Informationen extrahieren zu können, muß die Winkelverteilung der einzelnen Linien untersucht werden. Dies stellt eine Herausforderung dar, sowohl auf der experimentellen Seite bezüglich des Einsatzes geeigneterer Vakuumfenster und Detektoren für den Niederenergiebereich als auch bei der Interpretation der Winkelverteilungen der zahlreichen Röntgenübergänge.

6.9.1 Polarisation

Ein wichtiges alternatives Werkzeug zur Erforschung der Population magnetischer Unterzustände ist neben der in dieser Arbeit vorgestellten Winkelkorrelationsmessung die Messung der Polarisation der charakteristischen Strahlung.

Erfolgt die Messung der Polarisation mit unpolarisierten Elektronen, so ergibt sich bei Stoßenergien von 50, 220 und 400 MeV/u das im linken Teil der Abbildung 6.23 gezeigte Bild. Aufgrund der fehlenden Polarisation ist nur der Stokesparameter P_1 von Null verschieden. Verwendet man hingegen polarisierte Elektronen oder ein polarisiertes Target, so sind die Stokesparameter P_1 und P_2 zu beobachten, wie in der rechten Hälfte von Abbildung 6.23 für eine Stoßenergie von 400 MeV/u gezeigt.

6.9.2 Zweiphotonenkoinzidenzen

Das in Abschnitt 2.4.3 auf Seite 20 besprochene differentielle Alignment ist erst durch den Einsatz eines Detektors mit einem großen Nachweisraumwin-

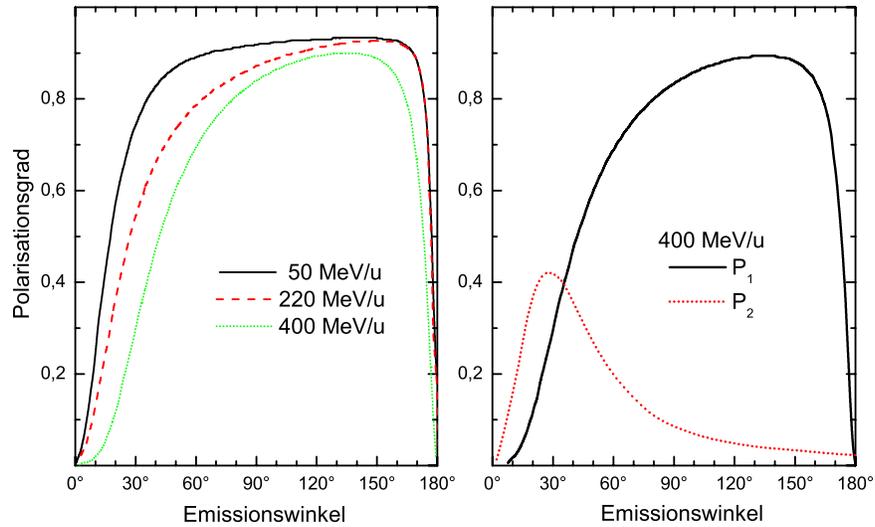


Abbildung 6.23: Die Polarisation der REC-Strahlung beim Einfang in nacktes Uran bei verschiedenen Projektilenergien.

kel möglich.

In einem ersten Experiment mit einem sogenannten „Cloverdetektor“ gemessen, der eine effizienten Messung von Zweiphotonenkoinzidenzen ermöglicht, wurde erstmals ein Energiespektrum aufgezeichnet. Der Detektor wurde unter einem Beobachtungswinkel von 90° eingesetzt. Das Energiespektrum der Lyman α -Strahlung wurde koinzident mit einem L, M, \dots -REC-Photon aufgezeichnet. Dies zeigt die prinzipielle Durchführbarkeit solcher Untersuchungen.

Kapitel 7

Zusammenfassung

Die intensiven gekühlten Schwerionenstrahlen des ESR-Speicherrings in Kombination mit dem dort installierten Überschallgastarget bieten einzigartige Möglichkeiten, Elektroneneinfangprozesse bei unterschiedlichen Projektilenergien zu untersuchen.

In der vorliegenden Arbeit wurde die Emission der charakteristischen Balmerstrahlung detailliert nach (n, ℓ, j) -Zuständen untersucht; die Lyman α -Strahlung konnte aufgrund der großen Feinstrukturaufspaltung des $2p_{3/2}$ -Niveaus darüberhinaus auch nach der Besetzung der magnetischen Unterzustände untersucht werden. Hierbei wurde gezeigt, daß der Elektroneneinfang bevorzugt in Zustände der magnetischen Quantenzahlen $m_j = \pm \frac{1}{2}$ erfolgt. Demnach hat der Einfangmechanismus einen starken Einfluß auf die Besetzung der magnetischen Unterzustände und als Folge dessen auf die Winkelabhängigkeit der Emission der charakteristischen Photonen. Erstmals konnte an einem schweren Stoßsystem die Multipolmischung beim Ly α_1 -Übergang mit großer Genauigkeit nachgewiesen werden; es ergab sich eine sehr gute Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage.

Die beiden nichtrelativistischen Theorien, die, aufgelöst nach magnetischen Unterzuständen, den nichtradiativen Einfang in das Projektil beschreiben, liefern bei den totalen Einfangwirkungsquerschnitten nahezu gleiche Ergebnisse in Übereinstimmung mit dem Experiment. Auch die (n, ℓ, j) -differentiellen Querschnitte zeigen bei dem Vergleich mit den gemessenen Balmerspektren eine sehr gute Übereinstimmung. Erst wenn die magnetischen Unterzustände in die Untersuchung miteinbezogen werden, weichen die beiden Theorien voneinander ab. Allerdings weichen beide Vorhersagen signifikant von den Meßwerten ab, solange die Multipolmischung vernachlässigt

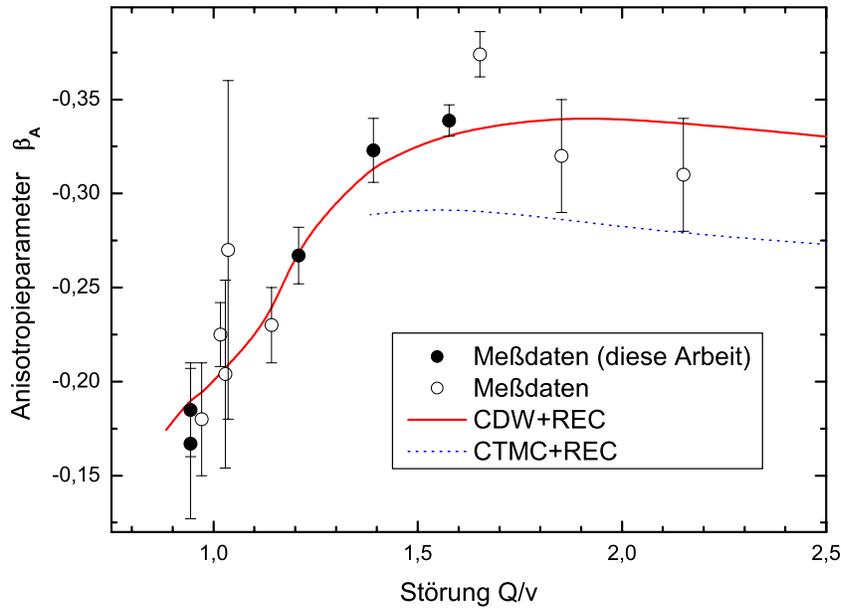


Abbildung 7.1: Die Anisotropie in Abhängigkeit der Störung Q/v . Die durchgezogene Kurve zeigt die theoretische Erwartung aus einer Kombination aus CDW-Näherung für den kinematischen Einfang und der relativistischen Beschreibung der radiativen Rekombination. Die gestrichelte Kurve zeigt die Ergebnisse der CTMC-Näherung.

wird. Anhand der Verteilung der Wirkungsquerschnitte nach n und (n, ℓ, j) wurde der wesentliche Unterschied der beiden untersuchten Einfangprozesse hervorgehoben, nämlich die Dreikörpurnatur des kinematischen Einfangs gegenüber den auf einen Zweikörperprozeß reduzieren REC.

Aus dem Vergleich der Messung der Anisotropie bei höheren Energien mit der Vorhersage einer relativistisch exakten Theorie wurde geschlossen, daß die Meßwerte nur dann erklärt werden können, wenn die Mischung von **E1**- und **M2**-Übergängen berücksichtigt wird. Der diese Mischung beinhaltende Korrekturfaktor (*Strukturfunktion*) ist ein Struktureffekt und gilt unabhängig von dem speziellen Prozeß, der zu dem angeregten Zustand geführt hat. Vielmehr ist dieser nur von dem speziellen Übergang und von der Kernladung des Ions abhängig.

Unter Einbeziehung der Multipolmischung stimmt die Vorhersage der CDW-

Theorie mit den Meßwerten überein, siehe Abbildung 7.1 auf der vorherigen Seite; die andere Theorie unterschätzt das Alignment des $2p_{3/2}$ -Zustands und die daraus folgende Anisotropie der Lyman α_1 -Strahlung. Nur die quantenmechanische Behandlung des Problems vermag die Besetzung der magnetischen Unterzustände korrekt vorherzusagen, die klassische Simulation versagt hier. Bei dem untersuchten Stoßsystem handelt es sich um ein sehr stark asymmetrisches ($Z_P \gg Z_T$), was im allgemeinen die theoretische Beschreibung erleichtert. Zudem muß hervorgehoben werden, daß es durch die Anwendung der Abbremsstechnik für nacktes Uran gelungen ist, diese Prozesse in einem Bereich extrem starker Störung (Q/v) zu untersuchen. Dieser Bereich ist im allgemeinen experimentell nicht zugänglich und ist eine Herausforderung für die theoretische Beschreibung.

Durch den Vergleich der als zuverlässig anzusehenden Vorhersage für den REC-Prozeß mit den Meßwerten konnte, erstmals für atomare Übergänge in Schwerionen, die Beeinflussung der meßbaren Anisotropie durch Mischung der Strahlung unterschiedlicher Multipolaritäten aufgedeckt werden. Hiermit war es möglich, das Übergangsratenverhältnis $\Gamma_{\mathbf{M2}}/\Gamma_{\mathbf{E1}}$ und daraus das Übergangsamplitudenverhältnis $\langle \mathbf{M2} \rangle / \langle \mathbf{E1} \rangle$ zu extrahieren. Dieser kleine magnetische Beitrag zur Rate, der etwa *ein* Prozent beträgt, ist mit anderen Methoden nicht zu vermessen.

Wie sich aus den Ausführungen zu Abbildung 6.19 ergibt, ist die Messung des Alignments bei niedrigen Stoßenergien stark von Kaskadeneffekten beeinflusst. Das bedeutet, daß das Alignment der Ly α_1 -Strahlung sowohl durch den direkten Einfang als auch durch die Zerfallskaskade bestimmt ist. Dieses resultiert in einer von der jeweiligen Theorie abhängigen Vorhersage, wodurch sich eine integrale Aussage über die Güte einer bestimmten Beschreibung ableiten läßt.

Anhang A

A.1 Bahngeschwindigkeiten

Hauptquantenzahl	E_B	β	T_{proj}
$n = 1$	132 keV	0.72	410 MeV/u
$n = 2(j = 1/2)$	34 keV	0.37	70 MeV/u
$n = 2(j = 1/2)$	30 keV	0.34	60 MeV/u
$n = 3$	14 keV	0.23	27 MeV/u
$n = 4$	8 keV	0.18	14 MeV/u
$n = 5$	5 keV	0.14	9 MeV/u
$N_2 n = 1$	667 eV	0.05	1.2 MeV/u

Tabelle A.1: Die Bindungsenergien, Bahngeschwindigkeiten und die entsprechenden Stoßenergien für wasserstoffähnliches Uran. Außer im Fall $n = 2$ wurde die Feinstrukturaufspaltung vernachlässigt, da diese ansonsten im Rahmen dieser Abschätzung keinen relevanten Einfluß auf die Orbitalgeschwindigkeiten hat. In der untersten Zeile sind zum Vergleich die Werte für ein K -Schalenelektron im atomaren, wasserstoffähnlichen Stickstoff.

A.2 Einfluß der Kaskade

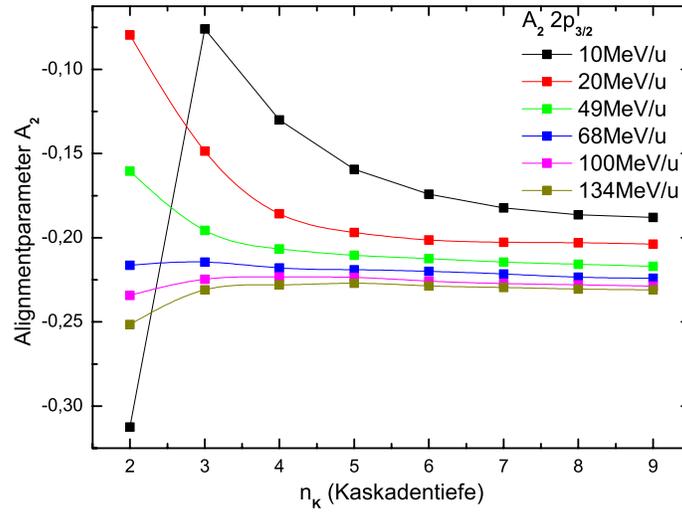


Abbildung A.1: Der Einfluß der Kaskade bei den CTMC-Rechnungen.

A.3 n, ℓ -Verteilung der REC-Querschnitte

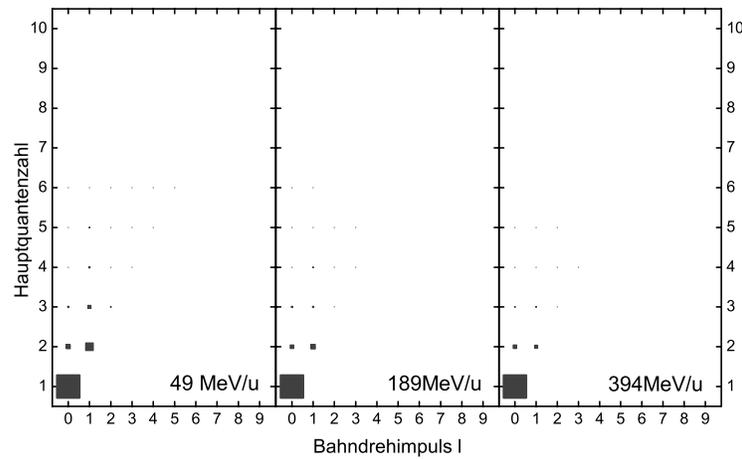


Abbildung A.2: n, ℓ -Anfangsbesetzungen durch radiativen Einfang; die Symbolgröße entspricht dem Wirkungsquerschnitt, normiert auf den Maximalwert bei der jeweiligen Energie.

A.4 Anisotropieparameter

β_2	NRC(CTMC)	NRC(CDW)	NRC(CDW)+REC	REC
10MeV/u	-0.1879	-0.2213		
20MeV/u	-0.2038	-0.2354		
49MeV/u	-0.2170	-0.2521		
68MeV/u	-0.2240	-0.2557		
100MeV/u	-0.2288	-0.2564		
126MeV/u		-0.2546		
134MeV/u	-0.2310	-0.2537	-0.2355	-0.2160
190MeV/u	-0.2470	-0.2470	-0.2070	-0.1860
400MeV/u				-0.1435

Tabelle A.2: Berechnete Anisotropieparameter

Literaturverzeichnis

- [Anh85] R. Anholt. Atomic collisions with relativistic heavy ions. II. Light-ion charge states. *Phys. Rev. A*, **31**, 3579, 1985.
- [AP66] R. Abrines und I. C. Percival. Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons. *Proc. Phys. Soc.*, **88**, 861, 1966.
- [ASY95] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev und V. Yerokhin. Relativistic nuclear recoil corrections to the energy levels of hydrogenlike and high-Z lithiumlike atoms in all orders in αZ . *Phys. Rev. A*, **52**, 1884, 1995.
- [AWW98] M. A. Abdallah, W. Wolff, H. E. Wolf, E. Sidky, E. Y. Kamber, M. Stöckli, C. D. Lin und C. L. Cocke. Cold-target recoil-ion-momentum spectroscopy study of single electron capture from He by slow Ar⁸⁺ ions. *Phys. Rev. A*, **57**, 4373, 1998.
- [BBH97] H. J. Beyer, K. Blum und R. Hippler. *Coherence in Atomic Collision Physics*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1. Auflage, 1997.
- [Bet47] H. A. Bethe. The Electromagnetic Shift of Energy Levels. *Phys. Rev.*, **72**, 339, 1947.
- [BF94] K. Blasche und B. Franzke. Status Report on SIS-ESR. *Proceedings of the 4th European Particle Accelerator Conference, London*, **1**, 133, 1994.
- [BGS79] Dž. Belkić, R. Gayet und A. Salin. Electron capture in high-energy ion-atom collisions. *Phys. Rep.*, **56**, 279, 1979.
- [BGS81] Dž. Belkić, R. Gayet und A. Salin. Computation of total cross-sections for electron capture in high energy ion-atom collisions. *Computer Physics Communications*, **23**, 153, 1981.

- [BGS83] Dž. Belkić, R. Gayet und A. Salin. Computation of total cross-sections for electron capture in high energy collisions. II. *Computer Physics Communications*, **30**, 193, 1983.
- [BGS84] Dž. Belkić, R. Gayet und A. Salin. Computation of total cross-sections for electron capture in high energy collisions. III. *Computer Physics Communications*, **32**, 385, 1984.
- [BK30] H. C. Brinkman und H. A. Kramers. Zur Theorie der Einfangung von Elektronen durch α -Teilchen. *Proc. K. Ned. Akad. Wet.*, **33**, 973, 1930.
- [BK77] E. G. Berezhko und N. M. Kabachnik. Theoretical study of inner-shell alignment of atoms in electron impact ionisation: angular distribution and polarisation of x-rays and Auger electrons. *J. Phys. B*, **10**, 2467, 1977.
- [BKS97] H. F. Beyer, H.-J. Kluge und V. P. Shevelko. *X-Ray Radiation of Highly Charged Ions*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1. Auflage, 1997.
- [Blu81] Karl Blum. *Density Matrix Theory and Applications*. Plenum Press, New York and London, 1. Auflage, 1981.
- [BR97] R. Brun und F. Rademakers. ROOT – An object oriented data analysis framework. *Nucl. Instr. Meth. A*, **389**, 81, 1997.
- [Bri00] Oana Brinzaescu. *X-Ray Emission of High-Z Projectiles in Collisions with Electrons and Atoms*. Dissertation, Universität Heidelberg, 2000.
- [BS57] Hans A. Bethe und Edwin E. Salpeter. *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1. Auflage, 1957.
- [CE79a] F. T. Chan und J. Eichler. Approximation Scheme for Electron Capture into Arbitrary Principal Shells of Energetic Bare Projectiles. *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 58, 1979.
- [CE79b] F. T. Chan und J. Eichler. Electron capture into arbitrary n, l levels of fast projectiles. *Phys. Rev. A*, **20**, 1841, 1979.

- [Che64] I. M. Cheshire. Continuum distorted wave approximation; resonant charge transfer by fast protons in atomic hydrogen. *Proc. Phys. Soc.*, **84**, 89, 1964.
- [Che65] I. M. Cheshire. Theory of Proton-Hydrogen Collisions. *Phys. Rev.*, **138**, A992, 1965.
- [CR74] E. Clementi und C. Roetti. Roothaan-Hartree-Fock Atomic Wavefunctions. *At. Data Nuc. Data Tab.*, **14**, 177, 1974.
- [CW52] G. F. Chew und G. C. Wick. The Impulse Approximation. *Phys. Rev.*, **85**, 636, 1952.
- [DE87] D. P. Dewangan und J. Eichler. Electron capture and the long range of the coulomb interaction. *Nucl. Instr. Meth. B*, **78**, 160, 1987.
- [DE94] D. P. Dewangan und J. Eichler. Charge exchange in energetic ion-atom collisions. *Phys. Rep.*, **247**, 59, 1994.
- [DGJ89] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia und E. P. Plummer. GRASP: a general purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications*, **55**, 425, 1989.
- [EC79] J. Eichler und F. T. Chan. Approach to electron capture into arbitrary principal shells of energetic projectiles. *Phys. Rev. A*, **20**, 104, 1979.
- [Eic81] J. K. M. Eichler. Eikonal theory of charge exchange between arbitrary hydrogenic states of target and projectile. *Phys. Rev. A*, **23**, 498, 1981.
- [Eic85] J. Eichler. Relativistic eikonal theory of electron capture. *Phys. Rev. A*, **32**, 112, 1985.
- [Eic94] J. Eichler. Angular Distribution of de-excitation X-rays from radiative electron capture in relativistic atomic collisions. *Nucl. Phys.*, **A572**, 147, 1994.
- [EIS95] J. Eichler, A. Ichihara und T. Shirai. Photon angular distributions from radiative electron capture in relativistic atomic collisions. *Phys. Rev. A*, **51**, 3027, 1995.

- [EIS98] J. Eichler, A. Ichihara und T. Shirai. Alignment caused by photoionization and in radiative electron capture into excited states of hydrogenic high- Z ions. *Phys. Rev. A*, **58**, 2128, 1998.
- [EM95] Jörg Eichler und Walter E. Meyerhof. *Relativistic atomic collisions*. Academic Press, Inc., 1. Auflage, 1995.
- [EN80] J. Eichler und H. Narumi. On the Classical-Trajectory Eikonal Approximation for Electron Capture into Multicharged Ions. *Zeitschrift für Physik A*, **295**, 209, 1980.
- [EP70] P. Eisenberger und P. M. Platzman. Compton Scattering of X Rays from Bound Electrons. *Phys. Rev. A*, **2**, 415, 1970.
- [Fio04] J. Fiol. private Mitteilung, 2004.
- [Fra87] B. Franzke. The Heavy Ion Storage and Cooler Ring Project at GSI. *Nucl. Instr. Meth.*, **B24/25**, 18, 1987.
- [FSB00] S. Fritzsche, Th. Stöhlker, O. Brinzaescu und B. Fricke. Formation of excited states in high- Z helium-like systems. *Hyperfine Interactions*, **127**, 257, 2000.
- [Gol91] Herbert Goldstein. *Klassische Mechanik*. AULA-Verlag Wiesbaden, 11. Auflage, 1991.
- [Har57] D. R. Hartree. *The Calculation of Atomic Structures*. Wiley, New York, 1957.
- [Hei54] Walter Heitler. *The Quantum Theory of Radiation*. Dover Publications, Inc., 3. Auflage, 1954.
- [Hen23] G. H. Henderson. Changes in the Charge of an α -Particle passing through matter. *Roy. Soc. Proc.*, **106**, 496, 1923.
- [HFK87] R. Hippler, M. Faust, H. Kleinpoppen und H. O. Lutz. Polarization studies of H($2p$) charge-exchange excitation: H⁺-He collisions. *Phys. Rev. A*, **36**, 4644, 1987.
- [ISE93] A. Ichihara, T. Shirai und J. Eichler. Cross Sections for Electron Capture in Relativistic Atomic Collisions. *At. Data Nuc. Data Tab.*, **55**, 63, 1993.
- [ISE94] A. Ichihara, T. Shirai und J. Eichler. Radiative electron capture in relativistic atomic collisions. *Phys. Rev. A*, **49**, 1875, 1994.

- [JAA80] D. H. Jakubaša-Amundsen und P. A. Amundsen. Charge Transfer in Heavy-Ion Collisions at Relativistic Velocities. *Zeitschrift für Physik A*, **298**, 13, 1980.
- [Jel88] Rainer J. Jelitto. *Theoretische Physik 5: Quantenmechanik II*. AULA-Verlag Wiesbaden, 2. Auflage, 1988.
- [JS53] J. D. Jackson und H. Schiff. Electron Capture by Protons Passing through Hydrogen. *Phys. Rev.*, **89**, 359, 1953.
- [JS85] W. R. Johnson und G. Soff. The Lamb Shift in Hydrogen-Like Atoms, $1 \leq Z \leq 110$. *At. Data Nuc. Data Tab.*, **33**, 405, 1985.
- [JW85] R. K. Janev und H. Winter. State-selective electron capture in atom–highly charged ion collisions. *Phys. Rep.*, **117**, 265, 1985.
- [Kab94] N. M. Kabachnik. New trends in the study of alignment and orientation in ion–atom collisions. *Nucl. Instr. Meth. B*, **86**, 20, 1994.
- [KJ75] M. Kleber und D. H. Jakubaša. Radiative Electron Capture in Heavy-Ion Collisions. *Nucl. Phys.*, **A252**, 152, 1975.
- [KK03] O. Klepper und C. Kozhuharov. Particle detectors for beam diagnosis and for experiments with stable and radioactive ions in the storage-cooler ring ESR. *Nucl. Instr. Meth. B*, **204**, 553, 2003.
- [KKP73] P. Kienle, M. Kleber, B. Povh, R. M. Diamond, F. S. Stephens, E. Grosse, M. R. Maier und D. Proetel. Radiative Capture and Bremsstrahlung of Bound Electrons Induced by Heavy Ions. *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 1099, 1973.
- [Kle04] O. Klepper. private Mitteilung, 2004.
- [KLR93] M. K. Kabadiyski, K. P. Lieb und D. Rudolph. Determination of spins and mixing ratios from directional correlations measured with the OSIRIS array. *Nucl. Phys.*, **A563**, 301, 1993.
- [KN29] O. Klein und Y. Nishina. Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac. *Zeitschrift für Physik*, **52**, 853, 1929.

- [Krä01] Andreas Krämer. *Untersuchungen zur Stoßdynamik von schweren, hochgeladenen Ionen am Jettarget des ESR Speicherrings - Die Entwicklung eines H₂-Cluster-Targets-*. Dissertation, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt/Main, 2001.
- [Ley87] Leybold AG. *Grundlagen der Vakuumtechnik, Berechnungen und Tabellen*, 1987.
- [LM87] C. D. Lin und J. H. Macek. Theory of anisotropy transfer and calculations of alignment of np states populated in electron capture by highly charged ions. *Phys. Rev. A*, **35**, 5005, 1987.
- [LR47] W. E. Lamb und R. C. Retherford. Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. *Phys. Rev.*, **72**, 241, 1947.
- [LS50] B. A. Lippmann und L. Schwinger. Variational Principles for Scattering Processes. I. *Phys. Rev.*, **79**, 469, 1950.
- [MAE85] W. E. Meyerhof, R. Anholt, J. Eichler, H. Gould, Ch. Munger, J. Alonso, P. Thieberger und W. E. Wegner. Atomic collisions with relativistic heavy ions. III. Electron capture. *Phys. Rev. A*, **32**, 3281, 1985.
- [MC70] M. R. C. McDowell und J. P. Coleman. *Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions*. North-Holland Publishing Company, 1. Auflage, 1970.
- [MH91] D. J. McLaughlin und Y. Hahn. Scaling behavior of radiative recombination cross sections and rate coefficients. *Phys. Rev. A*, **43**, 1313, 1991.
- [Min98] Minuit, 1998. <http://wwwasdoc.web.cern.ch/wwwasdoc/minuit/minmain.html>.
- [Mit64] M. H. Mittleman. Relativistic effects in charge transfer. *Proc. Phys. Soc.*, **84**, 453, 1964.
- [MM78] R. Marrus und P. J. Mohr. Forbidden transitions in one- and two-electron atoms. *Adv. At. Mol. Phys.*, **14**, 181, 1978.
- [MO87] M. L. McKenzie und R. E. Olson. Ionization and charge exchange in multiply-charged-ion-helium collisions at intermediate energies. *Phys. Rev. A*, **35**, 2863, 1987.

- [Mol47] G. Molière. Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen. I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld. *Z. Naturforsch.*, **2a**, 133, 1947.
- [MS80] B. L. Moiseiwitsch und S. G. Stockman. Electron capture by charged particles at relativistic energies. *J. Phys. B*, **13**, 2975, 1980.
- [NHR00] M. Niering, R. Holzwarth, J. Reichert, P. Pokasov, Th. Udem, M. Weitz, T. W. Hänsch, P. Lemonde, G. Santarelli, M. Abgrall, P. Laurent, C. Salomon und A. Clairon. Measurement of the Hydrogen $1S - 2S$ Transition Frequency by Phase Coherent Comparison with a Microwave Cesium Fountain Clock. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 5496, 2000.
- [Ols81] R. E. Olson. n, l distributions in $A^{q+} + H$ electron-capture collisions. *Phys. Rev. A*, **24**, 1726, 1981.
- [Ols83] R. E. Olson. Ion-atom differential cross sections at intermediate energies. *Phys. Rev. A*, **27**, 1871, 1983.
- [Opp28] J. R. Oppenheimer. On the quantum Theory of the capture of electrons. *Phys. Rev.*, **31**, 349, 1928.
- [OS77] R. E. Olson und A. Salop. Charge-transfer and impact-ionization cross sections for fully and partially stripped positive ions colliding with atomic hydrogen. *Phys. Rev. A*, **16**, 531, 1977.
- [OUSB87] R. E. Olson, J. Ullrich und H. Schmidt-Böcking. Dynamics of multiply charged ion-atom collisions: $U^{32+} + Ne$. *J. Phys. B*, **20**, L809, 1987.
- [PHS93] M. H. Prior, R. A. Holt, D. Schneider, K. L. Randall und R. Hutton. Alignment of magnetic substates in double-electron-capture collisions. *Phys. Rev. A*, **48**, 1964, 1993.
- [PKS89] M. Pajek, A. P. Kobzev, R. Sandrik, R. A. Ilkhamov und S. H. Khusmurodov. Accurate efficiency determination of a Si(Li) detector in the Si-K and Au-M absorption edge energy region. *Nucl. Instr. Meth. B*, **42**, 346, 1989.
- [POB01] J. A. Perez, R. E. Olson und P. Beiersdorfer. Charge transfer and x-ray emission reactions involving highly charged ions and neutral hydrogen. *J. Phys. B*, **34**, 3063, 2001.

- [PP88] T. Papp und J. Pálinkás. Measurement of the $M2 - E1$ mixing in L x-ray transitions. *Phys. Rev. A*, **38**, 2686, 1988.
- [PPS90] T. Papp, J. Pálinkás und L. Sarkadi. Magnetic-quadrupole-electric-dipole mixing in L_3 x-ray transitions of heavy elements. *Phys. Rev. A*, **42**, 5452, 1990.
- [PRT73] R. H. Pratt, A. Ron und H. K. Tseng. Atomic Photoelectric Effect Above 10 keV. *Revs. Modern Phys.*, **45**, 273, 1973.
- [PS95] G. Plunien und G. Soff. Nuclear polarization contribution to the Lamb shift in actinide nuclei. *Phys. Rev. A*, **51**, 1119, 1995.
- [PS99] Günter Plunien und Gerhard Soff. *Atomic Physics with Heavy Ions*, Kapitel: Quantum Electrodynamics of Highly Charged Ions, Seiten 63–91. Hrsg.: H. F. Beyer und V. P. Shevelko, 1999.
- [RBF97] H. Reich, W. Bourgeois, B. Franzke, A. Kritzer und V. Varentsov. The ESR internal target. *Nucl. Phys.*, **A626**, 417c, 1997.
- [RSG96] P. Rymuza, Th. Stöhlker, H. Geissel, C. Kozhuharov, P. H. Mokler, R. Moshhammer, F. Nickel, C. Scheidenberger, Z. Stachura und A. Warczak. State selective capture measured for fast H-like Bi projectiles in collisions with Ni target atoms. *Acta Phys. Pol. B*, **27**, 573, 1996.
- [RY71] G. Raisbeck und F. Yiou. Electron Capture by 40-, 155-, and 600-MeV Protons in Thin Foils of Mylar, Al, Ni, and Ta. *Phys. Rev. A*, **4**, 1858, 1971.
- [Sau32] F. Sauter. Über den atomaren Photoeffekt in der K-Schale nach der relativistischen Wellenmechanik Diracs. *Ann. Phys.*, **11**, 454, 1932.
- [SBB79] E. Spindler, H.-D. Betz und F. Bell. Influence of Retardation on the Angular Distribution of Radiative Electron Capture. *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 832, 1979.
- [SBB94] M. Steck, K. Beckert, F. Bosch, H. Eickhoff, B. Franzke, O. Klepper, R. Moshhammer, F. Nolden, P. Spädtke und T. Winkler. Recent Results on Equilibrium Temperatures and Cooling Forces with Electron Cooled Heavy Ions Beams in the ESR. *Proceedings of the 4th European Particle Accelerator Conference, London*, **2**, 1197, 1994.

- [SBB97a] B. Schlitt, K. Beckert, F. Bosch, H. Eickhoff, B. Franzke, Y. Fujita, H. Geissel, M. Hausmann, H. Irnich, O. Klepper, H.-J. Kluge, C. Kozhuharov, G. Kraus, G. Münzenberg, F. Nickel, F. Nolden, Z. Patyk, T. Radon, H. Reich, C. Scheidenberger, W. Schwab, M. Steck, K. Sümmerer, Th. Winkler, T. Beha, M. Falch, Th. Kerscher, K. E. G. Löbner, H. C. Jung, H. Wollnik und Yu. Novikov. Schottky mass spectrometry at the ESR: a novel tool for precise direct mass measurements of exotic nuclei. *Nucl. Phys.*, **A626**, 315c, 1997.
- [SBB97b] M. Steck, K. Beckert, F. Bosch, H. Eickhoff, B. Franzke, O. Klepper, F. Nolden, H. Reich, B. Schlitt, P. Spädtke und T. Winkler. Cooled heavy ion beams at the ESR. *Nucl. Phys.*, **A626**, 495c, 1997.
- [SBD72] H. W. Schnopper, H. D. Betz, J. P. Delvaille, K. Kalata, A. R. Sohval, K. W. Jones und H. E. Wegner. Evidence for Radiative Electron Capture by Fast, Highly Stripped Heavy Ions. *Phys. Rev. Lett.*, **29**, 898, 1972.
- [SBE96] M. Steck, K. Beckert, H. Eickhoff, B. Franzke, F. Nolden, H. Reich, B. Schlitt, und T. Winkler. Anomalous Temperature Reduction of Electron-Cooled Heavy Ion Beams in the Storage Ring ESR. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3803, 1996.
- [SBG97] Th. Stöhlker, F. Bosch, A. Gallus, C. Kozhuharov, G. Menzel, P. H. Mokler, H. T. Prinz, J. Eichler, A. Ichihara, T. Shirai, R. W. Dunford, T. Ludziejewski, P. Rymuza, Z. Stachura, P. Swiat und A. Warczak. Strong Alignment Observed for the Time-Reversed Photoionization Process Studied in Relativistic Collisions with Bare Ions. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3270, 1997.
- [SBG98] G. Soff, T. Beier, M. Greiner, H. Persson und G. Plunien. Quantum electrodynamics of strong fields: Status and perspectives. *Adv. Quant. Chem.*, **30**, 125, 1998.
- [SFG02] A. Surzhykov, S. Fritzsche, A. Gumberidze und Th. Stöhlker. Lyman- α_1 Decay in Hydrogenlike Ions: Interference between the $E1$ and $M2$ Transition Amplitudes. *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 153001, 2002.

- [SFS02] A. Surzhykov, S. Fritzsche und Th. Stöhlker. Photon-photon angular correlations in the radiative recombination of bare high-Z ions. *J. Phys. B*, **35**, 3713, 2002.
- [SG98] C. Scheidenberger und H. Geissel. Penetration of relativistic heavy ions through matter. *Nucl. Instr. Meth. B*, **135**, 25, 1998.
- [SGF91] Th. Stöhlker, H. Geissel, H. Folger, C. Kozhuharov, P. H. Mokler, G. Münzenberg, D. Schardt, Th. Schwab, M. Steiner, H. Stelzer und K. Sümmerer. Equilibrium charge state distributions for relativistic heavy ions. *Nucl. Instr. Meth. B*, **61**, 408, 1991.
- [Sha79] R. Shakeshaft. Relativistic effects in electron capture from a hydrogenlike atom by a fast-moving bare ion. *Phys. Rev. A*, **20**, 779, 1979.
- [SKF04] A. Surzhykov, P. Koval und S. Fritzsche. Algebraic tools for dealing with the atomic shell model. I. Wavefunctions and integrals for hydrogenlike ions. *Computer Physics Communications*, 2004. im Druck.
- [SKL92] Th. Stöhlker, C. Kozhuharov, A. E. Livingston, P. H. Mokler, Z. Stachura und A. Warczak. Radiative electron capture into the K -, L -, and M -Shell of decelerated hydrogenic Ge projectiles. *Zeitschrift für Physik D*, **23**, 121, 1992.
- [SKM95] Th. Stöhlker, C. Kozhuharov, P. H. Mokler, F. Bosch, H. Geissel, R. Moshhammer, C. Scheidenberger, J. Eichler, A. Ichihara, T. Shirai, Z. Stachura und A. Warczak. Radiative electron capture studied in relativistic heavy-ion-atom collisions. *Phys. Rev. A*, **51**, 2098, 1995.
- [SLB99] Th. Stöhlker, T. Ludziejewski, F. Bosch, R. W. Dunford, C. Kozhuharov, P. H. Mokler, H. F. Beyer, O. Brinzaescu, B. Franzke, J. Eichler, A. Griegal, S. Hagmann, A. Ichihara, A. Krämer, J. Lekki, D. Liesen, F. Nolden, H. Reich, P. Rymuza, Z. Stachura, M. Steck, P. Swiat und A. Warczak. Angular Distribution Studies for the Time-Reversed Photoionization Process in Hydrogenlike Uranium: The Identification of Spin-Flip Transitions. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 3232, 1999.
- [SLR98] Th. Stöhlker, T. Ludziejewski, H. Reich, F. Bosch, R. W. Dunford, J. Eichler, B. Franzke, C. Kozhuharov, G. Menzel, P. H. Mokler,

- F. Nolden, P. Rymuza, Z. Stachura, M. Steck, P. Swiat, A. Warczak und T. Winkler. Charge-exchange cross sections and beam lifetimes for stored and decelerated bare uranium ions. *Phys. Rev. A*, **58**, 2043, 1998.
- [SMK91] Th. Stöhlker, P. H. Mokler, C. Kozhuharov, E. A. Livingston und J. Ullrich. Capture of quasifree electrons into highly charged, heavy projectiles. *Nucl. Instr. Meth. B*, **56**, 86, 1991.
- [SMK97] Th. Stöhlker, P. H. Mokler, C. Kozhuharov und A. Warczak. Photoelectric Effect in the Relativistic Domain Revealed by the Time-Reversed Process for Highly Charged Uranium Ions. *Comm. At. Mol. Phys.*, **33**, 271, 1997.
- [SRB97] Th. Stöhlker, H. Reich, K. Beckert, F. Bosch, A. Gallus, H. Eickhoff, B. Franzke, T. Kandler, O. Klepper, C. Kozhuharov, G. Menzel, P. H. Mokler, F. Nolden, H. T. Prinz, P. Spädtke, M. Steck, T. Winkler, R. W. Dunford, P. Rymuza, T. Ludziejewski, Z. Stachura, P. Swiat und A. Warczak. First experiment with decelerated bare uranium ions conducted at the ESR storage ring. *Hyperfine Interactions*, **108**, 29, 1997.
- [Sto30] M. Stobbe. Zur Quantenmechanik photoelektrischer Prozesse. *Ann. Phys.*, **7**, 661, 1930.
- [Stö98] Thomas Stöhlker. *Atomphysik sehr starker Zentralfelder: Die Röntgenstrahlung der schwersten Ein- und Zwei-Elektronensysteme*. Habilitationsschrift, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt/Main, 1998.
- [Sur03] Andrey Surzykov. *Polarization and Correlation Phenomena in the Radiative Electron Capture by Bare Highly-Charged Ions*. Dissertation, Universität Kassel, 2003.
- [Tho27] L. H. Thomas. On the Capture of Electrons by Swiftly Moving Electrified Particles. *Roy. Soc. Proc. A*, **114**, 561, 1927.
- [TSB02] S. Tachenov, Th. Stöhlker, D. Banaś, H. F. Beyer, F. Bosch, A. Gumberidze, S. Hagmann, C. Kozhuharov, Th. Krings, X. Ma, A. Oršić Muthig, D. Protić, D. Sierpowski, U. Spillmann, Z. Stachura und A. Warczak. Polarization Studies for Radiative Electron Capture into High-Z Ions. *GSI Jahresbericht*, Seite 100, 2002.

- [TSB03] S. Tashenov, Th. Stöhlker, D. Banaś, H. F. Beyer, F. Bosch, A. Gumberidze, S. Hagmann, C. Kozhuharov, Th. Krings, X. Ma, A. Oršić Muthig, D. Protić, D. Sierpowski, U. Spillmann, A. Surzhykov und A. Warczak. Polarization Studies for Radiative Electron Capture into High-Z Ions. *GSI Jahresbericht*, Seite 93, 2003.
- [War03] A. Warczak. Strong field effects on structure and collisions of high-Z ions. *Nucl. Instr. Meth. B*, **205**, 36, 2003.
- [WBB97] T. Winkler, K. Beckert, F. Bosch, H. Eickhoff, B. Franzke, F. Nolden, H. Reich, B. Schlitt und M. Steck. Electron cooling of highly charged ions in the ESR. *Nucl. Phys.*, **A626**, 485c, 1997.