

**Effekte molekularer Symmetrien in der
Elektronenemission
bei langsamen He^{2+} - He - Stößen:
Eine kinematisch vollständige experimentelle
Untersuchung**

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften

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

von
Lothar Schmidt
aus Nidderau

Frankfurt am Main 2000

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

Dekan: Prof. Dr. Werner Mäntele

1. Gutachter: Prof. Dr. Horst Schmidt-Böcking

2. Gutachter: Prof. Dr. Reiner Dreizler

Datum der Disputation: 8. Dezember 2000

Meiner Familie gewidmet

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Elektronenemission aus langsamen He^{2+} -He-Stößen, d.h. bei Stoßenergien unterhalb von 25 keV/u, experimentell untersucht. Dabei wird auf den Vergleich der Einfachionisation ($\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^{2+} + \text{He}^+ + e^-$) mit der Transferionisation ($\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^{2+} + e^-$) besonderes Gewicht gelegt.

Die hier verwendete Meßtechnik ist von verschiedenen Arbeitsgruppen in den letzten Jahren entwickelt worden und unter dem Schlagwort COLTRIMS (**C**old **T**arget **R**ecoil **I**on **M**omentum **S**pectroscopy) [1, 2, 3] in der Literatur zu finden. Bei COLTRIMS werden die bei einer Reaktion in einem kalten Gastarget gebildeten Ionen in einem schwachen elektrischen Feld abgesaugt. Durch den orts aufgelösten Nachweis und die Messung der Flugzeit von der Targetzone bis zum Detektor kann die Anfangsbedingung der Bewegung im Feld, d.h. der Vektor des auf das Targetatom übertragenen Impulses, berechnet werden. Diese Methode kommt ohne Blenden aus, so daß im relevanten Teil des Phasenraumes 4π Raumwinkel erreicht werden. Der Nachweis des Elektrons erfolgt nach demselben Prinzip, jedoch stößt man dabei an die Grenzen der Flugzeitauflösung. Deshalb wurden in allen früheren Experimenten zu ähnlichen Reaktionen [4, 5, 6, 7, 8, 9] nur zwei der drei Impulskomponenten des Elektrons bestimmt. Die Konzipierung eines Spektrometers, welches in der Lage ist, den relevanten Phasenraum lückenlos zu erfassen und dabei alle drei Impulskomponenten der Elektronen zu bestimmen, war der wesentliche Teil der apparativen Entwicklung. Das durchgeführte Experiment ist nicht nur kinematisch vollständig, sondern erlaubt durch Anwendung des Energieerhaltungssatzes auch die Bestimmung der Schale, in der das Elektron im Endzustand gebunden ist. Die beiden oben genannten Reaktionen können somit getrennt nach Ereignissen mit und ohne Anregung untersucht werden, d.h., es wurden gleichzeitig vier verschiedene Ionisationskanäle vermessen.

Für den Ionisationsmechanismus bei Stößen mit einer Projektilgeschwindigkeit unterhalb der klassischen Bahngeschwindigkeit der Elektronen hat sich in den letzten Jahren der Begriff "Sattelpunkt"-Prozeß durchgesetzt [10]. Quantenmechanische Beschreibungen für Einelektronensysteme, wie das Stoßsystem p+H, wurden u.a. mit der semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Methode [11] in einem speziellen Basissatz [12, 13] und der "Hidden-Crossings"-Theorie [14, 15] gegeben. Beide Modelle beschreiben das System aus Projektil und Target als Quasimolekül. Sie sind lediglich in der Lage, die groben Strukturen in den Spektren zu erklären.

Das gewählte Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$, welches zwei Elektronen besitzt, erlaubt die Untersuchung von Korrelationseffekten. Die Messungen haben ergeben, daß die Impulsverteilung des emittierten Elektrons stark davon abhängt, wo und in welchem Bindungszustand das zweite Elektron nachgewiesen wird. Die gleiche Kernladung von Projektil und Target bedingt, daß alle Eigenzustände des gebildeten Quasimoleküls die Symmetrie des Hamiltonoperators gegenüber Raumspiegelung besitzen, und durch diese Spiegeloperation gehen die Endzustände der Transferionisation und der Einfachionisation ineinander über. Durch die gleichzeitige Messung der differentiellen Wirkungsquerschnitte der verschiedenen Reaktionskanäle und deren Vergleich erhält man Einblick in die zugrundeliegenden Prozesse.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	III
1 Einleitung	1
2 Theoretische Grundlagen	11
2.1 Kinematik von inelastischen Ion-Atom-Stoßprozessen	13
2.1.1 Elektroneneinfang	14
2.1.2 Ionisationsprozesse	16
2.2 Energieübertrag auf das Elektron	18
2.2.1 Sattelpunktelektronen	19
2.3 Das "Classical - Trajectory - Monte - Carlo" - Modell	21
2.4 Die semiklassische Gekoppelte - Kanäle - Methode	22
2.5 Das "Hidden-Crossings" - Modell	27
2.6 Semiklassische Rechnungen auf einem Gitter	29
2.7 Die "Time-Dependent-Hartree-Fock" - Methode	30
2.8 Theoretische Arbeiten zum Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$	31
2.9 Der He^{2+} -He-Stoß im quasimolekularen Bild	33
2.9.1 Die Ionisationsprozesse	38
3 Experimenteller Aufbau	41
3.1 Das Meßprinzip	42
3.2 Projektilpräparation	44
3.2.1 Strahlpulsung	44
3.3 Das Target	46
3.4 Detektoren und Nachweiswahrscheinlichkeiten	48
3.5 Das Impulsspektrometer	51
3.5.1 Das Elektronenspektrometer	52

3.5.2	Das Rückstoßionen-Impulsspektrometer	59
3.6	Der Projektildetektor	62
3.7	Signalverarbeitung und Datenaufnahme	62
4	Datenanalyse	67
4.1	Eichung des Rückstoßionen-Impulsspektrometers	67
4.2	Eichung des Elektronenspektrometers	71
4.2.1	Die Elektronenlongitudinalimpulseichung	74
4.2.2	Kontrolle der Elektronenimpulseichung mit Auger-Elektronen	76
4.3	Untergrundereignisse	78
4.3.1	Statistischer Untergrund im Flugzeitspektrum der Rückstoß- ionen	78
4.3.2	Untergrundunterdrückung durch Überprüfung der Energieer- haltung	81
4.3.3	Untergrundunterdrückung beim Ionisationskanal bzw. bei Messungen ohne Projektildetektor	83
4.4	Elektronenimpulse in der nuklearen Streuebene	85
4.5	Differentielle Wirkungsquerschnitte	87
4.6	Experimentelle Auflösung	89
5	Präsentation und Diskussion der Ergebnisse	91
5.1	Totale Wirkungsquerschnitte	92
5.1.1	Quotienten totaler Wirkungsquerschnitte	93
5.1.2	Differenzierung der Reaktionskanäle nach elektronischen Zuständen der gebundenen Elektronen	95
5.2	Der einfach-differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$	97
5.2.1	Elektroneneinfangkanäle	99
5.2.2	Vergleich zwischen SC, DC, SI und TI	102
5.2.3	Ionisationsprozesse	104
5.3	Spekulation über mögliche Reaktionswege der Ionisationsprozesse im MO-Bild	107
5.3.1	Ionisation mit gleichzeitiger Anregung des gebundenen Elektrons	109
5.4	Elektronenimpulsverteilungen der Transferionisation	111
5.4.1	Skalierung der Elektronenimpulse mit der Projektilgeschwin- digkeit	111
5.4.2	Darstellungen der 3-dimensionalen Elektronenimpulsvertei- lung der TI1 bei $v_p = 0.84$ a.u.	113

5.4.3	Abhängigkeit der Elektronenimpulsverteilung der TI1 von der Projektilgeschwindigkeit	118
5.5	Vergleich der Elektronenimpulsverteilungen von TI1 und SI1	120
5.6	Elektronenimpulsverteilungen für verschiedene $p_{r,rec}$	124
5.7	Überlegungen zur Drehimpulserhaltung bei den Ionisationsprozessen .	130
5.8	Einfluß der Isotopenmasse	135
5.9	Elektronenimpulsverteilungen von TI2 und SI2	139
5.10	Elektronenimpulsverteilungen bei anderen Stoßsystemen	144
6	Zusammenfassung der Ergebnisse	149
A	Differentielle Wirkungsquerschnitte	153
B	Atomare Einheiten	163
C	Coulombstreuung	165
D	Symbolverzeichnis	167
E	Zeitfokussierung beim Strahlpulser	169
	Literaturverzeichnis	173

Kapitel 1

Einleitung

Der Mensch bestimmt durch sein Handeln die Zukunft.

Die Quantenmechanik widerspricht dieser Aussage. Auch wenn es prinzipiell unmöglich ist, den Anfangszustand eines Systems genau zu bestimmen, so existiert dieser doch in der theoretischen Beschreibung. Da aus dem aktuellen Zustand eines abgeschlossenen Systems, und auch unsere Welt ist ein solches, der Zustand zu jedem späteren Zeitpunkt hervorgeht, wäre damit die Zukunft bereits vorbestimmt. Auch wenn Ereignisse der Zukunft nicht vorherzusehen sind, d.h., diese nicht berechnet werden können, so würden sie dennoch bereits jetzt festliegen. Dem Menschen bliebe nichts anderes übrig, als sich dem Schicksal zu ergeben. Glaubt man, daß ein solches Weltbild falsch ist, so muß man dies im Prinzip auch für die physikalischen Theorien in bezug auf entsprechende Systeme annehmen.

Dies alleine ist jedoch kein prinzipielles Problem, denn jede Theorie hat einen eingeschränkten Gültigkeitsbereich, und es ist wichtig, diesen zu kennen. Bei der klassischen Mechanik z.B. weiß man, daß sie falsche Ergebnisse liefert, wenn die Geschwindigkeiten von Teilchen in den Bereich der Vakuumlichtgeschwindigkeit kommen oder das Produkt aus Ort und Impuls nicht viel größer als \hbar ist. Bei der Quantenmechanik ist jedoch der Gültigkeitsbereich nicht klar begrenzt. Damit ist nicht gemeint, daß z.B. zur Beschreibung bestimmter Reaktionen die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes nötig ist oder die relativistische Formulierung der Quantenmechanik verwendet werden muß, und somit die Schrödingergleichung nicht anwendbar ist. Das Problem liegt vielmehr darin, daß auch für relativ einfache Coulomb-Systeme, bei denen man davon ausgeht, daß man die Gleichungen, die es beschreiben, kennt, diese nur mit teilweise einschneidenden Näherungen gelöst werden können. Wird ein experimenteller Befund mit einer solchen Rechnung nicht reproduziert, kann man somit nicht entscheiden, ob das untersuchte System nicht in den Gültigkeitsbereich der Quantenmechanik fällt oder ob die Näherungen das Ergebnis verfälscht haben.

Die Unlösbarkeit der quantenmechanischen Gleichungen von verschiedenen Systemen kann auf die zwei folgenden Gründe zurückgeführt werden: zum einen auf die Kopplung von Freiheitsgraden des Systems und zum anderen auf eine explizite und nichtperiodische Zeitabhängigkeit.

Bei Systemen, die gut beschrieben werden, können meist solche Koordinaten de-

finiert werden, bei denen die Bewegungen in den verschiedenen Freiheitsgraden des Systems weitgehend entkoppelt sind, d.h. getrennt berechnet werden können. Bei einem abgeschlossenen System, wie z.B. dem Wasserstoff-Atom mit zwei Teilchen, ist die Schwerpunktbewegung unabhängig von der Relativbewegung. In Kugelkoordinaten können zusätzlich noch Radial- und Winkelanteil der Relativbewegung separiert werden. Damit wird dieses System mit geringfügigen Näherungen analytisch berechenbar.

Auch Systeme mit sehr vielen Teilchen können berechnet werden, wenn sie sich in viele unabhängige Einteilchenprobleme zerlegen lassen. Ein Beispiel dafür sind die elektrischen Eigenschaften von Halbleitern, wo die relevanten Zustände in den Bändern makroskopische Ausdehnung haben, und sich somit zwei Elektronen in verschiedenen Zuständen nicht wesentlich beeinflussen. Bei dem Uran-Atom ist die Situation etwas anders, dort bewegen sich die Elektronen dicht zusammen in einer Art Wolke. Trotzdem ist die Elektron-Kern-Wechselwirkung aufgrund der hohen Kernladung viel stärker als die zwischen zwei bestimmten Elektronen. Der Einfluß aller anderen Elektronen auf ein bestimmtes kann deshalb durch eine Raumladung um den Kern beschrieben werden. Auch der elektronische Zustand im Uran ergibt sich deshalb in guter Näherung aus Einteilchenzuständen, die jedoch in einem durch die Raumladung abgeschirmten Kernpotential berechnet werden müssen.

Bei einem Atom mit wenigen Elektronen und kleiner Kernladung, wie z.B. dem Helium-Atom, ist eine solche Beschreibung dagegen unzureichend. Trotzdem können Eigenschaften dieses Dreiteilchen-Systems sehr genau berechnet werden. So wird beispielsweise die Bindungsenergie des Grundzustandes auf 16 Stellen genau wiedergegeben. Dies ist jedoch nur möglich, weil es sich dabei um ein statisches System handelt, und es wird nicht das Problem gelöst, wie sich ein bestimmter Dreiteilchen-Zustand mit der Zeit entwickelt. Die zur Berechnung der Bindungsenergie verwendeten Variationsverfahren bauen auf der trivialen Tatsache auf, daß es keinen Zustand gibt, der stärker gebunden ist als der Grundzustand. Man muß somit nur ausreichend lange verschiedene Zustände testen: Von diesen ist derjenige der beste, der die größte Bindungsenergie hat.

Damit ist man auf einen weiteren Grund für die praktische Unlösbarkeit von quantenmechanischen Systemen gestoßen, nämlich die Zeitabhängigkeit. Ein weiteres Dreiteilchen-Problem, dessen zu lösende Gleichungen genau die gleiche Struktur haben wie die des Helium-Atoms, ist das System aus zwei Protonen und einem Elektron. Wenn diese Teilchen ein H_2^+ -Molekül bilden, sind die statischen Eigenschaften des Systems noch berechenbar¹. Bei einem p-H-Stoß wird jedoch diesem System durch die Bewegung des Projektils eine Zeitabhängigkeit aufgeprägt, so daß eine dynamische Beschreibung notwendig ist.

Auch Einelektronen-Prozesse in Ion-Atom-Stößen sind theoretisch noch gut zu behandeln, wenn sie so schnell sind, daß keine Zwischenzustände berücksichtigt werden müssen, d.h., die Dynamik auf einen einzigen Schritt reduziert werden kann, und somit Störungsrechnung in erster Ordnung eine gute Näherung darstellt. Wenn

¹ Einen Vergleich der Bindungsenergien gebundener Zustände der Systeme $p+e^-+p$ (H_2^+) und e^-+p+e^- (H^-) findet man in [16].

die Elektronen gebunden bleiben, d.h., der elektronische Zustand sich im Bereich der stationären Zustände bewegt, sind auch für langsame Stöße theoretische Beschreibungen erfolgreich. Es gibt jedoch auch in langsamen Stößen, bei denen die Geschwindigkeit der Kerne in der Größenordnung der klassischen Elektronengeschwindigkeit im Wasserstoff liegt, eine kleine Wahrscheinlichkeit für die Emission von Elektronen in das Kontinuum. Die differentiellen Wirkungsquerschnitte solcher Prozesse konnten bis jetzt nur sehr grob berechnet werden.

Es stellt sich die Frage, welche Voraussetzungen erfüllt sein müssen, um ein Coulomb-System quantenmechanisch erfolgreich beschreiben zu können: Wie viele gekoppelte Freiheitsgrade darf ein System besitzen? In wie vielen dieser Freiheitsgrade darf eine explizite Zeitabhängigkeit vorliegen? Wie viele Freiheitsgrade dürfen an der Entwicklung eines Systems beteiligt sein, die nicht als "Springen" zwischen stationären Zuständen verstanden werden kann, sondern durch das Kontinuum verläuft?

Die Grenze, die bei der Lösung der Gleichungen durch die mathematischen Probleme gesetzt ist, wird sich in den kommenden Jahren immer weiter verschieben, nicht zuletzt durch die schnell steigende Leistungsfähigkeit der Computer. Ich bin jedoch davon überzeugt, daß es eine weitere Grenze gibt, ab der die quantenmechanische Beschreibung prinzipiell nicht mehr gültig ist, denn die Welt verhält sich nicht deterministisch. Wo könnte diese zweite Grenze liegen, und was kommt dahinter? Ist das Wunder des Lebens mit physikalischen Methoden überhaupt zu verstehen?

Die Grenze könnte schon bei einem Zweiteilchen-Problem mit expliziter Zeitabhängigkeit, bei dem sich ein Teil der Freiheitsgrade im Bereich des Kontinuums entwickelt, überschritten sein. Um diese Vermutung zu bestätigen oder zu verwerfen, muß man zwei Dinge tun: Erstens muß man die Natur so genau wie möglich beobachten, und zweitens muß man versuchen, die quantenmechanischen Gleichungen eines solchen Systems so genau wie möglich zu lösen. Jeder Punkt für sich ist eine Aufgabe, die nur noch von wenigen darauf spezialisierten Gruppen behandelt werden kann.

Wenn man die Gültigkeit oder zumindest die Anwendbarkeit der heutigen Formulierung der Quantenmechanik für bestimmte Systeme in Frage stellt, so soll dies nicht die bis jetzt erzielten Erfolge schmälern. Daß die quantenmechanischen Gleichungen überhaupt eine Beschreibung von Dynamik zulassen, ist insofern erstaunlich, als die experimentellen Befunde, die bei der Entwicklung der Quantenmechanik im Vordergrund standen, keine dynamische Beschreibung erforderten. Wesentliches Ziel war u.a. die Erklärung von Eigenschaften der Atome, wie z.B. die beobachteten Spektrallinien. Der Übergang zwischen zwei Bindungszuständen kann natürlich nicht statisch beschrieben werden, doch ist die beobachtete Eigenschaft, nämlich die Farbe des emittierten Lichtes bzw. die Bindungsenergie der stationären Zustände, unabhängig von der Dynamik des Übergangs zwischen zwei Zuständen. Ein anderer wichtiger Schritt bei der Entwicklung der Quantenmechanik war die Formulierung des Planckschen Strahlungsgesetzes, das die spektrale Energiedichte der Hohlraumstrahlung angibt. Bei der Ableitung dieses Gesetzes werden Schwingungsmoden, d.h. stationäre Lösungen der Maxwellgleichungen, betrachtet, die nur quantisierte Energie aufnehmen können. Die Energieübertragung zwischen der thermischen Bewegung

der Wände des Hohlraumes und dem elektromagnetischen Feld, also der zugrunde liegende dynamische Vorgang, spielt bei der Ableitung dieses Gesetzes jedoch keine Rolle.

Zur Berechnung dynamischer Systeme ist es zumindest notwendig, den Anfangszustand, der normalerweise stationär ist, richtig zu beschreiben. Nun ist dabei nicht nur wichtig, daß die Bindungsenergie oder andere statische Größen richtig wiedergegeben werden, sondern es müssen auch andere Eigenschaften des Zustandes stimmen. Beim Grundzustand von Helium kann es für einen Prozeß z.B. wichtig sein, wie die Verteilung der Impulsdifferenz zwischen den Elektronen ist oder unter welchem Winkel, vom Kern aus gemessen, sich die Elektronen am wahrscheinlichsten aufhalten. Abweichungen solcher Verteilungen von dem, was man im Einteilchenbild mit einem angepaßten Modellpotential berechnet, werden als Korrelation bezeichnet. Teilweise werden solche Eigenschaften eines stationären Zustandes auch als "dynamische Eigenschaften" bezeichnet, und es ist nicht klar, ob eine Näherungslösung, die z.B. die Bindungsenergie eines stationären Zustandes genau berechnet, auch diese Eigenschaften gut beschreibt.

Um die "dynamischen Eigenschaften" eines stationären Zustandes zu messen, verwendet man am besten einen Prozeß, der einfach zu berechnen ist, also so schnell verläuft, daß er in Störungstheorie niedriger Ordnung zu behandeln ist. Entsprechende Streuexperimente wurden mit Photonen, schnellen Elektronen und Ionen als Projektile sowie verschiedenen atomaren Targets, meist Helium, durchgeführt. Ein möglicher Prozeß, der bei einem schnellen Ion-Atom-Stoß zur Elektronenemission aus dem Target führt, ist der "Binary-Encounter"-Mechanismus. Die Wechselwirkung wird dabei wie beim Billardstoß als ein punktuelles Ereignis aufgefaßt, d.h., man berücksichtigt keine Ionisation über Zwischenzustände, und auch die Bindung des Elektrons an das Target während des Stoßprozesses wird vernachlässigt.

Der "Shake off"-Prozeß tritt auf, wenn ein Elektron schnell aus dem Target entfernt wurde. Der Zustand des oder der im Target verbleibenden Elektronen ist nicht mehr Eigenzustand des neuen Systems und enthält auch Anteile aus dem Kontinuum. Für diese Anteile, die vor dem Stoß noch gebunden waren, sind die inneren Freiheitsgrade in äußere übergegangen und damit meßbar.

Die Dynamik langsamer Ion-Atom-Stöße

In der Natur werden schnelle Teilchen nur durch Zerfälle von radioaktiven Isotopen erzeugt oder treffen als kosmische Strahlung auf die Erde. Deshalb spielen schnelle Stöße in unserem Alltag lediglich eine untergeordnete Rolle. Die Geschwindigkeiten chemischer und biologischer Prozesse sind dagegen durch die thermische Bewegung der Atomkerne bestimmt. Die mittlere thermische Geschwindigkeit eines Wasserstoff-Atoms bei Zimmertemperatur beträgt etwa 2000 m/s. Um eine Strecke zurückzulegen, die seinem Durchmesser entspricht, benötigt es somit ca. 50 ps. Das ist etwa 600 mal länger als die klassische Umlaufzeit der Elektronen um den Kern.

Treffen zwei Wasserstoff-Atome aufeinander und bilden ein H₂-Molekül, ist somit nicht nur die Dynamik der Elektronen in den stationären Zuständen vor und

nach dem Stoß entscheidend, sondern die während des gesamten Prozesses. Die Frage ist nun, wie man die Entwicklung eines Systems während einer solchen Reaktion beobachten kann. Dazu benötigt man einen zweiten Prozeß, der die inneren Freiheitsgrade "abfragt", indem er sie auf meßbare Eigenschaften abbildet. Dies wird durch eine Fragmentation erreicht, wenn die Emissionscharakteristik der Fragmente von dem davor vorhandenen Zustand abhängt. Aber wie soll man einen solchen Prozeß im richtigen Moment auslösen? Am günstigsten wäre es natürlich, wenn das System im richtigen Moment von selbst fragmentieren würde. Die Frage ist also, ob es geeignete chemische Prozesse gibt, bei denen die chemische Verbindung sofort fragmentiert.

Im Prinzip kann jeder Ion-Atom-Stoß bei Kerngeschwindigkeiten unterhalb der klassischen Elektronengeschwindigkeit als ein solcher chemischer Prozeß aufgefaßt werden. Projektil und Target bilden, während sie langsam aneinander vorbeifliegen, ein Molekül. Wenn die Energie, mit der die Kerne aufeinandertreffen, so hoch ist, daß sie nicht von inneren Freiheitsgraden aufgenommen werden kann, wird das Molekül sofort wieder zerfallen. Neben der elastischen Streuung sind bei solchen Stößen hauptsächlich die Prozesse von Bedeutung, bei denen ein oder mehrere Elektronen zum anderen Kern transferiert werden.

Für das System aus einem He-Atom und einem He^{2+} -Ion, das Gegenstand dieser Arbeit sein wird, wurde die elastische Streuung bei Kerngeschwindigkeiten, die ca. 30 mal höher als die mittlere thermische Geschwindigkeit waren, von Lam et al [17] vermessen. Auch die Elektronentransferkanäle bei diesem [18] und anderen Stoßsystemen sind seit vielen Jahren Gegenstand zahlreicher Arbeiten. Bei diesen Reaktionen mit zwei freien Teilchen im Endzustand werden drei innere Freiheitsgrade des Moleküls, welches für kurze Zeit gebildet wird, auf kinematische Größen abgebildet: Dies sind die drei Vektorkomponenten, welche die Relativbewegung der Fragmente beschreiben. Die Schwerpunktbewegung dagegen kann durch den Stoßprozeß nicht beeinflußt werden.

Diese Relativbewegung ist zum Teil durch die Energieerhaltung bestimmt. Außerdem ist vor dem Stoß nur eine Raumrichtung, nämlich die, in der sich die Kerne aufeinander zu bewegen, ausgezeichnet. Deshalb muß das Meßergebnis für eine solche Reaktion rotationssymmetrisch um diese Achse sein. Eine genaue Analyse (Abschnitt 2.1) ergibt, daß man dieses durch eine eindimensionale Verteilung darstellen kann. Aus einer solchen kann man natürlich nur bedingt Informationen über die Dynamik des Stoßes gewinnen. Eine theoretische Beschreibung muß jedoch die Bewegung der Teilchen, im Beispiel des He^{2+} -He-Stoßes sind dies zwei Elektronen und zwei Kerne mit insgesamt neun inneren und drei äußeren Freiheitsgraden, während des gesamten Stoßes richtig wiedergeben. Ob sie dieses tatsächlich tut, ist nicht mit Sicherheit zu entscheiden, wenn nur eine eindimensionale Verteilung mit dem Experiment verglichen werden kann. Da jedoch für viele solcher Prozesse gute Übereinstimmung zwischen theoretischen und experimentellen Ergebnissen erzielt wurde, ist hier sicherlich die Grenze, von der oben gesprochen wurde, noch nicht überschritten.

Die Möglichkeit für einen strengeren Test der theoretischen Beschreibung erhält man, wenn das System in mehr als zwei Bruchstücke zerfällt, d.h., noch mehr innere

Freiheitsgrade auf äußere und somit meßbare abgebildet werden. Bei einem Ion-Atom-Stoß heißt das, daß ein Elektron in das Kontinuum emittiert werden muß. Dadurch, daß im Endzustand nun drei zusätzliche Freiheitsgrade, nämlich die des emittierten Elektrons, nicht stationär sind, hat man sich in Richtung der Grenze bewegt, wo die Quantenmechanik keine vollständige Beschreibung mehr liefert.

Elektronenemission in Ion-Atom-Stößen mit kleiner Geschwindigkeit der Kerne

Elektronenemission ist erst bei höheren Relativgeschwindigkeiten der Kerne möglich. Verschiedene Ionisationsprozesse bei sehr schnellen Stößen wurden bereits angesprochen. Gerade diese sind jedoch nicht dafür geeignet, die Dynamik während des Stoßes zu untersuchen. Die Frage ist also, ob überhaupt ein Elektron emittiert werden kann, wenn sich die Kerne langsamer bewegen als die Elektronen, man also Verhältnisse wie in der Chemie hat. Im Prinzip ist dies möglich, denn durch die große Masse der Kerne können diese auch bei Geschwindigkeiten weit unterhalb der klassischen Elektronengeschwindigkeit noch die zur Überwindung der Bindung nötige Energie tragen.

Erste Hinweise auf einen Mechanismus, der in der Lage ist, diese Energie auf die Elektronen zu übertragen, wurden in Simulationen klassischer Trajektorien für das Elektron und die Kerne im p-H-Stoß von Olson [19] gefunden. Für diesen hat sich der Begriff Sattelpunkt-Mechanismus durchgesetzt. Dabei gelangen die Elektronen bei der Annäherung der Kerne in den Bereich, in dem sich die Coulombkräfte der beiden Kerne annähernd aufheben. Bei einem p-H-Stoß ist der Sattelpunkt im Potential der Kerne gleich dem Schwerpunkt. Entfernen sich die Kerne vom Schwerpunkt bzw. Sattelpunkt, so können dort Elektronen "stranden" und werden dann zwangsläufig in das Kontinuum befördert, wenn sich die Kerne ausreichend weit voneinander entfernt haben. In einem Streuexperiment ist ein solcher Prozeß durch die Elektronenemission mit der Geschwindigkeit des Sattelpunktes in Strahlrichtung charakterisiert.

Meßmethoden

Um aus Fragmentationsprozessen etwas lernen zu können, muß man die äußeren Freiheitsgrade des Systems nach dem Stoß bestimmen. Bis vor wenigen Jahren wurden dazu im wesentlichen Projektilstreuwinkel vermessen und die emittierten Elektronen mit klassischer dispersiver Elektronenspektroskopie nachgewiesen. Dabei wird der Emissionswinkel der Elektronen durch Blenden beschnitten und danach die Elektronen durch elektrische oder magnetische Felder nach unterschiedlichen Energien bzw. Geschwindigkeiten getrennt. Mit einem solchen Meßprinzip den Phasenraum lückenlos abzutasten, ist schwierig. Will man mehrere Teilchen nach einem solchen Verfahren gleichzeitig nachweisen, multipliziert sich der geringe Nachweisraumwinkel solcher Spektrometer, so daß extrem lange Meßzeiten notwendig werden, um eine aussagekräftige Statistik zu erhalten.

Dieses Problem wurde durch die Entwicklung der Rückstoßionen-Impulsspektroskopie (COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy: COLTRIMS [1, 2, 3])

weitgehend behoben. Ursprünglich wurden mit dieser Meßmethode nur die ionisierten Atome aus einem Gastarget nachgewiesen und deren Impuls, der als Rückstoß der anderen Fragmente aufgefaßt werden kann, bestimmt. Heute umfaßt COLTRIMS auch den Elektronennachweis.

Die geladenen Fragmente werden mit einem solch schwachen elektrischen Feld aus dem Target auf Detektoren abgesaugt, daß die Flugbahn wesentlich von der Emissionsrichtung und -geschwindigkeit bestimmt ist. Das Feld ist so gewählt, daß durch die Bestimmung der Flugzeit und des Nachweisortes für jedes einzelne Fragment alle drei Komponenten des Impulsvektors, mit dem dieses aus der Targetzone gestartet ist, berechnet werden können. Bis zu einer bestimmten Energie der Fragmente, die von dem Design des jeweiligen Spektrometers abhängt, erhält man dabei einen Raumwinkel von 4π .

Bei den frühen Messungen zur Elektronenemission in langsamen Ion-Atom-Stößen wurde noch die klassische dispersive Elektronenspektroskopie verwendet. In den Arbeiten von Olson et al [10] und Irby et al [20] wurden Geschwindigkeitsverteilungen von unter kleinem Winkel zur Strahlachse emittierten Elektronen als Indiz für den Sattelpunktmechanismus gewertet. In diesen Arbeiten wurden H^+ -He- und He^{2+} -He-Stöße bei Projektilgeschwindigkeiten oberhalb der klassischen Elektronengeschwindigkeit untersucht.

In der Veröffentlichung von Bernardi et al [21] wurden dagegen in Messungen mit den gleichen Stoßsystemen bei ähnlichen Projektilgeschwindigkeiten und Winkeln keine Hinweise auf Sattelpunktelektronen gefunden. Von Gay et al [22] konnten diese Meßergebnisse jedoch nicht reproduziert werden [23]. Aufgrund dieser widersprüchlichen Ergebnisse wurde die Diskussion um den Sattelpunktmechanismus entfacht.

Es folgten weitere Messungen von Meckbach et al [24] und DuBois [25] mit diesen Stoßsystemen, von Reinhold et al [26] und Irby et al [27] mit schwereren und höher geladenen Projektilen und von Pieksma et al [28] für das Stoßsystem $p + H$. COLTRIMS wurde ab 1996 zur Untersuchung der Ionisation in langsamen Stößen eingesetzt [4, 5, 6, 7, 8, 9].

Semiklassische Beschreibung eines langsamen Stoßes

Das Bild der Sattelpunktionisation ist ein klassisches, und man muß sich fragen, ob die klassische Beschreibung gerechtfertigt ist. Dieser Frage wird hier nun zuerst für die Kerne nachgegangen. Bei einer klassischen Kerntrajektorie ist jedem Stoßparameter b , der bei den relevanten Streuwinkeln gleich dem kleinsten Kernabstand im Stoß ist, ein fester Ablenkwinkel zugeordnet. Dieser Ablenkwinkel kann in einen Transversalimpuls p_{\perp} , der im Stoß auf den Kern übertragen wird, umgerechnet werden. Für die Coulombstreuung zweier nackter Kerne ist das Produkt $b \cdot p_{\perp}$ bei kleinen Winkeln eine Konstante, die nur von der Stoßgeschwindigkeit und den Kernladungen abhängig ist (siehe Anhang C).

Die Länge b und der Impuls p_{\perp} zeigen beide in die gleiche Richtung. Die Unschärferelation fordert, daß im Gegensatz zur klassischen Beschreibung diese bei-

den Größen gleichzeitig nicht genau bestimmt werden können. Für die Halbwertsbreiten Δb und Δp_{\perp} eines Zustandes muß $\Delta b \cdot \Delta p_{\perp} \geq 2\hbar$ gelten. Eine klassische Beschreibung kann also nur dann Sinn machen, wenn der durch die Unschärfere-lation bedingte Fehler kleiner ist als der klassisch beschriebene Effekt, d.h., wenn $b \cdot p_{\perp} > \Delta b \cdot \Delta p_{\perp}$ gilt. Bei den untersuchten Stößen ist der linke Term mindestens doppelt so groß wie der rechte und die klassische Beschreibung deshalb gerade noch zulässig.

Eine ähnliche Überlegung für die Elektronen ergibt, daß diese quantenmechanisch behandelt werden sollten. Entscheidend ist dabei, daß die auftretenden Impulse wegen der geringeren Masse der Elektronen wesentlich kleiner sind, während die Breiten der Ortsverteilungen in der Größe des Stoßparameters liegen. Die Beschreibung eines Systems, bei der die Kerne klassisch und die Elektronen quantenmechanisch behandelt werden, nennt man semiklassisch [29].

Die Positionen der Kerne bestimmen das Potential, in dem die Bewegung der beiden Elektronen quantenmechanisch beschrieben werden muß. Im Gegensatz zu einem stabilen Molekül, wo die Kerne durch die bindende Eigenschaft der Elektronenhülle in einem bestimmten Abstand gehalten werden, wird die Kernbewegung im Experiment vorgegeben, und die Wechselwirkung der Teilchen ändert die Impulse der Kerne nur um ca. 0.1%. Während die Kernimpulse somit bekannt sind, kann der Stoßparameter, d.h. der Abstand, in dem die Kerne aneinander vorbeifliegen, nicht vorgegeben werden. Dieser kann jedoch aus dem Impulsaustausch zwischen den Kernen für jedes Ereignis aus den gemessenen Verteilungen bestimmt werden. Somit ist die Kernbewegung vollständig kontrollierbar.

Wahl des Stoßsystems und Beschreibung des untersuchten quantenmechanischen Problems

Die klassische Kernbewegung, die als bekannt bzw. aus den Impulsüberträgen berechenbar angenommen werden kann, gibt ein zeitabhängiges Potential vor, in dem sich der elektronische Zustand entwickelt. Bei dieser semiklassischen Betrachtung ist der p-H-Stoß ein nicht abgeschlossenes Einteilchenproblem - das eine Teilchen ist das Elektron - mit äußeren, zeitabhängigen Feldern.

Korrelationseffekte können bei der semiklassischen Beschreibung erst in einem Zwei-Elektronen-System auftreten. Auch bei chemischen Verbindungen sind besonders Elektronenpaarbindungen von Interesse. Von experimenteller Seite ist die Verwendung von Helium als Target günstig, es sollte dann aber, um überhaupt noch eine Chance auf eine befriedigende theoretische Beschreibung zu haben, kein weiteres Elektron mit dem Projektil in das Stoßsystem eingebracht werden. Von den verschiedenen nackten Kernen die von dem Beschleuniger, an dem das Experiment durchgeführt wurde², zur Verfügung gestellt werden können, wurde He^{2+} ausgewählt, da nur so der elektronische Hamiltonoperator des Systems spiegelsymmetrisch zum

²Das Experiment wurde an der EZR-Ionenquelle im Institut für Kernphysik in Frankfurt/M [30] durchgeführt, die aufgrund ihrer guten Hochspannungsfestigkeit von bis zu 50 kV direkt die gewünschten Projektilenergien liefern kann. Ionenquellen dieses Typs sind in der Lage, auch Sauerstoff noch vollständig zu ionisieren.

Sattelpunkt ist. Diese Symmetrie wird später bei der Diskussion der gemessenen differentiellen Wirkungsquerschnitte oft verwendet.

Mit dieser Wahl des Stoßsystems lautet die Frage, der hier experimentell nachgegangen wurde: Wie sieht die korrelierte Bewegung zweier Elektronen in einem zeitabhängigen Zwei-Zentren-Potential aus, wenn sich das elektronische System in den Bereich des Kontinuums entwickelt?

Dieses System hat die Grenze des zur Zeit mathematisch Bewältigbaren überschritten. Ob damit auch schon die besagte zweite Grenze überschritten wurde, kann also im Moment nicht entschieden werden. Es ist jedoch damit zu rechnen, daß theoretische Ergebnisse in wenigen Jahren vorliegen werden.

Einige Gedanken zum wesentlichen Unterschied zwischen dem Verhalten von klassischen und quantenmechanischen Systemen

Nach der Formulierung des quantenmechanischen Problems und der Feststellung, daß die Elektronenbewegung nicht klassisch genähert werden kann, stellt sich die Frage, ob das rein klassische Sattelpunktbild trotzdem seine Berechtigung hat und mit Recht in sehr vielen experimentellen und theoretischen Arbeiten aufgegriffen wurde. Die wesentlichen quantenmechanischen Phänomene, die klassisch nicht darzustellen sind, sind die Quantisierung, das Tunneln und Interferenzen. Tunneleffekte spielen hier keine Rolle. Die Quantisierung tritt in der Quantenmechanik z.B. bei der Bindungsenergie und dem Drehimpuls von stationären Zuständen auf. Ein dynamisches System befindet sich in der Regel jedoch nicht in einem bestimmten stationären Zustand, sondern in einer Linearkombination aus solchen Zuständen und kann damit jede beliebige Linearkombination der quantisierten Bindungsenergien bzw. Drehimpulse besitzen. Erst nach der Reaktion, wenn man die Bindungsenergie mißt, "zwingt man das System wieder in die Quantisierung".

Dynamisch hat ein quantenmechanisches System demnach die "Freiheit", sich ohne die Zwänge der Quantisierung so wie ein klassisches zu entwickeln, und deshalb ist das klassische Sattelpunktbild anwendbar. Diese Aussage muß nun jedoch relativiert werden. Während der Reaktion kann die Bindungsenergie zwar jeden beliebigen Wert oberhalb der Grundzustandsenergie annehmen, jedoch nie einen darunter, d.h., obwohl dynamisch die Quantisierung aufgehoben wird, bleibt diese untere Grenze erhalten. Klassisch gibt es jedoch keinen Grundzustand, und tatsächlich führt dies zu einem der wesentlichen Probleme bei der klassischen Beschreibung der Dynamik von Systemen mit mehreren Elektronen, wie z.B. im CTMC-Modell (Abschnitt 2.3).

Des weiteren werden bei vielen Prozessen zu jeder Zeit, oder zumindest in gewissen Zeitabschnitten, Symmetriebedingungen erfüllt. Im untersuchten System sind dies z.B. die Punktspiegelung am Sattelpunkt bzw. Schwerpunkt und die Rotationssymmetrie um die Molekülachse. Während die Kerne aneinander vorbeifliegen, dreht sich die Molekülachse. Diese Drehung ist jedoch nur in einem sehr kurzen Zeitraum so schnell, daß dadurch die Rotationssymmetrie wesentlich gebrochen wird.

Durch Ausnutzung dieser Symmetrien kann man einen Teil der inneren Freiheitsgrade des Systems separieren und diesen Teil als stationär, d.h. zeitunabhängig

betrachten. Für diese stationären Freiheitsgrade ist die Quantisierung durch die Dynamik nicht aufgehoben. Die damit verbundenen Zwänge für die Entwicklung eines Systems werden klassisch nicht richtig wiedergegeben. Diese Zwänge sind es, die es erlauben, in den Prozeß hineinzuschauen, da sie Eigenschaften, die bei kleinen Kernabständen präpariert werden, so konservieren, daß sie im Endzustand sichtbar sind. Aus diesem Grund ist das Sattelpunktbild auch nicht in der Lage, Strukturen im Wirkungsquerschnitt zu erklären, die mit quantenmechanischen bzw. semiklassischen Argumenten sofort zu verstehen sind.

Inhalt dieser Arbeit

In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen eingeführt, die zum Verständnis der gemessenen Daten notwendig sind. Dabei wurde der Schwerpunkt auf die semiklassische Beschreibung des Systems mit der "Gekoppelte-Kanäle"- und "Hidden-Crossings"-Methode gelegt. Die Apparatur und die Meßmethode werden in den Kapiteln 3 und 4 beschrieben, wobei sich das erste mehr mit dem Design der Komponenten beschäftigt und das zweite die Vorgehensweise bei der Aufbereitung der gewonnenen Daten an Beispielen schildert. Die Meßergebnisse werden in Kapitel 5 präsentiert. Dabei wird besonderes Gewicht auf den Vergleich verschiedener Reaktionskanäle und Projektilgeschwindigkeiten gelegt. Außer in den Erläuterungen zu den einzelnen Spektren ist in den Abschnitten 5.3 und 5.7 dargelegt, wie die Strukturen in den differentiellen Wirkungsquerschnitten zum Teil dadurch erklärt werden können, daß man die Reaktionen als Bewegung des Zustandes im Raum molekularer Zustände interpretiert. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden in Kapitel 6 zusammengefaßt.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

Das in dieser Arbeit untersuchte Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$ besteht aus vier Teilchen. Somit ist eine quantenmechanische Berechnung nur mit Näherungsverfahren möglich.

Wie in der Einleitung erläutert wurde, sind die Voraussetzungen für eine klassische Betrachtung der Kernbewegung erfüllt. Die durch die Reaktionen bedingten Änderungen der Kerngeschwindigkeiten sind zudem wesentlich kleiner als die klassischen Geschwindigkeiten der Elektronen in den am niedrigsten gebundenen Zuständen. Für die Berechnung des Zustandes der Elektronen ist es hier ausreichend, die Kernbewegungen durch geradlinige, gleichförmige Bewegungen zu beschreiben. Mit diesen Näherungen wird die theoretische Beschreibung des He^{2+} -He-Stoßes auf die Berechnung des Zustandes zweier Elektronen in einem Coulombfeld mit durch die Kernbewegung vorgegebener Zeitabhängigkeit reduziert.

Auch wenn die Änderung der Kernbewegung während der Reaktion nicht berücksichtigt werden muß, ist doch der Austausch von Energie und Impuls zwischen den Kernen und den zwei Elektronen für jede Reaktion zwingend notwendig. Das gesamte System ist jedoch abgeschlossen, und deshalb zwingen die Erhaltungssätze den Endzustand auf einen niederdimensionalen Teil des Phasenraumes, in dem die Beschreibung der Bewegung einer entsprechenden Anzahl von Teilchen erfolgt. Zur Interpretation der Meßdaten und zum Verständnis der Prozesse ist es notwendig, diesen Unterraum zu kennen und durch eine geeignete Parametrisierung zu beschreiben. Die entsprechenden Grundlagen dafür werden im ersten Abschnitt dieses Kapitels diskutiert.

Wesentlicher Inhalt dieser Arbeit ist die Emission eines Target-Elektrons in das Kontinuum. Das einfache Bild des "Herauskickens" eines Elektrons aus dem Helium-Atom durch einen Stoß mit dem Projektil ist bei den kleinen Projektilgeschwindigkeiten, die in dieser Arbeit untersucht werden, nicht gültig. In Abschnitt 2.2 wird zunächst auf der Grundlage der klassischen Mechanik beschrieben, wie solche Emissionsprozesse stattfinden können.

Danach wird erläutert, mit welchen Methoden die quantenmechanische Beschreibung von langsamen Ion-Atom-Stößen möglich ist. In den meisten der vorgestellten Modelle werden die Elektronen dabei durch eine Linearkombination aus Zuständen

in Molekülen beschrieben, wobei der Kernabstand im Molekül und die Richtung der Molekülachse den sich ständig ändernden Positionen der Kerne angepaßt werden. Die Entwicklung des Systems während des Stoßes wird dabei als Bewegung in dem Raum, der durch alle molekularen Zustände aufgespannt wird, aufgefaßt.

Charakterisiert man die molekularen Zustände durch ihre Bindungsenergie, so kann man sich diese Entwicklung durch ein Diagramm, wie es in Abbildung 2.1 zu finden ist, veranschaulichen. Nach rechts ist dort die Zeit aufgetragen, der jeweils ein bestimmter Kernabstand zugeordnet ist. Diese Veranschaulichung der Reaktionen wird bei der Interpretation der Meßergebnisse in Kapitel 5 verwendet.

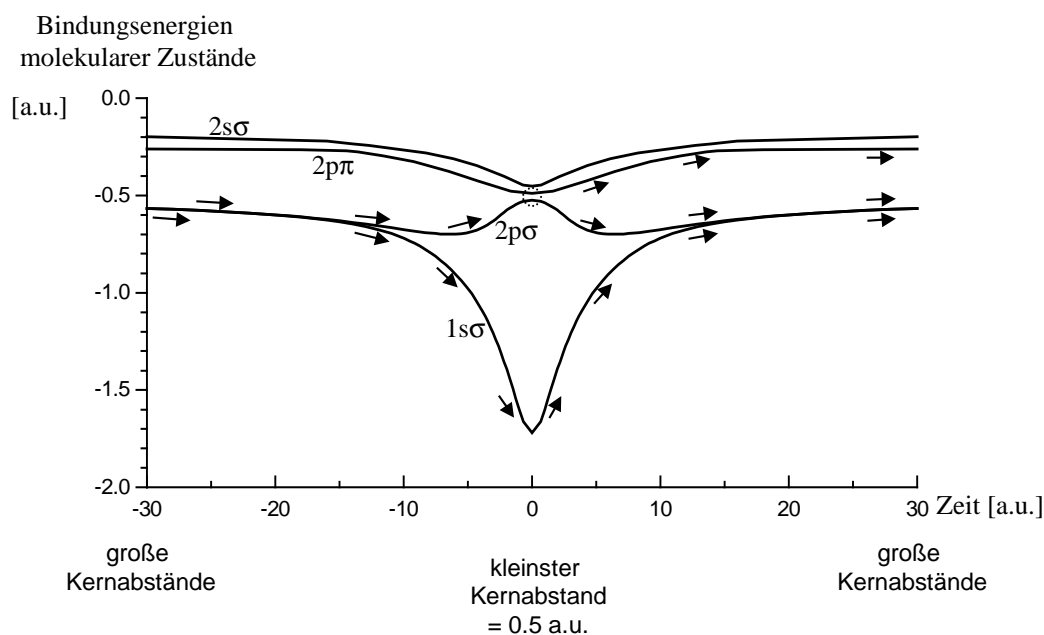


Abbildung 2.1: Mögliche Wege für die Entwicklung des Stoßsystems $p+H$ bei einem Stoß mit 0.5 a.u. als kleinstem Kernabstand und der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.5$ a.u. Die Linien geben die zeitliche Entwicklung der Bindungsenergien verschiedener molekularer Zustände an. Die Wahrscheinlichkeiten für die durch die Pfeile gekennzeichneten Reaktionswege werden durch die sogenannten Kopplungen beschrieben, auf die in Abschnitt 2.4 näher eingegangen wird. Die Rotationskopplung, die aus dem $2p\sigma$ -Zustand den $2p\pi$ -Zustand besetzt, ist hier durch einen Kreis symbolisiert (die Bezeichnung der Zustände wird in Abschnitt 2.4, Abbildung 2.2, erklärt). Vor dem Stoß wird das System durch eine Linearkombination der Zustände $1s\sigma$ und $2p\sigma$ beschrieben. Die dargestellten Kurven sind spiegelsymmetrisch zum Zeitpunkt Null, bei dem die Kerne den kleinsten Abstand besitzen. Deshalb würde die Darstellung der rechten Hälfte genügen. Mit einem Diagramm, bei dem auf der Abszisse anstelle der Zeit der Kernabstand von Null bis Unendlich aufgetragen ist, kann die Entwicklung von allen Kerntrajektorien dargestellt werden. Das System kehrt dann, von unendlich kommend, beim kleinsten Kernabstand um. Solche Darstellungen werden in diesem Kapitel und bei der Diskussion der Meßergebnisse verwendet.

2.1 Kinematik von inelastischen Ion-Atom-Stoßprozessen

Quantenmechanisch kann ein System aus m Teilchen z.B. durch eine komplexwertige Funktion auf dem $3m$ -dimensionalen Impulsraum (oder Ortsraum) kinematisch vollständig beschrieben werden. In einem solchen Raum ist das Quadrat der Funktion als Wahrscheinlichkeitsdichte meßbar. Bei einer Reaktion mit festgelegtem Anfangszustand ergibt sich aus Energie- und Impulserhaltung ein System von vier linear unabhängigen Gleichungen, welches in diesem Raum eine $3m - 4$ dimensionale Hyperfläche beschreibt, auf der alle Messungen des Endzustandes liegen müssen.

Die Kenntnis der Form dieser Hyperfläche ist die Voraussetzung für die Interpretation der Meßergebnisse, d.h., es muß eine geeignete Parametrisierung dieser Hyperfläche gefunden werden.

Die Impulserhaltung macht die Angabe des Impulses von einem der Teilchen im Endzustand überflüssig, da dieser durch die übrigen Impulse festgelegt ist. In Anlehnung an das in dieser Arbeit verwendete Meßprinzip wurde dafür der Projektilimpuls ausgewählt. Dadurch ist die Dimension des zu betrachtenden Phasenraumes bereits auf $3m - 3$ reduziert.

Die Energieerhaltung besagt, daß die Gesamtenergie E eines abgeschlossenen Systems vor und nach dem Stoß gleich ist:

$$\sum_j (\epsilon_j^i + E_{kin,j}^i) = E^i = E^f = \sum_k (\epsilon_k^f + E_{kin,k}^f). \quad (2.1)$$

Links steht in dieser Gleichung die Energie im Eingangskanal und rechts die im Ausgangskanal. Beide setzen sich aus der Summe der Bindungsenergien $\sum \epsilon$ und der kinetischen Energien $\sum E_{kin}$ zusammen. Sortiert man diese Gleichungen nach Bindungs- und kinetischen Energien, so erhält man folgende Definition des sogenannten Q -Wertes einer Reaktion:

$$Q = \sum_j \epsilon_j^i - \sum_k \epsilon_k^f = \sum_k E_{kin,k}^f - \sum_j E_{kin,j}^i. \quad (2.2)$$

$Q > 0$ bedeutet, daß die freien Teilchen nach der Reaktion mehr kinetische Energie besitzen als vorher, d.h. der Betrag der Summe der Bindungsenergien (diese haben negatives Vorzeichen) hat sich erhöht. In der physikalischen Chemie wird mit Q die zugeführte Wärme bezeichnet. Da Wärme in den hier untersuchten Systemen nicht definiert ist, stehen die hier verwendete und die chemische Definition des Q -Wertes in keinem direkten Zusammenhang.

Die kinetische Energie des Targets vor dem Stoß kann vernachlässigt werden, d.h., im Eingangskanal trägt nur das Projektil kinetische Energie.

$$\sum_j E_{kin,j}^i = E_{kin,p}^i = \frac{1}{2} m_p v_p^i{}^2 \quad (2.3)$$

Dabei ist m_p die Projektilmasse vor der Reaktion. Für die kinetische Energie im

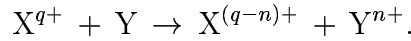
Ausgangskanal gilt somit:

$$\sum_k E_{kin,k}^f = \frac{m_p}{2} v_p^i{}^2 + Q. \quad (2.4)$$

Vom Reaktionstyp, d.h. von der Zahl und der Art der Fragmente, hängt nun ab, wie sich $\sum_k E_{kin,k}^f$ zusammensetzt. Betrachten wir zunächst die Fälle, in denen keine freien Elektronen erzeugt werden.

2.1.1 Elektroneneinfang

Besonders einfach ist die Kinematik bei Elektroneneinfangreaktionen vom Typ



Bei diesem n -fachen Elektroneneinfang in ein q -fach geladenes Projektil gibt es im Endzustand nur zwei freie Teilchen, nämlich das Rückstoßion Y^{n+} und das Projektil $X^{(q-n)+}$.

$$\sum_k E_{kin,k}^f = E_{kin,rec}^f + E_{kin,p}^f \quad (2.5)$$

$$= E_{kin,rec}^f + \frac{m_p + n m_e}{2} \left(v_{x,rec}^2 + v_{y,rec}^2 + \left(v_{z,p}^i + \Delta v_{z,p} \right)^2 \right) \quad (2.6)$$

Bei der Bezeichnung der Impuls- und Geschwindigkeitsvektoren im Ausgangskanal wurde dabei auf den Index "f" verzichtet und die z -Achse in Strahlrichtung gewählt.

Die Projektilgeschwindigkeit in Strahlrichtung $v_{z,p}$ unterscheidet sich in den meisten Reaktionen nur um einen kleinen Betrag $\Delta v_{z,p}$ von der Projektilgeschwindigkeit im Eingangskanal $v_{z,p}^i$. Im folgenden wird $v_{z,p}^i$, welches die einzige kinematisch relevante Größe im Eingangskanal ist, durch v_p abgekürzt¹.

$$v_{z,p} = v_{z,p}^i + \Delta v_{z,p} = v_p + \Delta v_{z,p} \quad (2.7)$$

Die Messung ergibt, daß Rückstoßionenimpulse mit $|p_{rec}^{\vec{r}}| > 25$ a.u. nur in einem vernachlässigbaren Anteil der Stöße erzeugt werden. Daraus kann mit Hilfe der Impulserhaltung

$$\begin{aligned} v_{x,p} &= p_{x,rec} / (m_p + n m_e) \\ v_{y,p} &= p_{y,rec} / (m_p + n m_e) \end{aligned}$$

auch eine obere Grenze für die Projektilgeschwindigkeit senkrecht zur Strahlrichtung angegeben werden. Mit den Massen $m_{rec} = 7360$ a.u. und $m_p > 5000$ a.u., was die beiden als Projektil verwendeten Helium-Isotope erfüllen, kann damit folgende Abschätzung gemacht werden:

$$E_{kin,rec}^f + \frac{m_p + n m_e}{2} \left(v_{x,rec}^2 + v_{y,rec}^2 \right) < 0.1 \text{ a.u.} = 2.7 \text{ eV}. \quad (2.8)$$

¹ v_p darf nicht mit dem Symbol für den Projektilgeschwindigkeitsvektor im Ausgangskanal \vec{v}_p oder dessen Komponenten $v_{x,p}$, $v_{y,p}$ und $v_{z,p}$ verwechselt werden, welche jedoch in dieser Arbeit keine weitere Verwendung finden.

Dies entspricht etwa der Bindungsenergie­differenz zwischen der M- und der N-Schale im He^+ . Der Hauptanteil der Elektroneneinfangreaktionen findet in sehr viel stärker gebundenen Schalen statt. Für diese erhält man eine ausreichend gute Näherung für die Konsequenz aus den Erhaltungssätzen, wenn man nur den Summanden $(v_p + \Delta v_{z,p})^2$ in Gleichung 2.6 berücksichtigt und in Gleichung 2.4 einsetzt:

$$\frac{m_p}{2} v_p^2 + Q = \sum_k E_{kin,k}^f \sim \frac{m_p + n m_e}{2} (v_p - \Delta v_{z,p})^2. \quad (2.9)$$

Teilt man diese Gleichung durch v_p und multipliziert $(v_p - \Delta v_{z,p})^2$ aus, so erhält man

$$\frac{Q}{v_p} = \frac{n m_e v_p}{2} + (m_p + n m_e) \Delta v_{z,p} \left(1 + \frac{\Delta v_{z,p}}{2 v_p} \right). \quad (2.10)$$

In den durchgeführten Experimenten gilt für alle Ereignisse $\Delta v_{z,p} \ll 0.01 v_p$, so daß mit nur kleinem Fehler die rechte Klammer durch 1 ersetzt werden kann. Die Impulserhaltung in Strahlrichtung ergibt

$$m_p v_p = p_{z,rec} + (m_p + n m_e) (v_p + \Delta v_p). \quad (2.11)$$

Benutzt man dies, um den Term $(m_p + n m_e) \Delta v_{z,p}$ in Gleichung 2.10 zu ersetzen, erhält man als Endergebnis

$$p_{z,rec} = -\frac{Q}{v_p} - n \frac{v_p m_e}{2}. \quad (2.12)$$

Die bei der Herleitung dieser Gleichungen durchgeführten Näherungen sind bei hohen Projektilgeschwindigkeiten besonders gut erfüllt, auch weil dort die transversalen Projektil- und Rückstoßionenimpulse, die durch die Kern-Kern-Wechselwirkung zustande kommen, kleiner sind als bei langsamen Stößen.

Die wesentliche Konsequenz dieser Gleichung ist, daß der Rückstoßionenimpuls in Strahlrichtung durch die Auswahl eines Reaktionskanals bereits festgelegt ist². Damit gilt weiterhin, daß die zweidimensionale Verteilung der Impuls­komponenten $p_{x,rec}$ und $p_{y,rec}$ frei von Einflüssen der Stoßkinematik ist. Diese Verteilung enthält jedoch noch die Rotationssymmetrie des Systems um die Strahlachse. Diese folgt zwingend aus der Tatsache, daß außer der Strahlrichtung keine Achse ausgezeichnet ist. Zur Diskussion der Ergebnisse genügt es somit, die Verteilung der Rückstoßionenimpulse $p_{r,rec} = \sqrt{p_{x,rec}^2 + p_{y,rec}^2}$ anzugeben.

Zur Interpretation von Gleichung 2.12 wird diese zunächst wie folgt erweitert:

$$p_{z,rec} = \frac{n \frac{1}{2} m_e v_p^2 - Q}{v_p} - n (v_p m_e). \quad (2.13)$$

² Die Charakterisierung des Reaktionskanals erfolgt in diesem Zusammenhang durch die Angabe des elektronischen Zustandes von Projektil und Rückstoßion im Endzustand, d.h. durch die Angabe der Ladungszustände und der Bindungsenergien. Damit ist die Zahl der in das Projektil eingefangenen Elektronen n und der Q -Wert festgelegt.

Der Term $n(v_p m_e)$ beschreibt den Impuls, den n Elektronen bekommen, wenn sie auf Projektilgeschwindigkeit beschleunigt werden. Dieser Impuls muß durch das Rückstoßion kompensiert werden, d.h. geht hier mit negativem Vorzeichen ein.

$n \frac{1}{2} m_e v_p^2 - Q$ ist die Energie, die aufgebracht werden muß, um die Differenz in den Bindungsenergien auszugleichen und n Elektronen auf Projektilgeschwindigkeit zu beschleunigen. Diese Energie kann nur aus der kinetischen Energie des Projektils entnommen werden. Die damit verbundene Impulsänderung des Projektils, muß ebenfalls durch das Rückstoßion kompensiert werden. Eine Reaktion, bei der die Elektronen nach dem Stoß schwächer gebunden sind, führt dabei zu einer Abbremsung des Projektils und somit zu einer Beschleunigung des Rückstoßions in Strahlrichtung.

Das Auftreten von diskreten Strukturen in der Impulsverteilung der Rückstoßionen entlang einer Raumrichtung ist die Voraussetzung für eine Eichung des verwendeten Spektrometers unabhängig von Simulationsrechnungen, und die erlaubt die Bestimmung der Impulsauflösung. Für die in dieser Arbeit untersuchten He^{2+} - $\text{He}(1^1S_0)$ -Stöße errechnet sich der Q -Wert für den Einfelelektroneneinfang (SC = single capture) $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^+$ wie folgt:

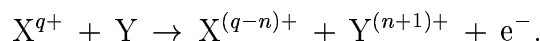
$$Q_{\text{SC}(m,n)} = -79 \text{ eV} - (-13.6 \text{ eV}) \left(\frac{4}{n_1^2} + \frac{4}{n_2^2} \right). \quad (2.14)$$

Dabei ist 79 eV die Doppelionisationsschwelle von He im Grundzustand. Davon werden die Bindungsenergien von zwei He^+ -Ionen abgezogen, die jeweils viermal größer sind als die entsprechenden Bindungsenergien im Wasserstoff. Mit n_1 bzw. n_2 werden hier die Hauptquantenzahlen der beiden Elektronen bezeichnet. Für den SC in den Grundzustand ($n_1 = n_2 = 1$) erhält man $Q = 29.8 \text{ eV}$ [31]. Für $n_1 \neq n_2$ ergeben sich durch Vertauschung von n_1 und n_2 zwei Endzustände, die im $p_{z,rec}$ Spektrum entartet sind, d.h., es kann durch die Messung von Q nicht darauf geschlossen werden, ob das Projektil oder das Rückstoßion höher angeregt wurde.

Beim Zweifachelektroneneinfang (DC = double capture) $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He} + \text{He}^{2+}$ sind die Elektronen sowohl vor als auch nach der Reaktion in einem neutralen Helium-Atom gebunden. Bei einem DC in den Grundzustand gilt deshalb $Q_{\text{DC}(1^1S_0)} = 0 \text{ eV}$. Für die niedrigsten Anregungszustände können aus der Literatur folgende Werte entnommen werden: $Q_{\text{DC}(2^3S_1)} = -19.8 \text{ eV}$, $Q_{\text{DC}(2^1S_0)} = -20.6 \text{ eV}$ und $Q_{\text{DC}(2^1P_1)} = 21.2 \text{ eV}$. Im durchgeführten Experiment werden davon nur die Singulett-Zustände besetzt. Diese sind jedoch aufgrund der Auflösung nicht im $p_{z,rec}$ -Spektrum getrennt.

2.1.2 Ionisationsprozesse

In diesem Abschnitt werden Prozesse betrachtet, bei denen genau ein freies Elektron emittiert wird, und zusätzlich n Elektronen aus dem Target (Y) in das Projektil (X) eingefangen werden:



Es gibt im Endzustand drei freie Teilchen, nämlich das Rückstoßion $Y^{(n+1)+}$, das Projektil $X^{(q-n)+}$ und ein Elektron e^- . Damit nimmt die Gleichung 2.4 die folgende Form an:

$$\frac{m_p}{2} v_p^2 + Q = \sum_k E_{kin,k}^f = E_{kin,rec} + E_{kin,p} + E_{kin,e}. \quad (2.15)$$

Die durch Gleichung 2.8 beschriebenen Abschätzungen sind auch hier gültig. Analog zu Gleichung 2.10 erhält man somit

$$\frac{Q}{v_p} = \frac{E_{kin,e}}{v_p} + \frac{n m_e v_p}{2} + (m_p + n m_e) \Delta v_{z,p} \left(1 + \frac{\Delta v_{z,p}}{2 v_p} \right). \quad (2.16)$$

Der Term $\Delta v_{z,p}/2v_p$ kann auch hier vernachlässigt werden. Bei der Impulsbilanz in Strahlrichtung muß nun zusätzlich der Impuls des freien Elektrons berücksichtigt werden. Es gilt:

$$m_p v_p = p_{z,rec} + (m_p + n m_e) (v_p + \Delta v_p) + m_e v_{z,e}. \quad (2.17)$$

Diese Beziehung wird in Gleichung 2.16 eingesetzt, um $(m_p + n m_e) \Delta v_{z,p}$ zu ersetzen. Man erhält:

$$p_{z,rec} = \frac{E_{kin,e} - Q}{v_p} - n \frac{m_e v_p}{2} - m_e v_{z,e}. \quad (2.18)$$

Dieses Ergebnis unterscheidet sich von Gleichung 2.12 durch zwei zusätzliche Terme: Der Q -Wert, der die Energiebilanz des Stoßes angibt, wird durch die kinetische Energie der Elektronen ergänzt, und der Elektronenimpuls in Strahlrichtung wird durch das Rückstoßion kompensiert. In dieser Form ist diese Gleichung in zahlreichen Veröffentlichungen [32, 33] zu finden. Der Rückstoßionenimpuls in Strahlrichtung ist hier, im Gegensatz zum Elektroneneinfang, nicht mehr alleine durch den Q -Wert bestimmt.

In Gleichung 2.18 ist $v_{z,e}$ zweimal enthalten, denn ausgeschrieben lautet diese:

$$p_{z,rec} = -\frac{Q}{v_p} - n \frac{m_e v_p}{2} + m_e \frac{v_{x,e}^2 + v_{y,e}^2}{2 v_p} + m_e \frac{v_{z,e}^2}{2 v_p} - m_e v_{z,e} \quad (2.19)$$

Durch quadratische Ergänzung erhält man daraus

$$\begin{aligned} p_{z,rec} &= -\frac{Q}{v_p} - (n+1) \frac{m_e v_p}{2} + m_e \frac{v_{x,e}^2 + v_{y,e}^2 + (v_{z,e} - v_p)^2}{2 v_p} \\ &= -\frac{Q}{v_p} - (n+1) \frac{m_e v_p}{2} + E_{kin,e}^p. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Mit der neu eingeführten Größe $E_{kin,e}^p$ wird dabei die kinetische Energie des freien Elektrons im Projektilsystem, d.h. einem Bezugssystem, welches sich mit v_p in Strahlrichtung bewegt, bezeichnet. Dieser Form von Gleichung 2.18 kann direkt eine untere Grenze für $p_{z,rec}$ entnommen werden.

$$p_{z,rec} \geq -\frac{Q}{v_p} - (n+1) \frac{m_e v_p}{2} \quad (2.21)$$

Für $E_{kin,e}^p = 0$ gilt hier das Gleichheitszeichen, und man erhält die für den $n + 1$ -fachen Elektroneneinfang gültige Gleichung. Eine Reaktion, bei der ein Elektron mit $E_{kin,e}^p = 0$ emittiert wird, kann auch als Elektroneneinfang in einen angeregten Zustand genau an der Autoionisationsschwelle interpretiert werden. Die Q -Werte sind in den beiden Fällen gleich.

In dem vermessenen Stoßsystem gibt es zwei Typen von Reaktionskanälen, die der hier beschriebenen Form entsprechen: Bei der Transferionisation (TI) wird ein Elektron aus dem Targetatom ins Kontinuum befördert und ein zweites Elektron ins Projektil eingefangen:



Bei der Einfachionisation (SI = single ionization)



verbleibt das gebundene Elektron beim Target. Bei beiden Reaktionen errechnet sich der Q -Wert zu

$$Q_{\text{TI}(n)} = Q_{\text{SI}(n)} = -79 \text{ eV} + 13.6 \text{ eV} \frac{4}{n^2}. \quad (2.22)$$

Mit n ist hier die Hauptquantenzahl des gebundenen Elektrons bezeichnet.

Sind im Rückstoßion oder Projektil zwei Elektronen angeregt, so kann die Anregungsenergie oberhalb der Einfachionisationsschwelle liegen. Solche elektronischen Zustände werden z.B. bei einem DC im Projektil bevölkert. Erfolgt der Übergang in den Grundzustand durch Emission eines Auger-Elektrons, so bezeichnet man den Prozeß als autoionisierenden Zweifachelektroneneinfang (ADC = Autoionizing Double Capture), der als ein spezieller Mechanismus der Transferionisation angesehen werden kann, da er von dieser im Endzustand nicht klar zu trennen ist. Die emittierten Elektronen haben im Projektilsystem eine feste kinetische Energie $E_{kin,e}^p$, die sich aus der Bindungsenergie des doppeltangeregten Zwischenzustandes ergibt. Damit führt dieser Mechanismus gemäß Gleichung 2.20 zu einem konstanten $p_{z,rec}$. Da die Kinematik des DC von der nachfolgenden Autoionisation nicht mehr beeinflusst wird, ergibt sich diese Signatur des Prozesses auch aus der Gleichung 2.12, die ebenfalls einen konstanten Rückstoßenimpuls für den DC als Ergebnis hat.

2.2 Übertragung von Energie aus der Projektilbewegung auf das Elektron

Ein schweres Projektil mit der Geschwindigkeit v_p überträgt in einem elastischen Stoß auf ein ungebundenes, ruhendes Elektron maximal die kinetische Energie $2m_e v_p^2$, wenn dieses in Vorwärtsrichtung emittiert wird. Aus der Kinematik des Stoßes errechnet sich im Geschwindigkeitsraum eine Kugel mit dem Radius v_p um das Projektil, auf der bei allen elastischen Streuprozessen das Elektron zu finden sein muß.

In der "binary-encounter"-Näherung [34] wird dieses Bild eines elastischen Stoßes zwischen zwei freien Teilchen auf gebundene Elektronen übertragen. Man findet entsprechende Impulsverteilungen ionisierter Elektronen in schnellen Ion-Atom-Stößen (z.B. [35, 36, 37]). Voraussetzung ist jedoch, daß $2m_e v_p^2$ wesentlich größer ist als die Bindungsenergie E_B der Elektronen im Targetatom, d.h., die Elektronen als quasi ungebunden betrachtet werden können.

Bei langsamen Stößen ($v_p < \sqrt{0.5 E_B/m_e}$) reicht die in einem solchen "Billardstoß" auf das Elektron übertragene Energie nicht aus, um dem Potential des Targetatoms zu entkommen. In der Projekttilbewegung steckt bei ausreichend großer Projekttilmasse jedoch genug kinetische Energie, um die Bindungsenergie aufzubringen. Im Prinzip ist eine Übertragung dieser Energie auf das Elektron möglich, dazu muß im klassischen Bild ein Elektron jedoch auf einer Bahn laufen, auf der abwechselnd oder gleichzeitig die Anziehungskräfte der beiden Atomkerne wirken.

Bei der quantenmechanischen Beschreibung eines solchen Prozesses versagen störungstheoretische Methoden, da dazu Voraussetzung ist, daß die Bewegung des Elektrons im wesentlichen durch einen zeitunabhängigen Hamiltonian beschrieben werden kann. Zur Übertragung der zur Ionisation notwendigen Energie in langsamen Stößen ist jedoch gerade die Bewegung des Elektrons im gemeinsamen und zeitabhängigen Coulombfeld der beiden Kerne entscheidend, und weder das Projekttilpotential noch das Targetpotential kann dabei als kleine Störung des jeweils anderen aufgefaßt werden.

Im folgenden wird zunächst ein einfaches Bild erläutert, welches einen möglichen Mechanismus der Energieübertragung auf das Elektron aufzeigt. Daran anschließend werden klassische und quantenmechanische Theorien zur Beschreibung von langsamen Ion-Atom-Stößen diskutiert.

2.2.1 Sattelpunktelektronen

Die Dynamik der Elektronen in einem langsamen Ion-Atom-Stoß kann nach den Ausführungen des letzten Abschnittes nicht als Bewegung in einem gestörten atomaren Potential beschrieben werden. Es muß vielmehr das zeitabhängige Zweizentren-coulombpotential der beiden Atomkerne als Grundlage für eine theoretische Beschreibung verwendet werden.

Die Anhebung dieses Potentials an einer bestimmten Stelle im Raum aufgrund einer Änderung der Kernorte bedingt eine Erhöhung der Energie der Elektronen, die sich dort befinden. Auf der Verbindungslinie zwischen den Kernen befindet sich an der Stelle

$$\vec{r}_{SP} = \frac{\vec{r}_P \sqrt{Z_T} + \vec{r}_T \sqrt{Z_P}}{\sqrt{Z_P} + \sqrt{Z_T}} \quad (2.23)$$

ein Sattelpunkt im Potential. Dabei sind \vec{r}_P und \vec{r}_T die Orte von Projekttil bzw. Target und Z_P und Z_T deren Ladungen. Der Sattelpunkt bewegt sich mit der Geschwindigkeit

$$\vec{v}_{SP} = \frac{\vec{v}_P \sqrt{Z_T} + \vec{v}_T \sqrt{Z_P}}{\sqrt{Z_P} + \sqrt{Z_T}}. \quad (2.24)$$

In einer klassischen Beschreibung des Stoßes erfahren Elektronen, die sich in der Umgebung des Sattelpunktes aufhalten, nur eine kleine Beschleunigung entlang der internuklearen Achse. Bei Vergrößerung des internuklearen Abstandes werden diese, wenn sie sich nicht bereits mit ausreichender Geschwindigkeit in Richtung eines der sich entfernenden Kerne bewegen, dort stranden und durch die Anhebung des Potentials ins Kontinuum gehoben. In CTMC-Rechnungen (siehe Abschnitt 2.3) wurde von R. E. Olson [19, 38] eine beträchtliche Wahrscheinlichkeit für die Ionisation von Elektronen durch diesen Mechanismus gefunden.

Die so ionisierten Elektronen können entlang der internuklearen Achse, die sich nach dem Stoß der Strahlachse annähert, durchaus Geschwindigkeiten im Bereich zwischen der Target- und der Projektilgeschwindigkeit besitzen. Sie dürfen nur nicht einen der Kerne "einholen". Senkrecht zur internuklearen Achse ist das Zweizentrenpotential attraktiv, d.h., die Elektronen können in dieser Ebene eine Oszillation ausführen, und man kann somit nicht erwarten, daß die Impulsverteilung der Elektronen senkrecht zur Strahlachse scharf ist. In der in dieser Arbeit vorgestellten Messung wurde z.B. für bestimmte Reaktionen genau am Sattelpunkt ein Minimum der Elektronenverteilung gefunden.

Das Sattelpunktbild fordert nicht das Ruhen der Elektronen am Sattelpunkt, was außerdem nach der Unschärferelation keinem quantenmechanisch erlaubten Zustand entspricht. Somit ist das Fehlen eines Peaks bei der Sattelgeschwindigkeit kein Indiz dafür, daß das Sattelpunktbild falsch ist. Es liefert jedoch auch keine Aussage darüber, welche Form die Elektronenverteilung in der Umgebung des Sattels hat. Insofern zeigt das Sattelpunktbild nur auf, daß ein für die Anhebung ins Kontinuum ausreichender Energieübertrag auf das Elektron möglich ist. Für weitergehende theoretische Untersuchungen muß man eines der in den folgenden Abschnitten skizzierten Modelle verwenden.

Das Bild des Sattelpunktmechanismus wurde in vielen theoretischen [10, 39, 40, 41, 14, 34, 42, 13, 43, 44, 45, 46] und experimentellen Arbeiten aufgegriffen. Anfangs standen nur experimentelle Daten, die mit konventioneller, dispersiver Elektronenspektroskopie gewonnen wurden, zur Verfügung [20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28]. Da dort bei Elektronenemission in Vorwärtsrichtung kein eindeutiger Peak bei der Sattelpunktgeschwindigkeit auftritt, wurde kontrovers diskutiert, ob die experimentellen Daten darauf hinweisen, daß der Sattelpunktmechanismus zur Ionisation nennenswert beiträgt.

Neuere Messungen [4, 5, 6, 7, 8, 9] mit der COLTRIMS-Technik, die den Phasenraum vollständig erfassen, haben gezeigt, daß bei langsamen Stößen ein wesentlicher Teil der Elektronen in einen weiten Bereich um die Sattelpunktgeschwindigkeit emittiert wird, die Verteilung jedoch eine Struktur aufweist, die stark von der Projektilgeschwindigkeit und vom Stoßsystem abhängt.

2.3 Das "Classical - Trajectory - Monte - Carlo" - Modell

Das "Classical-Trajectory-Monte-Carlo" (CTMC)-Modell [19, 10, 40, 47, 48, 49] beschreibt die Dynamik eines atomaren Stoßes durch klassische Bahnen der Kerne und der aktiven Elektronen. Dieses Modell ist somit geeignet, die Ionisation durch den Sattelpunktmechanismus quantitativ zu beschreiben.

Aus quantenmechanischen Modellen ist die Phasenraumverteilung der Elektronen im gebundenen, atomaren Anfangszustand mit guter Genauigkeit bekannt. Diese wird durch ein Ensemble von klassischen Anfangsbedingungen, die per Zufallsgenerator ausgewählt werden, nachgebildet. Zu jeder Anfangsbedingung wird die zeitliche Entwicklung des Systems nach den Regeln der klassischen Mechanik numerisch berechnet.

Problematisch ist bei Mehrelektronensystemen, daß klassisch keine Grundzustandsenergie existiert, was dazu führt, daß diese bei Berücksichtigung der exakten Elektron-Elektron-Wechselwirkung im allgemeinen auch dann autoionisieren können, wenn sie mit einer dem quantenmechanischen Grundzustand entsprechenden Konfiguration initialisiert wurden.

Dieses Problem kann z.B. dadurch gelöst werden, daß die Anfangsbedingungen nur aus solchen Konfigurationen gewählt werden, die stabile Elektronenbahnen ergeben, doch ist diese Auswahl unphysikalisch. Einen anderen Weg beschreibt die dCTMC (dynamical-screening-CTMC)-Methode [50], bei der die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Atomen mit mehreren Elektronen vernachlässigt wird, und stattdessen für die Elektron-Kern-Wechselwirkung ein abgeschirmtes Potential eingesetzt wird, dessen Form jedoch von der momentanen Position des bzw. der anderen Elektronen abhängt. Damit bleibt eine dynamische Radialkorrelation der Elektronen erhalten.

Nicht anwendbar ist die CTMC-Methode bei Reaktionen, die durch einen rein quantenmechanischen Effekt dominiert werden, wie z.B. das Tunneln. Für Elektroneneinfang- und Ionisationsprozesse erhält man gute Resultate für Projektilgeschwindigkeiten im Bereich der einfachen bis vierfachen klassischen Bahngeschwindigkeit der beteiligten Elektronen.

Die CTMC-Methode hat besonders bei solchen Systemen ihre Berechtigung, bei denen die quantenmechanischen Gleichungen nur mit starken Vereinfachungen, z.B. durch die Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, zu lösen sind, denn klassisch ist auch bei einem Mehrteilchensystem eine numerische Lösung ohne Näherung möglich. Die CTMC-Methode ist außerdem leicht auf eine große Zahl unterschiedlicher Systeme übertragbar. Für Prozesse mit geringer Wahrscheinlichkeit kann sich jedoch der nötige Rechenaufwand, um eine für die statistische Auswertung ausreichende Zahl von Endzuständen im gewünschten Kanal zu erhalten, stark erhöhen.

Die Strukturen von Rückstoßionen- und Elektronenimpulsverteilungen, die mit COLTRIMS für die Ionisation in Stößen von 15 keV Protonen mit Helium gemes-

sen wurden, konnten mit der CTMC-Methode qualitativ wiedergegeben werden [6], im Detail sind jedoch deutliche Abweichungen zu erkennen. Eine detaillierte Analyse des Sattelpunktmechanismus in diesem Stoßsystem wurde von Olson et al [10] durchgeführt.

Für das in dieser Arbeit untersuchte Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$ wurde von Folkerts et al (1994) [47] im Energiebereich von 50 keV/u bis 300 keV/u mit der dCTMC-Methode für den totalen Wirkungsquerschnitt des SC in angeregte Zustände eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen erzielt. Rechnungen zum DC wurden von Tókési und Hock (1996) [48] durchgeführt. Der Ionisationskanal wurde von Reinhold und Olson (1989) [40] berechnet. In dieser Arbeit sind die in der Elektronenenergie und dem Emissionswinkel differentiellen Wirkungsquerschnitte jedoch nur im Verhältnis zu den entsprechenden Wirkungsquerschnitten im p-H-Stoß angegeben.

CTMC-Rechnungen, die die Herkunft der in dieser Arbeit gemessenen Strukturen in der dreidimensionalen Elektronenverteilung aufklären könnten, sind nicht bekannt.

2.4 Die semiklassische Gekoppelte - Kanäle - Methode

Bei der semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Methode [11] wird die zeitliche Entwicklung des elektronischen Zustandes quantenmechanisch in einer kleinen, d.h. unvollständigen Basis beschrieben, deren Basiszustände dem zu untersuchenden System möglichst gut angepaßt sind. Die Bewegung der Kerne ist dabei durch eine klassische Trajektorie $\vec{R}(t)$ vorgegeben, wobei die konkrete Bedeutung von \vec{R} hier noch nicht festgelegt ist. Jeder Trajektorie ist ein Stoßparameter zugeordnet. Experimentell überprüfbare Ergebnisse erhält man somit aus der Integration über viele Stoßparameter.

Die Basiszustände, die hier auch als Kanalfunktionen oder Kanäle bezeichnet werden, sind im allgemeinen, wie auch der elektronische Hamiltonoperator, zeitabhängig. Die Kanäle sind meist Lösungen des Problems mit Näherungen, die eine Berechnung erlauben. Die sogenannte Kopplung zwischen den Kanälen beschreibt eine Korrektur zu dieser Näherung und ändert die Entwicklungskoeffizienten nach der aus den Kanalfunktionen bestehenden Basis. Im folgenden werden die Grundgleichung dieser Methode und verschiedene Möglichkeiten der Wahl der Kanalfunktionen vorgestellt.

Der elektronische Zustand $\Psi(t)$ eines Systems wird durch die Entwicklungskoeffizienten $a_k(t)$ nach einem vorgegebenen N -dimensionalen Basissatz aus den Kanalfunktionen $\phi_k(\vec{r}, t)$ eindeutig beschrieben.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{k=1}^N a_k(t) \phi_k(\vec{r}, t) \quad (2.25)$$

Setzt man dies in die Schrödingergleichung ein, so erhält man ein System von N

gekoppelten Differentialgleichungen, welches die Zeitentwicklung der Entwicklungskoeffizienten $a_k(t)$ festlegt. In Atomaren Einheiten³ lautet dieses [11]:

$$\sum_{k=1}^N N_{j,k}(t) \frac{d}{dt} a_k(t) = i \sum_{k=1}^N M_{j,k}(t) a_k(t) \quad j = 1 \dots N \quad (2.26)$$

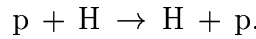
mit den zeitabhängigen Überlappmatrixelementen

$$N_{jk} = \langle \phi_j | \phi_k \rangle$$

und den Kopplungsmatrixelementen

$$M_{jk} = \langle \phi_j | i \frac{\partial}{\partial t} - H(\vec{r}) | \phi_k \rangle .$$

Für die Diskussion verschiedener Möglichkeiten zur Wahl der Basis betrachten wir hier, als ein besonders einfaches Beispiel für einen Ion-Atom-Stoßprozeß, die Reaktion



Vor und nach dem Stoß, d.h. für sehr große Kernabstände, ist in guter Näherung an jeder Stelle des Raumes das Potential von mindestens einem der beiden Protonen zu vernachlässigen, d.h., die gebundenen elektronischen Zustände in den Potentialmulden der beiden Protonen sind auch Eigenzustände des Gesamtsystems.

In keinem Bezugssystem ruhen beide Protonen. Wählt man z.B. das Schwerpunktsystem, so erhält man die Eigenfunktionen der bewegten Wasserstoffatome durch eine Galilei-Transformation der "ruhenden" Wasserstofforbitale. Bei dieser Transformation muß zusätzlich zur Verschiebung der Orbitale an den richtigen Ort der sogenannte elektronische Translationsfaktor (ETF) der Form $\exp(-ikr - i\frac{1}{2}m_e v^2)$, der die Geschwindigkeitsverteilung der Orbitale durch Verschiebung um $v = \hbar k/m_e$ an die Geschwindigkeit des Protons im gewählten Bezugssystem anpaßt und die damit verbundene kinetische Energie berücksichtigt, zur Wellenfunktion multipliziert werden.

Die so erhaltenen atomaren Orbitale (AO), die im Prinzip als Basisfunktion verwendet werden können, besitzen nicht die Symmetrie des molekularen Hamiltonoperators, der im Schwerpunktsystem invariant gegenüber Raumspiegelung ist.

$$H(\vec{r}, t) = H(-\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} - 0.5\vec{R}(t)|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r} + 0.5\vec{R}(t)|} \quad (2.27)$$

Mit $\vec{R}(t)$ wird hier der vektorielle Abstand zwischen den beiden Kernen bezeichnet.

Bei der LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals)-Methode werden deshalb Linearkombinationen der beiden AO mit entweder gerader ($f(\vec{r}) = f(-\vec{r})$) oder ungerader ($f(\vec{r}) = -f(-\vec{r})$) Symmetrie gebildet und als Basiszustände ϕ_k (LCAO-Basis) bei der Lösung der Gleichung 2.26 benutzt. Dabei ist der Zustand im Eingangskanal immer eine Linearkombination von einem geraden und einem ungeraden LCAO.

³Zu Atomaren Einheiten siehe Anhang B.

Die bei großen Abständen gegebene Entartung der Eigenzustände des Hamiltonoperators bezüglich dieser Symmetrie ist für kleine Kernabstände aufgehoben. Die konstruktive bzw. destruktive Interferenz im Überlappbereich der beiden AO führt zu unterschiedlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten von geraden und ungeraden Zuständen. Die geraden LCAO sind dadurch stärker gebunden als die entsprechenden ungeraden⁴.

Für kleine Kern-Kern-Abstände, d.h. bei zu großem Überlapp der AO, sind die LCAO-Zustände nur eine sehr grobe Näherung der Eigenzustände des entsprechenden stationären Systems, und somit kann mit einer kleinen LCAO-Basis ein langsamer Stoß, bei dem sich die Kerne lange sehr dicht beieinander aufhalten, nur schlecht beschrieben werden. In diesem Fall sind zeitabhängige molekulare Orbitale (MO) besser zur Bildung der Basis geeignet. Für das hier verwendete Beispiel können zu jedem Zeitpunkt die MO als Eigenfunktionen des molekularen Hamiltonoperators zum jeweils gegebenen Kernabstand in elliptischen Koordinaten analytisch berechnet werden.

Als Potentialkurven bezeichnet man die vom Kernabstand abhängigen Energieeigenwerte der Zustände. Abbildung 2.2 zeigt diese für die beiden niedrigsten molekularen Zustände und die entsprechenden LCAO. Für große Kernabstände stimmen LCAO und MO überein.

Die MO bilden aufgrund ihrer Definition als Eigenfunktionen eines Hamiltonoperators zu jeder Zeit ein Orthonormalsystem, d.h., für die Elemente der Überlappmatrix gilt $N_{jk} = \delta_{jk}$, und die Gleichung 2.26 vereinfacht sich erheblich. Vernachlässigt man zusätzlich alle nicht diagonalen Elemente der Kopplungsmatrix bzw. die Zeitabhängigkeit der Basiszustände ($\langle \phi_k | i \frac{\partial}{\partial t} | \phi_k \rangle = 0$), so erhält man

$$\frac{d}{dt} a_k(t) = -i \langle \phi_k | H(t) | \phi_k \rangle a_k(t) = -i \epsilon_k(t) a_k(t). \quad (2.28)$$

Diese Differentialgleichung wird gelöst durch

$$a_k(t) = a_k(t_0) \exp(-i \int_{t_0}^t \epsilon_k(t') dt'). \quad (2.29)$$

In der MO- und der LCAO-Basis ist das atomare $1s$ -Orbital im Anfangszustand

⁴ Bei der ungeraden LCAO heben sich im Bereich zwischen den Kernen die beiden atomaren Wellenfunktionen auf. Es entsteht dadurch eine Knotenebene, die senkrecht zur internuklearen Achse steht. Die ungerade Linearkombination der normierten AO muß deshalb mit einem Faktor größer Eins nochmals normiert werden, damit die Wahrscheinlichkeit, das Elektron irgendwo zu finden, gleich Eins ist. Dadurch wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einen Bereich verschoben, in dem der Potentialtopf nicht so tief ist wie zwischen den Kernen, und es ergibt sich eine schwächere Bindung. Liegen die beiden atomaren Orbitale bei Kernabstand Null genau übereinander, so ist die Normierung der ungeraden LCAO nicht mehr möglich. Für kleiner werdende Kernabstände strebt der Normierungsfaktor wie auch der Erwartungswert des Hamiltonoperators gegen Unendlich [51]. Die gerade LCAO aus $1s$ -Zuständen ist dagegen auch im Limit vereinigter Atome normierbar, und auch für sehr kleine Kernabstände wird die Bindungsenergie nur mit einem Fehler von maximal 25% im Vergleich zum exakten Grundzustand im Molekül wiedergegeben (siehe Abbildung 2.2).

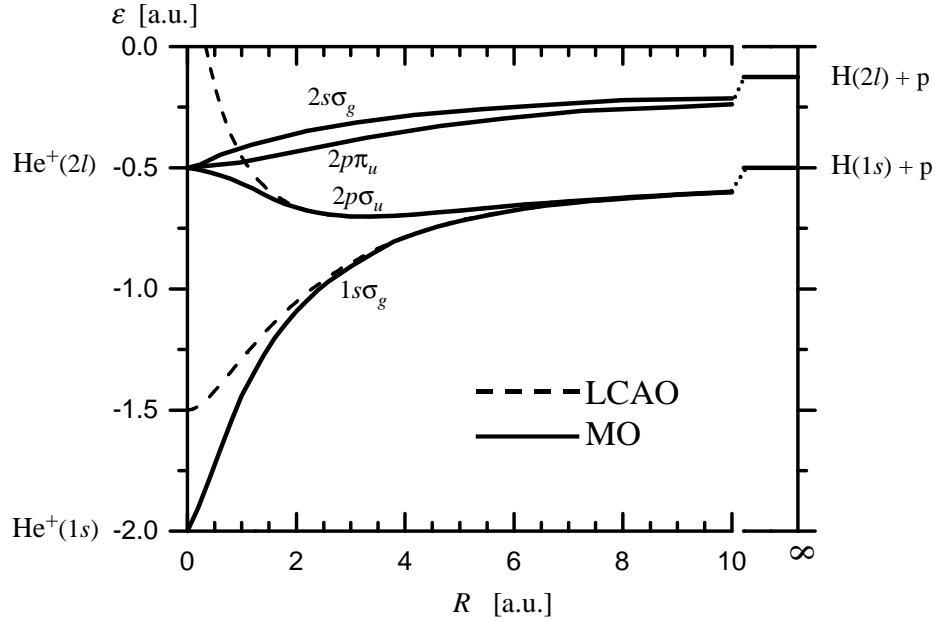


Abbildung 2.2: Potentialkurven der 4 niedrigsten elektronischen Zustände im H_2^+ -Molekül: Es sind die Eigenwerte des elektronischen Hamiltonoperators (ohne Kernabstoßung, siehe Gleichung 2.27) in Abhängigkeit vom Abstand der Kerne R aufgetragen. Für die Zustände $1s\sigma_g$ und $2p\sigma_u$ sind sowohl der exakte Verlauf (durchgezogene Linien) als auch der Verlauf in der in LCAO-Näherung [51] (unterbrochene Linien) angegeben. Im Limit vereinigter Kerne entsprechen die MO den atomaren Eigenfunktionen von He^+ . Daraus ergeben sich die ersten zwei Stellen in der Bezeichnung des molekularen Zustandes. An dritter Stelle ist die Quantenzahl Λ der Drehimpulskomponente in Richtung der Quantisierungsachse notiert, die gleich der Molekülachse gewählt wird. Die griechischen Buchstaben σ , π , δ usw. stehen dabei für $\Lambda = 1, 2, 3, \dots$. Das als Index angehängte Symbol für gerade (g) oder ungerade (u) Symmetrie wird oft weggelassen, da diese durch die übrige Bezeichnung bereits festgelegt ist.

eine Linearkombination der Zustände $1s\sigma_g$ und $2p\sigma_u$. In der Näherung von Gleichung 2.28 bleibt der Betrag aller Linearfaktoren unverändert. Die Phasendifferenz zwischen den zwei einzigen von Null verschiedenen Linearfaktoren $a_{1s\sigma}$ und $a_{2p\sigma}$ ist in diesem stark vereinfachten Bild durch

$$\varphi(t) = \int_{-\infty}^{t'} (\epsilon_{2p\sigma}(t') - \epsilon_{1s\sigma}(t')) dt' + \varphi(-\infty) \quad (2.30)$$

gegeben. Dabei erhält man die Funktionen $\epsilon(t')$ aus den entsprechenden Potentialkurven $\epsilon(R)$ (siehe Abbildung 2.2) und den gegebenen Kerntrajektorien $\vec{R}(t)$.

Wurden im Anfangszustand die Phasen von $1s\sigma_g$ und $2p\sigma_u$ so gewählt, daß $\varphi(-\infty) = 0$ gilt, so erhält man die Wahrscheinlichkeit für den Ladungstransfer P_{SC} durch [52]:

$$P_{SC} = \sin^2\left(\frac{\varphi(+\infty)}{2}\right). \quad (2.31)$$

In einer präziseren Beschreibung wird berücksichtigt, daß sich die MO während des Stoßes aufgrund der Drehung der Molekülachse um den Winkel θ und der Änderung des Kern-Kern-Abstandes R ständig verändern. In der Kopplungsmatrix [53] spiegelt sich dies durch die Terme der sogenannten Rotationskopplung und Radialkopplung wider, welche die im Eingangskanal präparierten Zustände während des Stoßes mit den anderen vermischen. Die Gleichung 2.26 nimmt unter Berücksichtigung dieser Kopplungen die folgende Form an⁵:

$$\frac{d}{dt}a_j(t) = -i\epsilon_j a_j(t) + i \sum_{k=1}^N \left(i\dot{R} \langle \phi_j | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_k \rangle + \dot{\theta} \langle \phi_j | iL_y | \phi_k \rangle \right) a_k(t). \quad (2.32)$$

Die Rotationskopplung mischt Zustände mit unterschiedlicher Quantenzahl Λ , welche die Drehimpulskomponente in Richtung der Molekülachse angibt. In einem klassischen Bild kann man sich das so vorstellen, daß der Drehimpulsvektor im Laborsystem konstant ist, sich durch die Drehung der Molekülachse im Laborsystem, wenn die Kerne aneinander vorbeifliegen, jedoch die Projektion auf diese Achse ändert. Da das Rotationskopplungs-Matrixelement $\langle \phi_j | iL_y | \phi_k \rangle$ mit der Winkelgeschwindigkeit $\dot{\theta}$ gewichtet wird, finden entsprechende Übergänge hauptsächlich bei kleinen Kernabständen statt. Im gewählten Beispiel wird dadurch der Zustand $2p\sigma_u$ mit dem Zustand $2p\pi_u$ vermischt, was im Endzustand zu einem angeregten Atom führt. Für kleine Kernabstände besitzen diese ähnliche Energieeigenwerte. Weder Radial- noch Rotationskopplung vermischen Zustände unterschiedlicher (gerader und ungerader) Symmetrie.

Die MO ruhen in einem molekularen Bezugssystem wie z.B. dem Schwerpunkt- oder Sattelpunktsystem. Für beliebig große Kern-Kern-Abstände stimmen die analytisch berechneten MO in der Ortsverteilung mit den LCAO, die das Problem dort exakt lösen, überein. Die Geschwindigkeitsverteilung wird in den MO jedoch nicht korrekt wiedergegeben, da diese im falschen Bezugssystem ruhen. Dies führt dazu, daß bestimmte Terme in der Kopplungsmatrix asymptotisch nicht verschwinden [54]. Da bei der Rechnung immer eine unvollständige Basis verwendet wird, führt dies besonders dann zu einer Verfälschung des Ergebnisses, wenn die Projektilgeschwindigkeit nicht deutlich kleiner ist als die klassische Orbitalgeschwindigkeit des Elektrons.

Somit sind MO besonders für sehr kleine Projektilgeschwindigkeiten geeignet. AO bzw. LCAO liefern für große Stoßparameter bzw. kurze Stoßzeiten, verglichen mit dem klassischen Bahnradius bzw. der Umlaufzeit der Elektronen, gute Ergebnisse. Eine Diskussion dieser Problematik findet man bei Riera et al [55]. In neueren Arbeiten [56] werden auch Kombinationen aus MO- und AO-Zuständen zur Bildung der Basis verwendet, um diese dem Problem möglichst gut anzupassen.

Bei einem Mehrelektronensystem erhöht sich der Rechenaufwand für die Lösung der Gleichung 2.26 erheblich. Dies liegt u.a. daran, daß sehr viel mehr angeregte Zustände berücksichtigt werden müssen, die energetisch dicht beinander liegen. Der molekulare Grundzustand spielt dagegen oft nur eine untergeordnete Rolle. Außerdem können die MO nicht mehr analytisch berechnet werden, und auch die Darstel-

⁵ L_y ist der Operator der Drehimpulskomponente in Richtung der Drehachse.

lung der Kanalfunktionen als Produkte von Einteilchenwellenfunktionen erfordert die Symmetrisierung der Zustände. Die neueren der in Abschnitt 2.8 aufgeführten theoretischen Arbeiten zum Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$ benutzen über 100 Basisfunktionen.

Im Eingangskanal startet das System in einem der stärker gebundenen Zustände. Bei der Beschreibung des Ionisationsprozesses in einer Basis aus adiabatischen Zuständen muß das System eine unendliche Zahl von angeregten, gebundenen Zuständen kreuzen, um das Kontinuum zu erreichen. In der im nächsten Abschnitt behandelten "Hidden-Crossings"-Methode werden Reaktionswege durch Serien von unendlich vielen Übergängen zwischen adiabatischen Zuständen beschrieben.

Mit einer alternativen Basis aus sogenannten "Sturmians" [57], die auch Kontinuumszustände beinhaltet, wurden von Ovchinnikov et al (1997) [12] Elektronenimpulsverteilungen für das Stoßsystem $p + \text{H}$ berechnet. Im Vergleich dieser theoretischen Arbeit mit Meßergebnissen fällt auf, daß die Verteilung parallel zur Strahlrichtung immer im wesentlichen auf den Bereich zwischen der Target- und der Projektilgeschwindigkeit konzentriert ist. Dies gilt auch für die in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Messungen. Eine Rechnung zur Ionisation im Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$ ist nicht bekannt.

2.5 Das "Hidden-Crossings"-Modell

Generell ist die Kreuzung von Potentialkurven erlaubt. Man findet jedoch auch Paare von Zuständen mit gleicher räumlicher Symmetrie, deren Potentialkurven aufeinander zulaufen, jedoch dann so abknicken, daß eine Kreuzung vermieden wird [58]. Die Kopplungsmatrixelemente zwischen solchen Zuständen sind an dem Punkt der nächsten Annäherung der Potentialkurven besonders hoch.

Berechnet man die Erwartungswerte ϵ_n des Hamiltonoperators in der Ebene komplexer Kernabstände, so findet man, daß die Potentialflächen $\epsilon_1(R)$ und $\epsilon_2(R)$ solcher Paare Zweige der gleichen Funktion sind, die auf einer Riemannschen Fläche definiert ist [59]. In der komplexen Ebene gibt es einen Weg um einen Verzweigungspunkt R_c , auf dem man von der einen auf die andere Potentialkurve gelangt. In der Nähe eines Verzweigungspunktes verhält sich der Abstand zwischen den Potentialkurven $\Delta\epsilon(R) = \epsilon_1(R) - \epsilon_2(R)$ wie

$$\Delta\epsilon(R) = \text{const} \sqrt{R - R_c}. \quad (2.33)$$

Im "Hidden-Crossings" (HC)-Modell [60, 15, 14, 61] wird ein Stoßprozeß in Abschnitte unterteilt, in denen der elektronische Zustand entweder adiabatisch einer Potentialkurve folgt oder in der Umgebung einer Vermiedenen Kreuzung auf die andere Potentialkurve wechselt. Die Übergangswahrscheinlichkeit an einer Vermiedenen Kreuzung ergibt sich aus dem Massey-Parameter, der durch eine Integration in der Ebene komplexer Kernabstände im Bereich zwischen R_c und der reellen Achse bestimmt wird.

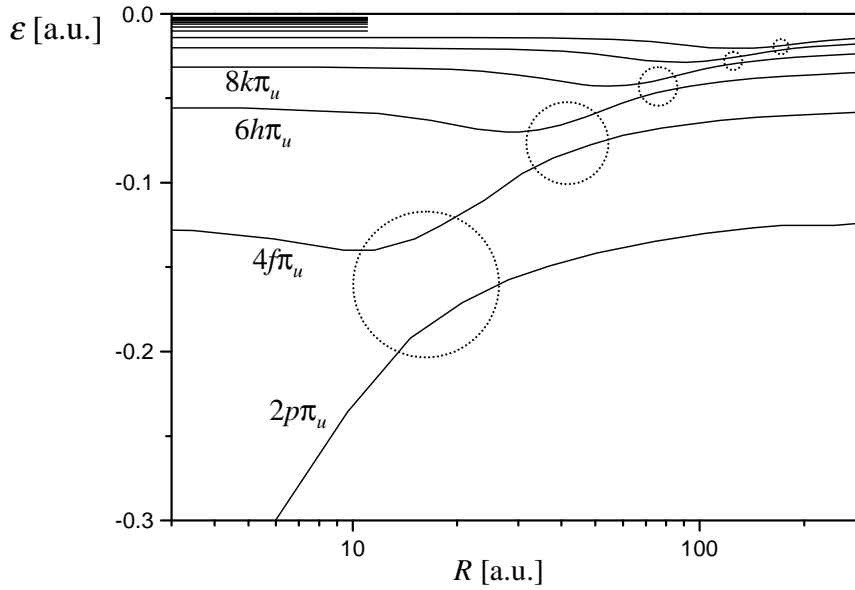


Abbildung 2.3: Adiabatische Potentialkurven im H_2^+ -Molekül (aus [16]): T_{01} -Serie, welche die Zustände $nl\pi_u$ mit $n = l = 2, 4, 6, \dots$ enthält. Die gepunkteten Kreise markieren die Vermiedenen Kreuzungen.

Ein einzelner Übergang kann ein Elektron nicht in einen Kontinuumszustand befördern, sondern hebt das System nur in den nächst höheren Zustand gleicher Symmetrie. Die Ionisation erfolgt somit durch eine Kette von immer dichter aufeinanderfolgenden Vermiedenen Kreuzungen. Solche Ketten finden sich bei kleinen (S-Serien) und großen (T-Serien) Kernabständen (> 5 a.u.). Die T-Serien sind mit dem durch die Sattelpunktelektronen beschriebenen Ionisationsprozeß verknüpft [62].

Als Beispiel sind in Abbildung 2.3 Potentialkurven der T_{01} -Serie dargestellt, die Zustände der Form $nl\pi_u$ mit $n = l = 2, 4, 6, \dots$ enthält. Dabei sind n und l die Haupt- und die Bahndrehimpuls-Quantenzahlen im Grenzfall vereinigter Atome ($R = 0$). Das dritte Symbol gibt die Quantenzahl Λ an, welche den Betrag der Drehimpulskomponente in Richtung der internuklearen Achse bestimmt und für $R = 0$ dem Betrag der atomaren Quantenzahl m entspricht. Die Symbole σ , π , δ , usw. stehen für $\Lambda = 1, 2, 3, \dots$ [63]. Aufgrund der Rotationssymmetrie um die Quantisierungsachse ist m bzw. Λ auch im Molekül eine gute Quantenzahl. Ähnliche Strukturen wie in Abbildung 2.3 findet man u.a. auch bei den Zuständen $nl\sigma_g$ mit $n = l = 1, 3, 6, \dots$ (T_{00} -Serie).

Die Position der Verzweigungspunkte in der Ebene komplexer internuklearer Abstände wurde von Solov'ev [60] angegeben. Daraus wurde ein analytischer Ausdruck für die Ionisationswahrscheinlichkeit nach diesem Prozeß berechnet. Experimentell ermittelte Wirkungsquerschnitte liegt oberhalb dieses Wertes.

Diese Ionisationswahrscheinlichkeit ist ein unendliches Produkt der Übergangswahrscheinlichkeiten, die sich im Verlauf der Serie der 1 annähern. Zur Berechnung von Impulsverteilungen ionisierter Elektronen muß die Entwicklung des Systems in

der Serie aus adiabatischen Zuständen abgebrochen und in einer diabatischen Basis fortgeführt werden [64]. Mit dieser Methode wurden von Pieksma und Ovchinnikov [42] Impulsverteilungen für das Stoßsystem p+H berechnet, die für die beiden oben genannten Serien in Strahlrichtung ein Maximum am Sattelpunkt haben. Innerhalb einer Serie ist die Drehimpulskomponente entlang der internuklearen Achse konstant. Die π_u -Symmetrie der T_{01} -Serie spiegelt sich in der so berechneten Impulsverteilung darin wider, daß diese auf der internuklearen Achse, die nach dem Stoß in guter Näherung in Strahlrichtung liegt, eine Knotenlinie besitzt.

Von Krstić et al (1996) [65] wurde die HC-Methode auf Mehrelektronensysteme übertragen (MEHC = multi-electron HC). Die damit berechneten totalen Wirkungsquerschnitte für die Ionisation im p-He-Stoß [66] stimmen gut mit experimentellen Daten überein. Elektronenimpulsverteilungen wurden in diesem Modell noch nicht berechnet.

2.6 Semiklassische Rechnungen auf einem Gitter

Der quantenmechanische Zustand eines Teilchens ist in der Ortsraumdarstellung eine komplexwertige Funktion der drei Ortskomponenten. In vielen theoretischen Beschreibungen, so z.B. auch in der Gekoppelte-Kanäle-Methode, wird diese Funktion durch Entwicklungskoeffizienten nach einer bestimmten Basis dargestellt. Die verwendete Basis ist dabei immer unvollständig, d.h., sie deckt nur einen meist kleinen Teil des Phasenraumes ab. Somit ist die zeitliche Entwicklung des Zustandes und damit auch das berechnete Ergebnis eines Streuprozesses immer auf diesen Teil beschränkt.

In der Ortsraumdarstellung kann die Wellenfunktion auch durch die Funktionswerte an gitterförmig angeordneten Stützstellen näherungsweise dargestellt werden. Die damit verbundene Diskretisierung der Schrödingergleichung ist in gewissem Maße auch als Darstellung in einer Basis aus Kasten- oder Deltafunktionen zu interpretieren. Die Wahl einer solchen Basis setzt nicht die Kenntnis des für den untersuchten Prozeß relevanten Phasenraumes voraus, und somit ist die Gefahr, durch falsche Wahl der Basis die Rechnung so zu beeinflussen, daß man das erwartete Ergebnis erhält, geringer.

Es ist zwar eine wesentlich größere Zahl von Basiszuständen bzw. Stützstellen notwendig als bei der Gekoppelte-Kanäle-Rechnung, diese sind jedoch mit vergleichbarem Rechenaufwand handhabbar, da sie immer orthonormal zueinander und räumlich sehr stark beschränkt sind (z.B. bei der Wahl von Kastenfunktionen als Basiszustände). Damit muß zur Bestimmung von Erwartungswerten von Operatoren nicht über den gesamten Raum integriert werden.

Rechnungen auf einem Gitter im Ortsraum wurden für Einteilchensysteme, z.B. für das Stoßsystem p+H mit klassischer Beschreibung der Kernbewegung, zuerst in einer Dimension mit einigen tausend Stützstellen [44, 67] und später dann auch in zwei und drei Dimensionen [68, 69] mit über $1 \cdot 10^7$ Stützstellen durchgeführt.

Wesentliches Problem bei dieser Art Rechnung ist die Auswertung der Wellen-

funktion nach dem Stoß. Prinzipiell erhält man die Impulsverteilung der Elektronen nach dem Stoß durch Fouriertransformation der Wellenfunktion im Ortsraum. Da jedoch nur die Impulsverteilung der Elektronen im Kontinuum von Interesse ist, müssen gebundene Zustände vorher abgezogen werden. Dies ist dann einfach, wenn die ungebundenen Anteile bereits weit auseinandergelaufen sind. Gerade dies sprengt jedoch leicht, gerade in mehreren Dimensionen, die Größe des Gitters. Beschränkt man sich bei der Auswertung der Wellenfunktion auf die Bereiche, die sich schon deutlich von den Kernen entfernt haben, ist es möglich, die Ortsverteilung der auseinanderlaufenden Wellenfunktion direkt als Impulsverteilung zu interpretieren.

Die Darstellung einer Zweiteilchenwellenfunktion, wie sie für die Berechnung des in dieser Arbeit untersuchten Stoßsystems mit zwei Elektronen notwendig ist, müßte konsequenterweise auf einem sechs-dimensionalen Gitter erfolgen. Ein solches ist jedoch in ausreichender Auflösung und Ausdehnung vom Rechenaufwand her nicht zu realisieren.

Bei der TDHF-Methode genügt für das in dieser Arbeit untersuchte Stoßsystem mit zwei Elektronen die Berechnung nur einer Einteilchenwellenfunktion in einem abgeschirmten Potential. Diese kann unter anderem auch auf einem dreidimensionalen Gitter [70, 71] dargestellt werden. Weitere Informationen dazu sind im folgenden Abschnitt zu finden.

2.7 Die "Time - Dependent - Hartree - Fock"-Methode

Beim "Hartree-Fock"-Verfahren wird ein stationäres Mehrelektronensystem durch eine Wellenfunktion beschrieben, die mittels Slater-Determinante aus Einteilchenwellenfunktionen berechnet wird. Diese sind Lösungen des Einteilchen-Hamiltonoperators zu einem effektiven Potential, welches zu bestimmen ist. Es muß so gewählt werden, daß die aus der Wellenfunktion zu diesem Potential berechnete Ladungsverteilung eine Abschirmung des Kernpotentials ergibt, die wieder genau dieses effektive Potential erzeugt. Eine solche selbstkonsistente Lösung erhält man durch ein Iterationsverfahren.

Die "Time-Dependent Hartree-Fock" (TDHF)-Methode startet mit einer Lösung des Problems für separierte Kerne, d.h. mit der Lösung des "Hartree-Fock"-Verfahrens für ein Helium-Atom. Die Kerne werden entlang einer klassischen Trajektorie bewegt. Die Einteilchenwellenfunktionen der beiden Elektronen ϕ_j entwickeln sich dabei gemäß der Gleichung [72]

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi_j = (H_1 + D - A) \phi_j \quad j = 1, 2. \quad (2.34)$$

Dabei ist H_1 der Hamiltonoperator eines entsprechenden Einelektronensystems, D das aus der Ladungsverteilung der Elektronen berechnete Abschirmpotential und A das Austauschpotential.

Sind, wie z.B. im Stoßsystem $He^{2+} + He(1s^2)$, im Anfangszustand alle Elektronen im gleichen Orbital, d.h., die Ortsanteile der beiden Einteilchenwellenfunktionen stimmen überein, so gilt dies in der Näherung der TDHF-Methode für den gesamten Stoß, da sich beide Einteilchenwellenfunktionen nach derselben Gleichung entwickeln. Es muß somit nur die zeitliche Entwicklung einer Einteilchenwellenfunktion ϕ berechnet werden. Da sich das System in einem Singulett-Zustand befindet, gilt

$$(D - A) \phi(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{|\phi(\vec{r}')|}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \phi(\vec{r}). \quad (2.35)$$

In den Arbeiten von Kulander et al (1982) [70] und Sandhya Devi und Garcia (1983) [71] zu dem hier untersuchten Stoßsystem wird $\phi(\vec{r})$ durch Stützstellen auf einem Gitter im Ortsraum (siehe Abschnitt 2.6) dargestellt. Damit werden experimentelle Daten gut wiedergegeben. Von Schaudt et al (1991) [73] konnte das Verfahren, aufbauend auf [71], u.a. durch den Einsatz leistungsfähigerer Computer weiter verbessert werden.

Eine TDHF-Rechnung mit einer Darstellung der Wellenfunktion in einem Basissatz aus Hylleraas-Funktionen von Stich et al [72] untersucht neben dem Stoßsystem $He^+ + He^+$ weitere Zweielektronen-Systeme, jedoch nicht das in dieser Arbeit behandelte.

2.8 Theoretische Arbeiten zum Stoßsystem $He^{2+} + He$

Das in dieser Arbeit untersuchte Stoßsystem war bereits sehr früh Gegenstand theoretischer Untersuchungen [74]. Fulton und Middlemon [75] konnten bereits 1966 mit einer Gekoppelte-Kanäle-Rechnung in einem Basissatz aus nur drei AO den Verlauf des absoluten Wirkungsquerschnittes für den DC gut wiedergeben. Der Einfachelektroneneinfang wurde dabei jedoch stark unterschätzt, da in dieser Rechnung die angeregten Zustände, die den Wirkungsquerschnitt im Bereich von Projektilgeschwindigkeiten unter 1 a.u. dominieren, nicht berücksichtigt wurden. Mukherjee et al [76] konnte 1973 durch die Erweiterung der Basis um sechs angeregte Zustände, wobei die Kopplungsterme zwischen diesen Zuständen vernachlässigt wurden, eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit experimentellen Daten erreichen.

Voraussetzung für präzise Rechnungen im quasimolekularen Bild, d.h. in einer Basis aus MO, ist die Kenntnis der Potentialkurven. Für die niedrigsten $^1\Sigma$ -Zustände wurden diese von Yagisawa (1977) [77] im Bereich $0.4 \text{ a.u.} < R < 4.5 \text{ a.u.}$ berechnet. Die Potentialkurven der Zustände $^1\Sigma_g$ zeigen dort die Struktur von Vermiedenen Kreuzungen.

Potentialkurven für autoionisierende Zustände wurden von Hara und Sato (1978) [78] bestimmt. Die Ergebnisse dieser Arbeit dienen als Grundlage für die Berechnung von totalen und streuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitten der "Zwei-

Elektronen-Anregung“ durch Koike et al [79]. Dabei wurden keine Translationsfaktoren (ETF) verwendet.

Mit einer Basis aus drei molekularen Zuständen wurde von López et al (1978) [80] die Wahrscheinlichkeit eines DC in den Grundzustand bei festem Projektilstreuwinkel als Funktion der Projektilgeschwindigkeit untersucht. Die berechnete Oszillation dieser Wahrscheinlichkeit stimmt gut mit der von experimentellen Daten überein. Diese Oszillation wurde auch von Harel und Salin (1980) [81] mit einer Basis von molekularen Zuständen, die die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und die ETF vernachlässigen (OEDM-Zustände), berechnet. Zusätzlich wurden auch totale Wirkungsquerschnitte für diverse Reaktionskanäle gut beschrieben.

Durch weitere Optimierung und Vergrößerung der Basissätze konnten z.B. von Kimura (1988) [82], Gramlich et al (1989) [83] und Gao et al (1992) [18] die Meßdaten immer besser reproduziert werden. In [83] erlaubte die Einbeziehung von Zuständen positiver Energie auch eine gute Beschreibung der Projektilenergieabhängigkeit des totalen Ionisations-Wirkungsquerschnittes.

Mit dem Umkehrprozeß des SC, d.h. dem Stoßsystem $\text{He}^+ + \text{He}^+$, befaßt sich die Arbeit von Fritsch et al (1987) [84]. Zu den Triplett-Zuständen des He_2^{2+} -Moleküls, die bei diesem Stoßsystem, jedoch nicht bei dem hier untersuchten, berücksichtigt werden müssen, sind dort Potentialkurven abgebildet.

Die Notwendigkeit der Kenntnis von totalen Wirkungsquerschnitten des SC in die N-Schale für die Plasmadiagnose beim Fusionsexperiment JET motivierte zu der Gekoppelte-Kanäle-Rechnung von Fritsch (1994) [85] mit über 100 Basiszuständen. In dieser Arbeit sind die wesentlichen Reaktionswege aufgezeigt. Von Davies (1998) [86] wurden in einer ähnlichen Rechnung auch die Wirkungsquerschnitte des DC für ein angeregtes Helium-Target bestimmt. Entsprechende experimentelle Daten, die in Anlehnung an die Plasmadiagnosemethode bei JET durch Photonenemissionsspektroskopie erzielt wurden, sind in der Arbeit von Folkerts et al (1994) [47] zu finden. Dort werden auch die Ergebnisse einer dCTMC Rechnung für die totalen Wirkungsquerschnitte des Elektroneneinfangs in angeregte Zustände vorgestellt.

Auf weitere theoretische Arbeiten nach der CTMC- und der TDHF-Methode wurde bereits in den Abschnitten 2.3 bzw. 2.7 verwiesen.

Die Elektronentransfer- und -anregungsprozesse können im quasimolekularen Bild als gut verstanden gelten. Die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen zum SC und DC dienen, neben der Eichung der Apparatur, hauptsächlich dem Vergleich mit den Ionisationskanälen in der Diskussion der Daten. Dem Autor ist keine theoretische Arbeit zum Stoßsystem $\text{He}^{2+} + \text{He}$ bekannt, die für die Einfachionisation oder Transferionisation in den Elektronenimpulsen differentielle Wirkungsquerschnitte liefert.

2.9 Elektronische Prozesse beim He^{2+} -He-Stoß im quasimolekularen Bild

Das quasimolekulare Bild, das in Abschnitt 2.4 am Beispiel des Stoßsystems $p + \text{H}$ vorgestellt wurde, soll hier auf den He^{2+} -He-Stoß übertragen werden. Die folgende Argumentation lehnt sich an die im letzten Abschnitt aufgeführten Arbeiten, insbesondere [85], an und bezieht sich auf Potentialkurven molekularer Orbitale, wie sie in [81] oder [80] zu finden und in Abbildung 2.4 dargestellt sind.

Der DC in den Grundzustand des Projektils besitzt im He^{2+} -He-Stoß bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten, abgesehen von der elastischen Streuung des Projektils, den größten totalen Wirkungsquerschnitt (siehe Abbildung 5.1). Dieser Prozeß verläuft im MO-Bild analog zum SC im p-H-Stoß.

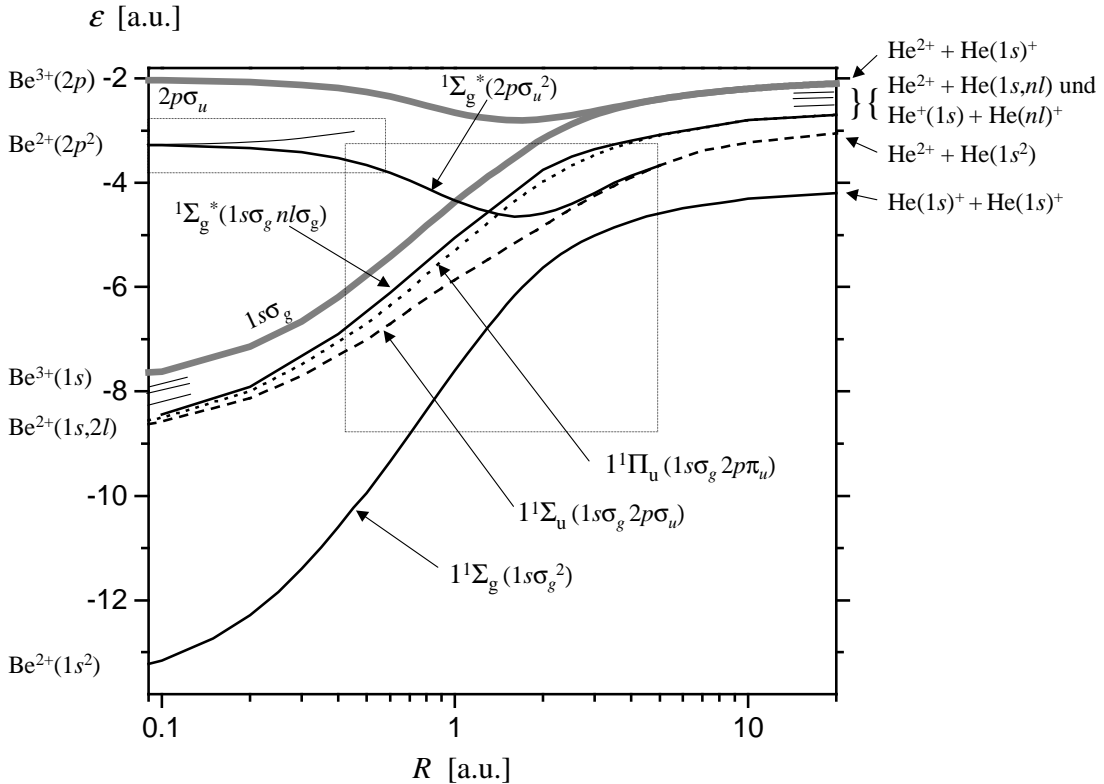


Abbildung 2.4: Potentialkurven des He_2^{2+} -Quasimoleküls nach Harel [81] bzw. López [80] (für Potentialkurven des H_2^+ -Quasimoleküls und weitere Erläuterungen siehe Abbildung 2.2): Die angeregten Zustände entsprechen nicht einem adiabatischen Zustand, sondern sind der Entwicklung des Systems bei einem Stoßprozeß angepaßt. Die zwei durch Rechtecke gekennzeichneten Bereiche sind in Abbildung 2.5 vergrößert dargestellt. Zusätzlich sind die Potentialkurven der niedrigsten Zustände im He_2^{3+} -Molekül, $1s\sigma_g$ und $2p\sigma_u$, eingezeichnet (breite Linien), welche die Autoionisationsgrenzen bei Verbleib eines Elektrons in einem dieser Zustände definieren.

Im Eingangskanal wird das System aus $\text{He}(1s^2)+\text{He}^{2+}$ durch eine Linearkombination aus den Zuständen $^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ und $^1\Sigma_u(1s\sigma 2p\sigma)$ beschrieben⁶, die eine gerade bzw. ungerade Symmetrie besitzen. Bei Annäherung der Kerne wird die energetische Entartung dieser beiden Zustände aufgehoben. Im Gegensatz zum p-H-Stoßsystem ist hier der gerade dieser beiden Zustände schwächer gebunden, was sich jedoch damit erklärt, daß er aus zwei ungeraden Einteilchenzuständen zusammengesetzt ist. Die Energiedifferenz bei kleinen Kernabständen bewirkt, daß sich die Phasen unterschiedlich entwickeln. Wird eine Linearkombination der im Eingangskanal besetzten Zustände nach dem Stoß wieder auf die atomaren Zustände projiziert, hängt es von der Phasendifferenz ab, in welchem Atom sich die Elektronen befinden. Dieser Prozeß kommt ohne einen Wechsel zwischen den Potentialkurven aus, d.h. findet auch bei Vernachlässigung der nicht diagonalen Elemente in der Kopplungsmatrix statt.

Der Stoßparameter, bei dem sich noch eine ausreichende Phasendifferenz für den DC ergibt, ist um so größer, je langsamer der Stoßprozeß ist, d.h., je länger die Kerne kleinen Kernabstand besitzen. Damit wird erklärt, warum der totale Wirkungsquerschnitt des DC bei Verringerung der Projektilgeschwindigkeit ansteigt. Da nach einem DC das System die gleiche Bindungsenergie wie vor dem Stoß besitzt, was damit zusammenhängt, daß keine weiteren molekularen Zustände besetzt werden, bezeichnet man diese Reaktion als resonant.

Mit den beiden im Eingangskanal besetzten Zuständen ist es unmöglich, eine Wellenfunktion zu konstruieren, bei der sich im Limit separierter Atome eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit für den Nachweis je eines Elektrons an jedem Kern (Einfachelektroneneinfang) oder eines Elektrons in einem angeregten Zustand ergibt. Jene Prozesse, die zur Besetzung entsprechender Zustände beitragen, starten hauptsächlich durch die Rotationskopplung zwischen $^1\Sigma_u$ und $^1\Pi_u$ bei kleinen Kernabständen. Auf diese Weise werden nur ungerade, nicht jedoch die zugehörigen geraden Zustände besetzt. Dies bedingt, daß die Wirkungsquerschnitte für Paare von Endzuständen, die ausschließlich über diese Kopplung besetzt werden und durch Raumspiegelung, d.h. Vertauschung von Projektil und Target, ineinander übergehen, gleich sein sollten. Für Projektilgeschwindigkeiten kleiner als 0.55 a.u. wurde

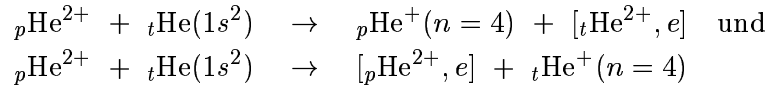
⁶ Die Bezeichnungen $^1\Sigma_u$ bzw. $^1\Sigma_g$ setzen sich wie folgt zusammen: Die hochgestellte Zahl gibt die Multiplizität des Zustandes an, d.h., die ¹ steht für einen Spin-Singulett-Zustand. Davor ist manchmal eine Ziffer angegeben, welche die Zustände gleicher Symmetrie, beginnend bei dem am stärksten gebundenen, durchnumeriert ($^1\Sigma_g$ bezeichnet z.B. den Grundzustand des Moleküls). Die Summe der Bahndrehimpulscomponenten in Quantisierungsrichtung wird durch den großen griechischen Buchstaben angegeben, wobei Σ , Π , Δ , usw. für 1, 2, 3, ... stehen. Der Index g bzw. u steht für gerade bzw. ungerade Symmetrie bei Punktspiegelung am Ursprung. Danach kann in Klammern die Elektronenkonfiguration im Limit vereinigter Atome folgen. Diabatische Potentialkurven, d.h., solche, die Vermiedene Kreuzungen bei den adiabatischen Zuständen überspringen und so der tatsächlichen Entwicklung des Systems angepaßt sind, werden in dieser Arbeit durch * gekennzeichnet. Nach dem Überspringen einer Vermiedenen Kreuzung stimmen die Bezeichnungen der Elektronenkonfigurationen von adiabatischen und diabatischen Zuständen nicht mehr überein.

dies durch Photonenemissionsspektroskopie am hier untersuchten Stoßsystem experimentell bestätigt [87]⁷. Bei höheren Projektilgeschwindigkeiten muß auch die Kopplung des geraden Anteils im Eingangskanal mit anderen Zuständen berücksichtigt werden. Solche Prozesse werden im folgenden beschrieben.

Der SC in den Grundzustand erfordert die Besetzung des molekularen Grundzustandes $1^1\Sigma_g(1s\sigma^2)$. Dies ist durch Radialkopplung der geraden Komponente im Eingangskanal bei Kernabständen oberhalb 1 a.u. möglich, jedoch ist dieser Prozeß schwächer als der SC in angeregte Zustände. Dies ist durch den großen energetischen Abstand von $1^1\Sigma_g(1s\sigma^2)$ zu allen anderen in Abbildung 2.4 gezeigten Zuständen⁸ zu erklären.

Zum Verständnis weiterer Reaktionskanäle muß zuerst der diabatische Charakter des verwendeten $1^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ -Zustandes diskutiert werden. Dieser Zustand entspricht dem Produkt aus den zwei $2p\sigma_u$ -Zuständen in einem Einelektronensystem und läuft nahezu parallel zum $2p\sigma_u$ -Zustand des He_2^{3+} -Moleküls. Die guten Resultate

⁷ In der Arbeit von Folkerts et al wurde das Verhältnis der Reaktionen



untersucht. Der vorangestellte Index dient dabei zur Unterscheidung von Projektil (p) und Target (t). Bei beiden Reaktionsgleichungen ist für einen der beiden Atomkerne nicht näher spezifiziert, ob und in welchem Zustand ein gebundenes Elektron vorhanden ist. $He^+(n=4)$ wurde im Experiment durch den Nachweis der beim Übergang des Elektrons in niedrigere Schalen emittierten Photonen identifiziert. Auf dieser Reaktion basiert eine Plasmadiagnosemethode beim Fusionsexperiment JET.

⁸ Es fällt auf, daß in Abbildung 2.4, ausgehend von der Konfiguration $He^+(1s)+He^+(1s)$ für separierte Atome, kein ungerader Zustand eingezeichnet ist. Konstruiert man den Ortsanteil eines solchen ungeraden Zustandes für Atome an den Positionen \vec{R} und $-\vec{R}$ aus einer Funktion $f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, die das Produkt der $1s$ -Orbitale von je einem Elektron an den beiden Kernen darstellt, so erhält man

$$\begin{aligned} \Sigma_u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - f(-\vec{r}_1, -\vec{r}_2) \\ &= \left[\phi_{1s}(\vec{r}_1 - \vec{R}) \phi_{1s}(\vec{r}_2 + \vec{R}) - \phi_{1s}(-\vec{r}_1 - \vec{R}) \phi_{1s}(-\vec{r}_2 + \vec{R}) \right]. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Der Grundzustand eines Einelektronensystems hat die Eigenschaft, daß $\phi_{1s}(\vec{r}) = \phi_{1s}(-\vec{r})$ gilt. Wendet man dies auf Gleichung 2.36 an, so erhält man

$$\begin{aligned} \Sigma_u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \left[\phi_{1s}(-\vec{r}_1 + \vec{R}) \phi_{1s}(-\vec{r}_2 - \vec{R}) - \phi_{1s}(\vec{r}_1 + \vec{R}) \phi_{1s}(\vec{r}_2 - \vec{R}) \right] \\ &= -\Sigma_u(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Man erkennt, daß der Ortsanteil dieses molekularen Zustandes antisymmetrisch gegenüber der Vertauschung der beiden Elektronen, d.h. der Vertauschung von r_1 und r_2 , ist. Damit muß man eine symmetrische Spinfunktion, d.h. einen Spin-Triplett-Zustand, wählen. Die Potentialkurve dieses $^3\Sigma_u$ -Zustandes ist z.B. in [84] zu finden. Er spielt für das in der vorliegenden Arbeit untersuchte Stoßsystem jedoch keine Rolle, da im Eingangskanal nur Singulett-Zustände besetzt sind, und diese nicht mit Triplett-Zuständen koppeln.

tate bei der Berechnung von streuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitten des DC bestätigen, daß sich der gerade Anteil der Wellenfunktion tatsächlich wie dieser Zustand verhält. Er kreuzt jedoch unendlich viele andere Zustände mit gleicher Symmetrie ($^1\Sigma_g$). Für adiabatische Potentialkurven ist dies verboten [58]. Veranschaulichen kann man dieses Verbot damit, daß diese Zustände bei einer Kreuzung ununterscheidbar würden, d.h., bei einem bestimmten Kernabstand wären statt zwei nur noch einer vorhanden, was der Forderung nach Stetigkeit widerspricht. Dynamisch bleiben Zustände gleicher Symmetrie bei einer Kreuzung jedoch durch ihre unterschiedliche zeitliche Entwicklung unterscheidbar, oder mit anderen Worten, die Dynamik des Systems stört die Symmetrie. Dies berechtigt die Verwendung des $^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ -Zustandes, dessen diabatischer Charakter durch * gekennzeichnet ist.

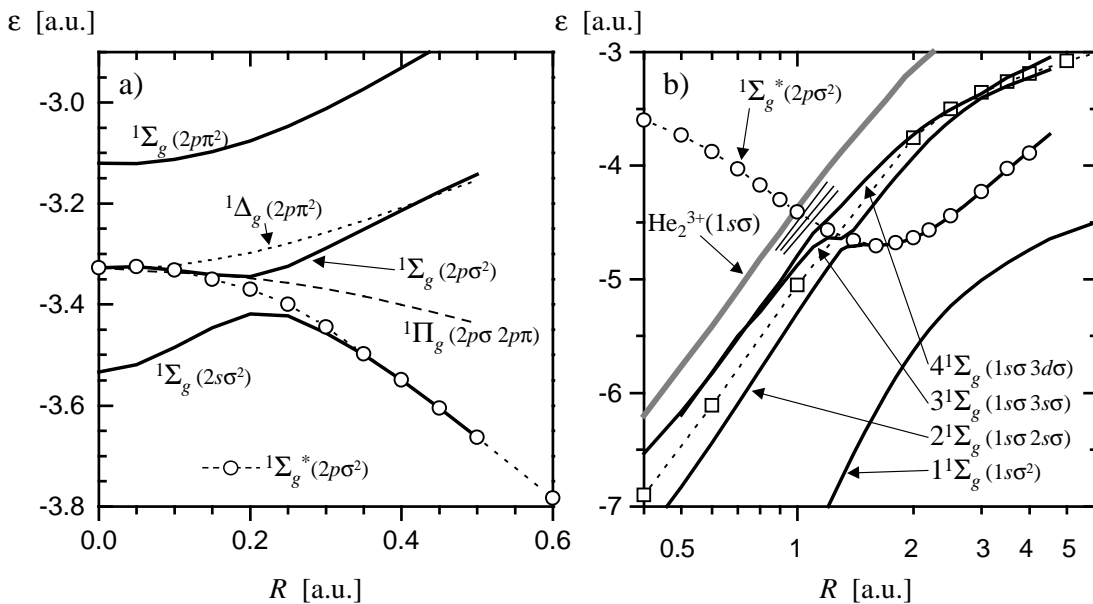


Abbildung 2.5: Vergleich der exakten Potentialkurven von angeregten $^1\Sigma_g$ -Zuständen (Linien) mit den diabatischen, die von Harel et al und López et al verwendet wurden (Kreise, Quadrate): a) Autoionisierende Zustände nach Hara et al (1978) [78] b) Die 4 niedrigsten $^1\Sigma_g$ -Zustände nach Yagisawa et al (1977) [77]. Unterhalb der Potentialkurve des $(1s\sigma_g)$ -Zustandes im He_2^{3+} -Molekül sind weitere Zustände des Typs $^1\Sigma_g(1s\sigma_g\ n l\sigma_g)$ angedeutet.

Für die zwei in Abbildung 2.4 durch Rechtecke markierten Bereiche sind in Abbildung 2.5 adiabatische Potentialkurven mit der des $^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ -Zustandes (Kreise) verglichen. Zwischen den Vermiedenen Kreuzungen folgt der $^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ -Zustand je einem adiabatischen. Nur links von der Vermiedenen Kreuzung bei $R = 0.2$ a.u. stimmen dabei die in Klammern angegebenen Elektronenkonfigurationen der übereinanderliegenden Potentialkurven überein, denn diese ergeben sich aus der Bezeichnung der Zustände bei vereinigten Atomen, d.h. für $R = 0$. In Abbildung 2.5 sind rechts vier adiabatische Potentialkurven ($1^1\Sigma_g$ bis $4^1\Sigma_g$) dargestellt. Eine Serie weiterer, die sich dem $1s\sigma$ -Zustand im He_2^{3+} -Molekül annähern, ist durch Linien angedeutet. Man erkennt, wie im diabatischen Verlauf (Kreise und Quadrate) Vermiedene Kreuzungen

bei den exakten Potentialkurven überwunden werden. In der "Hidden-Crossings"-Methode erhält man an solchen Stellen eine Übergangswahrscheinlichkeit nahe Eins. Werden diese Vermiedenen Kreuzungen jedoch nicht überschritten, so kann einer der anderen $^1\Sigma_g$ -Zustände besetzt werden, was zu SC oder DC in angeregte Zustände führt.

Alle in Abbildung 2.5-links gezeigten adiabatischen Zustände können durch Rotations- und Radialkopplung bei Kernabständen unter 0.3 a.u. besetzt werden. Die Entwicklung dieser Zustände bei Vergrößerung des Kernabstandes skizziert Abbildung 2.6, welche in [78] und [79] zu finden ist.

Rechts von der Vermiedenen Kreuzung bei ca. 0.2 a.u. entspricht der $^1\Sigma_g(2s\sigma^2)$ -

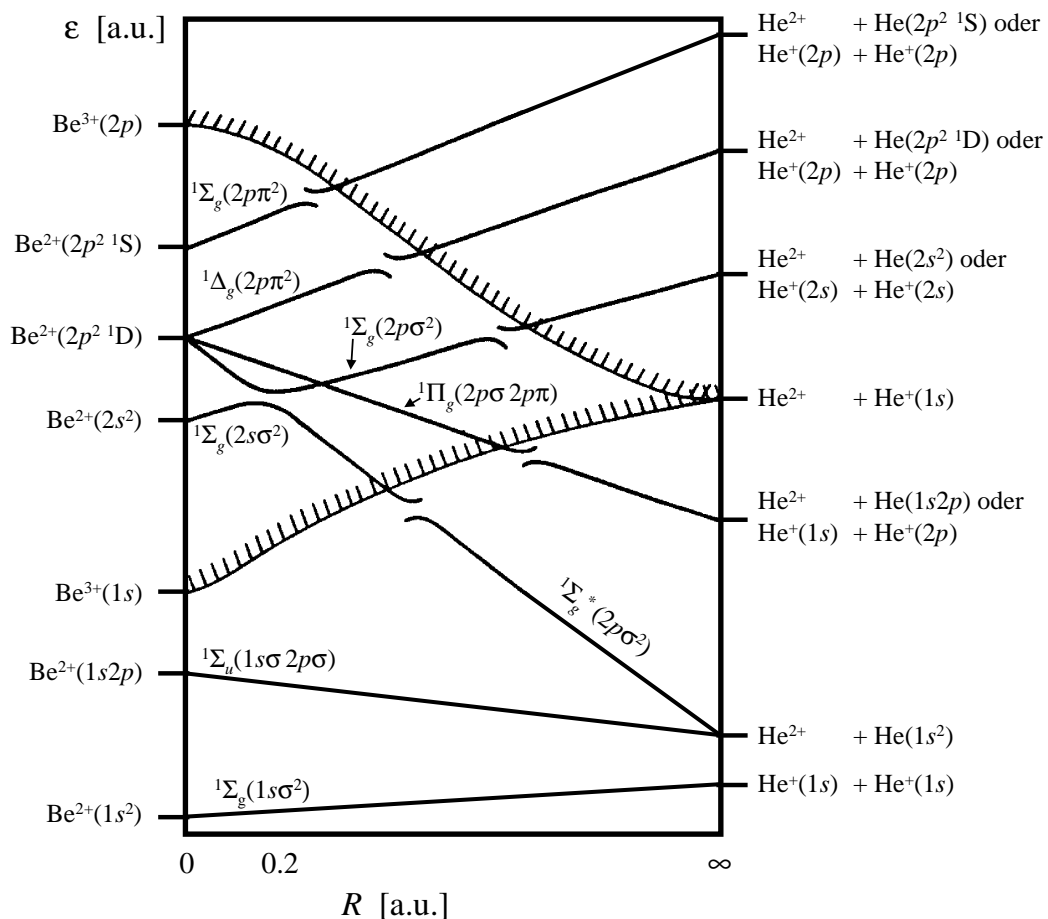


Abbildung 2.6: Korrelationsdiagramm (skizzierte Darstellung der Potentialkurven zur Verdeutlichung der Reaktionswege) des He_2^{2+} -Quasimoleküls (aus [78]): Für kleine Kernabstände ist der exakte Verlauf der oberen fünf adiabatischen Zustände in Abbildung 2.5-links zu finden. Zu großen Kernabständen wird die Entwicklung eines in diesen Zuständen befindlichen Systems skizziert (diabatische Zustände wie z.B. $^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$). Die Vermiedenen Kreuzungen mit Zuständen gleicher Symmetrie, die unterhalb der Potentialkurven des He_2^{3+} -Moleküls liegen, sind angedeutet.

Zustand dem diabatischen ${}^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ -Zustand. Unterhalb der Potentialkurven des He_2^{3+} -Moleküls sind die oben am Beispiel dieses Zustandes diskutierten Vermiedenen Kreuzungen mit Bändern von Zuständen gleicher Symmetrie angedeutet. Der ${}^1\Pi_g$ -Zustand z.B. führt über diese Vermiedenen Kreuzungen entweder zu einem SC oder DC in einfach angeregte Zustände. Die Besetzung der Zustände ${}^1\Sigma_g(2p\pi^2)$, ${}^1\Sigma_g(2p\sigma^2)$ und ${}^1\Delta_g(2p\pi^2)$ führt auch zu Endzuständen oberhalb der Autoionisationsschwelle, d.h. zum autoionisierenden DC (ADC). Bei schnellen, engen Stößen liefert die Entwicklung des Systems entlang dieser Wege einen nennenswerten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt. Ein Reaktionsweg für den ungeraden Anteil im Anfangszustand, der zum ADC führt, wird in der Literatur nicht diskutiert.

2.9.1 Die Ionisationsprozesse im quasimolekularen Bild

Für das Kontinuum besitzt der Hamiltonoperator ein kontinuierliches Eigenwertspektrum, d.h., es kann im Korrelationsdiagramm nicht sinnvoll dargestellt werden. In den Abbildungen 2.4 und 2.6 sind, zusätzlich zu den Potentialkurven des He_2^{2+} -Moleküls, auch solche des He_2^{3+} -Moleküls abgebildet, die im Grenzfall vereinigter Atome gegen die Bindungsenergien im Be^{3+} -Ion streben. Diese können mit einem Zustand gleichgesetzt werden, bei dem ein Elektron in das Kontinuum gehoben wurde und sich in ausreichender Entfernung zum Molekül in Ruhe befindet, so daß es keine kinetische Energie trägt, und die Wechselwirkung mit dem He_2^{3+} -Molekül zu vernachlässigen ist. Zustände, bei denen sich das emittierte Elektron vom Ursprung im molekularen Bezugssystem entfernt, liegen darüber. In Abbildung 2.6 sind diese durch die kurzen, schrägen Linien angedeutet.

Wie in der Darstellung eines Ionisationsprozesses durch Korrelationsdiagramme, so ist auch bei der Konstruktion einer Basis für eine quantenmechanische Rechnung die Einbeziehung des Kontinuums schwierig und mit extrem hohem Rechenaufwand verbunden. Auch unterhalb der Kontinuumsgrenze liegen strenggenommen schon beliebig viele molekulare Rydbergzustände, die nicht alle berücksichtigt werden können. Hinzu kommt, daß Impulsverteilungen der statischen molekularen Zustände nicht die Expansion des Moleküls berücksichtigen. Die schwach gebundenen Zustände, deren Impulsverteilungen schmal sind gegenüber $m_e v_p$, sind nur noch bedingt geeignet, um die Wellenfunktion mit einer beschränkten Basis darzustellen. Im "Hidden-Crossings"-Modell äußert sich dies darin, daß die Übergangswahrscheinlichkeiten an den Vermiedenen Kreuzungen gegen Eins streben.

Bei der Berechnung totaler Wirkungsquerschnitte ist die genaue Entwicklung des Systems in diesen hoch angeregten Zuständen oder im Kontinuum ohne große Bedeutung. Die Berechnung der Emissionscharakteristik der Elektronen ist jedoch aufgrund der genannten Schwierigkeiten für das untersuchte Stoßsystem bis jetzt nicht gelungen.

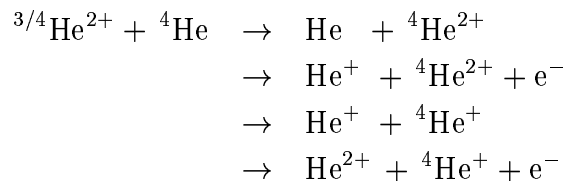
Auch wenn bei den Ionisationsprozessen die Beschreibung durch molekulare Zustände versagt, so besitzt das System doch weiterhin die molekularen Symmetrien. Besonders wichtig für die Impulsverteilung der emittierten Elektronen ist die Rotationssymmetrie um die Molekülachse. Wenn das System die hoch angeregten

Zustände bzw. das Kontinuum erreicht, haben sich die Kerne bereits so weit voneinander entfernt, daß die Molekülachse im Laborsystem fest ist und in guter Näherung der Strahlachse entspricht. Damit können die Zustände nach Eigenwerten des Drehimpulsoperators entlang dieser Achse klassifiziert werden. Zustände mit unterschiedlichen Eigenwerten können in dieser letzten Phase des Stoßes nicht mehr vermischt werden. Wie sich diese Quantisierung, die auch für die Kontinuumszustände gilt, in den gemessenen Verteilungen niederschlägt, wird in Abschnitt 5.7 genauer diskutiert.

Kapitel 3

Experimenteller Aufbau

Durch eine Koinzidenzmessung wurden die Reaktionen



kinematisch vollständig vermessen. Das Experiment wurde an der EZR-RFQ-Anlage [30, 88, 89, 90] im Institut für Kernphysik der Johann Wolfgang Goethe-Universität in Frankfurt/Main durchgeführt.

Dazu wurde mit Rückstoßionen-Impulsspektroskopie (COLd Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy = COLTRIMS) [1, 2, 3], welche erst in den letzten 10 Jahren entwickelt wurde, der Vektor des in der Reaktion auf das Target übertragenen Impulses bestimmt. Bei COLTRIMS werden alle ionisierten Targetatome, welche man auch als Rückstoßionen bezeichnet, durch ein schwaches elektrisches Feld auf einen Detektor projiziert. Es werden Feldkonfigurationen gewählt, bei denen der Impuls eindeutig aus der Flugzeit im Spektrometer und dem Nachweisort berechnet werden kann. Ein analoges Meßprinzip wurde auch für die Elektronen verwendet. Die relative Impulsänderung des Projektils beträgt bei den untersuchten Prozessen ca. 0.1% und ist somit experimentell schwer zugänglich. Der Projektilimpuls im Endzustand wurde über die Impulserhaltung berechnet.

In diesem Kapitel wird das Meßprinzip im Detail erklärt und auf die einzelnen Komponenten der Apparatur eingegangen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Beschreibung des Elektronenspektrometers, da die für die Untersuchung der Prozesse notwendige Meßgenauigkeit bei den Impulsvektoren der Elektronen am schwersten zu erreichen ist.

Die Funktionen, mit denen die Impulse aus den gemessenen Flugzeiten und Orten berechnet werden können, sind angegeben. Diese bestimmen die theoretisch erreichbare Auflösung des Spektrometers. Die tatsächlich im Experiment erreichte Auflösung wird in Kapitel 4 angegeben, wo die Auswertung der Rohdaten an Beispielen erklärt ist.

3.1 Das Meßprinzip

Die Abbildung 3.1 zeigt die wesentlichen Komponenten des Aufbaus. Der Anfangszustand der Projektionen wird durch eine Kollimationsstrecke und die Beschleunigungsspannung der Ionenquelle festgelegt. Ein Kondensatorplattenpaar, welches an einen Pulsgenerator angeschlossen ist, bietet die Möglichkeit, den kollimierten Strahl über eine Blende zu wedeln und so kurze Pulse von wenigen Nanosekunden Länge zu erzeugen. Kurz vor dem Spektrometer wird der Projektilstrahl elektrostatisch in horizontaler Richtung abgelenkt, um Verunreinigungen, die durch Umladungsprozesse im Strahlrohr entstehen, zu separieren. Im Spektrometer definiert der Überlapp zwischen dem Projektilstrahl und einem Atomstrahl, die sich unter 90° kreuzen, das Reaktionsvolumen.

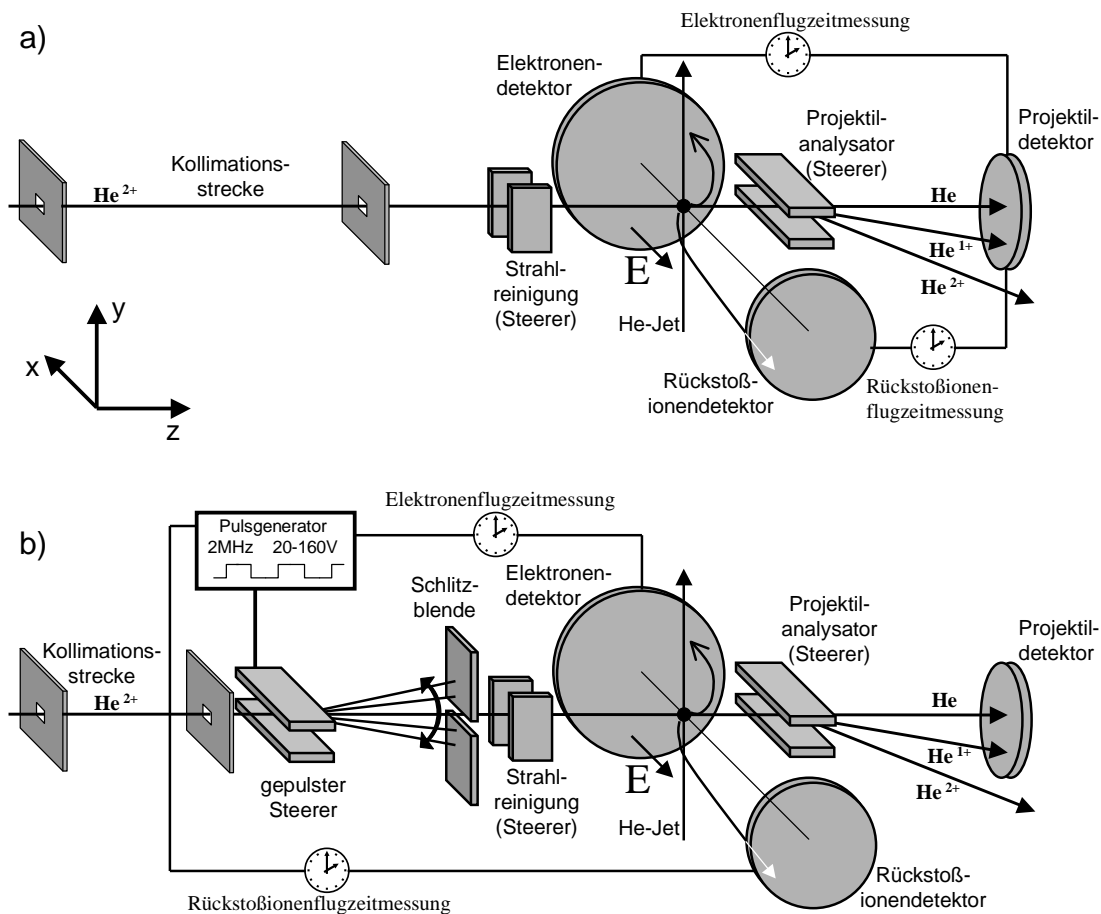


Abbildung 3.1: Skizze des experimentellen Aufbaus a) mit Nachweis des Projektils und b) mit Strahlpulsung zur Bestimmung der Elektronen- und Rückstoßionenflugzeit. Aufbau a) wurde für die Vermessung der Elektroneneinfangreaktionen und der Transferionisation verwendet. Die Flugzeitinformation bei den Ionisationsmessungen kann nur mit Aufbau b) bestimmt werden, da die He^{2+} -Projektile wegen zu hoher Zählrate nicht auf dem Projektil-detektor nachgewiesen werden können.

Die Projektile werden nach der Reaktion erneut durch elektrostatische Ablenkung in vertikaler Richtung nach Ladungszuständen getrennt. Für jeden Ladungszustand vor und nach der Targetzone ergibt sich somit ein anderer Nachweisbereich auf dem Projektildetektor. Durch Ausblenden von bestimmten Bereichen auf dem Projektildetektor können so bei einer koinzidenten Messung aller Teilchen ein oder mehrere der Reaktionskanäle ausgewählt werden.

Das ionisierte Targetatom und das freie Elektron werden durch ein elektrisches Feld in der Targetregion auf je einen Detektor projiziert, der den Nachweisort und -zeitpunkt bestimmt. Die Trajektorien der beiden Teilchen hängen dabei wesentlich von den Impulsen ab, mit denen die Teilchen aus der Reaktion hervorgegangen sind, so daß diese aus den Flugzeiten und den Nachweisorten berechnet werden können.

Der Reaktionszeitpunkt ist experimentell nicht direkt zugänglich, daher können nur Flugzeitdifferenzen gemessen werden. Die Projektilgeschwindigkeit kann jedoch in guter Näherung als konstant angenommen werden, so daß der Reaktionszeitpunkt berechnet werden kann, wenn an einer bestimmten Stelle entlang der Projektiltrajektorie eine Zeitmessung erfolgt.

In den durchgeführten Messungen wurden, abhängig von dem zu untersuchenden Reaktionskanal, zwei verschiedene Methoden verwendet:

1. Nachweis der Projektile nach der Reaktion auf einem Projektildetektor (siehe Abschnitt 3.6):

Die Zeitauflösung des Projektildetektors liegt im Bereich von 0.5 ns und trägt damit nicht wesentlich zum Fehler der Flugzeitmessungen bei. Weiterhin kann der Ladungszustand der Projektile bestimmt werden. Für die Messung der Einfachionisation (SI) ist der Projektildetektor jedoch nicht geeignet, da die durch das Produkt aus Targetdichte und Wirkungsquerschnitten bestimmten Reaktionswahrscheinlichkeiten nur im Bereich 10^{-6} bis 10^{-4} liegen, und die Projektile aufgrund ihres Ladungszustandes nicht von solchen getrennt sind, die ungestört das Target passiert haben. Die notwendige Beschränkung der möglichen Projektilrate würde bei der Vermessung der SI zu unrealistisch langen Meßzeiten führen.

2. Präparation von kurzen Projektilpulsen vor der Reaktionszone (siehe Abschnitt 3.2.1):

Ein Strahlpulser arbeitet bei den verwendeten Strahlströmen unabhängig von der Projektilrate. Die Reaktionsrate ist lediglich dadurch beschränkt, daß bei einer Koinzidenzmessung die Reaktionswahrscheinlichkeit pro Strahlpuls so klein gehalten werden muß, daß mehrere Reaktionen in einem Puls ausreichend unwahrscheinlich sind. Somit ist die Strahlpulsung auch für die Vermessung der SI geeignet. Mit dem für dieses Experiment konstruierten und aufgebauten System konnte die gute Zeitauflösung des Projektildetektors jedoch nicht erreicht werden. Außerdem enthalten die so aufgenommenen Daten einen höheren Untergrund, da die direkte Bestimmung des Ladungszustandes durch den Projektildetektor entfällt.

3.2 Projektilpräparation

Die Strahlenergie ist durch die Beschleunigungsspannung mit einer Genauigkeit von ± 100 eV festgelegt. Zur Lokalisierung des Targets und Festlegung der Strahlrichtung wird der Strahl der EZR-Ionenquelle, der eine Emittanz von mehr als 100π mm mrad hat, auf ca. 1π mm mrad kollimiert. Die auch nach der Kollimationsstrecke immer noch sehr große Strahldivergenz von ca. 100 mrad ist für das durchgeführte Experiment ausreichend klein, da keine Projektilstreuwinkel gemessen wurden.

Die gemessenen Rückstoßionen- und Elektronenimpulse werden in einem Kartesischen Koordinatensystem dargestellt und ausgewertet, dessen z -Achse durch die Strahlrichtung definiert ist. Deshalb liefert die Strahldivergenz einen Beitrag zum Fehler der Meßergebnisse, der jedoch gegenüber der Auflösung des Spektrometers vernachlässigt werden kann.

In die Kollimationsstrecke können zusätzliche Blenden und elektrostatische Ablenkplatten hineingefahren werden, welche die Erzeugung von Strahlpulsen mit einer Länge von ca. 2 ns ermöglichen.

3.2.1 Strahlpulsung

An dem niederenergetischen Strahlzweig der Frankfurter EZR-RFQ-Anlage stand keine Strahlpulsung zur Verfügung. Sie mußte deshalb für das durchgeführte Experiment mit möglichst einfachen Mitteln aufgebaut werden. Aufgrund der zu messenden Flugzeiten sind eine Pulslänge im Bereich weniger Nanosekunden und ein Pulsabstand von mindestens 200 ns erforderlich.

Eine Möglichkeit der Erzeugung gepulster Strahlen, ohne Reduktion des über die Zeit gemittelten Ionenstroms, ist die Geschwindigkeitsmodulation der Ionen, so daß diese nach einer Driftstrecke zu kurzen Paketen zusammenlaufen. Diese Methode ist jedoch mit erheblichem Aufwand verbunden und außerdem in dieser speziellen Anwendung nicht sinnvoll, da damit nach dem Liouvilleschen-Satz die Stromdichte im Phasenraum nicht erhöht werden kann und die Emittanz der Ionenquelle bereits wesentlich größer ist als die verwendbare.

Mit dem verwendeten Strahlpulser wird der Strahl in den Pulspausen auf Blenden gelenkt. Dadurch ist der zeitlich gemittelte Strahlstrom entsprechend dem Verhältnis zwischen Pulslänge und Pulsabstand reduziert. Die Ablenkung der Projektile erfolgt elektrostatisch in vertikaler Richtung (y -Achse) mit einem Plattenkondensator der Länge $l_c = 85$ mm und dem Plattenabstand $d = 6$ mm und mit einer Frequenz von maximal 2 MHz. Der aus der Strahlachse herausgelenkte Anteil des Projektilstrahls wird nach einer Drift der Länge $l_d = 100$ cm auf einer Schlitzblende vernichtet. Aufgrund der geringen Projektilgeschwindigkeit von 1-2 mm/ns ist die Durchflugzeit der Projektionen durch den Kondensator lange im Vergleich zur angestrebten Pulslänge und auch länger als die Anstiegszeit schneller Pulsgeneratoren. Der auf die Projektile, welche sich zur Zeit t_0 in der Mitte des Kondensators befinden, übertragene Impuls in Ablenkrichtung p_y ergibt sich bei Vernachlässigung der Randfelder des Kondensators aus der Integration der elektrostatischen Kräfte

$K(t) = qE(t) = qU_P(t)/d$ über die Durchflugzeit durch den Kondensator. Die Änderung der Strahllage am Ort der Blende y_{Blende} aufgrund der Ablenkung im Pulsfeld errechnet sich für Projektile der Masse m_p und Ladung q daraus zu

$$y_{Blende}(t_0) = \frac{l_d}{v_p m_p} \int K(t) dt = \frac{l_d}{v_p m_p} \int_{t_0 - \frac{l_c}{2v_p}}^{t_0 + \frac{l_c}{2v_p}} \frac{q U_P(t)}{d} dt. \quad (3.1)$$

Zur Berechnung der Pulslänge betrachten wir hier zunächst den idealisierten Fall eines Projektilstrahls mit vernachlässigbarer Ausdehnung in y -Richtung. Da die Blende eine endliche Öffnung hat, ist die Geschwindigkeit dy_{Blende}/dt_0 , mit der der Projektilstrahl die Blende überstreicht, entscheidend für die erreichbare Länge des Pulses:

$$\frac{dy_{Blende}}{dt_0} = \frac{l_d}{v_p m_p} \frac{q}{d} \left(U_P(t_0 + \frac{l_c}{2v_p}) - U_P(t_0 - \frac{l_c}{2v_p}) \right). \quad (3.2)$$

Nach Gleichung 3.2 hängt dieser Wert nicht vom konkreten Verlauf der Spannung $U_P(t)$ ab, sondern nur von der Spannung beim Ein- bzw. Austritt der Projektile aus dem Kondensator.

Nur solche Projektile, bei denen die Polarität des Feldes wechselt, wenn sie etwa die Hälfte der Strecke im Kondensator zurückgelegt haben, werden in der ursprünglichen Richtung weiterfliegen und können die Blende passieren. Es entstehen während einer Periode des Pulsenerators zwei Strahlpulse, die der auf- bzw. absteigenden Flanke der Pulserspannung zugeordnet sind. Der Verlauf der Spannung an den Kondensatorplatten ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Da die beiden Pulsflanken kürzer sind als die Projektilflugzeit durch den Kondensator, gilt für diese Projektile $U_P(t_0 - \frac{l_c}{2v_p}) = -U_P(t_0 + \frac{l_c}{2v_p}) = \pm U_{P,0}$. Daraus ergibt sich

$$\frac{dy_{Blende}}{dt_0} = \frac{l_d}{v_p m_p} \frac{q}{d} 2 U_{P,0}. \quad (3.3)$$

Bei einer Blendenöffnung von 1 mm ist bei der oben angegebenen Geometrie eine Pulseramplitude $U_{P,0}$ von mindestens 80 V erforderlich, um eine Pulslänge von 1 ns zu erreichen.

Ein endlicher Strahldurchmesser führt, auch bei infinitesimal kleiner Öffnung der Blende, über zwei Effekte zu einer endlichen Pulslänge:

Ionen, die im Kondensator einen bestimmten Abstand von der Strahlachse haben, passieren ebenfalls die Blende auf der Strahlachse, wenn sie kurz vor bzw. nach dem Zeitpunkt t_0 durch den Kondensator fliegen, so daß daraus die richtige Ablenkung zur Strahlachse hin resultiert.

Im elektrischen Randfeld des Kondensators wird die kinetische Energie der Projektile entsprechend dem elektrischen Potential leicht verändert. Durch den Wechsel der Polarität des Pulsfeldes beim Durchflug der Projektile heben sich die Effekte beim Ein- und Austritt aus dem Kondensator nicht mehr auf und, abhängig von der Lage der Trajektorie im Strahlprofil, verändert sich die Projektilgeschwindigkeit und damit auch die Pulsform bzw. -länge während der Drift zur Targetzone.

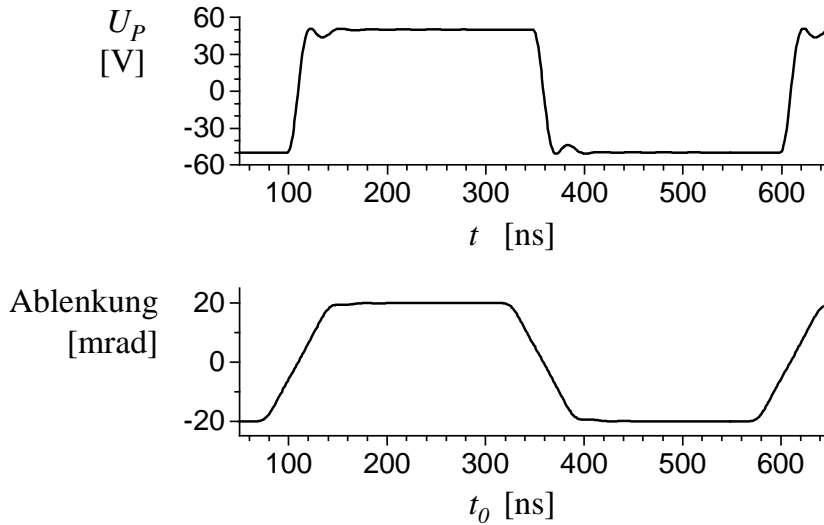


Abbildung 3.2: Pulserspannung U_P und resultierende Ablenkung von He^{2+} -Projektilen in der Mitte der Ablenkplatten für die Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.6$ a.u. und Pulseramplitude $U_{P,0} = 50$ V. Die Anstiegszeit der Pulserspannung ist mit ca. 20 ns deutlich kürzer als die Durchflugzeit der Projektilen durch den Plattenkondensator von 65 ns.

Für einen Parallelstrahl heben sich diese beiden Einflüsse der Strahlausdehnung im Kondensator auf, wenn folgende Bedingung (siehe Anhang E) erfüllt ist:

$$U_{P,0} = U_{\text{Quelle}} \frac{d}{l_d} \quad (3.4)$$

Gemäß dieser Gleichung wurde die Pulserspannung an die Geometrie und Quellenspannung angepaßt. Um eine ausreichende Intensität im gepulsten Strahl zu erhalten, dürfen die Blenden und Kollimatoren nicht zu weit geschlossen werden. Deshalb wurde mit gepulstem Strahl für die Elektronenflugzeitmessung eine Auflösung (FWHM) von nur 3 ns erreicht.

3.3 Das Target

An das Gastarget werden zwei Anforderungen gestellt: Es muß in Strahlrichtung gut lokalisiert sein, und die interne Temperatur muß so klein sein, daß die thermische Bewegung vernachlässigbar gegenüber den in Stoßprozessen auf das Target übertragenen Impulsen von 0.2 bis 20 a.u. ist. Diese Impulsüberträge entsprechen Energien zwischen nur 0.1 meV und 1 eV. Daraus folgt, daß die Targettemperatur unterhalb von 1 K liegen muß. Mit einem Ultraschallgasjet können die genannten Anforderungen erfüllt werden.

In dem verwendeten zweistufigen Jetsystem wird Helium mit Raumtemperatur

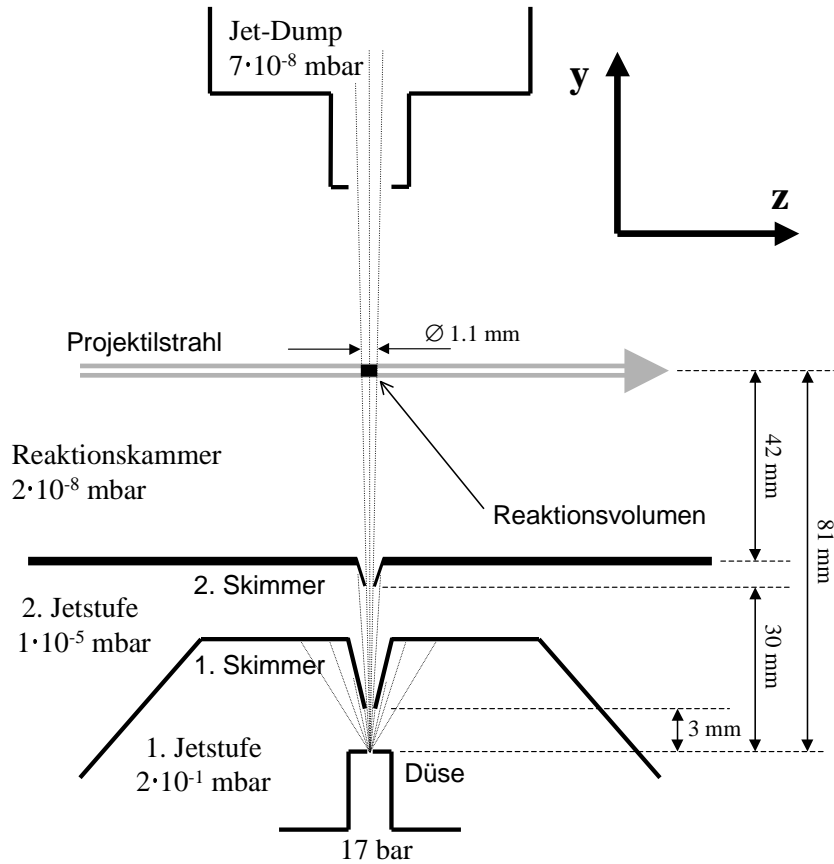


Abbildung 3.3: Skizze des Jetsystems.

T_0 und einem Druck von 17 bar durch eine kleine Düse mit 30 μm Durchmesser adiabatisch in ein Vakuum von $2 \cdot 10^{-1}$ mbar expandieren lassen. Dabei wird die Enthalpie des Gases in die kinetische Energie einer gerichteten Bewegung umgewandelt, und die Gasatome erhalten eine Geschwindigkeit von

$$v_{jet} = \sqrt{5kT_0/m} = 1760 \text{ m s}^{-1} \quad \text{mit } T_0 = 300 \text{ K}, \quad (3.5)$$

was einem Impuls von $p_{jet} = 5.9$ a.u. entspricht. Aufgrund des Restdruckes in der Expansionskammer bildet sich nur eine räumlich beschränkte Zone von einigen Millimetern Länge aus, in der sich die Helium-Atome nahezu ohne Stöße bewegen. Im Randbereich dieser sogenannten "zone of silence" wird das Gas durch Wechselwirkung mit dem Restgas abgebremst. Durch eine speziell geformte Blendenöffnung an der Spitze eines Hohlkegels (Skimmer), welcher in diese Zone eingetaucht wird, wird ein kleiner Teil der expandierenden Atome herausgeschält.

Dieser Teil bildet einen Strahl, der sich in der anschließenden zweiten Vakuumkammer bei wesentlich besserem Grundvakuum von ca. $1 \cdot 10^{-5}$ mbar ohne Wechselwirkung mit dem Restgas gemäß seiner Divergenz weiter aufweitet. Vor dem Eintritt in die Reaktionskammer wird er mit einem zweiten Skimmer, der einen Abstand von

30 mm zur Düse hat, auf einen Durchmesser von 0.4 mm ausgeblendet. In der Reaktionszone besitzt der Targetstrahl eine Divergenz von nur 14 mrad. Durch die kleinen Durchmesser der Skimmer ist weiterhin sichergestellt, daß der Fluß an warmem Helium in die Targetkammer aufgrund des niedrigen Leitwertes so klein ist, daß dort das Vakuum nicht beeinträchtigt wird.

Nach der Kreuzung mit dem Projektilstrahl im Spektrometer tritt der Jet durch eine differentielle Pumpstufe aus der Targetkammer in den sogenannten Jet-Dump ein, wo er auf die Wand trifft, und der dabei entstehende Gasanfall von ca. $3 \cdot 10^{-5} \text{ mbar l s}^{-1} = 8 \cdot 10^{14} \text{ Atome/s}$ bei einem Druck von etwa $1 \cdot 10^{-7} \text{ mbar}$ abgepumpt wird.

In der Targetkammer wurde mit eingeschaltetem Jet ein Vakuum von $7 \cdot 10^{-8} \text{ mbar}$ erreicht, was einer Volumendichte der Restgasatome von etwa $2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ entspricht. Auf der von den Projektilen innerhalb des Spektrometers zurückgelegten Strecke ergibt sich daraus eine Flächenbelegung von etwa $1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Die Teilchendichte im Jet wurde aus dem Gasanfall im Jet-Dump mit $4.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ abgeschätzt. Dies entspricht einer Flächendichte des Targets von etwa $5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Der Jetdurchmesser beträgt bei der Kreuzung mit dem Projektilstrahl 1.1 mm. Daraus ergibt sich für die verwendeten Projektilgeschwindigkeiten zwischen 1.3 mm/ns und 2.3 mm/ns eine Flugzeit der Projektile durch das Targetvolumen von 0.5 bis 0.8 ns. Diese Zeit geht als Fehler in die Flugzeitmessungen ein.

Die interne Temperatur des Jets nach der Expansion ergibt sich in Jetrichtung aus dem Speedratio S zu

$$T = T_0 \frac{5}{2} S^2. \quad (3.6)$$

Das Speedratio beträgt nach [91] für den verwendeten Jet etwa 40, woraus sich eine Impulsunschärfe (FWHM) in Jetrichtung von ca. 0.25 a.u. ergibt. Transversal errechnet sich die Impulsschärfe aus der Jetgeschwindigkeit und der durch die Geometrie der Skimmer und der Düse gegebenen Divergenz des Atomstrahls zu 0.08 a.u.

3.4 Detektoren und Nachweiswahrscheinlichkeiten

Voraussetzung für die Durchführung von COLTRIMS-Experimenten ist die Verfügbarkeit von zweidimensional ortsauflösenden Detektoren mit einer Zeitauflösung unter 1 ns. Wünschenswert ist außerdem, daß Raten von mehr als 10 kHz noch verarbeitet werden können. Die geforderten Bedingungen werden von Micro-Channel-Plates mit Ortsauslese über eine Delay-Line-Anode [92] erfüllt. Ein Micro-Channel-Plate (MCP) ist eine 0.5 bis 1 mm dicke Scheibe, in der sich Kanäle von typischerweise 0.025 mm Durchmesser befinden. Elektronen, die in einem der Kanäle auf die Oberfläche treffen, lösen dort weitere Elektronen aus. Zwischen Vorder- und Rückseite wird eine Spannung von ca. 1 kV angelegt, so daß in den Kanälen eine Elektronen-

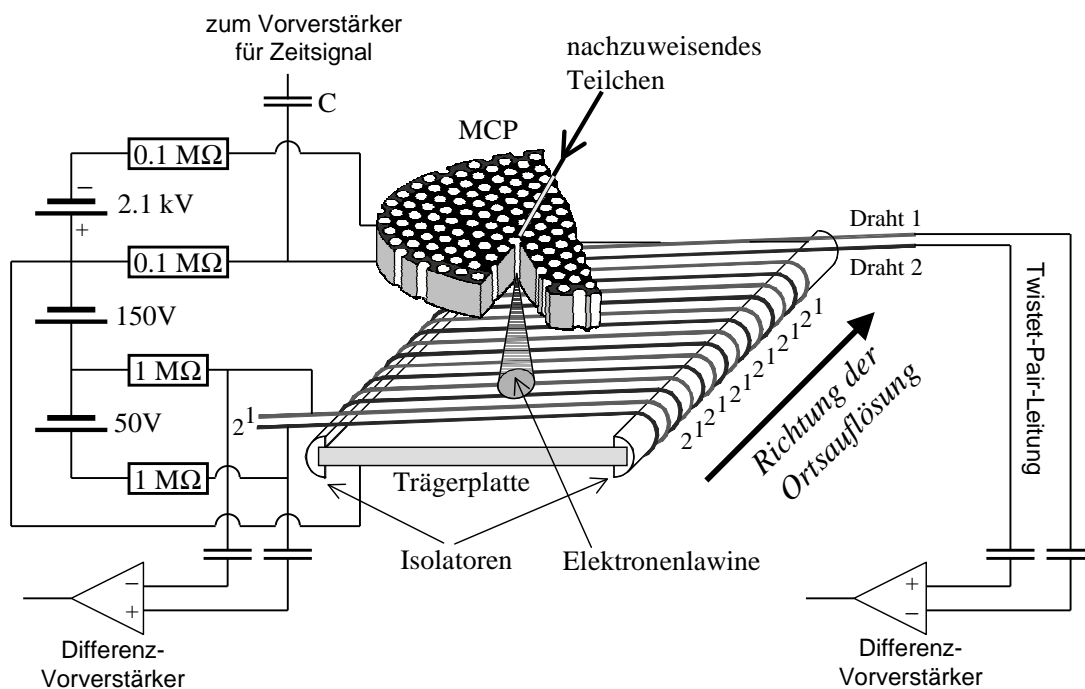


Abbildung 3.4: Skizze eines MCP-Detektors mit eindimensionaler Ortsauslese. Für eine zweidimensionale Ortsauslese wird eine zweite um 90° gedrehte Drahtebene um die Trägerplatte gewickelt.

lawine entsteht.

MCPs werden in einem Vakuum besser als $1 \cdot 10^{-5}$ mbar betrieben, d.h., die Voraussetzungen zum Einsatz in der Targetkammer sind erfüllt. In diesem Experiment wurden für die drei Detektoren je zwei MCPs in Chevron-Anordnung [93] verwendet, wodurch eine Ladungsverstärkung von ca. $1 \cdot 10^6$ erreicht wird.

Die entstandene Elektronenwolke tritt auf der Rückseite der MCPs aus und wird mit einem elektrischen Feld von einigen 10 V/mm auf die Anode transportiert, welche zur Ortsbestimmung verwendet wird. Die Spannungen am MCP werden über hohe Widerstände ($> 100 \text{ k}\Omega$) angelegt, so daß durch den Entzug der negativen Ladungen beim Austritt der Elektronenlawine ein kurzer positiver Spannungspuls (ca. 1 ns) entsteht, welcher kapazitiv ausgekoppelt wird und als Zeitsignal für Flugzeitmessungen zur Verfügung steht. Die Ortsbestimmung erfolgt mit der Anode und wird hier zunächst für eine Dimension erklärt.

Eine eindimensional ortsauflösende Anode besteht im Prinzip aus einer quadratischen Trägerplatte, um die ein Draht gewickelt ist, der jedoch zu dieser keinen elektrischen Kontakt hat. Eine Ladungswolke, die auf diese Drahtwicklung trifft, erzeugt dort einen Spannungspuls, der sich in beide Richtungen ausbreitet. Aus den Zeiten, zu denen das Signal die beiden Enden der Wicklung erreicht, kann die Ortsinformation für eine Raumrichtung gewonnen werden.

Um auf dieser Wicklung eine dispersionsarme Signalausbreitung zu erhalten, ist

diese als Doppelwicklung realisiert, d.h., es verlaufen zwei Drähte parallel zueinander (siehe Abbildung 3.4), die in der Nachweisebene ein Stabgitter bilden. Beide Drähte sind positiv in Bezug zur Rückseite der MCPs, so daß die Elektronenlawine vom MCP auf die Anode gesaugt wird. Zwischen den beiden Drähten wird jedoch eine solche Spannungsdifferenz angelegt, daß Elektronen nur auf einen der beiden, den sogenannten Signaldraht, treffen und sich so lokal die Spannungsdifferenz zum zweiten, dem sogenannten Differenzdraht, ändert. Dieser Puls in der Spannungsdifferenz breitet sich dann wie auf einer Lecherleitung aus.

Da nur ein Teil der Elektronenlawine auf den Signaldraht trifft, können zwei solcher Doppelwicklungen in zwei Ebenen in einem Abstand von ca. 1 mm und um 90° gegeneinander gedreht übereinandergelegt werden. Damit erhält man die Ortsauflösung in zwei Dimensionen. Von den vier Enden der zwei Doppelwicklungen werden die Signale mit je einer "Twistet-Pair"-Leitung aus der Reaktionskammer geführt, kapazitiv vom Gleichspannungspotential entkoppelt und die Pulse in der Spannungsdifferenz verstärkt.

Die Elektronenwolke weitet sich zwischen MCP und Anode so auf, daß mehrere Wicklungen getroffen werden, d.h., in jeder Drahtebene entstehen mehrere dicht aufeinanderfolgende Signale. Durch Schwerpunktbildung, die über eine geeignete Zeitkonstante der Differenzverstärker erreicht wird, kann der Ort wesentlich genauer bestimmt werden als der Wicklungsabstand der Drahtpaare von 1 mm. Erreichbar ist eine Ortsauflösung von 0.1 mm und besser.

Auch der Nachweis von Atomen und Ionen ist mit MCP-Detektoren möglich, wenn die kinetische Energie der Teilchen ausreicht, um aus der Oberfläche Elektronen herauszulösen. Beim Einsatz als Projektildetektor ist dies bei Projektilenergien von mehr als 10 keV immer gegeben. Im Spektrometer werden die Rückstoßionen jedoch nur mit einer Spannung von typischerweise 70 V auf den Detektor beschleunigt.

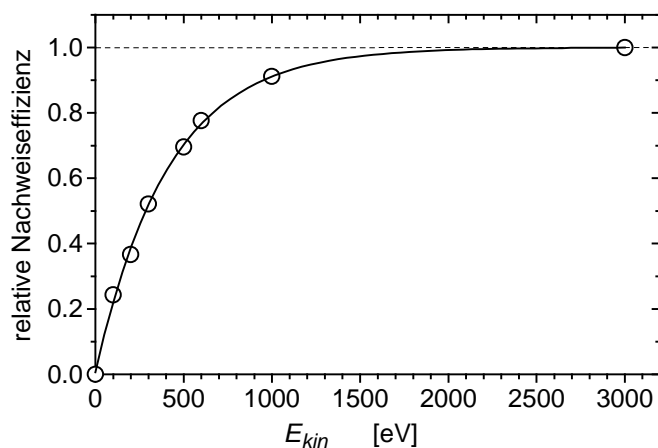


Abbildung 3.5: Nachweiseffizienz eines MCP-Detektors für He^+ -Ionen als Funktion der kinetischen Energie. Die Daten wurden bei $E_{kin} = 3 \text{ keV}$ auf Eins normiert. Die durchgezogene Linie ist der Fit mit einer Exponentialfunktion (aus [32]).

nigt. Aus diesem Grund müssen die Rückstoßionen vor dem MCP nochmals mit einer Spannung von mindestens 500 V nachbeschleunigt werden. Das Feld der Nachbeschleunigungsstrecke wird vom Spektrometerfeld durch ein Gitter getrennt. Bei den Messungen wurde eine Potentialdifferenz von 1000 V zwischen Targetvolumen und Vorderseite des MCP eingestellt. Aus Abbildung 3.5 ist zu entnehmen, daß die Nachweiswahrscheinlichkeiten von He^+ - und He^{2+} - Rückstoßionen aufgrund der unterschiedlichen kinetischen Energie um weniger als 10% voneinander abweichen. Die Abweichung geht als Fehler in die Bestimmung von Verhältnissen zwischen totalen Wirkungsquerschnitten von Reaktionskanälen mit unterschiedlichem Ladungszustand der Rückstoßionen ein.

Durch das inhomogene elektrische Feld im Bereich der Gittermaschen werden die Ionen stark fokussiert. Damit ist die Auflösung des Detektors auf die Maschenweite des Eintrittsgitters beschränkt. Für den Rückstoßionendetektor wurde ein besonders feines Gitter mit 0.05 mm Maschenweite, welches allerdings eine Transmission von nur 50% hat, verwendet. Alle anderen Gitter hatten eine Maschenweite von 0.25mm und eine Transmission größer als 80%.

3.5 Das Impulsspektrometer

Das Funktionsprinzip des Spektrometers ist, das ionisierte Target und ein Elektron mit einem solchen elektrischen Feld aus der Targetzone auf je einen Detektor abzusaugen, daß aus den Flugzeiten und den Nachweisorten die in der Reaktion auf die Teilchen übertragenen Impulse berechnet werden können. Es ist dazu nicht nötig, durch Blenden bestimmte Trajektorien auszuwählen, so daß Teilchen von Startimpuls Null bis zu einer bestimmten Maximalenergie mit 4π Raumwinkel nachgewiesen werden können. Im verwendeten Spektrometer ist das elektrische Feld im Bereich des Reaktionsvolumens homogen und steht senkrecht zur Projektil- und Jetrichtung.

Auf dem Weg zum jeweiligen Detektor durchfliegen die nachzuweisenden Teilchen Driftzonen und zum Teil auch fokussierende Felder, welche die Auflösung des Spektrometers verbessern.

Beim Design des für die durchgeführte Messung optimierten Spektrometers galt es, eine Geometrie zu finden, in der die aktiven Flächen der Detektoren bei den zu erwartenden Impulsverteilungen möglichst gut ausgenutzt werden. Insbesondere der große Massenunterschied der Fragmente machte dies problematisch.

Die Geschwindigkeit der Elektronen liegt in der Größenordnung der Projektilgeschwindigkeit von 2 mm/ns. Da die Größe der verfügbaren Detektoren die Abmessungen des Elektronenspektrometers beschränken, sind die Elektronenflugzeiten entsprechend kurz und die in der Flugzeit enthaltene Information über den Elektronenimpuls mit einem großen Fehler behaftet. Das Spektrometerdesign wurde daraufhin optimiert, diesen Fehler auf ein erträgliches Maß zu reduzieren.

Die Abbildung 3.6 zeigt einen Schnitt durch das Spektrometer, welches für die in dieser Arbeit vorgestellten Messungen konzipiert wurde. Im Folgenden wird auf die beiden Hälften, das Elektronen- und das Rückstoßionenspektrometer, näher ein-

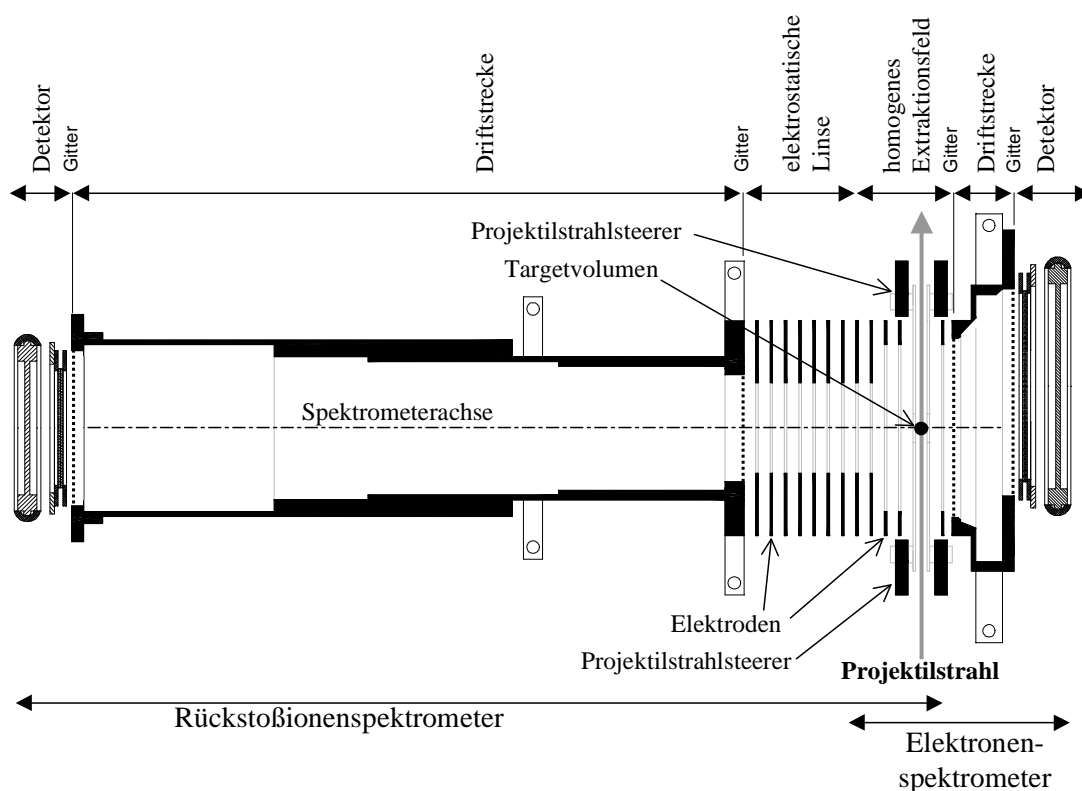


Abbildung 3.6: Skizze des Impulsspektrometers: Das Spektrometer ist im wesentlichen zylindersymmetrisch um die Spektrometerachse aufgebaut. Das elektrostatische Spektrometerfeld kann in ein weitgehend homogenes Extraktionsfeld und ein Linsenfeld unterteilt werden. Es wird zwischen zwei Gittern erzeugt und durch 14 ringförmige Elektroden im regelmäßigen Abstand von 5.5 mm, deren Potential durch eine Kette von 15 Widerständen zwischen den Gittern definiert wird, geformt. Abweichend von der Zylindersymmetrie sind zwei dieser Ringelektroden unterbrochen, um eine für den Durchtritt des Projektil- und Targetstrahls ausreichende Öffnung zu erhalten. Weiterhin ist der Detektor im Elektronenspektrometer in Richtung des Projektilstrahls versetzt. Der Rückstoßionendetektor hat einen Durchmesser von 50 mm und zum Target einen Abstand von 355 mm. Beim Elektronendetektor beträgt der der Durchmesser 80 mm und der Abstand 39 mm.

gegangen. Das homogene, elektrostatische Feld im Reaktionsvolumen ist Teil beider Spektrometer. Die Feldstärke dort wurde für den Elektronennachweis optimiert.

3.5.1 Das Elektronenspektrometer

In den vergangenen Jahren wurden bereits mehrere Messungen mit Impulsspektrometern durchgeführt, die sowohl einen Rückstoßionen- wie auch einen Elektronendetektoren enthielten. Dabei kamen verschiedene Konzepte zum Einsatz.

In mehreren Experimenten [94, 95, 96, 97, 98] wurde ein homogenes Magnet-

feld parallel zum elektrischen Feld benutzt, welches die Elektronen senkrecht zur Feldrichtung auf Kreisbahnen zwingt und sicherstellt, daß alle Elektronen bis zu einer bestimmten Energie, welche durch den maximal möglichen Gyrationradius im Spektrometer festgelegt ist, nachgewiesen werden. Der Nachteil dieser Methode ist, daß alle Elektronen, deren Flugzeit in etwa einem ganzzahligen Vielfachen der Gyrationperiode entspricht, auf einen Punkt auf dem Detektor projiziert werden. In diesem Fall kann der zu messende Impuls nicht berechnet werden. Deshalb fiel in dieser Arbeit die Wahl auf ein magnetfeldfreies Spektrometer.

Von mehreren Gruppen wurden bereits Messungen ohne Magnetfeld durchgeführt. Diese kann man nach Messungen mit schwachem [99, 100, 101] bzw. starkem [6, 5, 4, 7, 102] elektrischem Feld klassifizieren.

Bei kleiner elektrischer Feldstärke ist zwar eine hohe Impulsauflösung für das Rückstoßion und das Elektron zu erreichen, aber die Elektronen nehmen im elektrischen Feld nur wenig Energie auf. Ist diese klein gegenüber ihrer kinetischen Energie aus dem zu untersuchenden Prozeß, sind die Trajektorien in guter Näherung gerade, und die Elektronen werden nur mit dem geometrischen Raumwinkel auf dem Detektor nachgewiesen.

Bei hoher Feldstärke werden zwar auch schnelle Elektronen so in Richtung des Detektors beschleunigt, daß 4π Raumwinkel möglich sind, die Elektronenflugzeiten verkürzen sich dadurch jedoch so weit, daß sie in Größenordnung der Zeitauflösung der Detektoren liegen. Deshalb wurde in solchen Experimenten bisher auf die Elektronenflugzeitmessung verzichtet. Der Elektronenimpuls in Feldrichtung ist dadurch jedoch unbestimmt. Auch bei der Berechnung der Impulse senkrecht zum elektrischen Feld aus dem Nachweisort wird die genaue Flugzeit benötigt. Wird dabei für alle Ereignisse stattdessen die mittlere Flugzeit verwendet, welche aus einer Simulationsrechnung entnommen werden kann, so verzerrt dies die gemessene Elektronenverteilung [103]. Eine hohe Feldstärke am Targetort beschränkt außerdem die Auflösung, die für die Rückstoßionenimpulse erreicht werden kann.

Seit wenigen Jahren sind größere Detektoren mit Durchmessern von 80 mm und mehr verfügbar. Damit ist es möglich, ein Spektrometer ohne Magnetfeld zu konstruieren, was bei mittleren elektrischen Feldstärken die Vorteile der beiden Typen, nämlich voller Raumwinkel und Impulsauflösung in Flugzeitrichtung, in einem brauchbaren Kompromiß vereinigt. Die Geometrie wurde für den Nachweis von solchen Elektronen optimiert, deren Geschwindigkeitskomponente in Strahlrichtung zwischen Null und der Projektilgeschwindigkeit liegt. Dies ist der Bereich des Phasenraumes, in dem der wesentliche Teil der Elektronen aus den zu untersuchenden Stößen emittiert wird.

Die gewählte Geometrie des Elektronenspektrometers ergab sich aus den folgenden Rahmenbedingungen: Aufgrund der gegebenen Abmessungen des Jetsystems mußte der Elektronendetektor einen Mindestabstand von 32 mm von der Strahlachse haben. Aus konstruktiven Gründen wurde ein Abstand von 36 mm gewählt. Der Detektor mit einem Durchmesser von 80 mm wurde gegenüber der Spektrometerrachse um 20 mm in Strahlrichtung verschoben. Um bei Stößen mit Projektilen der Energie 25 keV u^{-1} die Elektronen, die mit der Projektilgeschwindigkeit von ca.

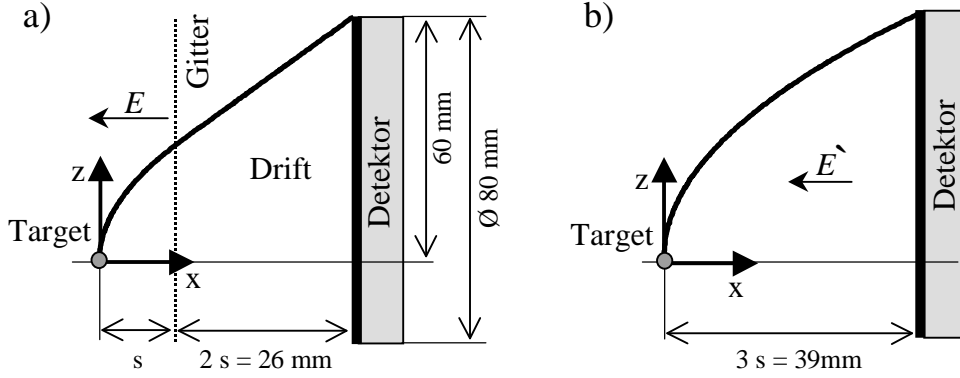


Abbildung 3.7: Vergleich von zwei unterschiedlichen Spektrometerkonzepten: a) flugzeitfokussierend mit Driftstrecke und b) ohne Driftstrecke. Für beide Geometrien ist die Trajektorie eingezeichnet, die ein Elektron beschreibt, welches aus dem Targetvolumen mit dem maximalen Impuls in Richtung der z -Achse emittiert wird, bei dem es gerade noch auf dem Detektor nachgewiesen werden kann. Wenn die Stärke der elektrischen Felder im Verhältnis $E/E' = 4/3$ steht, ist dieser maximale Impuls für beide Geometrien gleich groß.

$2 \cdot 10^6 \text{ ms}^{-1}$ in Strahlrichtung (z -Achse) emittiert werden, noch auf dem Detektor nachweisen zu können ($z < 60 \text{ mm}$), darf die Flugzeit maximal 30 ns betragen.

Es wurde eine flugzeitfokussierende Spektrometergeometrie (Abbildung 3.7-a) gewählt. Dabei muß die Reduktion der Nachweiswahrscheinlichkeit durch ein zusätzliches Gitter, welches die Beschleunigungsstrecke von der Driftstrecke trennt, in Kauf genommen werden. Die Flugzeit T_e zum Detektor als Funktion des Startortes in Feldrichtung $x_{0,e}$ (Abstand zum Gitter = $s + x_{0,e}$) und der Startgeschwindigkeit $v_{x,e}$ ergibt sich aus den Newtonschen Bewegungsgleichungen zu

$$T_e(x_0, v_{x,e}) = -\frac{v_{x,e}}{a_{elek}} + \sqrt{\frac{2s}{a_{elek}}} \left((f+1)^{1/2} + (f+1)^{-1/2} \right) \quad (3.7)$$

mit der Hilfsgröße

$$f(v_{x,e}, x_{0,e}) = \frac{v_{x,e}^2}{2s a_{elek}} + \frac{x_{0,e}}{s} = \frac{\frac{1}{2} m_e v_{x,e}^2}{s K_{elek}} + \frac{x_{0,e}}{s}$$

und der Beschleunigung der Elektronen im elektrischen Feld E_{Target}

$$a_{elek} = \frac{K_{elek}}{m_e} = \frac{e E_{Target}}{m_e}.$$

Dabei ist $\frac{1}{2} m_e v_{x,e}^2$ die kinetische Energie, die in der Bewegung entlang der x -Achse steckt und $s K_{elek}$ die Energie, die das Elektron bei der Bewegung im elektrostatischen Spektrometerfeld aufnimmt.

Durch Potenzreihenentwicklung erhält man für $f \ll 1$

$$T_e(x_0, v_{x,e}) = -\frac{v_{x,e}}{a_{elek}} + 2 \sqrt{\frac{2s}{a_{elek}}} \left[1 + \frac{1}{8} f^2 - \frac{1}{8} f^3 + \dots \right]$$

$$= -\frac{v_{x,e}}{a_{elek}} + 2\sqrt{\frac{2s}{a_{elek}}} \left[1 + \frac{1}{8} \left(\frac{E_{kin,0}}{qU} + \left(\frac{x_{0,e}}{s} \right)^2 + \dots \right) \right], \quad (3.8)$$

d.h., für ein gut lokalisiertes Target ($|x_{0,e}| \ll s$) ist die Flugzeit in guter Näherung unabhängig von der genauen Position innerhalb des Targetvolumens, und für kleine kinetische Energien ($E_{kin,e} \ll s K_{elek}$) besteht eine lineare Abhängigkeit vom Impuls $p_{x,e} = v_{x,e} m_e$. Unter diesen Bedingungen erhält man

$$T_e(p_{x,e}) = -\frac{p_{x,e}}{K_{elek}} + 2\sqrt{\frac{2s}{a_{elek}}}. \quad (3.9)$$

Das elektrische Feld ist im Elektronenspektrometer homogen, d.h., es wirken im idealisierten Fall keine Kräfte senkrecht zur Spektrometerachse (x -Achse). Zusammenfassend ergeben sich daraus mit der Näherung aus Gleichung 3.9 folgende Eichfunktionen für ein Elektronenspektrometer mit flugzeitfokussierender Geometrie:

$$p_{x,e} = (T_{e,0} - T_e) e E_{Target} \quad (3.10)$$

$$p_{y,e} = m_e \frac{y_e}{T_e} \quad (3.11)$$

$$p_{z,e} = m_e \frac{z_e}{T_e}. \quad (3.12)$$

Dabei sind y_e und z_e der Abstand des Nachweisortes in senkrechter bzw. horizontaler Richtung von der Spektrometerachse, und $T_{e,0}$ ergibt sich aus Gleichung 3.9 zu

$$T_{e,0} = T_e(0) = 2\sqrt{\frac{2s}{a_{elek}}} = 2\sqrt{\frac{2s}{E_{Target}} \frac{m_e}{e}}. \quad (3.13)$$

Für Elektronen, die genau in Strahlrichtung emittiert werden ($p_{x,e} = p_{y,e} = 0$), bestimmt die Zeit $T_{e,0}$ zusammen mit dem durch die Größe des Detektors beschränkten z_e den maximal nachweisbaren Impuls. Dieser wächst mit $T_{e,0}^{-1}$ bzw. der Wurzel von E_{Target} . Von der Feldstärke in der Targetzone hängt aber bei gegebenem Meßfehler von T_e die Auflösung von $p_{x,e}$ linear ab, d.h., verdoppelt man den maximal nachweisbaren Impuls in Strahlrichtung durch Vervierfachung der Feldstärke, so vervierfacht sich der Fehler von $p_{x,e}$. Es ist also angebracht, den Raumwinkel für den Elektronennachweis auf den wichtigsten Teil des Phasenraumes zu beschränken.

Abbildung 3.8 zeigt einen waagrechten Schnitt (senkrecht zur Jetrichtung) durch das Elektronenspektrometer. Die eingezeichneten Trajektorien wurden mit dem Programm SIMION3D [104] bei einer Spektrometerspannung U_{Spek} (Potentialdifferenz zwischen den Driftstrecken des Elektronenspektrometers und des Rückstoßionenspektrometers) von 92 V berechnet. Bei der verwendeten Widerstandskette, die die Potentiale an den Elektroden festlegt, ergibt sich daraus die Feldstärke nach der Gleichung

$$E_{Target} = U_{Spek} \cdot 0.0093 \text{ mm}^{-1} \quad (3.14)$$

zu $E_{Target} = 0.86 \text{ V mm}^{-1}$.

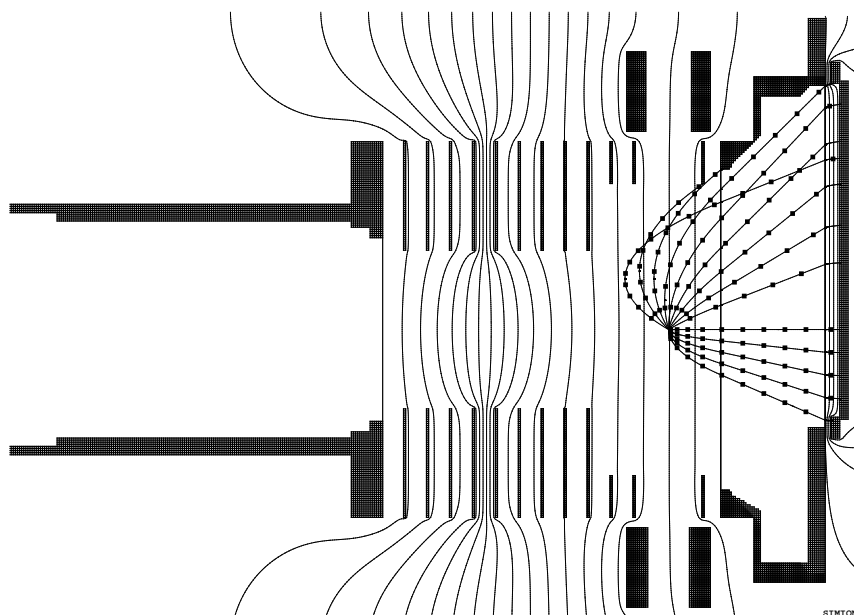


Abbildung 3.8: Berechnung der Elektronentrajektorien mit SIMION3D: Die Elektronen werden nach rechts auf den Elektronendetektor gesaugt. Der Abstand zwischen Targetzone und Elektronendetektor beträgt 39 mm, wobei 26 mm auf die Driftstrecke entfallen. In der oberen Bildhälfte besitzen die Elektronen einen Impuls von 1 a.u. und werden unter -75° , -60° , -45° , ..., 75° zur Strahlachse emittiert. In der unteren Hälfte wurden $p_{x,e} = p_{y,e} = 0$ und $p_{z,e} = 0, -0.05, -0.1, -0.15, -0.2$ a.u. gewählt. Das elektrostatische Feld im Extraktionsbereich beträgt $E_{Target} = 0.92 \text{ Vmm}^{-1}$. Die Quadrate entlang der Trajektorien markieren die Positionen der Elektronen nach 2.5, 5, 7.5, ... ns.

v_p (a.u.)	U_{Spektr} (V)	$T_{e,0}$ (ns)	$\frac{dp_{x,e}}{dT_e}$ (a.u. ns $^{-1}$)
0.63	40	40	0.03
0.67	68	30	0.05
0.71	52 - 68	31 - 35	0.04 - 0.05
0.74	68	31	0.05
0.78	68	31	0.05
0.84	68 - 90	27 - 31	0.05 - 0.06
0.95	84 - 90	27 - 28	0.06

Tabelle 3.9: Verwendete Spektrometerspannungen U_{Spektr} für Messungen bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten v_p und die daraus resultierenden Flugzeiten $T_{e,0}$ von Elektronen mit Impuls Null. Es ist $\frac{dp_{x,e}}{dT_e}$ die Steigung der Eichfunktion $p_{x,e}(T_e)$ für kleine $p_{x,e}$.

Die Spektrometerspannung wurde zu Beginn jeder Strahlzeit so weit verringert, daß der Bereich mit hoher Elektronenrate auf dem Elektronendetektor an die vordere Kante heranreicht, um so einen Kompromiß zwischen guter Impulsauflösung und großem Raumwinkel zu erreichen. Tabelle 3.9 faßt für die verschiedenen Messungen bei unterschiedlichen Projektilgeschwindigkeiten die gewählten Einstellungen des Spektrometerfeldes zusammen.

Der in dieser Tabelle angegebene Faktor $\frac{dp_{x,0}}{dT_e}$, multipliziert mit der Flugzeitauflösung, gibt die zu erwartende Auflösung von $p_{x,e}$ im Bereich $p_{x,e} = 0$ an. Elektronen, die mit großem Impuls in Richtung des Detektors starten, werden mit geringerer Auflösung nachgewiesen. Die beste im Experiment erreichte Flugzeitauflösung betrug 1.5 ns.

Die Ortsauflösung des Detektors und die Ausdehnung des Targets bestimmen den Fehler der Impulsmessung $\Delta p_{y,e}$ bzw. $\Delta p_{z,e}$. Da alle Einstellungen so gewählt sind, daß $v_p T_{e,0} \sim 50$ mm gilt, skalieren $\Delta p_{y,e}$ und $\Delta p_{z,e}$ mit der Projektilgeschwindigkeit. Für alle durchgeführten Messungen gilt:

$$\Delta p_{y,e} = \Delta p_{z,e} \sim 5\% v_p m_e. \quad (3.15)$$

Bis hier wurde davon ausgegangen, daß das Elektronenspektrometer magnetfeldfrei ist. Tatsächlich waren aber das Erdmagnetfeld und ein Streufeld der Ionenquelle vorhanden. Der Feldvektor stand fast exakt senkrecht zur Spektrometerachse (x -Achse), und die Feldstärke betrug etwa 0.5 G. Dieses Feld wurde mit zwei Helm-

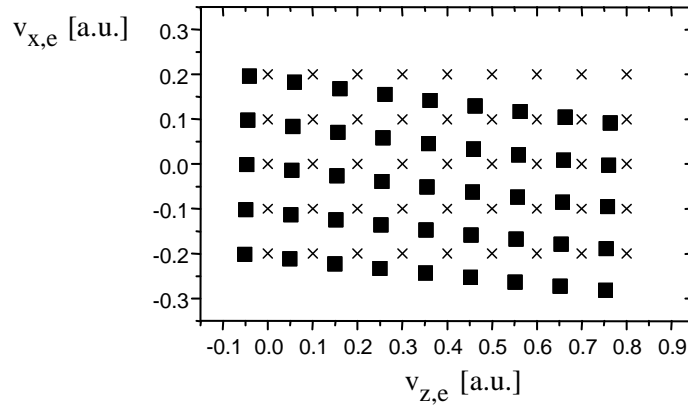


Abbildung 3.10: Einfluß eines Magnetfeldes auf die Elektronenbewegung. Mit SIMION3D wurden die Elektronentrajektorien für die Impulse $v_{z,e} = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, \dots, 0.8$ a.u. und $v_{x,e} = -0.2, -0.1, 0, 0.1, 0.2$ a.u. (Kreuze) bei einem Magnetfeld von 0.4 G in Richtung der y -Achse, d.h. senkrecht zur dargestellten Ebene, berechnet. Mit den Gleichungen zur Berechnung der Impulse aus der Flugzeit und dem Nachweisort, welche Magnetfelder nicht berücksichtigen (Gleichungen 3.8, 3.11 und 3.12), wurde versucht, diese Impulse aus den Simulationsergebnissen wieder zu berechnen (Quadrate). Die Verschiebung der Quadrate gegenüber den Kreuzen zeigt den Fehler an, der sich ergibt, wenn man bei der Auswertung der Meßdaten das Magnetfeld nicht berücksichtigt.

holtzspulenpaaren entlang der z -Achse auf Werte unterhalb 0.1 G kompensiert und entlang der y -Achse auf Werte zwischen 0 und 0.3 G eingestellt.

Es wurden Flugzeiten und Nachweisorte für die Elektronenbewegung im Magnetfeld simuliert. In Abbildung 3.10 ist für ein Magnetfeld von 0.4 G in y -Richtung (Jetachse) gezeigt, welcher Fehler sich in der Impulsberechnung aus den Meßgrößen ergibt, wenn man das Magnetfeld dabei nicht berücksichtigt. Durch das Magnetfeld erscheint die Impulsverteilung geschert und in Strahlrichtung verschoben. Dies wurde in der Auswertung durch eine lineare Transformation korrigiert. Eine Berechnung der Impulse aus den Meßgrößen nach den Bewegungsgleichungen, die das schwache Magnetfeld enthalten, wäre zu aufwendig gewesen. Der Fehler dieses Verfahrens ist kleiner als die Auflösung des Spektrometers.

Die Verschiebung der Nachweisorte durch das Magnetfeld wurde zum Teil gezielt ausgenutzt, um den Nachweisbereich des Spektrometers in Strahlrichtung zu erhöhen. Das Magnetfeld in y -Richtung wurde dazu innerhalb des oben angegebenen Bereiches variiert.

Vergleich mit einem Elektronenspektrometer ohne Flugzeitfokussierung

In anderen Experimenten (z.B. [99, 4]) wurden Elektronenspektrometer ohne Driftstrecke eingesetzt. Bei gleichem Abstand des Detektors zur Strahlachse genügt dabei eine um 25% niedrigere elektrische Feldstärke $E'_{Target} = 3/4 E_{Target}$, um die gleiche Flugzeit $T_{e,0}$ zu erhalten, d.h. um einen ähnlichen Teil des Phasenraumes nachweisen zu können wie in der Geometrie mit Driftstrecke (die beiden Geometrien sind in Abbildung 3.7 gegenübergestellt). Ohne Driftstrecke gilt:

$$T_e = -\frac{p_{x,e}}{e E'_{Target}} + \sqrt{\left(\frac{p_{x,e}}{e E'_{Target}}\right)^2 + 6 \frac{s + x_{0,e}}{E'_{Target}} \frac{m_e}{e}}. \quad (3.16)$$

In der Nähe von $p_{x,e} = 0$ und bei vernachlässigbarem $x_{0,e}$ erhält man daraus

$$p_{x,e} = (-T_e + T_{e,0}) e E'_{Target}. \quad (3.17)$$

Durch Vergleich mit Gleichung 3.10 erkennt man, daß der Fehler aufgrund der Zeitaufösung hier entsprechend der um 25% geringeren Feldstärke reduziert ist.

Wie in Abbildung 3.11 zu erkennen ist, beträgt der Fehler der Messung von $p_{x,e}$ bei einer Flugzeitaufösung von 1 ns und einer Targetausdehnung von 1 mm ($-0.5 \text{ mm} < x_{0,e} < 0.5 \text{ mm}$ - dies entspricht etwa den Gegebenheiten im Experiment) für beide Geometrien ca. 0.025 a.u., d.h. der Vorteil durch die kleinere Steigung der Eichfunktion bei einer Geometrie ohne Drift wird durch den Effekt der Targetausdehnung zunichte gemacht.

Ein Nachteil bei Spektrometern ohne Flugzeitfokussierung ist, daß auch für kleine $v_{x,e}$ keine lineare Näherung der Eichfunktion $p_{x,e}(T_e)$ verwendet werden kann. Dies bedeutet, daß bei einer zu $p_{x,e} = 0$ symmetrischen Elektronenimpulsverteilung die Flugzeitverteilung nicht spiegelsymmetrisch zu $T_{e,0}$ ist.

Auf diese Symmetrie, die im verwendeten Spektrometer gegeben ist, baut die in Abschnitt 4.2 beschriebene Eichung des Elektronenspektrometers auf.

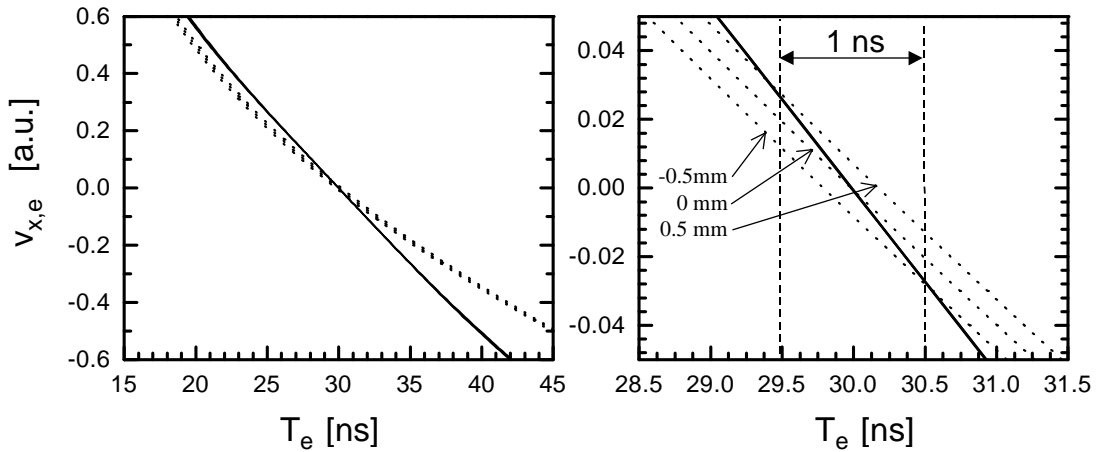


Abbildung 3.11: Eichkurven für Elektronenimpulse in Flugzeitrichtung für Spektrometer mit Drift (—) und ohne Drift (.....) und (rechts) verschiedene Abweichungen des Entstehungsortes der Elektronen in Feldrichtung $x_{0,e}$. Der rechte Teil zeigt vergrößert den Bereich um $v_{x,e} = 0$ bzw. $T_e = T_{e,0}$.

3.5.2 Das Rückstoßionen-Impulsspektrometer

Gleichung 3.8, welche die Impulseichung der Elektronen in Flugzeitrichtung angibt, gilt unabhängig von der Masse der nachzuweisenden Teilchen und der Abmessung des Spektrometers. Somit ist sie auch für das Rückstoßionenspektrometer gültig, sofern dies nur flugzeitfokussierend ist. Die entscheidende Größe, nämlich die elektrische Feldstärke im Targetvolumen, wurde bereits durch die Optimierung des Elektronenspektrometers festgelegt. Mit dieser Vorgabe ist für die Rückstoßionen ohne großen Aufwand eine ausreichende Impulsauflösung in Flugzeitrichtung möglich, da die Impulsverteilung in dieser Richtung eine Breite von ca. 20 a.u. hat, was etwa 50 mal mehr ist als bei den Elektronen. Aufgrund der größeren Masse der Rückstoßionen entspricht dies jedoch nur einer Geschwindigkeit von ca. $7 \text{ mm}/\mu\text{s}$, und damit ist die Bedingung $E_{kin,0} \ll qU$, welche in der Näherung bei der Herleitung von Gleichung 3.10 verwendet wurde, anders als beim Elektronenspektrometer, für die Rückstoßionen im gesamten Bereich der gemessenen Impulsverteilung sehr gut erfüllt.

Die nachzuweisenden Rückstoßionenimpulse in Strahlrichtung sind weitaus geringer als die in transversaler Richtung. Sie sind wesentlich durch die Energiebilanz des Stoßes bestimmt (siehe Gleichung 2.12), und eine Impulsauflösung von ca. 0.2 a.u. ist erforderlich, um eine Q -Wertauflösung zu erhalten, mit der kinematisch zwischen K- und L-Schalenanregung von gebundenen Elektronen unterschieden werden kann.

Es stand ein Detektor mit 50 mm Durchmesser zu Verfügung, so daß bei einer Targetausdehnung von 1 mm und einer solch einfachen Spektrometergeometrie, wie sie für die Elektronen verwendet wird, die Auflösung auf $1/50$ des Nachweisbereiches limitiert wäre.

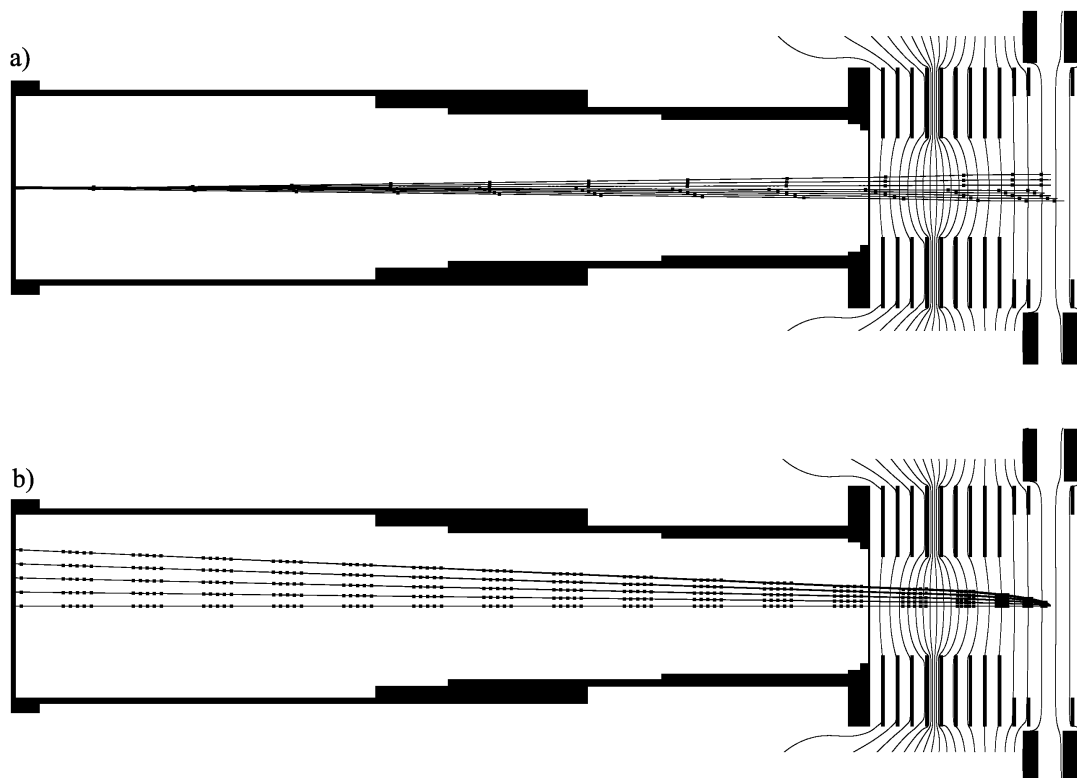


Abbildung 3.12: Simulation der Rückstoßionentrajektorien a) für Impuls Null und unterschiedliche Entstehungsorte und b) für die Impulse $p_{z,r} = 0, 3, 6, 9, 12$ a.u. und $p_{x,r} = 0, 3, 6, 9, 12$ a.u. Die Punkte entlang den Trajektorien geben die Positionen der Ionen nach $0.4 \mu\text{s}$, $0.8 \mu\text{s}$, $1.2 \mu\text{s}$ usw. an.

Da dies nicht ausreichend ist, mußte eine Linse in das Spektrometer integriert werden, die näherungsweise alle Rückstoßionen, welche im Targetvolumen mit gleichem Impuls entstehen, auf einen Punkt auf dem Detektor abbildet. Auf diese Weise kann die volle Auflösung des Detektors von ca. 0.1mm genutzt werden.

Das Rückstoßionen-Impulsspektrometer wurde zylindersymmetrisch um die x -Achse aufgebaut. Trotzdem sind die Bewegungsgleichungen der Ionen in dem inhomogenen Linsenfeld nicht analytisch lösbar. Mit dem Programm SIMION3D [104] wurden Simulationen durchgeführt, um geeignete Elektrodengeometrien und -spannungen zu finden. Dabei wurden die Position und Stärke der Linse sowie die Länge der Beschleunigungs- und Driftstrecke variiert. Um die Homogenität des elektrischen Feldes im Elektronenspektrometer bzw. in der Targetzone möglichst wenig zu stören, wurde im Bereich der Linse ein sehr kleiner Innendurchmesser der Elektroden gewählt. Es müssen dadurch leichte Verzerrungen im Randbereich des Spektrometers in Kauf genommen werden.

Zum Erreichen der Flugzeitfokussierung ist aufgrund der größeren Feldstärke im Bereich der Linse eine Driftstrecke notwendig, die deutlich länger ist als die zweifache Länge der Beschleunigungsstrecke. Abbildung 3.12-a zeigt mit SIMION3D

berechnete Trajektorien für Startimpuls Null und unterschiedliche Startorte, die bis zu 1 cm von der angenommenen Targetposition abweichen. Die Punkte geben die Positionen der Ionen nach einer Flugzeit von $0.4 \mu\text{s}$, $0.8 \mu\text{s}$, $1.2 \mu\text{s}$ usw. an. Man erkennt, daß die Nachweisorte und Flugzeiten zum Detektor für alle Startpositionen in guter Näherung gleich sind.

Im Gegensatz zum Elektronenspektrometer ist die Impulsberechnung in Ortsrichtung für gegebenen Ladungszustand unabhängig von der Flugzeit. Diese Eigenschaft des Rückstoßionenspektrometers resultiert aus der Ortsfokussierung durch die Linse. Da die Rückstoßionen im Extraktionsfeld eine wesentlich höhere Energie aufnehmen als die sehr kleine, im Stoßprozeß übertragene, ist die Geschwindigkeit in Feldrichtung, und damit die Flugzeit, nur in der Targetzone wesentlich vom Startimpuls abhängig. Die in diesem Bereich transversal zum Feld zurückgelegte Strecke führt jedoch wegen der Linse im Spektrometer nicht zu einer Änderung des Nachweisortes.

Mit der Spektrometerspannung U_{Spek} wird im folgenden die Potentialdifferenz zwischen dem Driftbereich der Elektronen und der Rückstoßionen bezeichnet. Die Spannungen an den anderen Elektroden wird daraus mit Hilfe von Ohmschen Spannungsteilern erzeugt.

Aus der in Abbildung 3.12-b dargestellten Simulation können die Eichfunktionen für He^+ -Rückstoßionen bei $U_{Spek} = 102 \text{ V}$ entnommen werden. Die simulierten Trajektorien wurden mit den Impulsen $p_{x,rec} = 0, 0.3, 0.6, \dots \text{ a.u.}$ und $p_{z,rec} = 0, 0.3, 0.6, \dots \text{ a.u.}$ am Targetort gestartet. Die Simulation liefert

$$p_{x,rec} = (T - 7238 \text{ ns}) \cdot 0.075 \text{ a.u. ns}^{-1} \quad (3.18)$$

$$p_{z,rec} = z_{rec} \cdot 0.45 \text{ a.u. mm}^{-1}. \quad (3.19)$$

Die Struktur der Bewegungsgleichungen liefert folgende Abhängigkeiten der Eichfunktionen von Ladung q_{rec} , Masse des Rückstoßions m_{rec} und U_{Spek} :

$$p_{x,rec} = (T_{rec} - T_{rec,0}) \frac{q_{rec}}{m_{rec}} U_{Spek} c_{Zeit}, \quad (3.20)$$

$$p_{y,rec} = y_{rec} \cdot \sqrt{\frac{q_{rec}}{m_{rec}} U_{Spek} c_{Ort}}, \quad (3.21)$$

$$p_{z,rec} = z_{rec} \cdot \sqrt{\frac{q_{rec}}{m_{rec}} U_{Spek} c_{Ort}}. \quad (3.22)$$

Dabei hängt $T_{rec,0}$ von der Spektrometergeometrie ab und ist aufgrund der elektrostatischen Linse im Rückstoßionenspektrometer analytisch nicht zu berechnen. Für die Abhängigkeit von der Ladung q_{rec} und der Masse m_{rec} des Rückstoßions gilt

$$T_{rec,0} = const \cdot \sqrt{\frac{q_{rec}}{m_{rec}}}. \quad (3.23)$$

Die beiden Konstanten c_{Zeit} und c_{Ort} sind nur abhängig von der Spektrometergeometrie, d.h., es genügt eine Simulation oder Eichmessung, um die Eichfunktion für alle U_{Spek} und verschiedene Massen bzw. Ladungen der Rückstoßionen zu bestimmen. Um sicherzustellen, daß die tatsächliche Spektrometerkonfiguration mit der

simulierten übereinstimmt, wurden Eichmessungen durchgeführt. Diese dienen auch zur Bestimmung der Auflösung des Spektrometers. Sie werden im nächsten Kapitel vorgestellt.

Die Bereiche im Flugzeitspektrum, in denen He^+ bzw. He^{2+} nachgewiesen werden, sind bei der verwendeten Spektrometergeometrie ausreichend gut getrennt, um den Ladungszustand der Rückstoßionen aus der Flugzeit bestimmen zu können.

3.6 Der Projektildetektor

Bei den zur Erzielung einer ausreichenden Reaktionsrate im zu messenden Reaktionskanal notwendigen Projektilraten war ein Nachweis aller Projektile nicht möglich. Deshalb wurden die Projektile durch eine elektrostatische Ablenkung nach Ladungszuständen getrennt und nur die einfachgeladenen und neutralen nachgewiesen. Dazu wurde ein zweidimensional ortsauflösender MCP-Detektor verwendet.

Der Abstand vom Target bis zum Detektor wurde mit ca. 80 cm möglichst kurz gewählt. Die geringe Änderung der Projektilgeschwindigkeit in den untersuchten Prozessen erlaubt es, bei diesem geringen Abstand die Flugzeit der Projektile zum Detektor, abgesehen von einem Fehler aufgrund der Targetausdehnung, als konstant anzunehmen und das Zeitsignal dieses Detektors zur Bestimmung des Reaktionszeitpunktes zu verwenden. Dieser wird für die Bestimmung der Flugzeiten im Impulsspektrometer benötigt.

Die Streuwinkelauflösung betrug bei dieser Geometrie und der relativ schlechten Kollimation des Projektilstrahls nur etwa 2 mrad. Die gemessenen Streuwinkel wurden bei der Analyse der Daten nicht berücksichtigt.

Die Ortsauflösung erlaubt es, räumlich getrennt mehrere Projektilladungszustände gleichzeitig nachzuweisen und die Strahlkollimation in einfacher Weise zu optimieren.

3.7 Signalverarbeitung und Datenaufnahme

Die Signale der Detektoren (Anodensignale: A1- A4 und Zeitsignale: MCP) werden mit schnellen Spannungsverstärkern (FA) bzw. Differenzverstärkern (DA) und "Constant-Fraction"-Diskriminatoren (CF) zu Standard-NIM-Signalen verarbeitet, die dann mit "Logical-Fan-out" (LF)-Modulen für die weitere Verarbeitung verzweigt werden. Auch der Strahlpulser liefert zwei Signale in diesem Standard, die in fester zeitlicher Beziehung zu Nulldurchgängen der positiven bzw. negativen Flanke des an die Kondensatorplatten angelegten Rechtecksignals stehen. Alle Informationen stehen somit in Form von Zeitsignalen zur Verfügung. Diese werden mit Standard-NIM- und CAMAC-Elektronikmodulen weiter verarbeitet.

Die Flugzeitinformation des Rückstoßions wurde mit einem "Time-to-Amplitude-Converter" (TAC) in ein Pulshöhensignal umgewandelt, welches dann mit einem "Analog-to-Digital-Converter" (ADC) ausgelesen wurde. Alle anderen

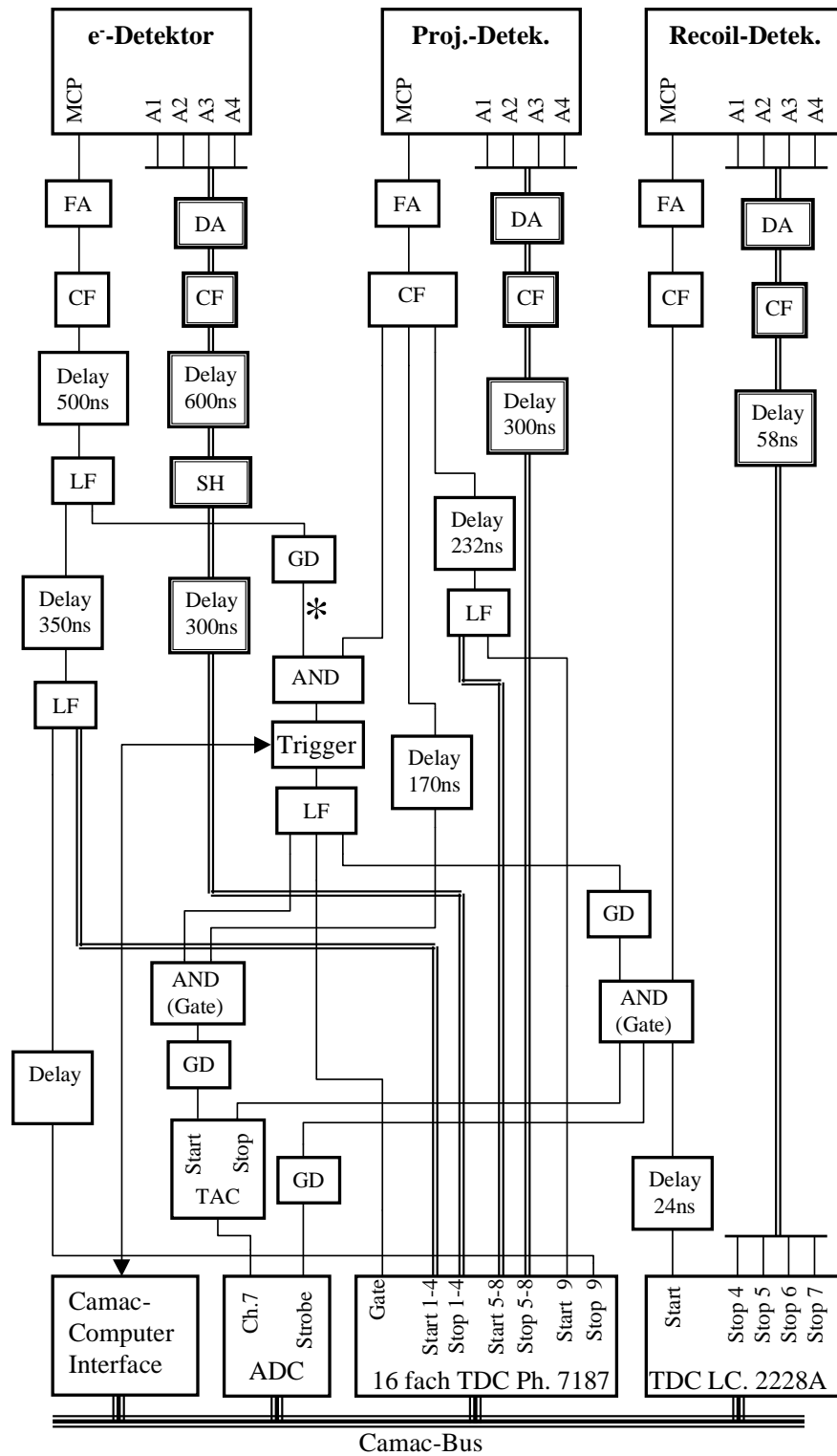


Abbildung 3.13: Schaltskizze für die Messungen mit Projektildetektor

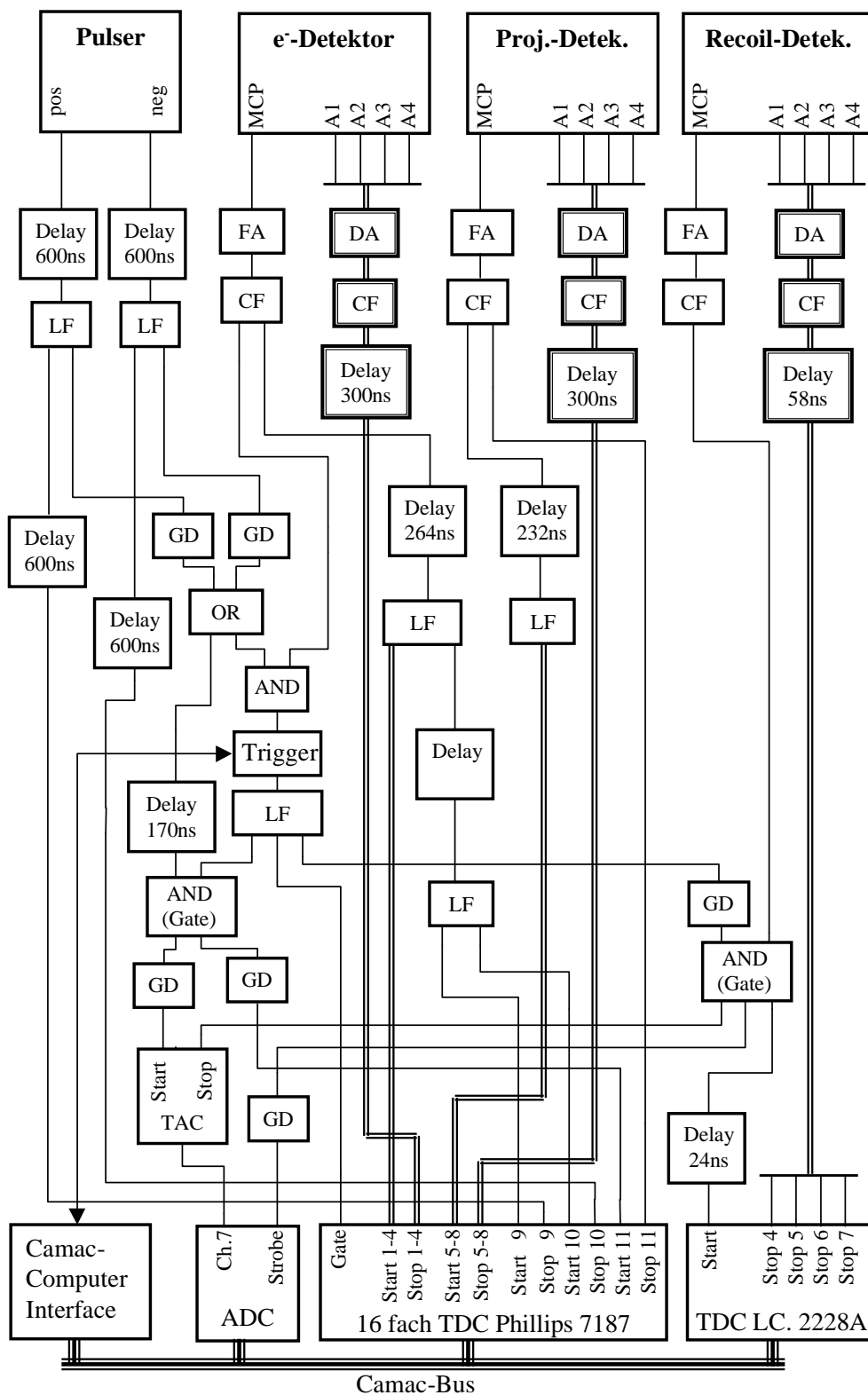


Abbildung 3.14: Schaltskizze für die Messungen mit Strahlpulser

Zeitinformationen wurden direkt mit "Time-To-Digital-Convertern" (TDC) erfaßt. Die digitalisierten Daten wurden über ein CAMAC-Computer-Interface auf einen PC übertragen und im List-Mode-Verfahren, d.h. Ereignis für Ereignis, auf der Festplatte gespeichert. Die Steuerung der Hardware, die Berechnung der kinematischen Größen aus den Rohdaten und die Erzeugung der Spektren erfolgte mit dem Programm COBOLD [105].

Die Datenaufnahme wird durch ein sogenanntes Triggermodul (Trigger) gesteuert, welches ein Signal erhält (Event-Signal), wenn ein für die Auslese geeignetes Ereignis stattgefunden hat. Durch das Triggermodul werden mit Hilfe von UND-Gattern¹ die Signalwege für einen bestimmten Zeitraum geöffnet und so sichergestellt, daß nur dann Signale digitalisiert werden, wenn das vorherige Ereignis ausgelesen ist und alle Digitalisierer in den Ausgangszustand zurückversetzt wurden. Damit wird verhindert, daß nicht koinzidente Signale, d.h. Signale, die nicht in einem bestimmten zeitlichen Zusammenhang stehen und somit nicht zu einer Reaktion gehören, als ein Ereignis abgespeichert werden.

Vor den UND-Gattern müssen dazu alle Signale durch Verzögerungsleitungen (Delay) oder "Gate-and-Delay-Generatoren" (GD) zeitlich so weit nach hinten verschoben werden, daß sie in das vom Triggermodul festgelegte Zeitfenster fallen. Die benötigte Verzögerungszeit richtet sich nach dem zeitlichen Abstand zwischen der ersten zu digitalisierenden Information und dem letzten Signal, das zur Erzeugung des Event-Signals benötigt wird. Diese Zeitdifferenz ist im durchgeführten Experiment im wesentlichen durch die Flugzeiten der Teilchen von der Targetzone zu den Detektoren bestimmt.

Bei den Messungen des Transferionisationskanals (Abbildung 3.13) wurde das Zeitsignal des Elektronendetektors mit einem GD so verzögert und gestreckt, daß es für alle gültigen Elektronenflugzeiten einen Überlapp mit dem Zeitsignal des Projektildetektors hat. Mit einem UND-Gatter (AND) wurde aus diesen beiden Signalen das Event-Signal erzeugt. Bei den Ionisationsmessungen wurde in einer entsprechenden Schaltung (Abbildung 3.14) das Signal des Projektildetektors durch die beiden Zeitsignale des Strahlpulsers ersetzt.

Die Schaltskizze für die Messung der Elektroneneinfangkanäle erhält man, wenn man in Abbildung 3.13 den mit * gekennzeichneten Signalweg entfernt und das nachfolgende UND-Gatter durch ein ODER-Gatter (OR) ersetzt, d.h., das Zeitsignal des Projektildetektors bildet dann das Event-Signal.

Der Rückstoßionendetektor konnte wegen der langen Flugzeiten der Rückstoßionen und fehlender Verzögerungsmodule in ausreichender Qualität bei allen Messungen nicht in die Erzeugung des Event-Signals einbezogen werden. Deshalb enthalten die List-Mode-Files Ereignisse, bei denen kein Rückstoßion registriert wurde. Diese wurden nachträglich mit einer Analysesoftware aus den Meßdaten entfernt. Somit ist bei den Ionisationsmessungen eine Dreifachkoinzidenz realisiert.

¹ Beim Philips TDC sind die UND-Gatter im CAMAC-Modul integriert und werden über den Gate-Eingang angesprochen, sonst wurden sie separat mit Koinzidenz-Modulen realisiert.

Kapitel 4

Datenanalyse

Im letzten Kapitel wurde die Funktionsweise des Spektrometers erläutert und gezeigt, wie aus den Flugzeiten und Nachweisorten die Impulse berechnet werden können. Die dort angegebenen Eichfunktionen wurden analytisch und durch Simulationsrechnungen gewonnen. Wegen möglicher Abweichungen zwischen der konzipierten und der tatsächlichen Konfiguration des Spektrometers sowie möglicher Ungenauigkeiten bei den Simulationen müssen die Parameter der Eichfunktionen experimentell überprüft werden.

In diesem Kapitel werden die durchgeführten Schritte und einige Zwischenresultate am Beispiel des He^{2+} -He-Stoßes bei einer Projektilgeschwindigkeit von 0.84 a.u. diskutiert. Bei der Eichung wird ausgenutzt, daß sowohl die gemessenen Impulsverteilungen als auch das Spektrometer Symmetrien besitzen. Zudem zwingt die Energieerhaltung alle Ereignisse im gemessenen Phasenraum auf einen niederdimensionalen Unterraum, wodurch diskrete Strukturen in bestimmten Spektren entstehen, die zur Eichung verwendet werden können. Es wird weiterhin gezeigt, daß durch die Überprüfung, ob ein gemessenes Ereignis die Energieerhaltung erfüllt, der statistische Untergrund weitgehend eliminiert werden kann.

Am Ende dieses Kapitels werden die Darstellungen, die bei der Präsentation der Ergebnisse verwendet werden, erläutert. Dort sind auch noch einmal die Meßfehler der verschiedenen Größen zusammengestellt.

4.1 Eichung des Rückstoßionen-Impulsspektrometers

Die Gleichungen 3.20 bis 3.22 (siehe Kapitel 3.5.2) zur Impulsberechnung aus den Meßgrößen können in der folgenden Form zusammengefaßt werden:

$$\vec{p}_{rec} = \mathbf{T} \cdot \begin{pmatrix} c_1 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_{rec} - T_{rec,0} \\ y_{rec} - y_{rec,0} \\ z_{rec} - z_{rec,0} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

mit

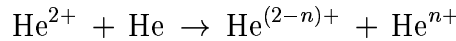
$$c_2 = c_3 = c_{Ort} \sqrt{\frac{q_{rec}}{m_{rec}} U_{Spek}}$$

und

$$c_3 = c_{Zeit} \frac{q_{rec}}{m_{rec}} U_{Spek}.$$

Die Größen $y_{rec,0}$ und $z_{rec,0}$ wurden ergänzt, um eine Abweichung der Einbaulage des Detektors von der Sollposition zu berücksichtigen. \mathbf{T} ist eine orthogonale Matrix, welche eine Drehung der Spektrometerkoordinaten gegenüber den Achsen im Laborsystem von ca. 10 mrad korrigiert. Für die im folgenden beschriebene Bestimmung der Eichparameter c_1 , c_2 , c_3 , $T_{rec,0}$, $y_{rec,0}$ und $z_{rec,0}$ mit Eichmessungen kann $\mathbf{T} = \mathbf{E}$ angenommen werden.

Bei dem n -fachen Elektroneneinfang



gibt es im Endzustand nur zwei freie Teilchen, nämlich das Projektil und das Rückstoßion. Aufgrund der Impulserhaltung ist die Messung des Rückstoßions ausreichend für ein kinematisch vollständiges Experiment. Die Impulsverteilungen beider Teilchen müssen symmetrisch um die Strahlachse sein, da nur diese Richtung ausgezeichnet ist. Zusätzlich erhält man in Strahlrichtung Ereignisse nur bei diskreten Werten (Kapitel 2.1.1, Gleichung 2.12):

$$p_{z,rec} = -\frac{Q}{v_p} - n \frac{v_p m_e}{2}. \quad (4.2)$$

Dabei ist Q die Bilanz der Bindungsenergien der Elektronen, v_p die Projektilgeschwindigkeit und n die Anzahl der aus dem Target in das Projektil eingefangenen Elektronen. Gleichung 2.12 gilt mit der Näherung, daß nur die Geschwindigkeit des Projektils in Richtung der Strahlachse und die Bindungsenergien der Elektronen maßgeblich zur Energiebilanz beitragen. Dies ist in den durchgeführten Experimenten gegeben.

Die Abbildung 4.1-a zeigt das Ortsbild des Rückstoßionendetektors. Durch Setzen einer Bedingung¹ auf den Flugzeitpeak der He^+ -Rückstoßionen und den Nachweisort der He^+ -Projektile wurde dabei der Reaktionskanal $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^+$ ausgewählt. In der Projektion dieser Verteilung auf die Strahlachse (Abbildung 4.1-b) sind die identifizierten Peaks mit den jeweiligen Hauptquantenzahlen der beiden Elektronen beschriftet. Weiterhin sind der Q -Wert und der nach Gleichung 2.12 zugeordnete Wert für $p_{z,rec}$ in Atomaren Einheiten² (a.u.) angegeben.

Mit diesen Peaks erfolgt die Bestimmung der Eichparameter z_0 und c_3 , d.h. die Impulseichung in Strahlrichtung. Da das Rückstoßionen-Impulsspektrometer zylindersymmetrisch um die x -Achse aufgebaut wurde, gilt $c_2 = c_3$. Die Verteilung der

¹ Mit dem Setzen einer Bedingung ist hier die Selektion der Ereignisse einer Messung gemeint, bei denen der Wert der angegebenen Größe in einem bestimmten Bereich liegt.

² Im Bohrschen Atommodell besitzt das Elektron des Wasserstoffs im Grundzustand eine Atomare Einheit Impuls. Für eine kurze Einführung in Atomare Einheiten siehe Anhang B.

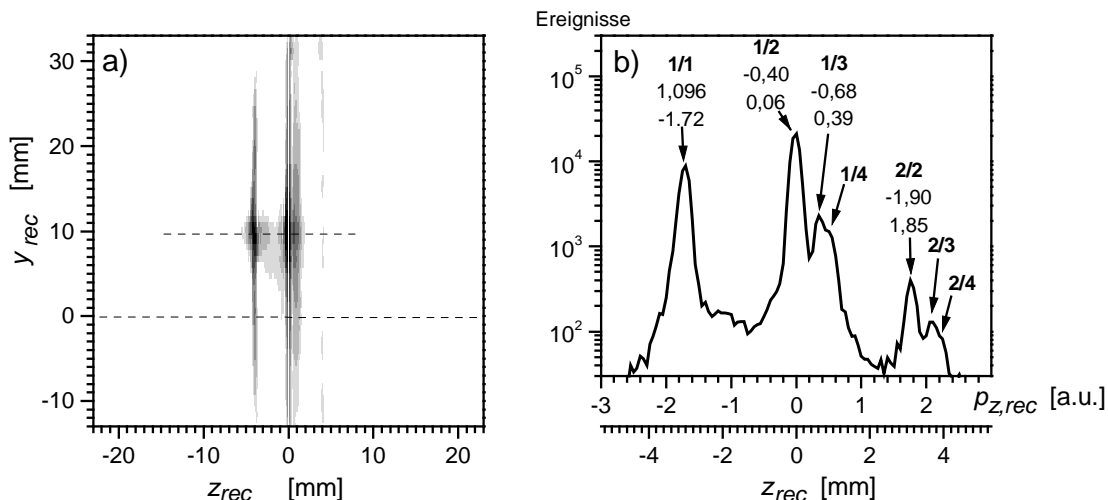


Abbildung 4.1: Einfachelektroneneinfang (SC) im He^{2+} -He-Stoß bei $v_p = 0.84$ a.u.: a) Ortsverteilung auf dem Rückstoßionendetektor, b) Projektion auf die z -Achse. Mit Hilfe der Position der identifizierten Peaks kann die Ortsskala in eine Impulsskala umgerechnet werden. An den Peaks sind angegeben (von oben nach unten): Hauptquantenzahlen der beiden Elektronen, Q -Wert der Reaktion und nach Gleichung 4.2 berechneter Wert von $p_{z,rec}$ in Atomaren Einheiten.

Impulsüberträge auf das Rückstoßion ist rotationssymmetrisch um die Strahlachse und damit spiegelsymmetrisch zu $p_{y,rec} = 0$. Aus der Symmetrie der entsprechenden Ortsverteilung wird $y_{rec,0}$ bestimmt.

Zu dem auf das Rückstoßion übertragenen Impuls $p_{y,rec}$, der in der Messung bestimmt werden soll, ist der Impuls des Targetatoms vor dem Stoß von ca. 5.9 a.u. addiert. Dieser Anteil wird bei dieser Methode der Bestimmung von $y_{rec,0}$ automatisch abgezogen. Besteht keine Dejustierung des Detektors, so gilt

$$y_{rec,0} = m_{rec} \frac{v_{jet}}{c_2} = \frac{5.9 \text{ a.u.}}{c_2}, \quad (4.3)$$

d.h., $y_{rec,0}$ ist abhängig von c_2 und damit vom Ladungszustand und muß für He^+ - und He^{2+} -Rückstoßionen separat bestimmt werden.

Mit einer Bedingung auf den Peak um $p_{z,rec} = 0.4$ a.u. ist in Abbildung 4.2 die Verteilung der Rückstoßionen in der Ebene senkrecht zur Strahlrichtung dargestellt. Die Eichparameter c_1 und $T_{rec,0}$ werden so gewählt, daß die Verteilung der Ereignisse in der x,y -Ebene möglichst rotationssymmetrisch um den Ursprung ist.

Die interne Bewegung des Targets, die Ortsauflösung des Detektors sowie Verzerrungen durch die Gitter bestimmen die Impulsauflösung in der y,z -Ebene. Die Linienstruktur der Impulsverteilungen bei den Elektroneneinfangreaktionen (Gleichung 2.12) erlaubt die Messung der Auflösung in Strahlrichtung. Bei $U_{Spek} = 92$ V wurden für He^+ -Rückstoßionen $\Delta p_{z,rec} = 0.15$ a.u. bzw. für He^{2+} $\Delta p_{z,rec} = 0.2$ a.u. (FWHM) bestimmt.

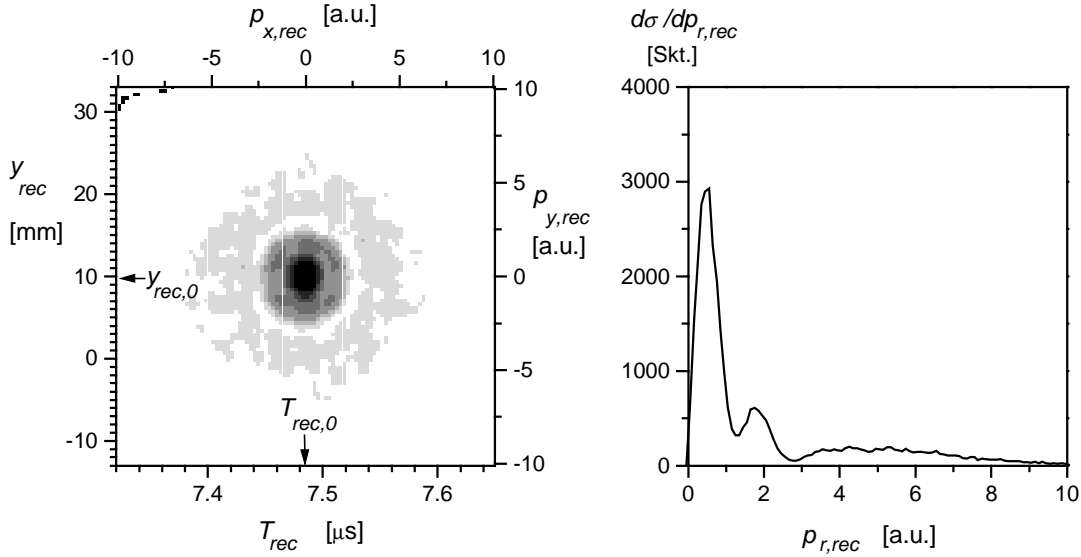


Abbildung 4.2: Transversalimpulsverteilung der Rückstoßionen beim Zweifach-elektroneneinfang im He^{2+} -He-Stoß in einen Anregungszustand mit $Q = -0.4$ a.u. bei einer Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u. Es gilt $p_{r,rec} = \sqrt{p_{x,rec}^2 + p_{y,rec}^2}$.

Die Targetatome besitzen aufgrund der Geometrie und des Speedratios des verwendeten Jetsystems (siehe Abschnitt 3.3) in der Ausbreitungsrichtung des Jets (y -Achse) eine um etwa 0.2 a.u. breitere Impulsverteilung als in der dazu senkrechten Ebene. Gegenüber $\Delta p_{z,rec}$ verschlechtert dies die Auflösung in Jetrichtung auf $\Delta p_{y,rec} = 0.35$ a.u. für He^+ bzw. 0.4 a.u. (FWHM) für He^{2+} . Eine Überprüfung dieser Auflösung ist bedingt dadurch möglich, daß man die Ereignisse des SC mit $Q = -0.68$ a.u. selektiert und ihre Verteilung in Jetrichtung aufträgt. In dieser findet sich ein Peak bei $p_{y,rec} = 0$, der nur wenig breiter ist als die abgeschätzte Auflösung.

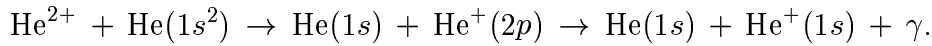
Der Fehler der Flugzeitmessung von ca. 5 ns entsteht im wesentlichen durch die den Detektoren nachgeschaltete Elektronik (siehe Abschnitt 3.7), insbesondere durch die aktiven Signalverzögerungsmodule (Delays). Die daraus resultierenden Fehler der Impulsmessung wachsen nach Gleichung 3.20 linear mit der Spektrometerspannung und dem Ladungszustand des Rückstoßions. Für He^{2+} bei $U_{Spek} = 92$ V wurde nur eine Auflösung von $\Delta p_{x,rec} = 0.5$ a.u. (FWHM) erreicht.

Abgesehen von einigen Eichmessungen wurden jedoch immer deutlich niedrigere Spektrometerspannungen eingestellt (siehe Tabelle 3.9), so daß der Fehler in beiden zur Strahlrichtung senkrechten Raumrichtungen unter 0.4 a.u. für He^{2+} - bzw. 0.3 a.u. für He^+ -Ionen lag.

Bei großen Impulsen, die hauptsächlich in transversaler Richtung auftreten, muß ein weiterer Fehler, der durch die Unsicherheit bei der Bestimmung der Eichfaktoren c_1 , c_2 und c_3 von maximal 10% zustande kommt, berücksichtigt werden.

4.2 Eichung des Elektronenspektrometers

Im Gegensatz zum Rückstoßionenspektrometer ist das Elektronenspektrometer nicht ortsfokussierend. Außerdem ist die Breite der Elektronenflugzeitverteilung nicht klein im Vergleich zur absoluten Flugzeit. Zur Impulsberechnung muß deshalb T_e bekannt sein, d.h., es muß der Nullpunkt im Flugzeitspektrum der Elektronen bestimmt werden. Da die Flugzeit nicht direkt, sondern als Differenz zu der als konstant angenommenen Projektilflugzeit gemessen wurde, muß dieser Nullpunkt aus den Meßdaten bestimmt werden. Dies ist möglich, da bei einem Teil der Stöße Projektil in angeregten Zuständen produziert werden, die durch Emission von Photonen in den Grundzustand übergehen. Auch Photonen werden vom Elektronendetektor mit einer geringen Nachweiseffizienz nachgewiesen. Von Interesse ist dabei besonders die Reaktion



Die Lebensdauer des angeregten $\text{He}^+(2p)$ beträgt ca. 0.1 ns, und die Flugzeit der Photonen zum Detektor ist kleiner als 0.2 ns. Die Zeitdifferenz zwischen dem Elektroneneinfang und dem Nachweis des Photons ist somit kleiner als die Flugzeitauflösung, und der durch die Photonen im Zeitspektrum erzeugte Peak kann zur Festlegung des Nullpunktes für die Elektronenflugzeit verwendet werden.

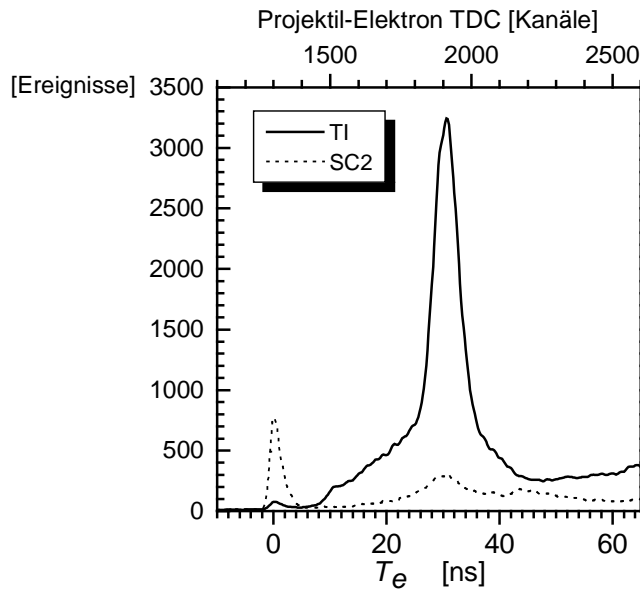


Abbildung 4.3: Flugzeitverteilung der Elektronen T_e bei der Transferionisation (TI) und beim Einfachelektroneneinfang mit Anregung eines Elektrons in die L-Schale (SC2). Bei $T_e = 0$ werden Photonen auf dem Detektor nachgewiesen, die echten Ereignisse befinden sich im Peak um $T_e = 31$ ns.

In Abbildung 4.3 ist das Elektronen- bzw. Photonenflugzeitspektrum für den Transferionisationskanal und den Einfachelektroneneinfang in die L-Schale dargestellt. Das Spektrum für den Elektroneneinfang enthält einen beträchtlichen Anteil

an Ereignissen mit Flugzeiten, die für Elektronen typisch sind. Es handelt sich dabei um Ereignisse des Transferionisationskanals, die durch einen falsch bestimmten Ladungszustand des Rückstoßions aufgrund von statistischem Untergrund hier erscheinen. Die Detektoreffizienz ist für Photonen ca. 3 mal niedriger als für Elektronen, und die Photonen werden nur mit dem geometrischen Raumwinkel von ca. 0.5π nachgewiesen. Deshalb entspricht das Verhältnis der Ereignisse im Photonenpeak zu denen im Elektronenflugzeitpeak nicht dem der Wirkungsquerschnitte.

Aus der nun bekannten Flugzeit T_e wurde mit Gleichung 3.8 unter der Näherung $x_0 = 0$ der Elektronenimpuls $p_{x,e}$ berechnet. Es gilt:

$$T_e(p_{x,e}) = \frac{-p_{x,e}}{K_{elek}} + \sqrt{\frac{2 s m_e}{K_{elek}}} \left(\left(\frac{1}{2 m_e} p_{x,e}^2 + 1 \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{2 m_e} p_{x,e}^2 + 1 \right)^{-\frac{1}{2}} \right) \quad (4.4)$$

Da $p_{x,e}$ hier in verschiedenen Potenzen auftritt und die Umkehrfunktion $p_{x,e}(T_e)$ nicht bekannt ist, wurde $p_{x,e}$ für gegebenes T_e mit einem numerischen Lösungsverfahren bestimmt.

Die Abbildung 4.4 zeigt für Elektronen, die im Transferionisationskanal beim He^{2+} -He-Stoß mit dem Impuls $-0.05 \text{ a.u.} < p_{x,e} < 0.05 \text{ a.u.}$ erzeugt wurden, die Ortsverteilung auf dem Elektronendetektor. Der Mittelpunkt der runden Detektorfläche liegt nicht auf der Spektrometerachse, sondern ist gemäß der Einbaulage an der Stelle $y = 0 \text{ mm}$ und $z = 19 \text{ mm}$ ³. Im allgemeinen können nach den Gleichungen 3.11 und 3.12

$$\begin{aligned} p_{y,e} &= m_e \frac{y_e}{T_e} \\ p_{z,e} &= m_e \frac{z_e}{T_e} \end{aligned}$$

aus dem Ort die Impulse nur berechnet werden, wenn die Flugzeit bekannt ist. Bei der in Abbildung 4.4 dargestellten Verteilung sind jedoch nur Ereignisse mit solch kleinem $p_{x,e}$ selektiert, daß die Flugzeit T_e in guter Näherung gleich der Konstanten $T_{e,0}$ ist:

$$T_e(p_{x,e}) \sim T_{e,0} = \sqrt{\frac{2 m_e s}{K_{elek}}}. \quad (4.5)$$

Somit kann dieses Ortsbild durch Skalierung der Achsen in ein Impulsbild transformiert werden.

Für einen größeren Bereich des Phasenraumes unterscheidet sich die Ortsverteilung wesentlich von der Impulsverteilung. Da T_e für jedes Ereignis gemessen wurde, können jedoch alle drei Impulskomponenten mit den Gleichungen 3.11, 3.12 und 3.8 berechnet werden.

³ Mit der Bestimmung des Nullpunktes in z -Richtung befassen sich die Abschnitte 4.2.1 und 4.2.2. Dort wird neben der Einbaulage des Detektors auch die Verschiebung der Ortsverteilung durch ein schwaches Magnetfeld berücksichtigt. Der Nullpunkt in y -Richtung ergibt sich aus der Symmetrie der Verteilungen.

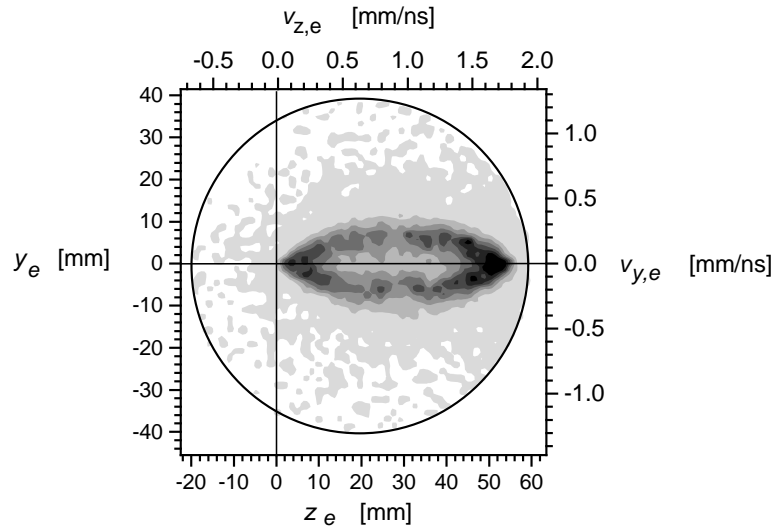


Abbildung 4.4: Transferionisation im He^{2+} -He-Stoß bei $v_p = 0.84$ a.u.: Ortsverteilung auf dem Elektronendetektor für kleine Elektronenimpulse in Richtung des elektrischen Feldes (-0.05 a.u. $< p_{x,e} < 0.05$ a.u.). Die Elektronenflugzeit beträgt für diese Ereignisse etwa 31 ns, und die Ortsskala (unten und links) kann in guter Näherung durch eine Geschwindigkeitsskala ersetzt werden (oben und rechts).

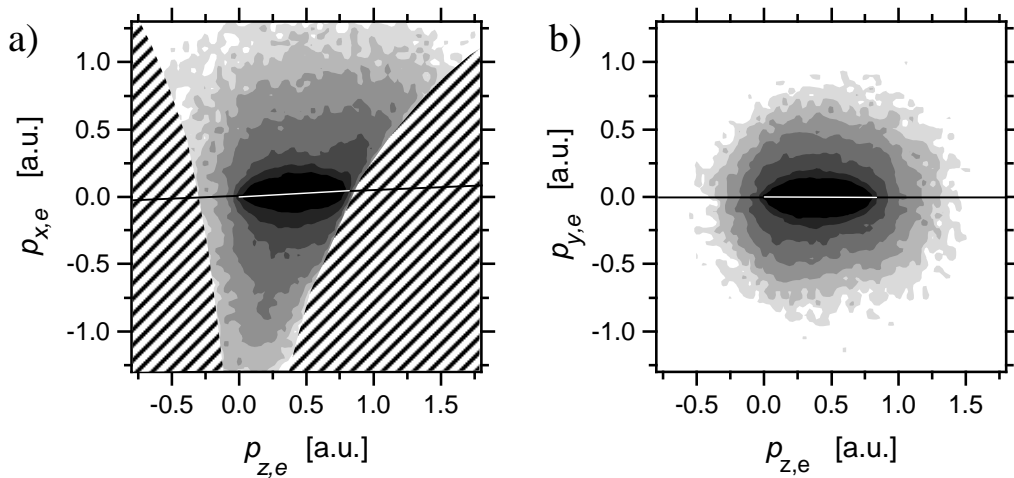


Abbildung 4.5: Transferionisation bei $v_p = 0.84$ a.u.: Nach Gleichungen 3.11, 3.12 und 3.8 berechnete Verteilung der Elektronenimpulse in der Projektion auf die a) x,y -Ebene und b) y,z -Ebene. Die schraffierten Flächen in a) geben den Bereich des Phasenraumes an, in dem die Elektronen nicht nachgewiesen werden können. In b) ist die geforderte Symmetrie um die z -Achse gegeben, in a) dagegen ist eine Kippung des Bereiches hoher Intensität zu erkennen, die aus dem magnetischen Feld von ca. 0.2 G in y -Richtung resultiert, welches in der Impulsberechnung an dieser Stelle noch nicht berücksichtigt ist.

Zur Kontrolle der Eichung wurden die berechneten Verteilungen der Elektronen in der Projektion auf die x,z - und y,z -Ebene verglichen (siehe Abbildung 4.5). Aufgrund der Zylindersymmetrie um die z -Achse sollten diese gleich sein und in den beiden Ebenen spiegelsymmetrisch zur z -Achse. In der x,z -Ebene ist dies aufgrund von Magnetfeldern im Spektrometer, die bei der Impulsberechnung bis jetzt noch nicht berücksichtigt wurden, nicht der Fall. Nach den in Abschnitt 3.5.1 vorgestellten Simulationsrechnungen (siehe Abbildung 3.10) kann eine ausreichend gute Korrektur des dadurch entstandenen Fehlers durch eine Scherung und Verschiebung der Verteilung erfolgen.

Es wurde folgende Transformation durchgeführt:

$$p'_{x,e} = p_{x,e} + c_{xz} p_{z,e} \quad (4.6)$$

$$p'_{y,e} = p_{y,e} + c_{y0} \quad (4.7)$$

$$p'_{z,e} = p_{z,e} + c_{z0} . \quad (4.8)$$

Diese Funktion ermöglicht die Korrektur eines Magnetfeldes und zusätzlich auch die einer möglichen Verschiebung der Impulse in der Nachweisebene des Detektors, z.B. aufgrund von Fehlern in der Spektrometergeometrie.

Das Magnetfeld im Spektrometervolumen war wesentlich durch das Streufeld der EZR-Ionenquelle bestimmt, welches empfindlich von den Quellenparametern abhängt. Um die Vakuumkammer waren zwei Spulenpaare in Helmholtzgeometrie angebracht, um das Erdmagnetfeld und das Streufeld der Ionenquelle zu kompensieren. Eine Magnetfeldmessung zur Optimierung des Stroms in den Korrekturspulen war während der Messung nur außerhalb der Vakuumkammer in einem Bereich möglich, in dem das Korrekturfeld bereits stark inhomogen ist. Aus diesen Gründen ist das Magnetfeld im Spektrometer nicht genau bekannt.

Die magnetfeldabhängigen Korrekturkonstanten c_{xz} und c_{z0} wurden deshalb für jede Messung, bei der die Spektrometer- oder Quelleneinstellung verändert wurde, neu bestimmt. Sie wurden so variiert, daß die gemessenen Verteilungen möglichst gut den geforderten Symmetriebedingungen genügen. Für die im Abbildung 4.5 als Beispiel gezeigte Messung wurde durch Simulation von Elektronenbahnen im Spektrometer abgeschätzt, daß das Magnetfeld eine Stärke von ca. 0.2 G in y -Richtung hat. Bei keiner der anderen Messungen war das Magnetfeld größer als 0.3 G.

Die Rotationssymmetrie um die Strahlachse hilft nicht bei der Bestimmung der Korrekturkonstanten c_{z0} . Dafür werden in den beiden folgenden Abschnitten zwei Möglichkeiten vorgestellt. Bei der Darstellung der Meßergebnisse wird der korrigierte Elektronenimpuls p' wieder mit p bezeichnet. Gleiches gilt für die Elektronengeschwindigkeit.

4.2.1 Die Elektronenlongitudinalimpulseichung

Aus der Energie- und Impulserhaltung erhält man mit einigen Näherungen, die in Abschnitt 2.1.2 näher beschrieben sind, eine Gleichung, die den Elektronenimpuls mit dem Rückstoßionenimpuls verknüpft und somit den vom Endzustand belegten Phasenraum einschränkt.

Ausgehend von der in Gleichung 2.19 gewählten Form erhält man mit der Bedingung $v_{x,e} = v_{y,e} = 0$ folgenden quadratischen Zusammenhang zwischen Elektronen- und Rückstoßionen-Longitudinalimpuls:

$$p_{z,rec} = -\frac{Q}{v_p} - n \frac{m_e v_p}{2} + m_e \frac{v_{z,e}^2}{2 v_p} - m_e v_{z,e} \quad (4.9)$$

bzw.

$$p_{z,rec} = A + B (v_{z,e} - v_p)^2 \quad (4.10)$$

$$\text{mit } C = -\frac{Q}{v_p} - (n+1) \frac{m_e v_p}{2} \quad \text{und} \quad B = \frac{m_e}{2 v_p}.$$

Aus den Meßdaten können aufgrund der Impulsauflösung Ereignisse mit $p_{r,e} = m_e \sqrt{v_{x,e}^2 + v_{y,e}^2} < 0.1$ a.u. bzw. $0.5 m_e (v_{x,e}^2 + v_{y,e}^2) < 0.005$ a.u. selektiert werden.

Dieser von Null verschiedene Elektronentransversalimpuls führt bei den verwendeten Projektilgeschwindigkeiten zu einer Abweichung von weniger als 0.01 a.u. von dem mit Gleichung 4.10 für $p_{z,rec}$ errechneten Wert. Diese Abweichung ist klein gegenüber dem Fehler aufgrund der Auflösung des Spektrometers.

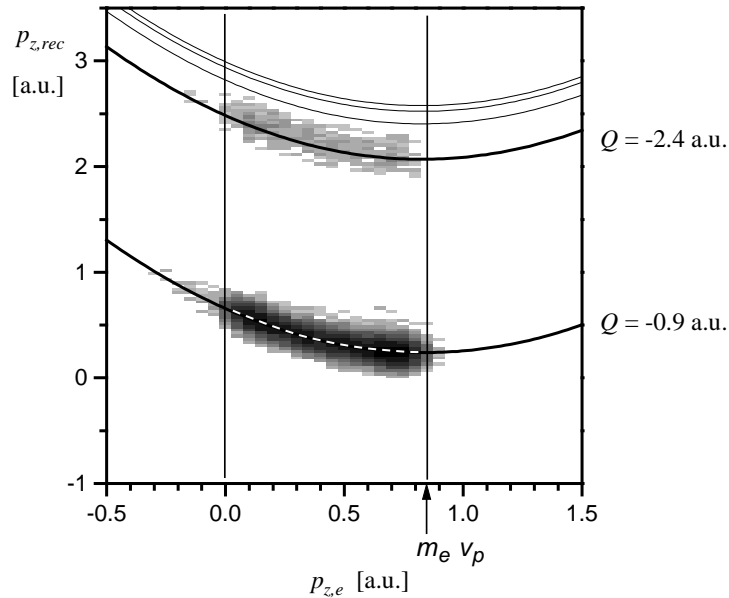


Abbildung 4.6: Elektronen- und Rückstoßionen-Longitudinalimpulsverteilung bei der Transferionisation mit $v_p = 0.84$ a.u. für kleine Elektronentransversalimpulse $p_{r,e} < 0.1$ a.u.: Eingezeichnet sind die mit Gleichung 4.10 für verschiedene Q -Werte berechneten Linien, auf denen die Ereignisse bei beliebig guter Auflösung des Spektrometers liegen müßten. Das Minimum der Parabeln ist immer bei $p_{z,e} = m_e v_p$.

$p_{z,rec}$ ist für $p_{z,e} = m_e v_p$ minimal. Da die Eichung der Rückstoßionenimpulse unabhängig von den Elektronenimpulsen erfolgt, kann dieses Minimum benutzt werden, um die im vorigen Abschnitt eingeführte Korrekturkonstante c_{z0} , welche eine Verschiebung der Elektronenimpulse in Strahlrichtung beschreibt, festzulegen.

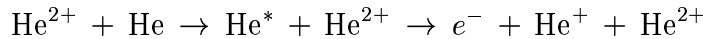
Unter Vorwegnahme der Meßergebnisse muß hier bemerkt werden, daß der wesentliche Anteil der Elektronen mit Impulsen $0 < p_{z,e} < m_e v_p$ erzeugt wird, und deshalb das Minimum aufgrund mangelnder Statistik im interessierenden Bereich in den Meßdaten nicht festzulegen ist.

Aus diesem Grund wurde die Verteilung der Ereignisse in der $p_{z,r}, p_{z,e}$ -Ebene mit dem durch Gleichung 4.10 gegebenen theoretischen Verlauf verglichen und c_{z0} so lange variiert, bis die bestmögliche Übereinstimmung gefunden war. Die Abbildung 4.6 zeigt exemplarisch eine solche Verteilung für die Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u. Die ermittelten Werte für c_{z0} liegen in dem Bereich, der bei Magnetfeldern von maximal 0.3 G aufgrund der Simulationsrechnungen mit SIMION3D (siehe Abbildung 3.10) erwartet wurde.

Der geschätzte Fehler bei der Bestimmung des Impulsnullpunktes in Strahlrichtung bzw. der Korrekturkonstanten c_{z0} beträgt bei dieser Methode 0.07 a.u. (FWHM). Die so bestimmten Werte von c_{z0} der verschiedenen Messungen unterscheiden sich jedoch nur um maximal 0.03 a.u.

4.2.2 Kontrolle der Elektronenimpulseichung mit Auger-Elektronen

Bei mehrfachem Elektroneneinfang in das Projektil ist auch die Besetzung von hoch angeregten Zuständen möglich, die noch in der Targetzone durch Autoionisation zerfallen. Der autoionisierende Zweifachelektroneneinfang (ADC)



ist ein Zweistufenprozeß, der in der Transferionisation enthalten ist.

In den Elektronenemissionsspektren der Stoßsysteme $e^- + \text{He}$, $p^+ + \text{He}$ und $\text{C}^{(4-6)+} + \text{He}$ wurde ein Peak bei ca. 35 eV⁴ gefunden und als Autoionisation der doppeltangeregten He-Zustände $(2p2)1D$ und $(2s2p)1P$ identifiziert [107].

Beim ADC werden die Elektronen aus dem Projektil emittiert und besitzen deshalb im Laborsystem keine feste Energie. Im Bezugssystem, welches mit dem Projektil mitbewegt wird, ist die kinetische Energie jedoch durch die Energieniveaus der beteiligten Zustände bestimmt.

Eine Darstellung der Elektronenimpulse, die zur Identifikation des ADC geeignet ist, ist die Verteilung in der $p_{z,e}, p_{r,e}$ -Halbebene.

$$p_{r,e} = \sqrt{p_{x,e}^2 + p_{y,e}^2} \quad (4.11)$$

⁴ Energiedifferenz zum Grundzustand und Energieüberschuß bei der Autoionisation für einige angeregte Zustände von He [106]: $\text{He}(2s^2)^1S$: 57.82eV/33.23eV, $\text{He}(2s2p)^3P$: 58.30eV/33.71eV, $\text{He}(2p^2)^1D$: 59.89eV/35.30eV, $\text{He}(2s2p)^1P$: 60.13eV/35.54eV.

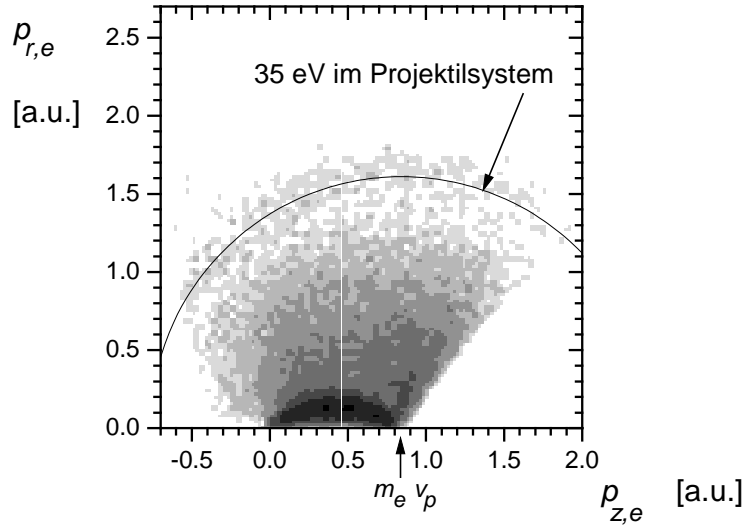


Abbildung 4.7: Elektronenverteilung in der $p_{z,e}, p_{r,e}$ -Ebene: Transferionisation bei $v_p = 0.84$ a.u.: Im Spektrum sind nur Ereignisse mit $T_e \leq T_{e,0}$ enthalten. Die eingezeichnete Linie gibt den Kreis an, auf dem Elektronen nachgewiesen werden, die mit einer kinetischen Energie von 35 eV aus dem Projektil emittiert wurden.

Damit ist außerdem die Rotationssymmetrie um die Strahlrichtung berücksichtigt. Abbildung 4.7 zeigt eine solche Darstellung für die Transferionisation bei einer Projektilgeschwindigkeit von $v_p = 0.84$ a.u.

In Abbildung 4.7 ist in der $p_{z,e}, p_{r,e}$ -Ebene bei hohen Transversalimpulsen eine Erhöhung der Elektronendichte in einem Bereich zu erkennen, der die Form eines Kreissegments hat. Mit der Annahme, daß es sich dabei um Elektronen aus ADC handelt, legt der Mittelpunkt eines Kreises durch diese Verteilung die Projektilgeschwindigkeit auf der Abszisse fest.

Ein Kreisbogen, der durch die Gleichung

$$\left| \vec{p}_e^* \right| = p_{x,e}^2 + p_{y,e}^2 + (p_{z,e} - m_e v_p)^2 = (1.6 \text{ a.u.})^2 \quad (4.12)$$

beschrieben wird, wurde in Abbildung 4.7 eingezeichnet. Ereignisse, die auf einem solchen Kreisbogen liegen, haben in dem Bezugssystem, welches sich gegenüber dem Laborsystem mit der Geschwindigkeit v_p in Strahlrichtung bewegt, die Energie

$$E_{kin}^* = \frac{1}{2m_e} \left| \vec{p}_e^* \right|^2 = 35 \text{ eV}. \quad (4.13)$$

Im Rahmen der Impulsauflösung für die Elektronen, die jedoch bei hohen Transversalimpulsen schlechter ist als in der Nähe der Abszisse, stimmt die Lage dieses Kreisbogens mit den Meßergebnissen überein, was einen groben Fehler bei der Impulseichung ausschließt.

Mit dieser Methode würde ein Fehler in der Eichung der Impulskomponente $p_{x,e}$ von mehr als 10% sichtbar. Weiterhin kann so eine Verschiebung des Nullpunktes auf der z -Achse bzw. ein Fehler des Korrekturparameters c_{z0} von mehr als ± 0.07 a.u. ausgeschlossen werden.

4.3 Untergrundereignisse

Eine wesentliche Quelle von Untergrund in den gemessenen Phasenraumverteilungen sind Signale auf den Detektoren, die von Teilchen stammen, die nicht in dem eigentlich zu erfassenden Ereignis erzeugt wurden. Insbesondere auf dem Elektrendetektor stammt etwa die Hälfte aller Signale von Elektronen, die nicht im Targetvolumen erzeugt wurden. Diese sind im Elektronenflugzeitspektrum statistisch nicht gleichverteilt.

Zufällige Koinzidenzen von Teilchen, die aus den Reaktionen zweier zeitlich dicht aufeinanderfolgender Projektile stammen, führen außerdem zu falschen Meßwerten für die Flugzeiten. Beim Nachweis der Rückstoßionen bedeutet dies, daß neben der falschen Zuordnung auch zum Teil ein falscher Ladungszustand bestimmt wird.

Bei den Messungen, bei denen der Projektildetektor eingesetzt wurde, um den Reaktionszeitpunkt zu bestimmen, ist der Ladungszustand des Projektils immer bestimmt, und somit kann die Ladungserhaltung benutzt werden, um einen großen Teil der zufälligen Koinzidenzen aus den Meßdaten herauszufiltern. Bei den Messungen mit Strahlpulser entfällt diese Möglichkeit. Beim Abzug bzw. bei der Abschätzung des Untergrundanteils müssen somit die beiden Meßmethoden getrennt behandelt werden.

Für beide Meßmethoden ist die Kontrolle, ob das entsprechende Ereignis im Rahmen des Meßfehlers den Energieerhaltungssatz erfüllt, geeignet, um einen großen Teil des Untergrundes zu eliminieren.

Spektren, an denen Strukturen diskutiert werden, die nur einen kleinen Beitrag zum Wirkungsquerschnitt liefern, wurden, wenn möglich, aus einem Teilbereich des gemessenen Phasenraumes erzeugt, der aufgrund der apparativen Gegebenheiten weniger Untergrund enthält.

4.3.1 Statistischer Untergrund im Flugzeitspektrum der Rückstoßionen

Die Flugzeit der Rückstoßionen hängt von deren Ladungszustand und Impuls in Richtung der Spektrometerachse ab. Das Spektrometer ist so dimensioniert, daß man für die beiden möglichen Rückstoßionen He^+ und He^{2+} zwei gut getrennte Peaks erhält. Die Flugzeitmessung kann nicht mit dem Rückstoßion selbst gestartet werden, sondern es wird die Flugzeitdifferenz zu der als konstant angenommenen Projektilflugzeit bestimmt. Im Bereich außerhalb der Peaks im Flugzeitspektrum findet man Ereignisse, bei denen das nachgewiesene Projektil und Rückstoßion nicht aus derselben Reaktion stammen. Dieser statistische Untergrund kann in guter Näherung als konstant über den gesamten Bereich des Flugzeitspektrums angenommen werden, und damit ist abzuschätzen, welcher Anteil von Ereignissen innerhalb der Peaks aus diesem Untergrund stammt.

In Abbildung 4.8 ist bei einer Projektilgeschwindigkeit von 0.84 a.u. das Flugzeitspektrum der Rückstoßionen getrennt für die beiden nachgewiesenen Projektil-

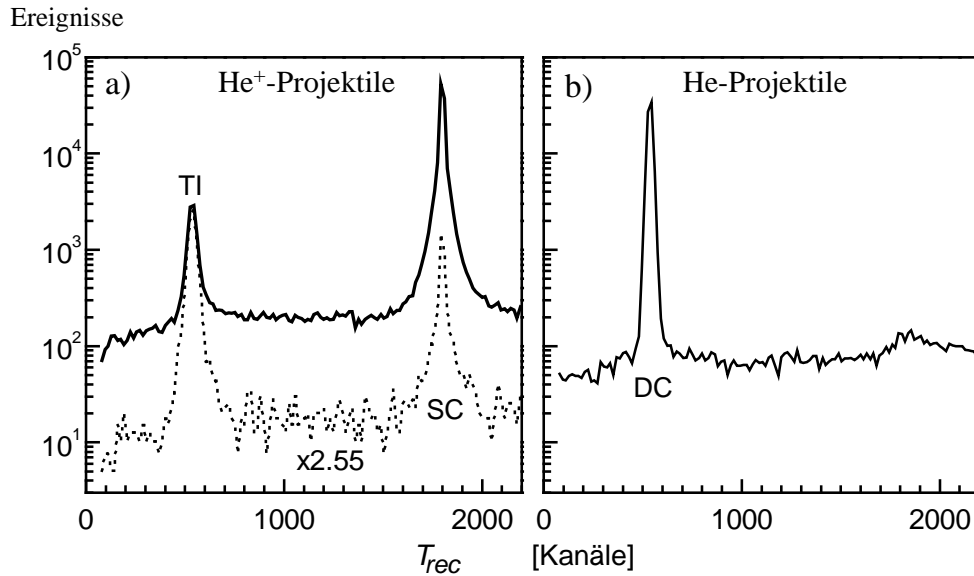


Abbildung 4.8: Flugzeitverteilung der Rückstoßionen bei $v_p = 0.84$ a.u. für a) einfach geladene und b) neutrale Projektile. Die durchgezogenen Linien geben die Verteilung bei einer Koinzidenzmessung zwischen Projektil und Rückstoßion an. Mit einer solchen Zweiteilchenkoinzidenz wurde der Einfach- (SC) und Zweifachelektroneneinfang (DC) vermessen. Bei der gepunkteten Linie wurde in einer zusätzlichen Koinzidenz ein Elektron nachgewiesen. Diese Verteilung ist mit dem Faktor 2.55 multipliziert, der die Reduktion der Ereignisse im Zeitpeak der Transferionisation (TI) durch die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors kompensiert.

ladungszustände aufgetragen (—). Die Peaks können je einem Reaktionskanal zugeordnet werden. Bei den Elektroneneinfangkanälen enthalten die Peaks innerhalb der fünffachen Halbwertsbreite nur ca. 1.5% Untergrunderereignisse. Trotzdem kann dies den nach dem Rückstoßionen-Transversalimpuls differentiellen Wirkungsquerschnitt verfälschen, denn insbesondere für große Transversalimpulse, d.h. große Abweichungen der Flugzeit vom Peaksschwerpunkt, liefert der Untergrund einen nennenswerten Beitrag.

Noch gravierender ist der Effekt für den schwächeren Transferionisationskanal (TI). Hier ist der Nachweis der Elektronen nötig, um durch die zusätzliche Koinzidenz den Untergrund zu reduzieren. In der als Beispiel ausgewählten Messung war der Elektronendetektor nicht in die Koinzidenzschaltung einbezogen. Da die Orts- und Zeitinformationen, falls vorhanden, trotzdem ausgelesen wurden, können per Software die Ereignisse mit einer Dreiteilchenkoinzidenz selektiert werden. Zum Vergleich des so generierten Spektrums (Abbildung 4.8 (.....)) mit dem der Zweiteilchenkoinzidenz wurde dieses mit dem Kehrwert der Nachweiswahrscheinlichkeit des Elektronendetektors von ca. 40% multipliziert. Die Absenkung der Verteilung im Bereich zwischen den Peaks zeigt eine Reduktion des Untergrundes von ca. einer Größenordnung.

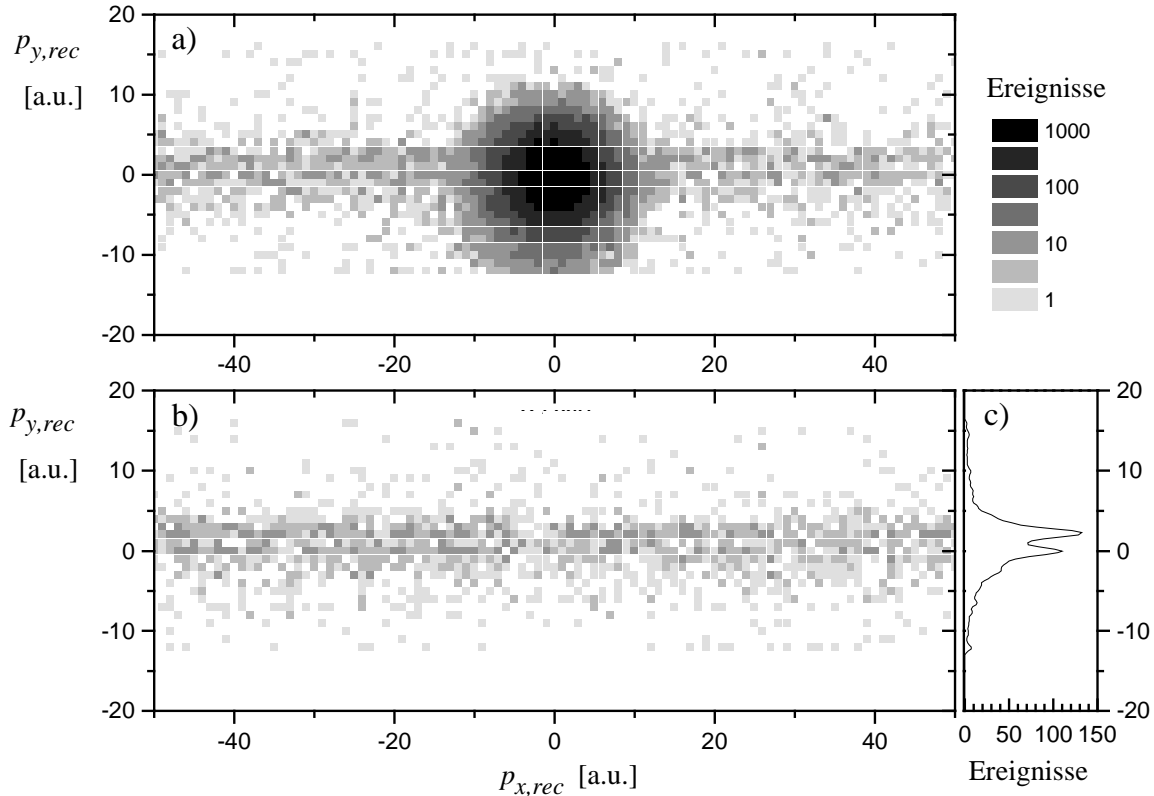


Abbildung 4.9: Transversale Rückstoßionenimpulsverteilung für a) DC ohne Untergrundabzug und b) Untergrund zu neutralen Projektilen, geeicht mit den Eichfaktoren für He^{2+} -Rückstoßionen. Die Berechnung von $p_{x,rec}$ mit Gleichung 3.20 erfolgte in a) mit dem aus dem Peakschwerpunkt bestimmten korrekten $T_{rec,0}$ und in b) mit einem $T_{rec,0}$ aus einem Bereich des Flugzeitspektrums, in dem keine echten Koinzidenzen zu erwarten sind. Das Spektrum c) zeigt eine Projektion von b) auf die senkrechte Achse. Der Peak bei $p_{y,rec} = 0$ enthält die in dieser Richtung korrekt geeichten He^{2+} -Rückstoßionen. He^+ -Rückstoßionen werden aufgrund der Jetgeschwindigkeit in dieser Eichung mit einem um ca. 2.5 a.u. zu großen $p_{y,rec}$ dargestellt und bilden den zweiten Peak.

Wählt man $T_{rec,0}$ aus einem Bereich des Flugzeitspektrums, in dem keine echten Ereignisse enthalten sind, erhält man mit Gleichung 4.1 und sonst unveränderten Eichparametern eine Verteilung von Untergrundereignissen im Impulsraum, die im Rahmen der statistischen Schwankungen mit dem Untergrundanteil in der Verteilung der echten Ereignisse übereinstimmt.

In Abbildung 4.9 sind für das Beispiel des DC die zwei entsprechenden Spektren gegenübergestellt. Der aus der Flugzeit berechnete Impuls $p_{x,rec}$ wird bis zu annähernd beliebig großen Werten erfaßt, während senkrecht dazu die Größe des Detektors den Nachweisbereich beschränkt. Dies ist durch die scharfe Grenze in der Verteilung zu erkennen. Die gute Übereinstimmung im Bereich großer $p_{x,rec}$ zeigt, daß dort der Untergrund dominiert. Man erkennt, daß der differentielle Wirkungs-

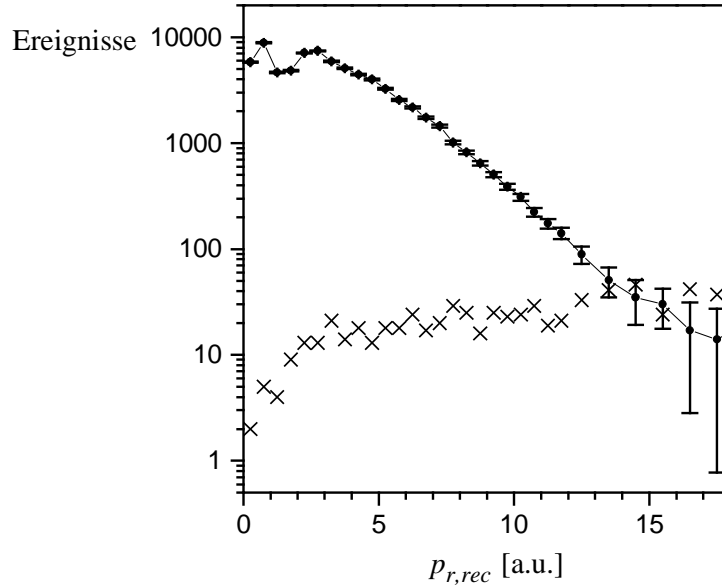


Abbildung 4.10: Verteilung des Rückstoßionen-Transversalimpulses beim DC mit $v_p = 0.84$ a.u.: Untergrundereignisse (\times) und Verteilung mit abgezogenem Untergrund (\bullet). Bei der Berechnung der Fehlerbalken muß auch der statistische Fehler im abgezogenen Untergrundspektrum berücksichtigt werden.

querschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ hier nur bis zu einem Transversalimpuls $p_{r,rec}$ von etwa 15 a.u. mit akzeptablem Fehler berechnet werden kann. Die Abbildung 4.10 zeigt diesen unnormiert mit Angabe des statistischen Fehlers.

4.3.2 Untergrundunterdrückung durch Überprüfung der Energieerhaltung

Bei den untersuchten Reaktionen kann mit Hilfe der Impulserhaltung aus den Meßgrößen der Endzustand kinematisch vollständig bestimmt werden. In Kapitel 2.1 wurde gezeigt, daß der Longitudinalimpuls des Rückstoßions $p_{z,rec}$ in guter Näherung aus der Energieerhaltung und, soweit vorhanden, den Impulsen der freien Elektronen berechnet werden kann, wenn die Bindungsenergien vor und nach dem Stoß bekannt sind.

Bei den Elektroneneinfangreaktionen sind in der Näherung von Gleichung 2.12 nur diskrete Werte für $p_{z,rec}$ möglich. Jeder dieser Werte ist einer Gruppe von Reaktionskanälen zugeordnet. Ereignisse, die mehr von diesen Werten abweichen, als es durch die Auflösung des Spektrometers erklärt werden kann, werden herausgefiltert.

Beim Transferionisations- und Einfachionisationskanal kann in der gemessenen Verteilung von $p_{z,rec}$ nur der Teil unterhalb der durch Gleichung 2.21 bestimmten Schwelle als Untergrund identifiziert werden, da $p_{z,rec}$ neben dem Q -Wert auch vom Elektronenimpuls abhängt. Eine effektive Untergrundreduktion ist dennoch mit einem viel direkteren Weg möglich.

In der kinematisch vollständigen Information des Endzustandes ist auch die kinetische Energie E_{kin}^f aller Teilchen enthalten. Diese wird benutzt, um den Q -Wert der Reaktion, der in Abschnitt 2.1 wie folgt definiert wurde,

$$Q = \sum_k E_{kin,k}^f - \sum_j E_{kin,j}^i \quad (4.14)$$

zu berechnen. Der Index j summiert über alle Teilchen im Anfangszustand "i" und der Index k entsprechend über alle Teilchen im Endzustand "f". Der große experimentelle Fehler bei der kinetischen Energie des Projektils hebt sich aufgrund des Meßprinzips durch die Differenzbildung zwischen Anfangs- und Endzustand heraus.

Bei der Berechnung von Q aus den Meßgrößen wurden, im Gegensatz zu den Rechnungen in Abschnitt 2.1, keine Näherungen verwendet. Diese waren dort nur nötig, um die Gleichungen nach $p_{r,rec}$ auflösen zu können. Dieser Schritt ist hier jedoch nicht erforderlich.

Die theoretisch möglichen Werte für Q ergeben sich nach der Energieerhaltung aus den Bindungsenergien ϵ zu

$$Q = \sum_j \epsilon_j^i - \sum_k \epsilon_k^f. \quad (4.15)$$

Diese sind sowohl für die Ionisation als auch für die Transferionisation im He^{2+} -He-Stoß durch die Gleichung 2.22 bestimmt. Befindet sich das im He^+ -Ion gebundene

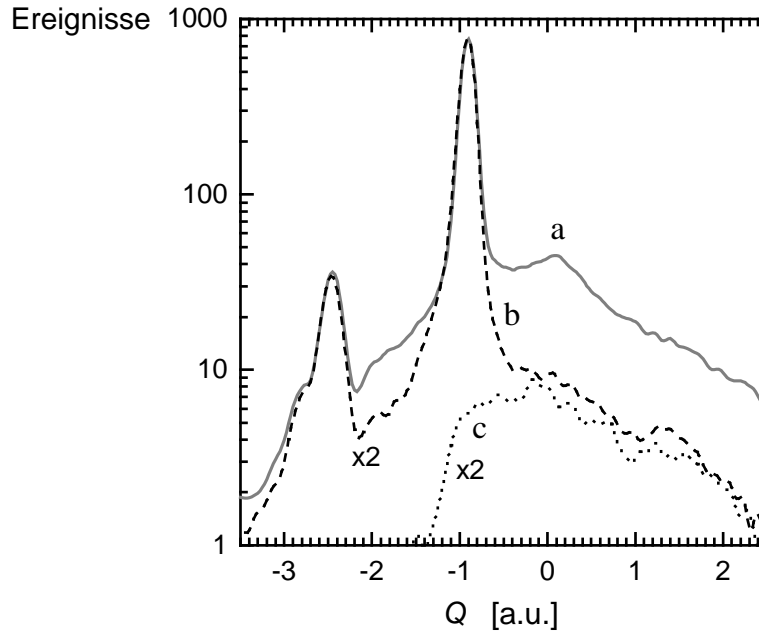


Abbildung 4.11: Q -Wert-Verteilung für die Transferionisation bei $v_p = 0.84$ a.u.: a) alle Ereignisse (—); b) Ereignisse mit $p_{x,e} < 0$, d.h. nur Elektronenimpuls in Richtung des Detektors bzw. nur kurze Flugzeiten (---); c) Ereignisse mit $p_{x,e} < 0$ und nur solche Rückstoßionen, die in einem Teil des Flugzeitspektrums liegen welches nur statistischen Untergrund enthält (.....).

Elektron in der K-Schale, so gilt $Q = -0.90$ a.u., für die L-Schale gilt $Q = -2.40$ a.u. und für die M-Schale $Q = -2.68$ a.u.

Die Abbildung 4.11 zeigt als Beispiel für die Messungen mit Projektildetektor für die Transferionisation bei $v_p = 0.84$ a.u. eine Verteilung der gemessenen Q -Werte. Auf die Messungen mit Strahlpulser, bei denen sich eine etwas andere Situation ergibt, wird im nächsten Abschnitt eingegangen. Das Spektrum 4.11-a enthält alle Ereignisse, von denen liegt etwa die Hälfte im Peak bei $Q = -0.9$ a.u. liegen. Dieser hat eine Halbwertsbreite kleiner 0.2 a.u. und enthält im Bereich von 0.7 a.u. bis 1.1 a.u. etwa 10% Untergrund.

Die den angeregten Zuständen zugeordneten Peaks sind nicht mehr getrennt und enthalten aufgrund der mehr als zehnmals geringeren Wirkungsquerschnitte für diese Kanäle wesentlich weniger Statistik und gleichzeitig einen höheren Anteil an Untergrund. Auf eine Angabe von differentiellen Wirkungsquerschnitten für die Transferionisation mit gleichzeitiger Anregung des gebundenen Elektrons muß aus diesem Grund in dieser Arbeit weitgehend verzichtet werden.

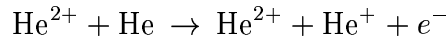
Aufgrund der nichtlinearen Eichfunktion für den aus der Flugzeit T_e berechneten Elektronenimpuls $p_{x,e}$ sind die Ereignisse mit $p_{x,e} < 0$ bzw. $T_e \leq T_{e,0}$, d.h. solche, bei denen die Elektronen in Richtung des Detektors emittiert werden, auf einen kleineren Bereich des Flugzeitspektrums konzentriert als die übrige Hälfte. Wie durch Vergleich von Spektrum 4.11-b, in welchem nur 50% des Phasenraumes berücksichtigt wurden und welches deshalb mit dem Faktor 2 multipliziert ist, mit Spektrum 4.11-a deutlich wird, kann durch diese Auswahl der Untergrund um nahezu eine Größenordnung reduziert werden. Durch geeignete Einschränkung des in der Auswertung berücksichtigten Raumwinkels kann somit festgestellt werden, ob der Untergrund die Form der in Kapitel 5 vorgestellten differentiellen Wirkungsquerschnitte maßgeblich beeinflusst. Sofern dies der Fall ist, wurde die dadurch bedingte Erhöhung des statistischen Fehlers in Kauf genommen. Die angegebenen Fehlerbalken berücksichtigen den Untergrund in beiden Fällen.

Das Spektrum 4.11-c zeigt die zu Spektrum 4.11-b gehörende Verteilung, welche, wie in Abschnitt 4.3.1 beschrieben, aus einem Teil des Rückstoßionen-Flugzeitspektrums erzeugt wurde, der nur statistischen Untergrund enthält. Die Spektren 4.11-b und 4.11-c stimmen im Bereich $Q > 0$ gut überein, was belegt, daß der in Spektrum 4.11-b noch verbliebene Untergrund auf nichtkoinzidente Rückstoßionen zurückgeführt werden kann. Die Analyse der zugehörigen Ortsverteilung auf dem Rückstoßionendetektor ergibt, daß es sich dabei um Rückstoßionen aus Elektroneneinfangreaktionen handelt.

4.3.3 Untergrundunterdrückung beim Ionisationskanal bzw. bei Messungen ohne Projektildetektor

Die Ladungserhaltung legt bei bekanntem Ladungszustand des Rückstoßions und dem Nachweis eines freien Elektrons den Ladungszustand des Projektils fest. Wird dieser zusätzlich auch gemessen, reduziert dies den statistischen Untergrund.

Bei der Einfachionisation (SI)



können jedoch die an einer Reaktion beteiligten Projektile aufgrund des unveränderten Ladungszustandes nicht vom Primärstrahl getrennt und somit nicht nachgewiesen werden. Die SI mußte deshalb in einer Zweiteilchenkoinzidenz mit gepulstem Projektilestrahl vermessen werden. Für diese Messungen, bei denen der Projektildetektor nicht in die Koinzidenzschaltung einbezogen war, und somit nicht für jedes Ereignis ein Signal auf dem Projektildetektor vorhanden ist, muß untersucht werden, welche Auswirkungen das Fehlen dieser Information auf den Untergrund hat.

In den so zur Untersuchung der SI durchgeführten Messungen ist auch der Transferionisationskanal (TI) enthalten. Für diesen sind die Projektildetektorsignale in einem um die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors von ca. $1/2.55$ reduzierten Anteil der Ereignisse vorhanden, d.h., es ist möglich, Spektren zu erzeugen, in denen die Information des Projektildetektors enthalten bzw. nicht enthalten ist. Die Abbildung 4.12-a zeigt, wie der Untergrund, hauptsächlich im Bereich $-0.5 \text{ a.u.} < Q < 0 \text{ a.u.}$, abgesenkt wird, wenn durch den Projektildetektor sichergestellt ist, daß nur Ereignisse, aus denen ein He^+ -Projektil hervorgegangen ist, im Q -Wert-Spektrum enthalten sind.

Für die SI enthält das gemessene Q -Wert-Spektrum (siehe Abbildung 4.12-a) neben den echten Peaks bei $Q = -0.9, -2.4,$ und -2.68 a.u. eine breite Verteilung bei positiven Werten. Dabei handelt es sich um Ereignisse, bei denen nicht wie ei-

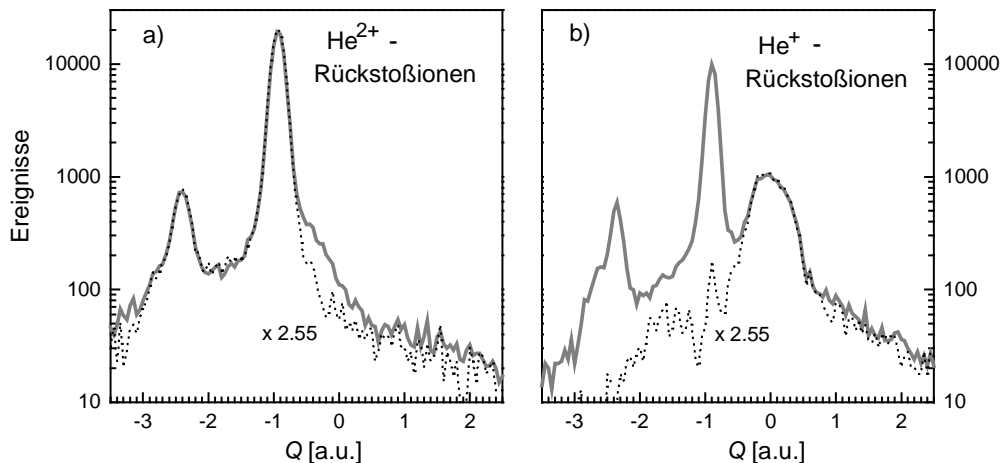


Abbildung 4.12: Gemessene Q -Wert-Verteilungen bei $v_p = 0.84 \text{ a.u.}$ für a) die Transferionisation (TI) und b) die Ionisation (SI): Spektren mit Projektil-Elektron-Koinzidenz, d.h. ohne Projektilnachweis (—) und Spektren mit Dreiteilchenkoinzidenz, d.h. mit Nachweis eines Projektils, die mit dem Kehrwert der Nachweiseffizienz multipliziert sind (.....). Bei der TI wird durch den Projektilnachweis der Untergrund leicht reduziert, während bei der SI Untergrundereignisse selektiert werden, da He^{2+} vor dem Projektildetektor ausgeblendet wird.

gentlich erwartet ein He^{2+} -Projektil produziert wurde. Dies ergibt sich durch den Vergleich mit dem entsprechenden Spektrum, das nur Ereignisse aus einer Dreiteilchenkoinzidenz und somit nur Untergrundereignisse mit He- oder He^+ -Projektilen, enthält.

Dieser Untergrund liefert in den Bereichen der echten Peaks nur einen verschwindend kleinen Beitrag, so daß sich die fehlende Koinzidenz mit dem Projektildetektor bei der Messung der SI nicht negativ auswirkt.

4.4 Darstellung der Elektronenimpulse in einem durch die nukleare Streuebene festgelegten Koordinatensystem

In den Abschnitten 4.1 und 4.2 wurde bei der Eichung des Rückstoßionen- und Elektronenspektrometers die Symmetrie der gemessenen Verteilungen um die Strahlachse ausgenutzt.

Stellt man die Impulsvektoren der beiden gemessenen Teilchen in Zylinderkoordinaten (r, φ, z^o) dar, d.h., für das Rückstoßion gilt

$$p_{r,rec} \cos(\varphi_{rec}) = p_{x,rec} \quad (4.16)$$

$$p_{r,rec} \sin(\varphi_{rec}) = p_{y,rec} \quad (4.17)$$

$$p_{z^o,rec} = p_{z,rec} \quad (4.18)$$

und für das Elektron entsprechend

$$p_{r,e} \cos(\varphi_e) = p_{x,e} \quad (4.19)$$

$$p_{r,e} \sin(\varphi_e) = p_{y,e} \quad (4.20)$$

$$p_{z^o,e} = p_{z,e} \quad (4.21)$$

dann müssen die einfachdifferenziellen Wirkungsquerschnitte $d\sigma/d\varphi_{rec}$ und $d\sigma/d\varphi_e$ konstant sein. Dies wurde mit kleinen Abweichungen, welche durch die unterschiedliche Auflösung entlang der drei Raumachsen und Einschränkungen des Raumwinkels bedingt sind, auch durch die Messungen bestätigt.

Betrachtet man für Elektronen und Rückstoßionen, die im selben Stoß erzeugt wurden, jedoch die Differenz der beiden Polarwinkel $\varphi = \varphi_e - \varphi_{rec}$, so ist die Verteilung dieser Größe nicht mehr durch die Symmetrie bestimmt. In Abbildung 4.13 ist am Beispiel der Transferionisation in Stößen von 70 keV He^{2+} -Projektilen mit He zu erkennen, daß das Elektron und das Rückstoßion in der transversalen Ebene vorzugsweise in die gleiche oder entgegengesetzte Richtung emittiert werden.

Aus den Größen $p_{r,e}$, $p_{z,e}$ und dem errechneten Winkel φ kann nun mit den Gleichungen

$$p_{x',e} = p_{r,e} \cos(\varphi) \quad (4.22)$$

$$p_{y',e} = p_{r,e} \sin(\varphi) \quad (4.23)$$

$$p_{z',e} = p_{z^o,e} = p_{z,e} \quad (4.24)$$

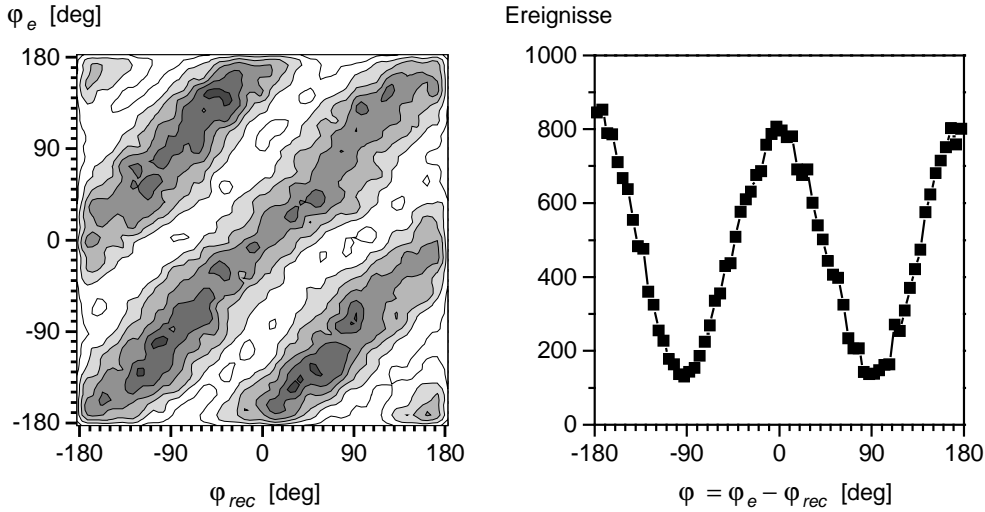


Abbildung 4.13: Polarwinkelverteilung der Elektronen- und Rückstoßionenemission bei der Transferionisation in 70 keV He^{2+} -He-Stößen.

wieder eine Darstellung der Elektronenverteilung in kartesischen Koordinaten errechnet werden. Dieses Koordinatensystem hat keine feste Orientierung im Raum, sondern wird für jedes Ereignis individuell festgelegt. Elektronenimpulsverteilungen in diesem System enthalten auch Informationen über die Richtung des Rückstoßionenimpulses.

$p_{x',e}$ ist die Projektion des Elektronentransversalimpulses auf die nukleare Streuebene, die in diesem Experiment durch die Strahlrichtung und den Impulsvektor des Rückstoßions festgelegt wird. Da $p_{r,e}$ für fast alle Ereignisse kleiner ist als die Impulsauflösung für das Rückstoßion, unterscheidet sich diese Definition nicht wesentlich von der sonst oft üblichen, bei der die Projektiltrajektorie die Streuebene bestimmt.

Die Abbildung 4.14 zeigt in dieser Darstellung die transversale Elektronenverteilung. Die nukleare Streuebene liegt waagrecht, wobei das Rückstoßion nach rechts und das Projektil nach links gestreut wird. Die Richtung senkrecht zur Streuebene (y' -Achse) ist nicht durch eine meßbare physikalische Größe ausgezeichnet, sondern wird als Kreuzprodukt $\vec{e}_{y'} = \vec{e}_{z'} \times \vec{e}_{x'}$ aus den beiden Einheitsvektoren, welche die Streuebene aufspannen, definiert, d.h., die Richtung von $\vec{e}_{y'}$ hängt von der Händigkeit des verwendeten Koordinatensystems ab. Da die Coulombwechselwirkung invariant gegenüber Raumspiegelung ist, müssen die gemessenen Verteilungen spiegelsymmetrisch in bezug zur Streuebene sein, d.h., zur Diskussion der Ergebnisse genügt es, nur die obere Hälfte der in Abbildung 4.14 dargestellten Verteilung zu berücksichtigen bzw. anstelle von $p_{y',e}$ den Betrag dieses Impulses $|p_{y',e}|$ darzustellen.

Der wesentliche Teil der Ereignisse liegt im Bereich $|p_{y',e}| < 0.1$ a.u., d.h., die Breite der gemessenen Verteilung liegt in der Größe der Auflösung des Elektronenspektrometers.

Die Verteilung von $p_{x',e}$ unterliegt dagegen keiner Symmetriebedingung. Der Be-

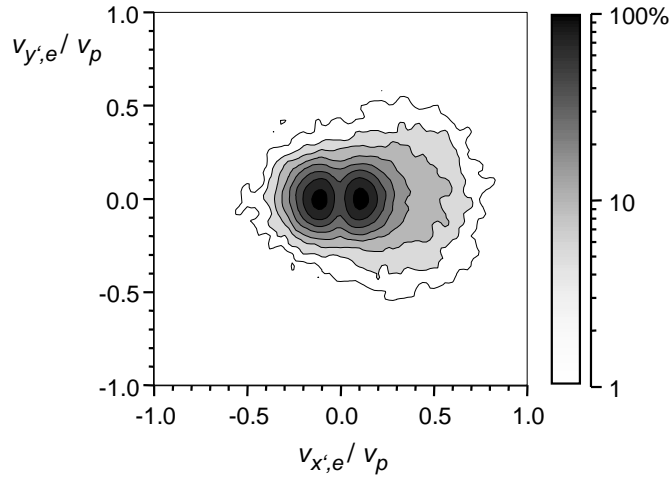


Abbildung 4.14: Transferionisation bei $v_p = 0.84$ a.u.: Elektronentransversalimpuls im durch die nukleare Streuebene definierten Koordinatensystem. Das Rückstoßion fliegt in dieser Darstellung immer nach rechts und es sind nur Ereignisse mit $0.3 v_p \leq v_{z,e} \leq 0.7 v_p$ und $Q = -0.9$ a.u. enthalten.

reich mit hohen Wirkungsquerschnitten erstreckt sich hier von etwa -0.25 a.u. bis 0.25 a.u. und ist damit deutlich breiter als die experimentelle Auflösung. Ähnliche Verhältnisse wurden für alle gemessenen Projektilgeschwindigkeiten gefunden.

4.5 Differentielle Wirkungsquerschnitte

Der quantenmechanische Zustand von drei freien Teilchen wird durch die neun Impulskomponenten beschrieben. Bei einem um die Strahlachse rotationssymmetrischen Anfangszustand erlauben die Erhaltungssätze für die drei Impulskomponenten, die Energieerhaltung und die Symmetrie, die kinematisch vollständige Information über den Endzustand in einer vierdimensionalen Verteilung darzustellen. Bei den untersuchten Ionisationsprozessen (TI und SI) kann dies zum Beispiel durch den vierfachdifferentiellen Wirkungsquerschnitt $d^4\sigma/(dp_{x',e} dp_{y',e} dp_{z',e} dp_{r,rec})$ geschehen. Die Größen $p_{x',e} p_{y',e}$ wurden im letzten Abschnitt definiert.

Der Endzustand kann außer durch die Impulskomponenten der Teilchen z.B. auch durch die kinetische Energie und den Emissionswinkel charakterisiert werden. Dementsprechend ergeben sich viele weitere äquivalente Formen für den vierfachdifferentiellen Wirkungsquerschnitt.

Aufgrund der apparativen Auflösung enthält die Impulskomponente $p_{y',e}$ nur wenige Informationen. Integriert man über diesen Parameter, erhält man den dreifachdifferentiellen Wirkungsquerschnitt $d^3\sigma/(dp_{x',e} dp_{z',e} dp_{r,rec})$, der, mit wenigen Ausnahmen, Ausgangspunkt für die Diskussion der Ergebnisse im folgenden Kapitel ist.

Die Messungen haben ergeben, daß die Breite der Elektronenimpulsverteilung in

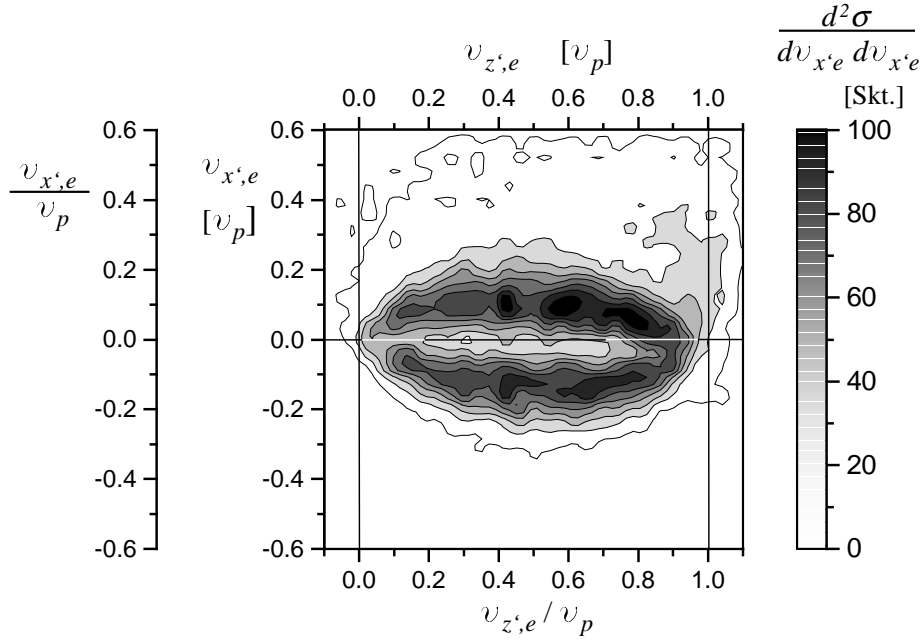


Abbildung 4.15: Elektronengeschwindigkeitsverteilung in der nuklearen Streuebene - $d^2\sigma/(dv_{x',e} dv_{z',e})$: Transferionisation $\text{He}^{2+} + \text{He}$ bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u. Für $v_{z',e}/v_p > 1$ ist der Nachweisraumwinkel reduziert.

Strahlrichtung linear mit der Projektilgeschwindigkeit v_p skaliert. Zum Vergleich der Meßergebnisse bei unterschiedlichen v_p ist es deshalb sinnvoll, die Elektronenimpulse in Einheiten von $m_e v_p$ aufzutragen.

Um in den Achsenbeschriftungen nicht immer die Elektronenmasse mit angeben zu müssen, wird stattdessen oft die Elektronengeschwindigkeit v_e in Einheiten von v_p aufgetragen bzw. die dimensionslose Größe v_e/v_p verwendet. Strenggenommen unterscheiden sich die beiden letztgenannten Formen, denn im einen Fall ist z.B. der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$d^2\sigma/(dv_{x',e} dv_{z',e})$$

und im anderen

$$d^2\sigma/(d\frac{v_{x',e}}{v_p} d\frac{v_{z',e}}{v_p}) = v_p^2 d^2\sigma/(dv_{x',e} dv_{z',e})$$

die der Achsenkalierung entsprechende Verteilung. Diese beiden Verteilungen unterscheiden sich lediglich durch den konstanten Faktor v_p^2 , und somit kommt der Unterschied nur zum Tragen, wenn die Meßdaten auf absolute Wirkungsquerschnitte normiert wurden.

Unabhängig von der in den Abbildungen gewählten Form der Achsenbeschriftung wird die Verteilung der Elektronenimpulse in der Streuebene immer durch den zweifachdifferentiellen Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dv_{x',e} dv_{z',e})$ angegeben.

Die Abbildung 4.15 zeigt als Beispiel einer solchen Darstellung die Transferionisation bei $v_p = 0.84$ a.u. Das Target befindet sich in dem hier dargestellten Phasenraum am Punkt $v_{z',e}/v_p = v_{x',e}/v_p = 0$ und die Projektile vor dem Stoß am Punkt $v_{z',e}/v_p = 1$, $v_{x',e}/v_p = 0$. Mit der hier verwendeten Definition von $v_{x',e}$ wird das Targetatom beim Stoß immer in die obere Halbebene gestreut, die Geschwindigkeit des Rückstoßions ist auf dieser Skala jedoch verschwindend klein.

Bleiben beide Elektronen gebunden, so entfallen von den vier Freiheitsgraden der Bewegung ($dp_{x',e} dp_{y',e} dp_{z',e} dp_{r,rec}$) alle Impulskomponenten des Elektrons. Folglich werden die Elektroneneinfangreaktionen (SC und DC) durch den streuwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ kinematisch vollständig beschrieben.

4.6 Zusammenstellung der experimentellen Auflösungen für die verwendeten Größen

In dieser Arbeit sind die Ergebnisse von Messungen aus einem weiten Bereich von Projektilgeschwindigkeiten zusammengestellt. Den damit verbundenen Änderungen der Projektilflugzeiten vom Target bis zum Detektor mußte durch Anpassung der Signalverzögerungen Rechnung getragen werden. Weiterhin wurde die Spektrometereinstellung jeweils der Breite der Elektronenimpulsverteilung angepaßt. Im oberen und unteren Bereich der Projektilenergien war zudem die Einstellung der Strahlführung problematisch. Durch die Unterschiede zwischen den Messungen variiert auch die Auflösung. Deshalb wird im Folgenden für jede Größe ein Bereich angegeben, in dem die experimentelle Auflösung liegt. Die besten Werte wurden bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten erreicht, die mit niedrigen Spektrometerspannungen vermessen wurden.

Eine genaue Kontrolle über die erreichte Auflösung erhält man für den Rückstoßenimpuls in Strahlrichtung $p_{rec,z}$ durch die Linienstruktur bei den Elektronentransferprozessen SC und DC. Diese Größe wird jedoch nicht in den differentiellen Wirkungsquerschnitten verwendet, sondern dient nur zur Bestimmung des Reaktionskanals. Die Impulskomponente $p_{y,rec}$ wird nach dem gleichen Verfahren wie $p_{x,rec}$ gemessen. Der angegebene Fehler ist größer, da das Target eine breite Impulsverteilung in dieser Raumrichtung besitzt, die an dieser Stelle berücksichtigt wurde. Die Flugzeitmessung, die $p_{x,rec}$ bestimmt, war zum Teil durch elektronische Probleme verfälscht. Verschiebungen im Schwerpunkt des Flugzeitpeaks während einer Meßzeit von einigen Stunden konnten nur zum Teil korrigiert werden. Von der Konzeption des Spektrometers hätte für $p_{x,rec}$ eine ähnliche Auflösung wie für $p_{z,rec}$ erreicht werden können.

Größe	Auflösung für He ⁺ -Rückstoßen [a.u.] (FWHM)	Auflösung für He ²⁺ -Rückstoßen [a.u.] (FWHM)
$p_{z,rec}$	0.13 - 0.2	0.15 - 0.25
$p_{y,rec}$	0.3 - 0.4	0.3 - 0.45
$p_{x,rec}$	0.2 - 0.3	0.3 - 0.5

Auch für die Auflösung bei der Impulsmessung der Elektronen ergeben sich Werte, die mit der Projektilgeschwindigkeit variieren. Nun haben aber die Meßergebnisse gezeigt, daß es sinnvoll ist, anstelle der Impulse die skalierten Geschwindigkeiten \vec{v}_e/v_p aufzutragen. In dieser Skalierung ist die Auflösung in y - und z -Richtung durch die Wahl der Spektrometerspannungen nahezu konstant, d.h. unterscheidet sich nicht bei Messungen mit unterschiedlichen Projektilgeschwindigkeiten. Nach der Eichfunktion, die $v_{x,e}$ aus der Elektronenflugzeit bestimmt, sollte der Fehler von $v_{x,e}/v_p$ mit abnehmender Projektilgeschwindigkeit kleiner werden. Dies wird jedoch weitgehend dadurch kompensiert, daß die Flugzeitauflösung bei kleinem v_p schlechter ist⁵. Somit kann für alle Komponenten der skalierten Elektronengeschwindigkeit eine von v_p unabhängige Auflösung angegeben werden. Für $p_{x,e}$ bzw. $v_{x,e}/v_p$ muß zwischen den Messungen mit Projektildetektor, die einen kleinen Fehler in der Elektronenflugzeit besitzen, und den Messungen mit Strahlpulser unterschieden werden.

Größe	Auflösung für Messungen mit Projektildetektor (FWHM)	Auflösung für Messungen mit gepulstem Strahl (FWHM)
$p_{x,e}$ $v_{x,e}/v_p$	0.05-0.1 a.u. 0.1	0.08-0.15 a.u. 0.15
$p_{y,e}$ $v_{y,e}/v_p$	0.015 - 0.03 a.u. 0.04	
$p_{z,e}$ $v_{z,e}/v_p$	0.02 - 0.04 a.u. 0.04	

Die Größen $v_{x',e}/v_p$ und $v_{y',e}/v_p$, welche sich abhängig von der Lage der nuklearen Streuebene aus $v_{x,e}/v_p$ und $v_{y,e}/v_p$ berechnen, wurden gemäß der Fehlerfortpflanzung mit einer Auflösung von 0.07 (FWHM) bzw. 0.1 bei gepulstem Strahl gemessen. Dies gilt jedoch nur, wenn über alle Lagen der Streuebene gemittelt wurde. Selektiert man jedoch Ereignisse, bei denen $v_{x',e}$ annähernd gleich $v_{y,e}$ ist, d.h., die Streuebene senkrecht im Laborsystem steht (in y -Richtung), so besitzt $v_{x',e}$ die gleiche Auflösung wie $v_{y,e}$.

In den meisten Spektren, die Elektronenverteilungen in der nuklearen Streuebene zeigen, werden nur solche Ereignisse dargestellt, für die

$$v_{x',e} = \sin(\phi) v_{x,e} + \cos(\phi) v_{y,e} \quad \text{mit } -45^\circ < \phi < 45^\circ \quad (4.25)$$

gilt. Durch die Multiplikation von $v_{x,e}$ mit einem Faktor, der immer kleiner als $1/\sqrt{2}$ ist, wird so der Fehler von $v_{x',e}$ reduziert. Damit ergeben sich die folgenden Auflösungen:

Größe	Auflösung für Messungen mit Projektildetektor (FWHM)	Auflösung für Messungen mit gepulstem Strahl (FWHM)
$v_{x',e}/v_p$	0.05	0.065

⁵ Die Ursache dafür ist, daß die Flugzeit der Projektile durch das Target bei Verringerung der Projektilgeschwindigkeit länger wird.

Kapitel 5

Präsentation und Diskussion der Ergebnisse

Im durchgeführten Experiment wurde mit COLTRIMS bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten v_p der Endzustand der folgenden Reaktionen im wesentlichen Teil des Phasenraumes lückenlos und kinematisch vollständig erfaßt:

- Der Einfelektroneneinfang (Single Capture - SC)
 $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^+$,
 $v_p = 0.59, 0.64, 0.71, 0.78, 0.84, 0.95$ und 1.06 a.u.
- Der Zweifelektroneneinfang (Double Capture - DC)
 $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He} + \text{He}^{2+}$,
 $v_p = 0.59, 0.64, 0.71, 0.78, 0.84, 0.95$ und 1.06 a.u.
- Die Einfachionisation (Single Ionization - SI)
 $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^{2+} + \text{He}^+ + e^-$,
 $v_p = 0.71, 0.90, 0.95$ und 1.06 a.u.
- Die Transferionisation (Transfer Ionization - TI)
 $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^{2+} + e^-$,
 $v_p = 0.64, 0.71, 0.78, 0.84, 0.90, 0.95$ und 1.06 a.u.

Als Projektile kamen die beiden Isotope $^4\text{He}^{2+}$ und $^3\text{He}^{2+}$ zum Einsatz, für den Gasjet, d.h. das Target, konnte dagegen aus Kostengründen nur das Isotop ^4He verwendet werden. Soweit Messungen mit beiden Isotopen zur gleichen Projektilgeschwindigkeit durchgeführt wurden, haben die Verteilungen der Rückstoßionen- und Elektronenimpulse übereingestimmt (siehe Abschnitt 5.8) und wurden teilweise zur Verringerung des statistischen Fehlers addiert.

In Abschnitt 4.5 wurde diskutiert, wie die Phasenraumverteilung von zwei Teilchen bei den Elektroneneinfangreaktionen bzw. von drei Teilchen bei den Ionisationsprozessen im Endzustand unter Berücksichtigung der Symmetrien und Erhaltungssätze parametrisiert werden kann. Jeder Parametrisierung ist dabei eine

bestimmte Form des differentiellen Wirkungsquerschnittes zugeordnet. Die durchgeführte Messung erlaubt die Berechnung des differentiellen Wirkungsquerschnittes in jeder Darstellung.

Da man sich bei der Präsentation der Ergebnisse auf die Darstellung von zwei-dimensionalen Verteilungen beschränken muß, wurden Schnitte und Projektionen gewählt, anhand derer verschiedene Fragestellungen diskutiert werden. Dabei wurde besonderes Gewicht auf den Vergleich der genannten Prozesse und auf die Änderung des differentiellen Wirkungsquerschnittes mit der Projektilgeschwindigkeit gelegt.

Im Folgenden werden zuerst totale und danach im Rückstößen-Transversalimpuls differentielle Wirkungsquerschnitte diskutiert, die auch für die Prozesse ohne Elektronenemission verfügbar sind. Nach einer Interpretation dieser Ergebnisse im quasimolekularen Bild (siehe auch Abschnitt 2.9) wird die dreidimensionale Elektronenverteilung in verschiedenen Darstellungen präsentiert.

5.1 Totale Wirkungsquerschnitte

Absolut normierte Wirkungsquerschnitte können mit der verwendeten Apparatur nicht bestimmt werden, da die Projektilrate und die Targetdichte nicht mit ausreichender Genauigkeit bekannt sind. Die zur Normierung notwendigen Werte wurden deshalb der Literatur entnommen. Ihre Fehler bzw. die Abweichungen zwischen verschiedenen Veröffentlichungen betragen bis zu 40% (siehe Abbildung 5.1).

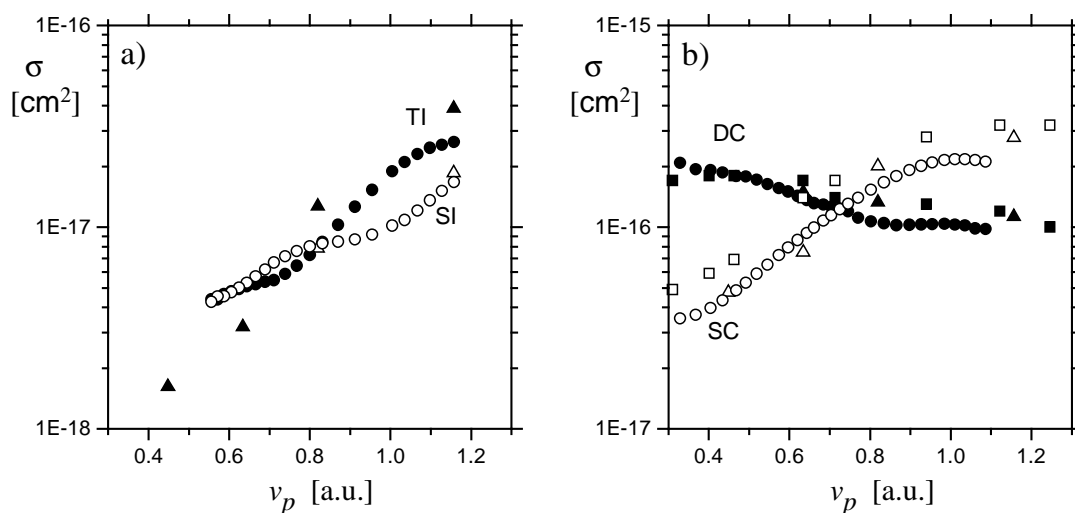


Abbildung 5.1: Totale Wirkungsquerschnitte verschiedener Reaktionskanäle beim He^{2+} -He-Stoß: a) SI (offene Symbole) und TI (gefüllte Symbole), b) SC (offene Symbole) und DC (gefüllte Symbole), gemessen von V. V. Afrosimov (1975) [108] (\circ), R. D. DuBois (1987) [109] (\triangle) und K. H. Berkner (1968) [110] (\square). Totale Wirkungsquerschnitte bis zu einer Projektilgeschwindigkeit von 6 a.u. wurden von Shah und Gilbody [111] gemessen.

Nur die Messungen von Afrosimov et al [108] enthalten in dem für diese Arbeit relevanten Bereich der Projektilgeschwindigkeit eine ausreichende Anzahl von Datenpunkten, um auf die hier verwendeten Geschwindigkeiten interpolieren zu können. Sie wurden deshalb zur Normierung der gemessenen Verteilungen verwendet.

5.1.1 Quotienten totaler Wirkungsquerschnitte

Die eigenen experimentellen Daten enthalten das Verhältnis zwischen den Wirkungsquerschnitten der verschiedenen Reaktionskanäle. Dieses wird mit den Quotienten aus den in Abbildung 5.1 gezeigten totalen Wirkungsquerschnitten verglichen.

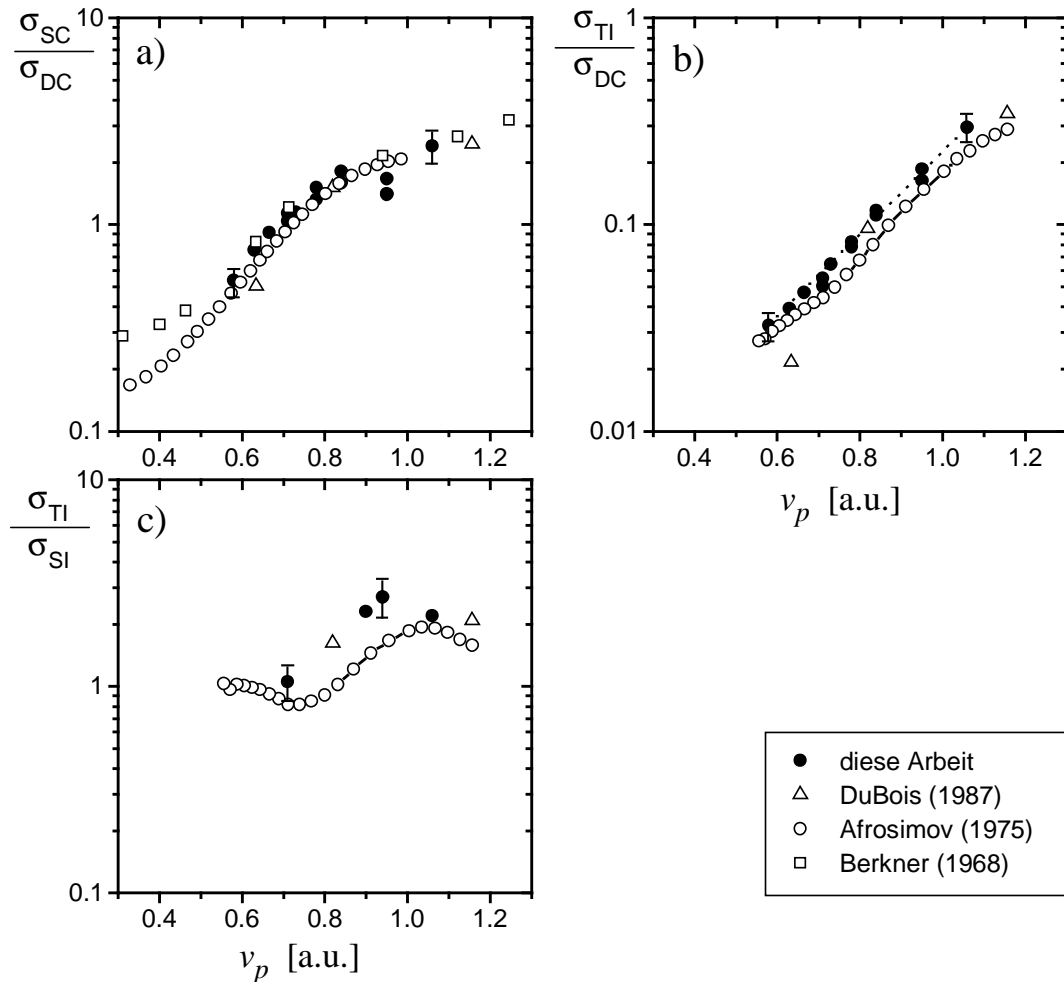


Abbildung 5.2: Quotienten totaler Wirkungsquerschnitte von a) SC und DC, b) TI und DC, c) TI und SI für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten: Werte, die aus den totalen Wirkungsquerschnitten in [109, 108, 110] berechnet wurden (offene Symbole) und eigene Ergebnisse (●). Das Verhältnis aus σ_{SI} und σ_{TI} kann durch die Funktion $\sigma_{TI}/\sigma_{DC} = 0.0023 \exp(v_p/0.218 \text{ a.u.})$ beschrieben werden.

Die Abbildungen 5.2-a und -b zeigen für die Reaktionskanäle σ_{SC} , σ_{DC} und σ_{TI} eine sehr gute Übereinstimmung der eigenen Ergebnisse mit aus der Literatur entnommenen Werten. Für das Verhältnis von σ_{TI} zu σ_{SI} liegen die eigenen Meßwerte, ebenso wie die von DuBois, über denen von Afrosimov. Es ist zu vermuten, daß bei Afrosimov die SI einen erhöhten Untergrund enthält, da in diesem Reaktionskanal die Realisation einer Dreiteilchenkoinzidenz wegen des unveränderten Projektilladungszustandes mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden ist. Für die eigenen Ergebnisse beträgt der Fehler der in Abbildung 5.2 gezeigten Datenpunkte ca. $\pm 15\%$. Bei SI und TI bezieht sich das angegebene Verhältnis jedoch nur auf den Teil des totalen Wirkungsquerschnittes, der in dem erfaßten Phasenraumbereich liegt. Gemäß den Ergebnissen von Tests bei höheren Spektrometerspannungen wurden ca. 90% des totalen Wirkungsquerschnittes erfaßt.

Für die Normierung der in dieser Arbeit gemessenen Verteilung wurde aus den Daten von Afrosimov wahlweise einer der Reaktionskanäle SC, DC oder TI verwendet, d.h., die Normierung der SI erfolgte durch das selbst bestimmte Verhältnis zur TI.

Abbildung 5.2-c zeigt, unabhängig von den Abweichungen zwischen den verschiedenen Messungen, daß sich die totalen Wirkungsquerschnitte von SI und TI bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten annähern. Durch Spiegelung des Systems im Endzustand gehen diese beiden Reaktionskanäle ineinander über. Werden diese Reaktionskanäle nur durch gerade oder nur durch ungerade Zustände (im molekularen Bezugssystem) besetzt, so liefern diese gleiche Beiträge zur SI und TI. Nur durch eine Linearkombination aus Zuständen beider Symmetrien kann sich ein Endzustand ergeben, in dem sich die totalen Wirkungsquerschnitte unterscheiden. Eine mögliche Erklärung für die Annäherung der totalen Wirkungsquerschnitte ist, daß bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten nur noch Zustände einer Symmetrie zu den beiden Ionisationsprozessen beitragen.

Die Phasendifferenz φ zwischen zwei molekularen Zuständen unterschiedlicher Symmetrie ändert sich mit dem Stoßparameter, da deren Energieeigenwerte für kleine Kernabstände nicht entartet sind. Nach den Ausführungen in Abschnitt 2.4 (siehe Gleichung 2.30) und Abschnitt 2.9 bestimmt φ , bei welchem der beiden Kerne zwischen dem geraden und ungeraden Anteil der Wellenfunktion konstruktive bzw. destruktive Interferenz herrscht, d.h., wo das oder die Elektronen zu finden sind. Ändert sich φ im relevanten Stoßparameterbereich um viele π , wird die Interferenzstruktur nicht mehr aufzulösen sein, und im Mittel erhält man ebenfalls gleiche Wirkungsquerschnitte. Anschaulich bedeutet dies, daß das Quasimolekül aus Projektil und Target lange genug existiert hat, so daß die Elektronen "vergessen haben", welchem der beiden Kerne sie bei der Bildung des Moleküls zugeordnet waren. In diesem Fall wird auch im Endzustand die Bezeichnung der Kerne mit Projektil und Target keine Rolle mehr spielen, und SI und TI werden ununterscheidbar. Gleiche totale Wirkungsquerschnitte sind also auch bei der Beteiligung von Zuständen unterschiedlicher Symmetrie möglich.

Anhand der in diesem Kapitel präsentierten differentiellen Wirkungsquerschnitte soll diese Verknüpfung von SI und TI im quasimolekularen Bild weiter untersucht

werden. Da die totalen Wirkungsquerschnitte, wie in Abbildung 5.1 zu sehen ist, exponentiell mit v_p fallen, stehen differentielle Daten der SI nur für Projektilgeschwindigkeiten größer als 0.71 a.u. und bei der TI ab 0.64 a.u. zur Verfügung.

In [87] wurde Übereinstimmung der totalen Wirkungsquerschnitte für den SC mit Projektil- bzw. Targetanregung für Projektilgeschwindigkeiten kleiner als 0.55 a.u. gefunden. Die hier verwendeten Projektilgeschwindigkeiten sind 1.2 bis 2 mal höher. In diesem Bereich ist nicht mehr zu erwarten, daß die differentielle Wirkungsquerschnitte von TI und SI generell große Ähnlichkeit besitzen. Es wird sich jedoch zeigen, daß es möglich ist, Klassen von Ereignissen zu selektieren, bei denen dies auch bei hohen Projektilgeschwindigkeiten noch der Fall ist.

5.1.2 Differenzierung der Reaktionskanäle nach elektronischen Zuständen der gebundenen Elektronen

Die Reaktionskanäle SC, DC, SI und TI können nach den Zuständen der gebundenen Elektronen weiter differenziert werden. Im durchgeführten Experiment wurde der Q -Wert jedes Ereignisses, d.h. die Bilanz der Bindungsenergien, durch die Messung aller kinetischer Energien bestimmt (siehe Abschnitt 2.1). Somit ist die Aufteilung des Wirkungsquerschnittes eines Reaktionskanals zumindest nach Endzuständen verschiedener Bindungsenergien möglich. Die verschiedenen Drehimpulszustände innerhalb einer Schale können nicht getrennt werden, weiterhin ist es mit COLTRIMS nicht möglich, beim SC mit Anregung eines der beiden Elektronen festzustellen, ob sich dieses im Projektil oder Target befindet.

Die Bestimmung des Q -Wertes bei der SI und der TI erfordert die Messung aller Impulskomponenten des freien Elektrons, d.h. auch die Elektronenflugzeitmessung mit ausreichender Auflösung. Im Gegensatz zu dem hier vorgestellten Experiment wurde dies in früheren Arbeiten [6, 4, 5, 7, 9] nicht realisiert. Hier liegt eine der wesentlichen apparativen Weiterentwicklungen dieser Arbeit.

Abbildung 5.3 zeigt die totalen Wirkungsquerschnitte der Elektroneneinfangreaktionen und der TI differenziert nach Q -Werten. Die gemessenen Verhältnisse der totalen Wirkungsquerschnitte wurden auf die Daten in [112] normiert. Die Bedeutungen der verwendeten Abkürzungen sind Tabelle 5.4 zu entnehmen.

Beim SC trägt der Übergang in den Grundzustand im gezeigten Geschwindigkeitsbereich nur mit ca. 30% zum Wirkungsquerschnitt bei. Wie in Abschnitt 2.9 erläutert wurde, resultiert dies daraus, daß zwischen dem Grundzustand im Quasimolekül und allen sonst für die Reaktion relevanten molekularen Orbitalen eine relativ große energetische Lücke ist.

Beim DC ist der Einfang in den Grundzustand (DC1) resonant und liefert den Hauptbeitrag zum Wirkungsquerschnitt. So trägt der DC2 bei $v_p = 0.59$ a.u. nur zu ca. 5% zum DC bei. Bei höheren Projektilgeschwindigkeiten werden jedoch die molekularen Zustände durch die dynamischen Kopplungsterme stärker gemischt, so daß der Anteil des DC2 bis auf 25% steigt.

Bei der TI sind im gesamten untersuchten Geschwindigkeitsbereich nur ca. 7%

der Projektile in einem angeregten Zustand. Hierfür ist sicherlich der stark negative Q -Wert der TI2 verantwortlich, d.h., es ist für das System "schwierig", zusätzlich zur Ionisation eines Elektrons das zweite in einen angeregten Zustand zu befördern. In den folgenden Abschnitten wird anhand der differentiellen Wirkungsquerschnitte diskutiert, welche Entwicklung des Systems im quasimolekularen Bild zu einer TI2 führen könnte.

Für den Reaktionskanal SI2 konnte der totale Wirkungsquerschnitt nicht mit ausreichender Genauigkeit bestimmt werden, da dessen Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung zum großen Teil in einem Bereich liegt, der für He^+ -Ionen im verwendeten Spektrometer nur noch mit geringem Raumwinkel nachgewiesen wird. Für kleine Transversalimpulse sind differentielle Wirkungsquerschnitte von SI2 und TI2 in Abbildung 5.10 verglichen.

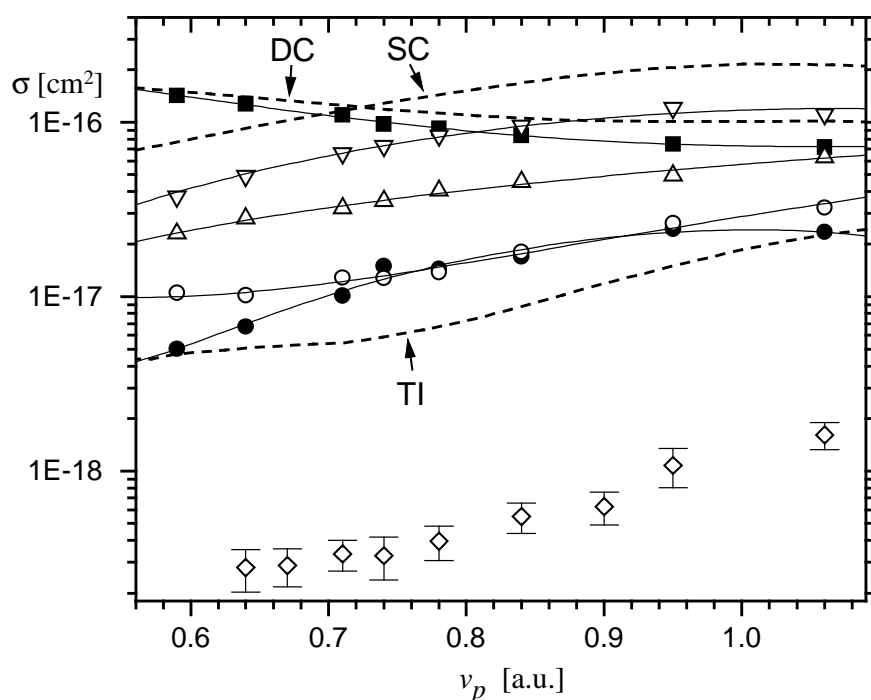


Abbildung 5.3: Totale Wirkungsquerschnitte der nach Q -Werten differenzierten Reaktionskanäle (die Bedeutungen der Abkürzungen sind in Tabelle 5.4 erklärt): SC1 (Δ), SC2 (∇), SC3 (\circ), DC1 (\blacksquare), DC2 (\bullet), TI2 (\diamond). Die Linien (—) durch die Datenpunkte sind eingezeichnet, um das Auge zu führen. Die Messungen wurden die absoluten Wirkungsquerschnitte des SC, DC, und der TI (---) von Afrosimov et al [112] normiert. Der Wirkungsquerschnittes von TI1 ist nur ca. 5% kleiner als der von TI und wurde hier nicht gesondert dargestellt.

Bezeichnung	Endzustände	Q-Wert
SC1	${}_p\text{He}^+(1s) + {}_t\text{He}^+(1s)$	$Q = 1.10 \text{ a.u.}$
SC2	${}_p\text{He}^+(2l) + {}_t\text{He}^+(1s)$	$Q = -0.40 \text{ a.u.}$
	${}_p\text{He}^+(1s) + {}_t\text{He}^+(2l)$	
SC3	${}_p\text{He}^+(nl) + {}_t\text{He}^+(1s)$	$Q \leq -0.68 \text{ a.u.}$
	${}_p\text{He}^+(1s) + {}_t\text{He}^+(nl)$ $n = 3, 4, \dots$	
DC1	${}_p\text{He}(1s^2) + {}_t\text{He}^{2+}$	$Q = 0 \text{ a.u.}$
DC2	${}_p\text{He}(1s nl) + {}_t\text{He}^{2+}$ $n = 2, 3, \dots$	$Q \leq -0.73 \text{ a.u.}$
TI1	${}_p\text{He}^+(1s) + {}_t\text{He}^{2+} + e^-$	$Q = -0.9 \text{ a.u.}$
TI2	${}_p\text{He}^+(nl) + {}_t\text{He}^{2+} + e^-$ $n = 2, 3, \dots$	$Q \leq -2.4 \text{ a.u.}$
SI1	${}_p\text{He}^{2+} + {}_t\text{He}^+(1s) + e^-$	$Q = -0.9 \text{ a.u.}$
SI2	${}_p\text{He}^{2+} + {}_t\text{He}^+(nl) + e^-$ $n = 2, 3, \dots$	$Q \leq -2.4 \text{ a.u.}$

Tabelle 5.4: Abkürzungen zur Bezeichnung der nach Q -Werten differenzierten Reaktionskanäle: Bei den Endzuständen bezeichnen die Indizes "p" und "t" das Projektil- und das Target-Ion.

5.2 Der einfach - differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$

In dem in Abschnitt 2.4 beschriebenen semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Modell wird die Kernbewegung durch klassische Trajektorien beschrieben, zu denen die Entwicklung des elektronischen Zustandes berechnet wird, d.h., die Kerntrajektorien sind nicht Ergebnis einer Rechnung sondern werden vorgegeben. Die Krümmung der Kerntrajektorien ist bei allen untersuchten Reaktionen so klein, daß für die Berechnung des elektronischen Zustandes diese als Geraden genähert werden können. Eine solche gerade Bewegung wird durch die Projektilgeschwindigkeit und den Stoßparameter charakterisiert. Zu jedem solchen Paar dieser zwei Größen erhält man in einem semiklassischen Bild die Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Reaktionskanäle aus dem berechneten elektronischen Endzustand.

Im Experiment sind neben den Projektilgeschwindigkeiten v_p jedoch nicht die Stoßparameter, sondern die Projektilstreuwinkel bzw. die Rückstoßionen-Transversalimpulse $p_{r,rec}$ bekannt. Die Ablenkung des Projektils ist zwar nicht relevant für die Entwicklung des elektronischen Zustandes, trotzdem muß die Ladungsverteilung der Elektronen bekannt sein, um mit der Meßgröße $p_{r,rec}$ auf den Stoßparameter schließen zu können. Entscheidend ist hierbei nicht, daß die Elektronenimpulse in der Impulsbilanz berücksichtigt werden müssen, denn der wesentliche Transversalimpuls-Austausch geschieht zwischen den Kernen, und die Impulse emit-

tierter Elektronen sind im Vergleich dazu klein (siehe Abbildung 5.5). Die Elektronen schirmen jedoch mit ihrer Ladung die Kernpotentiale ab, d.h. beeinflussen die Kräfte, die die Kerne aufeinander ausüben.

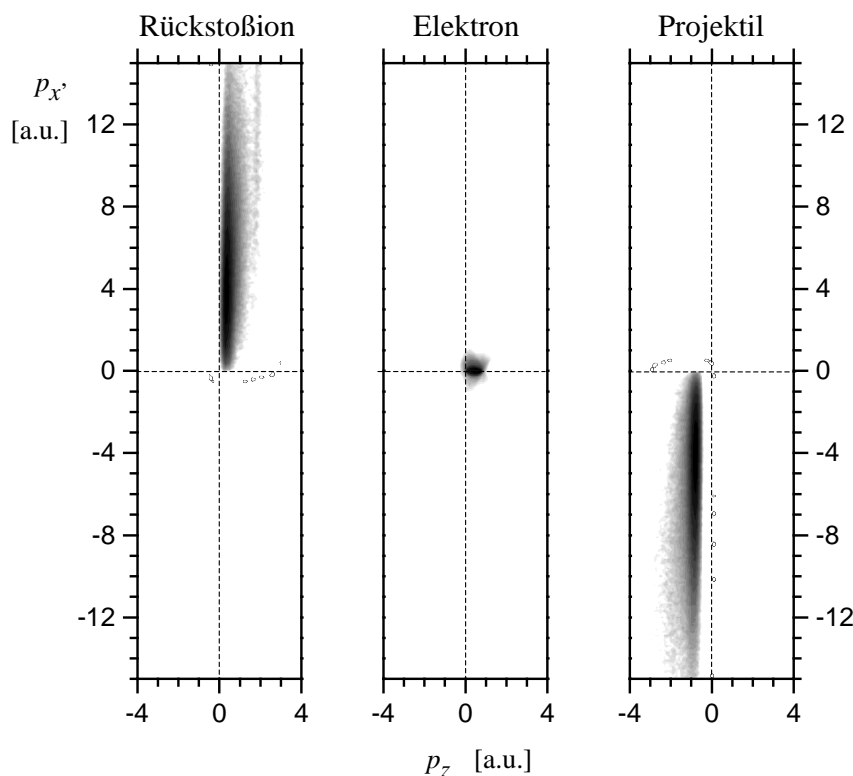


Abbildung 5.5: Übersicht über die Impulsverteilung der Transferionisation bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u.: Dargestellt ist der Impulsübertrag auf alle Fragmente projiziert auf die nukleare Streuebene. Bei dem Rückstoßion und dem Elektron ist dies gleich dem Impuls im Laborsystem. Um den Projektilimpuls im Laborsystem zu erhalten, muß man in Strahlrichtung (p_z) etwa 6200 a.u. addieren.

Für eine grobe Abschätzung des Stoßparameters b aus den Meßgrößen kann die Gleichung¹

$$b = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} Z_p Z_{rec} \frac{2}{v_p} \frac{1}{p_{r,rec}} \quad (5.1)$$

verwendet werden, die für die Coulombstreuung von zwei punktförmigen Teilchen der Ladungen $e Z_p$ und $e Z_{rec}$ gilt (siehe Anhang C). Diese Gleichung vernachlässigt die Abschirmung der Kernpotentiale durch die Elektronen. Anstelle der wirklichen Kernladung kann ein effektiver Ladungszustand Z^{eff} angenommen werden. Für große Kernabstände erscheint das Target nach außen neutral, so daß $Z_p^{eff} Z_{rec}^{eff} = 0$ gilt, bei 2 bis 3 a.u. Kernabstand entspricht die auf die Kerne wirkende Kraft etwa den

¹ In Atomaren Einheiten gilt $\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} = 1$.

effektiven Ladungen $Z_p^{eff} Z_{rec}^{eff} = 1$. Für Kernabstände unterhalb 0.5 a.u. kann die Abschirmung vernachlässigt werden.

Bei schnellen Stößen ist eine solche Abschätzung des Stoßparameters aus den Impulsüberträgen auf die Kerne nicht mehr möglich, da hier die Elektronenimpulse in der Impulsbilanz dominieren [113, 102]. Gleichzeitig versagt dort die klassische Beschreibung der Kernbewegung aufgrund der Unschärferelation.

Mit der Verknüpfung zwischen $p_{r,rec}$ und dem Stoßparameter hat die Abhängigkeit des differentiellen Wirkungsquerschnittes von $p_{r,rec}$ bzw. v_p im semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Modell ähnliche Ursachen. Theoretische Arbeiten zum He^{2+} -He-Stoßsystem (siehe Abschnitt 2.8) haben beide Abhängigkeiten untersucht.

Für kleine Projektilstreuwinkel, und in diesem Sinne sind alle hier gemessenen Winkel klein, entspricht der Stoßparameter etwa dem kleinsten Kernabstand entlang der Trajektorie. Diese Information ist besonders wichtig, um abzuschätzen, welche Wege das System im Korrelationsdiagramm möglicherweise genommen hat, d.h., die Verteilung der Rückstoßionen-Transversalimpulse bzw. der Projektilstreuwinkel ist die Grundlage für die Interpretation der Daten im quasimolekularen Bild.

In den folgenden Abschnitten werden in verschiedenen Abbildungen die einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte $d\sigma/dp_{r,rec}$ von verschiedenen Reaktionskanälen bei mehreren Projektilgeschwindigkeiten verglichen.

5.2.1 Der einfach-differentielle Wirkungsquerschnitt der Reaktionskanäle SC und DC

Für einen gegebenen Reaktionskanal, d.h. Ladungszustand und Bindungsenergie von Projektil und Rückstoßion, sind die Elektroneneinfangreaktionen durch die Angabe des einfach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d\sigma/dp_{r,rec}$ kinematisch vollständig beschrieben. Die Verteilung im dreidimensionalen Impulsraum ergibt sich daraus mit Hilfe von Gleichung 2.12 und der Rotationssymmetrie um die Strahlachse.

Die Abbildungen 5.6 und 5.7-a zeigen die im Rückstoßionen-Transversalimpuls differentiellen Wirkungsquerschnitte $d\sigma/dp_{r,rec}$ der stärksten Reaktionskanäle für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten. Diese zeigen Oszillationen, wobei sich die Position der Minimas bei weiten Stößen leicht und bei engen Stößen deutlich zu größeren $p_{r,rec}$ verschiebt, wenn die Projektilgeschwindigkeit erhöht wird. Entsprechende Messungen zum DC bei Projektilenergien oberhalb 1.5 a.u. findet man z.B. bei Dörner et al [114].

Diese Oszillationen entstehen durch Interferenzen zwischen den verschiedenen Reaktionswegen im Korrelationsdiagramm, die zu dem jeweiligen Prozeß beitragen. Beim DC1 sind dies die unterschiedlichen Entwicklungen des geraden und ungeraden Anteils der Wellenfunktion. Die Bindungsenergien der beiden Anteile beginnen bei Kernabständen kleiner als ca. 3 a.u., sich deutlich zu unterscheiden, so daß sich die Phasen der beiden Anteile unterschiedlich entwickeln. Die Transversalimpulse bei den Minimas im differentiellen Wirkungsquerschnitt gehören zu Stoßparametern, bei denen die Phasenverschiebung zwischen den beiden Anteilen ein Vielfaches

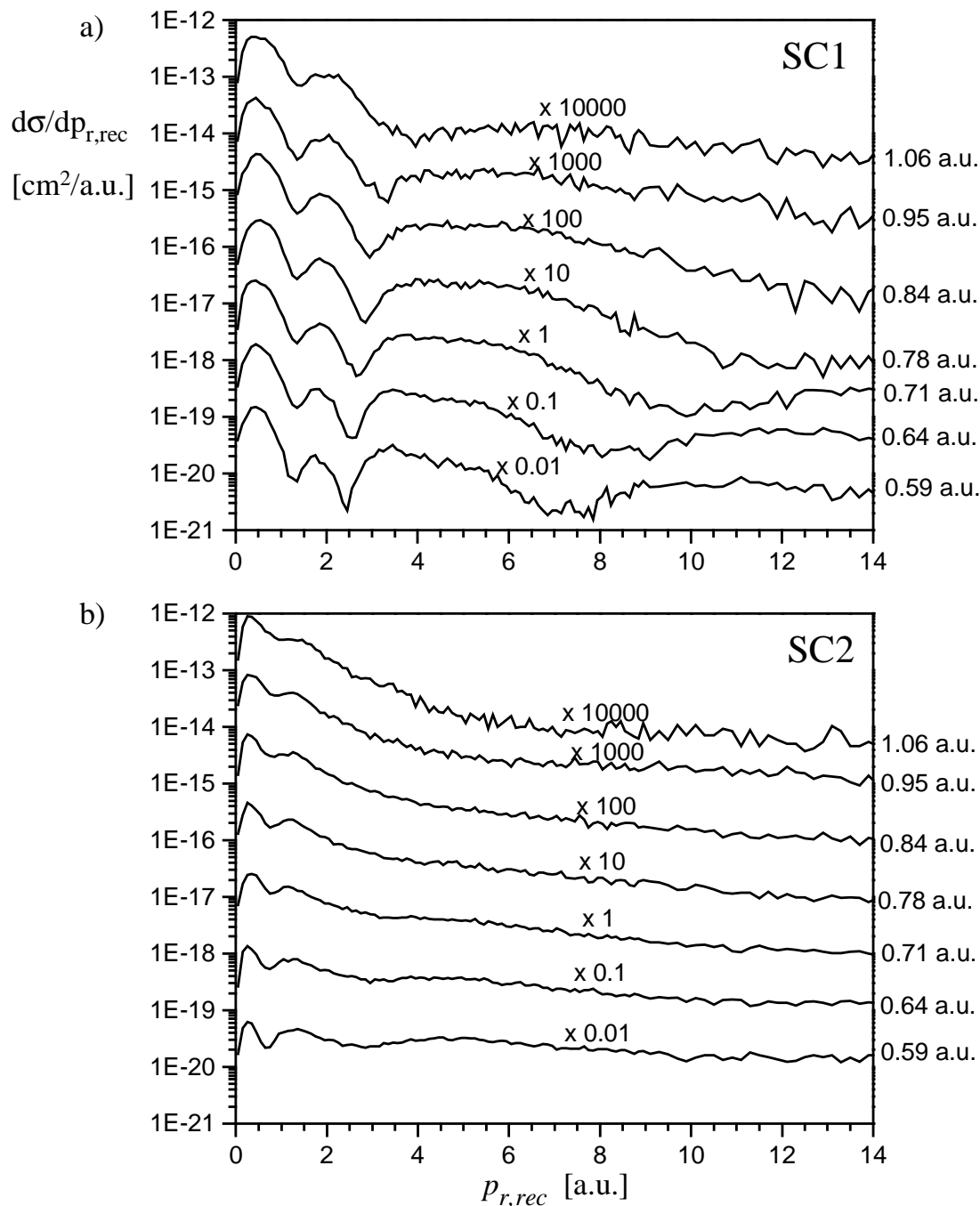


Abbildung 5.6: Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung des SC für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten zwischen 0.59 a.u. und 1.06 a.u.: a) SC1: Projektil und Target im Grundzustand ($Q = 29.8 \text{ eV} = 1.1 \text{ a.u.}$), b) SC2: ein He^+ -Ion im Grundzustand und eines in die L-Schale angeregt ($Q = -11.0 \text{ eV} = -0.4 \text{ a.u.}$). Die differentiellen Wirkungsquerschnitte wurden mit [108] normiert und zur Trennung der Spektren mit den jeweils angegebenen Faktoren multipliziert.

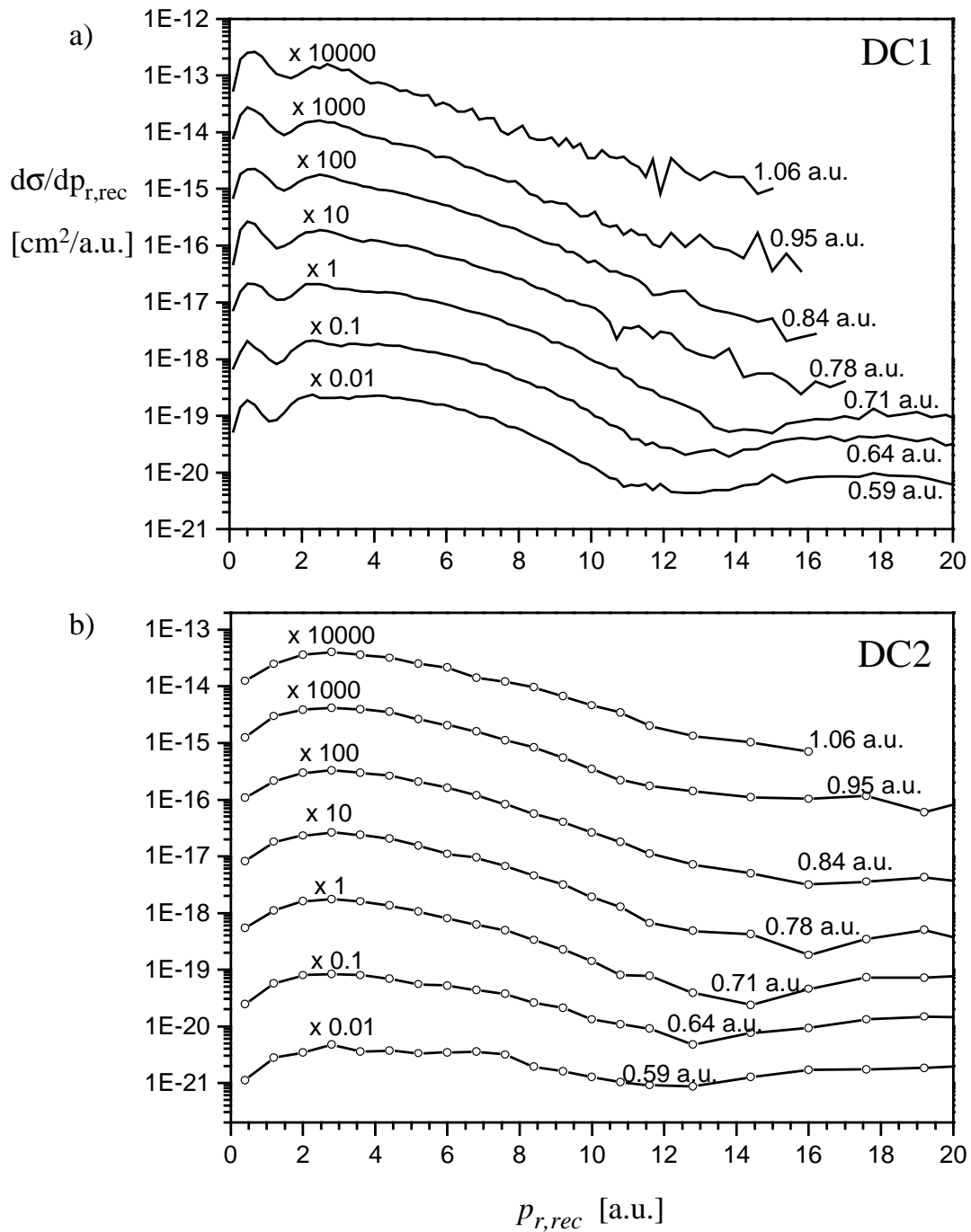


Abbildung 5.7: Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung des DC für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten zwischen 0.59 a.u. und 1.06 a.u.: a) DC1: Projektil im Grundzustand ($Q = 0$ a.u.), b) DC2: Projektil angeregt ($Q \leq -0.73$ a.u.). Die differentiellen Wirkungsquerschnitte wurden mit [108] normiert und zur Trennung der Spektren mit den jeweils angegebenen Faktoren multipliziert.

von 2π beträgt. In diesem Fall ergibt die Überlagerung der beiden Anteile eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen, deren wesentlicher Anteil beim Target liegt.

Beim SC1 wird der molekulare Grundzustand durch Radialkopplung hauptsächlich bei Kernabständen oberhalb 1 a.u. besetzt. Die ungeraden Endzustände des SC1 sind Spin-Triplett-Zustände und können nicht besetzt werden. Deshalb ist die Interferenz zwischen geraden und ungeraden Zuständen nicht der Grund für die Oszillationen beim SC1. Es interferieren hier die Reaktionswege, bei denen der Übergang in den molekularen Grundzustand bei der Annäherung bzw. der Entfernung der Kerne stattfindet.

5.2.2 Vergleich der einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte der Elektroneneinfangkanäle mit denen der Ionisationsprozesse

Im Gegensatz zu den Reaktionskanälen SC1, SC2, DC1 usw., deren Endzustände nur wenige Eigenzustände des Systems enthalten, fassen die Reaktionskanäle SI und TI unendlich viele Zustände im Ausgangskanal, nämlich die Kontinuumszustände des emittierten Elektrons, zusammen. Die kinematisch vollständige Beschreibung der Ionisationsprozesse erfolgt deshalb durch einen vierfach-differentiellen Wirkungsquerschnitt.

Die Transversalimpulse der Kerne müssen den Transversalimpuls des emittierten Elektrons kompensieren. In den folgenden Abschnitten wird sich jedoch zeigen, daß der Elektronenimpuls bei den hier untersuchten Stößen fast immer wesentlich kleiner ist als die Impulsüberträge auf die Kerne. Somit kann die Verteilung der Rückstoßionen-Transversalimpulse bei der TI und SI direkt mit den im letzten Abschnitt gezeigten verglichen werden. Exemplarisch ist dies in Abbildung 5.8 für die Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.95$ a.u. dargestellt.

Die Transversalimpulse der Kerne müssen den Impuls des emittierten Elektrons kompensieren. In den folgenden Abschnitten wird sich jedoch zeigen, daß der Elektronenimpuls bei den hier untersuchten Stößen fast immer wesentlich kleiner ist als die Impulsüberträge auf die Kerne. Somit kann die Verteilung der Rückstoßionen-Transversalimpulse bei der TI und SI direkt mit den im letzten Abschnitt gezeigten verglichen werden. Exemplarisch ist dies in Abbildung 5.8 für die Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.95$ a.u. dargestellt.

Im klassischen Bild der Sattelpunktelektronen wird die SI als ein SC interpretiert, bei dem das zu transferierende Elektron "es nicht ganz über die Potentialbarriere geschafft hat", dort strandet und so in das Kontinuum gelangt. Strandet bei einem DC eines der beiden Elektronen auf dem Sattel, so führt dies zu einer Transferionisation. Im "Hidden-Crossings"-Modell (Abschnitt 2.5) wird die Ionisation in langsamen Stößen als die Anregung über eine Kette Vermiedener Kreuzungen in einen Rydbergzustand des Moleküls beschrieben. Am Beginn dieser Ketten werden solche Zustände durchlaufen, die im Limit separierter Kerne zu Elektronenanregung, even-

tuell verbunden mit Elektronentransfer, führen. Diese beiden Modelle lassen somit erwarten, daß sich die Serie der differentiellen Wirkungsquerschnitte des SC in die n -te Schale mit wachsendem n dem Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ der SI annähern wird. Gleiches gilt für den DC in angeregte Zustände und die TI.

Dies wird durch die Messungen bestätigt. Für die beiden Elektroneneinfangreaktionen sind SC3 und DC2 die Kanäle mit den höchsten auflösbaren Anregungsenergien. Diese zeigen, wie in Abbildung 5.8 zu erkennen ist, Ähnlichkeit mit SI1 bzw. TI1. Für die höchste gemessene Geschwindigkeit von 1.06 a.u. ist die Übereinstimmung in der Form der Verteilungen noch deutlicher (siehe Abbildung 5.9). Der Übersichtlichkeit halber sind hier nur die Kanäle SC3, SI1, DC2 und TI1 dargestellt. Die Übereinstimmung auch der totalen Wirkungsquerschnitte von TI1 und DC2 ist, wie man Abbildung 5.3 entnehmen kann, eher zufällig.

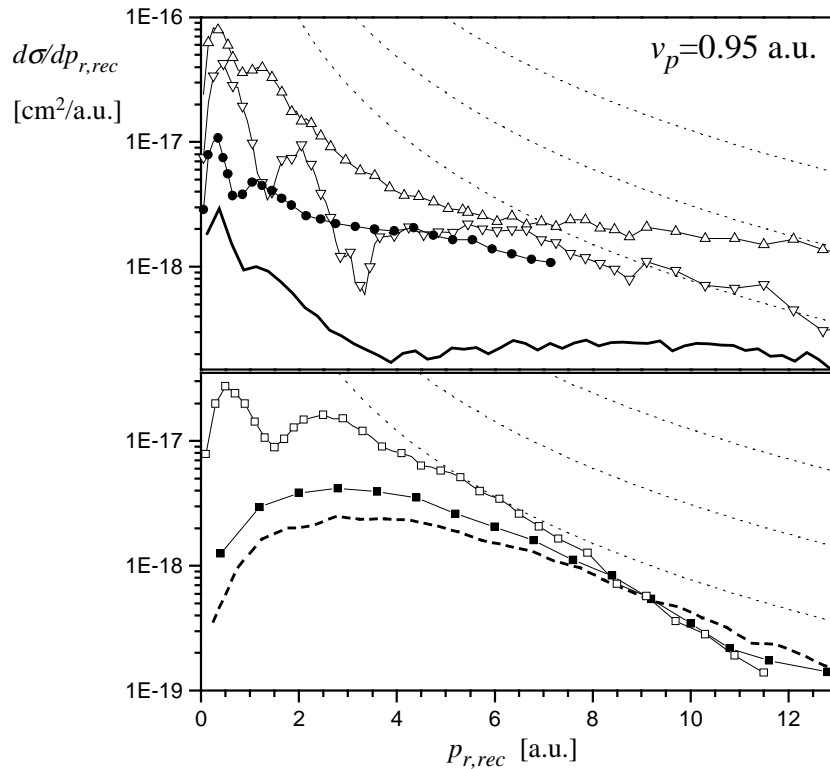


Abbildung 5.8: Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung verschiedener Reaktionskanäle bei der Projektilgeschwindigkeiten $v_p = 0.95$ a.u.: oben: SC1 (∇), SC2 (\triangle), SC3 (\bullet), SI1 (—); unten: DC1 (\square), DC2 (\blacksquare), TI1 (---). Die differentiellen Wirkungsquerschnitte wurden mit [108] normiert. Zusätzlich sind die einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte $d\sigma/dp_{r,rec}$ der Coulombstreuung (siehe Anhang C) von punktförmigen Teilchen für die die Ladungen $Z_p/Z_t = 1, 2$ und 4 eingezeichnet (\cdots).

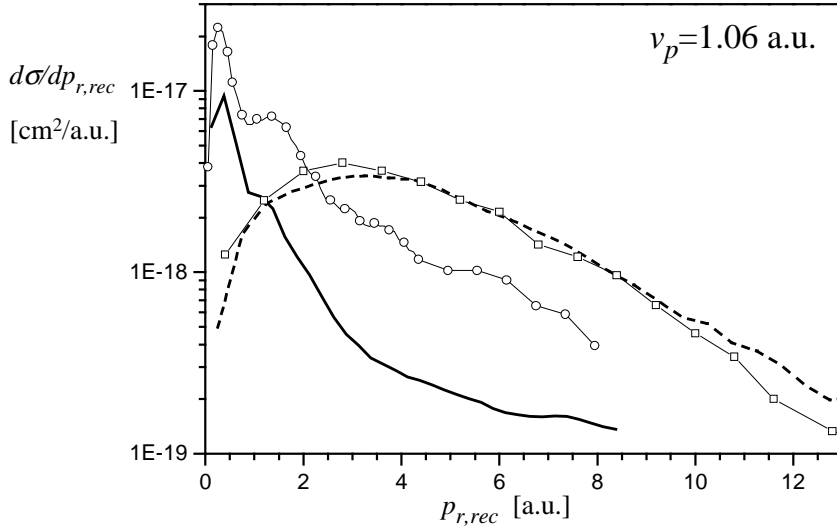


Abbildung 5.9: Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung verschiedener Reaktionskanäle bei der Projektilgeschwindigkeiten $v_p = 1.06$ a.u.: SC3 (\circ), DC2 (\square), TI1 (---), SI1 (—).

5.2.3 Die einfach - differentiellen Wirkungsquerschnitte $d\sigma/dp_{r,rec}$ der Ionisationsprozesse

Abbildung 5.10 zeigt für alle mit gepulstem Strahl vermessenen Projektilgeschwindigkeiten v_p die Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilungen der Ionisationskanäle, bei denen genau ein Elektron emittiert wird. Der Zustand des im Endzustand gebundenen Elektrons erlaubt die Differenzierung der Ionisation in SI1, SI2, TI1 und TI2, wobei das Elektron im Endzustand bei der SI im Target- und bei der TI im Projektilion zu finden ist. Die daran angehängte 1 kennzeichnet die Bindung im Grundzustand und 2 die Bindung in einer höheren Schale.

Es fällt auf, daß die differentiellen Wirkungsquerschnitte von SI1 und TI1 (Linien) umeinander oszillieren. Das bereite Maximum der TI1 bei etwa 4 a.u. fällt in das Minimum der SI1 (nicht mehr vorhanden bei $v_p = 1.06$ a.u.). Für $v_p = 0.71$ a.u. deutet sich eine dritte Kreuzung der Kurven bei $p_{r,rec} \sim 18$ a.u. an.

SI1 hat bei hohem v_p seinen Hauptbeitrag bei weiten Stößen, d.h. kleinem $p_{r,rec}$. In diesem Bereich ist eine Aufspaltung in zwei Peaks zu erkennen, die sich entgegen der Tendenz bei den Elektroneneinfangkanälen für steigende Projektilgeschwindigkeiten anzunähern scheinen. Eine entsprechende Struktur kann bei TI1 nicht aufgelöst werden, da dort die Spektrometerauflösung, aufgrund der doppelt so hohen Ladung der Rückstoßionen, je nach Raumrichtung um einen Faktor $\sqrt{2}$ bis 2 schlechter ist.

Im Gegensatz zur SI1 und TI1 sind sich die Meßdaten von SI2 und TI2 sehr ähnlich. Bei den niedrigen Projektilgeschwindigkeiten stimmt auch die absolute Höhe gut überein. Für diese Kanäle scheint sich die Symmetrie zwischen den beiden Ioni-

sationskanälen SI und TI, deren Konsequenzen bereits in Abschnitt 5.1.1 bei der Diskussion des Verlaufs der totalen Wirkungsquerschnitte erläutert wurden, schon bei wesentlich kürzeren Lebensdauern der Quasimoleküle im differentiellen Wirkungsquerschnitt anzudeuten. Eine weitergehende Interpretation dieses Effekts folgt im nächsten Abschnitt.

Die differentiellen Wirkungsquerschnitte aller Ionisationsprozesse verschieben sich mit zunehmendem v_p zu kleineren $p_{r,rec}$. Zum Teil ist dies natürlich dadurch

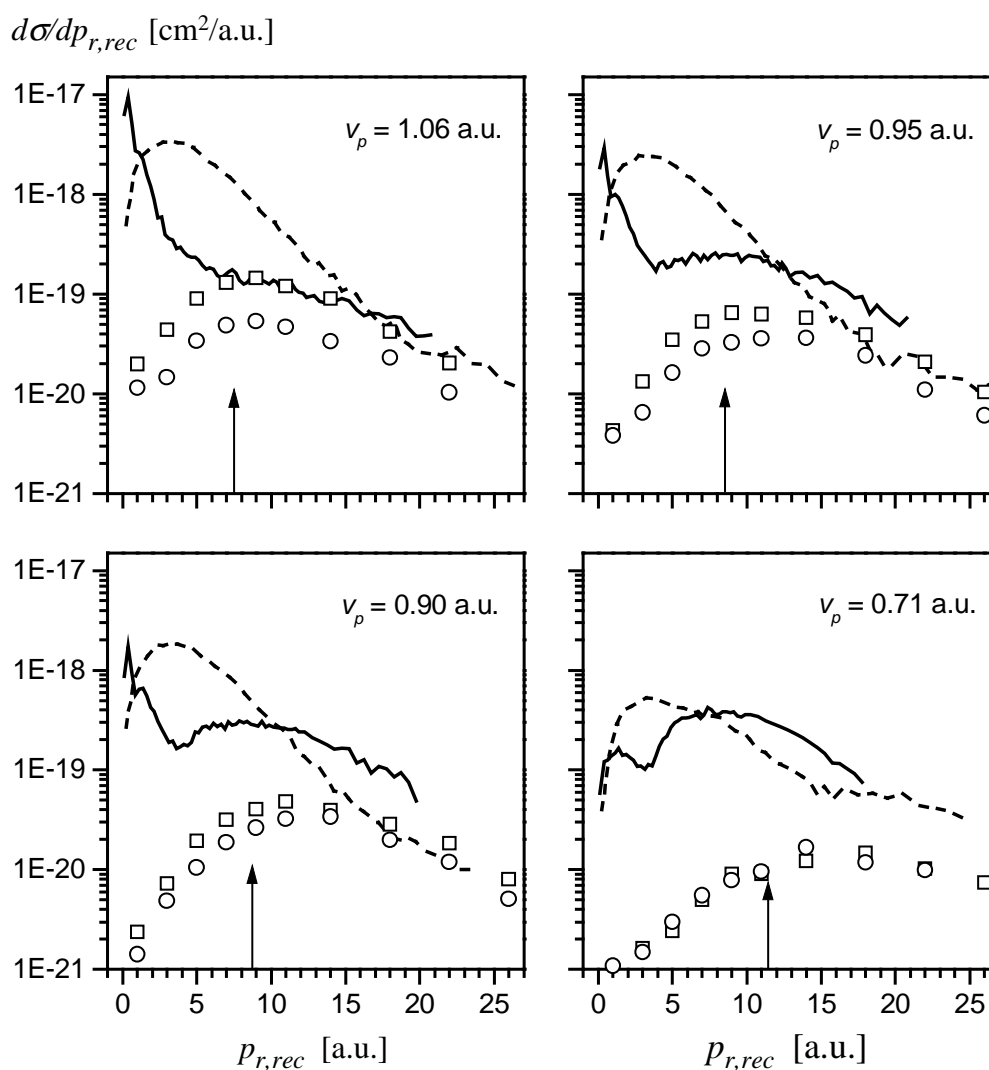


Abbildung 5.10: Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung der Reaktionskanäle TI1 (---), TI2 (\square), SI1 (—) und SI2 (\circ) für vier Projekttilgeschwindigkeiten zwischen 0.71 a.u. und 1.06 a.u. Der Pfeil markiert den Transversalimpuls, der bei einer klassischen Coulombstreuung zweier Kerne der Ladungszahl 1 einem Stoßparameter von 0.25 a.u. entspricht (siehe Gleichung C.8). Die differentiellen Wirkungsquerschnitte wurden auf den totalen TI-Wirkungsquerschnitt in [108] normiert.

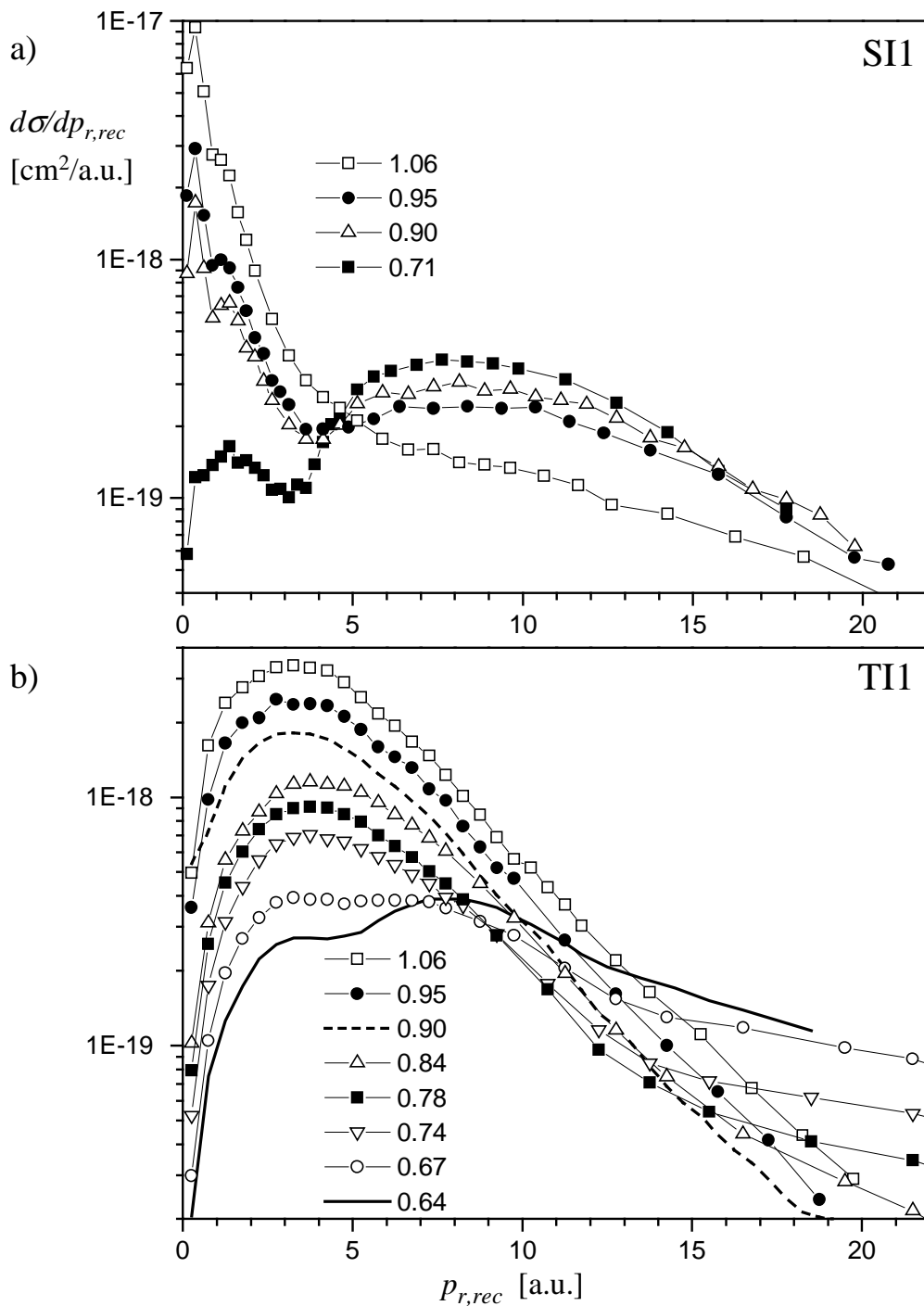


Abbildung 5.11: Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung der SI1 und TI1 in den Grundzustand: a) SI1, alle mit gepulstem Strahl vermessenen Projektilgeschwindigkeiten, b) TI1, Projektilgeschwindigkeiten zwischen 0.64 und 1.06 a.u.

bedingt, daß die Stoßzeit abnimmt, und somit bei gleichem Stoßparameter, d.h. etwa gleichen Kräften, weniger Impuls übertragen wird. Die Pfeile markieren den Rückstoßionen-Transversalimpuls, der in einer klassischen Coulombstreuung zweier punktförmiger Teilchen der Ladung e bei einem Stoßparameter von 0.25 a.u. übertragen wird. Zwischen der niedrigsten ($v_p = 0.71$ a.u.) und der höchsten ($v_p = 1.06$ a.u.) Projektilgeschwindigkeit liegt nur ein Faktor 1.5. Insgesamt scheint die Verschiebung der Verteilungen zu kleinen $p_{r,rec}$ stärker zu sein.

Für die Reaktionskanäle TII bzw. SI1 sind die einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte in Abbildung 5.11 übereinandergelegt. Die TI ist, da das Projektil seinen Ladungszustand ändert, experimentell leichter zugänglich. In Messungen ohne Strahlpulsung wurde eine ganze Reihe weiterer Projektilgeschwindigkeiten vermessen, die hier ebenfalls dargestellt sind.

Das Maximum der Verteilungen der TII wird mit abnehmendem v_p breiter. Für $v_p = 0.67$ und 0.64 a.u. bildet sich auf dem Plateau ein schwaches Minimum aus. Im Vergleich der Ergebnisse von SI1 und TII bei der jeweils niedrigsten Projektilgeschwindigkeit zeigt sich eine Annäherung der Verläufe, die zum größten Teil dadurch zustande kommt, daß die Wahrscheinlichkeit der Ionisation in weiten Stößen rapide mit der Projektilgeschwindigkeit abnimmt.

Im folgenden Abschnitt wird mit Argumenten des MO-Bildes und dem "Hidden-Crossings"-Modell aufgezeigt, wie die vorgestellten experimentellen Befunde zustande kommen. Die dabei diskutierten Reaktionsmechanismen erklären auch zum Teil die Struktur der gemessenen Elektronenverteilungen, die ab Abschnitt 5.4 präsentiert werden.

5.3 Spekulation über mögliche Reaktionswege der Ionisationsprozesse im MO-Bild

Im "Hidden-Crossings"-Modell ergeben sich die Ionisationswege im Korrelationsdiagramm aus der Form der Potentialflächen in der Ebene komplexer Kernabstände. Für das H_2^+ -Molekül ist die elektronische Wellenfunktion zu jedem Kernabstand in elliptischen Koordinaten analytisch zu berechnen, so daß diese Potentialflächen bekannt sind.

Für das He_2^{2+} -Molekül, welches als Zweielektronensystem nicht analytisch zu behandeln ist, sind entsprechende Daten nicht verfügbar. Beschreibt man jedoch die elektronischen Zustände in einem Modell unabhängiger und unterscheidbarer Elektronen, so erhält man die Potentialflächen einfach durch Addition der entsprechend skalierten Potentialflächen des H_2^+ -Moleküls.

Für die am tiefsten gebundenen MO ist diese Näherung sehr schlecht. Da die Zustände $He(1s^2) + He^{2+}$ und $He^+(1s) + He^+(1s)$ dabei die gleiche Energie haben, verschwindet damit die Energielücke zwischen dem molekularen Grundzustand $1^1\Sigma_g$ und dem im Eingangskanal besetzten $2^1\Sigma_g$ -Zustand (siehe Abbildung 2.5-b). Somit kann in dieser Näherung z.B. der relativ niedrige Wirkungsquerschnitt für SC1 nicht

erklärt werden. Die Energielücke zwischen den Zuständen $2^1\Sigma_g$ und $3^1\Sigma_g$, die wesentlich kleiner ist, wird dagegen in einer diabatischen Näherung übersprungen. Der entsprechende diabatische Zustand $1^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ (er wird bei der Beschreibung des DC mit zwei Zuständen verwendet) entspricht der Entwicklung beider Elektronen gemäß dem $2p\sigma$ -Zustand im H_2^+ -Molekül. Für Rydbergzustände, bei denen ein Elektron hoch angeregt und das andere im Grundzustand ist, haben die Einteilchenwellenfunktionen nur geringen Überlapp, so daß das Austauschpotential klein ist. Außerdem kann das abgeschirmte Potential bei großem Abstand zu den Kernen, d.h. im Aufenthaltsbereich des hoch angeregten Elektrons, gut durch ein $1/r$ -Potential mit reduzierter Kernladung genähert werden. Insgesamt kann somit davon ausgegangen werden, daß für höher angeregte Zustände das Bild unabhängiger Elektronen seine Berechtigung hat.

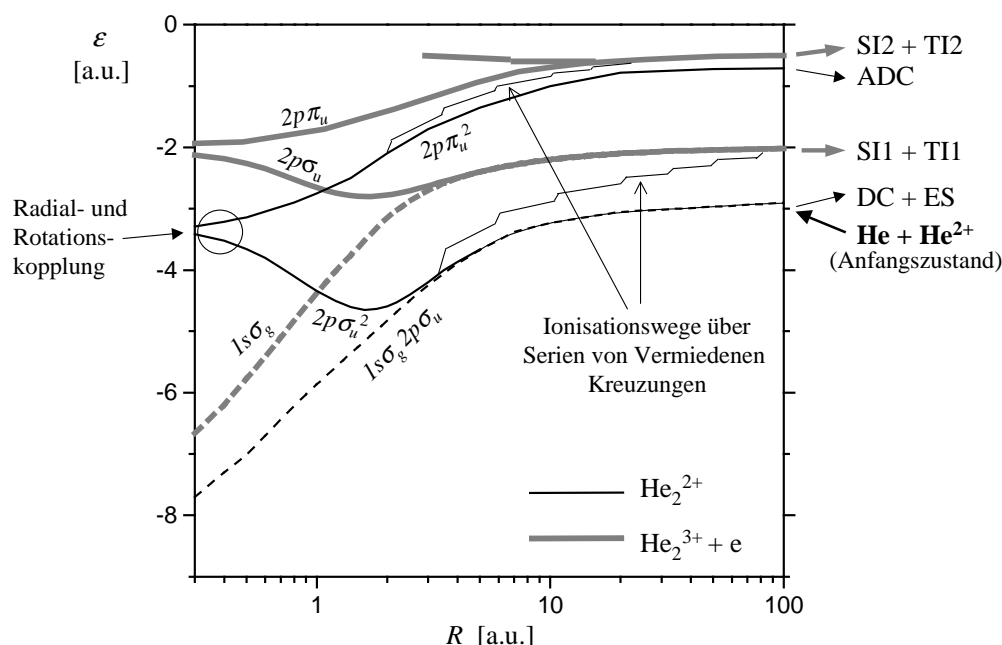


Abbildung 5.12: Korrelationsdiagramm des He_2^{2+} - und des He_2^{3+} -Quasimoleküls mit skizzierten Wegen der Ionisation. Die "Treppen" zeigen an, wo Serien von Zuständen, die über Vermiedene Kreuzungen verbunden sind und eine Promotion ins Kontinuum erlauben, vermutet werden. Das System startet in dem rechts angegebenen Anfangszustand und bewegt sich dann entlang einer der Kurven nach links bis zum Kernabstand der nächsten Annäherung. Danach vergrößert sich der Kernabstand wieder, d.h., das System bewegt sich in der Skizze nach rechts und endet im Fall einer Elektronenemission in einem der angegebenen Kanäle (z.B. in ES = elastische Streuung).

Unter dieser Voraussetzung erhält man für das He_2^{2+} -Molekül Reaktionswege nach dem "Hidden-Crossings"-Modell, indem man für ein Elektron den Einteilchenzustand festhält und das zweite sich entsprechend der T_{00^-} , T_{01^-} oder einer anderen Serie von Zuständen im H_2^+ -Molekül entwickeln läßt. Abbildung 5.12 skizziert, wo solche Serien im Korrelationsdiagramm zu finden sein könnten.

In den von Yagisawa et al berechneten Potentialkurven (siehe Abbildung 2.5-b) deutet sich der Beginn einer solchen Serie an. Folgt das System bei Vergrößerung des Kernabstandes nicht dem dort eingezeichneten diabatischen $^1\Sigma_g^*(2p\sigma^2)$ -Zustand, in den $2^1\Sigma_g$ -Zustand, sondern überspringt die Vermiedene Kreuzung bei $R \sim 1.2$ a.u. nicht, so kann es sich gemäß dem $3^1\Sigma_g$ -Zustand weiterentwickeln. Bei $R \sim 3$ a.u. läßt die Form der Potentialkurven vermuten, daß dort eine Vermiedene Kreuzung mit dem $4^1\Sigma_g$ -Zustand zu finden und somit der Übergang in das nächst höher angeregte MO möglich ist. Setzt sich diese Serie fort, was mit den verfügbaren Potentialkurven nicht zu entscheiden ist, so wird sich der Zustand bei Erreichen der Autoionisationsgrenze dann vermutlich aus den Einteilchenzuständen $1s\sigma_g$ und einem Rydbergzustand mit der Quantenzahl $\Lambda = 0$ (σ -Zustand) zusammensetzen.

Im Eingangskanal ist sowohl der $1s\sigma_g$ - als auch der $2p\sigma_u$ -Einteilchenzustand besetzt, so daß davon ausgegangen werden kann, daß auch in dem aus der Elektronenemission über verschiedene Serien resultierenden He_2^{3+} -Molekül diese beiden Zustände besetzt werden. Bei den T-Serien verläuft die Promotion über Vermiedene Kreuzungen durch Radialkopplung im wesentlichen bei großen Kernabständen. Hier sind die MO bezüglich der Symmetrie entartet. In Abbildung 5.12 sind deshalb die Ionisationswege, die zu den MO der beiden Symmetrien gehören und zu einem He^+ -Ion im Grundzustand führen, durch eine gemeinsame Treppe symbolisiert.

Findet die Emission eines Elektrons in einem weiten Stoß statt, so erwartet man keine Phasendifferenz zwischen den Zuständen unterschiedlicher Symmetrie. Das Elektron, welches gebunden bleibt, wird auch im Endzustand beim Target zu finden sein. Dies erklärt den Peak im differentiellen Wirkungsquerschnitt der SI bei kleinen $p_{r,rec}$. Nur wenn man zu kleinen Stoßparametern geht, wo die Potentialkurven sich trennen, entwickeln sich die Phasen unterschiedlich, und das gebundene Elektron kann in das Projektil transferiert werden, d.h., eine Transferionisation kann stattfinden. Wird die Phasendifferenz größer als π , dominiert wieder die SI. Dieses Bild der Ionisationsprozesse wird durch die in den Meßdaten beobachteten Oszillationen der differentiellen Wirkungsquerschnitte von SI1 und TI1 bestätigt.

Addiert man in Abbildung 5.10 SI1 und TI1, so erhält man einen wesentlich glatteren Kurvenverlauf. In dieser Summe wird deutlich, daß die Wahrscheinlichkeit für die Ionisationsprozesse bei steigender Projektilgeschwindigkeit im wesentlichen bei weiten Stößen wächst. Zusammen mit der durch die Oszillation hervorgerufenen Struktur führt dies zu dem dramatischen Anwachsen des Peaks bei kleinen $p_{r,rec}$ im einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitt der SI1. Durch die Analyse der Impulsverteilung der emittierten Elektronen (Abschnitt 5.4 ff) kann man zeigen, daß bei den dabei hinzukommenden Anteilen im wesentlichen σ -Zustände beteiligt sind.

5.3.1 Ionisation mit gleichzeitiger Anregung des gebundenen Elektrons

Bis hier wurde noch keine Aussage über mögliche Prozesse gemacht, die zur Anregung des gebundenen Elektrons, d.h. zu SI2 oder TI2, führen. Das Verhalten des He_2^{3+} -Quasimoleküls, d.h. des Quasimoleküls, welches man nach der Emission von

einem Elektron erhält, stimmt mit dem von H_2^+ überein. Mit der Kenntnis der Stoßparameterabhängigkeiten der Anregungsprozesse im p-H-Stoß kann ausgeschlossen werden, daß die Anregung bei TI2 und SI2 erst nach der Ionisation, d.h. bei großen Kernabständen, stattfindet. Eine Möglichkeit, die notwendige Energie bereits vor der Entfernung eines Elektrons in dem molekularen System zu deponieren, findet man in der Arbeit von Koike et al [79]. Dort werden Wege im Korrelationsdiagramm beschrieben (siehe Abbildung 2.6), die zur Besetzung von autoionisierenden Zuständen im He-Atom führen. Befinden sich die Elektronen im Endzustand beim Projektil, ergibt dies den autoionisierenden Zweifachelektroneneinfang (ADC), der in dieser Arbeit ebenfalls in den Meßdaten identifiziert wurde.

Die entsprechenden Zustände werden durch Rotations- und teilweise zusätzlich durch Radialkopplung bei Kernabständen kleiner als ca. 0.3 a.u. aus dem diabatischen $^1\Sigma_g^*(2p\sigma_u^2)$ -Zustand besetzt und setzen sich, wie in Abbildung 5.12 angedeutet ist, u.a. aus den Einteilchenzuständen $2p\pi_u$ zusammen. Bei Vergrößerung des Kernabstandes kann nun ein Elektron im $2p\pi_u$ -Zustand verbleiben und das andere, z.B. entsprechend der T_{01} -Serie, ins Kontinuum gehoben werden.

Aus diesem angenommenen Reaktionsweg ergeben sich einige Konsequenzen, die experimentell überprüfbar sind. Der kleine Kernabstand, der für diesen Weg im Korrelationsdiagramm erreicht werden muß, führt dazu, daß nur große Rückstoßionen-Transversalimpulse auftreten. Die ausschließliche Besetzung der L-Schale im He^+ -Molekül durch den $2p\pi_u$ -Zustand bedingt, daß im Endzustand die Einteilchenwellenfunktion des gebundenen Elektrons ungerade ist. Das bedeutet aber gleichzeitig, daß man bei Projektil und Target gleiche Aufenthaltswahrscheinlichkeit erhält. SI2 und TI2 sollten deshalb im molekularen Bezugssystem absolut gleiche differentielle Wirkungsquerschnitte haben.

In Abschnitt 5.2.3 ist genau dies den gemessenen Daten zu entnehmen, nur mit dem Unterschied, daß bei hohen Geschwindigkeiten TI2 wahrscheinlicher ist als SI2. Dies kann folgenden Grund haben: Die oben zugrunde liegende Annahme, daß ein Einteilchenzustand sich gemäß einer T-Serie im H_2^+ -System entwickelt und der andere unverändert bleibt, muß nicht erfüllt sein. In einem Eielektronensystem verschwindet zwar die Kopplung zwischen Zuständen unterschiedlicher Symmetrie, dies gilt aber nicht für die Einteilchenzustände in einem Mehrelektronensystem. Dort ist nur die Symmetrie des Gesamtsystems erhalten. Es kann sich somit die Symmetrie des Einteilchenzustandes, der das im Endzustand gebundene Elektron repräsentiert, ändern. Werden so gerade und ungerade Linearkombinationen von Zuständen der L-Schale besetzt, so können sich auch die Wirkungsquerschnitte von TI2 und SI2 unterscheiden. An der Stoßparameterabhängigkeit bzw. der Verteilung von $p_{r,rec}$ ändert dies, wie auch die experimentellen Daten bestätigen, nichts mehr, da solche Übergänge, die erst nach der entscheidenden Kopplung bei kleinen Kernabständen stattfinden, keine wesentlich anderen Wege im Korrelationsdiagramm eröffnen.

5.4 Elektronenimpulsverteilungen der Transferionisation

In diesem Abschnitt soll die Form der dreidimensionalen Verteilung der Elektronen bzw. der dreifach-differentielle Wirkungsquerschnitt $d^3\sigma/(dv_{x',e}dv_{y',e}dv_{z,e}) = d^3\sigma/d\vec{v}_e^3$ dargestellt werden. In gedruckter Form ist dies jedoch nur auf zweidimensionalen Flächen möglich. Zur Diskussion der physikalischen Prozesse ist jedoch auch meist die Darstellung eines einfach- oder zweifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes ausreichend.

Es werden verschiedene Koordinatensysteme verwendet, deren genaue Definitionen in Abschnitt 4.4 nachzulesen sind. Das Laborsystem wird durch die kartesischen Koordinaten x (Spektrometerachse), y (Jetrichtung) und z (Strahlrichtung) aufgespannt. Diese werden hier jedoch nicht verwendet, da darin die Rotationssymmetrie der Wirkungsquerschnitte um die Strahlachse nicht berücksichtigt ist.

Die Bewegung der Kerne definiert die Streuebene, welche durch die x' - und z' -Achse aufgespannt wird. Dabei zeigt die x' -Achse in Richtung der Transversalkomponente des Rückstoßimpulses. Die z' -Achse stimmt mit der z -Achse überein. Die dritte kartesische Achse wird mit y' bezeichnet und steht senkrecht auf der Streuebene. In dieser Richtung werden oft nur positive Werte dargestellt, da, wie erwartet, die Elektronenverteilungen spiegelsymmetrisch zur Streuebene sind.

In dem auf die Streuebene bezogenen System werden auch die Zylinderkoordinaten r , φ , z verwendet, wobei für Punkte auf der x' -Achse $\varphi = 0$ gilt, d.h., φ bezeichnet den Winkel zwischen den Transversalimpulsen von Rückstoßion und Elektron.

Bevor für ausgewählte Reaktionskanäle und Projektilgeschwindigkeiten verschiedenste Darstellungsarten der Elektronenverteilungen präsentiert werden, wird im folgenden Abschnitt anhand von eindimensionalen Verteilungen die Skalierung mit der Projektilgeschwindigkeit diskutiert. Anschließend wird die Abhängigkeit der Elektronenverteilung vom Rückstoßion-Transversalimpuls untersucht.

5.4.1 Skalierung der Elektronenimpulse mit der Projektilgeschwindigkeit

Im Bild der Sattelpunkt-Elektronenemission (siehe Abschnitt 2.2.1) wird erwartet, daß die Elektronenverteilung die Target-, Projektil- und Sattelpunktgeschwindigkeit als Fixpunkte besitzt. Für den Reaktionskanal T11 sind in Abbildung 5.13 für den Bereich kleiner Elektronenimpulse, d.h. solche in der Größenordnung $m_e v_p$, eindimensionale Verteilungen zu vier Projektilgeschwindigkeiten dargestellt. Man erkennt, daß die Form der Verteilungen in erster Näherung mit v_p skaliert.

Aufgrund der Anpassung der Spektrometereinstellung an die jeweilige Projektilgeschwindigkeit (siehe Abschnitt 3.5.1) skaliert auch die Auflösung in dieser Weise. In den meisten Abbildungen der folgenden Abschnitte wurde, um für die verschiede-

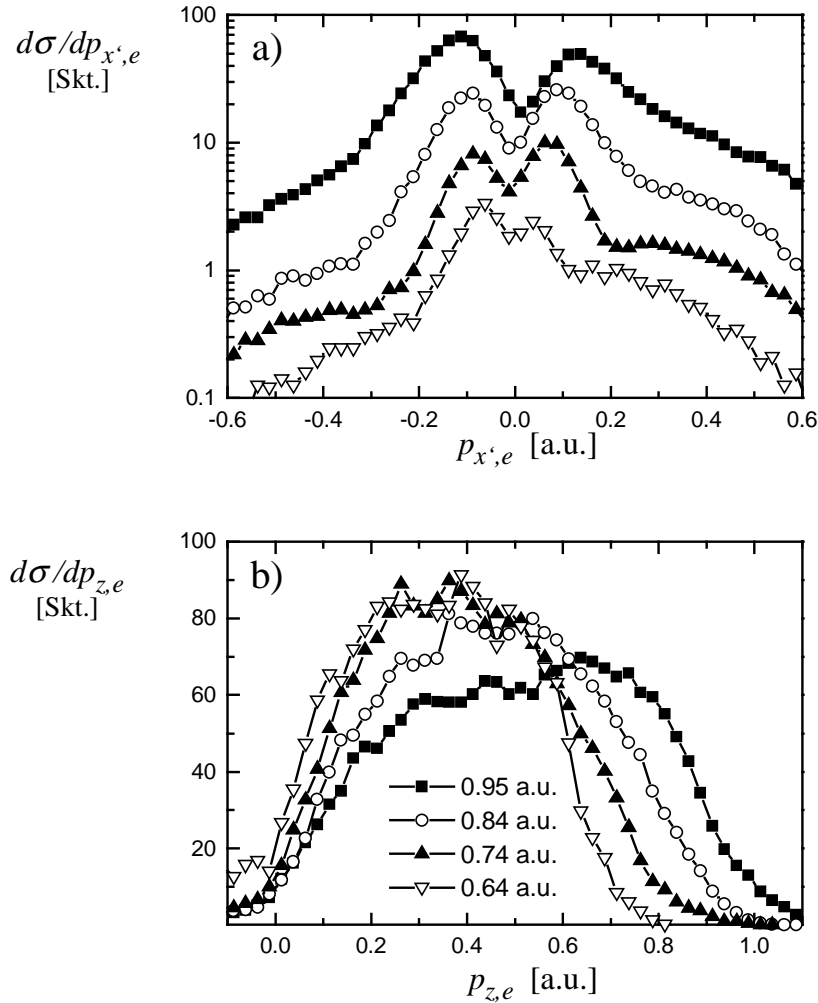


Abbildung 5.13: Eindimensionale Elektronenimpulsverteilungen der Transferionisation mit $Q = -0.9$ a.u. (TI1) für vier verschiedene Projektilgeschwindigkeiten zwischen 0.64 und 0.95 a.u.: Entlang der jeweils nicht dargestellten Achsen wurde über die angegebenen Bereiche integriert. a) Projektion des Transversalimpulses auf die Streuebene, Ereignisse mit $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 v_p$ und $-\infty < v_{y',e} < +\infty$, die Kurven sind durch die Multiplikation von Konstanten so gegeneinander verschoben, daß sie sich nicht gegenseitig verdecken. Das Rückstoßion wird in dieser Darstellung immer nach rechts und das Projektil nach links emittiert. b) Impuls in Strahlrichtung, Ereignisse mit $v_{r,e} \leq 0.3 v_p$ und $0 \leq \varphi < 360^\circ$, die Kurven sind sie auf gleiche Integrale normiert.

nen Projektilgeschwindigkeiten eine möglichst einheitliche Darstellung zu erhalten, der Elektronenimpuls in Einheiten von $m_e v_p$ bzw. die Elektronengeschwindigkeit in Einheiten von v_p aufgetragen. In den verwendeten Atomaren Einheiten besitzen Impuls und Geschwindigkeit eines Elektrons den gleichen Zahlenwert, so daß diese Unterscheidung rein formal ist.

Die lineare Verbreiterung der Elektronenimpulsverteilungen mit v_p beschreibt den wesentlichen Teil des Einflusses der Projektilgeschwindigkeit. Nur im Sattelpunktbild wird eine solche Abhängigkeit in einfacher Weise erklärt, allerdings wurde die Verschiebung des Maximums und nicht die Verbreiterung der Verteilung mit v_p erwartet. Das "Hidden-Crossings"-Modell liefert nur Elektronenimpulsverteilungen, wenn man die eigentliche Promotion ins Kontinuum vorzeitig abbricht und die Entwicklung der elektronischen Wellenfunktion in einem Modellpotential fortsetzt. Bei Rechnungen nach der Gekoppelte-Kanäle-Methode muß das Kontinuum mit wenigen Basiszuständen beschrieben werden. Der scharfe Abbruch der Elektronenimpulsverteilung entlang der z -Achse bei $\pm 0.5 v_p$, bezogen auf den Ursprung des molekularen Bezugssystems, mußte sich in der Besetzung dieser Zustände widerspiegeln. Ohne eine konkrete Rechnung ist jedoch nicht einsichtig, wodurch dies bedingt sein könnte. Bei der Verwendung von Sturmians als Basisfunktionen wird dieser experimentelle Befund richtig wiedergegeben [12].

Die Doppelpeakstruktur in Abbildung 5.13-a entlang der x' -Achse ist zum Teil durch die Einschränkung des dort dargestellten Phasenraumes auf $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 v_p$ bedingt. Sie ist Teil einer komplexeren Struktur, die im Folgenden durch verschiedene zweidimensionale Verteilungen dargestellt wird.

5.4.2 Verschiedene Darstellungen der dreidimensionalen Elektronenimpulsverteilung für den Reaktionskanal TI1 bei $v_p = 0.84$ a.u.

Der dreifach-differentielle Wirkungsquerschnitt $d^3\sigma/dv_e^{\vec{v}}$ ist auf einem dreidimensionalen Raum definiert, kann hier jedoch nur auf ein- oder zweidimensionalen Räumen, z.B. auf einer Ebene, dargestellt werden. Senkrecht zu einer solchen Ebene muß aufgrund der begrenzten Statistik über einen Bereich gemittelt werden, der größer als die Kanalbreite in der Ebene ist. Es kommt also darauf an, die beste "Ansicht" zu finden, um die wesentlichen Strukturen der Verteilung erkennen zu können. Für den Kanal TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u., die etwa in der Mitte des untersuchten Bereichs liegt, sind hier verschiedene Möglichkeiten der Darstellung zusammengestellt (gemessen mit ${}^4\text{He}^{2+}$ -Projektilen).

In Abbildung 5.14 ist der differentielle Wirkungsquerschnitt $d^3\sigma/dv_e^{\vec{v}}$ in 6 zueinander parallelen Ebenen aufgetragen. Der Abstand der Ebenen von $0.2 v_p$ in Richtung der z -Achse entspricht auch gleichzeitig dem Bereich, über den gemittelt wurde. Die Folge der Spektren a) bis f) ergibt eine "Fahrt des Betrachters" in Strahlrichtung durch die Sattelpunktregion. Die bereits in Abbildung 5.13-a gezeigte Struktur mit zwei Maximas verschwindet in der Nähe des Targets und des Projektils, d.h. für $v_{z,e} = 0$ bzw. v_p . In Abbildung 5.14-b ist das linke, in 5.14-e dagegen das rechte Maximum höher. Im Sattelpunktbild, in dem die Ionisation im wesentlichen dann stattfindet, wenn sich die Achse des Quasimoleküls aus Projektil und Target wieder in die Strahlachse gedreht hat, kann dies nicht verstanden werden. Ebenso muß hier jede Näherung (z.B. [13]) versagen, die ausschließlich mit Stoßparameter Null rechnet.

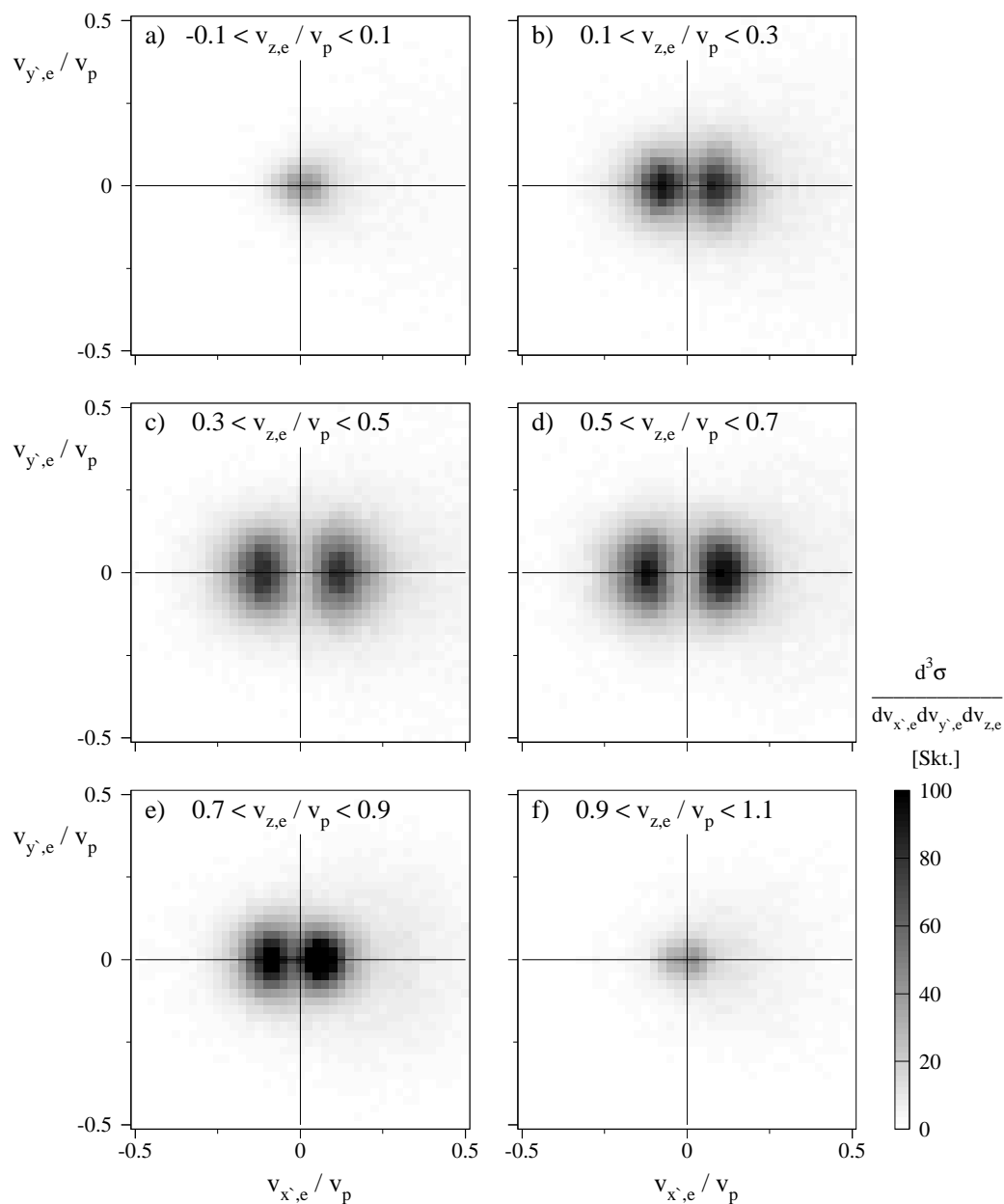


Abbildung 5.14: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u. im durch die nukleare Streuebene definierten Koordinatensystem: Für sechs Schnitte in Strahlrichtung ist die Verteilung der Transversalimpulse gezeigt. Der Rückstoßionen-Transversalimpuls zeigt in diesen Darstellungen immer nach rechts, d.h. in Richtung der x' -Achse. Die Verteilung ist nach Definition der Achsen spiegelsymmetrisch zur x',z -Ebene. Die Daten sind so skaliert, daß das Maximum des dreifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d^3\sigma/(dv_{x',e}dv_{y',e}dv_{z,e})$ 100 Skalenteile (Skt.) entspricht. Entsprechende Darstellungen zu weiteren Projektilgeschwindigkeiten findet man in Anhang A.

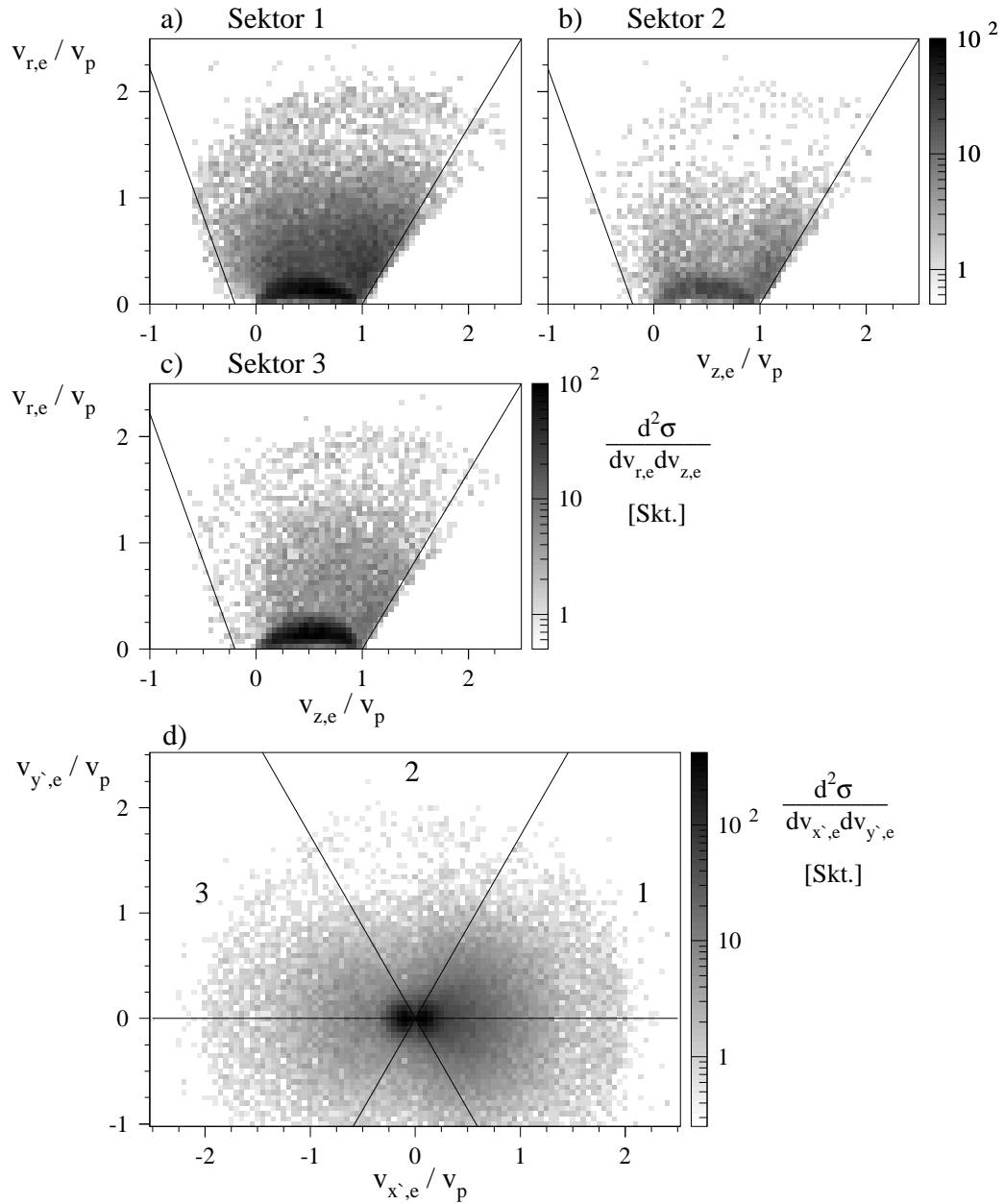


Abbildung 5.15: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84 \text{ a.u.}$: In den oberen drei Spektren ist die Transversalkomponente der Elektronengeschwindigkeit $v_{r,e}$ gegen die in Strahlrichtung für die Polarwinkelbereiche a) $0 < \varphi < 60^\circ$, b) $60 < \varphi < 120^\circ$ und c) $120 < \varphi < 180^\circ$ aufgetragen. Rechts und links von den eingezeichneten Linien fällt der Nachweisraumwinkel des Spektrometers auf Null. In d) ist die Verteilung in der transversalen Ebene dargestellt, wobei das Rückstoßion immer nach rechts emittiert wird. Die Linien trennen die verwendeten Sektoren. Die untere und obere Halbebene sind in dieser Darstellung identisch. Die Daten sind so skaliert, daß das Maximum des zweifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d^2\sigma/(dv_{r,e}dv_{z,e}dv_{z,e})$ 100 Skalenteilen (Skt.) entspricht.

In allen Ebenen ist zu erkennen, daß die Ausläufer der Verteilungen im wesentlichen in Richtung der positiven x' -Achse, d.h. in Richtung des Transversalimpulses des Rückstoßions, zeigen. In Abbildung 5.15-d, die eine logarithmische Skala für den zweifach-differentiellen Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dv_{x'e}dv_{y'e})$ verwendet und auch noch wesentlich größere Transversalimpulse beinhaltet, sind diese Ausläufer deutlicher zu erkennen. Über $v_{z,e}$ ist im Nachweisbereich des Spektrometers integriert. Die untere Hälfte ist abgeschnitten, da sowohl diese Verteilung als auch die in Abbildung 5.14 spiegelsymmetrisch zur Streuebene bzw. hier zur x' -Achse sind. Dies ist dadurch begründet, daß senkrecht zur Streuebene keine Richtung ausgezeichnet und die Coulombwechselwirkung invariant gegen Raumspiegelung ist. Diese Symmetrie wurde in den Rohdaten gefunden und ist in den gezeigten Darstellungen zur Reduktion des statistischen Fehlers ausgenutzt.

In Abbildung 5.15-d sind drei gleich große Sektoren eingezeichnet. Für diese 60° großen Bereiche des Polarwinkels φ , der den Winkel zwischen den Transversalimpulsen von Rückstoßion und Elektron mißt, ist in den Abbildungen 5.15-a bis 5.15-c der zweifach-differentielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dv_{r,e}dv_{z,e})$ aufgetragen.

In Zylinderkoordinaten ist das Volumenelement durch $rdr dz d\varphi$ gegeben, d.h., die dreifach-differentiellen Wirkungsquerschnitte in kartesischen und Zylinderkoordinaten sind auf folgende Weise miteinander verknüpft:

$$1/r \frac{d^3\sigma}{dr d\varphi dz}(r, \varphi, z) = \frac{d^3\sigma}{dx dy dz}(x, y, z). \quad (5.2)$$

Somit sind beim differentiellen Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dv_{r,e}dv_{z,e})$ die Anteile mit großer Transversalgeschwindigkeit gegenüber der kartesischen Darstellung linear mit $v_{r,e}$ angehoben. Da in den Abbildungen 5.15-a bis 5.15-c außerdem eine logarithmische Skala verwendet wurde, sind diese besonders geeignet, um die äußerst schwachen Ausläufer der Elektronenverteilung bei großen Transversalimpulsen hervorzuheben.

Wie zu erkennen ist, wird im Nachweisbereich die Elektronenverteilung durch eine Kugelfläche begrenzt, deren Mittelpunkt im Projektilsystem, d.h. bei $\vec{v}_e = (0, 0, v_p)$, liegt. Die Ereignisse am Rand der Verteilung können dem DC in autoionisierende Zustände (ADC) zugeordnet werden. Die Halbwertszeit der dabei besetzten doppelt angeregten Zustände im He ist so kurz, daß diese noch im Targetvolumen zerfallen. Bei der hier verwendeten Definition der Reaktionskanäle über den Ladungszustand der Ionen und den Q -Wert ist der ADC nicht als meßtechnisch bedingter Untergrund im TI1 zu verstehen, sondern stellt einen möglichen, wenn auch schwachen, Beitrag zur Transferionisation dar.

Noch größerer Energieübertrag auf das ionisierte Elektron als mit dem ADC ist, wie gezeigt wurde, extrem unwahrscheinlich. Das heißt jedoch nicht, daß der Kernbewegung nicht mehr Energie entzogen werden könnte, doch führt dies zur Anregung des gebundenen Elektrons, d.h. zur TI2.

Der ADC wird, aufgrund der Bindungsenergien der beteiligten Zustände, durch konstante kinetische Energie im Projektilsystem zwischen 33.2 und 35.5 eV charakterisiert. Zur Untersuchung dieses Anteils der Elektronenverteilung ist somit die verwendete Skalierung der Elektronengeschwindigkeiten mit v_p wenig geeignet.

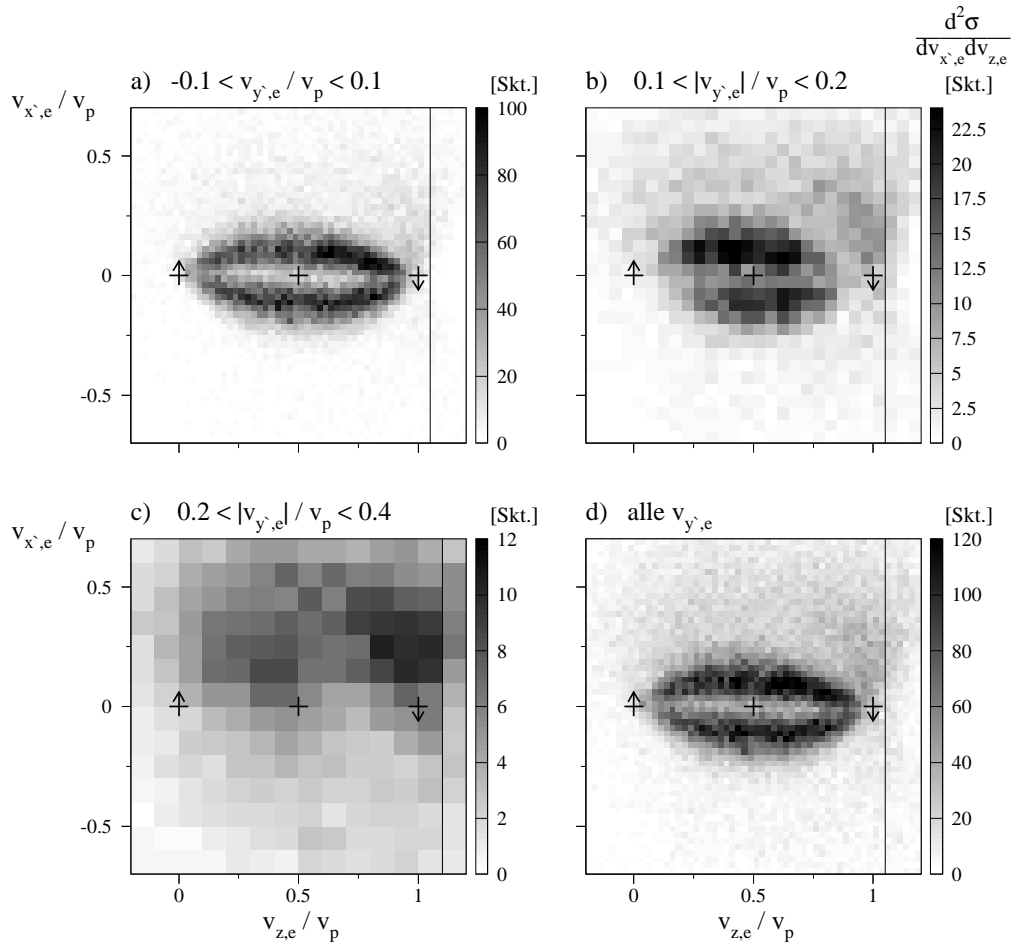


Abbildung 5.16: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u.: zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dv_{x',e}dv_{z,e})$ für verschiedene Bereiche von $v_{y',e}$, a) $0 < |v_{y',e}| < 0.1 v_p$, b) $0.1 v_p < |v_{y',e}| < 0.2 v_p$, c) $0.2 v_p < |v_{y',e}| < 0.4 v_p$, d) $-\infty < v_{y',e} < +\infty$. Die Kreuze geben die Positionen von Target, Sattelpunkt und Projektil im Geschwindigkeitsraum an, wobei die Pfeile in Richtung der Transversalimpulse der beiden Ionen zeigen. In b) und c) sind mehrere Kanäle zusammengefaßt, um den statistischen Fehler zu verringern. Rechts von den senkrechten Linien fällt der vom Elektronenspektrometer erfaßte Raumwinkel, so daß der Wirkungsquerschnitt dort zu niedrig erscheint. Ein Skalenteil (Skt.) entspricht etwa $1.7 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{a.u.}^2$, wobei der Fehler der Absolutnormierung ca. 30 % beträgt. In den Spektren a) und d) ist 1 Skt. gleich 1 Ereignis/Kanal.

Eine weitere Darstellungsmöglichkeit in kartesischen Koordinaten ist in Abbildung 5.16 gezeigt. Aufgetragen sind die Geschwindigkeitskomponenten in Richtung der beiden Achsen, welche die nukleare Streuebene aufspannen. In d) wurde entlang der nicht dargestellten y' -Achse über den gesamten Raum integriert, die Spektren a) bis c) zeigen Schnitte zu den angegebenen Bereichen. Da der differentielle Wirkungsquerschnitt stark mit wachsendem Betrag von $v_{y',e}$ fällt, wurden, wie zu erkennen ist, die verwendete Farbskala und Kanalbreite jeweils angepaßt.

Hier und in den Abbildungen 5.14 und 5.16 ist zu erkennen, daß der wesentliche Teil der Elektronenverteilung in zwei "Bananen" zu finden ist, die in der nuklearen Streuebene liegen und im Geschwindigkeitsraum vom Projektil bis zum Target reichen. Senkrecht zur Streuebene fällt der differentielle Wirkungsquerschnitt schnell um mehr als eine Größenordnung. Eine Struktur ist nur für sehr große $v_{r,e}$ zu erkennen, die als ADC identifiziert wurde. Zum Vergleich der Elektronenverteilungen im Bereich der höchsten Intensität bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten scheint somit die Darstellungsweise von Abbildung 5.16-d am besten geeignet.

Der Grund für das Minimum in der Elektronenverteilung auf der z - bzw. Molekülachse, d.h. zwischen den beiden "Bananen", wird in Abschnitt 5.7 diskutiert. Die Anteile außerhalb der "Bananen" sind in Richtung des Rückstoßionen-Transversalimpulses stärker. Dies wird besonders in Abbildung 5.16-c deutlich. Eine Erklärung dafür kann hier nicht gegeben werden.

Die in diesem Abschnitt exemplarisch für $v_p = 0.84$ a.u. gezeigten Darstellungen sind in Anhang A für einige weitere Projektilgeschwindigkeiten zu finden.

5.4.3 Abhängigkeit der Elektronenimpulsverteilung der T11 von der Projektilgeschwindigkeit

Im letzten Abschnitt war in den verschiedenen Darstellungen zu erkennen, daß der wesentliche Anteil der Elektronenverteilung in zwei Bereichen liegt, die dort aufgrund ihrer Form als "Bananen" bezeichnet wurden. Ihre grobe Form ist in guter Näherung spiegelsymmetrisch zu den Ebenen, die durch $v_{x',e} = 0$ und $v_{z,e} = 0.5 v_p$ gegeben sind, und natürlich zur nuklearen Streuebene ($v_{y',e} = 0$). Für den Wert des differentiellen Wirkungsquerschnittes innerhalb der "Bananen" gilt dies jedoch nicht. Dieser ist im Quadranten, der durch $v_{x',e} > 0$ und $v_{z,e} > v_p/2$ gegeben ist, deutlich höher als in den übrigen.

Hier soll nun untersucht werden, ob sich dieses Maximum mit der Projektilgeschwindigkeit verschiebt. Dazu ist am besten die in Abbildung 5.16-d verwendete Darstellungsweise geeignet, die den zweifach-differentiellen Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dv_{x',e}dv_{z,e})$ angibt. Abbildung 5.17 zeigt diesen für acht Projektilgeschwindigkeiten im untersuchten Bereich von $v_p = 0.64$ a.u. bis $v_p = 1.05$ a.u. Die Farbskala wurde jeweils an das Maximum des Wirkungsquerschnittes angepaßt und beginnt erst bei 15% des maximalen Wertes, so daß die schwächeren Anteile außerhalb der "Bananen" nicht dargestellt werden.

Zunächst wird noch einmal darauf hingewiesen, daß die wesentliche Änderung der Elektronenimpuls- bzw. Elektronen-Geschwindigkeitsverteilung in der Skalierung der Achsen mit v_p verborgen ist. In Strahlrichtung (z -Achse) werden dadurch alle Verteilungen in sehr guter Näherung gleich breit dargestellt. In transversaler Richtung (x' -Achse) dagegen ist eine deutliche Änderung mit der Projektilgeschwindigkeit zu erkennen, wobei die untere ($v_{x',e} < 0$) "Banane" ihre Lage kaum verändert, während sich die obere bei abnehmender Projektilgeschwindigkeit der durch eine unterbrochene Linie markierten Achse annähert. Bei $v_p = 0.71$ a.u. erscheint die Verteilung am schmalsten, es ist jedoch schon zu erkennen, daß ein weiterer Anteil bei

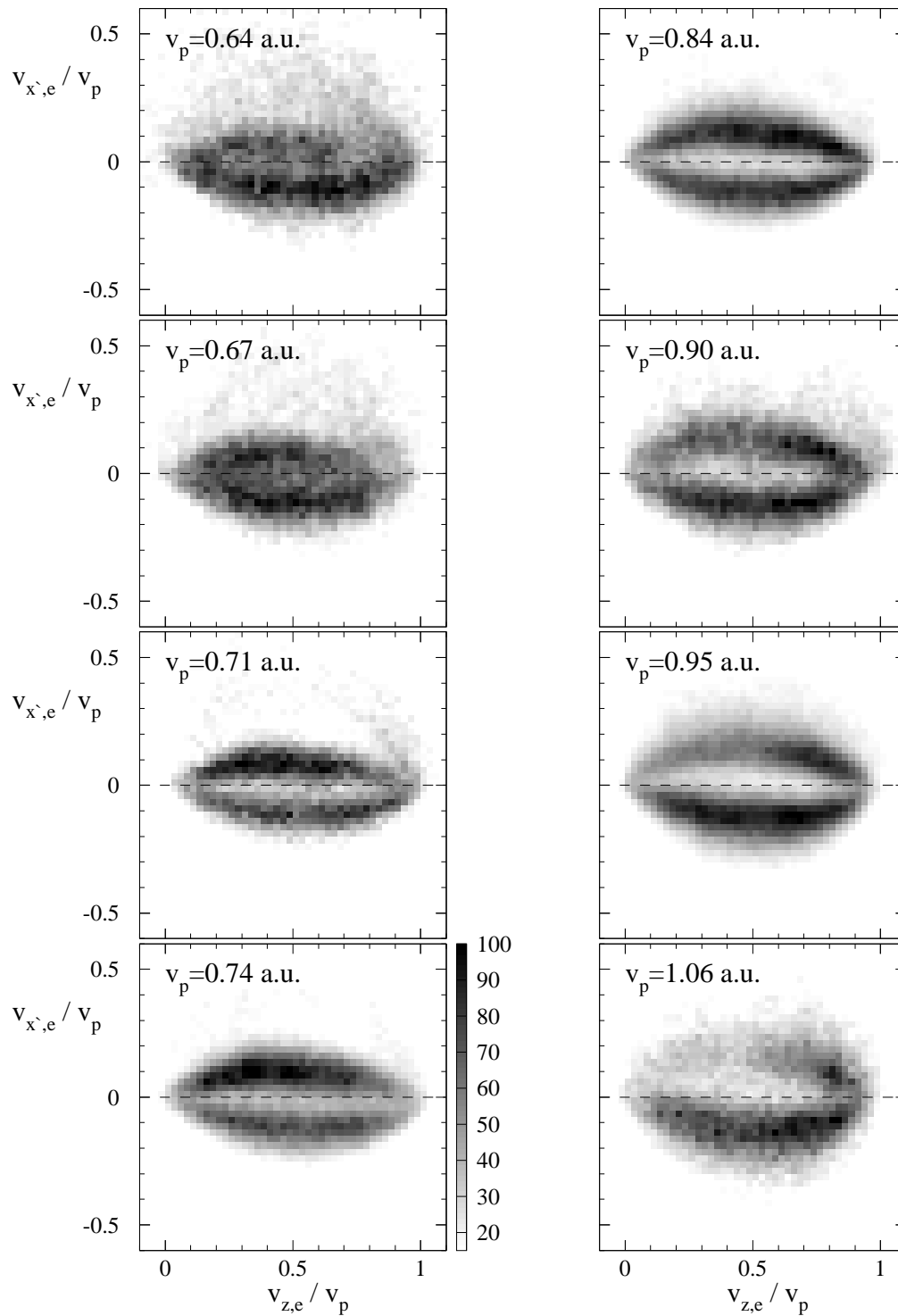


Abbildung 5.17: Projektion der Elektronenverteilung der TI1 in die nukleare Streuebene für verschiedene Projektilgeschwindigkeiten zwischen $v_p = 0.64$ a.u. und $v_p = 1.06$ a.u.: Die Verteilungen sind auf gleiche maximale Intensitäten skaliert. Die unterbrochene Linie markiert die Strahlachse.

größerem $v_{x',e}$ hinzukommt. Dieser hat sich bei der kleinsten gemessenen Geschwindigkeit bereits so weit entwickelt, daß sich für diese Verteilung eine Ähnlichkeit mit der der höchsten Geschwindigkeit von $v_p = 1.06$ a.u. ergibt.

Weiterhin ist in Abbildung 5.17 zu erkennen, daß das Maximum des zweifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes mit der Projektilgeschwindigkeit in der Streuebene wandert. Für die Verschiebung senkrecht zur Strahl- bzw. Molekülachse ist eine Erklärung in Abschnitt 5.7 zu finden.

Die Unsymmetrie gegenüber Spiegelung an der durch $v_{z,e} = 0.5 v_p$ definierten Ebene ist nicht verwunderlich, da nur die Kernladung des Projektils durch das gebundene Elektron abgeschirmt wird. Diese Abschirmung verschiebt den Sattelpunkt zum Projektil. Welche Konsequenzen für die Elektronenverteilung daraus zu erwarten sind, ist jedoch unklar, denn zum einen verschiebt sich die Sattelpunktgeschwindigkeit zu größeren Werten, andererseits entsteht dadurch im größten Teil des Bereiches zwischen den beiden Kernen eine Kraft, die rückwärts gerichtet ist. Beiden Argumenten ist jedoch gemeinsam, daß sie unabhängig von der Projektilgeschwindigkeit gelten sollten und somit die beobachtete Oszillation der Position des Maximums in der Elektronenverteilung nicht erklären können. Eine befriedigende Interpretation dieses Phänomens kann hier nicht gegeben werden.

5.5 Vergleich der Elektronenimpulsverteilungen von TI1 und SI1

In diesem Abschnitt werden die Elektronenverteilungen der TI1, die schon in den vorausgegangenen Abschnitten untersucht wurden, mit denen der SI1 verglichen. Die niedrigste Projektilgeschwindigkeit, bei der diese beiden Reaktionskanäle gemessen wurden, beträgt 0.71 a.u. Für diese ist in Abbildung 5.18, welche die Projektionen auf die nukleare Streuebene zeigt, eine deutliche Ähnlichkeit zwischen TI1 und SI1 zu erkennen.

Bei der Interpretation der Ergebnisse im quasimolekularen Bild wird das Bezugssystem im Schwerpunkt oder Sattelpunkt errichtet, in dem die Bezeichnung der beiden Kerne mit Projektil und Target nicht möglich ist. Die Unterscheidung der beiden Ionen im Endzustand kann in diesem Fall z.B. durch ihren Ladungszustand erfolgen. In Abbildung 5.18 ist jedoch die x' -Achse durch den Transversalimpuls des Rückstoßions und die z -Achse durch den Impuls des Projektils definiert, wie dies auch in den vorausgegangenen Abschnitten der Fall war. Zwei Darstellungen, die vom molekularen Standpunkt aus vergleichbar sind, erhält man, wenn man z.B. die Verteilung der SI1 am Mittelpunkt ($v_{z,e} = 0.5 v_p$, $v_{x',e} = 0$) spiegelt. Damit zeigt dann der Transversalimpuls des He^{2+} -Ions immer nach oben und der des He^+ -Ions immer nach unten. Nach dieser Spiegelung haben beide Verteilungen ihr Maximum in der oberen Hälfte, gleichzeitig geht damit aber die Übereinstimmung verloren, daß bei beiden Reaktionskanälen links ($v_{z,e} < 0.5 v_p$) mehr Intensität zu finden ist.

Entscheidender als diese Abweichungen im Detail ist jedoch die Entwicklung der Verteilungen bei zunehmender Projektilgeschwindigkeit. Während sich bei der TI1

das Minimum auf der z -Achse verbreitert, verschwindet es bei der SI1. Wie in den Abbildungen 5.19 und 5.20 zu sehen ist, bildet sich bei der SI1 auf der Strahlachse zwischen Projektil und Rückstoßion ein geschlossener Bereich hoher Intensität aus.

Zunächst erscheint es erstaunlich, daß sich diese zwei Prozesse überhaupt in ihrer Elektronenverteilung unterscheiden, denn in den letzten Abschnitten wurde in der Argumentation mit molekularen Eigenzuständen deutlich, daß der Übergang von der TI1 zur SI1 lediglich eine Verschiebung der Phasen zwischen geraden und ungeraden Zuständen im Quasimolekül bedeutet. Die Unterschiede in der Emissionscharakteristik der Elektronen können sicherlich nicht nur mit dieser Phasendifferenz zusammenhängen. Es ist also davon auszugehen, daß bei hohen Projektilgeschwindigkeiten verschiedene molekulare Zustände zur Besetzung der Endzustände von SI1 bzw. TI1 führen.

Diese Annahme wird dadurch untermauert, daß SI1 und TI1 bei hohen Geschwindigkeiten ihre Hauptbeiträge bei vollkommen verschiedenen Rückstoßionen-Transversalimpulsen (siehe Abbildung 5.10) haben, denn es hängt wesentlich von dem Kernabstand bei der nächsten Annäherung ab, ob ein bestimmter Weg im Korrelationsdiagramm zu einem Prozeß beitragen kann. So sollte z.B. die Rotationskopplung, die im wesentlichen bei kleinen Kernabständen stattfindet, bei der SI1 kaum eine Rolle spielen.

Für weitere Untersuchungen ist es erforderlich, die Elektronenverteilung für verschiedene Bereiche in der Verteilung der Rückstoßionen-Transversalimpulse zu betrachten. Dies erfolgt im nächsten Abschnitt.

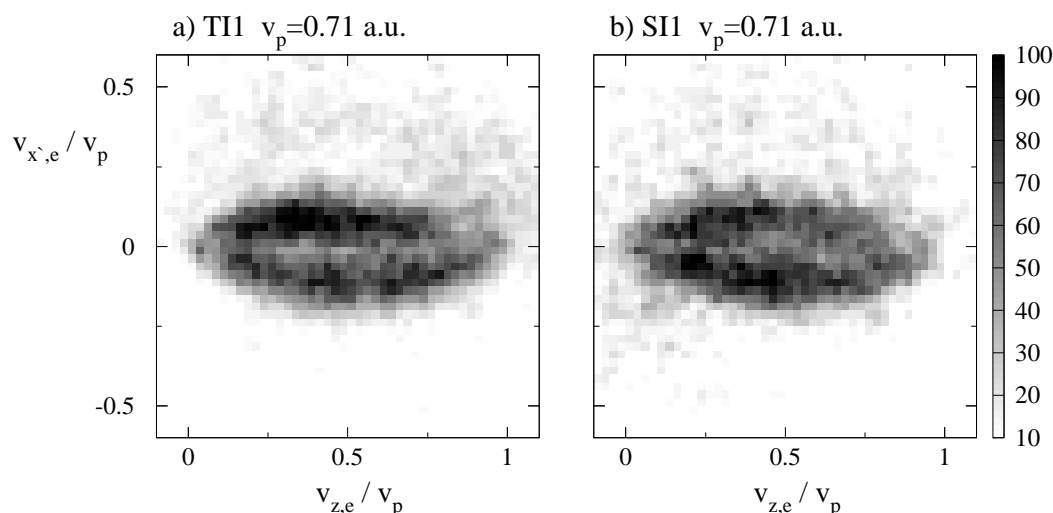


Abbildung 5.18: Vergleich der Ionisationskanäle TI1 und SI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.71$ a.u.: Elektronenimpulsverteilungen in der nuklearen Streuebene. Die Verteilungen sind auf gleiche maximale Intensitäten skaliert. Für höhere Projektilgeschwindigkeiten siehe Abbildung 5.19.

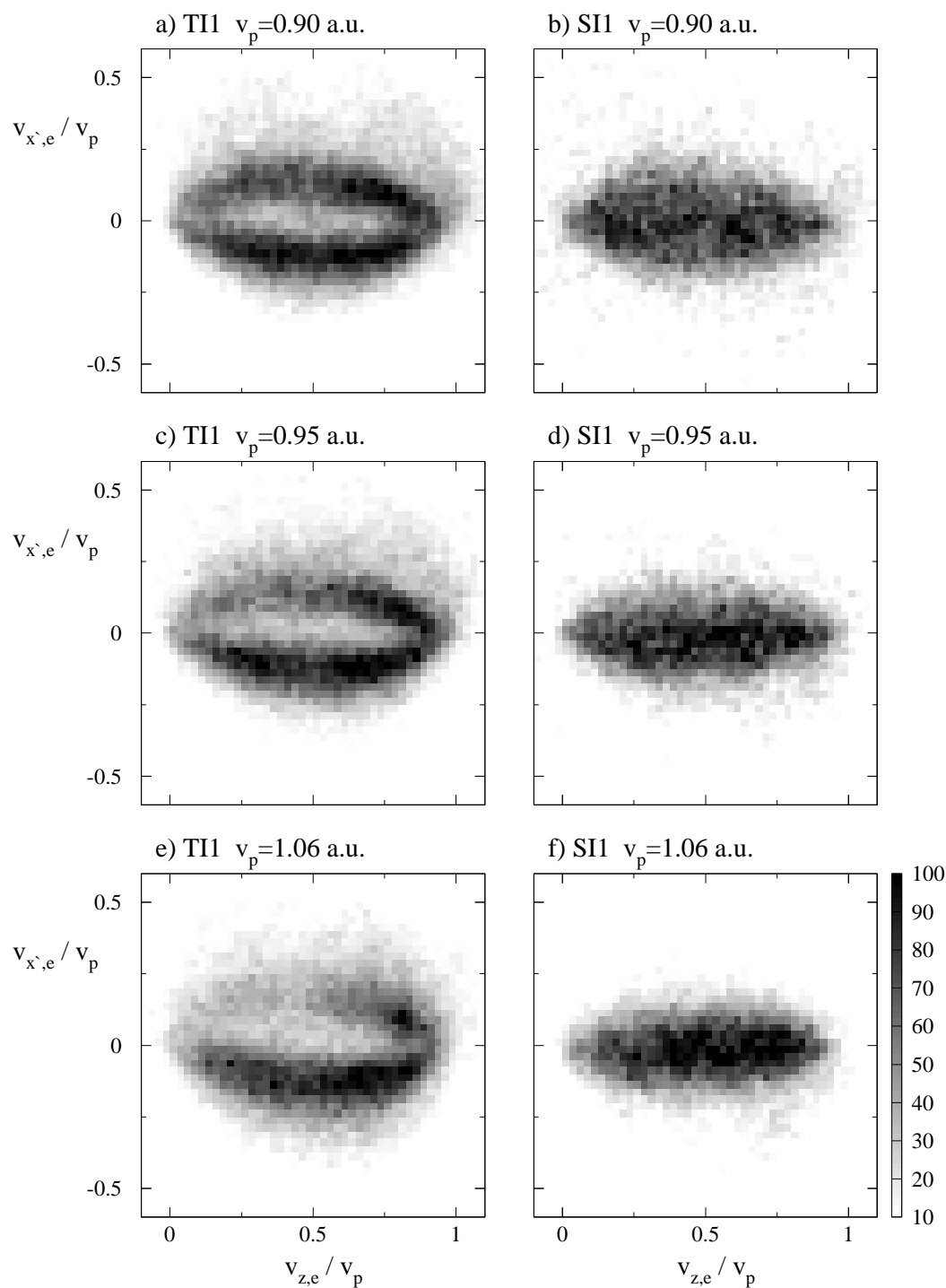


Abbildung 5.19: Vergleich der Ionisationskanäle TI1 und SI1 bei den Projektilgeschwindigkeiten $v_p = 0.90, 0.95$ und 1.06 a.u.: Elektronenimpulsverteilungen in der nuklearen Streuebene. Die Verteilungen sind auf gleiche maximale Intensitäten skaliert. Für $v_p = 0.71$ a.u. siehe Abbildung 5.18.

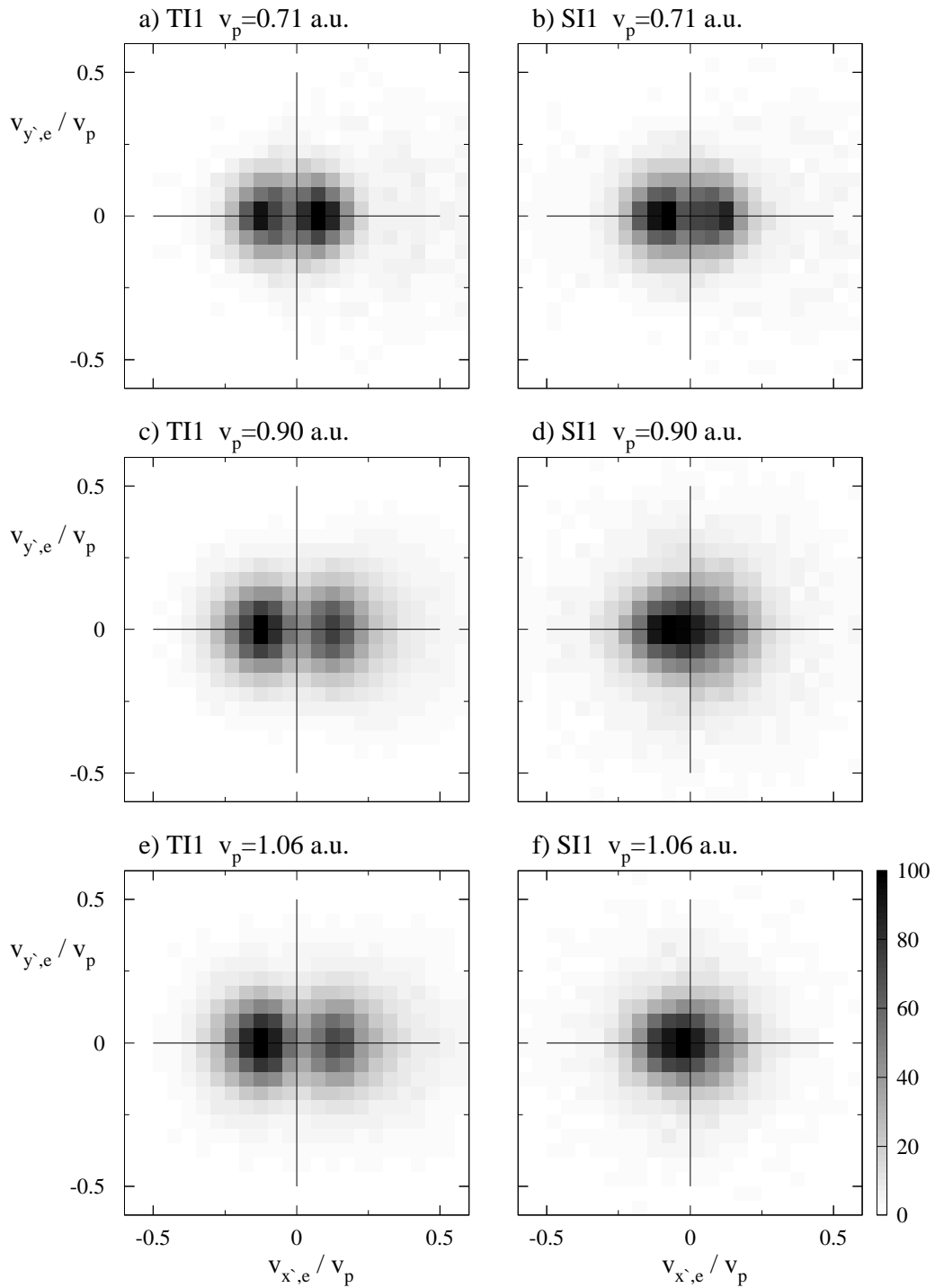


Abbildung 5.20: Vergleich der Ionisationskanäle TII und SI1 bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten: Elektronenimpulsverteilungen in der Ebene senkrecht zur Strahlrichtung für Longitudinalimpulse mit $0.3v_p < v_{z,e} < 0.7v_p$. Die Verteilungen sind auf gleiche maximale Intensitäten skaliert.

5.6 Elektronenimpulsverteilungen für verschiedene $p_{r,rec}$

Die Selektion von Ereignissen bestimmter Werte von $p_{r,rec}$ vergrößert den statistischen Fehler in der Elektronenimpulsverteilung. Deshalb werden hier zunächst die Ergebnisse von Messungen mit ungepulstem Strahl vorgestellt, die zwar gute Statistik ergeben aber nur die Transferionisation enthalten.

In Abbildung 5.21 sind für drei ausgewählte Projektilgeschwindigkeiten und jeweils das obere und untere Ende im $p_{r,rec}$ -Spektrum die Elektronenverteilungen in der nuklearen Streuebene dargestellt. Man erkennt, daß der Stoßparameter keinen großen Einfluß auf die Form der Verteilung hat. Der Anteil von Ereignissen, der außerhalb der "Bananen" liegt, ist jedoch generell bei Stößen mit kleinem Stoßparameter stärker. Weiterhin fällt auf, daß sich die Intensitätsverteilung innerhalb der "Bananen" zum Teil mit $p_{r,rec}$ verändert. Dabei ist jedoch kein einheitlicher Trend zu erkennen. Bei $v_p = 0.71$ a.u. ergeben sich für enge Stöße, bei $v_p = 0.95$ a.u. dagegen für weite Stöße größere Intensitätsunterschiede innerhalb der "Bananen". Bei $v_p = 0.78$ a.u. ist in beiden Fällen die Intensitätsverteilung innerhalb der "Bananen" etwa gleich, wobei die obere mehr Ereignisse enthält.

Der durch die Bedingung $6 < p_{r,rec} < 12$ a.u. (Abbildung 5.21-rechts) selektierte Teil des Phasenraumes ist 13.5-mal größer als der durch $1 < p_{r,rec} < 3$ a.u. beschriebene (Abbildung 5.21-links). Diese Bereiche sind so gewählt, daß jeweils etwa gleich viele Ereignisse enthalten sind. Für den Bereich großer $p_{r,rec}$ ist damit ein höherer Untergrundanteil in den Verteilungen zu erwarten. Es muß somit untersucht werden, ob bei großen $v_{x',e}$ die Beiträge in der Elektronenverteilung nicht auf Untergrundeignisse zurückzuführen sind.

Die durchgeführte Untergrundunterdrückung überprüft die Erfüllung der Energieerhaltung. Die Emissionsrichtung in der transversalen Ebene ist davon unabhängig, da zur Berechnung der kinetischen Energie nur der Betrag der Geschwindigkeit benötigt wird. Abbildung 5.22 zeigt, ebenfalls für zwei Bereiche von $p_{r,rec}$ mit der Bedingung $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 v_p$, die Verteilung in der transversalen Ebene. Man erkennt deutlich, daß sowohl rechts als auch links, d.h. für weite und enge Stöße, die Anteile außerhalb der "Bananen" nur ca. 45° aus der nuklearen Streuebene herausgehen. Diese Winkelkorrelation schließt aus, daß dieser Anteil wesentlich von Untergrundeignissen erzeugt wird.

Bisher wurden in zweidimensionalen Darstellungen lediglich die Komponenten des Elektronenimpulsvektors in verschiedenen Kombinationen gegeneinander aufgetragen. Dabei wurde darauf geachtet, daß beide Achsen die gleiche Skalierung haben. Natürlich sind aber auch Projektionen des vierfach-differentiellen Wirkungsquerschnittes auf Flächen, die eine Komponente des Elektronenimpulses und $p_{r,rec}$ als Achsen enthalten, möglich. Zwei solche Darstellungen sind in Abbildung 5.23 für SI1 bei $v_p = 0.90$ a.u. gezeigt. Mit der durch die Graustufenskala beschränkten Auflösung kann man dort z.B. entlang einer waagerechten Linie die Verteilung von $v_{z,e}$ oder $v_{x',e}$ für einen bestimmten Wert von $p_{r,rec}$ ablesen. So ist hier deutlich zu erkennen, daß die Elektronenverteilung für enge Stöße (große $p_{r,rec}$) in

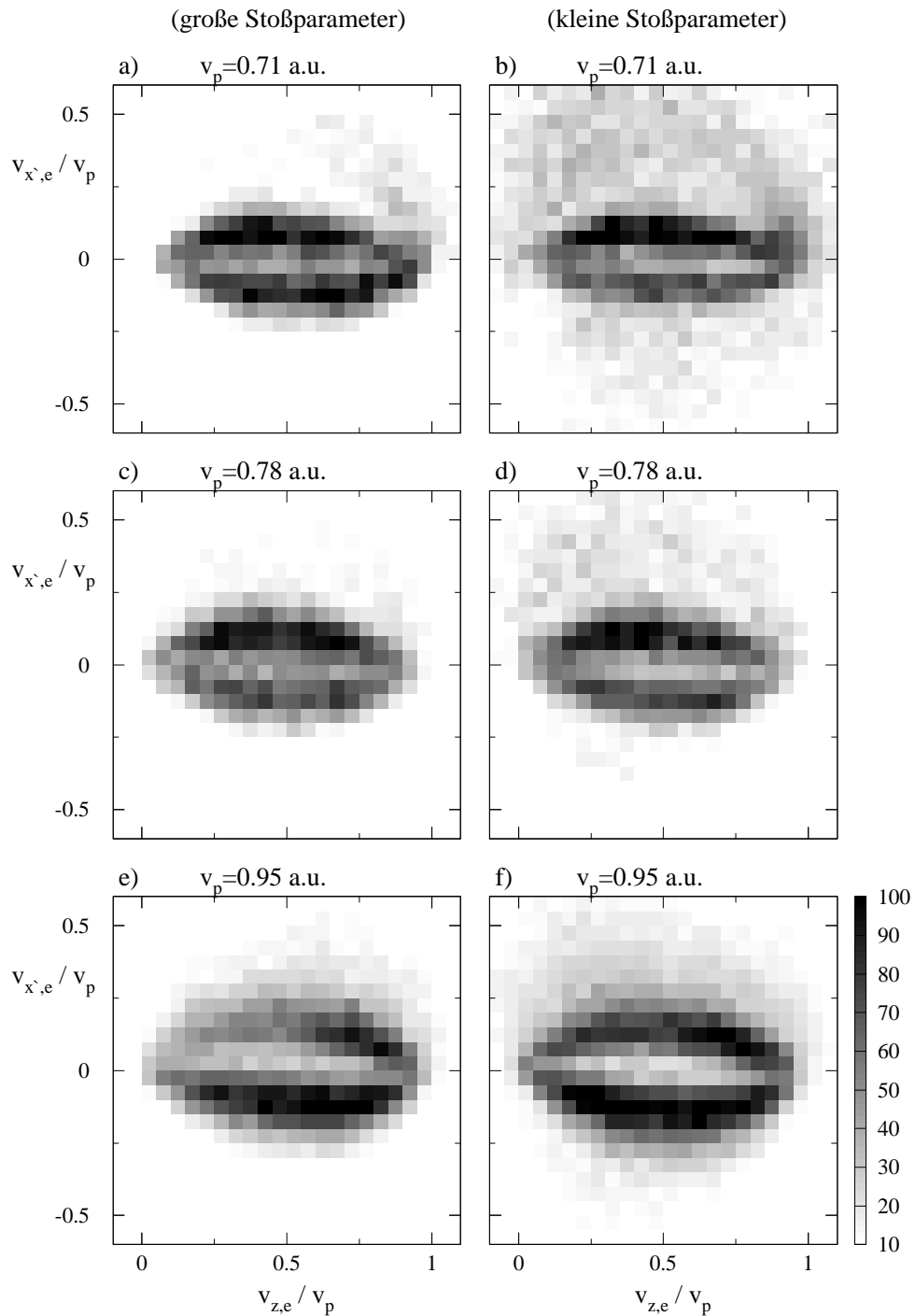


Abbildung 5.21: Elektronengeschwindigkeitsverteilungen in der nuklearen Streuebene der TII für drei verschiedene Projektilgeschwindigkeiten und je zwei Bereiche von $p_{r,rec}$: links - Spektren a), c) und e): $1 < p_{r,rec} < 3$ a.u., entspricht großen Stoßparametern; rechts - Spektren b), d) und f): $6 < p_{r,rec} < 12$ a.u., entspricht kleinen Stoßparametern. Die Verteilungen sind auf gleiche maximale Intensitäten skaliert.

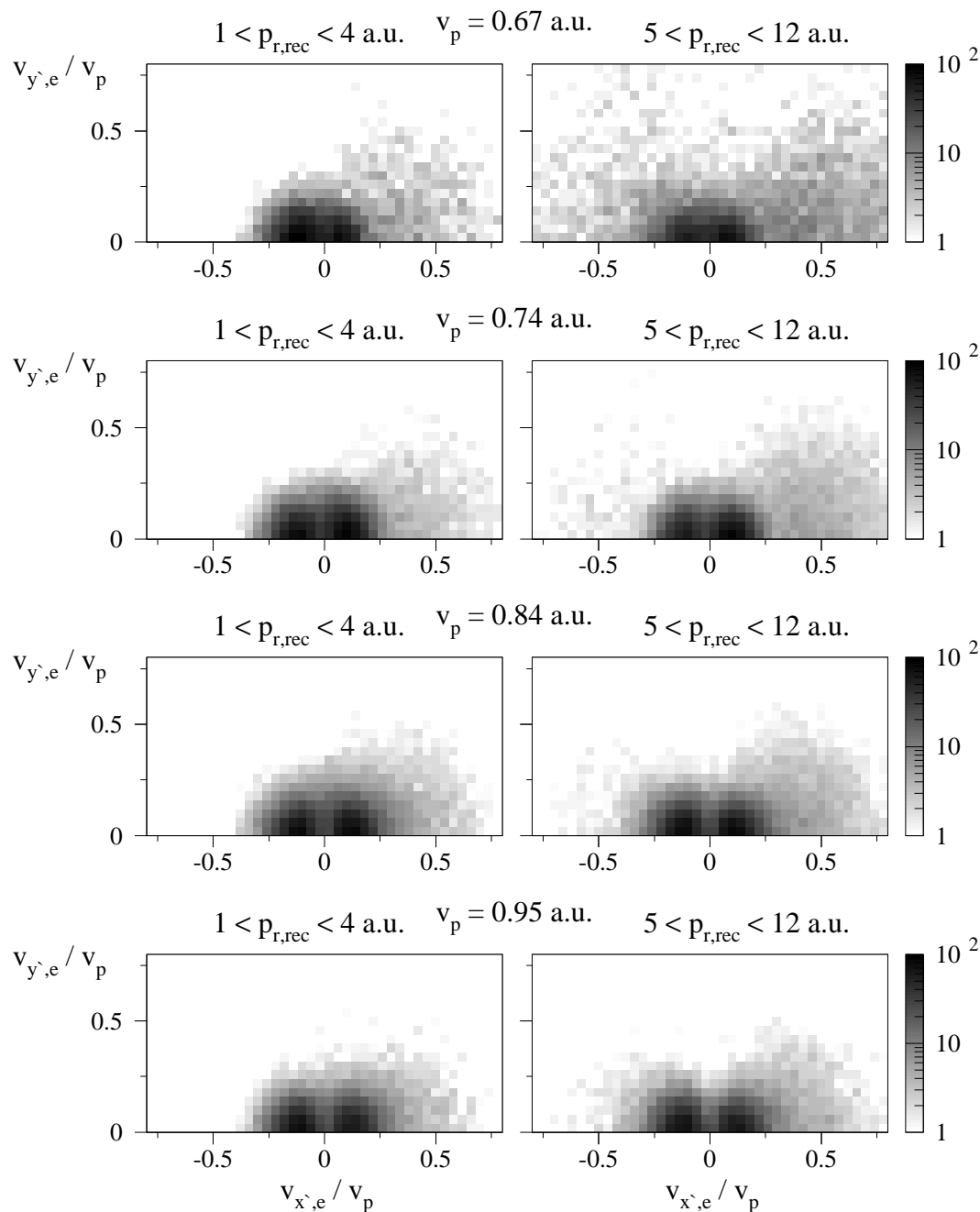


Abbildung 5.22: Transferionisation bei vier Projektilegeschwindigkeiten: Elektronengeschwindigkeitsverteilung in der Ebene senkrecht zur Strahlrichtung für kleine (links) und große (rechts) Rückstoßionen-Transversalimpulse. In Strahlrichtung wurde über den Bereich $0.3 v_p < v_{ze} < 0.7 v_p$ integriert. Für $v_{y',e}$ (Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Streuebene) werden nur positive Geschwindigkeiten dargestellt, da die Verteilung spiegelsymmetrisch zur Streuebene ist. Das Rückstoßion fliegt in dieser Darstellung immer nach rechts. Die Verteilungen sind auf gleiche maximale Intensitäten skaliert.

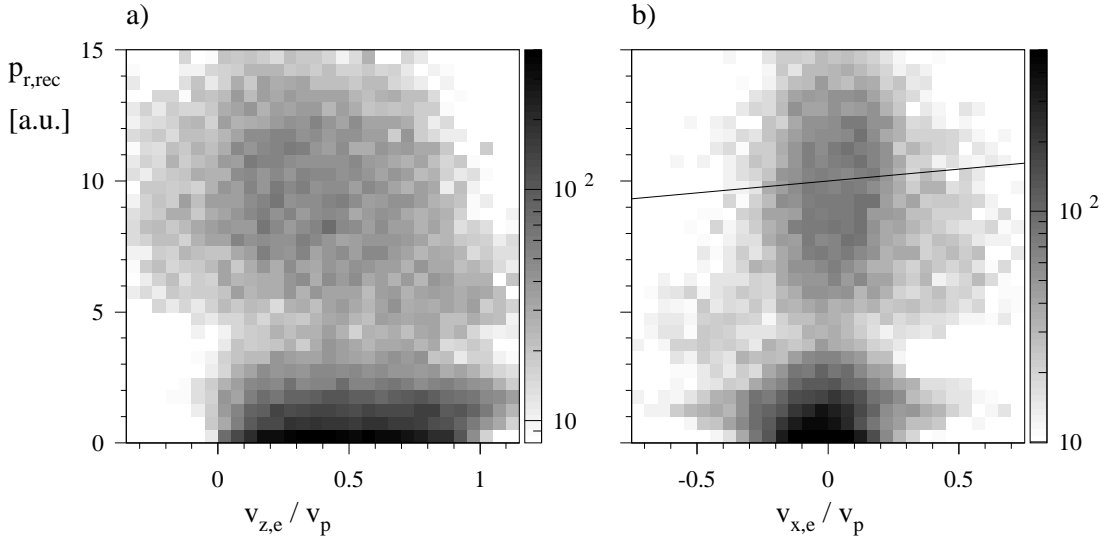


Abbildung 5.23: Zweifach-differentielle Wirkungsquerschnitte von SI1 bei $v_p = 0.90$ a.u.: a) $d^2\sigma/(dv_{z,e}dp_{r,rec})$ und b) $d^2\sigma/(dv_{x',e}dp_{r,rec})$. Die Graustufenskala zeigt Ereignisse pro Kanal, wobei ein Kanal 0.0225 a.u.² groß ist. Die Linie in b) markiert die konstante Impulskomponente des Projektils von $p_{x',p} = 10$ a.u. in Richtung der x' -Achse.

Richtung Target verschoben ist. Weiterhin wird in Abbildung 5.23-b ein Bereich ($p_{r,rec} \sim 4$ a.u.) sichtbar, in dem entgegen der bis hier in allen Spektren gefundenen Tendenz mehr Elektronen in Richtung des Projektil-Transversalimpulses (negative x' -Achse) emittiert werden. Auch senkrechte Schnitte in diesen Darstellungen können als Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilung für einen bestimmten Teil des Elektronen-Impulsraumes interpretiert werden.

Darstellungsweisen wie in Abbildung 5.23 sind geeignet, um interessante Strukturen im differentiellen Wirkungsquerschnitt zu finden, jedoch besitzen diagonale Strukturen hier in der Regel keine anschauliche Bedeutung. Obwohl die zwei jeweils aufgetragenen Größen Impulskomponenten sind bzw. leicht in einen Impuls umgerechnet werden können, sind Winkel in der Darstellungsebene nicht direkt mit Winkeln im sechsdimensionalen Phasenraum von Elektron und Rückstoßion verknüpft.

Da in Abbildung 5.23-b für Elektron und Rückstoßion jeweils die Impulskomponente entlang der x' -Achse aufgetragen ist, kann zu jedem Punkt diese Impulskomponente auch für das Projektil angegeben werden. Auf der dort eingezeichneten diagonalen Linie beträgt diese $p_{x',p} = 10$ a.u. Wie man sieht, sind die Elektronenimpulse so klein, daß die von Rückstoßion und Projektil in guter Näherung übereinstimmen.

Einen Vergleich der $p_{r,rec}$ -Abhängigkeit der Elektronenverteilung von TI1 und SI1 findet man, ebenfalls für die Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.90$ a.u., in Abbildung 5.24, die wie gewohnt Projektionen in die nukleare Streuebene darstellt. Durch die Einschränkung auf zum Teil relativ kleine Bereiche von $p_{r,rec}$ sind diese

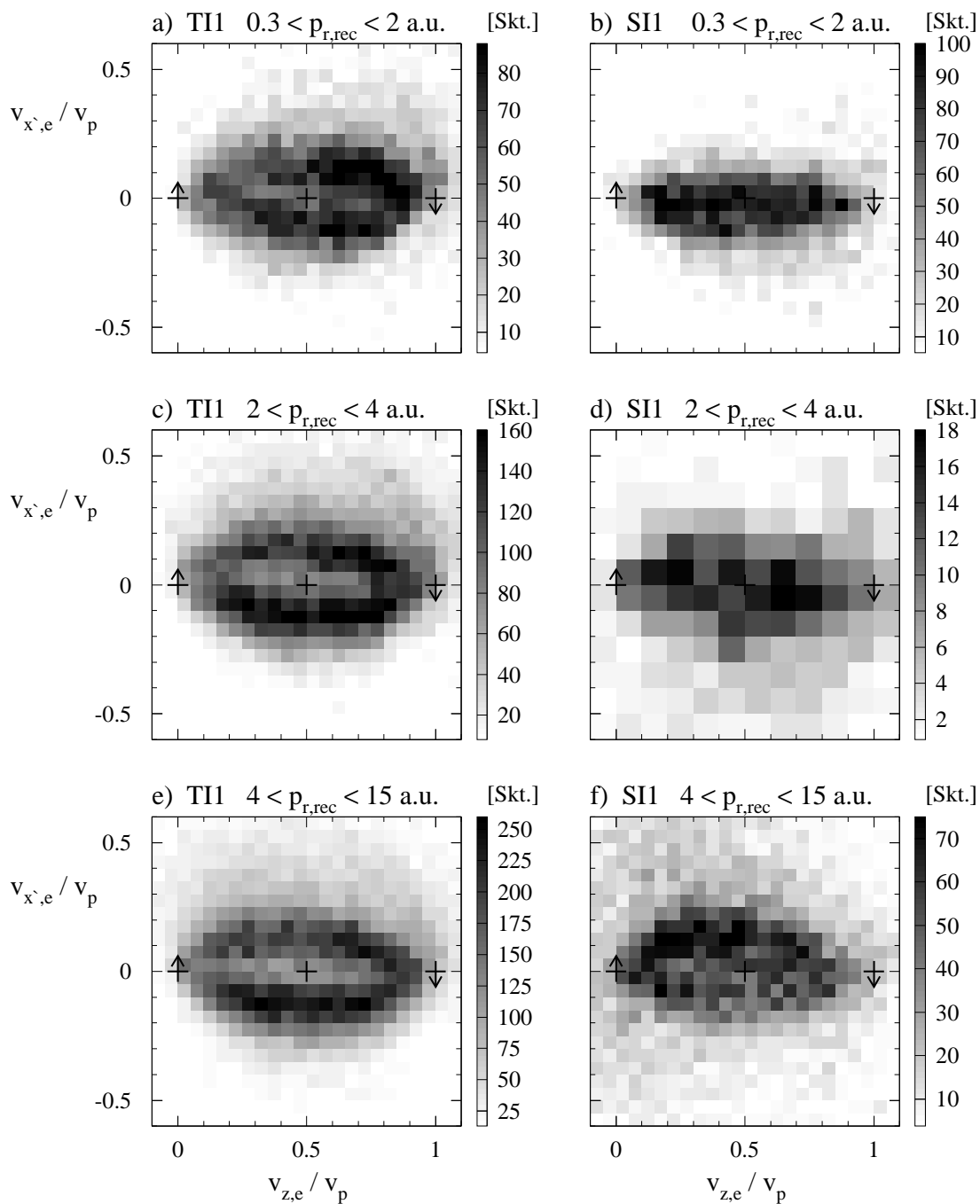


Abbildung 5.24: Elektronenverteilung in der nuklearen Streuebene für verschiedene $p_{r,rec}$ bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.90$ a.u.: TI1 (links) und SII (rechts). In d) wurde die Kanalbreite wegen des Minimums in $d\sigma/dp_{r,rec}$ bei der SII an dieser Stelle vergrößert. Ein Skt. entspricht in a), c), e) und f) 1 Ereignis/Kanal, in allen Spektren gilt $1 \text{ Skt.} = 0.5 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2 / \text{a.u.}^2$.

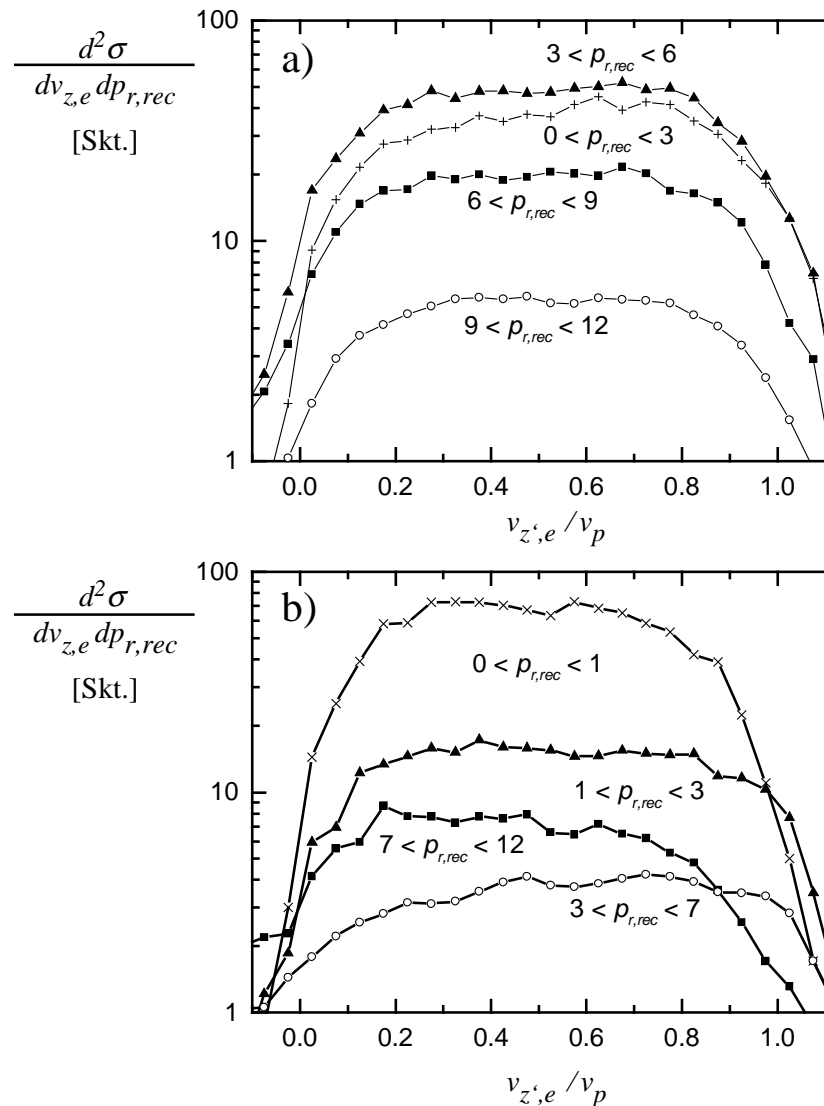


Abbildung 5.25: Elektronengeschwindigkeitsverteilung in Strahlrichtung für verschiedene $p_{r,rec}$: a) TI1 und b) SI1, jeweils bei $v_p = 0.90$ a.u.

Verteilungen mit einem dreifach-differentiellen Wirkungsquerschnitt gleichzusetzen, den man erhält, wenn man die Werte an der Graustufenskala durch die Breite des jeweiligen Bereiches teilt.

Man erkennt, daß sich die drei Spektren der SI1 (Abb. 5.24-rechts) untereinander wesentlich deutlicher unterscheiden als die entsprechenden Spektren der TI1 (links). Für enge Stöße weitet sich die Verteilung der SI1 entlang der x' -Achse deutlich auf. Der Grund wird im nächsten Abschnitt dargelegt. Wie in Abbildung 5.25 durch die eindimensionale Darstellung deutlicher zu sehen ist, hat die SI1 bei sehr engen und weiten Stößen ihr Maximum bei kleinen $v_{z,e}$, im mittleren Stoßparameterbereich dagegen bei großen $v_{z,e}$. Eine entsprechende Entwicklung ist bei der TI1 nicht so ausgeprägt. Eine Erklärung dafür kann jedoch nicht gegeben werden.

Für enge Stöße (Abb. 5.24-e und -f) sind sich die Elektronenverteilungen von

TI1 und SI1 sehr ähnlich. Bei TI1 ist die maximale Intensität unten ($v_{x',e} < 0$) und rechts ($v_{z,e} > 0.5v_p$) bei SI1 dagegen oben links. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, wie diese Verteilungen in Bezug zueinander gesetzt werden können. Zum einen kann man annehmen, daß es hier keine Rolle spielt, wo sich die Elektronen vor dem Stoß befunden haben, damit sollten SI1 und TI1 gleich sein. Unter dieser Annahme kann man die Ergebnisse in einem Koordinatensystem darstellen, welches durch die Impulsvektoren des He^+ - und des He^{2+} -Fragments bestimmt ist. Das verwendete Koordinatensystem ergibt sich jedoch aus den Impulsen von Projektil und Target, die je nach Reaktion unterschiedliche Ladung haben. Wie schon in Abschnitt 5.5 erläutert wurde, muß man bei dieser Interpretationsweise eines der beiden Spektren am Mittelpunkt spiegeln. Damit erhält man bei beiden Reaktionen das Maximum der Verteilung auf der gleichen Seite.

Speziell hier bietet sich auch noch eine zweite Möglichkeit der Interpretation an. Man kann annehmen, daß Prozesse zugrunde liegen, die zwei "Bananen" mit gleichmäßiger Intensitätsverteilung erzeugen². Das Elektron, das nach der Emission des anderen gebunden bleibt, befindet sich entweder im $1s\sigma_g$ - oder $2p\sigma_u$ -Zustand und bildet mit den Kernen ein He_2^{3+} -Molekül. Die Phase zwischen diesen Zuständen bestimmt, an welchem der Kerne sie konstruktiv bzw. destruktiv interferieren, d.h., wo das gebundene Elektron zu finden ist. Wenn diese Phase jetzt von der Emissionsrichtung des anderen Elektrons abhängt, erhält man für jeden der Endzustände von SI1 und TI1 "Bananen" mit ungleichmäßiger Intensitätsverteilung, die sich jedoch gegenseitig ergänzen. Hier dürfen die Verteilungen nicht gespiegelt werden. Nach den gemessenen Verteilungen hat sowohl diese als auch die vorangegangene Interpretation ihre Berechtigung.

5.7 Überlegungen zur Drehimpulserhaltung bei den Ionisationsprozessen

In dieser Arbeit wird durchweg ein semiklassisches Bild des Stoßes diskutiert. Die zu untersuchenden dynamischen Größen beziehen sich somit hauptsächlich auf den elektronischen Zustand.

Da die Elektronen mit den Kernen Drehimpuls austauschen können, ist ihr Drehimpuls im allgemeinen keine Erhaltungsgröße und somit auch keine gute Quantenzahl. Nur im Limit vereinigter Kerne und separierter Kerne gilt die Drehimpulserhaltung für das elektronische System, da sich dort die Elektronen in einem bzw. zwei getrennten Zentralpotentialen bewegen. Die molekularen Zustände (MO) können deshalb in diesen beiden Limits unterschiedlichen Drehimpuls besitzen. So besitzt z.B. der $2p\sigma_u$ -Zustand im H_2^+ -Molekül die atomaren Quantenzahlen $n = 2$, $l = 1$ und $m = 0$ bei vereinigten Kernen, bei separierten Kernen setzt sich $2p\sigma_u$ jedoch aus zwei mit unterschiedlichen Vorzeichen addierten $1s$ -Zuständen zusammen, welche die Quantenzahlen $n = 1$, $l = 0$ und $m = 0$ besitzen.

Bei allen MO ist die magnetische Bahndrehimpulsquantenzahl m in beiden Li-

² In Abschnitt 5.7 wird gezeigt, daß π -Zustände eine solche Verteilung erzeugen können.

mits gleich, und auch für alle anderen Kernabstände ist m eine gute Quantenzahl, welche die Drehimpulskomponente in Richtung der Molekülachse beschreibt. Dies resultiert daraus, daß das System rotations-symmetrisch um die Molekülachse ist oder, mit anderen Worten, der Hamiltonoperator mit jedem Operator vertauscht, der um die Molekülachse dreht. Aus diesem Grund kann die elektronische Wellenfunktion Ψ wie folgt separiert werden:

$$\Psi = f(a, b) \exp(im\varphi). \quad (5.3)$$

Dabei ist φ der Polarwinkel in der Ebene senkrecht zur Quantisierungs- bzw. Molekülachse, und $f(a, b)$, je nach verwendetem Koordinatensystem (Kugel-, Zylinderkoordinaten oder elliptische Koordinaten) eine Funktion der beiden übrigen Koordinaten.

Der Betrag der Quantenzahl m wird in molekularen Zuständen mit Λ bezeichnet. Daß m bzw. Λ eine gute Quantenzahl für die MO ist, heißt jedoch nicht, daß sie sich im Stoß nicht ändern kann. Durch die Drehung der Molekülachse und damit auch des molekularen Bezugssystems, wenn die Kerne aneinander vorbeifliegen, wird der Drehimpulsvektor gekippt, d.h., daß zum Beispiel die $2p$ -Zustände mit unterschiedlichem m vermischt werden. Dieser Vorgang wurde in Abschnitt 2.4 als Rotationskopplung der Zustände bezeichnet und ist in Abbildung 5.26 veranschaulicht.

Eine Spiegelung des Raumes an der nuklearen Streuebene, d.h. der Ebene, in der sich die Kerne bewegen, ändert für einen gegebenen molekularen Eigenzustand das Vorzeichen von m . Dies kann man sich damit klar machen, daß eine Raumspiegelung immer den Drehsinn umkehrt, und durch $\exp(im\varphi)$ bzw. $\exp(-im\varphi)$ zwei gegenläufige Phasendrehungen um die Molekülachse beschrieben werden. Der $2p\sigma_u$ -Zustand ist rotations-symmetrisch zur Molekülachse und somit auch spiegelsymmetrisch zur Streuebene. Aus der Invarianz der Coulombwechselwirkung gegenüber Raumspiegelung und der Spiegelsymmetrie des Potentials in Bezug zur nuklearen Streuebene folgt, daß durch Rotationskopplung aus dem $2p\sigma_u$ -Zustand immer die beiden $2p\pi_u$ -Zustände mit $+m$ und $-m$ in gleicher Weise besetzt werden.

Allgemein erzeugt eine Drehung um eine senkrecht zur Quantisierungsrichtung stehende Achse aus einem σ -Zustand einen π -Zustand der Form

$$\Psi = f(a, b) \exp(im\varphi) + f(a, b) \exp(-im\varphi) = f(a, b) 2 \cos(m\varphi), \quad (5.4)$$

wobei die durch $\varphi = 0$ und $\varphi = \pi$ beschriebenen Halbebenen die Streuebene ergeben. Die damit gegebene Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons besitzt für $m = \pm 1$ bzw. $\Lambda = 1$ (π -Zustand) eine $\cos(\varphi)^2$ -Abhängigkeit. Für $\Lambda = 0$ (σ -Zustand) ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit unabhängig von φ .

Zwei MO mit $m = 1$ und $m = -1$ und sonst gleichen Quantenzahlen sind bei allen Kernabständen entartet. Damit ist eine Phasenverschiebung dieser beiden Zustände, die eine Drehung der $\cos(\varphi)^2$ -Verteilung aus der Streuebene heraus bedingen würde, ausgeschlossen. Bei den großen Kernabständen, wo nach dem "Hidden-Crossings"-Modell die Promotion ins Kontinuum stattfindet, ist die Molekülachse im Laborsystem fest und zeigt in Strahlrichtung. Das bedeutet, die Rotationskopplung

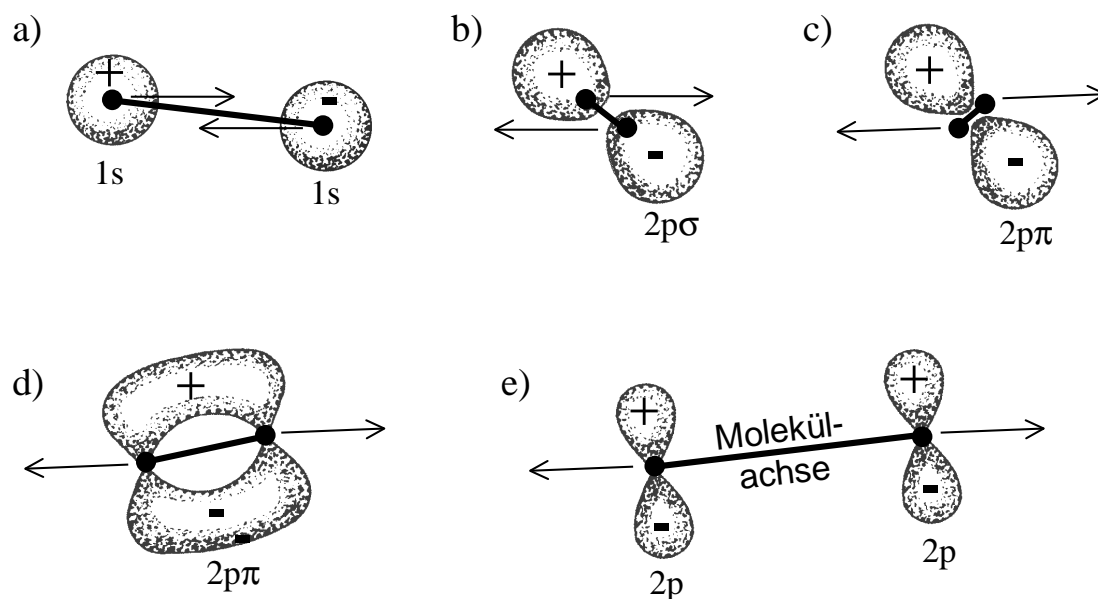


Abbildung 5.26: Veranschaulichung des Übergangs von einem $2p\sigma_u$ - in einen $2p\pi_u$ -Zustand: Bei großem Kernabstand vor dem Stoß (a) ist der $2p\sigma_u$ -Zustand skizziert, der sich aus der Addition von zwei atomaren $1s$ -Zuständen mit um π verschobener Phase ergibt. Bei Annäherung der Kerne (b) bildet sich die für einen $2p$ -Zustand typische, keulenförmige Elektronenverteilung aus. Wenn die Kerne aneinander vorbeifliegen (zwischen (b) und (c)), kann diese Keule nicht der schnellen Drehung der Molekülachse folgen. Es wird der $2p\pi_u$ -Zustand besetzt (d), der bei großen Kernabständen (e) gleich der Summe von zwei atomaren $2p$ -Zuständen ist. Die Keulen, welche eine \cos^2 -Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons symbolisieren, liegen in der nuklearen Streuebene.

verschwindet, und der $\cos(\varphi)^2$ -Charakter in der Wellenfunktion, der durch Rotationskopplung nur bei kleinen Kernabständen erzeugt werden kann, bleibt erhalten.

Die Argumentation bezog sich bis hier auf Einteilchenzustände bzw. ein Eielektronen-System, wie z.B. das H_2^+ -Molekül. Im Endzustand der TI1 und SI1 beim He^{2+} -He-Stoß sind die beiden Elektronen räumlich getrennt, d.h., die Beschreibung des Endzustandes als Produkt von Einteilchenzuständen ist sehr gut. Da sich bei diesen Ionisationskanälen die $1s$ -Zustände des an einen Kern gebundenen Elektrons aus der Linearkombination zweier Zustände mit $m = 0$, nämlich $1s\sigma_g$ und $2p\sigma_u$ im He_2^{3+} -Molekül, ergeben, muß dort die Komponente des Gesamtdrehimpulses in Quantisierungsrichtung alleine von dem emittierten Elektron getragen werden. Das Elektron, welches gebunden bleibt, ist in der Drehimpulsbilanz bei TI1 und SI1 ohne Bedeutung. Die Überlegungen zum Eielektronensystem sind somit weiterhin gültig.

Im Endzustand des emittierten Elektrons überlagern sich nach den vorangegangenen Ausführungen Komponenten mit verschiedenen φ -Abhängigkeiten. Da im Eingangskanal nur s - und p -Zustände vorkommen, und $m \leq l$ gilt, werden σ -Zustände

($m = 0$) und π -Zustände ($m = 1$) den Ionisationswirkungsquerschnitt dominieren. Welche Verteilungen diese Zustände in Strahlrichtung (Elektronengeschwindigkeit $v_{z,e}$) und in transversaler Richtung ($v_{r,e}$) haben, bleibt hier offen. Von Piekema et al [42] wurde dies mit einem Modellpotential, welches im Sattelpunkt errichtet wurde, untersucht.

Hier soll lediglich gezeigt werden, daß für verschiedene $v_{z,e}$ und $v_{r,e}$ die gemessene φ -Verteilung der Elektronen gut durch eine Überlagerung von σ - und π -Zuständen beschrieben werden kann. Dazu ist als Beispiel in Abbildung 5.27 für TII bei $v_p = 0.84$ a.u. der einfach-differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\varphi$ in einer Polardarstellung aufgetragen. Für die anderen Projektilgeschwindigkeiten wurde hier auf diese Art der Darstellung des Wirkungsquerschnittes verzichtet, da diese nicht der Meßmethode angepaßt ist. Im Prinzip kann der $d\sigma/d\varphi$ aus den zweidimensionalen Verteilungen in der transversalen Ebene entnommen werden.

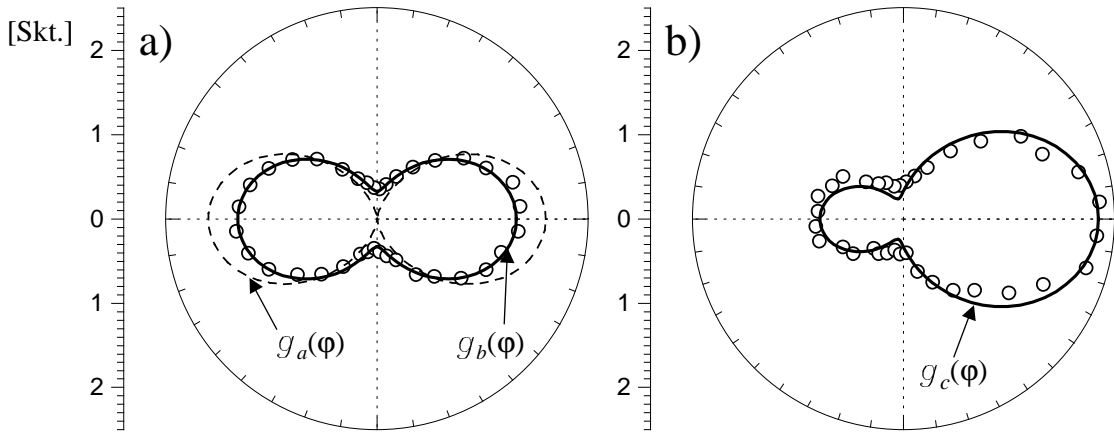


Abbildung 5.27: Elektronenverteilung der TII bei $v_p = 0.84$ a.u.: Polardarstellung des einfach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d\sigma/d\varphi$ für verschiedene Bereiche von $v_{z,e}$ und $v_{r,e}$. Das Integral der Wirkungsquerschnitte wurde jeweils auf 2π normiert. a) $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 v_p$ und $0.1 v_p < v_{r,e} < 0.3 v_p$, eingezeichnet sind die Funktionen $g_a(\varphi) = 2 \cos^2(\varphi)$ und $g_b(\varphi) = 0.66 \cdot 2 \cos^2(\varphi) + 0.33$. b) $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 v_p$ und $0.3 v_p < v_{r,e} < 0.5 v_p$, eingezeichnet ist die Funktion $g_c(\varphi) = 0.66 \cdot 2 \cos^2(\varphi) + 0.66 \cos(\varphi) + 0.33$.

Wie sich ein σ - und ein π -Zustand in der Wahrscheinlichkeit für verschiedene Emissionsrichtungen überlagern, hängt von der vollen Konfiguration der beiden Zustände ab, d.h. nicht nur von m . Bezeichnet man mit ξ alle Freiheitsgrade des Systems mit Ausnahme von φ und mit $\Phi(\xi)$ den Anteil in einer Produktwellenfunktion, der nur von ξ abhängt, so haben solche Summenzustände die folgende Form:

$$\Psi(\xi, \varphi) = \sum_{m=0}^1 c_m \cdot \Phi_m(\xi) \cos(m\varphi). \quad (5.5)$$

Dabei sind mit c_m die Entwicklungskoeffizienten nach den beiden Drehimpulszuständen bezeichnet. Die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron mit Emissionswinkel φ

und beliebigem ξ zu finden, ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
\int |\Psi(\xi, \varphi)|^2 d\xi &= \int \Psi \bar{\Psi} d\xi \\
&= \int [c_0 \Phi_0 + c_1 \Phi_1 \cos(\varphi)] [\bar{c}_0 \bar{\Phi}_0 + \bar{c}_1 \bar{\Phi}_1 \cos(\varphi)] d\xi \\
&= |c_0|^2 \int \Phi_0 \bar{\Phi}_0 d\xi + |c_1|^2 \int \Phi_1 \bar{\Phi}_1 d\xi \cdot \cos^2(\varphi) \\
&\quad + 2 \operatorname{Re} (c_0 \bar{c}_1 \int \Phi_0 \bar{\Phi}_1 d\xi) \cos(\varphi). \tag{5.6}
\end{aligned}$$

Die Zustände $\Psi_m(\xi, \varphi) = \Phi_m(\xi) \cos(m\varphi)$ werden als normiert angenommen, d.h., es gilt:

$$\int \Phi_0 \bar{\Phi}_0 d\xi = 1 \quad \text{und} \quad \int \Phi_1 \bar{\Phi}_1 d\xi = 2. \tag{5.7}$$

Über den Interferenzterm in der letzten Zeile von Gleichung 5.6 kann ohne weitere Informationen keine Aussage gemacht werden. Verschwindet das Überlappintegral von Φ_0 und Φ_1 bzw. der Interferenzterm, so hat die Elektronenemission folgende Charakteristik:

$$d\sigma/d\varphi = C \cdot [|c_0|^2 + |c_1|^2 \cdot 2 \cos(\varphi)]. \tag{5.8}$$

Durch die Ergänzung der Konstante C kann $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ gefordert werden.

Das andere Extrem erhält man, wenn Φ_0 und Φ_1 bis auf den unterschiedlichen Normierungsfaktor gleich sind, und c_0 und c_1 gleiche Phase haben, d.h. reell gewählt werden können. Dann gilt:

$$d\sigma/d\varphi = C \cdot [c_0 + c_1 \cdot \sqrt{2} \cos(\varphi)]^2 = C \cdot [c_0^2 + c_0 c_1 2\sqrt{2} \cos(\varphi) + c_1^2 2 \cos^2(\varphi)]. \tag{5.9}$$

Dies beschreibt die maximale Interferenz.

Die beiden Drehimpulszustände können natürlich auch nur zu einem Teil interferieren. Für die Beschreibung der Meßdaten kann deshalb folgende Gleichung benutzt werden:

$$d\sigma/d\varphi = C \cdot [c_0^2 + d \cdot c_0 c_1 2\sqrt{2} \cos(\varphi) + c_1^2 2 \cos^2(\varphi)]. \tag{5.10}$$

Dabei sind c_0 und c_1 reell gewählt, wie oben gilt $c_0^2 + c_1^2 = 1$, und der neu eingeführte Parameter d kann zwischen -1 und 1 variiert werden. Erstaunlich ist, daß bei den in Abbildung 5.27 eingezeichneten Funktionen $g_b(\varphi)$ und $g_c(\varphi)$, welche die Datenpunkte recht gut beschreiben, der Fitparameter b die Werte 0 und $1/2$ annimmt. Für beide Funktionen gilt außerdem $c_0 = \sqrt{0.33}$ und $c_1 = \sqrt{0.66}$.

Die $\cos^2(\varphi)$ -Charakteristik von π -Zuständen erklärt eine Konzentration des differentiellen Wirkungsquerschnittes auf die nukleare Streuebene und ein Minimum in der Elektronenverteilung bei $v_{x,e} = 0$. Dies sind die wesentlichen Strukturen, die bei der TI1 gefunden wurden. Die Verteilungen der SI1 bei hohen Projektilgeschwindigkeiten sind dagegen nahezu rotationssymmetrisch um die Molekülachse und entsprechen der Emissionscharakteristik eines σ -Zustandes. Daß π -Zustände dabei nur zu einem sehr geringen Anteil beitragen, ist damit zu erklären, daß SI1 hauptsächlich bei solch großen Stoßparametern stattfindet, bei denen die Rotationskopplung keine

Rolle spielt. Den trotzdem vorhandenen, schwachen π -Anteil kann man, wie in Abschnitt 5.6 gezeigt wurde, herausfiltern, indem man die Ereignisse mit großem $p_{r,rec}$ auswählt.

Durch die hier aufgeführten Argumente wurde somit gezeigt, wie die Unterschiede in der Elektronenemission und dem einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ von TII und SII miteinander verknüpft sind.

5.8 Einfluß der Isotopenmassen von Projektil- und Rückstoßion auf den vierfach-differentiellen Wirkungsquerschnitt

Quantenmechanische Rechnungen arbeiten meist mit einem stark eingeschränkten Basissatz. Um damit trotzdem gute Ergebnisse zu erhalten, ist es besonders wichtig, die Basis in einem geeigneten Bezugssystem zu errichten. Bei semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Rechnungen im molekularen Bezugssystem bieten sich hierfür der Ladungs-, der Massenschwerpunkt und der Sattelpunkt im Potential der beiden Kerne an. Stellt sich im Experiment heraus, daß die Ergebnisse von der Isotopenmasse unabhängig sind, so ist damit gezeigt, daß die auf die Kernladungen bezogenen Bezugssysteme besser geeignet sind.

Von der Darstellung des differentiellen Wirkungsquerschnittes ist es abhängig, ob sich die Ergebnisse für verschiedene Isotopenmassen unterscheiden. Der differentielle Wirkungsquerschnitt der Coulombstreuung $d\sigma/d\Omega$ (siehe Gleichung C.1) hängt von der Stoßenergie im CM-System und damit auch von der Isotopenmasse ab. Aus diesem Grund ist, hauptsächlich in älteren Veröffentlichungen, für streuwinkeldifferentielle Wirkungsquerschnitte die Stoßenergie und nicht die Projektilgeschwindigkeit angegeben.

Die den Erhaltungssätzen angepaßte Größe ist jedoch nicht der Streuwinkel, sondern der Impulsübertrag. Wie man in Gleichung C.5 sieht, ist der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ der Coulombstreuung unabhängig von der Masse des Projektils und des Targets. Auch in der Formel für die Berechnung des Stoßparameters aus $p_{r,rec}$ in einem klassischen Coulombstoß (Gleichung C.8) kommt die Masse nicht vor.

In den hier untersuchten Reaktionen muß jedoch die Abschirmung durch die Elektronen berücksichtigt werden. Trotzdem berechnet sich der Impulsübertrag \vec{p}_{rec} auf das Target gemäß

$$\vec{p}_{rec} = \int \vec{K}(t) dt \quad (5.11)$$

alleine aus der zeitabhängigen Kraft. Bei kleinen Streuwinkeln genügt es, in semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Rechnungen die Trajektorien der Kerne durch Geraden zu nähern, um die Entwicklung des elektronischen Zustandes und damit die Abschirmung bzw. $\vec{K}(t)$ zu berechnen. In dieser Näherung kann $\vec{K}(t)$ und somit auch \vec{p}_{rec} nicht von den Kernmassen abhängen. Da das semiklassische Gekoppelte-

Kanäle-Modell für die Elektroneneinfangkanäle beim untersuchten Stoßsystem sehr erfolgreich angewendet worden ist, ist davon auszugehen, daß eine Änderung der Kernmasse den in entsprechender Form dargestellten differentiellen Wirkungsquerschnitt nicht beeinflusst. Natürlich gilt es, dies zu überprüfen.

Als Target wurden in den durchgeführten Messungen immer ^4He -Atome verwendet, als Projektile kamen jedoch sowohl $^4\text{He}^{2+}$ - als auch $^3\text{He}^{2+}$ -Ionen zum Einsatz. Bei allen Messungen ohne Projektilnachweis, d.h. bei der Messung der SI mit gepulstem Strahl, wurden $^3\text{He}^{2+}$ -Projektile eingesetzt. Bei diesen Messungen ist eine Unterdrückung des Untergrundes, der sich bei $^4\text{He}^{2+}$ -Projektile durch H_2^+ -Verunreinigungen ergibt, nicht ohne weiteres möglich ist. Die für die Messungen der Ionisationskanäle bei den verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten v_p verwendeten Projektilisotopen und Meßmethoden sind in Tabelle 5.29 zusammengefaßt.

In den Abbildungen 5.28, 5.30 und 5.31 sind für die TI1 verschiedene einfach- und zweifach-differentielle Wirkungsquerschnitte zu den beiden verwendeten Projektilisotopen verglichen. Im Rahmen der Auflösung und des statistischen Fehlers sind keine Abweichungen festzustellen.

Die Strukturen mit der Breite eines Kanals auf den Plateaus in Abbildung 5.30, die bei den verschiedenen Messungen an unterschiedlichen Stellen liegen, sind dabei nicht durch statistische Schwankungen zu erklären, sondern auf Verzerrungen des Detektorbildes zurückzuführen, die durch die nachgeschaltete Elektronik verursacht werden. Da bei jeder Änderung der Projektilgeschwindigkeit die Verzöge-

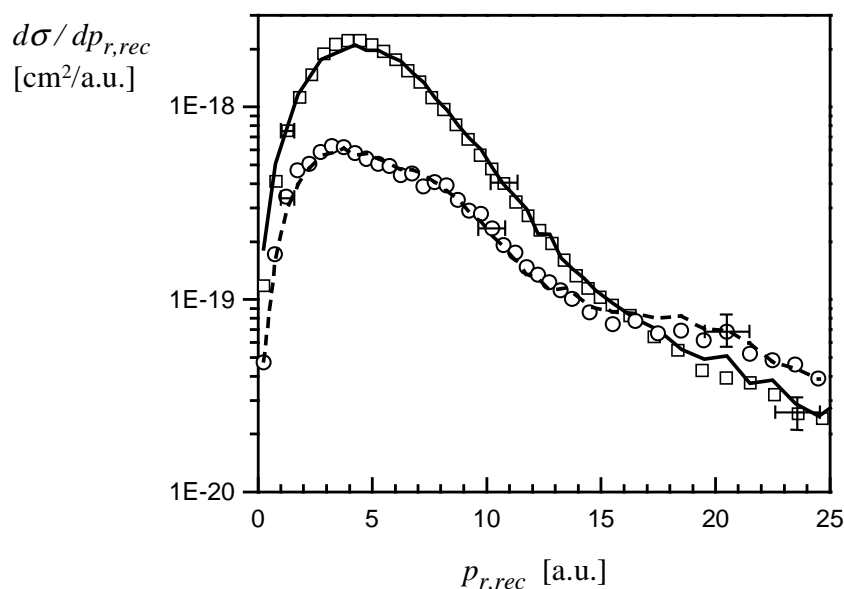


Abbildung 5.28: TI1 bei $v_p = 0.71$ (--- und \circ) und 0.95 a.u. (— und \square): Vergleich der Rückstoßionen-Transversalimpulsverteilungen für die Projektilisotope $^3\text{He}^{2+}$ (Linien) und $^4\text{He}^{2+}$ (Symbole). Die waagerechten Fehlerbalken berücksichtigen die Spektrometerrauflösung und eine mögliche Fehleichung und werden deshalb nach rechts größer.

v_p	Isotopenmasse	Meßmethode für Ionisationsmessung
0.59	4	Projektildetektor
0.64	4	Projektildetektor
0.67	4	Projektildetektor
0.71	3+4	Projektildetektor + Strahlpulsung
0.74	4	Projektildetektor
0.78	4	Projektildetektor
0.84	3+4	Projektildetektor
0.90	3	Strahlpulsung
0.95	3+4	Projektildetektor + Strahlpulsung
1.06	3	Strahlpulsung

Tabelle 5.29: Verwendete Isotopenmassen und Meßverfahren bei den verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten (die Messungen der Elektroneneinfangkanäle erfolgten immer mit Projektildetektor).

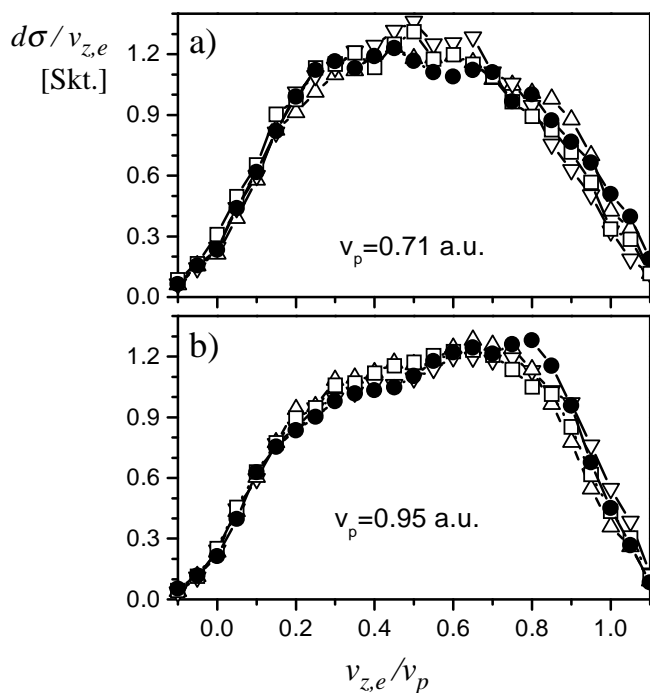


Abbildung 5.30: TI1 bei $v_p = 0.71$ und 0.95 a.u.: Vergleich von Messungen der Longitudinalimpulsverteilung von TI1 mit verschiedenen Projektilisotopen, Meßverfahren und Spektrometereinstellungen: a) $v_p = 0.71$ a.u.: ${}^4\text{He}^{2+}$ -Projekteile (∇ , \square , \triangle), ${}^3\text{He}^{2+}$ -Projekteile mit Strahlpulsung (\bullet) b) $v_p = 0.95$ a.u.: ${}^4\text{He}^{2+}$ -Projekteile (\bullet), ${}^3\text{He}^{2+}$ -Projekteile (\triangle , \square), ${}^3\text{He}^{2+}$ -Projekteile mit Strahlpulsung (∇).

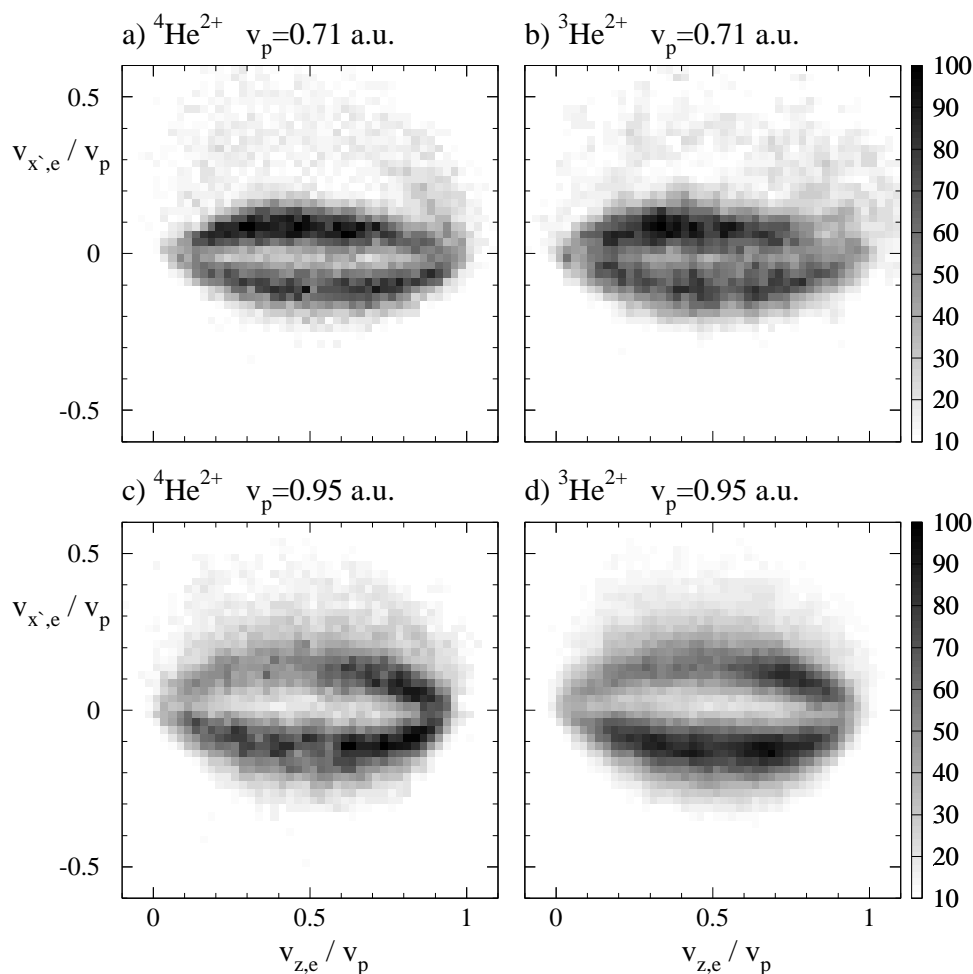


Abbildung 5.31: TII bei $v_p = 0.71$ und 0.95 a.u.: Vergleich der Elektronenimpulsverteilungen in der nuklearen Streuebene für ${}^3\text{He}^{2+}$ - und ${}^4\text{He}^{2+}$ -Projektilen.

rungsleitungen in der Signalverarbeitung angepaßt werden mußten und die hier zusammengestellten Messungen nicht direkt hintereinander durchgeführt wurden, sind die Verzerrungen jeweils an einer anderen Position. Die Position der Verzerrungen im Impulsraum hängt zusätzlich noch von der Spektrometereinstellung ab. In einer zweidimensionalen Darstellung, wie z. B. der Projektion der Elektronenverteilung in die nukleare Streuebene in Abbildung 5.31, wo die verschiedenen Messungen zu gleichen Projektilisotopen addiert wurden, sind die Abweichungen im Bereich des Intensitätsmaximums kleiner als 10% und deshalb mit der verwendeten Graustufenskala nicht mehr zu erkennen.

Nach den Ergebnissen dieses Vergleichs sollte der elektronische Zustand des Quasimoleküls $({}^3\text{He}{}^4\text{He})^{2+}$, ebenso wie der von ${}^4\text{He}^{2+}$, in einer Basis beschrieben werden, die auf dem geometrischen Mittelpunkt bzw. Sattelpunkt errichtet ist. Der Schwerpunkt der Kerne ist für das Verständnis der Reaktionen ohne Bedeutung.

5.9 Elektronenimpulsverteilungen von TI2 und SI2

Wie in Abschnitt 5.1 gezeigt wurde, findet bei weniger als 10% der Ereignisse gleichzeitig mit der Emission eines Elektrons eine Anregung des He^+ -Ions statt. Weiterhin haben die Impulsverteilungen der Rückstoßionen aus den beiden entsprechenden Reaktionskanälen TI2 und SI2 ihren Hauptbeitrag bei wesentlich höheren Werten als TI1 und SI1. Besonders in Richtung der Jetachse, d.h. für $p_{y,rec}$, ist jedoch der Nachweisbereich des Spektrometers beschränkt, so daß nur für Transversalimpulse $p_{r,rec}$, die im wesentlichen in Richtung der Spektrometerachse zeigen, der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ unverfälscht wiedergegeben wird.

Die ohnehin schon geringe Zahl an Ereignissen in den Reaktionskanälen TI2 und SI2 erlaubt es nicht, bei der Berechnung von Elektronenverteilungen durch die Selektion eines entsprechenden Teils des Phasenraumes dieses Problem zu beseitigen. Deshalb sind bei den in diesem Abschnitt gezeigten Spektren kleine $p_{r,rec}$ bevorzugt, und es muß darauf vertraut werden, daß die Elektronenverteilungen nicht wesentlich von $p_{r,rec}$ abhängen.

Wegen dieses Fehlers wurde auf eine Normierung der Verteilungen verzichtet. Die folgenden Abbildungen geben zwar Aufschlüsse über die entsprechenden Reaktionskanäle, doch falls in Zukunft eine theoretische Beschreibung des Systems in der Lage sein sollte, entsprechende Verteilungen mit guter Genauigkeit zu berechnen, so ist zu deren Überprüfung die Durchführung eines auf SI2 und TI2 optimierten Experiments notwendig.

Die Abbildungseigenschaften des Rückstoßionenspektrometers ergeben in der kritischen Raumrichtung für He^{2+} -Ionen einen $\sqrt{2}$ -mal größeren Nachweisbereich als für He^+ -Ionen, die bei SI2 erzeugt werden. Weiterhin enthalten die Messungen mit ungepulstem Strahl nicht die Reaktionskanäle SI1 und SI2. Aus diesen Gründen sind die Ergebnisse für TI2 genauer und werden hier zuerst dargestellt.

In Abbildung 5.32 werden bei vier Projektilgeschwindigkeiten die Elektronenverteilungen in der nuklearen Streuebene von TI2 mit denen von TI1 verglichen. Diese Geschwindigkeiten wurden ausgewählt, weil dort die beste Statistik vorhanden ist. Mit den genannten Einschränkungen durch die Beschränkung des Nachweisbereiches ergibt sich bei jeder Projektilgeschwindigkeit der gleiche Normierungsfaktor, um bei TI1 und TI2 aus der mit einer Graustufenskala angegebenen Zahl von Ereignissen den differentiellen Wirkungsquerschnitt zu berechnen.

Der Anteil der Ereignisse außerhalb der "Bananen" ist bei TI2 deutlich größer als bei TI1 und zu kleineren $v_{z,e}$ verschoben. Bei Abbildung 5.32-f und -h findet man diese Verschiebung auch für die Anteile innerhalb der "Bananen". In Abbildung 5.33 ist in der Projektion des Bereiches $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 < v_p$ in die Ebene senkrecht zur Strahlrichtung deutlicher zu erkennen, daß bei TI2 durchweg mehr Ereignisse in der "Banane" mit $v_{x',e} > 0$ sind. Dies ist bei TI1 nicht der Fall.

Insgesamt findet man bei TI2 jedoch keine von TI1 völlig verschiedene Struktur in der Elektronenverteilung. Wesentliche Merkmale sind auch hier die Konzentra-

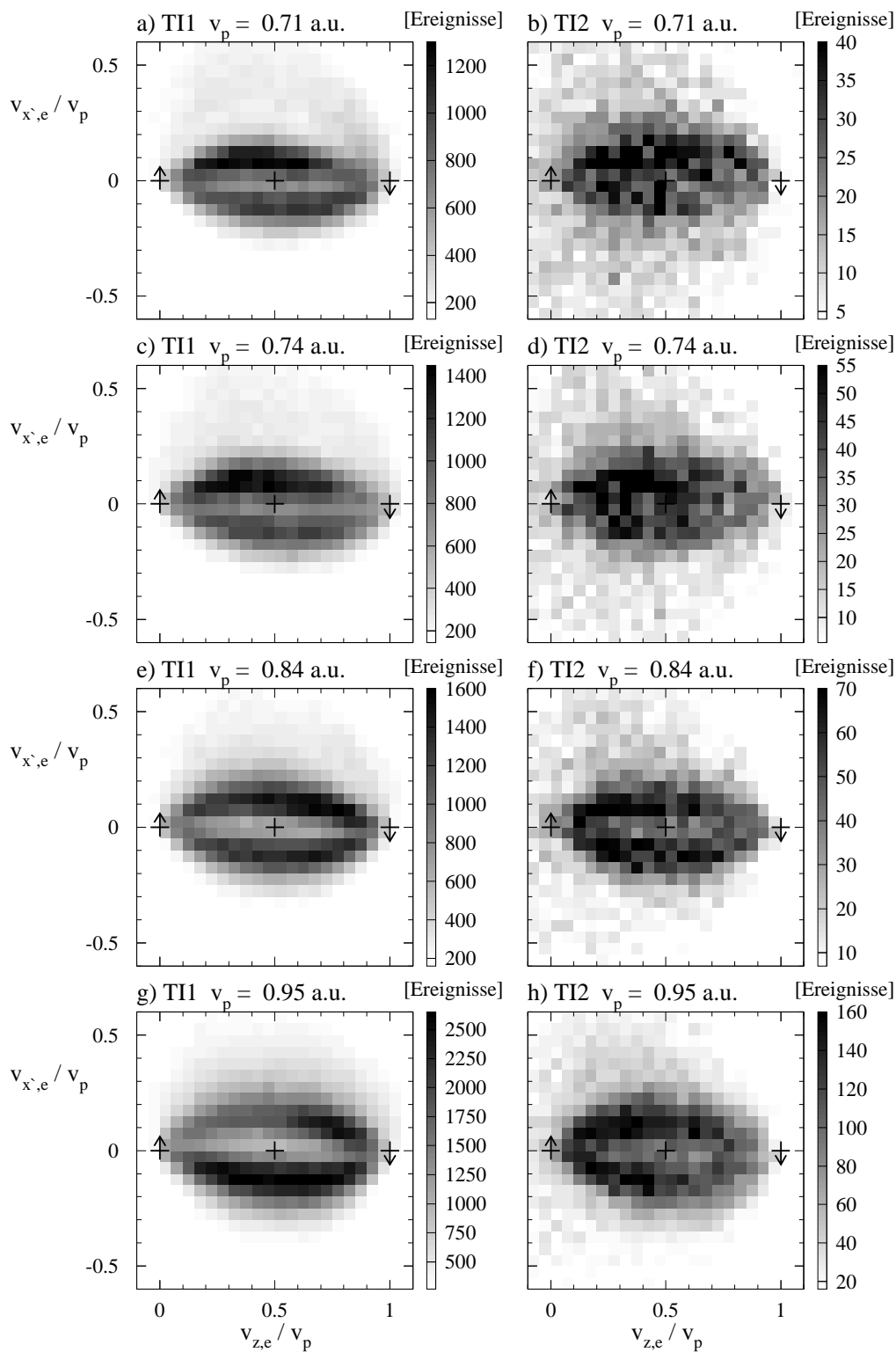


Abbildung 5.32: Elektronenverteilungen in der nuklearen Streuebene: Vergleich von TI1 (links) und TI2 (rechts) bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten.

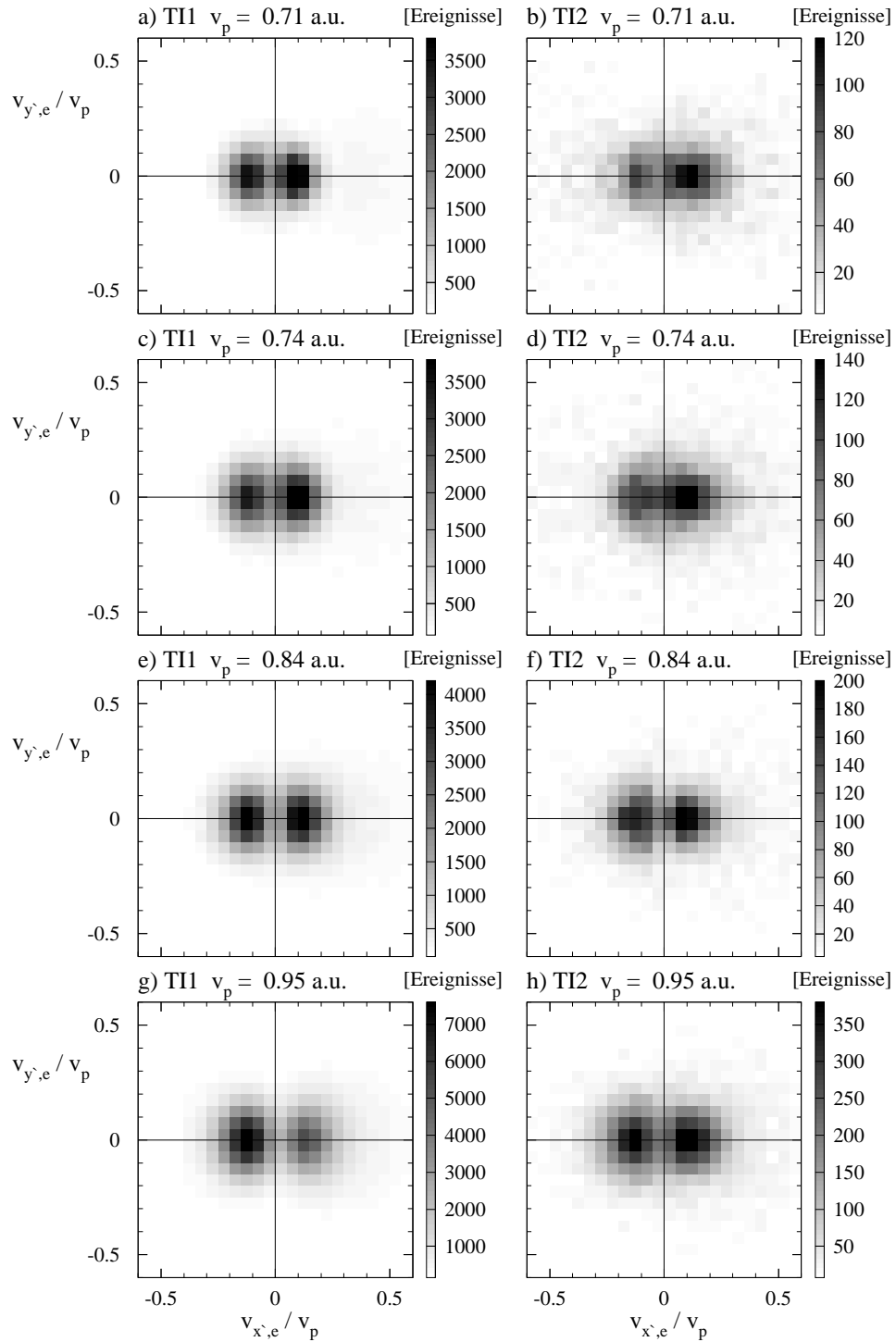


Abbildung 5.33: Elektronenverteilungen in der Ebene senkrecht zur Strahlrichtung; Vergleich von TI1 (links) und TI2 (rechts) bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten. In der nicht dargestellten Raumrichtung ist über den Bereich $0.3 v_p < v_{z,e} < 0.7 v_p$ integriert.

tion auf den Bereich zwischen Target- und Projektilgeschwindigkeit, d.h. zwischen $v_{z,e}/v_p = 0$ und 1, und das Minimum für $v_{x',e} = 0$, welches für große v_p ausgeprägter ist. Letztere Eigenschaft, die bei TI1 mit der Promotion des emittierten Elektrons über eine T_{01} - bzw. π -Serie in das Kontinuum erklärt wurde (Abschnitt 5.7), ist ein Indiz für die Besetzung von π -Zuständen durch Rotationskopplung. Dies steht im Einklang mit der in Abschnitt 5.3.1 aufgestellten Hypothese für einen Reaktionsweg der TI2, der im Korrelationsdiagramm wie der ADC beginnt.

In Abschnitt 5.6 wurde durch Selektion verschiedener $p_{r,rec}$ bei der TI1 gezeigt, daß der hohe Anteil an Ereignissen außerhalb der "Bananen" bei kleinen Stoßparametern ein allgemeiner Effekt ist und nicht nur bei TI2 auftritt. Auch eine Verschiebung der Verteilung innerhalb der "Bananen" kann durch Selektion bestimmter Stoßparameter erreicht werden (siehe z.B. Abbildung 5.25). Man kann sich somit fragen, ob die Unterschiede in der Elektronenemission von TI1 und TI2 auf Korrelationseffekte zurückzuführen sind. Dies kann man bejahen, denn Korrelationseffekte bestimmen den Verlauf der Potentialkurven und sind somit dafür verantwortlich, daß TI1 und TI2 unterschiedliche Stoßparameterabhängigkeiten besitzen. Dieser Aspekt der Korrelation ist jedoch keine Besonderheit der dynamischen Entwicklung des Systems, sondern im wesentlichen eine Eigenschaft der stationären molekularen Zustände.

Bei SI1 ist davon auszugehen, daß im wesentlichen σ -Zustände an der Reaktion beteiligt sind, denn der Hauptbeitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt liegt bei weiten Stößen, d.h. kleinen $p_{r,rec}$. SI2 ist jedoch im differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dp_{r,rec}$ ähnlich zu TI2, und es wurde die Hypothese aufgestellt, daß diese beiden Reaktionskanäle als Projektionen eines molekularen Endzustandes auf die atomaren Basiszustände zu verstehen sind. Deshalb ist zu vermuten, daß sich SI1 und SI2 deutlich voneinander unterscheiden.

In den Abbildungen 5.34-a und -b ist für $v_p = 0.90$ a.u. noch einmal die Elektronenverteilung von SI1 dargestellt, bei der kein Minimum für $v_{x',e} = 0$ zu erkennen und die zu negativen $v_{x',e}$ verschoben ist. Für SI2 (5.34-e und -f) dagegen deutet sich das Minimum an, und die Verteilung hat sich deutlich zu positivem $v_{x',e}$ verschoben. Die gleiche Tendenz ergibt sich auch, wenn man aus SI1 Ereignisse mit kleinen Stoßparametern bzw. großen $p_{r,rec}$ selektiert (5.34-c und -d).

Besonders im Vergleich der Spektren 5.34-e bis 5.34-h erkennt man, daß bei $v_p = 0.90$ a.u. die Elektronenverteilungen von TI2 und SI2 deutlich besser übereinstimmen als die von TI1 und SI1, welche in den Abbildungen 5.19-a und -b bzw. 5.20-c und -d verglichen sind. Dies war nach der Diskussion der in Abschnitt 5.2.3 präsentierten einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte auch zu erwarten.

In Abbildung 5.35 sind die Elektronenverteilungen von SI2 bei zwei höheren Projektilgeschwindigkeiten zu finden. Das Intensitätsmaximum verschiebt sich hier mit steigender Projektilgeschwindigkeit in Strahlrichtung, während bei der TI2 gerade der umgekehrte Effekt zu beobachten ist. Für $v_p = 0.71$ a.u. war mit der vorhandenen Zahl von Ereignissen keine vernünftige Darstellung zu erzeugen.

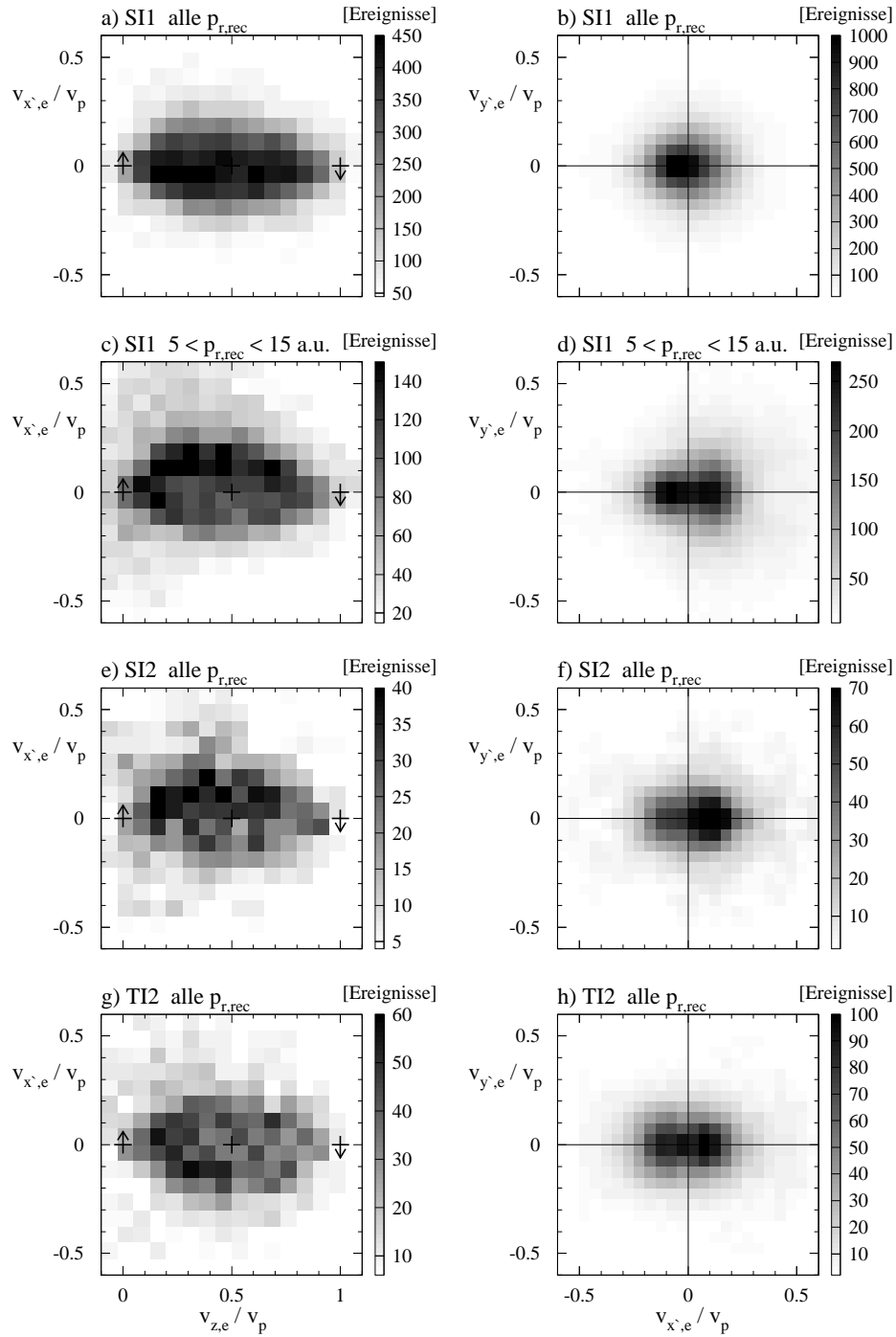


Abbildung 5.34: Elektronenverteilungen der Ionisationskanäle SI1, SI2 und TI2 bei $v_p = 0.90$ a.u. projiziert in die nukleare Streuebene (links - Spektren a, c, e, g) und in die Ebene senkrecht zur Strahlrichtung mit Bedingung auf $0.1 v_p < v_{z,e} < 0.9 v_p$ (rechts- Spektren b, d, f, h): a+b) SI1, alle Stoßparameter, c+d) SI1 mit Selektion enger Stöße ($5 < p_{r,rec} < 15$ a.u.), e+f) SI2, alle Stoßparameter, g+h) TI2, alle Stoßparameter.

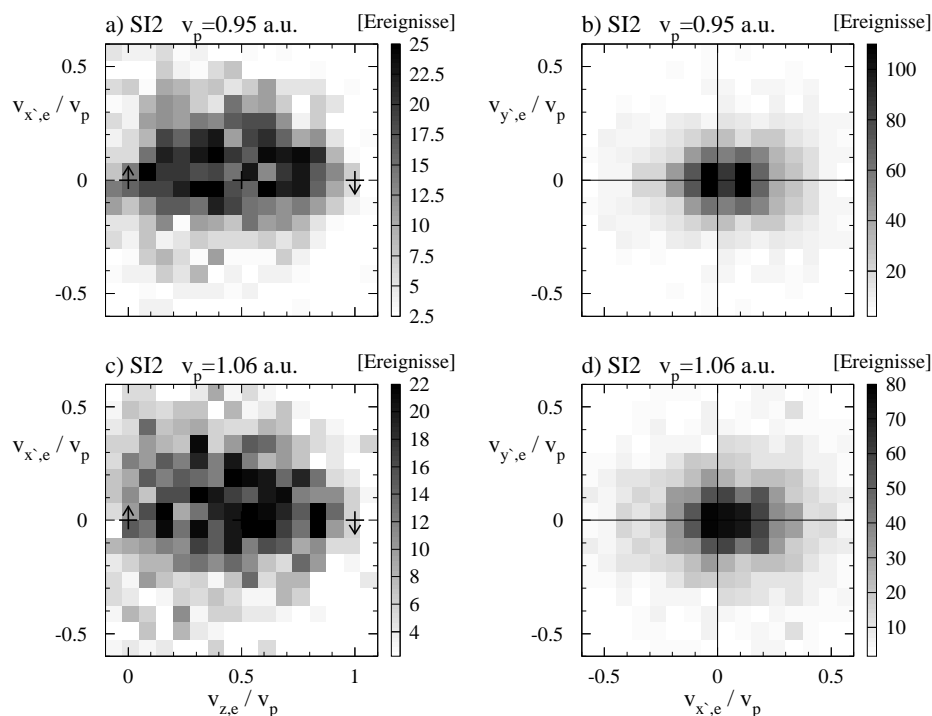


Abbildung 5.35: Elektronenverteilungen des Ionisationskanals SI2: a+b) $v_p = 0.95$ a.u., c+d) $v_p = 1.06$ a.u. (die entsprechenden Spektren für $v_p = 0.90$ a.u. sind in der Abbildung 5.34-e und -f zu finden).

5.10 Elektronenimpulsverteilungen bei anderen Stoßsystemen

Zu Beginn der Diskussion der Sattelpunktemission von Elektronen wurden mit konventioneller, dispersiver Elektronenspektroskopie zahlreiche Experimente durchgeführt. Deren Ergebnisse sind jedoch mit den hier gemessenen nicht direkt vergleichbar und ergeben meist nur ein sehr lückenhaftes Bild der Elektronenverteilung im Phasenraum. Deshalb wird hier auf diese Arbeiten nicht eingegangen. Experimente, die, wie das in dieser Arbeit vorgestellte Experiment, den Phasenraum des emittierten Elektrons komplett abbilden, wurden seit 1996 durchgeführt.

Bei den Arbeiten von Kravis et al [4] und Abdallah et al [5], die an derselben Apparatur gemessen wurden, stand kein lokalisiertes Target zur Verfügung, und deshalb mußte die Targetposition aus dem Nachweisort des Rückstoßions berechnet werden. Die dort gemessenen Elektronenverteilungen sind deshalb noch nicht auf die nukleare Streuebene bezogen. Von Kravis wurde für Projektilgeschwindigkeiten zwischen 0.63 und 2.39 a.u. gezeigt, daß bei der Einfachionisation die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen in Strahlrichtung sowohl bei p-He- als auch bei C^{6+} -He-Stößen im wesentlichen zwischen Projektil und Target liegt. Entgegen der Vorhersage des Sattelpunktmodells verschiebt sich das Maximum der Verteilung mit steigender Projektilladung in Strahlrichtung. Dies wurde von Abdallah durch die Ergänzung von

Messungen mit He^{2+} -, O^{8+} - und Ne^{10+} - Projektilen bei $v_p = 1.63$ a.u. bestätigt. Der außerdem durchgeführte Vergleich zwischen einem He- und einem Ne-Target ergab dagegen nur geringe Unterschiede.

Das erste Experiment, welches auf die nukleare Streuebene bezogene Elektronenverteilungen geliefert hat, wurde 1996 von Dörner et al [6] für die Einfachionisation in p-He-Stößen durchgeführt. Die Daten zeigten für $v_p = 0.64$ a.u. eine Struktur, die den "Bananen" ähnlich ist. Bei $v_p = 0.45$ und 0.78 a.u. verschwindet jedoch jeweils eine der beiden "Bananen" nahezu vollständig. Dieser Effekt wurde auf Interferenzen zwischen σ - und π -Zuständen, die über die T_{00} - bzw. T_{01} -Serie ionisieren, zurückgeführt [12, 42].

Mit dieser und den übrigen hier zitierten Messungen konnten keine Elektronenverteilungen in der Ebene transversal zur Strahlrichtung bestimmt werden, da nur zwei der drei Vektorkomponenten des Elektronenimpulses bestimmt wurden und darin die Strahlrichtung immer enthalten war. Der Winkel zwischen der Ebene, in der die zwei gemessenen Impulskomponenten liegen, und der nuklearen Streuebene wurde durch die Selektion entsprechender Rückstoßionenimpulse festgelegt. Eine Elektronenflugzeitmessung mit sehr guter Auflösung, die zur Berechnung aller Vektorkomponenten notwendig ist, konnte in diesen Experimenten noch nicht realisiert werden. Ist die volle Impulsinformation, und somit die kinetische Energie des Elektrons, nicht bekannt, kann bei der Ionisation nur mit Einschränkungen nach verschiedenen Q -Werten bzw. Bindungsenergien differenziert werden. Weiterhin führt das Fehlen der exakten Flugzeitinformation bei der Impulsberechnung aus den Nachweisorten der Elektronen zu einer leichten Verzerrung der Spektren, die jedoch für die Interpretation der Meßdaten nicht von großer Bedeutung ist. Diese Verzerrung wurde ausführlich in der Arbeit von Irby [103] diskutiert.

Ergebnisse, die denen des hier untersuchten Stoßsystems $\text{He}^{2+} + \text{He}$ sehr ähnlich sind, wurden von Abdallah et al [7] für die Reaktion $\text{He}^+ + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^+ + e^-$ gefunden. Zwei aus dieser Arbeit entnommene Spektren, bei denen sich eine deutliche π -Struktur zeigt, sind in Abbildung 5.36 mit eigenen Ergebnissen bei gleicher Projektilgeschwindigkeit verglichen. Entscheidend für die Ähnlichkeit ist vermutlich die Symmetrie durch die gleiche Kernladung von Projektil und Target sowie die ausschließliche Besetzung von $1s$ -Orbitalen im Eingangszustand, die eine stärkere Besetzung von Zuständen mit $\Lambda > 1$ durch Rotationskopplung erschwert³. In [7] ist auch eine Elektronenverteilung in der nuklearen Streuebene für die SI im He^{2+} -He-Stoß enthalten. Diese unterscheidet sich nicht signifikant von der in Abbildung 5.18-b für die SI1 bei $v_p = 0.71$ a.u. gezeigten.

Eine Elektronenverteilung mit vollkommen anderer Struktur wurde von Abdallah et al [8] in der Reaktion $\text{Ne}^+ + \text{Ne} \rightarrow \text{Ne}^+ + \text{Ne}^+ + e^-$ bei Projektilgeschwindigkeiten zwischen 0.25 und 0.55 a.u. gefunden. Hier liegt ein wesentlicher Teil außerhalb des Bereiches der "Bananen". Die Halbwertsbreite der Transversalimpulsverteilung beträgt etwa $5 m_e v_p$. Es wurde keine Doppelpeakstruktur in x' -Richtung aufgelöst.

³ Die Quantenzahl Λ der molekularen Eigenfunktionen beschreibt den Betrag der Drehimpulskomponente in Richtung der Molekülachse. Bei $\Lambda = 0, 1$ und 2 spricht man von σ -, π - und δ -Zuständen.

Die Verteilung der Rückstoßionenimpulse in Strahlrichtung zeigt, daß es einen nennenswerten Beitrag mit Anregung von Projektil oder Rückstoßion zur Ionisation gibt, die präsentierten Elektronenverteilungen enthalten jedoch nur Reaktionen ohne Anregung.

Ebenfalls von Abdallah et al [9] wurde ein Vergleich der Reaktionskanäle $\text{He}^+ + \text{Ne} \rightarrow \text{He}^+ + \text{Ne}^+ + e^-$ und $\text{Ne}^+ + \text{He} \rightarrow \text{Ne}^+ + \text{He}^+ + e^-$ durchgeführt. Im Gegensatz zu der in Abschnitt 5.3 diskutierten Symmetrie zwischen SI und TI, die nur durch Verschiebung der Phasen zwischen geraden und ungeraden molekularen Zuständen ineinander übergehen, sind hier Zustände verschiedener Bindungsenergien im Eingangskanal besetzt. Dies äußert sich schon darin, daß im He^+ -Ne-Stoß ein nicht zu vernachlässigender Anteil an Ionisationsprozessen mit einer Anregung verbunden ist, während dies im Ne^+ -He-Stoß nicht der Fall ist. Die beste Übereinstimmung zwischen der Ionisation in He^+ -Ne- und Ne^+ -He-Stößen wurde bei der mittleren der drei untersuchten Projektilgeschwindigkeiten von $v_p = 0.25, 0.35$ und 0.5 a.u. gefunden. Insgesamt sind die Impulsverteilungen stärker auf den Bereich zwischen Target- und Projektilgeschwindigkeit konzentriert als im Ne^+ -Ne-Stoß, doch

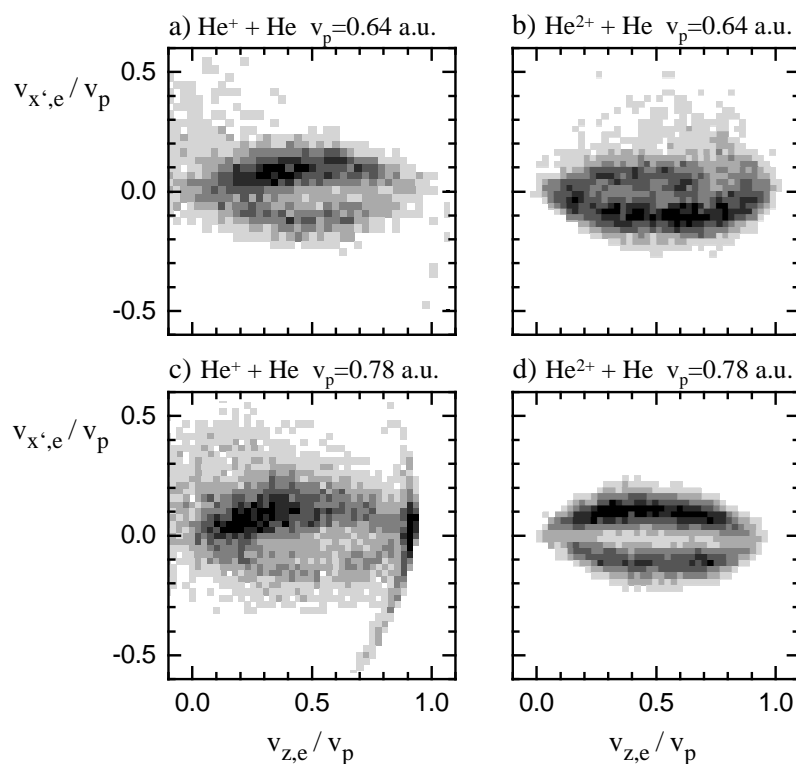


Abbildung 5.36: Elektronenverteilungen in der nuklearen Streuebene verschiedener Ionisationsprozesse bei den Projektilgeschwindigkeiten $v_p = 0.64$ und 0.78 a.u.: a+c) $\text{He}^+ + \text{He} \rightarrow \text{He}^+ + \text{He}^+ + e^-$, Meßdaten von Abdallah et al [7], Spektrum c) ist nach rechts durch den Nachweisbereich des Detektors begrenzt, b+e) $\text{He}^{2+} + \text{He} \rightarrow \text{He}^+(1s) + \text{He}^{2+} + e^-$, eigene Messungen.

wurde auch hier keine π -Struktur in der Emissionscharakteristik der Elektronen gefunden, und die Transversalimpulse sind deutlich größer als in Stößen von He^+ oder He^{2+} mit He.

Kapitel 6

Zusammenfassung der Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wurden die elektronischen Prozesse in langsamen He^{2+} -He-Stößen mit Projektilenergien zwischen 10 und 28 keV/u experimentell untersucht. Das durchgeführte Experiment ist nicht nur kinematisch vollständig, sondern erfaßt auch alle möglichen Endzustände, mit Ausnahme der elastischen Streuung und der Emission beider Elektronen in das Kontinuum. Insbesondere die vierfach-differentiellen Wirkungsquerschnitte jener Prozesse, bei denen im Endzustand ein ungebundenes Elektron zu finden ist, erlauben Rückschlüsse auf die Dynamik des Vierteilchen-Systems. In der Emissionscharakteristik dieser Elektronen spiegelt sich der Drehimpulsaustausch zwischen den Kernen und den Elektronen wider. Bei den Reaktionen, bei denen beide Elektronen in gebundenen Zuständen verbleiben, steckt diese Information in den internen Freiheitsgraden der beiden Fragmente und ist deshalb in der Regel nicht experimentell zugänglich. Die gewonnenen Daten ermöglichen so, erstmals ein detailliertes Bild von der Entwicklung des Systems während des Stoßes zu geben.

Eine klassische Beschreibung der Kernbewegung ist bei den vermessenen langsamen Ion-Atom-Stößen möglich. Die Kernbewegung ist durch die Präparation des Anfangszustandes und durch den gemessenen Impulsaustausch zwischen den Kernen bekannt und gibt ein zeitabhängiges Potential vor, in dem sich die Elektronen bewegen. In einer solchen semiklassischen Beschreibung bilden Projektil und Target zusammen ein Molekül. Die Dynamik der Elektronen im Potential der beiden Kerne kann quantenmechanisch als Promotion in dem Raum stationärer molekularer Zustände (MO = Molecular Orbital) beschrieben werden. Zur Interpretation der Meßdaten wurden die Erkenntnisse aus verschiedenen Arbeiten zur Sattelpunktionisation in Stoßsystemen mit einem Elektron und das MO-Bild der Elektroneneinfangprozesse beim He^{2+} -He-Stoß verknüpft.

Nach den hier vorgestellten Ergebnissen kann der Ionisationsprozeß in zwei Phasen unterteilt werden: Zu Beginn entwickelt sich das System entlang einer der Wege, die mit der semiklassischen Gekoppelte-Kanäle-Methode theoretisch beschrieben werden können. Für den Einfach- und Zweifachelektroneneinfang bei verschiedenen Stoßsystemen wurde diese Methode bereits erfolgreich angewendet. Diese erste Phase dauert an, bis sich die Kerne wieder etwas voneinander entfernt haben. Nun sind

dem System bereits wesentliche Eigenschaften, die sich im Endzustand widerspiegeln werden, aufgeprägt.

Durch Rotationskopplung werden in der ersten Phase verschiedene Drehimpulszustände besetzt. Die Rotationskopplung beschreibt das Verhalten der Elektronenorbitale, wenn die Molekülachse, d.h. der Abstandsvektor zwischen Projektil- und Targetkern, im Stoß so schnell gedreht wird, daß eine adiabatische Anpassung des elektronischen Zustandes an das sich ändernde Potential nicht möglich ist.

Solche und andere Übergänge zwischen molekularen Zuständen finden bei bestimmten Kernabständen statt. Werden diese im Stoß nicht erreicht, so sind Reaktionskanäle, die diese Übergänge enthalten, nicht möglich. Der Projektilstreuwinkel bzw. der Rückstoßionen-Transversalimpuls einer Reaktion ist mit dem kleinsten Kernabstand in der Reaktion verknüpft, und somit lassen die Verteilungen dieser Größen erkennen, wo solche Übergänge zwischen den molekularen Zuständen zu finden sind.

Die MO besitzen die Symmetrie des in der Reaktion gebildeten He_2^{2+} -Quasimoleküls gegenüber Punktspiegelung. Deshalb trägt ein MO immer in gleicher Weise zu Paaren von Reaktionskanälen bei, deren Endzustände durch diese Spiegelung ineinander übergehen. Solche Paare sind z.B. die elastische Streuung und der Zweifachelektroneneinfang in das Projektil oder die Einfachionisation (SI) und die Transferionisation (TI). Abweichungen in den differentiellen Wirkungsquerschnitten von SI und TI sind auf Interferenzen zwischen mehreren MO zurückzuführen. Bei Verringerung des Kernabstandes werden durch die unterschiedliche Entwicklung der Bindungsenergien von MO unterschiedlicher Symmetrien deren Phasen gegeneinander verschoben. Die Interferenzstruktur wird somit wesentlich von der Entwicklung des Systems bei kleinen Kernabständen bestimmt. Werden in einer theoretischen Beschreibung diese Interferenzen wiedergegeben, so zeigt dies, daß die Bindungsenergien entlang der Reaktionswege richtig beschreiben wurde.

In der zweiten Phase, die beginnt, wenn sich der Kernabstand schon wieder vergrößert hat, findet die eigentliche Ionisation statt, die durch das "Hidden-Crossings"-Modell beschrieben werden kann. Für das untersuchte System ist die Funktion der Energieeigenwerte in der Ebene komplexer Kernabstände, die für eine wirkliche Berechnung benötigt wird, nicht bekannt. Es wurde angenommen, daß es, ausgehend von verschiedenen in der ersten Phase besetzten Zuständen, mehrere Promotionswege in das Kontinuum gibt.

Die größeren Kernabstände in der zweiten Phase des Stoßes haben zur Konsequenz, daß sich die Bindungsenergien der an einem Prozeß beteiligten Zustände nicht mehr so stark unterscheiden, und somit die Phasenverschiebungen zwischen den Zuständen weitgehend erhalten bleiben. Dies wird durch den Vergleich der Interferenzstrukturen in den einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitten der Elektronentransferprozesse mit denen der Ionisationsprozesse bestätigt.

Die Drehung der Molekülachse im Laborsystem ist in der zweiten Phase des Stoßes nahezu abgeschlossen, und diese zeigt in guter Näherung in Strahlrichtung. Die Rotationssymmetrie um die Molekülachse, die jetzt auch eine Symmetrie im Labor- und CM-System ist, konserviert Eigenschaften des elektronischen Zustan-

des auch dann noch, wenn ein Elektron in das Kontinuum übergegangen ist. Aus der Impulsverteilung der emittierten Elektronen in der Ebene senkrecht zur Strahlrichtung kann man die Drehimpulskomponente in Strahlrichtung bestimmen (siehe Abschnitt 5.7). Damit erhält man Informationen über die Stärke der Rotationskopplungen in der ersten Phase des Stoßes. Speziell für diese zur Interpretation der Daten wichtige Ebene konnte in früheren Experimenten zu ähnlichen Prozessen die Impulsverteilung nicht bestimmt werden.

Viele der Details der Elektronenimpulsverteilung sind bis jetzt nicht verstanden. Dies hängt damit zusammen, daß keine einfachen Symmetriebedingungen bekannt sind, mit denen man die Abbildung der inneren Freiheitsgrade während des Stoßes auf die kinematischen Größen im Endzustand leicht beschreiben kann. Hier soll die umfangreiche Zusammenstellung der experimentellen Befunde bei der zukünftigen Entwicklung geeigneter Modelle helfen.

Bei der Beschreibung der Dynamik des Stoßes als einen Weg durch den Raum der molekularen Zustände werden die beiden Elektronen zu jedem Zeitpunkt als eine Einheit betrachtet. Die Auswirkungen der dynamischen Elektronenkorrelation sind in diesem Bild im wesentlichen in den Eigenschaften der verwendeten stationären molekularen Zustände verborgen. Diese stationären Eigenschaften bestimmen jedoch, wie die Zustände durch die dynamische Kopplung miteinander vermischt werden können oder, anschaulich formuliert, "wie das System zwischen diesen Zuständen springen kann" bzw. welche Wege durch den Zustandsraum möglich sind. Der entscheidende Schritt zu einer zukünftigen Berechnung des Stoßsystems scheint somit nicht die Lösung einer Evolutionsgleichung, wie z.B. der zeitabhängigen Schrödingergleichung, zu sein, sondern die Untersuchung stationärer Systeme, nämlich der Moleküle bei allen, aber zeitlich konstanten Kernabständen. Die Behandlung des Stoßsystems $\text{He}^{2+} + \text{He}$ im "Hidden-Crossings"-Modell wäre danach möglich [115].

Viele der in den differentiellen Wirkungsquerschnitten der Ionisationskanäle gemessenen Strukturen können jedoch auch ohne eine Rechnung interpretiert werden. Insbesondere war es möglich, Zusammenhänge zwischen der Streuwinkelverteilung des Projektils und der Emissionscharakteristik des Elektrons sowie zwischen den differentiellen Wirkungsquerschnitten der vier hier unterschiedenen Ionisationskanäle aufzuzeigen.

Anhang A

Zusammenstellung differentieller Wirkungsquerschnitte der TI1

Im folgenden sind verschiedene Darstellungen der Geschwindigkeitsverteilungen der Elektronen zusammengestellt, die aufgrund der vielfältigen Darstellungsmöglichkeiten im Kapitel 5 nur für die Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.84$ a.u. präsentiert wurden. Auch hier wird sich auf eine Auswahl beschränkt, unter anderem weil aufgrund der unterschiedlichen Statistik und Auflösung bei den durchgeführten Messungen nicht immer jede Darstellung sinnvoll ist.

Die Kommentare zu den Bildern sind hier teilweise gekürzt oder verweisen auf den Hauptteil der Arbeit. Der folgenden Tabelle kann die Zuordnung der Abbildungen zu denen im Abschnitt 5.4.2 gezeigten entnommen werden. Weiterhin ist jeweils die Projektilgeschwindigkeit und die in den Spektren dargestellten Größen angegeben. Bei allen hier gezeigten Spektren wurden ${}^4\text{He}^{2+}$ -Ionen als Projektile verwendet.

Abbildung	v_p	Abbildung in Kapitel 5	dargestellte Spektren
A.1 A.2 A.3	0.64 a.u. 0.71 a.u. 0.95 a.u.	5.14	$d^3\sigma/d\vec{v}_e$ in 6 x', y' -Ebenen mit $v_{z,e}/v_p = 0, 0.2, 0.4, \dots, 1$
A.4 A.5 A.6	0.64 a.u. 0.71 a.u. 0.95 a.u.	5.15	$d^2\sigma/(dv_{r,e} dv_{r,e})$ für 3 Sektoren ($n \cdot 60^\circ < \varphi < (n+1) \cdot 60^\circ$ mit $n = 0, 1, 2$) und $d^2\sigma/(dv_{x',e} dv_{y',e})$
A.7 A.8 A.9	0.64 a.u. 0.71 a.u. 0.95 a.u.	5.16	Verteilung in der Streuebene: $d^2\sigma/(dv_{x',e} dv_{z,e})$ für verschiedene Bereiche von $v_{y',e}$

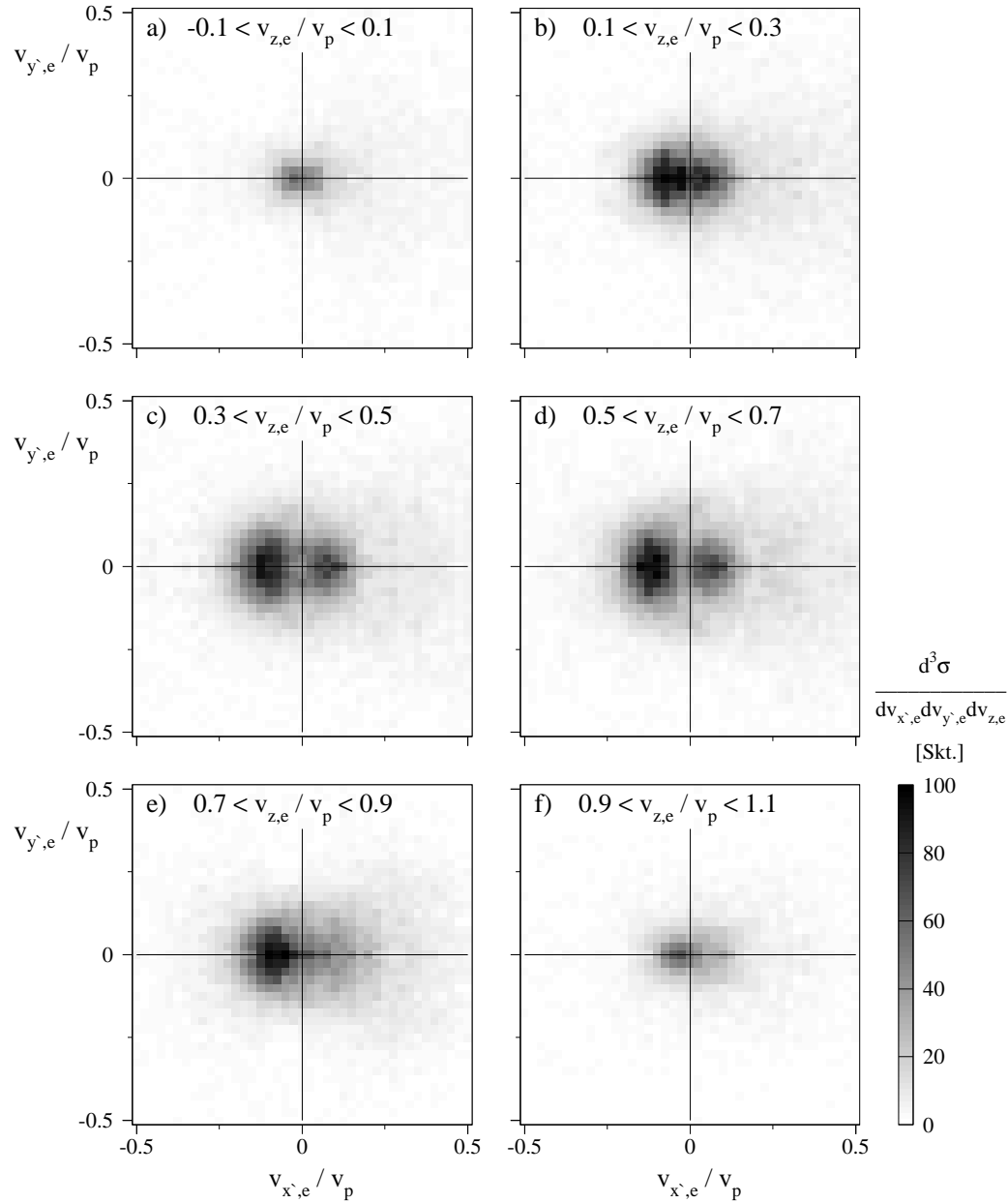


Abbildung A.1: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TII bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.64$ a.u. im durch die nukleare Streuebene definierten Koordinatensystem. Die Daten sind so skaliert, daß das Maximum des dreifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d^3\sigma/(dv_{x',e} dv_{y',e} dv_{z,e})$ 100 Skalenteilen (Skt.) entspricht. Für weitere Angaben siehe Abschnitt 5.4.2.

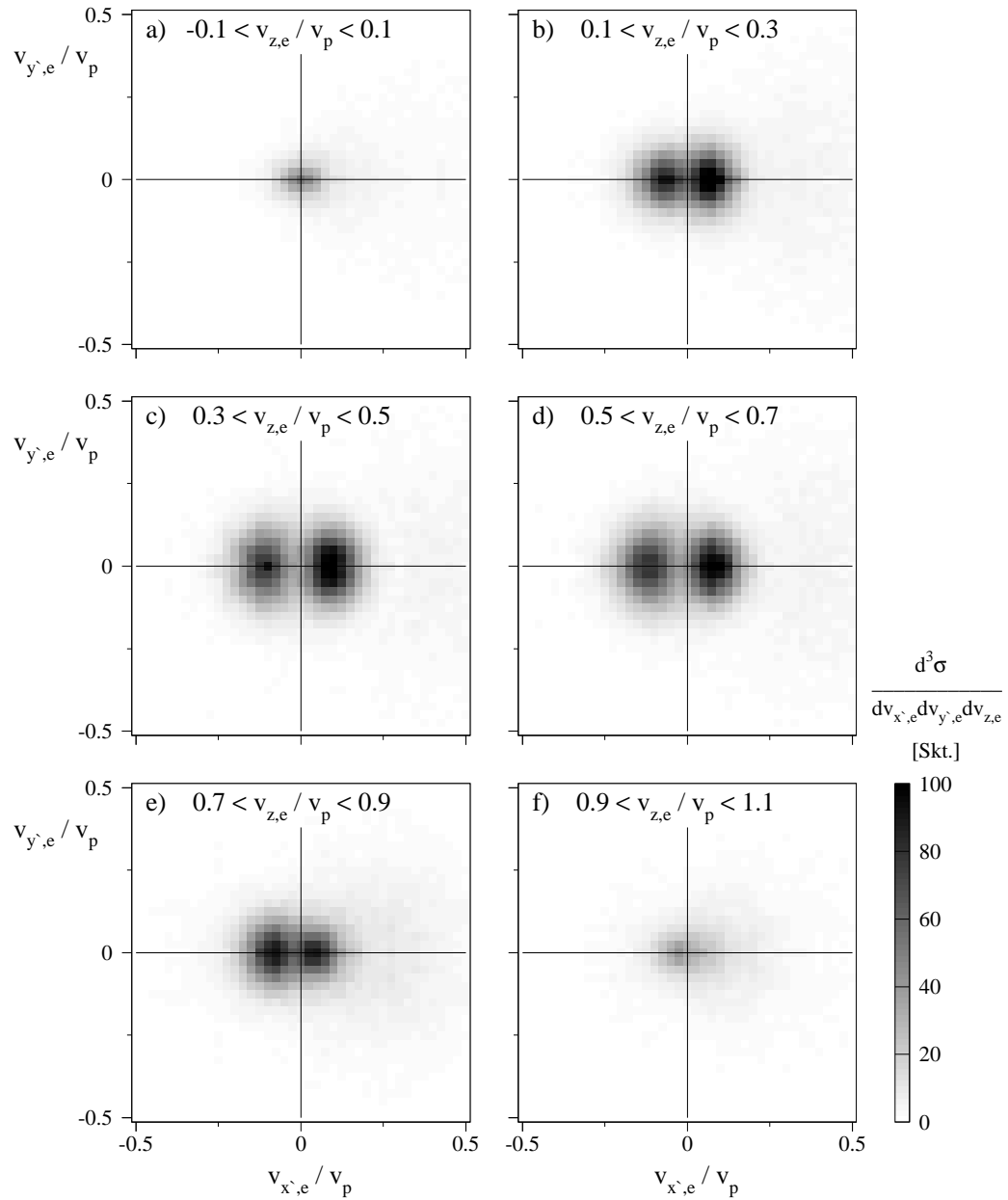


Abbildung A.2: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.71$ a.u. im durch die nukleare Streuebene definierten Koordinatensystem. Die Daten sind so skaliert, daß das Maximum des dreifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d^3\sigma/(dv_{x',e}dv_{y',e}dv_{z,e})$ 100 Skalenteilen (Skt.) entspricht. Für weitere Angaben siehe Abschnitt 5.4.2.

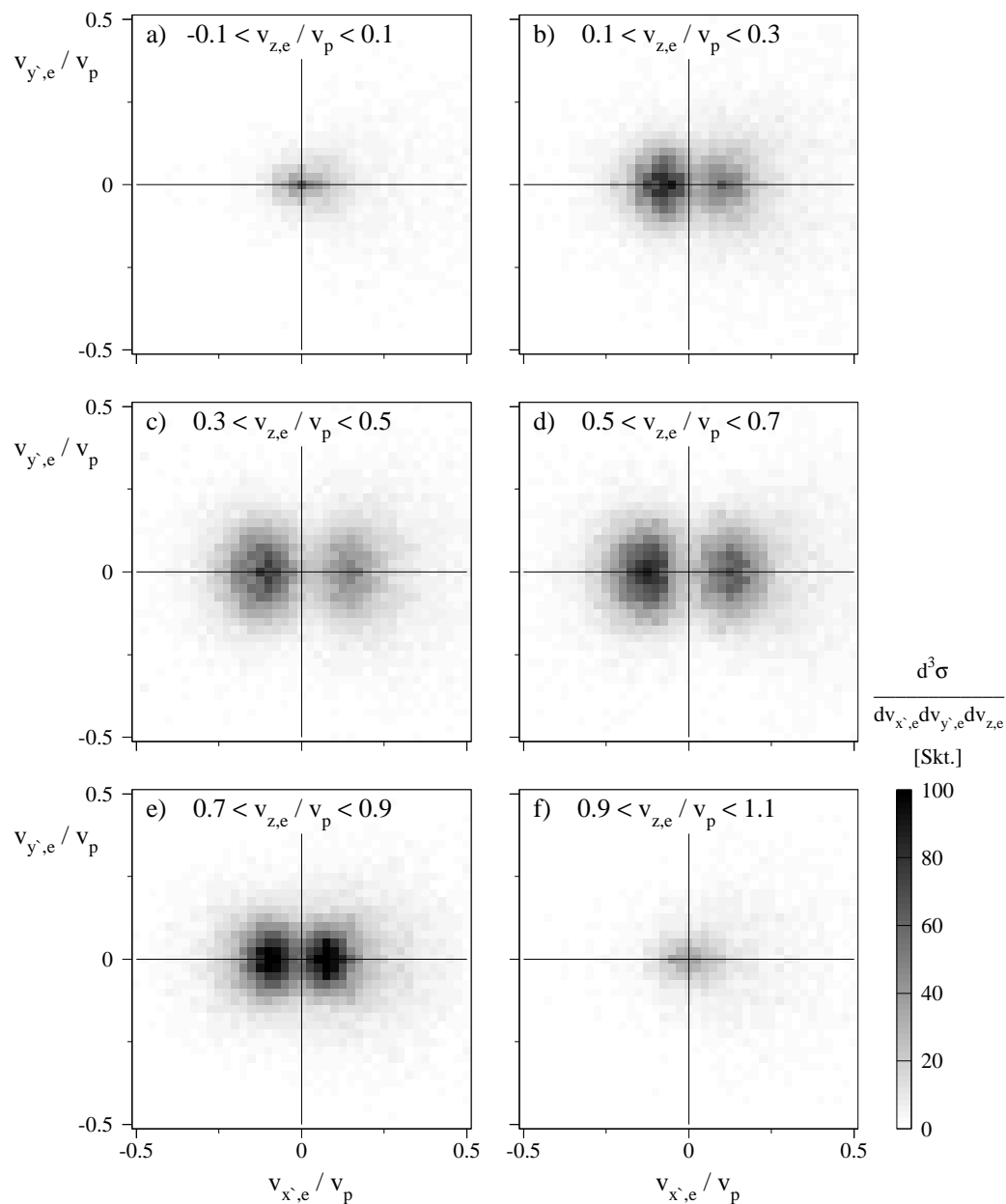


Abbildung A.3: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TII bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.95$ a.u. im durch die nukleare Streuebene definierten Koordinatensystem. Die Daten sind so skaliert, daß das Maximum des dreifach-differentiellen Wirkungsquerschnittes $d^3\sigma / (dv_{x',e} dv_{y',e} dv_{z,e})$ 100 Skalenteilen (Skt.) entspricht. Für weitere Angaben siehe Abschnitt 5.4.2.

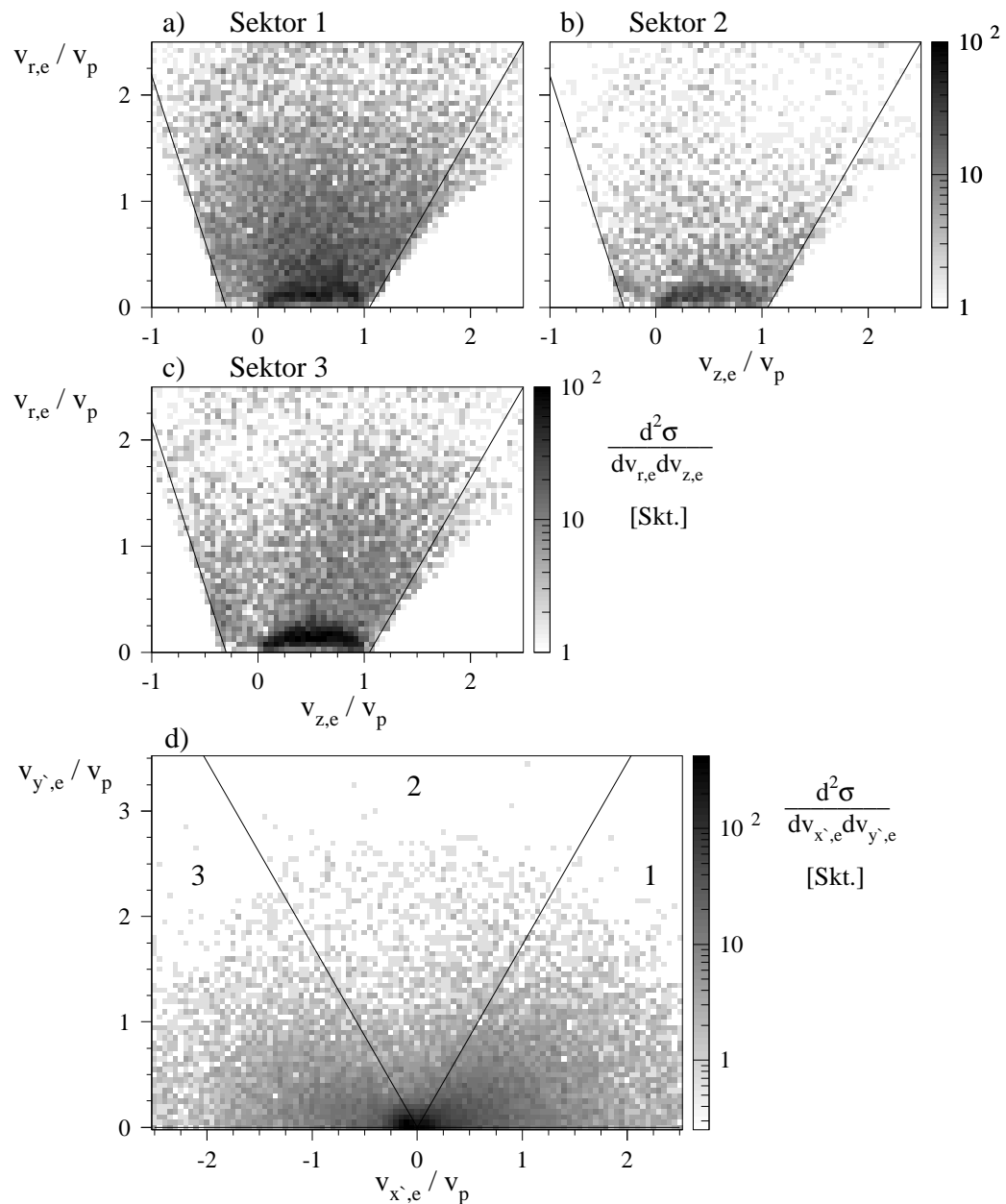


Abbildung A.4: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.64$ a.u.: In den oberen drei Spektren ist die Transversalkomponente der Elektronengeschwindigkeit $v_{r,e}$ gegen die in Strahlrichtung für die Polarwinkelbereiche a) $0 < \varphi < 60^\circ$, b) $60 < \varphi < 120^\circ$ und c) $120 < \varphi < 180^\circ$ aufgetragen. Rechts und links von den eingezeichneten Linien fällt der Nachweisraumwinkel des Spektrometers auf Null. In d) ist die Verteilung in der transversalen Ebene dargestellt, wobei das Rückstoßion immer nach rechts emittiert wird. Die Linien trennen die verwendeten Sektoren (für weitere Angaben siehe Abbildung 5.15).

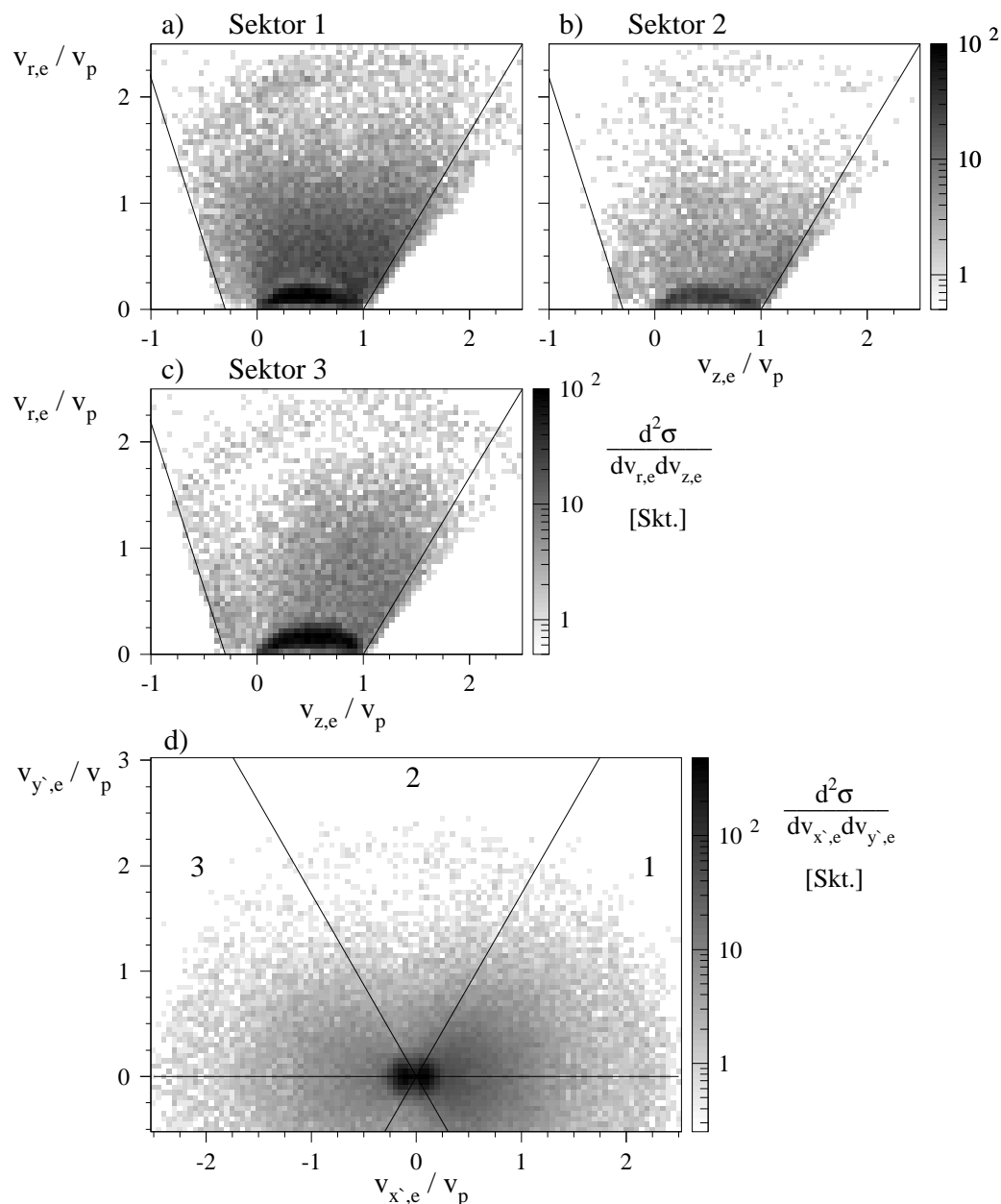


Abbildung A.5: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.71$ a.u.: In den oberen drei Spektren ist die Transversalkomponente der Elektronengeschwindigkeit $v_{r,e}$ gegen die in Strahlrichtung für die Polarwinkelbereiche a) $0 < \varphi < 60^\circ$, b) $60 < \varphi < 120^\circ$ und c) $120 < \varphi < 180^\circ$ aufgetragen. Rechts und links von den eingezeichneten Linien fällt der Nachweisraumwinkel des Spektrometers auf Null. In d) ist die Verteilung in der transversalen Ebene dargestellt, wobei das Rückstoßion immer nach rechts emittiert wird. Die Linien trennen die verwendeten Sektoren (für weitere Angaben siehe Abbildung 5.15).

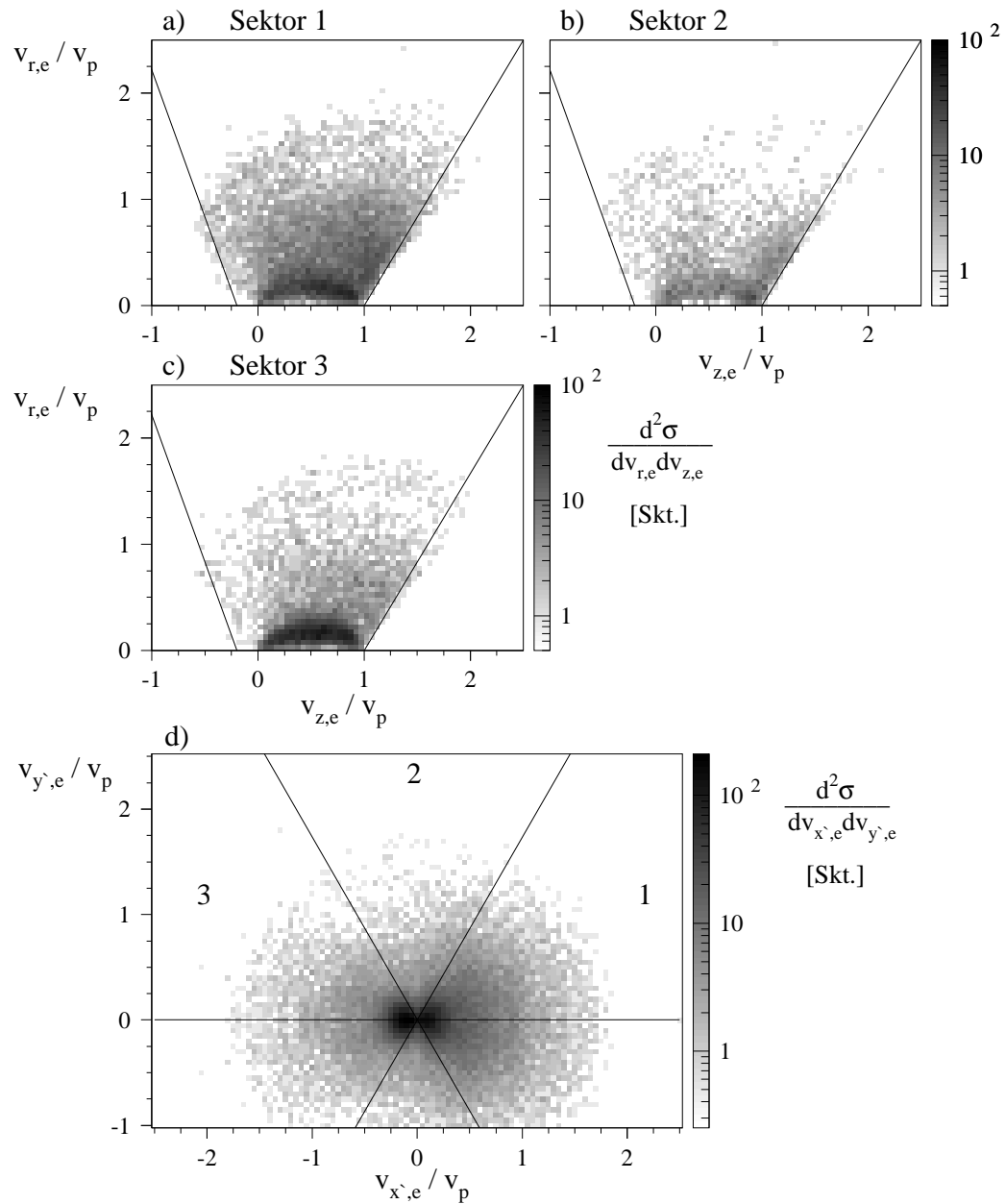


Abbildung A.6: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.95$ a.u.: In den oberen drei Spektren ist die Transversalkomponente der Elektronengeschwindigkeit $v_{r,e}$ gegen die in Strahlrichtung für die Polarwinkelbereiche a) $0 < \varphi < 60^\circ$, b) $60 < \varphi < 120^\circ$ und c) $120 < \varphi < 180^\circ$ aufgetragen. Rechts und links von den eingezeichneten Linien fällt der Nachweisraumwinkel des Spektrometers auf Null. In d) ist die Verteilung in der transversalen Ebene dargestellt, wobei das Rückstoßion immer nach rechts emittiert wird. Die Linien trennen die verwendeten Sektoren (für weitere Angaben siehe Abbildung 5.15).

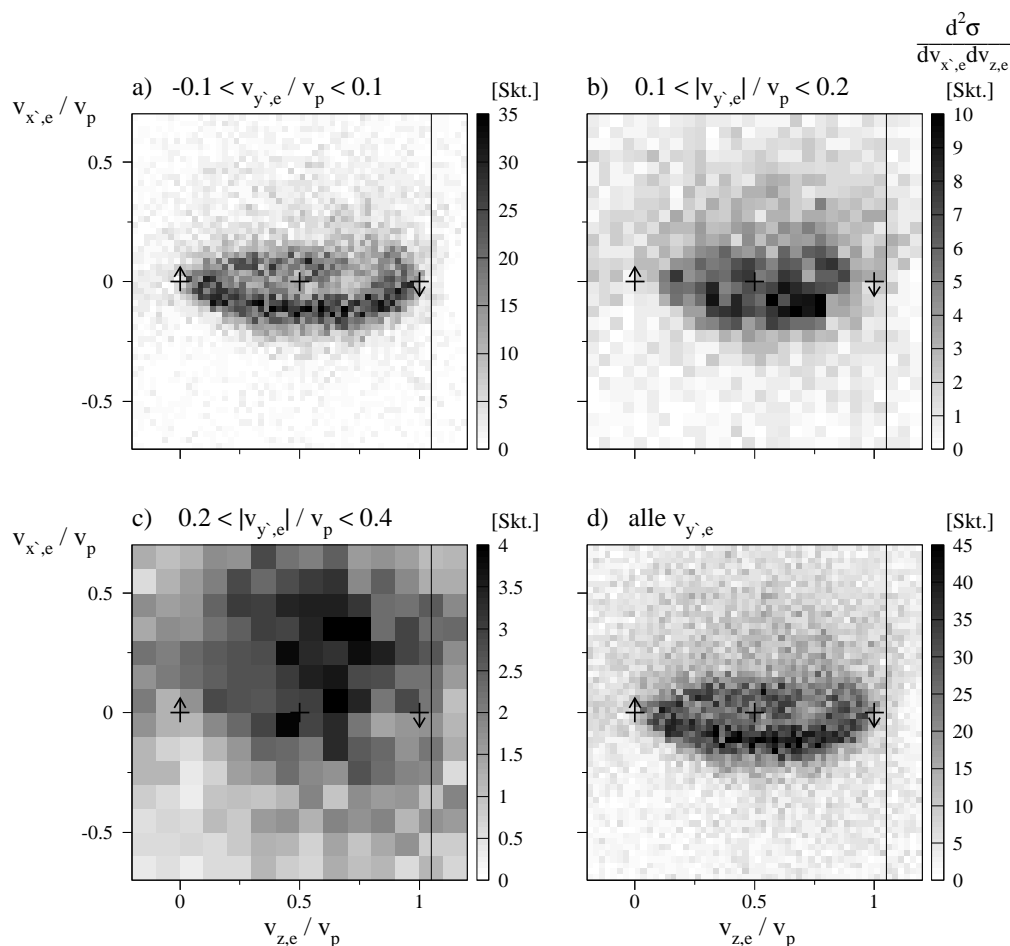


Abbildung A.7: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.64$ a.u. (${}^4\text{He}^{2+}$ -Projektil): zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/dv_{x',e}dv_{z,e}$ für verschiedene Bereiche von $v_{y',e}$, a) $0 < |v_{y',e}| < 0.1 v_p$, b) $0.1 v_p < |v_{y',e}| < 0.2 v_p$, c) $0.2 v_p < |v_{y',e}| < 0.4 v_p$, d) $-\infty < v_{y',e} < \infty$. Die Kreuze geben die Positionen von Target, Sattelpunkt und Projektil im Geschwindigkeitsraum an, wobei die Pfeile in Richtung der Transversalimpulse der beiden Ionen zeigen. In b) und c) sind mehrere Kanäle zusammengefaßt, um den statistischen Fehler zu verringern. Rechts von den senkrechten Linien fällt der vom Elektronenspektrometers erfaßte Raumwinkel, so daß der Wirkungsquerschnitt dort zu niedrig erscheint. Ein Skalenteil (Skt.) entspricht etwa $2 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{a.u.}^2$, wobei der Fehler der Absolutnormierung ca. 30 % beträgt. In den Spektren a) und d) ist 1 Skt. gleich 1 Ereignis/Kanal.

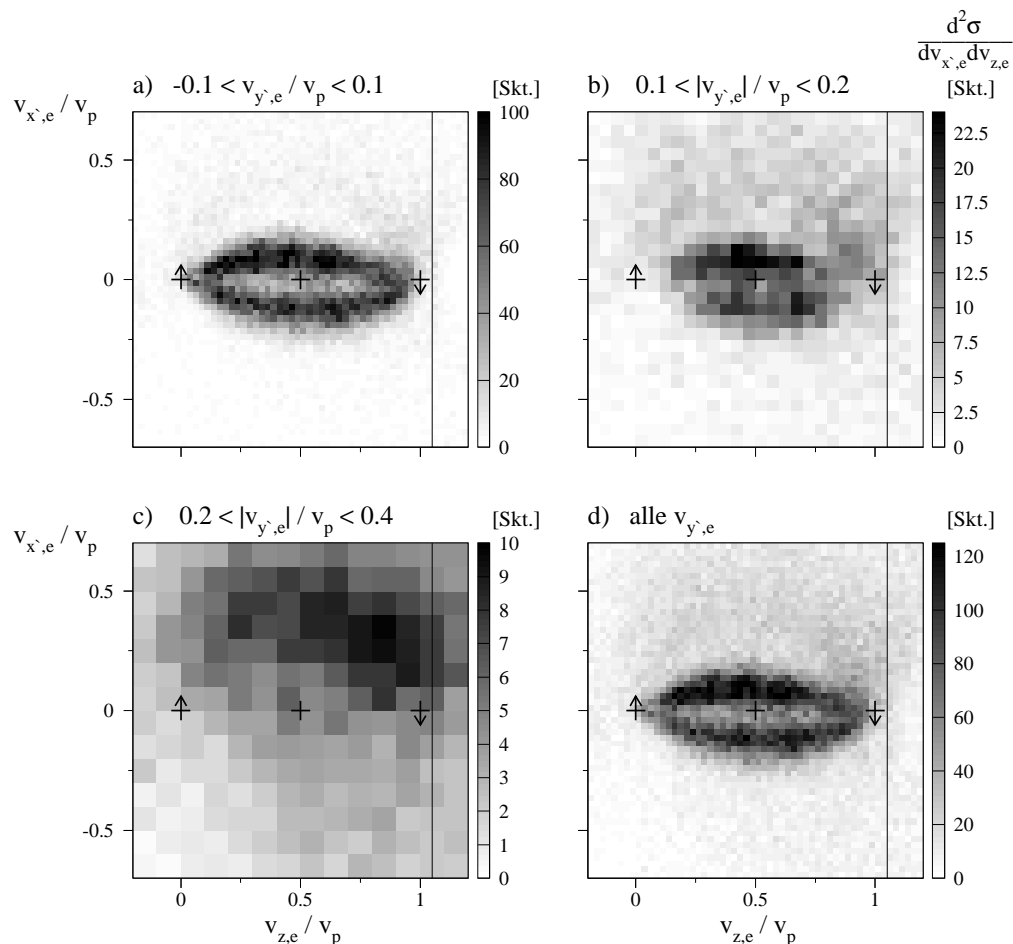


Abbildung A.8: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TII bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.71$ a.u. (${}^4\text{He}^{2+}$ -Projektil): zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/dv_{x',e}dv_{z,e}$ für verschiedene Bereiche von $v_{y',e}$, a) $0 < |v_{y',e}| < 0.1 v_p$, b) $0.1 v_p < |v_{y',e}| < 0.2 v_p$, c) $0.2 v_p < |v_{y',e}| < 0.4 v_p$, d) $-\infty < v_{y',e} < \infty$. Die Kreuze geben die Positionen von Target, Sattelpunkt und Projektil im Geschwindigkeitsraum an, wobei die Pfeile in Richtung der Transversalimpulse der beiden Ionen zeigen. In b) und c) sind mehrere Kanäle zusammengefaßt, um den statistischen Fehler zu verringern. Rechts von den senkrechten Linien fällt der vom Elektronenspektrometers erfaßte Raumwinkel, so daß der Wirkungsquerschnitt dort zu niedrig erscheint. Ein Skalenteil (Skt.) entspricht etwa $1 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{a.u.}^2$, wobei der Fehler der Absolutnormierung ca. 30 % beträgt. In den Spektren a) und d) ist 1 Skt. gleich 1 Ereignis/Kanal.

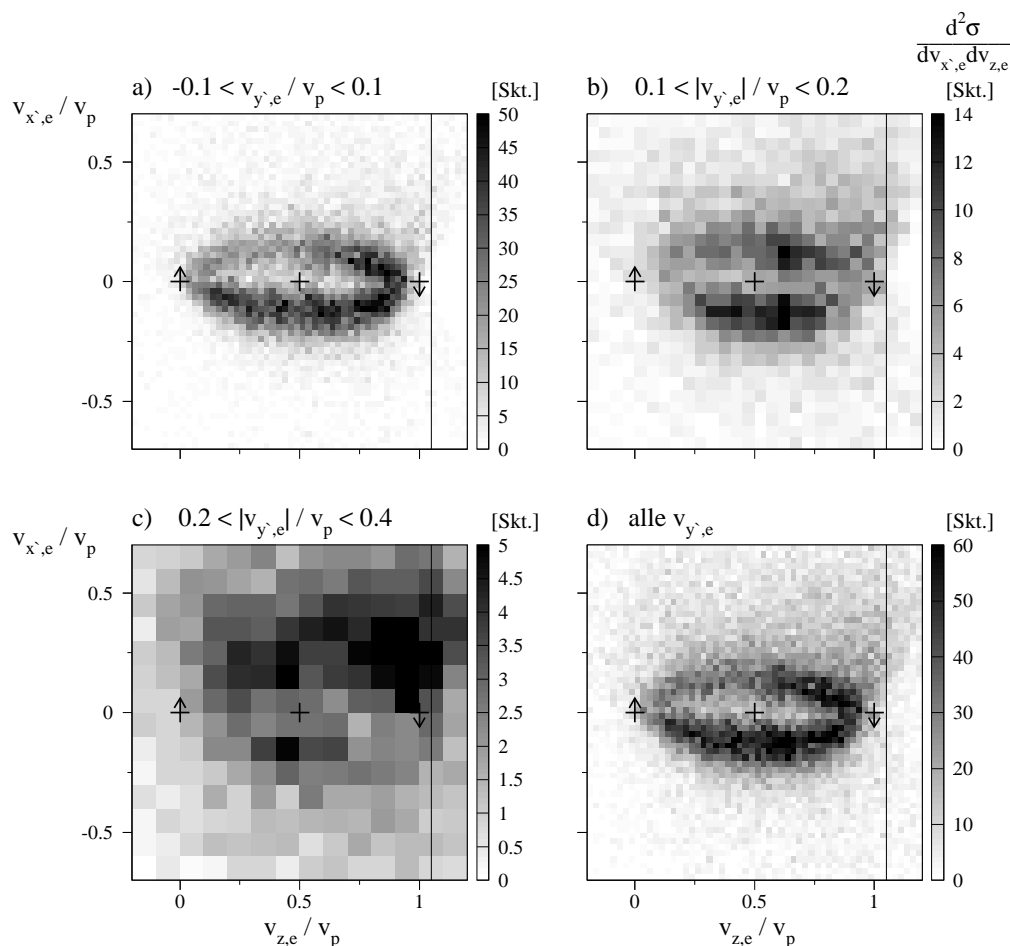


Abbildung A.9: Elektronengeschwindigkeitsverteilung der TI1 bei der Projektilgeschwindigkeit $v_p = 0.95$ a.u. (${}^4\text{He}^{2+}$ -Projektil): zweifach-differenzieller Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/dv_{x',e}dv_{z,e}$ für verschiedene Bereiche von $v_{y',e}$, a) $0 < |v_{y',e}| < 0.1 v_p$, b) $0.1 v_p < |v_{y',e}| < 0.2 v_p$, c) $0.2 v_p < |v_{y',e}| < 0.4 v_p$, d) $-\infty < v_{y',e} < \infty$. Die Kreuze geben die Positionen von Target, Sattelpunkt und Projektil im Geschwindigkeitsraum an, wobei die Pfeile in Richtung der Transversalimpulse der beiden Ionen zeigen. In b) und c) sind mehrere Kanäle zusammengefaßt, um den statistischen Fehler zu verringern. Rechts von den senkrechten Linien fällt der vom Elektronenspektrometers erfaßte Raumwinkel, so daß der Wirkungsquerschnitt dort zu niedrig erscheint. Ein Skalenteil (Skt.) entspricht etwa $6 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{a.u.}^2$, wobei der Fehler der Absolutnormierung ca. 30 % beträgt. In den Spektren a) und d) ist 1 Skt. gleich 1 Ereignis/Kanal.

Anhang B

Atomare Einheiten

Um bei der Beschreibung von atomaren Prozessen mit einfachen Zahlenwerten arbeiten zu können, verwendet man oft die sogenannten Atomaren Einheiten, die sich dadurch auszeichnen, daß die folgenden Naturkonstanten einen einfachen Zahlenwert besitzen:

Elementarladung	$e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ As} = 1$
Elektronenmasse	$m_e = 9.1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 1$
Planksche Konstante	$h = 6.62617 \cdot 10^{-34} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} = 2\pi$ $\hbar = h \frac{1}{2\pi} = 1$
Vakuumlichtgeschwindigkeit	$c = 2.99792 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1} = \alpha^{-1} = 137.036$ $\alpha c = 1$

Daraus können die Umrechnungsfaktoren zum SI-Maßsystem für die physikalischen Grundgrößen abgeleitet werden. In Atomaren Einheiten wird für alle Größen, wie z.B. Länge, Fläche und Volumen, das Symbol "a.u." zur Bezeichnung der Einheit verwendet, das bedeutet aber, daß $1 \text{ a.u.} = 1 \text{ a.u.}^2 = 1 \text{ a.u.}^3 = 1$ gilt. Es wird somit mit dimensionslosen Größen gerechnet.

Es ergeben sich folgende Umrechnungsfaktoren zwischen Atomaren Einheiten und SI-Einheiten:

Ladung:	$1 \text{ C} = 6.1656 \cdot 10^{18} \text{ a.u.}$
Masse:	$1 \text{ kg} = 1.0978 \cdot 10^{30} \text{ a.u.}$
Drehimpuls, Wirkung:	$1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-1} = 1 \text{ Js} = 9.4824 \cdot 10^{30} \text{ a.u.}$
Geschwindigkeit:	$1 \text{ m s}^{-1} = 4.5706 \cdot 10^{-7} \text{ a.u.}$ $1 \text{ a.u.} = \alpha c = 2.1877 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1}$
Zeit:	$1 \text{ s} = 4.1341 \cdot 10^{16} \text{ a.u.}$ $1 \text{ a.u.} = \hbar m_e^{-1} (\alpha c)^{-2} = 2.4189 \cdot 10^{-17} \text{ s}$
Länge:	$1 \text{ m} = 1.8897 \cdot 10^{10} \text{ a.u.}$ $1 \text{ a.u.} = \hbar m_e^{-1} (\alpha c)^{-1} = 0.529177 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

Energie: $1 \text{ J} = 2.294 \cdot 10^{17} \text{ a.u.}$
 $1 \text{ a.u.} = m_e (\alpha c)^2 = 4.360 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 27.212 \text{ eV}$

Spannung: $1 \text{ V} = 0.0367 \text{ a.u.}$
 $1 \text{ a.u.} = m_e (\alpha c)^2 e^{-1} = 27.212 \text{ V}$

Kraft: $1 \text{ N} = 1.2138 \cdot 10^7 \text{ a.u.}$
 $1 \text{ a.u.} = m_e^2 (\alpha c)^3 \hbar^{-1} = 8.2388 \cdot 10^{-8} \text{ N}$

Weitere Konstanten in Atomaren Einheiten:

Induktionskonstante: $\mu_0 = 6.6918 \cdot 10^{-4} \text{ a.u.}$
 Influenzkonstante: $\epsilon_0 = (4\pi)^{-1}$
 Ruhemasse des Protons: $m_p = 1836.15 \text{ a.u.}$
 Bohrscher Radius: $r_B = 1 \text{ a.u.}$
 Compton-Wellenlänge des Elektrons: $\lambda_c = 0.04585 \text{ a.u.}$
 Feinstrukturkonstante: $\alpha = 1/137.0360$

Anhang C

Coulombstreuung

Aus diversen Lehrbüchern [116, 117] kann die Rutherfordsche Streuformel entnommen werden. Sie gibt den raumwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitt der elastischen Coulombstreuung zweier Atomkerne den Ladungen Z_1 und Z_2 bei der Stoßenergie E_{CM} im Schwerpunktsystem (CM-System) an.

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} = \frac{d^2\sigma}{\sin(\theta) d\theta d\phi} = \frac{k^2}{16 E_{CM}^2} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (\text{C.1})$$

Dabei wurde die Abkürzung

$$k = V(r) r = \frac{e^2 Z_p Z_{rec}}{4\pi \epsilon_0}$$

verwendet. Für die in dieser Arbeit relevanten Streuwinkel sind die Näherungen $\sin(\alpha) \sim \alpha$ und $\cos(\alpha) \sim 1$ gültig. Durch Integration über den Polarwinkel ϕ erhält man den azimutalwinkel-differentiellen Wirkungsquerschnitt der Coulombstreuung im CM-System:

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = 2\pi \frac{k^2}{E_{CM}^2} \frac{1}{\theta^3}. \quad (\text{C.2})$$

Den Streuwinkel θ erhält man in der Näherung kleiner Winkel aus der durch den Stoß bedingten transversalen Geschwindigkeitskomponente des Projektils $v_{r,p} = p_{r,p}/m_p$ und der im CM-System gemessenen Geschwindigkeit in Strahlrichtung $v_{p,CM} = v_p m_{rec}/(m_{rec} + m_p)$:

$$\theta = \frac{v_{r,p}}{v_{p,CM}} = \frac{p_{r,p}/m_p}{v_p m_{rec}/(m_{rec} + m_p)} = \frac{p_{r,p}}{\mu v_p}. \quad (\text{C.3})$$

Dabei ist μ die reduzierte Masse. Die Energie im CM-System ergibt sich aus der Energie im Laborsystem E_{kin} zu

$$E_{CM} = \frac{\mu}{m_p} E_{kin} = \frac{1}{2} \mu v_p^2. \quad (\text{C.4})$$

Aufgrund der Impulserhaltung gilt $p_{r,p} = p_{r,rec}$. Mit den Gleichungen C.2 bis C.4 und der aus Gleichung C.3 durch Differentiation gewonnenen Beziehung

$dp_{r,rec} = \mu v_p d\theta$ erhält man den rückstoßionen-transversalimpuls-differentiellen Wirkungsquerschnitt der Coulombstreuung im Laborsystem:

$$\frac{d\sigma}{dp_{r,rec}} = 8\pi \frac{k^2}{v_p^2} \frac{1}{p_{r,rec}^3} = 8\pi \frac{e^4}{(4\pi \epsilon_0)^2} Z_p^2 Z_{rec}^2 \frac{1}{v_p^2} \frac{1}{p_{r,rec}^3}. \quad (\text{C.5})$$

In Atomaren Einheiten gilt $e^4 (4\pi \epsilon_0)^{-2} = 1$. Will man den differentiellen Wirkungsquerschnitt nicht in a.u., sondern in $\text{cm}^2/\text{a.u.}$ erhalten, kann man folgende Gleichung benutzen:

$$\frac{d\sigma}{dp_{r,rec}} = 7.0 \cdot 10^{-16} \text{cm}^2 \cdot Z_p^2 Z_{rec}^2 \frac{1}{v_p^2} \frac{1}{p_{r,rec}^3}. \quad (\text{C.6})$$

Ist die Geschwindigkeitsänderung der Kerne während des Stoßes so gering, daß die damit verbundene Änderung der Trajektorien zu keiner wesentlichen Änderung der während des Stoßes zwischen den Kernen wirkenden Coulombkräfte K_c führt, so ist der durch $\Delta p = \int K_c(t) dt$ gegebene Impulsübertrag auf die Kerne unabhängig von deren Masse. In Gleichung C.5, die für kleine Streuwinkel gilt, tauchen folglich die Projektil- und Rückstoßionenmasse nicht auf.

Bei einer klassischen Betrachtung der Coulombstreuung gilt folgende Beziehung zwischen dem Stoßparameter b und θ :

$$b = \frac{k}{2 E_{CM}} \cot(\theta/2) \sim \frac{k}{E_{CM}} \frac{1}{\theta}. \quad (\text{C.7})$$

Mit Gleichung C.3 erhält man daraus:

$$b = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} Z_p Z_{rec} \frac{2}{v_p p_{r,rec}}. \quad (\text{C.8})$$

In Atomaren Einheiten berechnet sich der dabei auftretende konstante Faktor zu

$$\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} = 1 \text{ a.u.}$$

Anhang D

Liste häufig verwendeter Symbole

Zeichen	physikalische Größe
\vec{p}, p	Impuls, Impulskomponente
m	Masse
t	Zeit allgemein
T	Flugzeit vom Target zum Detektor
T_0	Flugzeit vom Target zum Detektor für $p = 0$
\vec{v}, v	Geschwindigkeit, Geschwindigkeitskomponente
a_{elek}	Beschleunigung im elektrostatischen Spektrometerfeld
E_{Target}	Elektrische Feldstärke im Targetvolumen
K_{elek}	Kraft im elektrostatischen Spektrometerfeld
Q	Q -Wert
s	Abstand zwischen Target und Gitter im Elektronenspektrometer
v_p	Projektilgeschwindigkeit im Anfangszustand
v_{jet}	Jetgeschwindigkeit = 1760ms^{-1}
x	Ort in Richtung des elek. Spektrometerfeldes
y	Ort in Jetrichtung
z	Ort in Strahlrichtung
φ	Winkel in der x,y -Ebene
r	Abstand von der Strahlachse bzw. z -Achse
Indizes	Bedeutung
rec	Rückstoßion (recoil)
p	Projektil
e	Elektron
x, y, z	kartesische Vektorkomponenten im Laborsystem
x', y', z'	kartesische Vektorkomponenten bzgl. der nuklearen Streuebene
r	radiale Vektorkomponente
i	Anfangszustand
f	Endzustand

Anhang E

Strahlpulser in zeitfokussierender Geometrie

Wird zur Erzeugung von kurzen Pulsen ein Ionenstrahl in einem Plattenkondensator periodisch so abgelenkt, daß er eine Schlitzblende überstreicht, so hängt die Pulslänge von der Blendenöffnung ab. In Abschnitt 3.2.1 wurde für einen Strahl ohne Ausdehnung in Ablenkrichtung gezeigt, daß die Geschwindigkeit dy_{Blende}/dt , mit der er über die Blende gewedelt wird, durch

$$\frac{dy_{Blende}}{dt} = \pm \frac{l_d}{v_p m_p} \frac{q}{d} 2 U_{P,0} \quad (\text{E.1})$$

gegeben ist. Dabei sind m_p , v_p und q die Masse, die Geschwindigkeit und die Ladung der Projektilionen, l_d der Abstand zwischen dem Ablenkkondensator und der Schlitzblende und $U_{P,0}/d$ das elektrische Ablenkkfeld vor bzw. nach der Umpolung. Wir betrachten hier einen Puls, bei dem die Ionen vor der Umpolung des Feldes nach oben und danach nach unten abgelenkt werden. Damit gilt in Gleichung E.1 das negative Vorzeichen, denn der Strahl überstreicht dabei die Schlitzblende von oben nach unten. Die Situation ist in Abbildung E.1-a verdeutlicht. Wird das Feld zu dem Zeitpunkt umgepolt, an dem sich ein auf der Strahlachse befindliches Projektil genau in der Mitte des Kondensators befindet, so ist die Summe der Impulsüberträge in Ablenkrichtung gleich Null, und das Projektil kann die Schlitzblende passieren.

Hier soll nun diskutiert werden, welche Effekte sich durch eine Ausdehnung des Strahls im Strahlpulser ergeben. Zunächst muß ein Teilchen, das mit dem Abstand y_p zur Strahlachse durch den Puls-kondensator fliegt, eine Ablenkung erfahren, um die Schlitzblende passieren zu können. In dem in Abbildung E.1-b gezeigten Beispiel, in welchem die Trajektorie eines Projektils eingezeichnet ist, das sich oberhalb der Strahlachse befindet, wird diese Ablenkung dann erreicht, wenn es um die Zeit t_1 später durch den Kondensator fliegt als ein Projektil auf der Achse, das nicht abgelenkt wird. Mit Gleichung E.1 erhält man für t_1 :

$$t_1 = \frac{dt}{dy_{Blende}} (-y_p) = y_p \frac{d}{l_d} \frac{m_p v_p}{2 q} \frac{1}{U_{P,0}} = y_p \frac{d}{l_d} \frac{U_{Quelle}}{v_p} \frac{1}{U_{P,0}}. \quad (\text{E.2})$$

Dabei wurde verwendet, daß die kinetische Energie der Projektilen $E_{kin} = 0.5 m_p v_p^2$

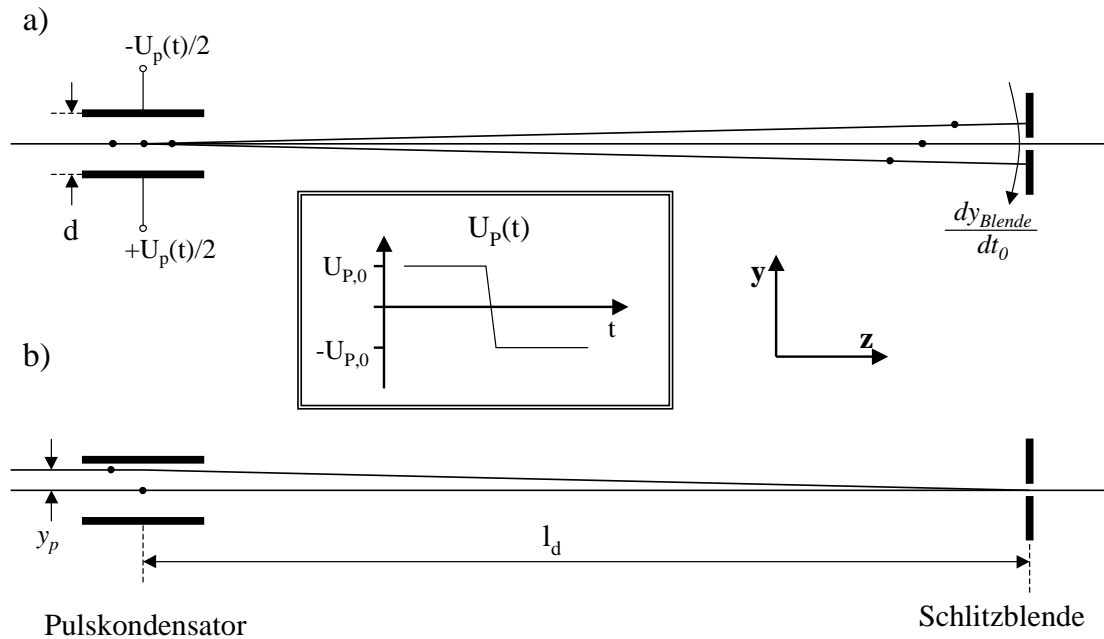


Abbildung E.1: Skizze des Strahlpulsers zur Veranschaulichung der Funktionsweise: a) Die Ablenkung von Projektile auf der Strahlachse ist abhängig von deren Position bei der Umpolung des Pulserfeldes. Der Strahl wird über die Schlitzeblende gewedelt. b) Außerhalb der Strahlachse müssen die Projektile eine bestimmte Ablenkung erfahren, um die Schlitzeblende passieren zu können. Zu jedem Abstand y_p zur Strahlachse gibt es zum Zeitpunkt der Umpolung des Feldes eine Position, bei der diese Ablenkung gegeben ist.

gleich der Ladung q mal der Beschleunigungsspannung an der Ionenquelle U_{Quelle} ist.

Der Puls-kondensator erzeugt ein elektrisches Wechselfeld, in dem geladene Teilchen Energie aufnehmen oder verlieren können. Werden die Pulserplatten immer mit Spannung entgegengesetzter Polarität versorgt, dies war im Experiment gegeben, so ist der Energieübertrag auf Projektile auf der Strahlachse Null, da dort die longitudinalen Feldkomponenten verschwinden¹. Für Projektile außerhalb der Strahlachse kann man, anstelle die Randfelder zu betrachten, die Energieänderung ΔE_{kin} aus der Potentialänderung bei der Umpolung des Feldes am Projektillort berechnen.

$$\Delta E_{kin} = \frac{y_p}{d} 2q U_{P,0} \quad (E.3)$$

Im Beispiel von Abbildung E.1-b wechselt das Potential oberhalb der Strahlachse sein Vorzeichen von negativ auf positiv. Das Projektile wird beim Eintritt in den Kondensator im Randfeld auf die noch negative obere Kondensatorplatte hinbeschleunigt und beim Austritt von dieser wegbeschleunigt, gewinnt also kinetische Energie.

¹Die folgende Argumentation kann leicht auf unsymmetrische Spannungsversorgung verallgemeinert werden. Am Ergebnis ändert sich dadurch nichts.

Die Projektilgeschwindigkeit ändert sich somit von v_p auf

$$\begin{aligned} v_p + \Delta v_p &= \sqrt{2 \frac{E_{kin} + \Delta E_{kin}}{m_p}} \\ &\sim \sqrt{2 \frac{E_{kin}}{m_p}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\Delta E_{kin}}{E_{kin}} \right) = v_p + v_p \frac{y_p q U_{P,0}}{d} \frac{1}{q U_{Quelle}}. \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Damit ändert sich auch die Flugzeit der Projektile auf der Driftstrecke der Länge l_d zwischen Pulscondensator und Schlitzeblende um t_2 :

$$t_2 = \frac{l_d}{v_p + \Delta v_p} - \frac{l_d}{v_p} \sim -\frac{l_d}{v_p^2} \Delta v_p = -\frac{y_p}{v_p} \frac{l_d}{d} \frac{U_{P,0}}{U_{Quelle}}. \quad (\text{E.5})$$

Gilt nun $t_1 = -t_2$, d.h., die notwendige Zeitverschiebung, um die richtige Ablenkung zur Strahlachse zu erhalten, und die Flugzeitänderung durch die Beschleunigung im Randfeld des Pulscondensators heben sich auf, so kann der Strahldurchmesser vergrößert werden, ohne daß dadurch die Pulslänge zunimmt. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn

$$\frac{U_{P,0}}{U_{Quelle}} = \frac{d}{l_d} \quad (\text{E.6})$$

gilt, d.h., in diesem Fall kommen unabhängig von y_p alle Projektile, welche die Blende an einem bestimmten Punkt im Schlitz passieren, dort gleichzeitig an. Eine solche zeitfokussierende Geometrie wurde im durchgeführten Experiment realisiert.

Es muß beachtet werden, daß die Strahlpulse aufgrund der Geschwindigkeitsmodulation nach dem Punkt der Zeitfokussierung wieder auseinanderlaufen. Es ist jedoch auch möglich, daß die Ebene der Zeitfokussierung hinter die Schlitzeblende, also in die Reaktionszone gelegt wird.

Tritt ein divergenter, von einer Punktquelle ausgehender Strahl anstelle des hier angenommenen Parallelstrahls in den Pulser, so wird dadurch der Zeitfokus in Strahlrichtung verschoben. Auch dies kann durch die Pulsergeometrie bzw. Pulserspannung berücksichtigt werden. Eine Vergrößerung der Emittanz² des Strahls führt jedoch in jedem Fall zu einer Vergrößerung der Pulslänge.

Die hier abgeleiteten Formeln sind somit als Anhaltspunkte für die Dimensionierung eines Strahlpulsers zu verstehen. Die im Experiment verwendete Geometrie wurde mit dem Programm SIMION3D [104] simuliert, welches Trajektorien für gegebene Elektrodengeometrien, auch bei zeitabhängigen Elektrodenspannungen, berechnet.

²Die hier angesprochene zweidimensionale Emittanz ist ein Maß für die in der $y, \frac{dy}{dz}$ -Ebene vom Strahl eingenommene Fläche. Ein idealer Parallelstrahl hat demnach die Emittanz Null. Das gleiche gilt für einen Strahl, der von einer Punktquelle ausgeht. Für einen real existierenden Projektilestrahl wird die kürzest mögliche Pulslänge immer bei einer etwas höheren als der durch Gleichung E.6 errechneten Pulserspannung erzielt. Dies geht jedoch zu Lasten der Intensität des gepulsten Strahls.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Ullrich, R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger und H. Schmidt-Böcking. *Comments At. Mol. Phys.*, **30**:285, (1994).
- [2] J. Ullrich, R. Moshhammer, R. Dörner, O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking und L. Spielberger. *J. Phys. B*, **30**:2917, (1997).
- [3] R. Dörner, V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, J. Ullrich, R. Moshhammer und H. Schmidt-Böcking. *Physics Reports*, **330**:95–192, (2000).
- [4] S. D. Kravis, M. Abdallah, C. L. Cocke, C. D. Lin, M. Stöckli, B. Walch, Y. D. Wang, R. E. Olson, V. D. Rodríguez, W. Wu, M. Pieksma und N. Watanabe. *Phys. Rev. A*, **54**:1394, (1996).
- [5] M. Abdallah, S. Kravis, C. L. Cocke, Y. Wang, V. D. Rodríguez und M. Stöckli. *Phys. Rev. A*, **56**:2000, (1997).
- [6] R. Dörner, H. Khemliche, M. H. Prior, C. L. Cocke, J. A. Gary, R. E. Olson, V. Mergel J. Ullrich und H. Schmidt-Böcking. *Phys. Rev. Lett.*, **77**:4520, (1996).
- [7] M. A. Abdallah, C. L. Cocke, W. Wolff, H. Wolf, S. D. Kravis, M. Stöckli und E. Kamber. *Phys. Rev. Lett.*, **81**:3627, (1998).
- [8] M. A. Abdallah, W. Wolff, H. E. Wolf, C. L. Cocke und M. Stöckli. *Phys. Rev. A*, **58**:R3379, (1998).
- [9] M. A. Abdallah, W. Wolff, H. E. Wolf, C. L. Cocke und M. Stöckli. *J. Phys. B*, **32**:4237, (1999).
- [10] R. E. Olson, T. J. Gay, H. G. Berry, E. B. Hale und V. D. Irby. *Phys. Rev. Lett.*, **59**:36, (1987).
- [11] W. Fritsch. Progress in atomic collisions theory: The semiclassical close-coupling model and the physics it describes. In C. D. Lin, editor, *Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions*, Seite 239 ff. World Scientific, (1993).
- [12] S. Yu. Ovchinnikov, J. H. Macek und D. B. Khrebtukov. *Phys. Rev. A*, **56**:2872, (1997).

- [13] S. Yu. Ovchinnikov und J. H. Macek. *Phys. Rev. Lett.*, 75:2474, (1995).
- [14] M. Pieksma und S. Y. Ovchinnikov. *J. Phys. B*, 24:2699, (1991).
- [15] S. Yu. Ovchinnikov und E. A. Solov'ev. *Comments At. Mol. Phys.*, 22:69, (1988).
- [16] J. M. Rost, J. S. Briggs und P. T. Greenland. *J. Phys. B*, 22:L353, (1989).
- [17] S. K. Lam, L. D. Doverspike und R. L. Champion. *Phys. Rev. A*, 7:1595, (1973).
- [18] R. S. Gao, C. M. Dutta, N. F. Lane, K. A. Smith, R. F. Stebbings und M. Kimura. *Phys. Rev. A*, 45:6388, (1992).
- [19] R. E. Olson. *Phys. Rev. A*, 27:1871, (1983).
- [20] V. D. Irby, T. J. Gay, J. Wm. Edwards, E. B. Hale, M. L. McKenzie und R. E. Olson. *Phys. Rev. A*, 37:3612, (1988).
- [21] G. Bernardi, S. Suárez, P. Fainstein, C. Garibotti, W. Meckbach und P. Focke. *Phys. Rev. A*, 40:6863, (1989).
- [22] T. J. Gay, M. W. Gealy und M. E. Rudd. *J. Phys. B*, 23:L823, (1990).
- [23] G. Bernardi, S. Suarez, P. Fainstein, C. Garibotti, W. Meckbach und P. Focke. *J. Phys. B*, L829:23, (1990).
- [24] W. Meckbach, S. Suárez, P. Focke und G. Bernardi. *J. Phys. B*, 24:3763, (1991).
- [25] R. D. DuBois. *Phys. Rev. A*, 48:1123, (1993).
- [26] C. O. Reinhold und R. E. Olson. *J. Phys. B*, 23:L297, (90).
- [27] V. D. Irby, S. Datz, P. F. Dittner, N. L. Jones, H. F. Krause und C. R. Vane. *Phys. Rev. A*, 47:2957, (1993).
- [28] M. Pieksma, S. Y. Ovchinnikov, J. van Eck, W. B. Westerveld und A. Niehaus. *Phys. Rev. Lett.*, 73:46, (1994).
- [29] L. Kocbach, J. M. Mansteen und R. Gundersen. *Nucl. Instr. Meth.*, 169:281, (1980).
- [30] K. Stiebing, H. Streit, L. Schmidt, A. Schremmer, K. Bethge, H. Schmidt-Böcking, A. Schempp, U. Bessler, P. Beller und J. Madlung. *Nucl. Instr. Meth. B*, 113:34, (1996).
- [31] J. E. Bayfield und G. A. Khayrallah. *Phys. Rev. A*, 11:920, (1975).
- [32] V. Mergel. *Dynamische Elektronenkorrelationen in Helium*. Doktorarbeit, Universität Frankfurt/Main, (1996).

- [33] V. Mergel, R. Dörner, M. Achler, Kh. Khayyat, S. Lencinas, J. Euler, O. Jagutzki, S. Nüttgens, M. Unverzagt, L. Spielberger, W. Wu, R. Ali, J. Ullrich, H. Cederquist, A. Salin, R. E. Olson, Dž. Belkić, C. L. Cocke und H. Schmidt-Böcking. *Phys. Rev. Lett.*, 79:387, (1997).
- [34] M. E. Rudd, Y. E. Kim, D. H. Madison und T. J. Gay. *Reviews of Modern Physics*, 64:441, (1992).
- [35] U. Bechthold, S. Hagmann, J. Ullrich, B. Bathelt, A. Bohris, R. Moshhammer, U. Ramm, C. Bhalla, G. Kraft und H. Schmidt-Böcking. *Phys. Rev. Lett.*, 79:2034, (1997).
- [36] D. H. Lee, P. Richard, T. J. M. Zouros, J. M. Sanders, J. L. Shinpaugh und H. Hidmi. *Phys. Rev. A*, 41:4816, (1990).
- [37] J. O. P. Pedersen, P. Hvelplund, A. G. Petersen und P. D. Fainstein. *J. Phys. B*, 24:4001, (1991).
- [38] R. E. Olson. *Phys. Rev. A*, 33:4397, (1986).
- [39] V. D. Irby. *Phys. Rev. A*, 39:54, (1989).
- [40] C. O. Reinhold und R. E. Olson. *Phys. Rev. A*, 39:3861, (1989).
- [41] G. Bandarage und R. Parson. *Phys. Rev. A*, 41:5878, (1990).
- [42] M. Pieksma und S. Y. Ovchinnikov. *J. Phys. B*, 27:4573, (1994).
- [43] M. McCartney. *Phys. Rev. A*, 52:1213, (1995).
- [44] M. Chassid und M. Horbatsch. *J. Phys. B*, 28:L621, (1995).
- [45] E. Y. Sidky und C. D. Lin. *J. Phys. B*, 31:2949, (1998).
- [46] E. Y. Sidky und C. D. Lin. *Phys. Rev. A*, 60:377, (1999).
- [47] H. O. Folkerts, F. W. Blik, L. Meng, R. E. Olson, R. Morgenstern, M. von Hellermann, H. P. Summers und R. Hoekstra. *J. Phys. B*, 27:3475, (1994).
- [48] K. Tókési und G. Hock. *J. Phys. B*, 29:L119, (1996).
- [49] R. E. Olson, C. R. Feeler, C. J. Wood, C. L. Cocke, R. Dörner, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking, R. Moshhammer und J. Ullrich. *Nucl. Instr. Meth. B*, 124:249, (1997).
- [50] V. J. Montemayor und G. Schiwietz. *Phys. Rev. A*, 40:6223, (1989).
- [51] Arthur Beiser. *Atome, Moleküle, Festkörper*. Vieweg, (1969).
- [52] W. Lichten. *Phys. Rev.*, 131:229, (1963).
- [53] L. I. Ponomarev, T. P. Puzynina und N. F. Truskova. *J. Phys. B*, 11:3861, (1978).

- [54] G. J. Hatton und G. A. Khayrallah. *Phys. Rev. A*, 11:920, (1975).
- [55] A. Riera und A. Salin. *J. Phys. B*, 9:2877, (1976).
- [56] J. Anton. *Eine generalistische Lösung der zeitabhängigen DFS-Gleichung mit Hilfe angepaßter atomarer Basissätze und expliziter elektronischer Translationsfaktoren*. Doktorarbeit, Universität Kassel, (1998).
- [57] S. Yu. Ovchinnikov und J. H. Macek. *Phys. Rev. A*, 55:3605, (1997).
- [58] G. J. Hatton. *Phys. Rev. A*, 14:901, (1976).
- [59] J. H. Macek und S. Yu. Ovchinnikov. *Phys. Rev. A*, 50:468, (1994).
- [60] E. A. Solov'ev. *Sov. Phys. JETP*, 54:893, (1981).
- [61] J. H. Macek, S. Yu. Ovchinnikov und S. V. Pasovets. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4631, (1995).
- [62] R. K. Janev, G. Ivanovski und E. A. Solov'ev. *Phys. Rev. A*, 49:R645, (1994).
- [63] K. Bethge und G. Gruber. *Physik der Atome und Moleküle*. VCH, (1990).
- [64] E. A. Solov'ev. *Phys. Rev. A*, 42:1331, (1990).
- [65] P. S. Krstić, G. Bent und D. R. Schultz. *Phys. Rev. Lett.*, 77:2428, (1996).
- [66] P. S. Krstić, D. R. Schultz und G. Bent. *J. Phys. B*, 31:183, (1998).
- [67] M. Chassid und M. Horbatsch. *J. Phys. B*, 31:515, (1998).
- [68] J. C. Wells, D. R. Schultz, P. Gavras und M. S. Pindzola. *PRA*, 54:593, (1996).
- [69] A. Kolakowska, M. S. Pindzola, F. Robicheaux, D. R. Schultz und J. C. Wells. *Phys. Rev. A*, 58:2872, (1998).
- [70] K. C. Kulander, K. R. Sandhya Devi und S. E. Koonin. *Phys. Rev. A*, 25:2968, (1982).
- [71] K. R. Sandhya Devi und J. D. Garcia. *J. Phys. B*, 16:2837, (1983).
- [72] W. Stich, H. J. Lüdde und R. M. Dreizler. *J. Phys. B*, 18:1195, (1985).
- [73] K. J. Schaudt, N. H. Kwong und J. D. Garcia. *Phys. Rev. A*, 43:2294, (1991).
- [74] A. F. Ferguson und B. L. Moiseiwitsch. *Proc. Phys. Soc.*, 74:457, (1959).
- [75] M. J. Fulton und M. H. Mittleman. *Proc. Phys. Soc.*, 87:669, (1966).
- [76] S. C. Mukherjee, K. Roy und N. C. Sil. *J. Phys. B*, 6:467, (1973).
- [77] H. Yagisawa, H. Sato und T. Watanabe. *Phys. Rev. A*, 16:1352, (1977).
- [78] S. Hara und H. Sato. *J. Phys. B*, 11:955, (1978).

- [79] F. Koike, H. Nakamura, S. Hara, Y. Itikawa, M. Matsuzawa, H. Sato und I. Shimamura. *J. Phys. B*, 11:4193, (1978).
- [80] V. López, A. Macías, R. D. Piacentini, A. Riera und M. Yáñez. *J. Phys. B*, 11:2889, (1978).
- [81] C. Harel und A. Salin. *J. Phys. B*, 13:785, (1980).
- [82] M. Kimura. *J. Phys. B*, 21:L19, (1988).
- [83] K. Gramlich, N. Grün und W. Scheid. *J. Phys. B*, 22:2567, (1989).
- [84] W. Fritsch und C. D. Lin. *Phys. Lett. A*, 123:128, (1987).
- [85] W. Fritsch. *J. Phys. B*, 27:3461, (1994).
- [86] P. G. Davies und D. R. Flower. *J. Phys. B*, 31:3639, (1998).
- [87] H. O. Folkerts, R. Hoekstra, L. Meng, R. E. Olson, W. Fritsch, R. Morgenstern und H. P. Summers. *J. Phys. B*, 26:L619, (1993).
- [88] S. Runkel, O. Hohn, L. Schmidt, K. E. Stiebing, H. Schmidt-Böcking, A. Schempp und R. Becker. *Rev. Sci. Instruments*, 69:721, (1998).
- [89] L. Schächter, K. E. Stiebing, S. Dobrescu, Al. I. Badescu-Singureanu, L. Schmidt, O. Hohn und S. Runkel. *Rev. Sci. Instruments*, 70:1367, (1999).
- [90] L. Schächter, K. E. Stiebing, S. Dobrescu, Al. I. Badescu-Singureanu, S. Runkel, O. Hohn, L. Schmidt, A. Schempp und H. Schmidt-Böcking. *Rev. Sci. Instruments*, 71:981, (2000).
- [91] G. Brusdeylins, J. P. Toennies und R. Vollmer. *XII. Symposium on Molecular Beams, Book of Abstracts*. Perugia, (1989).
- [92] V. Mergel, O. Jagutzki, L. Spielberger, K. Ullmann-Pfleger, R. Dörner und H. Schmidt-Böcking. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 502:171, (1998).
- [93] J. L. Wiza. *Nucl. Instr. Meth.*, 162:587, (1979).
- [94] R. Moshhammer, J. Ullrich, H. Kollmus, W. Schmitt, M. Unverzagt, O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking, R. Mann, C. J. Woods und R. E. Olson. *Phys. Rev. Lett.*, 77:1242, (1996).
- [95] R. Moshhammer, M. Unverzagt, W. Schmitt, J. Ullrich und H. Schmidt-Böcking. *Nucl. Instr. Meth. B*, 108:425, (1996).
- [96] H. Bräuning, R. Dörner, C. L. Cocke, M. H. Prior, B. Krässig, A. Bräuning-Demian, K. Carnes, S. Dreuil, V. Mergel, P. Richard, J. Ullrich und H. Schmidt-Böcking. *J. Phys. B*, 30:L649, (1997).

- [97] H. Bräuning, R. Dörner, C. L. Cocke, M. H. Prior, B. Krässig, A. S. Kheifets, I. Bray, A. Bräuning-Demian, K. Carnes, S. Dreuil, V. Mergel, P. Richard, J. Ullrich und H. Schmidt-Böcking. *J. Phys. B*, 31:5149, (1998).
- [98] R. Dörner, H. Bräuning, O. Jagutzki, V. Mergel, M. Achler, R. Moshhammer, J. M. Feagin, T. Osipov, A. Bräuning-Demian, L. Spielberger, J. H. McGuire, M. H. Prior, N. Berrah, J. D. Bozek, C. L. Cocke und H. Schmidt-Böcking. *Phys. Rev. Lett.*, 81:5776, (1998).
- [99] M. Achler. *Untersuchung von Symmetrieeffekten in der Photodoppelionisation von Helium mit zirkular polarisiertem Licht*. Doktorarbeit, Universität Frankfurt/Main, (1999).
- [100] V. Mergel, M. Achler, R. Dörner, Kh. Khayyat, T. Kambara, Y. Awaya, V. Zoran, B. Nyström, L. Spielberger, J. H. McGuire, J. Feagin, J. Berakdar, Y. Azuma und H. Schmidt-Böcking. *Phys. Rev. Lett.*, 80:5301, (1998).
- [101] R. Dörner, J. M. Feagin, C. L. Cocke, H. Bräuning, O. Jagutzki, M. Jung, E. P. Kanter, H. Khemliche, S. Kravis, V. Mergel, M. Prior, H. Schmidt-Böcking, L. Spielberger, J. Ullrich, M. Unverzagt und T. Vogt. *Phys. Rev. Lett.*, 77:1024, (1996).
- [102] Th. Weber, Kh. Khayyat, R. Dörner, O. Jagutzki, L. Schmidt, F. Afaneh, A. Gonzalez, C. L. Cocke, A. L. Landers und H. Schmidt-Böcking. *J. Phys. B*, zur Veröffentlichung angenommen, (2000).
- [103] V. D. Irby. *Phys. Rev. A*, 60:1135, (1999).
- [104] David A. Dahl. *SIMION 3D Version 6.0 User's Manual*. Idaho National Engineering Laboratory, (1995).
- [105] K. Ullmann-Pfleger. Roentdek G.m.b.H., software@roentdek.com, (1999).
- [106] P. J. Hicks und J. Comer. *J. Phys. B*, 8:1866, (1975).
- [107] J. O. P. Pedersen und P. Hvelplund. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2373, (1989).
- [108] V. V. Afrosimov, G. A. Leïko, Yu. A. Mamaev und M. N. Panov. *Sov. Phys. JETP*, 40:661, (1975).
- [109] R. D. DuBois. *Phys. Rev. A*, 36:2585, (1987).
- [110] K. H. Berkner, R. V. Pyle, J. W. Stearns und J. C. Warren. *Phys. Rev.*, 166:44, (1968).
- [111] M. B. Shah und H. B. Gilbody. *J. Phys. B*, 18:899, (1985).
- [112] V. V. Afrosimov, A. A. Basalaeu, G. A. Leïko und M. N. Panov. *Sov. Phys. JETP*, 47:837, (1978).

- [113] R. Moshhammer, J. Ullrich, H. Kollmus, W. Schmitt, M. Unverzagt, H. Schmidt-Böcking, C. J. Woods und R. E. Olson. *Phys. Rev. A*, 56:1351, (1997).
- [114] R. Dörner, V. Mergel, L. Spielberger, O. Jagutzki, J. Ullrich und H. Schmidt-Böcking. *Phys. Rev. A*, 57:312, (1998).
- [115] J. H. Macek. *Private Mitteilung*, (2000).
- [116] R. J. Jelitto. *Theoretische Physik 2: Mechanik II*, Seite 188ff. AULA-Verlag, (1987).
- [117] T. Mayer-Kuckuk. *Atomphysik*, Seite 19. Teubner, (1985).

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die mich bei der Durchführung des Experiments und der Auswertung der Daten unterstützt haben:

Ottmar Jagutzki ist in unserer Arbeitsgruppe der Spezialist für MCP-Detektoren und hat auch beim Bau der von mir verwendeten mitgearbeitet.

Lutz Spielberger hat beim Aufbau des Datenaufnahmesystems geholfen und Klaus Ullmann-Pfleger hat die Datenaufnahmesoftware COBOLDPC an die Bedürfnisse des Experiments angepaßt.

Alkis Müller ist der richtige Ansprechpartner bei allen Fragen zum Betriebssystem VMS und zum Datenanalyseprogramm PAW.

Reinhard Dörner, Thorsten Weber, Matthias Achler und Volker Mergel haben mich durch Hilfe und Ratschläge insbesondere bei den ersten Strahlzeiten und den Eichmessungen unterstützt.

Kurt Stiebing, Oliver Hohn und Steffen Runkel bilden das EZR-Team, dem ich seit der Zeit des Diploms selbst noch ein bißchen angehöre, und das sich um die Ionenquelle kümmert.

Die Werkstätten des Instituts unter der Leitung von Herrn E. Zanger haben meine Ideen für das neue Spektrometer in die Realität umgesetzt und bei vielen kleinen technischen Problemen geholfen.

Die Elektronikwerkstatt hat für mich nicht nur den Strahlpulser gebaut, sondern auch so manches Elektronikmodul wieder zum Leben erweckt.

Die Beschleunigermannschaft hat nicht nur durch Wartung der Pumpstände ihren Beitrag zur Durchführung des Experimentes geleistet, sondern war auch bei der Beseitigung von Schäden nach einem Kühlwasserverlust sehr behilflich.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Prof. Horst Schmidt-Böcking für die herzliche Aufnahme in seine Arbeitsgruppe. Mit ihm kann man nicht nur gut über Physik diskutieren, sondern auch wandern, grillen, musizieren

Neben den hier namentlich genannten Personen haben mich viele andere Mitglieder der Arbeitsgruppe und des Instituts durch Handgriffe und hilfreiche Ratschläge unterstützt. Im einzelnen mag diese Hilfe nicht so wichtig erscheinen, doch insgesamt ist es dieses Umfeld, das vieles überhaupt erst möglich gemacht hat. Bei allen bedanke ich mich ganz herzlich.

Zum Schluß bedanke ich mich noch bei meiner Familie, insbesondere bei meinen Eltern, die mich während des gesamten Studiums unterstützt haben. Mein Bruder Harald (er ist Informatik-Student) hat mich mit allen nötigen Computerbauteilen eingedeckt, so daß ich auch am Wochenende jederzeit arbeiten konnte. Erst gegen Ende des Studiums kam Andrea, die mittlerweile meine Frau ist, in mein Leben. Sie hat vieles für mich erledigt, während ich an dieser Arbeit geschrieben habe. Seit 7 Monaten ist nun schon meine Tochter Louisa auf der Welt. Sie konnte zwar nichts zu dieser Arbeit beitragen, doch war ihr recht bald klar, daß der Papa nachts seinen Schlaf braucht. Diesen Menschen, meiner Familie, habe ich diese Arbeit gewidmet.

Lebenslauf

Lothar Philipp Helmut Schmidt, geboren am 01. Dezember 1968 in Hanau, verheiratet mit Andrea Schmidt, geb. Kuhn, ein Kind

1975 - 1979	Grundschule (Kurt-Schumacher-Schule in Nidderau)
1979 - 1985	Förderstufe und Sekundarstufe I (Integrierte Gesamtschule Nidderau)
1985 - 1988	Gymnasiale Oberstufe (Georg-Christoph-Lichtenberg-Oberstufen-Gymnasium in Bruchköbel)
22.06.1988	Allgemeine Hochschulreife
07/88 - 09/1989	Grundwehrdienst: Grundausbildung in Baunatal, danach Waffenmechaniker in Arolsen
ab WS1989	Studium der Physik an der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main
18.10.1991	Diplom-Vorprüfung für Physik
19.09.-23.09.1994	Weiterbildungskurs der Fachhochschulen Frankfurt/M und Gießen-Friedberg: Vakuumtechnik für die industrielle und wissenschaftliche Praxis
22.02.1996	Diplom in Physik, mit Auszeichnung bestanden, Thema: "Extraktion und Strahlführung an der Frankfurter EZR-Ionenquelle", durchgeführt am Institut für Kernphysik der J. W. Goethe-Universität bei Prof. Dr. H. Schmidt-Böcking
03/1996 - 02/1997	Anstellung als Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Institut für Kernphysik der J. W. Goethe-Universität: Weiterentwicklung und Umbau der EZR-Ionenquelle
seit 01.08.1996	Promotionsarbeit an der J. W. Goethe-Universität
03/1997 - 02/1999	Stipendium nach dem Hessischen Gesetz zur Förderung von Nachwuchswissenschaftlern
seit 01.03.1999	Anstellung als Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Institut für Kernphysik der J. W. Goethe-Universität

Forschungsaufenthalte:

Jan. + Feb. 1997	GSI, Darmstadt: Hochenergetische δ -Elektronen aus Schwerionenstößen
24.03. - 03.04.1998	ATOMKI, Debrecen, Ungarn: Erzeugung von Metallionen mit EZR-Ionenquellen
21.06. - 19.07.1999	Lawrence Berkeley National Laboratory, CA, USA: Photodoppelionisation von Ne
11.10. - 17.10.1999	Manne-Siegbahn Laboratory, Stockholm, Schweden: Doppelionisation in schnellen p-He-Stößen