

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich-Mathematischen
Gesamtfakultät
der Ruprecht-Karls-Universität
Heidelberg

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Daniel Fischer
aus Pforzheim

Tag der mündlichen Prüfung: 18. Dezember 2003

**Mehr-Teilchen-Dynamik
in der Einfach- und Doppelionisation
von Helium durch geladene Projektile**

**Gutachter: Prof. Dr. Joachim Ullrich
Prof. Dr. Dirk Schwalm**

Zusammenfassung:

In der vorliegenden Arbeit wurden schnelle Ion-Atom-Stöße, bei denen ein Heliumtarget einfach oder doppelt ionisiert wird, kinematisch vollständig vermessen. Dazu wurde ein sogenanntes „Reaktionsmikroskop“ verwendet, daß an den Tandem-Beschleuniger des Max-Planck-Institutes für Kernphysik angeschlossen wurde. Die Analyse des so bestimmten vollständig aufgelösten Endzustandsimpulsraumes erlaubt tiefe Einblicke in die Mehr-Teilchen-Dynamik der zu untersuchenden Stoßreaktionen. Für die Einfachionisation von Helium konnte der wohl vollständigste experimentelle Satz differentieller Wirkungsquerschnitte gewonnen und mit neusten Rechnungen und früheren Experimenten verglichen werden. Durch die Wahl bestimmter kinematischer und geometrischer Situationen war es möglich, dynamische Mechanismen, die in bisherigen Experimenten nicht beobachtet wurden, zu identifizieren und über einen weiten Bereich der Stärke der Wechselwirkung hinweg zu verfolgen. Für die Doppelionisation im Ion-Atom-Stoß wurden im Rahmen dieser Arbeit erstmals vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte gewonnen. Im Vergleich mit früheren Ergebnissen zur Elektronenstoß-Doppelionisation wurden deutliche Unterschiede beobachtet, die auf ladungsabhängige, nichtlineare Prozesse zurückzuführen sind. Von theoretischer Seite gibt es bereits neue Ansätze und mögliche Erklärungen, um die in dieser Arbeit beobachteten Diskrepanzen zwischen dem Experiment und theoretischen Vorhersagen zu verstehen.

Abstract:

In this work single and double ionization of helium induced by fast ion impact was investigated in kinematically complete experiments. For these experiments a so-called “reaction-microscope” was used, which was attached to the tandem accelerator at the Max-Planck Institute for Nuclear Physics. The analyses of the fully resolved final state momentum space opens up a deep insight into the many-body dynamics of collision reactions. For single ionization of helium the most complete experimental set of differential cross sections was obtained and compared with the latest calculations and previous experimental results. In this way, dynamical mechanisms were identified by choosing specific kinematical and geometrical situations, which were not observed in previous experiments. For the double ionization by ion impact, fully differential cross sections have been obtained for the first time and compared with previous data of electron impact double ionization. Significant differences have been observed and attributed to charge-sign dependent non-linear processes. From the theoretical side there already exists a number of approaches and possible explanations to acquire a deeper insight into the discrepancies between experiment and theoretical predictions observed in this work.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Ionisation in Stößen geladener Teilchen mit Atomen	11
1.1 Eigenschaften unterschiedlicher Stoßsysteme	11
1.1.1 Unterschiede im Protonen- und Elektronenstoß	13
1.1.2 Stöße mit hochgeladenen Ionen	17
1.1.3 Die Eigenschaften eines atomaren Targets	19
1.2 Die Stoßkinematik	23
1.3 Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Ersten Born- schen Näherung	26
1.3.1 Stoß- und photoneninduzierte Ionisation: Die Dipolnäherung .	26
1.3.2 Einfachionisation	28
1.3.3 Doppelionisation	30
2 Das Experiment	35
2.1 Erzeugung und Struktur des Projektilstrahls	35
2.2 Das Reaktionsmikroskop	38
2.2.1 Das Target	39
2.2.2 Das Spektrometer	41
2.2.3 Abbildungseigenschaften des Spektrometers	44
2.3 Bestimmung der Impulse	46
2.3.1 Berechnung der Longitudinalimpulse	46
2.3.2 Berechnung der Transversalimpulse und des Azimuthalwinkels	48
2.3.3 Impulsübertrag und Stoßkinematik	52
2.4 Auflösung und Akzeptanz des Reaktionsmikroskops	55
2.4.1 Das COLTRIM-Spektrometer	55
2.4.2 Das Elektronenspektrometer	57
2.4.3 Test der Spektrometerauflösung	62

3	Theorie der stoßinduzierten Ionisation	65
3.1	Ein exakter quantenmechanischer Ansatz	66
3.2	Die Bornsche Näherung	69
3.2.1	Die Erste Bornsche Näherung	70
3.2.2	Die Zweite Bornsche Näherung	72
3.2.3	Eine alternative Methode: Die 3C-Wellenfunktion	73
3.3	<i>Distorted Wave</i> -Rechnungen	74
3.3.1	Die CDW-EIS-Näherung	76
3.4	Die Methode der gekoppelten Kanäle	77
3.4.1	Die <i>Convergent Close-Coupling</i> -Näherung	79
3.4.2	Die CCC-Näherung zur Beschreibung der Doppelionisation . .	79
4	Einfachionisation	81
4.1	Einfach differentielle Wirkungsquerschnitte: Höhere-Ordnungs-Beiträge und Kern-Kern-Wechselwirkung	83
4.1.1	Die longitudinalen Impulsverteilungen	84
4.1.2	Die transversalen Impulsverteilungen	88
4.2	Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte	90
4.2.1	Der Einfluß der Kern-Kern-Streuung bei kleiner Störung . . .	91
4.2.2	Projektilladungsabhängigkeit bei kleiner Störung	96
4.2.3	Die Stoßdynamik bei mittleren Störungen	102
4.2.4	Die Dynamik in der Streuebene bei mittlerer und großer Störung	106
5	Doppelionisation	115
5.1	Totale Doppelionisationsquerschnitte und Ionisationsmechanismen . .	116
5.2	Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte	121
5.2.1	Experimentelle Ergebnisse	121
5.2.2	Vergleich mit der Theorie	125
	Zusammenfassung und Ausblick	133
A	Anhang	137
A.1	Der Rutherfordstreuquerschnitt	137
A.2	Doppelionisationsmechanismen in der Vielteilchen-Störungstheorie . .	139
A.3	Atomare Einheiten	141
	Literaturverzeichnis	143

Einleitung

Das Verständnis der Wechselwirkung zeitabhängiger elektromagnetischer Felder mit Materie, z.B. in atomaren und molekularen Stoßprozessen oder bei der Störung von Atomen und Molekülen in intensiven, ultra-kurzen Lichtpulsen ist einerseits ein traditionelles, gleichzeitig jedoch hoch aktuelles und stark wachsendes Forschungsgebiet in der modernen Atom-, Molekül- und optischen Physik. Neu entwickelte Imaging-Techniken für den Nachweis von Reaktionsprodukten [UMD 03], Laserpulse mit Femto- und sogar sub-Femtosekunden Zeitauflösung (siehe z.B. [BUU 03]), intensive Attosekundenpulse in Stößen mit hochgeladenen Ionen [MSU 97] verbunden mit dem Einsatz von modernsten Hochleistungsrechnern auf Seiten der Theorie erlauben es, die zentrale Fragestellung bei dieser Wechselwirkung, nämlich nach der Quantendynamik von Vielteilchensystemen auf extrem kurzen, atomaren Zeitskalen mit bisher nicht vorstellbarer Präzision zu untersuchen.

Im Rahmen dieser Arbeit gelang es erstmals, explizite Zweielektronenprozesse, nämlich die Doppelionisation von Helium im Stoß mit schnellen Ionen kinematisch vollständig zu vermessen. Dabei konnten nichtlineare Prozesse, welche unter anderem zu signifikanten Unterschieden in der Doppelionisation zwischen Protonen und Antiprotonen [AHK 86] führen, im Detail untersucht und einzelne dynamische Mechanismen identifiziert werden. Gleichzeitig wurde der wohl vollständigste Datensatz zur Einfachionisation von Helium gewonnen und damit jüngste, spektakuläre Ergebnisse [SMF 03a] über einen weiten Bereich der Stärke der Wechselwirkung hinweg verfolgt, analysiert und mit neuesten Rechnungen verglichen. Daraus ergaben sich neue Ansätze zur möglichen Erklärung der bisher gefundenen, überraschenden Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment [MFF 03, VNU03]. Ebenfalls aufgenommene, kinematisch vollständige Daten zur Fragmentation von H_2 im Ionenstoß, wo bisher lediglich intensiv diskutierte Ergebnisse zur Elektronenemission vorlagen [SSH 01], befinden sich zur Zeit noch in der umfangreichen Auswertung und sind deshalb nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Stoßinduzierte Ionisation spielt in vielen Bereichen der angewandten Physik, z.B. in der Plasma-, Astro- oder in der Strahlungsphysik eine herausragende Rolle. Seit einiger Zeit werden Strahlen hochgeladener Ionen, insbesondere auch das in die-

ser Arbeit untersuchte C^{6+} -Projektil, so erfolgreich zur Tumorthherapie eingesetzt (z.B. [JKK 01]), daß gerade in diesem Monat erstmals in Deutschland die Genehmigung zum Bau eines dezidierten Medizinbeschleunigers zur Tumorthherapie mit hochgeladenen Ionen in Heidelberg erteilt wurde. Die im Rahmen der hier vorgestellten Arbeit gewonnenen Daten geben den wohl detailliertesten Überblick über die Mechanismen des Energie- und Impulsübertrages bei der Wechselwirkung dieser für die Therapie hochrelevanten Projektilen mit einfachen Targetatomen und Molekülen. Atomare Stoßexperimente haben eine lange Tradition. Rutherford [Rut11] gelang es bereits Anfang des letzten Jahrhunderts, die Streuung geladener Teilchen an Atomen zu vermessen und, unter Vernachlässigung der Streuung an den Elektronen, in einem Zwei-Körper-Bild zu beschreiben. Seine Ergebnisse trugen entscheidend zum heutigen Verständnis der atomaren Struktur sowie der Dynamik in Zwei-Teilchen-Coulomb-Stößen bei. In den frühen 1930er Jahren entwickelte Bethe, ausgehend von der sogenannten Bornschen Näherung, eine erste quantenmechanische Beschreibung der stoßinduzierten Ionisation [Bet30]. Bei der Berechnung eines solchen Prozesses müssen mindestens drei Teilchen berücksichtigt werden: Das Projektil, der Targetkern und das ionisierte Elektron. Die von Bethe und Born entwickelte Methode basiert auf der quantenmechanischen Störungsrechnung und kann dann angewandt werden, wenn die Störung des Targetsystems durch das Feld des Projektils nur gering ist. Noch heute wird die „Erste Bornsche Näherung“ häufig zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte in atomaren Stößen verwendet.

Auf experimenteller Seite wurden vor 1960 in aller Regel nur totale Ionisationswahrscheinlichkeiten gemessen, da die Spektroskopie niederenergetischer Elektronen, die bei einer Ionisation emittiert werden, lange Zeit nicht möglich war [SDR97]. Erst 1969 gelang ein kinematisch vollständiges Experiment zur Einfachionisation von Helium im Elektronenstoß [EST 69]. Hier wurden in einer sogenannten $(e, 2e)$ -Reaktion die Impulse aller Stoßpartner nach dem Ionisationsprozeß vermessen, sodaß zum ersten Mal sowohl der Energie- als auch der Impulsübertrag vom Projektil auf das Targetsystem unter speziellen geometrischen Bedingungen vollständig bestimmt werden konnten. Beide Größen sind für das Verständnis der Stoßdynamik von entscheidender Bedeutung. Auch in Ion-Atom-Stößen wurde die Ionisation schon früh mit Hilfe elektronenspektroskopischer Methoden differentiell untersucht (z.B. [RJ63]), die kinematisch vollständige Vermessung solcher Prozesse wurde jedoch erst erheblich später durch die Entwicklung sogenannter „Reaktionsmikroskope“ möglich [UMD 97]. Experimentelle Ergebnisse aus Ion-Atom-Stößen, bei denen der Endzustandsimpulsraum vollständig aufgelöst wurde (sogenannte „vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte“), liegen erst seit 2001 vor [SMM 01]. Bei der dabei angewandten Technik wird nicht, wie bei konventionellen $(e, 2e)$ -Experimenten, die Streuung des Projektils gemessen, sondern es werden die Targetfragmente vollständig und simultan,

über einen großen dynamischen Bereich von Endimpulsen hinweg nachgewiesen. Diese auch in dieser Arbeit angewandte und weiterentwickelte Technik erlaubt es damit, nicht nur kinematisch vollständige Experimente auszuführen, sondern darüber hinaus nahezu den gesamten Vielteilchenendzustand zu erfassen, oder, quantenmechanisch ausgedrückt, das Quadrat der Vielteilchen-Endzustands-Wellenfunktion vollständig zu vermessen. Wie gezeigt werden wird, ist gerade dies von entscheidender Bedeutung, um nicht-lineare Prozesse, die über eine Beschreibung erster Ordnung hinausgehen, theorieunabhängig zu identifizieren.

Neue theoretische Ansätze, unterstützt durch die Entwicklung leistungsstarker Rechner und sicherlich auch stark motiviert durch die Verfügbarkeit hochaufgelöster experimenteller Daten, führten gerade in den letzten Jahren zu einer wesentlichen Verbesserung in der Beschreibung solcher dynamischer Prozesse. So konnte vor kurzem mit Hilfe der *Exterior Complex Scaling*-Methode das Drei-Körper-Coulomb-Problem, genauer gesagt die Ionisation von Wasserstoff im Elektronenstoß, numerisch und, wie behauptet wurde, im mathematischen Sinne exakt gelöst werden [RBI 99]. Diese Methode ist jedoch nur bei leichten Projektilen (Elektronen oder Positronen) und bei geringen Projektilgeschwindigkeiten anwendbar und damit im allgemeinen Fall wenig hilfreich. Bei der Beschreibung der Ionisation nicht nur von Wasserstoff, sondern auch von Mehr-Elektronen-Targetatomen bei sehr kleinen Energien, im Bereich starker zeitabhängiger Kopplung des Projektilfeldes mit dem Target, sind jedoch selbst totale experimentelle Wirkungsquerschnitte für die Einfachionisation von Helium im Antiprotonenstoß nicht in Übereinstimmung mit allen theoretischen Vorhersagen [KAL 03]. Für höhere Projektilenergien zeigte sich die *Continuum Distorted Wave – Eikonal Initial State*-Näherung (CDW-EIS) als besonders erfolgreich bei der Beschreibung der Elektronenemission im Ionenstoß [FPR91]. Sie ist in der Lage, die Bewegung des niederenergetischen Elektrons im Feld des Targettrumpfes und des Projektils nach der eigentlichen Ionisation und damit Beiträge höherer Ordnung im Sinne einer störungstheoretischen Behandlung zu berücksichtigen (siehe z.B. [MFS 99]). Auch vollständig differentielle Daten zur Ionisation von Helium durch positiv geladene Projektile wurden unter bestimmten geometrischen Bedingungen qualitativ erklärt [MSJ 02]. Aufgrund dieser Fortschritte in der theoretischen Beschreibung galt die stoßinduzierte Ionisation durch schwere Projektile, zumindest bei nicht zu kleinen Projektilgeschwindigkeiten, als weitgehend verstanden.

Überraschenderweise zeigten sich nun in neuesten Experimenten, bei denen nicht nur die Bewegung des Elektrons, sondern auch die Streuung des Projektils sowie der Impulsübertrag auf den Targetkern vermessen und somit also erstmals die vollständige Drei-Körper-Dynamik umfassend untersucht wurde (z.B. [MPS 01, SMF 03a]), auch bei mittleren bis hohen Geschwindigkeiten unter gewissen geometrischen Gegebenheiten drastische Abweichungen zu den theoretischen Vorhersagen. Die direkte

Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetkern oder möglicherweise sogar mit dem zweiten Targetelektron im Heliumatom scheint von entscheidender Bedeutung für das Verständnis der Drei-Teilchen-Dynamik zu sein. Die Berücksichtigung selbst nur der Wechselwirkung zwischen den Kernen ist bis heute mit größten theoretischen Schwierigkeiten verbunden und liefert bisher kaum zufriedenstellende Ergebnisse (z.B. [FMS 03]), wie in dieser Arbeit erstmals zusammenfassend dargestellt wird. Die wirklichen Gründe hierfür liegen weitgehend im Dunkeln. Möglicherweise spielt, wie bereits bemerkt, das zweite Elektron des Heliumtargets auch für hohe Projektilenergien eine wesentliche, bisher weitgehend vernachlässigte Rolle, sodaß selbst bei der Einfachionisation von Helium explizit das Vier-Teilchen-Problem gelöst werden müßte. Um diese Frage zu klären, wird zur Zeit im Rahmen einer weiteren Doktorarbeit ein kaltes atomares Wasserstofftarget aufgebaut.

Die Untersuchung der Doppelionisation ist sowohl experimentell als auch theoretisch erheblich aufwendiger als die der Einfachionisation, da nun tatsächlich vier Teilchen aktiv am Stoß beteiligt sind. Kinematisch vollständige Experimente zur Erforschung der Doppelionisation von Helium im Elektronenstoß, sogenannte $(e, 3e)$ -Reaktionen, gelangen erstmals 1998 [TLD 98, DMS 99]. Von großer Bedeutung für die theoretische Beschreibung dieses Prozesses ist die Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Korrelation, also der Wechselwirkung der beiden Targetelektronen untereinander. Dies erschwert die Targetbeschreibung im Vergleich zur Einfachionisation, bei der häufig ein effektives Ein-Elektronen-Bild verwendet wird, erheblich. Am erfolgreichsten ist bisher die *Convergent Close-Coupling*-Methode, bei der das dynamische Problem für vollständig korrelierte Wellenfunktionen im Anfangs- und im Endzustand numerisch gelöst wird [KBL 99]. Mit diesem Ansatz wurden bereits vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für die Photodoppelionisation in sehr guter Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten berechnet (z.B. [KB98]). Auch für $(e, 3e)$ -Reaktionen konnten die experimentellen Ergebnisse mit dieser Rechnung qualitativ und teilweise auch quantitativ beschrieben werden [DKS 01, LDD 03, DKS 03]. Anhand der in dieser Arbeit gewonnenen experimentellen Daten zur Doppelionisation im Protonenstoß, konnte erstmals auch die Abhängigkeit der Stoßdynamik vom Vorzeichen der Projektilladung detailliert studiert werden.

Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurden zwei Stoßsysteme experimentell untersucht: Die einfache und doppelte Ionisation von Helium durch Protonen bei einer Energie von 6 MeV und durch C^{6+} -Ionen bei einer Energie von 24 MeV. Im Vergleich mit experimentellen Studien anderer Stoßsysteme, bei denen hochgeladene Ionen und Elektronen als Projektile verwendet wurden, und im Vergleich mit unterschiedlichen theoretischen Modellen werden in der vorliegenden Arbeit, hauptsächlich anhand von vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten, die Unterschiede in den verschiedenen Stoßsystemen sowie der Gültigkeitsbereich der theoretischen Ansätze

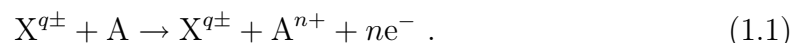
erstmal systematisch untersucht.

Im ersten Kapitel der vorliegenden Arbeit wird ein kurzer Überblick über die grundlegenden Eigenschaften der stoßinduzierten Ionisation gegeben. Kapitel 2 beinhaltet die Beschreibung der in dieser Arbeit verwendeten experimentellen Techniken. In Kapitel 3 werden verschiedene quantenmechanische Beschreibungen der stoßinduzierten Ionisation erläutert. In Kapitel 4 und 5 werden die in dieser Arbeit gewonnenen Ergebnisse für Einfach- und Doppelionisation vorgestellt und diskutiert.

Kapitel 1

Ionisation in Stößen geladener Teilchen mit Atomen

Bei Stößen von geladenen Teilchen mit neutralen Atomen können je nach Geschwindigkeit und Ladung des Projektils verschiedene Prozesse auftreten. Anregung und Ionisation des Targetatoms sind für unterschiedliche Projektile, wie Elektronen, Positronen, Antiprotonen oder auch Ionen möglich. Bei Ion-Atom-Stößen kommen außerdem Elektroneneinfang und, falls das Projektilion nicht vollständig ionisiert ist, auch Anregung bzw. Ionisation des Projektils vor. In dieser Arbeit wurden Stoßsysteme untersucht, bei denen die Ionisation des Targets der dominante Reaktionskanal ist. Die Reaktionsgleichung dieser Prozesse ist gegeben durch



Dabei ist q der Ladungszustand des positiv oder negativ geladenen Projektils X , und n die Anzahl der aus dem Target A emittierten Elektronen e^{-} . Das ionisierte Target A^{n+} wird auch „Rückstoßion“ genannt.

In diesem Kapitel soll ein Überblick über die charakteristischen Eigenschaften unterschiedlicher Stoßsysteme, über die Kinematik der Stoßprozesse, sowie über die Struktur der Winkelverteilung der emittierten Elektronen gegeben werden.

1.1 Eigenschaften unterschiedlicher Stoßsysteme

Ionisation im Stoß mit einem geladenen Projektil wird (nahezu ausschließlich) durch die Coulombwechselwirkung zwischen dem Projektil und dem Targetsystem verursacht. Dementsprechend hängen die beobachtbaren Größen der Reaktion, z.B. die totale Ionisationswahrscheinlichkeit (der „totale Wirkungsquerschnitt“), die Impulsverteilung der Targetfragmente oder der Energie- und Impulsübertrag vom Projektil

auf das Target (die „differentiellen Wirkungsquerschnitte“), hauptsächlich von der Ladung Z_P und Geschwindigkeit v_P des Projektils ab. Ebenso sind die spezifischen Targeteigenschaften, hier vor allem das Ionisationspotential I_P aber auch die elektronische Struktur des Targets, von entscheidender Bedeutung. Vor allem bei geringen Stoßgeschwindigkeiten v_P spielt auch die Projektilmasse m_P eine wichtige Rolle.

Um die Abhängigkeit von diesen Größen zu veranschaulichen, ist es sinnvoll, sich dem physikalischen Problem über die quantenmechanische Beschreibung des Stoßsystems zu nähern (näheres dazu in Kapitel 3). Hier befindet sich das Stoßsystem vor der Ionisation im Anfangszustand $|\phi_i\rangle$, in dem das Elektron im Target gebunden ist, danach befindet es sich im Endzustand $|\phi_f\rangle$, in dem sich das Elektron im Kontinuum des Targettrumpfes bewegt. Ist die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetsystem im Anfangs- und im Endzustand gering, d.h. ist einerseits die Stoßgeschwindigkeit v_P hoch genug und andererseits die Projektilladung Z_P niedrig, können vor und nach dem Stoß Projektil und Target als unabhängig voneinander angesehen werden. In diesem Fall wird der Anfangszustand als ein Produkt der Wellenfunktion des gebundenen Elektrons und einer einlaufenden ebenen Welle für das Projektil beschrieben. Der Endzustand entspricht dann einer auslaufenden ebenen Welle für das Projektil und einer „Coulombwelle“¹ für das ionisierte Elektron. Das Potential $V(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \sim Z_P / |\mathbf{R} - \mathbf{r}|$ (\mathbf{R} : Ort des Projektils, \mathbf{r} : Ort des Elektrons), mit dem Projektil und Targetelektron wechselwirken, kann dann als Störung des Targetsystems durch das Projektil behandelt werden. Im Rahmen der ersten Ordnung der quantenmechanischen Störungstheorie, der „Ersten Bornschen Näherung“, ergibt sich der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma \propto |\langle \phi_f | V(\mathbf{R} - \mathbf{r}) | \phi_i \rangle|^2 . \quad (1.2)$$

Berechnet man diese Übergangsamplitude, erhält man die Abhängigkeit des (totalen und differentiellen) Wirkungsquerschnitts (unter Vernachlässigung einer sich mit der Geschwindigkeit langsam ändernden Abhängigkeit von $\ln v_P$, z.B. [Ino71]) von den Projektileigenschaften:

$$\sigma \sim (Z_P / v_P)^2 . \quad (1.3)$$

Die Größe $\eta = Z_P / v_P$, mit dessen Quadrat der Ionisationsquerschnitt σ in der Ersten Bornschen Näherung skaliert, ist charakteristisch für ein Stoßsystem und wird auch „Störung“ genannt. Die Abhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeit von Z_P und v_P läßt sich anschaulich damit erklären, daß bei hohen Projektilladungen die Kraft auf das Targetsystem erhöht wird, wodurch ein Ionisationsprozeß wahrscheinlicher wird. Für niedrige Geschwindigkeiten v_P wird die Stoßzeit länger, so daß das

¹Die Coulombwelle ist die quantenmechanisch exakte Lösung zur Beschreibung eines Elektrons im Kontinuum eines Coulomb-Zentralpotentials.

Projektil länger in der Nähe des Targets verweilt, wodurch ebenfalls eine Wechselwirkung, die zur Ionisation des Targets führt, wahrscheinlicher wird. Aus Gl. 1.3 ist ebenfalls ersichtlich, daß (im Gültigkeitsbereich der Ersten Bornschen Näherung) der Ionisationsquerschnitt im wesentlichen unabhängig von der Projektilmasse m_P und dem Vorzeichen der Projektilladung Z_P ist. Somit sind in dieser Näherung die Wirkungsquerschnitte für Stöße mit Protonen und Elektronen identisch.

Die Erste Bornsche Näherung ist dann (weitgehend) gültig, wenn einerseits die Geschwindigkeit des Projektils v_P groß genug ist, und andererseits die Störung η nicht größer als etwa 1 a.u. ist (eine Erläuterung zu atomaren Einheiten (a.u.) findet sich in Anhang A.3). In diesem Fall ist das Projektil viel schneller als das im Target gebundene Elektron, und der Ionisationsprozeß geschieht durch die einmalige Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron. Wenn die Störung erhöht wird, d.h. es wird entweder die Geschwindigkeit des Projektils herabgesetzt (z.B. im Protonen- und Elektronenstoß) oder die Projektilladung erhöht (im Stoß mit hochgeladenen Ionen), treten Effekte auf, die in der Ersten Bornschen Näherung nicht berücksichtigt sind. Diese Effekte sollen im folgenden für Protonen- und Elektronenstoß sowie für Stöße mit hochgeladenen Ionen qualitativ diskutiert werden. Außerdem soll ein Überblick über die Targeteigenschaften gegeben werden, die den Stoßprozeß beeinflussen.

1.1.1 Unterschiede im Protonen- und Elektronenstoß

Vor allem bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten treten im Stoß mit Elektronen bzw. mit Protonen unterschiedliche Effekte auf, die einerseits auf die unterschiedliche Masse der Projektilen und andererseits auf ihre unterschiedliche Ladung zurückzuführen sind. Im Elektronenstoß ist bei langsamen Kollisionen außerdem der quantenmechanische Effekt des Elektronenaustauschs wichtig, der auf der Ununterscheidbarkeit des Projektilelektrons und des ionisierten Targetelektrons im Endzustand und dem Pauli-Prinzip beruht (z.B. [MM33, BBK 91, BB94]).

Die Projektilmasse

Die Tatsache, daß ein Proton 1836 mal schwerer ist als ein Elektron, führt dazu, daß sowohl der Impuls als auch die Energie eines Protons erheblich höher ist als bei einem Elektron gleicher Geschwindigkeit.

Der Einfluß des unterschiedlichen Impulses beruht vor allem darauf, daß in der quantenmechanischen Beschreibung eines Projektils vielmehr sein Impuls als seine Geschwindigkeit eine Rolle spielt. In der Ersten Bornschen Näherung wird das Projektil häufig durch eine Ebene Welle anstatt durch eine Coulombwelle beschrieben. Im Grenzwert unendlichen Projektilimpulses ist diese Näherung exakt und be-

schreibt deshalb bei gegebener Geschwindigkeit v_P den Protonenstoß besser als den Elektronenstoß. Häufig kann im Proton-Atom-Stoß sogar die semiklassische Näherung benutzt werden ([SDR97] und Referenzen darin), bei der das Projektil sich auf einer klassischen Trajektorie bewegt und nur das Targetsystem quantenmechanisch beschrieben wird.

Die verschiedenen Projektilenergien im Protonen- und Elektronenstoß bei gleicher Geschwindigkeit führen dazu, daß sich die Energie, die vom Projektil auf das Targetsystem übertragen werden kann, für die beiden Stoßsysteme unterscheidet. Die größtmögliche Energie, die das Targetelektron im Proton-Atom-Stoß aufnehmen kann, beträgt (in a.u., für $m_P \gg 1$ a.u.)

$$E_{e, \max} = 2 \cdot v_P^2 . \quad (1.4)$$

Dies ist genau dann der Fall, wenn das Projektil zentral mit dem Targetelektron stößt, wobei das Elektron in Vorwärtsrichtung mit der doppelten Projektilgeschwindigkeit emittiert wird. Dieser Mechanismus wird auch *Binary Encounter* (BE) genannt (z.B. [LRZ 90, SDR97], siehe Abbildung 1.1 (b)).

Im Elektron-Atom-Stoß ist die Energie, die das Targetelektron aufnehmen kann, geringer. In diesen Stößen sind außerdem das Projektilelektron und das ionisierte Targetelektron im Endzustand ununterscheidbar. Deshalb wird hier zwischen dem Elektron höherer und geringerer Energie unterschieden. Die Energie des langsameren Elektrons ist genau dann maximal, wenn die beiden Elektronen sich die zur Verfügung stehende Energie symmetrisch aufteilen. In diesem Fall ist

$$E_{e, \max} = \frac{1}{2} (v_P^2/2 - I_P) . \quad (1.5)$$

Die niedrigere Projektilenergie im Elektronenstoß führt außerdem dazu, daß die Ionisationsschwelle bei höheren Projektilgeschwindigkeiten als im Protonenstoß liegt. So reicht bereits bei Geschwindigkeiten von $v_P < 1,34$ a.u. (d.h. $\eta > 0,74$ a.u.) die kinetische Energie des Projektils nicht mehr aus, um das Ionisationspotential I_P eines Heliumatoms zu überwinden.

Effekte, die durch die unterschiedliche Projektilmasse hervorgerufen werden, treten hauptsächlich bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten auf. Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten ist der Einfluß der Projektilmasse auf den Ionisationsprozeß gering. In diesem Fall kann sowohl das Proton als auch das Projektilelektron in guter Näherung durch eine ebene Welle beschrieben werden, und der relative Energieverlust des Projektils in „weichen“ Stößen, d.h. in Stößen bei denen nur wenig Energie übertragen wird (diese Stöße liefern den überwiegenden Beitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt), ist vernachlässigbar klein.

Das Vorzeichen der Projektilladung

In der Ersten Bornschen Näherung sind die Wirkungsquerschnitte unabhängig vom Vorzeichen der Projektilladung (Gl. 1.3). Bei geringen Stoßgeschwindigkeiten reicht es durch die längere Stoßzeit jedoch nicht aus, nur die einmalige Wechselwirkung zwischen Projektil und Target entsprechend der Ersten Bornschen Näherung anzunehmen. Im perturbativen Ansatz können Beiträge höherer Ordnung, d.h. mehrfache Wechselwirkungen zwischen den Stoßpartnern, zum Teil durch die „Zweite Bornsche Näherung“ einbezogen werden, die zwei Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target berücksichtigt. Bereits in diesem Ansatz tritt ein Beitrag zum Wirkungsquerschnitt auf, der mit Z_p^3 skaliert und somit eine Abhängigkeit vom Vorzeichen der Projektilladung verursacht (siehe auch Kapitel 3.2).

Ist die Geschwindigkeit des Projektils vergleichbar mit der Geschwindigkeit des im Target gebundenen Elektrons ($v_p \lesssim 3$ a.u., d.h. $\eta \gtrsim 0,33$ a.u.), so ist die störungstheoretische Beschreibung des Stoßsystems durch die Bornsche Reihe wenig zweckmäßig. Das langreichweitige Coulomb-Potential des Projektils beeinflusst dann die Wellenfunktion des im Target gebundenen Elektrons bereits vor der Ionisation, und auch nach dem Stoß muß die Wechselwirkung zwischen Projektil und Target berücksichtigt werden. Diese „Zwei-Zentren-Effekte“ sind z.B. in den *Distorted Wave*-Modellen einbezogen (z.B. [FPR91, SDR97] und Kapitel 3.3). Aus Abb. 1.1 (a) ist ersichtlich, daß die mit einer solchen Methode berechneten totalen Wirkungsquerschnitte für Protonen und Antiprotonen bei kleinen Geschwindigkeiten differieren. Bei sehr niedrigen Stoßgeschwindigkeiten ($v_p < 1$ a.u.) muß im Ion-Atom-Stoß das System sogar in einem quasimolekularen Bild beschrieben werden, d.h. das aktive Elektron befindet sich während des Stoßes in einem Molekülorbital zwischen Projektil und Targetrumpf (z.B. [OKS 96, MO98]).

Die Bewegung des Elektrons im Zwei-Zentren-Potential des Projektils und des Targets verursacht nicht nur unterschiedliche totale Wirkungsquerschnitte für positiv und negativ geladene Projektile, sondern sie beeinflusst auch die Dynamik des Stoßprozesses. Das ionisierte Elektron wird nach dem Stoß von einem negativen Projektil abgestoßen, wohingegen es von einem positiv geladenen Projektil angezogen wird. Für negativ geladene Projektile wird also die longitudinale Impulsverteilung (longitudinal bzgl. des einlaufenden Projektilstrahls) des ionisierten Elektrons in Rückwärtsrichtung verschoben, bei positiv geladenen Projektile geht die Verschiebung entsprechend in die entgegengesetzte Richtung, also die Richtung des auslaufenden Projektils. Dieser Effekt wird auch *Post Collision Interaction* (PCI) genannt, und wurde z.B. für Protonen und Antiprotonen beobachtet [KWD 99].

Die Tatsache, daß ein positiv geladenes Projektil das aktive Elektron anzieht, führt zu einer Reihe von Mechanismen, die bei negativ geladenen Projektile nicht auftreten können. Dazu gehört z.B. der Einfang des Elektrons in einen im Projektil gebun-

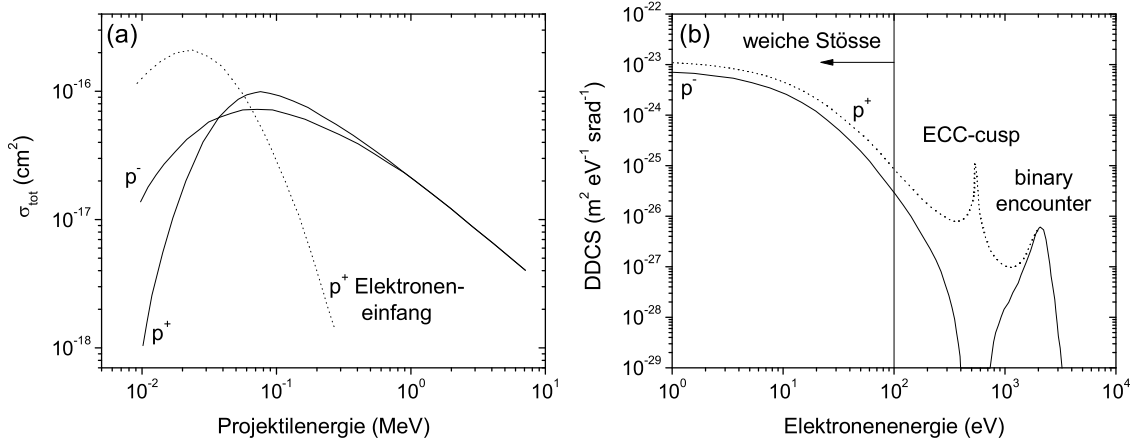


Abbildung 1.1: (a) Mit der CDW-EIS-Methode berechneter totaler Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation von Helium im Stoß mit Protonen bzw. Antiprotonen abhängig von der Energie des Projektils (durchgezogene Linien) (aus [FPR87]). Experimentell bestimmter Wirkungsquerschnitt des Elektroneneinfangs für den Proton-Helium-Stoß (gepunktete Linie) (aus [RDT 83, SG85]). (b) Doppelt differentieller Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dE_e d\Omega)$ der Ionisation von Helium durch 1 MeV Protonen und Antiprotonen für die Elektronenemission in Richtung des auslaufenden Projektils. Dargestellt sind die Ergebnisse der CDW-EIS-Rechnung für den Protonen- (gepunktete Linie) und den Antiprotonenstoß (durchgezogene Linie) (aus [FPR88]).

denen Zustand. Dieser Elektroneneinfang konkurriert bei kleinen Geschwindigkeiten mit der Targetionisation und ist im Proton-Helium-Stoß bei einer Projektilenergie von weniger als etwa 50 keV dominant (siehe Abb. 1.1 (a)). Das aktive Elektron kann jedoch auch in das Kontinuum des Projektils eingefangen werden, d.h. das Elektron bewegt sich nach dem Stoß ungebunden mit der Projektilgeschwindigkeit in Vorwärtsrichtung (siehe Abb. 1.1 (b)). Dieser Mechanismus wird auch *Electron Capture to the Continuum* (ECC) genannt (z.B. [FPR88, WKD 01, SDR97]). Bei negativ geladenen Projektilen ist im differentiellen Querschnitt an derselben Stelle ein Minimum zu beobachten, das mit der Abstoßung zwischen Projektil und Elektron erklärt werden kann (siehe Abb. 1.1 (b)). Ein dritter Mechanismus, der nur bei positiv geladenen Projektilen auftritt, ist die „Sattelpunkts-Ionisation“ (z.B. [Ols86, SDR97]). Hierbei befindet sich das aktive Elektron zwischen dem Projektil und dem Target auf dem Sattelpunkt des Zwei-Zentren-Potentials, während die beiden Kerne auseinanderlaufen. Dabei kann das Elektron durch die sich ändernde Höhe des Sattelpunktes ins Kontinuum gehoben werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ausschließlich das niederenergetische Elektronenspektrum, also „weiche“ Stöße, untersucht. Die oben geschilderten Ionisationsmechanismen ECC und Sattelpunktsionisation seien also nur der Vollständigkeit halber erwähnt, und sind nicht Gegenstand dieser Arbeit.

1.1.2 Stöße mit hochgeladenen Ionen

Generell können bei der Targetionisation im Stoß zwischen hochgeladenen Ionen und neutralen Atomen die gleichen Mechanismen wie im Protonenstoß (z.B. BE, ECC, Sattelpunktionisation, etc.) auftreten. Je höher jedoch die Projektilladung ist, desto größer werden die Unterschiede zum Protonenstoß. Diese Unterschiede beruhen einerseits darauf, daß hohe Störungen η auch bei schnellen Stößen ($v_P \gg 1$ a.u.) erreicht werden, und somit die Bewegung der gebundenen Elektronen während der Stoßzeit noch weitgehend vernachlässigbar ist. Andererseits wird das Target durch die höhere Feldstärke der hochgeladenen Projektile bereits bei entfernteren Stößen, d.h. bei größeren Stoßparametern² b , ionisiert.

Extrem hochgeladenen, relativistischen Projektile (z.B. U^{92+}) liefern die kürzesten und stärksten elektromagnetischen Felder, die mit heutiger Technik im Labor zugänglich sind. Hierbei können Leistungsdichten von etwa 10^{21} W/cm² bei einer Stoßzeit von weniger als einer Attosekunde ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$) erreicht werden. Im Vergleich dazu sind mit einem handelsüblichen Titan-Saphir-Laser nur Leistungsdichten von etwa 10^{15} W/cm² bei einer Pulslänge von 25 fs erreichbar (eine Gegenüberstellung von ionen- und lasererzeugten Feldern findet sich zum Beispiel in [BK]). Wird ein Atom solchen extremen Feldern ausgesetzt, dominiert vor allem die Mehrfachionisation, bei der viele Elektronen mit geringer kinetischer Energie emittiert werden. So konnte mit Uran-Ionen bei einer Energie von $15,5 \text{ MeV/amu}$ (=18 % Lichtgeschwindigkeit) die vollständige Ionisation eines Argontargets (Ar^{18+}) sowie Xe^{32+} beobachtet werden ([RUK 85, KUR 86]).

Theoretisch kann die Ionisation in diesen Stoßsystemen auch durch Photoionisation beschrieben werden. In einem Ansatz, der schon sehr früh von Fermi, Weizsäcker und Williams entwickelt wurde [Wei34, Wil34, Jac62], wird das vom Projektil induzierte zeit- und stoßparameterabhängige elektromagnetische Feld $\mathbf{E}(t, b)$ in zwei Pulse aufgeteilt, von denen sich einer entlang der Projektilstrahlrichtung und der andere senkrecht dazu ausbreitet. Die Fouriertransformierte $\mathbf{E}(\omega, b)$ liefert die Anzahl von „virtuellen“ Photonen $n(\omega, b)$, die in den beiden Pulsen pro Flächeneinheit und Frequenzintervall $d\omega$ enthalten sind. Die Ionisation kann dann mit der Absorption eines oder mehrerer virtueller Photonen erklärt werden (z.B. [MSU 97]).

In Abbildung 1.2 (a) sind die Impulsverteilungen der Targetfragmente und des Projektils nach der Einfachionisation von Helium im Stoß mit 1 GeV/amu U^{92+} -Ionen (88 % Lichtgeschwindigkeit, $\eta = 0,76$ a.u.) dargestellt. Wie aus der Abbildung ersichtlich ist, werden die Elektronen und die Rückstoßionen mehrheitlich in entgegengesetzten Richtungen emittiert (linkes Diagramm), sodaß die Impulsänderung der

²Der Stoßparameter b entspricht dem Abstand zwischen der Projektiltrajektorie und dem Targetkern. Die Angabe des Stoßparameters ist nur in der klassischen bzw. semiklassischen Näherung sinnvoll, da in der quantenmechanischen Beschreibung über diese Größe integriert werden muß.

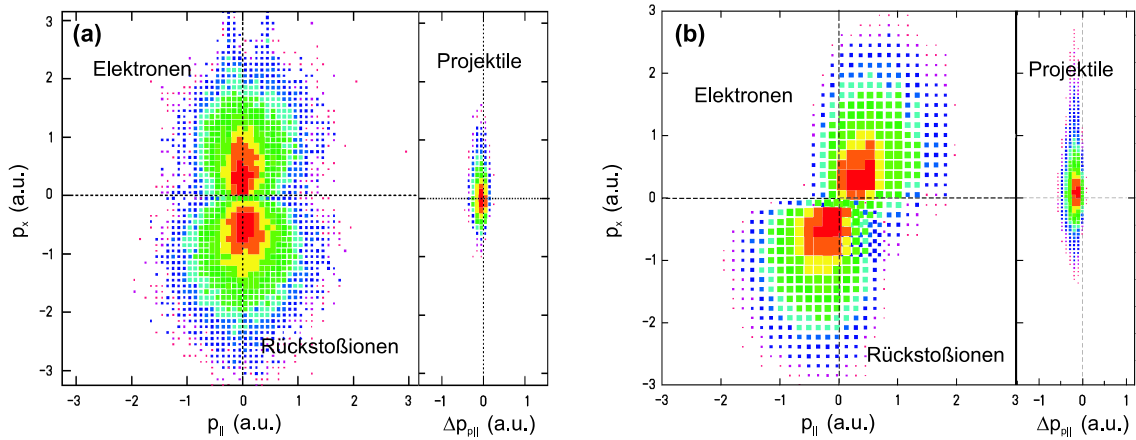


Abbildung 1.2: Projektion der Impulse aller Stoßpartner nach der Einfachionisation von Helium auf die Ebene, die durch den einfallenden Projektilstrahl und den Impuls des He^+ -Ions definiert ist. Die Dichteverteilung stellt den doppelt differentiellen Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dp_x dp_{\parallel})$ dar, wobei die x -Richtung durch den negativen Transversalimpuls des Rückstoßions $-p_{r\perp}$ definiert ist. Abbildung (a) zeigt die Impulsbilanz für den Stoß mit 1 GeV/amu U^{92+} -Ionen (aus [MSU 97]), Abb. (b) für den Stoß mit 3,6 MeV/amu Au^{53+} -Ionen.

Projektile (rechtes Diagramm) nur sehr gering ist. Darüber hinaus ist die Impulsverteilung der Targetfragmente in longitudinaler Richtung um Null zentriert. Dies kann anschaulich darauf zurückgeführt werden, daß die Kraft, die auf das Target durch das Projektil ausgeübt wird, im zeitlichen Mittel verschwindet. Aufgrund der sehr kurzen Stoßzeit kann außerdem die Wechselwirkung des freien Elektrons mit dem Projektil im Endzustand vernachlässigt werden. Das Target „dissoziiert“ also in dem vom Projektil induzierten transversalen Feld, wobei – wie in der Photoionisation – kaum Impuls auf das Targetsystem übertragen wird.

Bei höheren Störungen η , d.h. bei geringeren Stoßgeschwindigkeiten v_P , müssen wiederum Zwei-Zentren-Effekte berücksichtigt werden. Vor allem die Anziehung zwischen dem Projektil und dem ungebundenen Elektron im Endzustand – die bereits im vorangegangenen Kapitel diskutierte PCI – hat einen großen Einfluß auf die Impulsverteilung der Targetfragmente. Dieser Effekt kann im Stoß mit hochgeladenen Ionen noch erheblich stärker sein als im Protonen- oder Elektronenstoß. Abbildung 1.2(b) zeigt die Impulsverteilung der Stoßpartner in der Einfachionisation von Helium durch 3,6 MeV/amu Au^{53+} -Ionen ($\eta = 4.4$ a.u.). Ebenso wie im Stoß mit U^{92+} sind die Elektronen- und Rückstoßionenimpulse mehrheitlich in entgegengesetzte Richtungen orientiert und das Projektil ändert seinen Impuls kaum. Aufgrund der PCI sind hier jedoch die Elektronenimpulse stark nach vorne und die Rückstoßionenimpulse entsprechend nach hinten verschoben.

Bei Stößen zwischen hochgeladenen Ionen und Atomen kann es außerdem zu ei-

ner Reihe von anderen Prozessen kommen, die zur Ionisation des Targets führen. Bei einem Target mit vielen Elektronen kann z.B. der Einfang eines Innerschalenelektrons aus dem Target ins Projektil auftreten, der von einem *Auger*-Zerfall oder einem *Shakeoff*-Prozeß begleitet ist (z.B. [SSS 90]). Solche Mechanismen sind bei den Stoßsystemen, die im Rahmen dieser Doktorarbeit untersucht wurden, jedoch vernachlässigbar.

1.1.3 Die Eigenschaften eines atomaren Targets

Die Dynamik eines Stoßprozesses hängt nicht nur von der Ladung, Masse und Geschwindigkeit des Projektils, sondern auch entscheidend von der Struktur des Targets ab. Die Erste Bornsche Näherung beinhaltet die Struktur des Targets durch die Abhängigkeit vom Anfangs- und vom Endzustand $|\phi_{i,f}\rangle$ (siehe Gl. 1.2). Die quantenmechanische Beschreibung dieser Zustände ist für Targets mit mehreren Elektronen jedoch nicht einfach und bereits für ein Heliumtarget nicht mehr analytisch möglich. Deshalb muß das Target häufig vereinfacht beschrieben werden, um den Wirkungsquerschnitt berechnen zu können. In diesem Kapitel sollen, ausgehend von einem einfachen Zwei-Körper-Bild, die Eigenschaften eines atomaren Targets, der Einfluß der Targeteigenschaften auf die Stoßdynamik sowie die Möglichkeiten und Schwierigkeiten bei der theoretischen Beschreibung des Targetatoms qualitativ diskutiert werden.

Der Rutherford-Streuquerschnitt

Im einfachsten theoretischen Ansatz zur Beschreibug der Stoßionisation kann das Target durch ein ruhendes Elektron genähert werden. Sowohl der Targetkern als auch die elektronische Struktur des Targets wird in diesem Ansatz vernachlässigt. Für sehr schnelle Projektilgeschwindigkeiten, bei denen das Targetelektron während der Stoßzeit gleichsam im Target „eingefroren“ ist, kann man jedoch erwarten, daß diese Annahme eine berechtigte Vereinfachung darstellt. Der differentielle Wirkungsquerschnitt in diesem Zwei-Körper-Stoß ist dann gegeben durch die Rutherfordformel (siehe Anhang A.1), die in Abhängigkeit von der kinetischen Energie E_e des Elektrons nach dem Stoß geschrieben werden kann als (z.B. [RKM 92])

$$\frac{d\sigma}{dE_e} \propto \frac{2\pi}{m_e v_P^2} \left(\frac{Z_P}{E_e + I_P} \right)^2. \quad (1.6)$$

In diesem Ausdruck ist bereits einer spezifischen Targeteigenschaft Rechnung getragen, nämlich dem Ionisationspotential I_P , das überwunden werden muß, bevor das Elektron kinetische Energie aufnehmen kann.

Dieser sehr einfache aber fundamentale Ansatz zur Beschreibung der Stoßionisation zeigt dieselbe Abhängigkeit von der Projektilladung Z_P und Geschwindigkeit v_P wie die Erste Bornsche Näherung (Gl. 1.3). In Gleichung 1.6 werden jedoch im Gegensatz zur Ersten Bornschen Näherung nur direkte Stöße zwischen dem Projektil und dem Targetelektron berücksichtigt. Für harte Stöße mit Elektronenenergien $E_e \gg I_P$ ist diese Annahme berechtigt, und der Wirkungsquerschnitt zeigt das typische Skalierungsverhalten von $1/E_e^2$. Vor allem bei weichen Stößen wird der Wirkungsquerschnitt jedoch systematisch unterschätzt, da hier Dipolübergänge ähnlich der Photoionisation beitragen, für die eine quantenmechanische Beschreibung des Targets von wesentlicher Bedeutung sind.

Darüber hinaus werden auch weitere spezifische Eigenschaften eines atomaren Targets in Gleichung 1.6 vernachlässigt, die im folgenden näher beleuchtet werden sollen.

Das Compton-Profil

Ein augenfälliger Unterschied der in Gl. 1.6 gemachten Näherung zur quantenmechanischen Beschreibung des Targets ist, daß das Elektron nicht in Ruhe ist, sondern sich im Target mit einer Impulsverteilung, dem sogenannten „Compton-Profil“, bewegt. Diese Verteilung hängt vom quantenmechanischen Zustand des Elektrons ab. Der Begriff „Compton-Profil“ kommt ursprünglich aus der Röntgenspektroskopie, bei der monochromatische Photonen an Elektronen, die in einem Atom oder Festkörper gebunden sind, elastisch gestreut werden (z.B. [DuM33]). Durch das Geschwindigkeitsprofil der gebundenen Elektronen ist die spektrale Breite der gestreuten Strahlung größer als die des eingestrahlt Lichts. In der stoßinduzierten Ionisation führt das Compton-Profil zu einer Verbreiterung der Elektronenimpulse im Endzustand. Die Signatur des Compton-Profils konnte auch schon direkt im niederenergetischen Kontinuum nach der Ionisation in einem Stoß mit hochgeladenen Ionen beobachtet werden [MFS 99]. Auf theoretischer Seite kann ausgehend von Gl. 1.6 ein erweitertes Modell, das sogenannte *Binary Encounter*-Modell (z.B. [Vri67, SDR97]), verwendet werden, in dem die Bewegung des Elektrons im Anfangszustand berücksichtigt ist. In der Ersten Bornschen Näherung ist das Compton-Profil ebenfalls enthalten, da hier das Target quantenmechanisch beschrieben wird.

Die Rolle des Targetkerns

Ein anderes grundlegendes Merkmal atomarer Targets ist in Gl. 1.6 ebenfalls nicht enthalten, nämlich, daß das Target nicht nur aus einem Elektron, sondern auch aus einem Atomkern besteht. Bei der Stoßionisation handelt es sich also nicht um einen Zwei-Körper-Stoß, sondern schon beim einfachsten atomaren Target, dem Wasserstoffatom, um ein Drei-Körper-Problem. Das heißt einerseits, daß sich das Elektron

nach der Ionisation nicht kräftefrei bewegt, sondern sich nach wie vor im Potential des Targetkerns befindet. Andererseits kann das Projektil nicht nur am Elektron sondern auch am Targetkern gestreut werden.

Die Wechselwirkung zwischen dem Targettrumpf und dem ionisierten Elektron ist in der Ersten Bornschen Näherung dadurch berücksichtigt, daß der Endzustand des Elektrons durch eine Coulombwelle (siehe Kapitel 3.2) statt durch eine ebene Welle beschrieben wird. Für ein Wasserstoffatom ist dies die quantenmechanisch exakte Beschreibung dieser Wechselwirkung. Generell ist die Wechselwirkung des Targettrumpfes mit dem ionisierten Elektron vor allem bei weichen Stößen, also bei der Emission niederenergetischer Elektronen, von entscheidender Bedeutung (z.B. [FGM96]).

Die Kern-Kern-Streuung wird hingegen in der Ersten Bornschen Näherung nicht berücksichtigt. Bislang wurde angenommen, daß sie im Gültigkeitsbereich dieser Näherung keine Rolle spielt, da bei der Streuung des Projektils am Kern im allgemeinen zu wenig Energie übertragen wird³, um das Target zu ionisieren. In der Tat trägt die Kern-Kern-Streuung kaum zum totalen Wirkungsquerschnitt bei. Neueste experimentelle Ergebnisse zeigen jedoch, daß die Stoßdynamik selbst bei niedrigen Störungen (und hohen Projektilgeschwindigkeiten) durch diesen Mechanismus beeinflusst wird ([SMF03a] und Kapitel 4.2.1 dieser Arbeit). Bei hohen Störungen, wenn Effekte höherer Ordnung, also jenseits der Ersten Bornschen Näherung, zum Wirkungsquerschnitt beitragen, konnte ebenfalls gezeigt werden, daß die Kern-Kern-Streuung von entscheidender Bedeutung zum Verständnis der Stoßdynamik ist [MPS01]. Theoretisch kann die Kern-Kern-Streuung z.B. in der Zweiten Bornschen Näherung behandelt werden, in der neben der Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem Elektron auch die Projektil-Targettrumpf-Wechselwirkung berücksichtigt wird (z.B. [VNU03] und Kapitel 3.2.2). Auch in *Distorted Wave*-Modellen ist es möglich, die Kern-Kern-Streuung einzubeziehen. In diesem Fall wird die Wechselwirkung durch eine Modifizierung des Anfangs- und des Endzustands beschrieben (z.B. [OF01, Rod03, MFF03], und Kap. 3.3).

Die Abschirmung des Targetpotentials bei Mehrelektronenatomen

Bei den im vorangegangenen Abschnitt diskutierten Effekten wurde angenommen, daß das Target wie ein Wasserstoffatom lediglich aus einem Kern und einem Elektron besteht. Dies ist jedoch bereits bei einem Heliumtarget nicht mehr erfüllt, da hier das Target zwei Elektronen trägt.

In den meisten Rechnungen zur Einfachionisation wird die Rolle des passiven, nicht

³Diese Energie ergibt sich aus Gl. 1.6 bzw. A.8, wenn die Masse des Elektrons m_e durch die Masse des Targetkerns m_R ersetzt wird.

ionisierten Elektrons auf eine Abschirmung des Targetkernpotentials beschränkt. In diesem effektiven Ein-Elektronen-Bild hängt jedoch die Stärke der Abschirmung vom Abstand zwischen dem wechselwirkenden Teilchen und dem Targetkern ab. Das heißt, daß das Teilchen bei kleinen Abständen die volle Kernladung und bei sehr großen Abständen nur die Ladung $Z_{\text{eff}} = 1$ a.u. (im Falle eines einfach geladenen Rückstoßions) „sieht“. Dieser Effekt beeinflusst vor allem die Bewegung des aktiven Elektrons im Potential des Targettrumpfes aber auch die Streuung des Projektils am Targetpotential [Rod03, MPS 01].

Die Wechselwirkung zwischen dem Targettrumpf und dem Elektron kann in dem vereinfachten Modell, bei dem nur ein aktives Elektron berücksichtigt wird, auf verschiedene Weise behandelt werden. Die einfachste Möglichkeit besteht darin, das Target wasserstoffähnlich zu beschreiben, d.h. das Potential des Targets entspricht einem zentralen Coulombpotential $V_T \sim Z_{\text{eff}}/r^2$ (r ist der Abstand vom Targetkern), wobei die Ladung Z_{eff} einer effektiven Kernladung entspricht. In aller Regel wird bei der Einfachionisation von Helium die Ladung $Z_{\text{eff}} = 1,345$ a.u. gewählt, da sich in diesem Fall eine Bindungsenergie von $I_P = 24,6$ eV ergibt, die genau dem Ionisationspotential von Helium entspricht. In dieser Näherung ist jedoch vernachlässigt, daß die Stärke der Abschirmung des Kernpotentials vom Abstand des aktiven Elektrons vom Targetkern abhängt. Um diesen Umstand zu berücksichtigen, können kompliziertere Targetpotentiale verwendet werden. Die gebundenen Zustände sowie die Kontinuumszustände können dann numerisch durch die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung bestimmt werden. Zur Modellierung der zu verwendenden Potentiale gibt es verschiedene Ansätze, z.B. mit *Hartree Fock Slater*-Potentialen (HFS) (z.B. [HS63, TRW 98]), mit der *Optimized Potential Method* (OPM) (z.B. [ECM 92, GKS 00]) oder mit den *Optimized Effective Potentials* (OEP) (z.B. [TS76, FMU01]).

Die Elektron-Elektron-Korrelation

Ein weiterer Effekt, der bei Targets mit mehreren Elektronen auftritt, ist die „Korrelation“ der Targetelektronen untereinander (ein Überblick findet sich in [McG97]). Diese Korrelation ergibt sich daraus, daß ein Mehr-Elektronen-Zustand nicht dem Produkt der entsprechenden Ein-Elektronen-Zustände entspricht. Es gibt also Effekte, die nur in dem zusammengesetzten System, nicht aber bei voneinander unabhängigen Elektronen auftreten⁴. Die Elektron-Elektron-Korrelation spielt vor allem bei Mehrfachionisation eine große Rolle. Ohne diese Korrelation könnte ein Target bei einer einmaligen Wechselwirkung mit dem Projektil, wie sie in der Ersten Bornschen

⁴ Der Elektronenaustausch, der ebenfalls nur in Mehrelektronensystemen auftritt, wird im allgemeinen nicht als Korrelationseffekt gedeutet.

Näherung angenommen wird, nicht mehrere Elektronen emittieren. Die Korrelationseffekte, die zur Doppelionisation von Helium führen, sollen im Detail in Kapitel 5.1 und im Anhang A.2 diskutiert werden.

Die theoretische Beschreibung von korrelierten Mehrelektronensystemen ist in aller Regel sehr schwierig und das Verständnis von Korrelationseffekten in der Atomphysik ist noch recht unvollständig. Während Aspekte der Elektron-Elektron-Korrelation von der Theorie im Rahmen der *Configuration Interaction* (CI) für zeitunabhängige, gebundene Zustände berücksichtigt werden können, ist die Beschreibung von korrelierten Kontinuumszuständen und von dynamischer, also zeitabhängiger Korrelation, wie sie in Stößen mit geladenen Projektilen auftritt, nur mit extrem hohem Aufwand möglich. Modelle, die versuchen, diesen Effekten Rechnung zu tragen, werden an anderer Stelle in dieser Arbeit vorgestellt (z.B. Kapitel 3.4).

1.2 Die Stoßkinematik

Bei atomaren oder molekularen Fragmentationsprozessen, die durch Stöße mit geladenen Teilchen, einzelnen Photonen oder auch durch starke elektromagnetische Felder induziert werden, ergeben sich aus der Impuls- und Energieerhaltung einige Einschränkungen des Endzustandsimpulsraums. Eine allgemeine Betrachtung der daraus resultierenden Regeln für unterschiedliche Reaktionen findet sich z.B. in [UMD 97, US03]. In diesem Kapitel soll die Stoßkinematik nur für den Fall der Einfach- bzw. Mehrfachionisation des Targetatoms im Teilchenstoß diskutiert werden.

Der Endzustand eines Stoßsystems, nach der Ionisation eines neutralen Targets durch ein geladenes Projektil, ist dann vollständig bekannt (unter Vernachlässigung der Spins), wenn sowohl die Impulsänderung des Projektils $\Delta \mathbf{p}_p$ als auch die Impulse der Targetfragmente, also die Impulse der ionisierten Elektronen $\mathbf{k}_{e,j}$ und der Rückstoßionenimpuls \mathbf{p}_r , bestimmt werden. Ist N die Anzahl der freien Teilchen nach dem Stoß, so ist der Endzustandsimpulsraum $3N$ -dimensional. Aufgrund der Impuls- und Energieerhaltung erhält man bei einer durch Gleichung 1.1 gegebenen Reaktion unter der Annahme, daß das Targetatom vor dem Stoß ruht

$$\mathbf{p}_p^i = \mathbf{p}_p^f + \sum_{j=1}^n \mathbf{k}_{e,j} + \mathbf{p}_r \quad (1.7)$$

$$E_p^i = E_p^f + I_P + \sum_{j=1}^n E_{e,j} + E_r \quad (1.8)$$

Dabei sind \mathbf{p}_p^i und \mathbf{p}_p^f die Impulse des Projektils vor bzw. nach dem Stoß (siehe Abb. 1.3), E_p^i und E_p^f die entsprechenden kinetischen Energien des Projektils, $E_{e,j}$

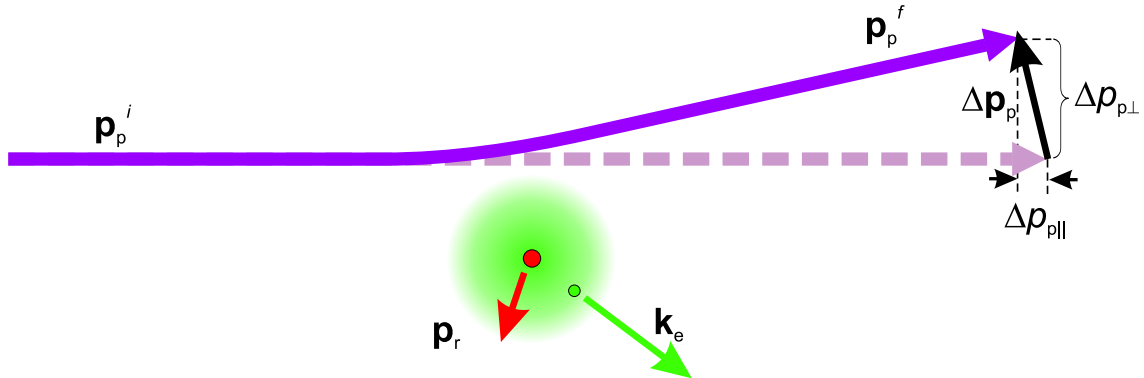


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung der Impulse in der Einfachionisation eines neutralen Targets durch ein geladenes Projektil. $\Delta \mathbf{p}_p$ ist die Impulsänderung des Projektils, \mathbf{p}_e und \mathbf{p}_r sind die Impulse des ionisierten Elektrons und des Rückstoßions.

die kinetischen Energien der emittierten Elektronen, E_r die Rückstoßionenenergie, I_P das Ionisationspotential des Targets und n die Anzahl der ionisierten Elektronen. Mit den Gleichungen 1.7 und 1.8 reduziert sich die Anzahl der unabhängigen Impulskomponenten auf die Anzahl $3N - 4$.

Die Gleichung zur Energieerhaltung (Gl. 1.8) lässt sich für Stoßsysteme mit großen Projektilenergien noch deutlich vereinfachen. Bei diesen Stößen ist die Impulsänderung des Projektils $\Delta \mathbf{p}_p$ und somit der Impulsübertrag auf die Targetfragmente \mathbf{q} im Verhältnis zum Anfangsimpuls des Projektils \mathbf{p}_p^i sehr klein. Daraus folgt, daß die Impulse der Targetfragmente in derselben Größenordnung liegen (typisch wenige a.u.). Somit kann die kinetische Energie des Rückstoßions E_r vernachlässigt werden, da sie etwa um den Faktor $u \cdot 1836$ mal kleiner ist (u : Anzahl der Nukleonen des Targets) als die kinetische Energie E_e eines emittierten Elektrons. Des weiteren kann für die Änderung der kinetischen Energie des Projektils (Projektilmasse M_p) folgende Näherung gemacht werden:

$$\Delta E_p = E_p^f - E_p^i \approx \frac{\mathbf{p}_p^i}{M_p} \cdot \Delta \mathbf{p}_p \quad (1.9)$$

Da die Impulse der Stoßpartner sich symmetrisch um die Achse, die durch die Richtung des einlaufenden Projektils gegeben ist, verteilen, ist es sinnvoll, die Impulse der Stoßpartner in einen Anteil parallel zum Projektilstrahl $\mathbf{p}_{||} = (0, 0, p_z)$ und einen Anteil senkrecht dazu $\mathbf{p}_{\perp} = (p_x, p_y, 0)$ zu unterteilen. Für das Skalarprodukt aus Gl. 1.9 erhält man damit

$$\mathbf{p}_p^i \cdot \Delta \mathbf{p}_p = |\mathbf{p}_p^i| |\Delta \mathbf{p}_{p||}| = M_p v_p \cdot \Delta p_{p||} \quad (1.10)$$

wobei v_p der Projektilgeschwindigkeit entspricht. Somit ergibt sich aus den Gleichungen 1.8 bis 1.10 bereits ohne Verwendung des Rückstoßionenimpulses die longi-

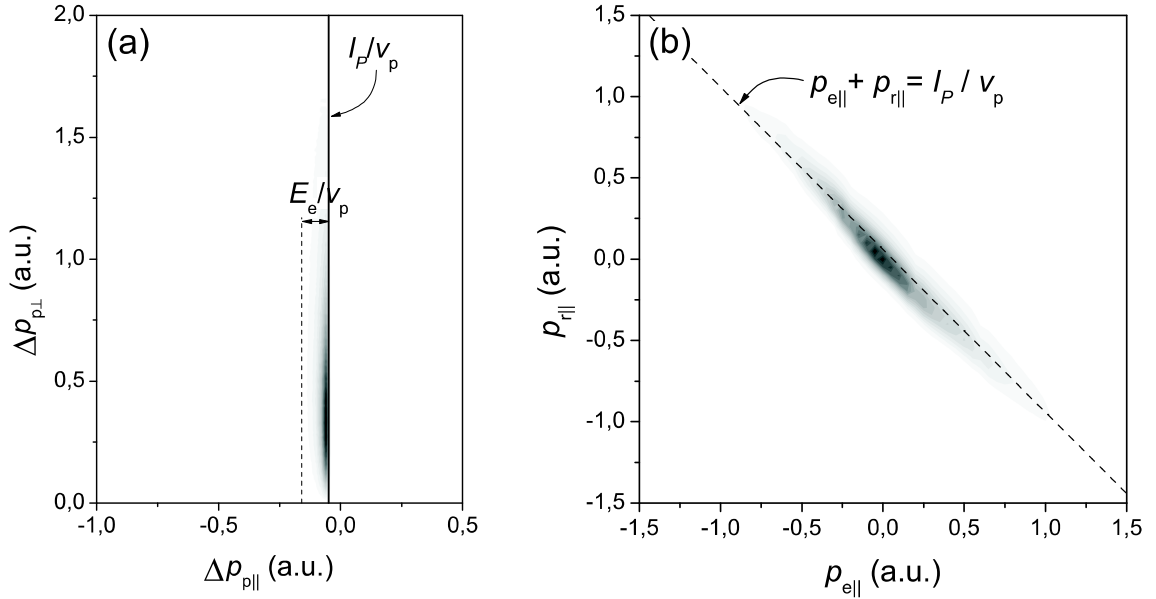


Abbildung 1.4: Einfachionisation von Helium durch 6 MeV Protonen. (a) Verteilung der Impulsänderung des Projektils. (b) Longitudinalimpulse der Targetfragmente. Die gestrichelte Linie ergibt sich aus der Impulsbilanz aus Gl. 1.11 mit $E_e = 0$ eV.

tudinale Impulsänderung des Projektils $\Delta p_{p\parallel}$ bzw. der longitudinale Impulsübertrag q_{\parallel}

$$q_{\parallel} = -\Delta p_{p\parallel} = \left(I_P + \sum_{j=1}^n E_{e,j} \right) \cdot \frac{1}{v_p} \quad (1.11)$$

Aus dieser Gleichung ergeben sich einige grundlegende Eigenschaften des Endzustandsimpulsraums nach einem Ionisationsprozeß. Da sowohl das Ionisationspotential I_P als auch die kinetische Energie der Elektronen $E_{e,j}$ positive Größen sind, muß die longitudinale Impulsänderung des Projektils $\Delta p_{p\parallel}$ immer negativ und kleiner als $-I_P/v_p$ sein. Im relativistischen Grenzfall, also für $v_p \rightarrow c$, entspricht diese Impulsänderung gerade dem Impuls eines Photons der Energie $h\nu = I_P + \sum E_{e,j}$. Bei großen Projektilgeschwindigkeiten v_p ist außerdem die longitudinale Verteilung des Impulsübertrags erheblich schmäler als die Verteilung seines Transversalimpulses. Somit ist in solchen Stoßsystemen der Impulsübertrag auf das Targetsystem nahezu senkrecht zur Projektilstrahlachse. Der genaue Winkel des Impulsübertragsvektors bezüglich der Vorwärtsrichtung ist unter Kenntnis der Elektronenenergien $E_{e,j}$ und des Betrags des Impulsübertrags q festgelegt und ergibt sich unter Zuhilfenahme von Gl. 1.11 aus $\arccos(q_{\parallel}/q)$.

In Abbildung 1.4 (a) ist eine für die Ionisation in schnellen Ion-Atom-Stößen typische Impulsübertragsverteilung dargestellt. Untersucht wurde hier die Einfachioni-

sation von Helium durch 6 MeV Protonen (d.h. $v_P = 15,5$ a.u.). Der Impulsübertrag zeigt genau das oben beschriebene Verhalten: In longitudinaler Richtung ist die Verteilung sehr schmal und die Änderung des Projektilimpulses ist nicht größer als $-I_P/v_P = -0,058$ a.u.. Im Gegensatz dazu ist die transversale Verteilung des Impulsübertrags deutlich breiter. In Abbildung 1.4 (b) sind die Longitudinalimpulse der Targetfragmente bzw. ihre Abhängigkeit voneinander dargestellt. Zwar ist die longitudinale Impulsverteilung sowohl des Elektrons als auch des Rückstoßions recht breit, jedoch kompensieren sich diese beiden Impulse weitgehend. Wird also ein Elektron in Vorwärtsrichtung emittiert, fliegt das Rückstoßion entsprechend nach hinten, und umgekehrt. Somit weist die Verteilung eine schmale diagonale Struktur von links oben nach rechts unten auf. Die Breite der Verteilung in der dazu senkrechten Richtung resultiert aus der Energiebreite der Elektronen.

1.3 Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Ersten Bornschen Näherung

Die Emissionscharakteristik der Elektronen in einem Ionisationsprozeß wird häufig anhand von vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnitten untersucht (siehe dazu auch Kapitel 4.2). Diese Querschnitte liefern die Wahrscheinlichkeit, das System nach der Ionisation in einem kinematisch vollständig⁵ bestimmten Endzustand vorzufinden. Die grundlegenden Eigenschaften der vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von Helium sind dabei für nicht zu große Störungen η bei allen Stoßsystemen recht ähnlich. Diese Eigenschaften sollen anhand der Ersten Bornschen Näherung im Vergleich mit der Photoionisation in diesem Kapitel näher erläutert werden.

1.3.1 Stoß- und photoneninduzierte Ionisation: Die Dipolnäherung

Die Ionisation von neutralen Atomen durch schnelle geladene Projektile kann häufig mit der Photoionisation verglichen werden. So ist die Methode der äquivalenten Photonen von Weizsäcker und Williams [Wei34, Wil34] (siehe auch Kap. 1.1.2) in der Kern- und Hochenergie-Physik [BB88] aber auch in der Beschreibung der Elektronenemission in hochenergetischen atomaren Stößen ein häufig verwendetes Modell [MSU 97]. Diese Methode beruht darauf, daß das Feld eines relativistischen Projektils bei nicht zu dichten Stößen nahezu identisch mit dem Puls eines freien

⁵„Kinematisch vollständig“ heißt, daß die Impulse aller Stoßpartner nach dem Ionisationsprozeß bekannt sind, nicht aber die Spins.

1.3. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Ersten Bornschen Näherung

Strahlungsfeldes ist. Aus diesem Grund kann der Wirkungsquerschnitt der relativistischen stoßinduzierten Ionisation direkt mit dem Wirkungsquerschnitt der Photoionisation in Verbindung gebracht werden.

Bereits in der Born-Theorie gibt es Übereinstimmungen zwischen der Photo- und Stoßionisation. So konnte in einer relativistischen Ersten Bornschen Näherung gezeigt werden, daß bei schnellen Stößen unter bestimmten kinematischen Bedingungen die Wechselwirkung zwischen Projektil und Target exakt der Absorption eines realen Photons entspricht [VU01]. Aber auch in nichtrelativistischen Stößen ergeben sich bei der Bestimmung der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte, vor allem für kleine Impulsüberträge q , Ähnlichkeiten zur Photoionisation.

In der Ersten Bornschen Näherung erhält man den differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma$ aus dem Betragsquadrat des Übergangsmatrixelements T_{1B} (d.h. $d\sigma \propto |T_{1B}^{fi}|^2$). Dieses Übergangsmatrixelement läßt sich in der nichtrelativistischen Bornschen Näherung (vgl. Kapitel 3.2.1) wie folgt schreiben:

$$T_{1B}^{fi} = \frac{1}{q^2} \langle \varphi_f | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \varphi_i \rangle . \quad (1.12)$$

Dabei ist \mathbf{q} der Impulsübertrag vom Projektil auf das Targetsystem, \mathbf{r} der Ort des aktiven Elektrons und $\varphi_{i,f}$ die nichtrelativistischen Wellenfunktionen des Elektrons im Anfangs- und im Endzustand.

Für kleine Impulsüberträge q kann die Exponentialfunktion in Gl. 1.12 in eine Potenzreihe entwickelt werden, wobei nur der führende Term berücksichtigt werden muß. Da aufgrund der Orthogonalität des Anfangs- und des Endzustands der erste Term (also der Monopolterm) verschwindet, erhält man in der Dipolnäherung

$$T_{1B}^{fi} = \frac{i}{q^2} \langle \varphi_f | \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} | \varphi_i \rangle . \quad (1.13)$$

Im Vergleich dazu ergibt sich für die Dipolübergangsamplitude T_γ^{fi} in der Photoionisation:

$$T_\gamma^{fi} = i\omega \langle \varphi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | \varphi_i \rangle . \quad (1.14)$$

Hierbei ist ω die Energie und \mathbf{e} der Polarisationsvektor des absorbierten Photons. Formal besteht eine sehr große Ähnlichkeit zwischen dem Ausdruck für die Stoßionisation aus Gl. 1.13 und der Photoionisation aus Gl. 1.14, wobei der Impulsübertrag im Stoß \mathbf{q} der Polarisation des Photons \mathbf{e} entspricht. Dies führt zu Parallelen in der Struktur der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte für die beiden Prozesse, die im folgenden diskutiert werden sollen. Diese Parallelen treten hauptsächlich dann auf, wenn einerseits die Störung η in dem untersuchten Stoßsystem nicht zu hoch und andererseits der im Stoß übertragene Impuls q klein ist. D.h. die Ähnlichkeiten sind vor allem dann sehr ausgeprägt, wenn sowohl die Erste Bornsche Näherung als auch die Dipolnäherung gültig ist.

1.3.2 Einfachionisation

Zur Untersuchung des vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitts in einem Photoionisationsprozeß reicht es aus, den Emissionsraumwinkel Ω_e des ionisierten Elektrons bezüglich der Polarisationsrichtung \mathbf{e} zu bestimmen (die Propagationsrichtung des Photons spielt häufig keine Rolle). In der Stoßionisation gibt es mehr Freiheitsgrade, da hier weder der Energie- noch der Impulsübertrag auf das Targetsystem festgelegt sind. Um hier den vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitt zu erhalten, muß also nicht nur der Emissionsrichtung des Elektrons sondern auch seine Energie E_e und der Impulsübertrag q bekannt sein. Die Richtung des Impulsübertragsvektors \mathbf{q} ist dann durch die Energie- und Impulserhaltung festgelegt (siehe Kapitel 1.2).

Wird ein Elektron aus einem s -Zustand durch ein einzelnes Photon ionisiert, befindet es sich nach der Absorption in einem p -Zustand. Daraus ergibt sich für den Winkel des Elektronenimpulses bezüglich der Polarisationsrichtung eine \cos^2 -Verteilung. Eine solche Verteilung ist in Abbildung 1.5 (a) (in einem dreidimensionalen Polarplot) dargestellt. Die grundlegenden Eigenschaften der Emissionscharakteristik sind dabei die Folgenden: Erstens ist die Verteilung symmetrisch zur Polarisationsrichtung \mathbf{e} und zweitens werden die Elektronen nicht senkrecht zu dieser Richtung emittiert. Somit zeigt die Winkelverteilung eine Struktur mit zwei symmetrischen Keulen.

Für die stoßinduzierte Ionisation ergibt sich in der Ersten Bornschen Näherung ein ähnliches Verhalten. Ein Beispiel für einen so berechneten vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitt ist in Abbildung 1.5 (b) gezeigt. In Entsprechung zur Photoionisation ist auch hier die Winkelverteilung zylindersymmetrisch zum Impulsübertragsvektor⁶ \mathbf{q} . Senkrecht zu \mathbf{q} tritt ein deutliches Minimum auf, wodurch sich ebenfalls eine Struktur mit zwei Keulen ergibt. Dieses Minimum folgt aus den Dipolauswahlregeln und ist somit bei kleinen Impulsüberträgen, also im Gültigkeitsbereich der Dipolnäherung, besonders ausgeprägt.

Im Gegensatz zur Photoionisation sind die beiden Keulen in der Stoßionisation nicht mehr spiegelsymmetrisch. Dies beruht darauf, daß in der Photoionisation die Polarisation nur eine Achse liefert, jedoch keine Vorzugsrichtung aufweist. In der Stoßionisation hingegen ist die Symmetrie gebrochen, da der Impuls, der im Stoß übertragen wird, unter festgelegten kinematischen Bedingungen immer in die gleiche Richtung deutet. Hier können sich folglich Keulen unterschiedlicher Größe ausbilden. Das größere Maximum in Richtung des Impulsübertrags \mathbf{q} wird auch *Binary-Peak*, und das kleinere in der entgegengesetzten Richtung *Recoil-Peak* genannt.

Die Doppelkeulen-Struktur des vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitts wurde experimentell sowohl im Elektronenstoß (siehe z.B. [Lah91, CMD94, Lah02]) als

⁶Dies gilt nur in der nichtrelativistischen Näherung. Für relativistische Stöße stimmt die Symmetrieachse nicht mit der Impulsübertragsrichtung [VU01].

1.3. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Ersten Bornschen Näherung

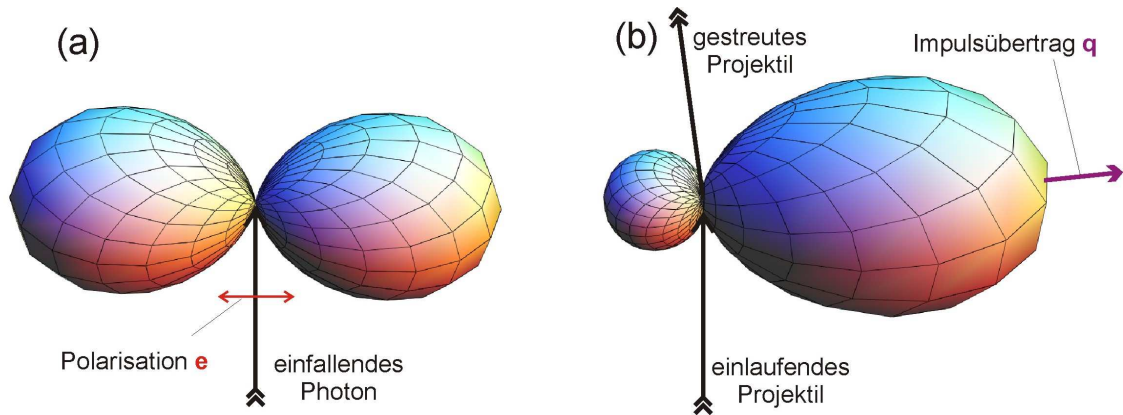


Abbildung 1.5: (a) Winkelverteilung eines aus einem s -Zustand ionisierten Photoelektrons. (b) Nach der Ersten Bornschen Näherung berechneter vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt eines aus dem s -Zustand im Stoß ionisierten Elektrons.

auch im Ionenstoß [SMM01] bestätigt. Die Ursache für diese Struktur wurde in einem klassischen Bild mit zwei unterschiedlichen Mechanismen erklärt [CMD94, Lah02]. Die Elektronen aus dem *Binary-Peak*, die in Richtung von \mathbf{q} emittiert werden, wechselwirken in einem direkten (binären) Stoß mit dem Projektil, wobei der Targetrumpf passiv bleibt. Im Gegensatz dazu stoßen die Elektronen aus dem *Recoil-Peak* in einem ersten Schritt mit dem Projektil, werden dann jedoch in einem zweiten Schritt vom Targetrumpf zurückgestreut [MCH72]. Dabei muß der Targetrumpf den Rückstoß (engl.: *recoil*) sowohl des Projektils als auch des ionisierten Elektrons kompensieren. Quantenmechanisch kann die beobachtete Struktur als die Signatur der dominanten Dipolübergänge verstanden werden, da die ionisierten Elektronen sich nach einem solchen Übergang in einem p -Zustand befinden. Auch in dieser Erklärung beruht der Effekt auf der Wechselwirkung zwischen dem Targetrumpf und dem ionisierten Elektron.

Das Verhältnis der Höhe des *Binary-* zu der des *Recoil-Peaks* hängt sehr sensitiv von den gewählten kinematischen Bedingungen ab. Allgemein läßt sich sagen, daß die relative Intensität des *Recoil-Peaks* mit steigendem Impulsübertrag q und mit steigender Energie E_e abnimmt [EJK 86]. Bei extrem kleinen Impulsüberträgen, im sogenannten *Photo Limit*, sind die beiden Keulen nahezu gleich stark ausgeprägt. Ist der Impulsübertrag jedoch sehr groß, verschwindet der *Recoil-Peak* ganz. Hierbei spricht man vom *Binary Limit*.

Bereits aufgrund der oben diskutierten allgemeinen Eigenschaften der Ersten Bornschen Näherung, lassen sich in vielen Fällen Beiträge höherer Ordnung in den experimentellen Daten identifizieren, ohne dabei die Rechnung explizit durchführen zu müssen. Vor allem die Verletzung der Symmetrie bezüglich der Impulsübertrags-

richtung ist dabei ein eindeutiger Hinweis, daß eine Erste-Ordnungs-Näherung den Querschnitt nicht beschreiben kann (siehe z.B. [EJK 86, SMP 02, SMF 03a] und Kapitel 4.2 dieser Arbeit). Dabei tritt häufig auch ein signifikanter Beitrag von Übergängen auf, die nach den Dipolauswahlregeln verboten sind (z.B. [SMP 02, SMF 03a]). Die theoretische Beschreibung des Verhältnisses von *Binary*- zu *Recoil-Peak* ist ebenfalls in aller Regel in der Ersten Bornschen Näherung sehr schwierig (z.B. [SAC90, MSJ 02]). In der Tat hat sich herausgestellt, daß die Reproduktion dieses Verhältnisses ein entscheidender Test theoretischer Modelle sowohl bezüglich der Targetbeschreibung (z.B. [MSJ 02]) als auch bezüglich der Beschreibung der Projektil-Target-Wechselwirkung (z.B. [MWW98]) ist. Auf diesen Sachverhalt wird in dieser Arbeit an anderer Stelle im Detail eingegangen (siehe Kap. 4.2).

1.3.3 Doppelionisation

In der Doppelionisation ist zur Bestimmung der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte die Kenntnis der Impulse zweier Elektronen notwendig. Hier ist der Endzustand dann kinematisch vollständig bestimmt, wenn der Impulsübertrag q , die dreidimensionalen Emissionswinkel $(\Omega_{e1}, \Omega_{e2})$ und die Energien (E_{e1}, E_{e2}) der beiden Elektronen bekannt sind. Da dadurch der Endzustandsimpulsraum erheblich komplizierter als in der Einfachionisation ist, wurden in dieser Arbeit die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte für eine möglichst einfache Kinematik untersucht. Die kinematischen Bedingungen wurden so gewählt, daß die Impulse aller beteiligter Teilchen in derselben Ebene (der sog. „Streuebene“) liegen und die „Exzeßenergie“ $E_{ex} = E_{e1} + E_{e2}$ symmetrisch unter den beiden emittierten Elektronen aufgeteilt wird ($E_{e1} = E_{e2}$). Für diese Situation ergeben sich einige einfache Eigenschaften des Wirkungsquerschnitts in der Ersten Bornschen Näherung, die im folgenden im Vergleich mit der Photodoppelionisation vorgestellt werden sollen.

In der Photodoppelionisation schreibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma$ für den Dipolübergang aus einem s^2 -Zustand unter den oben beschriebenen kinematischen Bedingungen als Funktion der Emissionswinkel der Elektronen bzgl. der Polarisationsrichtung in der Streuebene ϑ_1, ϑ_2 nach einer Parametrisierung aus [HSW 91] als

$$d\sigma(\vartheta_1, \vartheta_2) \propto (\cos \vartheta_1 + \cos \vartheta_2)^2 \cdot G(\Delta\vartheta) . \quad (1.15)$$

Dabei ist $\Delta\vartheta$ der Winkel zwischen den Impulsvektoren der beiden Elektronen und G der sogenannte Korrelationsfaktor⁷. Ein mit dieser Gleichung berechneter vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt ist in Abbildung 1.6 (a) dargestellt.

Der Wirkungsquerschnitt weist vier Maxima auf, die wie folgt erklärt werden können: Unterdrückt sind die Ereignisse, bei denen entweder die Elektronen in entgegenge-

⁷Ein Ausdruck für den Korrelationsfaktor G findet sich in [HSW 91, BS00].

1.3. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Ersten Bornschen Näherung

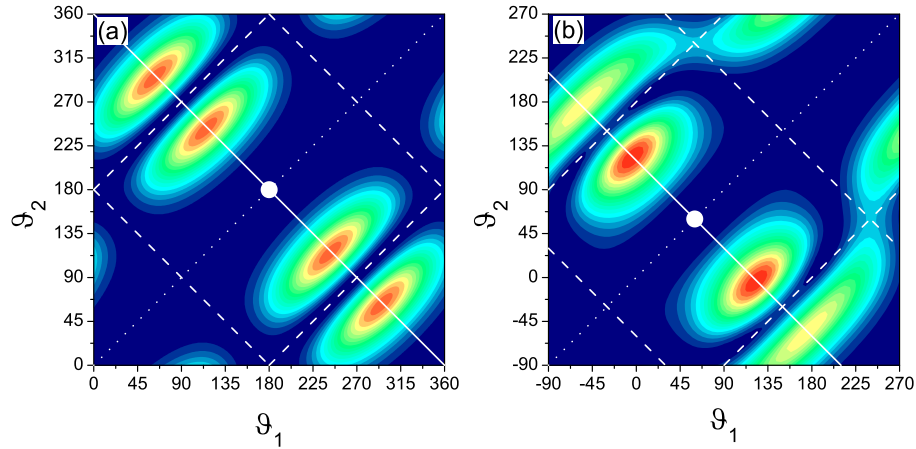


Abbildung 1.6: Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt bei koplanarer Geometrie und bei symmetrischer Energieaufteilung (zwischen den beiden emittierten Elektronen) für die Photoionisation (a) (berechnet nach Gleichung 1.15) und die stoßinduzierte Ionisation (b) (Erste Bornsche Näherung) (siehe Text). ϑ_1 und ϑ_2 sind die Emissionswinkel der beiden Elektronen bzgl. der Polarisationsrichtung bzw. der Richtung des auslaufenden Projektilstrahls.

setzter Richtung emittiert werden ($\vartheta_1 = \vartheta_2 \pm 180^\circ$) oder der Summenimpuls der beiden Elektronen senkrecht zur Polarisation gerichtet ist ($(\vartheta_1 + \vartheta_2)/2 = \vartheta_e \pm 90^\circ$, ϑ_e : Winkel der Polarisationsrichtung). In dem in der Abbildung gezeigten Fall liegt ϑ_e bei 0° bzw. 180° . Diese Minima (gestrichelte Linien in Abb. 1.6 (a)) repräsentieren die Dipolauswahlregeln und ergeben sich aus dem ersten Faktor in Gl. 1.15, der der \cos^2 -Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts in der Einfachionisation entspricht. Ein weiteres Minimum tritt auf, wenn die Elektronen in gleicher Richtung emittiert werden (gepunktete Linie). Dieses Minimum ergibt sich aus dem Korrelationsfaktor G , der die Abstoßung der beiden Elektronen im Endzustand beschreibt. Darüber hinaus zeigt der Wirkungsquerschnitt die folgenden allgemeinen Symmetrieeigenschaften: Erstens ist die Winkelverteilung der Elektronen symmetrisch zur ersten Winkelhalbierenden. Dies folgt aus der Ununterscheidbarkeit der beiden Elektronen mit gleicher Energie. Zweitens ist die Verteilung wie in der Einfachionisation symmetrisch zur Polarisationsrichtung. Die durchgezogene Linie liefert die Symmetrieachse und entspricht der Situation, daß der Summenimpuls der Elektronen in Richtung der Polarisation zeigt. Drittens haben alle vier Maxima die gleiche Intensität. Dies liegt daran, daß im Falle der Photoionisation die Polarisation keine Vorzugsrichtung vorgibt und somit der Wirkungsquerschnitt invariant bezüglich einer Verschiebung der Winkel um 180° ist. Wie sich unter Berücksichtigung der beiden anderen Symmetrieeigenschaften mit einfachen geometrischen Überlegungen zeigen läßt, sind also alle vier Maxima identisch.

Die theoretische Winkelverteilung für die stoßinduzierte Doppelionisation ist in Abbildung 1.6 (b) dargestellt (vgl. auch Abb. 5.4). Dabei läuft der Projektilstrahl bei 180° ein und bei etwa 0° wieder aus (unter Vernachlässigung des kleinen Projektilstreuwinkels). Unter den gewählten kinematischen Bedingungen ist der Winkel des Impulsübertragsvektors etwa 60° . Bei der Berechnung des Wirkungsquerschnitts wurde die CCC-Näherung zur Bestimmung der korrelierten Targetzustände und die Erste Bornsche Näherung zur Beschreibung der Projektil-Target-Wechselwirkung verwendet (siehe Kap. 3.4.2). Der so berechnete Wirkungsquerschnitt zeigt große Ähnlichkeit zu dem der Photodoppelionisation. Auch hier tritt die charakteristische Struktur mit vier Maxima auf. Dies kann als die Signatur der Dipolauswahlregeln (gestrichelte Linien) und der Abstoßung der Elektronen im Endzustand (gepunktete Linie) verstanden werden. Darüber hinaus sind auch bei der stoßinduzierten Ionisation Symmetrien zu beobachten. Zum einen besteht die Symmetrie zur ersten Winkelhalbierenden aufgrund der Ununterscheidbarkeit der emittierten Elektronen, zum anderen ist die Verteilung symmetrisch zur Impulsübertragsrichtung \mathbf{q} . Die durchgezogene Linie ist dabei die Symmetrieachse und entspricht der Situation, daß der Summenimpuls der Elektronen entweder in Richtung von \mathbf{q} oder von $-\mathbf{q}$ zeigt. Diese Symmetrie ist, in Entsprechung zur Einfachionisation, eine allgemeine Eigenschaft der Ersten Bornschen Näherung und ansonsten unabhängig von der expliziten Beschreibung des Vier-Teilchen-Systems.

Im Gegensatz zur Photodoppelionisation ist die Intensität der vier Maxima in der Stoßionisation nicht mehr identisch, sondern die Maxima in der Mitte der Diagramme sind höher als die Äußerer. Im Vergleich mit der Einfachionisation lassen sie sich als *Binary- und Recoil-Peak* verstehen. Bei den beiden inneren Maxima zeigt der Summenimpuls der Elektronen in Richtung des Impulsübertrags \mathbf{q} . Dies entspricht dem *Binary-Peak* in der Einfachionisation. Bei den äußeren Maxima zeigt der Summenimpuls, entsprechend dem *Recoil-Peak* der Einfachionisation, in die entgegengesetzte Richtung. Somit ist auch die unterschiedliche Höhe der Maxima, wie bei der Einfachionisation, mit der in einem Stoß eindeutig vorgegebenen Richtung des Impulsübertrags und der deshalb gebrochenen Symmetrie zu verstehen.

Experimentell wurde sowohl die Photodoppelionisation (für einen Überblick siehe [BS00]) als auch die stoßinduzierte Doppelionisation (z.B. [DKS01]) kinematisch vollständig untersucht. Dabei konnte die oben beschriebene generelle Struktur der Winkelverteilung bestätigt werden. Die in der Stoßionisation auftretenden Abweichungen, vor allem die Verletzung der in der Ersten Bornschen Näherung geforderten Symmetrie zur Impulsübertragsrichtung, die unter der hier diskutierten Geometrie auftritt, erlaubt es häufig, Beiträge höherer Ordnung in der Projektil-Target-Wechselwirkung allein anhand der experimentellen Daten zu identifizieren (siehe z.B. [DKS03, LDD03]). Alle experimentellen vollständig differentiellen Daten

1.3. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Ersten Bornschen Näherung

vor dieser Arbeit stammen aus Elektronenstoßexperimenten. Im Rahmen dieser Arbeit konnten zum ersten Mal vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für die Doppelionisation im Proton-Helium-Stoß gewonnen werden [FMD 03]. Somit ist es erstmals möglich, die Projektiladungsabhängigkeit der Höheren-Ordnungs-Beiträge zu untersuchen. Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden im Detail in Kapitel 5 erläutert.

Kapitel 2

Das Experiment

Die experimentelle Untersuchung von atomaren Stoßprozessen bei denen Ionisation, elektronische Anregung und Ladungstransfer auftreten, bietet durch den Vergleich mit theoretischen Beschreibungen einen tiefen Einblick in die Reaktionsmechanismen und die Dynamik des Mehr-Körper-Problems. Die experimentelle Herausforderung hierbei ist, möglichst die die ganze kinematische Information der beobachteten Reaktion zu gewinnen, d.h. die Impulskomponenten aller beteiligten Teilchen im Anfangs- und im Endzustand mit guter Auflösung zu bestimmen. Dieses Ziel stellt hohe Ansprüche an die Qualität des Projektilstrahls, des Targets und des verwendeten Spektrometers, mit dem die Impulse bestimmt werden. Die in dieser Arbeit eingesetzten experimentellen Techniken sollen in diesem Kapitel beschrieben werden.

2.1 Erzeugung und Struktur des Projektilstrahls

Im Rahmen dieser Arbeit wurden mehrere Experimente am MP-Tandem-Beschleuniger des Max-Planck-Instituts für Kernphysik (MPI-K) in Heidelberg durchgeführt. Mit diesem Beschleuniger können gepulste Strahlen unterschiedlicher Ionensorten über einen breiten Energiebereich erzeugt werden. Negativ geladene Ionen werden in eine Beschleunigungsstrecke eingeschossen und von einer positiven Hochspannung elektrostatisch angezogen. Diese Hochspannung wird mit Hilfe eines Van-de-Graaff-Generators erzeugt und beträgt am Tandem des MPI-K maximal 13 MV. Am Hochspannungsterminal werden die Ionen durch eine sogenannten *Stripper*-Folie bzw. ein *Stripper*-Gas umgeladen (engl.: *stripped*) und als positive Ionen von der Hochspannung wegbeschleunigt. Die maximal erreichbare Energie hängt also vom Ladungszustand der gewünschten Ionensorte ab und beträgt für Protonen 26 MeV. Am MPI-K sind jedoch auch höhere Strahlenergien unter Verwendung eines Hochfrequenz-Nachbeschleunigers möglich.

Von besonderer Bedeutung für Experimente mit Reaktionsmikroskopen, wie sie in

dieser Arbeit durchgeführt wurden, ist die Pulsung des Projektilstrahls, da bei diesen Messungen die Flugzeiten des ionisierten Targets und der emittierten Elektronen bestimmt werden müssen. In früheren Experimenten wurde zwar auch mit kontinuierlichen Projektilstrahlen gearbeitet, dann muß zur Flugzeitbestimmung jedoch das Projektil in Koinzidenz zu den Targetfragmenten gemessen werden (siehe z.B. [Sch98]). Um das gemessene Projektil eindeutig einem beobachteten Ionisationsprozeß zuordnen zu können, sind bei diesen Messungen nur sehr geringe Strahlströme möglich. Die Pulsung bietet nun den Vorteil, daß das Zeitsignal des Projektilpulses als Referenzzeitpunkt zur beobachteten Ionisation verwendet werden kann, sofern die Pulslänge ausreichend kurz ist (weniger als 1 ns). Vor allem bei der Untersuchung von Stoßsystemen, bei denen der totale Ionisationsquerschnitt sehr gering ist, kann gegenüber Experimenten mit kontinuierlichem Strahlstrom durch die Pulsung eine erhebliche kürzere Meßzeit erreicht werden.

Am Tandem-Beschleuniger des MPI-K wird der Ionenstrahl sowohl mit Hilfe hochfrequenter elektrischer Ablensysteme (*Chopper*) als auch mit einem Energiemodulationssystem (*Buncher*) gepulst (Details hierzu finden sich z.B. in [Völ75]). Bei einem Chopper wird der kontinuierliche Teilchenstrahl mit einem Hochfrequenz-Ablenk Kondensator über eine Blende abgelenkt. Hinter der Blende treten dann zweimal pro Periode der Hochfrequenzspannung Strahlpulse auf, deren Breiten je nach der am Kondensator angelegten Hochfrequenz geringer als 1 ns sein können. Vorteil dieser Pulsungstechnik ist die hohe Untergrundfreiheit des gepulsten Strahls, dabei geht jedoch ein großer Anteil der primären Strahlintensität verloren. Deshalb wird dieses System mit einem Buncher kombiniert. In einem solchen Energiemodulator werden die Ionen durch eine elektrische Wechselspannung (im Idealfall eine Sägezahnspannung) entlang der Strahlachse verzögert bzw. beschleunigt, je nach dem Zeitpunkt, zu dem sie den *buncher* durchfliegen. Dadurch ändern die Ionen ihre relative Geschwindigkeit und somit ihren räumlichen Abstand, so daß der Strahl in einem Fokuspunkt zu schmalen Pulsen gebündelt wird. Durch eine Kombination dieser beiden Techniken läßt sich sowohl eine hohe Untergrundfreiheit als auch eine hohe Strahlintensität realisieren.

In Abbildung 2.1 ist der Tandem-Beschleuniger schematisch dargestellt. Auf der Niederenergie-Seite des Beschleunigers, also zwischen Ionenquelle und dem Tandem-Tank, befinden sich der Pre-Chopper und der Buncher, mit denen der Strahl bereits vor der Hauptbeschleunigung gepulst wird. Hinter dem Tandem befindet sich der Hochenergie-Chopper, der die endgültige Pulsbreite bestimmt. Alle Pulsungselemente müssen bezüglich ihrer Phase so aufeinander abgestimmt sein, daß sowohl eine kurze Pulsbreite als auch eine hohe Strahlintensität am Reaktionsort erreicht wird. Die Grundfrequenz des Pulsungssystems beträgt 13,56 MHz, was der 8. Subharmonischen der Nachbeschleunigerfrequenz entspricht (108.48 MHz), der Pre-Chopper

2.1. Erzeugung und Struktur des Projekttilstrahls

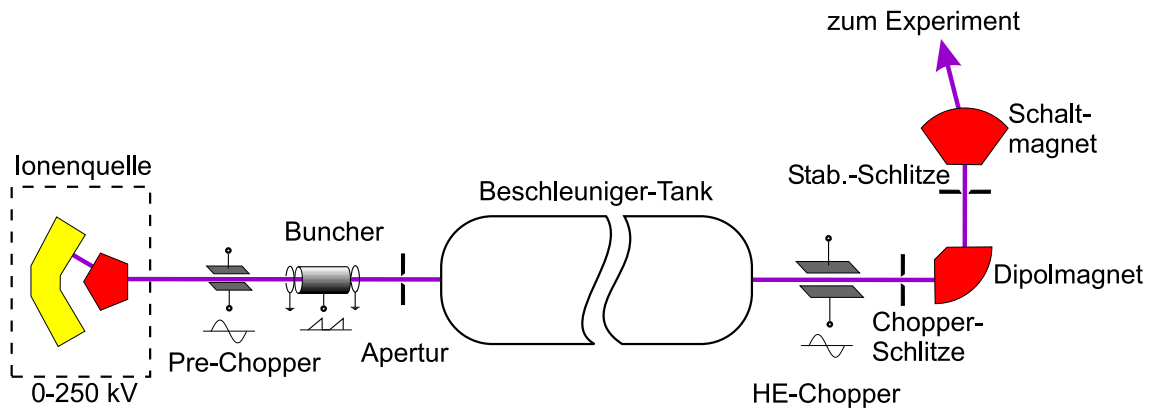


Abbildung 2.1: Der MP-Tandem-Beschleuniger am MPI-K.

ermöglicht jedoch eine Untersetzung des Strahlpulsung, so daß auch niedrigere Wiederholfrequenzen realisierbar sind. Hinter dem Hochenergie-Chopper befindet sich der 90°-Ablenkmagnet, der sowohl die an den Chopper-Schlitzen gestreuten Ionen als auch Ionen anderer Ladungszustände herausfiltert. Zusätzlich zu den Elementen, die zur Pulsung dienen, enthält das Beschleuniger-Strahlrohr noch andere Vorrichtungen, die für die Strahlführung, die Fokussierung und die Strahldiagnose von Bedeutung sind, die hier jedoch nicht im einzelnen vorgestellt werden sollen.

Die zeitliche Pulsbreite am Reaktionsort wurde jeweils vor den einzelnen Messungen bestimmt. Dazu wurde ein Kollimator, der sich etwa 2 m vor dem Reaktionsvolumen befindet, soweit geschlossen, daß pro Puls im Durchschnitt deutlich weniger als ein Projektil das Schlitzpaar passiert. Diese Projektile wurden etwa 1,5 m hinter der Re-

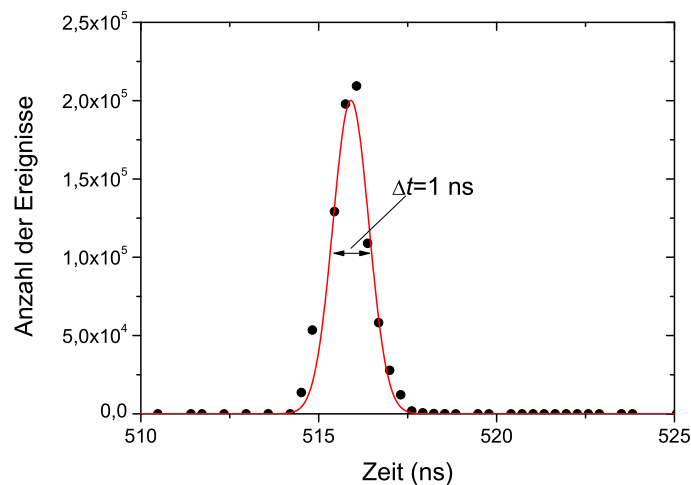


Abbildung 2.2: Pulsstruktur des Protonenstrahls bei einer Energie von 6 MeV.

aktionskammer mit Hilfe eines Plastiksziellators mit einer Zeitauflösung von unter 0,5 ns nachgewiesen. Die Zeitdifferenz zwischen den nachgewiesenen Projektilen und einem Triggersignal, das von der Pulsung des Beschleunigers geliefert wird, wurde mit einem Computer aufgenommen. Die Breite der so gemessenen Linie entspricht der Zeitauflösung, die sich aus der Pulsbreite des Strahls, der Auflösung des Detektors und den Schwankungen des Triggersignals ergibt. In Abbildung 2.2 ist dieses Spektrum, das für Protonen mit einer Energie von 6 MeV aufgenommen wurde, dargestellt. Die durch einen Gauß-Fit bestimmte Breite der Linie beträgt 1 ns, was eine genaue Impulsbestimmung der Targetfragmente mit dem Reaktionsmikroskop zuläßt (siehe Kapitel 2.4).

2.2 Das Reaktionsmikroskop

Mit Reaktionsmikroskopen können kinematisch vollständige Experimente durchgeführt werden, d.h. damit ist es möglich, die Impulskomponenten aller am Stoß beteiligten Teilchen im Endzustand zu bestimmen. In den letzten Jahren wurde diese Methode bereits erfolgreich in zahlreichen Experimenten zur Untersuchung von Elektronenstoßionisation, Ionisation und Einfang im Ion-Atom-Stoß, Einphotonenionisation und der Multiphotonen- bzw. Feldionisation in starken Laserfeldern eingesetzt und hat sich somit zu einer bewährten Technik entwickelt (für einen Überblick siehe z.B. [UMD 97, DMJ 00, UMD 03]).

Das Reaktionsmikroskop besteht aus einer Kombination eines COLTRIM-Spektrometers (*Cold Target Recoil Ion Momentum Spectrometer*), mit dessen Hilfe der Impuls des ionisierten Targets ermittelt wird, und eines Elektronenspektrometers, das die Impulsbestimmung eines oder mehrerer niederenergetischer Elektronen über nahezu den vollen Raumwinkel erlaubt. Dadurch ergeben sich etliche Vorteile gegenüber konventionellen Techniken, bei denen in der Regel der Streuwinkel des Projektils in Koinzidenz zu den emittierten Elektronen, die jeweils nur in einem kleinen Raumwinkelsegment nachgewiesen werden, gemessen wird:

- Dadurch, daß bei einem Reaktionsmikroskop die Impulsänderung des Projektils nicht direkt, sondern mit Hilfe der Impuls- bzw. Energieerhaltung aus dem Elektronen- und Rückstoßionenimpuls bestimmt wird, sind auch extrem kleine Projektilstreuwinkel zugänglich, die je nach Ionenmasse und Geschwindigkeit nur wenige μrad betragen können. Diese kleinen Streuwinkel sind mit konventionellen Techniken nicht zugänglich. Außerdem wird auf diese Weise die erreichbare Auflösung nicht durch die Energieunschärfe und Emittanz des Projektilstrahls beeinträchtigt.
- Beim Nachweis des Rückstoßions wird implizit sein Ladungszustand und somit

der Ionisationsgrad der Reaktion bestimmt. Bei der konventionellen Elektronenspektroskopie muß diese Information aus der Energiebilanz des beobachteten Stoßes berechnet werden.

- Sowohl Rückstoßion als auch die emittierten Elektronen können mit einem Reaktionsmikroskop über einen großen Energiebereich nahezu über den vollen Raumwinkel von 4π nachgewiesen werden. Die Raumwinkelakzeptanz von konventionellen Elektronenspektrometern liegt im Bereich von $\Delta\Omega/4\pi \approx 10^{-3}$ für jedes nachzuweisende Elektron¹. Bei der kinematisch vollständigen Spektroskopie der Einfachionisation im Elektronenstoß müssen zwei Teilchen, das Projektil- und das Targetelektron, gemessen werden. Mit einem konventionellen Spektrometer würde sich dadurch also die Akzeptanz auf 10^{-6} reduzieren, d.h. nur etwa jedes millionste Ionisationsereignis kann allein aufgrund der Raumwinkelakzeptanz kinematisch vollständig bestimmt werden. Bei konventionellen Spektrometern werden die Elektronen außerdem nur für eine bestimmte Energie (bzw. für einen bestimmten Energiebereich) gemessen, wodurch die Akzeptanz weiter eingeschränkt wird.

Im folgenden Kapitel wird ein kurzer Überblick über die Erzeugung des Targets und die Funktionsweise des verwendeten Spektrometers gegeben. Eine detaillierte Beschreibung der zum Einsatz kommenden Techniken findet sich z.B. in [Fis00, US03].

2.2.1 Das Target

Voraussetzung für die hochauflösende Impulsspektroskopie ist ein kaltes Target, da die erreichbare Auflösung durch die thermische Impulsbreite der Targetatome stark beeinträchtigt werden kann. Die zu bestimmenden Impulse der Targetfragmente liegen bei den zu untersuchenden Stößen im Bereich von wenigen atomaren Einheiten ($1 \text{ a.u.} = 1,995 \cdot 10^{-24} \text{ kg m/s}$). Soll z.B. ein Heliumion mit einer Impulsauflösung von $0,1 \text{ a.u.}$ nachgewiesen werden, so ist eine Auflösung seiner kinetischen Energie von $0,02 \text{ meV}$ erforderlich, was einer Targettemperatur von etwa 150 mK entspricht. Eine weitere technische Voraussetzung für diese Stoßexperimente ist ein möglichst gerichteter, gut lokalisierter Targetstrahl. Zum einen darf das Ultrahochvakuum (UHV) in der Reaktionskammer nicht durch das Targetgas beeinträchtigt werden, um Untergrund bei der Messung zu vermeiden, zum anderen würde ein großes Reaktionsvolumen, d.h. ein großer Überlapp zwischen Projektil- und Targetstrahl, ebenfalls die erreichbare Auflösung beeinträchtigen (siehe Kap. 2.4).

¹Mit Toroidspektrometern sind auch größere Akzeptanzen erreichbar.

Diese Bedingungen werden durch einen Überschall-Gasjet, wie er im Reaktionsmikroskop zur Anwendung kommt, in ausgezeichneter Weise erfüllt. Das Funktionsprinzip eines solchen Gasjets beruht auf einer Überschallexpansion. Dabei strömt das Targetgas aus einem Reservoir mit dem Vordruck p_0 durch eine kleine Düse in eine Expansionskammer mit niedrigerem Druck p_{exp} . Ist das Druckverhältnis p_0/p_{exp} größer als etwa zwei (Details in [Mil88]), expandiert das Gas hinter der Düse adiabatisch und es bildet sich ein wenige Zentimeter langer Bereich aus, die sog. *Zone-of-Silence*, in der sich die einzelnen Atome schneller als die lokale Schallgeschwindigkeit bewegen. Im Idealfall wird dabei die freie Enthalpie $H = 5/2 k_B T_0$ (k_B : Boltzmannkonstante, T_0 : Temperatur des Gases vor der Expansion), d.h. die Summe aus der thermischen Energie und die durch den Gasdruck pro Atom gespeicherte Arbeit, vollständig in gerichtete kinetische Energie umgewandelt. So ergibt sich ein Impuls für Targetatome der Masse M von

$$p_{\text{jet}} = \sqrt{5 k_B T_0 M}. \quad (2.1)$$

Diese idealen Bedingungen lassen sich in der Praxis nicht erreichen, da die Gasatome untereinander und mit dem Restgas stoßen können. Die erreichbare interne Temperatur T des expandierten Gases wird durch das *Speedratio*

$$S = \frac{v_{\text{jet}}}{v_{\text{therm}}} = \sqrt{\frac{5T_0}{2T}}, \quad (2.2)$$

also dem Verhältnis zwischen der gerichteten Geschwindigkeit v_{jet} und der thermischen Geschwindigkeit v_{therm} des Gasjets, bestimmt. Das Speedratio hängt von dem verwendeten Gas, der Temperatur des Gases vor der Expansion und dem Produkt aus Düsendurchmesser und Vordruck $d \cdot p_0$ ab. In dieser Arbeit wurde ein Heliumjet mit einem Düsendurchmesser von $d = 30 \mu\text{m}$ und einem Vordruck von $p_0 = 15 \text{ bar}$ verwendet. Unter diesen Umständen ergibt sich ein Speedratio von $S \approx 30$ (siehe [Mil88]). Wenn das Gas vor der Expansion also eine Temperatur von $T_0 = 300 \text{ K}$ hat, so ergibt sich aus Gl. 2.2 eine Targettemperatur von $T = 0,83 \text{ K}$ bzw. eine Impulsbreite von $\Delta p \approx 0,24 \text{ a.u.}$

Zur Erzeugung eines kalten, gut lokalisierten Targets aus dem expandierten Gas, wird aus der *Zone-of-Silence* mit Hilfe einer scharfberandeten, kegelförmigen Blende, dem *Skimmer*, ein Atomstrahl herausgeschält (siehe Abb. 2.3). Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Gasjet, befindet sich zwischen der Expansions- und Reaktionskammer eine weitere, separat gepumpte Druckstufe, die von der Reaktionskammer durch einen zweiten Skimmer getrennt ist. Dadurch wird gewährleistet, daß das Vakuum im Reaktionsbereich durch den Jetbetrieb praktisch nicht beeinträchtigt wird. Während des Experiments betrug der Druck in der Expansionskammer $p_{\text{exp}} \approx 10^{-3} \text{ mbar}$, in der zweiten Stufe 10^{-6} bis 10^{-5} mbar und in der Reaktionskammer zwischen 10^{-9}

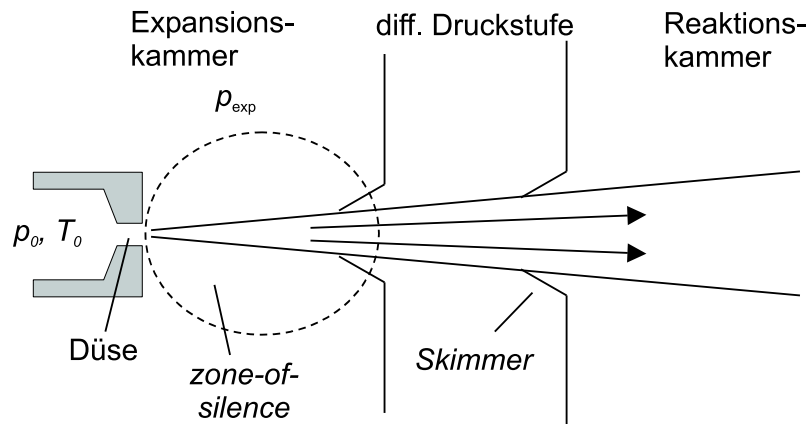


Abbildung 2.3: Aufbau des Gasjets

und 10^{-8} mbar. Hinter der Reaktionskammer wird der Gasstrahl in einer weiteren differentiellen Pumpstufe vernichtet.

Durch die Verwendung der Skimmer wird die Temperatur des Gasjets zusätzlich verringert, da Atome mit einer großen transversalen Geschwindigkeit ausgeblendet werden. Die Impulsunschärfe des Targets ist dann durch die Jetgeometrie und die Jetgeschwindigkeit festgelegt. Aus dem Abstand des zweiten Skimmers zur Düse von etwa 3 cm, dem Skimmerdurchmesser von 0,6 mm und dem gerichteten Impuls der Heliumatome von 5,9 a.u. (aus Gl. 2.1) ergibt sich eine Impulsbreite von $\Delta p \approx 0,12$ a.u. in der Richtung senkrecht zum Gasstrahl.

Prinzipiell sind mit dieser Technik noch tiefere Temperaturen erreichbar, wenn das Targetgas vor der Expansion zusätzlich gekühlt wird. Diese Methode erfordert allerdings einen deutlich höheren technischen Aufwand, da zum einen die Düse entweder durch flüssigen Stickstoff oder einen Kryostaten gekühlt werden muß, und zum anderen die Gaslast in der Expansionskammer deutlich erhöht wird und somit leistungsfähigere Pumpen verwendet werden müssen. In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten wurde deshalb auf eine Vorkühlung des Gasjets verzichtet, auch weil die zu beobachteten Impulsspektren eine glatte Verteilung und keine scharfen Strukturen aufweisen.

2.2.2 Das Spektrometer

Das Reaktionsmikroskop basiert auf der Technik der Rückstoßionenimpulsspektroskopie (COLTRIMS). Allen COLTRIM-Spektrometern ist gemeinsam, daß das ionisierte Target mit Hilfe eines schwachen, homogene, elektrischen Feldes (üblicherweise wenige V/cm) auf einen zweidimensional ortsempfindlichen Detektor abgebildet wird. Aus der beobachteten Flugzeit der Ionen und aus ihrem Auftreffort auf dem

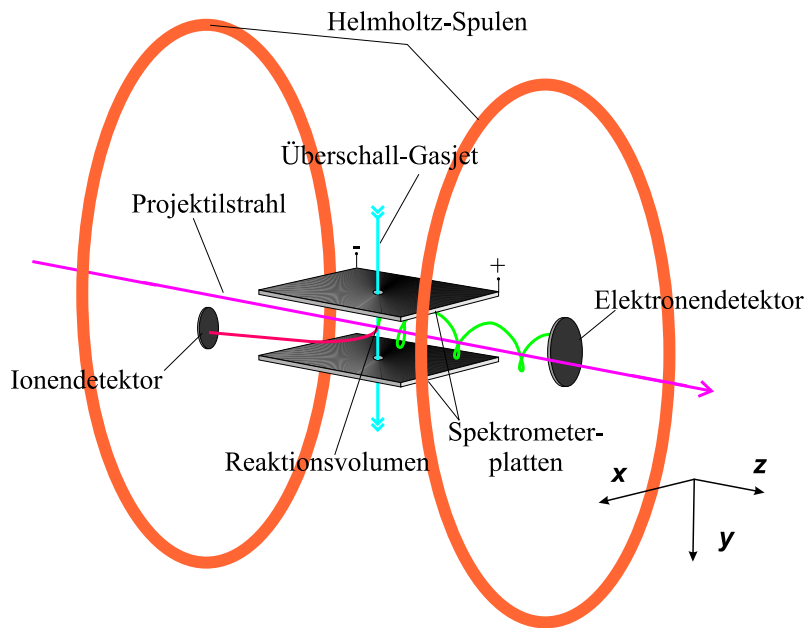


Abbildung 2.4: Das Reaktionsmikroskop

Detektor kann dann die Flugbahn bzw. der Impuls zur Startzeit rekonstruiert werden. Das Reaktionsmikroskop ist gegenüber üblichen COLTRIMS-Apparaturen um ein Elektronenspektrometer erweitert [MUS 96]. Die Elektronen werden durch das gleiche elektrische Feld wie die Ionen aber in entgegengesetzter Richtung, auf einen zweiten positionsempfindlichen Detektor gelenkt. Da die Elektronen einen ähnlichen Impuls wie die Rückstoßionen aber eine deutlich höhere Energie haben (im eV-Bereich), würde ein elektrisches Feld allein nicht ausreichen, um sie auf den Detektor, der im verwendeten Aufbau nur etwa 0,4 % des vollen Raumwinkels abdeckt, abzubilden. Deshalb wird parallel zum elektrischen Feld ein homogenes magnetisches Feld von einigen Gauß angelegt, mit dessen Hilfe die Elektronen auf Zyklotronbahnen in Richtung des Elektronendetektors geführt werden. Die Flugbahnen der Ionen werden durch das Magnetfeld aufgrund ihrer deutlich höheren Massen nur unwesentlich verändert. Die Berechnung der Elektronenimpulse ist wegen der komplizierten Flugbahnen etwas aufwendiger als bei den Rückstoßionen, aber über fast den vollen Endzustands-Impulsraum problemlos möglich.

In Abb. 2.4 ist der Gesamtaufbau des Reaktionsmikroskops dargestellt. In der Mitte des Spektrometers befindet sich das Reaktionsvolumen, also der Überlapp des Projektilstrahls mit dem Target. An dieser Stelle werden die Heliumatome ionisiert und ein oder mehrere Elektronen emittiert. Das elektrische Feld zur Extraktion des Rückstoßions und der Elektronen wird mit Hilfe zweier hochohmig beschichteter Keramikplatten (20×22 cm) erzeugt, die oberhalb und unterhalb des Projektilstrahls

angebracht sind. In den Plattenzentren befinden sich Löcher mit einem Durchmesser von 1,5 cm, durch die der Gasstrahl hindurchströmt. Die Ecken der Platten können jeweils auf ein bestimmtes Potential gelegt werden, welches über die Widerstandsschicht gleichmäßig abfällt. Auf diese Weise kann ein homogenes elektrisches Feld in nahezu jede Raumrichtung erzeugt werden. Somit es ist möglich, die Flugbahn der Rückstoßionen in Richtung des Ionendetektors zu optimieren und eine größtmögliche Impulsakzeptanz in senkrechter Richtung zum Projektilstrahl zu erreichen. Eine genauere Untersuchung der Platten und der durch sie erzeugten Feldverläufe findet sich in früheren Arbeiten [Sch94, MUS 96, Fis00].

An das homogene elektrische Feld schließt sich sowohl in Richtung der Ionen- als auch der Elektronenextraktion ein elektrisch feldfreier Driftbereich mit einer Länge von 22 cm an, dessen Potential der Spannung an den jeweiligen Plattenenden entspricht. Durch die Wahl dieser Geometrie, bei der die Beschleunigungsstrecke (11 cm) gerade halb so lang wie die Driftstrecke ist, wird eine Flugzeitfokussierung erreicht [Fis00, US03]. In diesem Fall ist die totale Flugzeit für Teilchen, die zur Startzeit in Ruhe sind, unabhängig von einer kleinen Variation des Startortes. Deshalb ist die Flugzeit nicht durch die Ausdehnung des Reaktionsvolumens in der Extraktionsrichtung beeinträchtigt. In der Tat läßt sich in dieser Richtung die beste Impulsauflösung erreichen, die dann im wesentlichen nur durch die Targettemperatur begrenzt wird. Die beste je mit dieser Technik erreichte Impulsauflösung betrug so 0,07 a.u. [FFD 02]. Die Wahl der Extraktionsrichtung entlang des Projektilstrahls erlaubt also die Bestimmung der longitudinalen Impulskomponenten, die für die Stoßkinematik von großer Bedeutung sind (siehe Kap. 1.2), mit bester Auflösung.

Hinter den Driftstrecken befinden sich die orts- und zeitempfindlichen Detektoren. Der Ionendetektor, der aus einem *Microchannelplate* (MCP) (Durchmesser ca. 4 cm) in Kombination mit einer ortsauflösenden *Wedge & Strip*-Anode besteht (für Details siehe [Fis00, US03]), ist unterhalb des Projektilstrahls angebracht. Das ionisierte Target wird einerseits durch seinen gerichteten Impuls, den es durch Targeterzeugung im Gasjet hat (etwa 5,9 a.u. für Helium), und andererseits durch ein geringes elektrisches Korrekturfeld, das durch die an den Widerstandsplatten angelegten Spannungen erzeugt wird, nach unten auf den Detektor gelenkt. Der Elektronendetektor befindet sich seitlich des Projektilstrahls. Das überlagerte Magnetfeld, dessen Feldlinien vom Reaktionsvolumen in Richtung des Zentrums des Detektors orientiert sind, gewährleistet, daß die Elektronen auf Zyklotronbahnen zum Detektor geführt werden. Der Elektronendetektor muß gegenüber dem Ionendetektor einer zusätzlichen Anforderung gerecht werden: Mit ihm soll bei einem Doppelionisationsereignis der Nachweis von zwei Elektronen innerhalb kurzer Zeit möglich sein. Dabei spricht man von *multihit*-Fähigkeit. Deshalb wurde für den Elektronennachweis ein MCP-Detektor (Durchmesser 8 cm) verwendet, der mit einer multihit-fähigen *Delay-Line*-Anode

ausgerüstet ist. Dies erlaubt so den Nachweis mehrerer Elektronen bei einer Totzeit von etwa 10 ns. Details zum verwendeten Elektronendetektor finden sich ebenfalls in [Fis00, US03].

2.2.3 Abbildungseigenschaften des Spektrometers

Die Flugzeit t_r der Ionen mit der Masse m und dem Ionisationsgrad q , die mit einem Potential U auf der Strecke a beschleunigt werden und hinterher die Driftstrecke d durchlaufen beträgt

$$t_r = \left(719,9 \frac{\text{ns}}{\text{cm}} \sqrt{\frac{\text{eV}}{\text{amu}}} \right) \cdot \sqrt{\frac{m}{q}} \cdot \frac{(2a + d)}{\sqrt{U}}. \quad (2.3)$$

Aus der gemessenen Ionenflugzeit kann also das Verhältnis von Masse und Ladung des Ions m/q , und somit auch der beobachtete Prozeß, z.B. Einfach- oder Doppelsonenionisation, identifiziert werden.

In dem Experiment zur Untersuchung der Ionisation von Helium durch 6 MeV Protonen betrug das Potential zur Extraktion der Rückstoßionen etwa 23 V (also ca. 46 V über die gesamte Länge der Widerstandsplatten). Somit ergibt sich im Flugzeitspektrum der Abbildung 2.5 (a) eine Linie für die Einfachionisation von Helium bei etwa 13,26 μs und eine Linie für die Doppelsonenionisation bei 9,37 μs . Die Flugzeitänderung der Rückstoßionen, die durch ihren nicht verschwindenden Startimpuls verursacht wird und zur Impulsbestimmung dient (siehe Kap. 2.3.1), liegt im Vergleich dazu im Bereich von einigen Nanosekunden.

Die Ortsverteilung der Rückstoßionen ist in Abb. 2.5 (b) dargestellt und zeigt eine ovale Struktur, die um einen Winkel gegenüber der Senkrechten verkippt ist. Die größere Ausdehnung der Verteilung in einer Richtung liegt zum Teil an der Targettemperatur, die nicht in jeder Raumrichtung gleich ist (siehe Kap. 2.2.1). Die Hauptursache dafür ist jedoch, daß das Extraktionsfeld aufgrund der Verwendung der Widerstandsplatten nicht homogen ist. Vor allem am Übergang zwischen Beschleunigungs- und Driftbereich entstehen Feldinhomogenitäten, die wie eine elektrostatische Linse vor allem in der senkrechten Richtung defokussierend wirken. Dieser Effekt wurde durch eine Computersimulation mit der Software SIMION untersucht, und es ergab sich ein Korrekturfaktor zur Ortsbestimmung von 0,9 in der horizontalen und 0,72 in der vertikalen Richtung [Fis00, Sch94]. Die mit der Simulation bestimmten Werte sind in guter Übereinstimmung mit den im Experiment gemachten Beobachtungen, und dieser Abbildungsfehler kann in der Datenanalyse problemlos korrigiert werden. Die Verdrehung des Spektrums ist durch das angelegte Magnetfeld verursacht (in diesem Experiment etwa 14 Gauß), da die Ionen auf ihrer Flugbahn zum Detektor durch die Lorentzkraft abgelenkt werden.

2.2. Das Reaktionsmikroskop

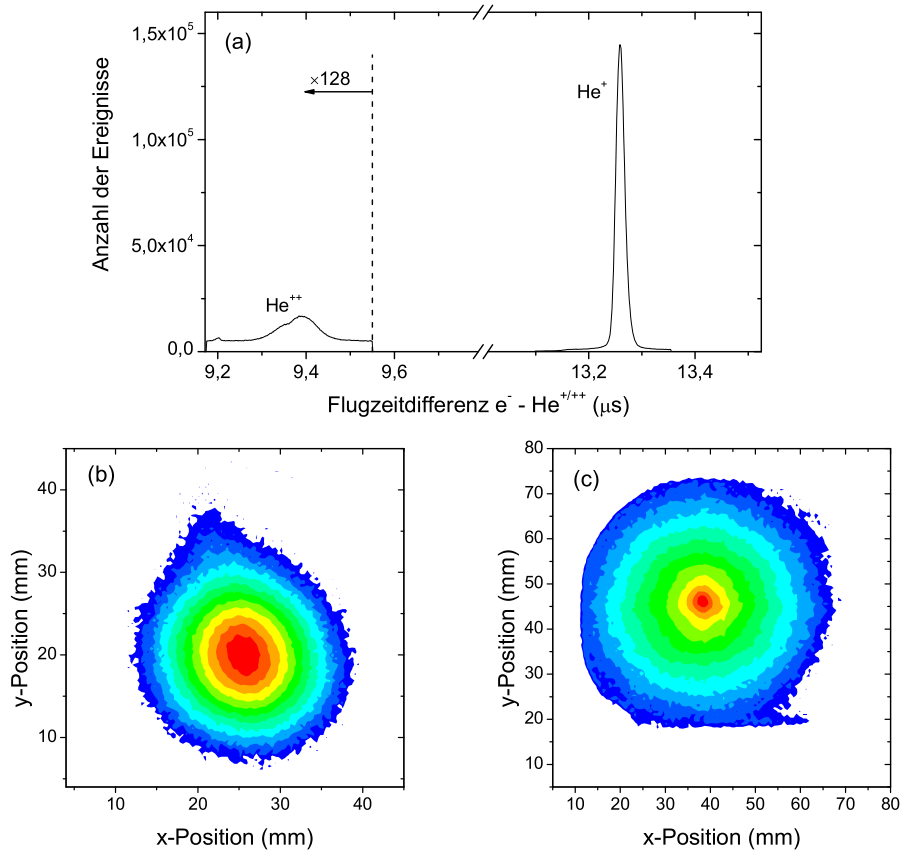


Abbildung 2.5: Ionisation von Helium durch 6 MeV Protonen. (a) Flugzeitdifferenz zwischen Elektron und Rückstoßion. (b) Ort der Rückstoßionen und (c) der Elektronen (Ortsspektren in logarithmischer Darstellung).

Das Ortsspektrum der Elektronen (Abb. 2.5 (c)) zeigt diese Asymmetrie nicht (auch unter Berücksichtigung des Magnetfeldes, das eine mögliche Asymmetrie „verschmieren“ könnte). Erstens spielt die Targettemperatur, und somit die unterschiedlichen Impulsbreiten des Targets in den verschiedenen Raumrichtungen, bei der Elektronenextraktion kaum eine Rolle, da die kinetische Energie der Elektronen deutlich höher ist als die thermische Energie des Targets. Zweitens wurde in der Richtung der Elektronenextraktion beim Übergang vom Beschleunigungs- in den Driftbereich ein Edelmetallnetz angebracht, das Linseneffekte, wie sie bei der Ionenextraktion beobachtet werden, unterdrückt. Auf der Ionenseite konnte ein solches Netz nicht verwendet werden, da die Maschen des Netzes wie eine Linse auf die sehr langsamen Ionen wirken würden und somit eine Rekonstruktion des Startimpulses nicht mehr möglich wäre.

2.3 Bestimmung der Impulse

Wie oben bereits erwähnt, werden die Impulskomponenten der Elektronen und des Rückstoßions aus der Flugzeit und dem Auftreffort auf dem Detektor bestimmt. Die durch die Geometrie des Spektrometers ausgezeichnete Richtung ist dabei die Extraktionsrichtung. In den zu beobachtenden Stoßprozessen bildet der einfallende Projektilstrahl die Symmetrieachse, zu der die Impulsverteilungen rotationssymmetrisch sind. Durch die Wahl einer longitudinalen Extraktion, d.h. einer Extraktion entlang des Projektilstrahls, entspricht die Symmetrie des Spektrometers also der des Stoßsystems. Daher ist es naheliegend, Zylinderkoordinaten zu verwenden und die Impulse in die Komponente p_{\parallel} entlang der Extraktionsrichtung bzw. des Projektilstrahls und die Komponente p_{\perp} senkrecht dazu zu zerlegen.

Um die dreidimensionalen Impulsvektoren vollständig zu erhalten, muß außerdem der Azimutalwinkel φ , also der Winkel in der Ebene senkrecht zur Extraktions- bzw. Projektilstrahlrichtung, bestimmt werden. Aus den so erhaltenen Impulsvektoren kann daraufhin der Impulsübertrag, also die Summe aus Elektronen- und Rückstoßionenimpuls, sowie jede andere Information gewonnen werden, die untersucht werden soll (z.B. die Elektronenenergie, der Emissionswinkel der Elektronen bezüglich des Projektilstrahls oder der Streuwinkel des Projektils).

2.3.1 Berechnung der Longitudinalimpulse

Zur Berechnung der longitudinalen Impulskomponente reicht sowohl für die Elektronen als auch für die Rückstoßionen die Kenntnis ihrer Flugzeit aus. Die Kraft, die durch das angelegte Magnetfeld auf die Teilchen wirkt, ist in die zum Feld senkrechte Richtung, also auch senkrecht zur Extraktion, orientiert, und beeinflusst deshalb die Bewegung in longitudinaler Richtung nicht.

In einem Stoßprozeß wird auf das zu messende Teilchen ein Impuls p_{\parallel} entlang des Projektilstrahls übertragen, sodaß es eine Startenergie in dieser Richtung von $E_{\parallel} = p_{\parallel}^2/2m$ (m : Elektronen- bzw. Rückstoßionenmasse) hat. Das Teilchen durchläuft danach das homogene Beschleunigungsfeld der Länge a und gewinnt dabei die kinetische Energie $q \cdot U$ (q : Ladung des Teilchens, U : Extraktionspotential). Nach der Beschleunigung durchfliegt es die elektrisch feldfreie Driftregion der Länge d . Wie sich leicht zeigen läßt beträgt dann die Gesamtflugzeit des Elektrons bzw. des Rückstoßions

$$t_{\pm}(E_{\parallel}) = f \cdot \sqrt{m} \cdot \left[\frac{2a}{\sqrt{E_{\parallel} + qU} \pm \sqrt{E_{\parallel}}} + \frac{d}{\sqrt{E_{\parallel} + qU}} \right] \quad (2.4)$$

$$\text{mit} \quad f = 719,9 \cdot \frac{\text{ns}}{\text{cm}} \sqrt{\frac{\text{eV}}{\text{amu}}} = 16,861 \cdot \frac{\text{ns}}{\text{cm}} \sqrt{\frac{\text{eV}}{\text{a.u.}}} .$$

2.3. Bestimmung der Impulse

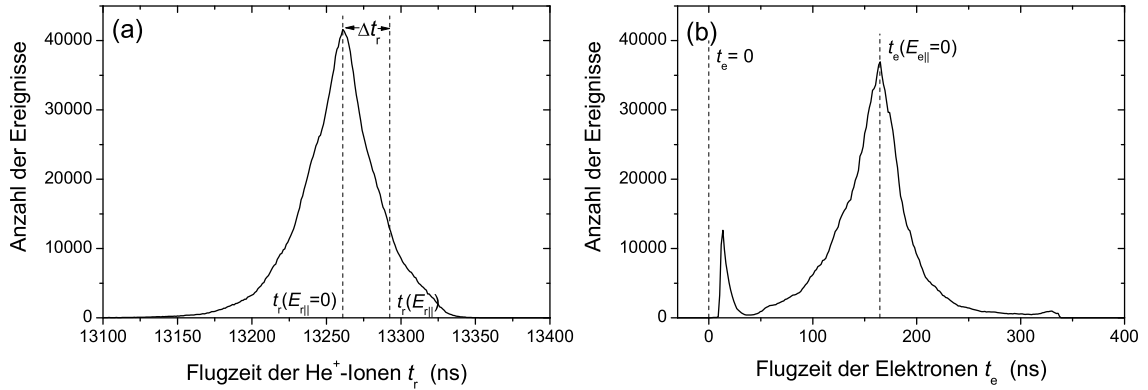


Abbildung 2.6: Flugzeitspektren der He⁺-Ionen (a) und der Elektronen (b) bei Einfachionisation im Stoß mit 6 MeV Protonen. Die Stärke des Extraktionsfeldes betrug 2,1 V/cm ($U \approx 23$ V).

Dabei ist das „+“-Zeichen zu verwenden, wenn das Teilchen in Richtung des Detektors emittiert wird, das Minus gilt entsprechend für einen Startimpuls in der entgegengesetzten Richtung. Der Betrag des Faktors f hängt davon ab welche Einheiten gewählt werden. Die in Gleichung 2.4 gegebenen Werte gelten dann, wenn t in ns, die Strecken a und d in cm, E_{\parallel} und qU in eV und die Masse m in atomaren Masseneinheiten amu (zweckmäßig zur Berechnung der Flugzeit der Rückstoßionen, $1 \text{ amu} = \frac{1}{12} C_6^{12}$) bzw. in atomaren Einheiten a.u. (für die Elektronen, $1 \text{ a.u.} = m_e$) angegeben werden.

Um aus der gemessenen Flugzeit die longitudinale Impulskomponente zu erhalten, muß die Umkehrfunktion von Gleichung 2.4 verwendet werden. Die Schwierigkeiten hierbei sind, daß es zu der angegebenen Gleichung zum einen keine analytische Umkehrfunktion gibt, und zum anderen der absolute Startzeitpunkt der Reaktion im Experiment nicht direkt bestimmt werden kann. Die Flugzeit der Teilchen wird lediglich relativ zu einem Triggersignal gemessen, das von der Projektilstrahlungspulsung geliefert wird. Um diese Probleme zu umgehen, werden für die longitudinale Impulskomponentenbestimmung der Rückstoßionen und der Elektronen unterschiedliche Strategien angewendet.

Bei den Rückstoßionen macht man sich die Tatsache zunutze, daß die im Stoß auf das Targetion übertragene kinetische Energie $E_{r\parallel}$ (in der Größenordnung von einigen meV) deutlich geringer ist, als die im Extraktionsfeld aufgenommene Energie qU (je nach Stärke des Extraktionsfeldes mehrere eV). Deshalb kann die Flugzeitdifferenz Δt_r zwischen einem Ion der Energie $E_{r\parallel} = 0$ und einem Ion der Energie $E_{r\parallel} \neq 0$ durch

$$\Delta t_r = t(E_{r\parallel}) - t(E_{r\parallel} = 0) \approx \left[\frac{dt_r(E_{r\parallel})}{dE_{r\parallel}} \cdot \frac{dE_{r\parallel}}{dp_{r\parallel}} \right]_{p_{r\parallel}=0} \cdot p_{r\parallel} \quad (2.5)$$

angenähert werden. Mit Gleichung 2.4 ergibt sich damit für den Longitudinalimpuls der Rückstoßionen (in atomaren Einheiten)

$$p_{r\parallel} = \left(8,04 \times 10^{-3} \frac{\text{cm a.u.}}{\text{eV ns}}\right) \cdot \frac{qU}{a} \Delta t_r . \quad (2.6)$$

Um mit dieser Gleichung den Longitudinalimpuls $p_{r\parallel}$ zu berechnen, muß noch die Flugzeit $t(E_{r\parallel} = 0)$ bestimmt werden. Bei hohen Projektilgeschwindigkeiten liegt diese Zeit nahe dem Maximum der Flugzeitverteilung (siehe Abb. 2.6 (a)). Eine genauere Bestimmung ist mit Hilfe der Stoßkinematik möglich (siehe Kap. 2.3.3).

Zur Bestimmung des Longitudinalimpulses der Elektronen kann die Näherung aus Gleichung 2.5 nicht angewendet werden, da die kinetische Energie $E_{e\parallel}$ des Elektrons, die es im Stoß aufnimmt, von der gleichen Größenordnung ist wie die Energie eU , die dem Elektron im Extraktionsfeld zugeführt wird. Zur Bestimmung der Umkehrfunktion von Gleichung 2.4 muß deshalb ein anderes Verfahren verwendet werden. In früheren Arbeiten wurde dazu eine analytische, genäherte Funktion verwendet [Sch98]. In dieser Arbeit wurde der Longitudinalimpuls der Elektronen mit Hilfe des numerischen Newton-Verfahrens bestimmt. Bei beiden Methoden muß jedoch die absolute Flugzeit der Elektronen bekannt sein. Der Zeitnullpunkt kann auf zwei unabhängige Arten indirekt bestimmt werden. Die eine Möglichkeit beruht darauf, daß die Elektronen sich auf Zyklotronbahnen bewegen und die Umlaufzeit unabhängig von der Energie der Elektronen ist. Näheres dazu findet sich in Kapitel 2.3.2. Die zweite, genauere Methode macht sich die Stoßkinematik zunutze (siehe Kapitel 2.3.3).

In Abbildung 2.6 (b) ist die Flugzeit der Elektronen ebenfalls aus dem Experiment zur Untersuchung des Proton-Helium-Stoßes dargestellt. Für die Elektronen liegt das Maximum der Verteilung bei der Startenergie $E_{e\parallel} = 0$ (der Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dE_e$ ist hier maximal). In dem gezeigten Spektrum gibt es ein zweites, kleineres Maximum bei Flugzeiten unter 50 ns, das durch Ionisation des Restgases in der Nähe des Elektronendetektors verursacht wird. Die relative Höhe dieses Maximums hängt stark vom Druck in der Reaktionskammer und der genauen Projektilstrahlführung ab. Dieser Untergrund läßt sich allerdings in der Datenanalyse leicht herausfiltern.

2.3.2 Berechnung der Transversalimpulse und des Azimutalwinkels

Die transversalen Impulse der Rückstoßionen $p_{r\perp}$ und der Elektronen $k_{e\perp}$ werden mit Hilfe der Flugzeiten und Auftrefforte auf den Detektoren bestimmt. Die Berechnung des Impulses der Elektronen ist hierbei komplizierter, da bei ihnen die Bewegung im Magnetfeld berücksichtigt werden muß. Sowohl für die Ionen als auch für die Elektronen ist es aufgrund der Stoßsymmetrie und der Symmetrie des Spektrometers

2.3. Bestimmung der Impulse

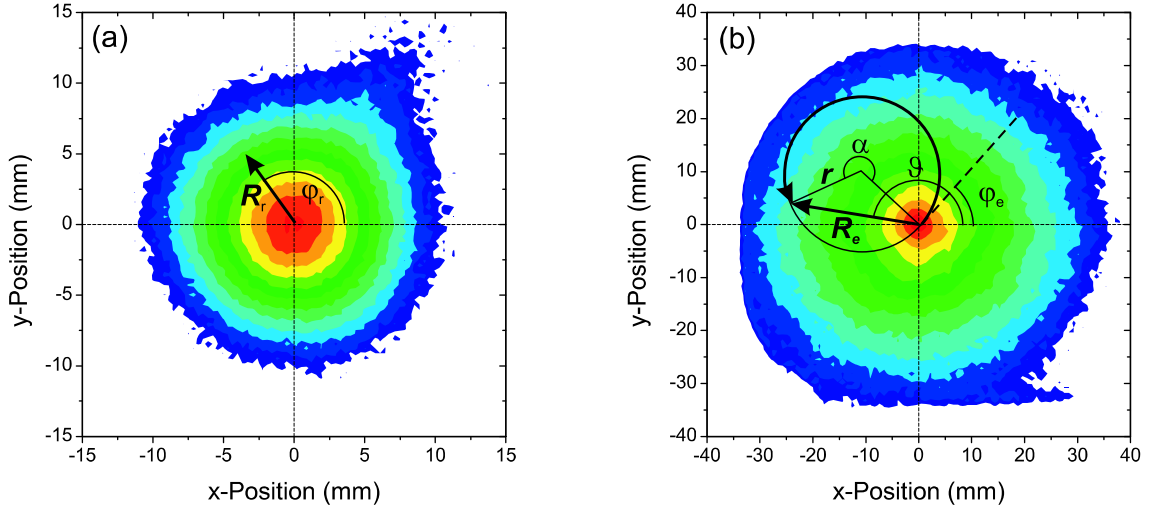


Abbildung 2.7: (a) Das Ortsspektrum der Rückstoßionen nach der Korrektur von Linseneffekten und (b) Ortsspektrum der Elektronen (in logarithmischer Darstellung). In Abbildung (a) und (b) sind die Größen eingezeichnet, die zur Berechnung der Impulse benötigt werden (siehe Text).

sinnvoll, den Detektorauftreffort in Polarkoordinaten zu bestimmen ((R_r, φ_r) für die Ionen und (R_e, ϑ) für die Elektronen). Der Ursprung des Koordinatensystems ist dabei der Schwerpunkt oder, genauer gesagt, der Symmetriepunkt der Ortsverteilung. Teilchen mit dem Transversalimpuls $p_{\perp} = 0$ treffen an dieser Stelle auf den Detektor. Die Ortsverteilung der Rückstoßionen und der Elektronen mit den jeweiligen Koordinaten ist in Abbildung 2.7 (a) und (b) dargestellt.

Für die Rückstoßionen der Masse m_r ist die R_r -Koordinate auf dem Detektor proportional zur Flugzeit t_r und zum Transversalimpuls $p_{r\perp}$ des Teilchens (unter Vernachlässigung der Wirkung des Magnetfeldes). Es gilt:

$$R_r = \left(1,200 \times 10^{-3} \frac{\text{mm amu}}{\text{ns a.u.}}\right) \cdot \frac{p_{r\perp} \cdot t_r}{m_r}. \quad (2.7)$$

Zur Bestimmung des Transversalimpulses mit Hilfe dieser Gleichung kann die genäherte Flugzeit aus Gleichung 2.3 verwendet werden, da die Flugzeitänderung Δt_r , die durch die longitudinale Startenergie des Rückstoßions verursacht wird, in der Regel nur wenige Promille der gesamten Flugzeit t_r beträgt. Somit ergibt sich für den Transversalimpuls der Rückstoßionen (in atomaren Einheiten)

$$p_{r\perp} = \left(11,6 \frac{\text{a.u.}}{\sqrt{\text{amu eV}}}\right) \cdot \frac{R_r}{2a+d} \cdot \sqrt{qU \cdot m_r}. \quad (2.8)$$

Der Azimuthalwinkel φ_r des Rückstoßionenimpulses kann direkt aus dem Auftreffort bestimmt werden (siehe Abb. 2.7 (a)). Dabei muß jedoch berücksichtigt werden, daß

die Ionenflugbahn durch das angelegte Magnetfeld einige Grad um die Feldachse gedreht wird (in den durchgeführten Experimenten weniger als 30°). Die Fokussierung der Ionen durch das Magnetfeld ist bei diesen kleinen Winkeln sehr gering (im Bereich von 1%) und kann deshalb vernachlässigt werden.

Die Bewegung der Elektronen in der senkrechten Richtung ist wesentlich stärker durch das Magnetfeld B bestimmt. Während ihrer Flugzeit t_e werden die Elektronen auf einer Spiralbahn auf den Detektor geführt. Der Radius r des Kreises, der der Projektion der Flugbahn auf die Azimuthalebene entspricht (siehe Abbildung 2.7 (b)), ist dabei proportional zum Transversalimpuls $p_{e\perp}$ des Elektrons (in SI-Einheiten):

$$k_{e\perp} = reB . \quad (2.9)$$

Das Elektron durchläuft auf seinem Weg zum Detektor den Winkel $\alpha = \omega t_e$, der von seiner Flugzeit t_e und der Zyklotronfrequenz $\omega = eB/m_e$ abhängt. Aus trigonometrischen Überlegungen ergibt sich mit Hilfe dieses Winkels dann der Zusammenhang zwischen dem Radius der Zyklotronbahn r und dem auf dem Detektor bestimmten Abstand R_e zum Mittelpunkt der Ortsverteilung (Abb. 2.7 (b)). Es gilt:

$$r = \frac{R_e}{2 |\sin \frac{\alpha}{2}|} = \frac{R_e}{2 |\sin (\frac{1}{2}\omega t_e)|} . \quad (2.10)$$

Aus Gleichung 2.9 und 2.10 ergibt sich somit für den Transversalimpuls des Elektrons (in atomaren Einheiten)

$$k_{e\perp} = \left(8,04 \times 10^{-3} \frac{\text{a.u.}}{\text{mm Gauß}} \right) \cdot \frac{R_e B}{2 |\sin (\frac{1}{2}\omega t_e)|} . \quad (2.11)$$

Den Azimuthalwinkel φ_e des Elektronenimpulsvektors erhält man mit Hilfe des im Ortsspektrum bestimmten Winkels ϑ (Abb. 2.7 (b)):

$$\varphi_e = \vartheta - \omega t/2 . \quad (2.12)$$

Aufgrund der Rotationssymmetrie der Impulsverteilungen zur Projektilstrahlachse spielt der absolute Betrag der gemessenen Azimuthalwinkel keine Rolle, vielmehr ist die Differenz der Winkel des Rückstoßions und des Elektrons $\varphi_e - \varphi_r$ entscheidend. Die Verteilung dieses Differenzwinkels weist in den zu untersuchenden Stoßsystemen bei 180° ein Maximum auf.

Zur Bestimmung sowohl des Transversalimpulses des Elektrons als auch seines Azimuthalwinkels ist es notwendig den Winkel α genau zu kennen. Die Berechnung dieses Winkels aus der Magnetfeldstärke B ist wenig zweckmäßig, da die Feldstärke

2.3. Bestimmung der Impulse

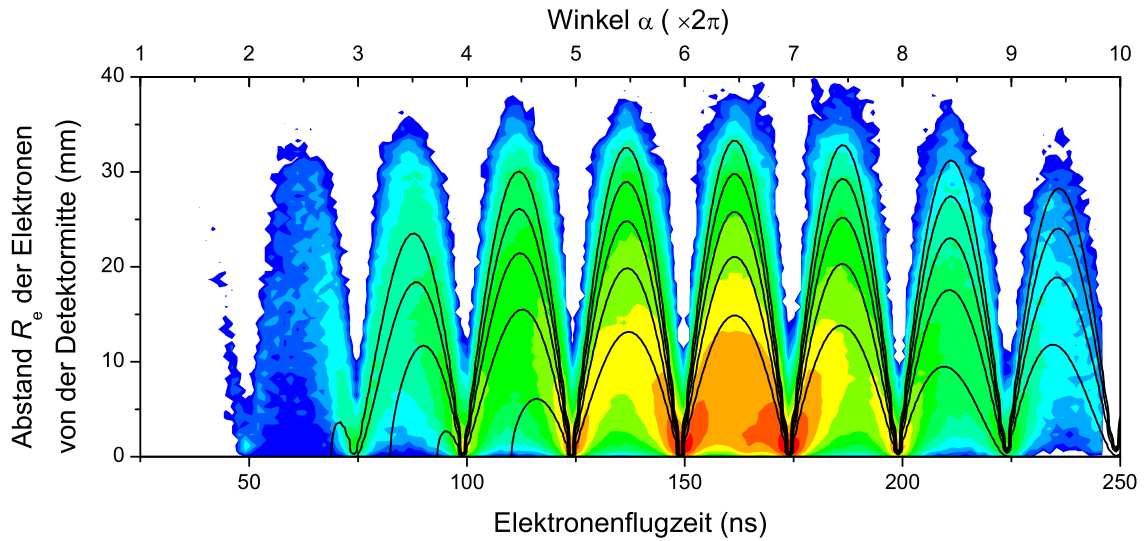


Abbildung 2.8: Die Verteilung der Elektronen abhängig von ihrer Flugzeit und ihrem Radius R_e auf dem Elektronendetektor (in logarithmischer Darstellung) bei der Einfachionisation von Helium durch 6 MeV Protonen. Die durchgehenden Linien geben die Position der Elektronen für kinetische Energien von 10 bis 50 eV in Schritten von 10 eV an.

im Spektrometer nicht mit ausreichender Genauigkeit gemessen werden kann. Durch die Abhängigkeit des Auftreffortes der Elektronen von ihrer Flugzeit ist jedoch der Betrag der Zyklotronfrequenz, und somit auch der Winkel α bzw. die Stärke des Magnetfeldes, indirekt zugänglich. In Abbildung 2.8 ist die Verteilung der Elektronen abhängig von der Flugzeit t_e und dem Radius auf dem Detektor R_e gezeigt. Zu bestimmten Zeitpunkten (in der Abbildung bei etwa 50 ns, 75 ns, 100 ns usw.) ist der Radius auf dem Detektor für alle Elektronen $R_e = 0$ mm. Bei diesen Zeiten hat das Elektron, unabhängig von seinem Transversalimpuls $p_{e\perp}$, ein ganzzahliges Vielfaches des Winkels 2π durchlaufen ($\alpha = n \cdot 2\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$, α ist auf der oberen Achse des Graphen dargestellt), und es kehrt auf die Achse, die entlang der Magnetfeldlinien vom Reaktionsvolumen auf die Mitte des Elektronendetektors zeigt, zurück. Die Einschnitte der Verteilung bei diesen Zeiten werden auch *Wiggles* genannt. Der Abstand dieser Wiggles (in diesem Fall 25 ns) liefert die Umlaufzeit der Elektronen im Magnetfeld und somit die Zyklotronfrequenz bzw. die magnetische Feldstärke (in diesem Experiment $B \approx 14$ Gauß).

Mit Hilfe des in Abbildung 2.8 dargestellten Spektrums lassen sich auch weitere nützliche Informationen gewinnen. Zum einen kann der Durchmesser des Reaktionsvolumens abgeschätzt werden, der ansonsten nicht direkt zugänglich ist. Dieser Durchmesser muß kleiner sein, als die Breite der R_e -Verteilung zum Zeitpunkt eines Wiggles, da das Elektron, wenn es den Winkel $\alpha = n \cdot 2\pi$ durchlaufen hat, zum

Ort $R_e = 0$ zurückkehren muß. Ist das Reaktionsvolumen punktförmig, muß – unter Vernachlässigung der Spektrometerauflösung – die Verteilung in Abb. 2.8 bei den *wiggles* bis $R_e = 0$ eingeschnitten werden. Die Abweichung von diesem Idealfall liefert eine obere Grenze für die Größe des Quellvolumens. Die zweite Information, die durch das Spektrum zugänglich wird, ist die Eichung der Zeitachse, die zur Bestimmung des Longitudinalimpulses des Elektrons benötigt wird (siehe Kapitel 2.3.1). Der Zeitnullpunkt muß an einer Wiggle-Position liegen, da Elektronen mit der Flugzeit $t_e = 0$, also mit dem Longitudinalimpuls $k_{e\parallel} \rightarrow \infty$ (und einem endlichen Transversalimpuls), den Winkel $\alpha = \omega t_e = 0$ durchlaufen und somit in der Mitte des Detektors auftreffen würden (d.h. $R_e = 0$). Da die Wiggles äquidistant sind, lassen sich die möglichen Zeitnullpunkte mit Hilfe der bekannten Wiggle-Positionen extrapolieren. Zur genauen Bestimmung des Zeitnullpunkts wird jedoch eine Bedingung benutzt, die sich aus der Stoßkinematik ergibt (siehe Kap. 2.3.3).

Die durchgehenden Linien in Abbildung 2.8 zeigen die Position von Elektronen mit einer Energie von 10 bis 50 eV in Schritten von 10 eV. Die Energieauflösung der gemessenen Elektronen in Abhängigkeit von ihrer Flugzeit und ihrem Auftreffort entspricht dem Abstand der Linien. Es ist direkt ersichtlich, daß bei den Wiggles, also wenn gilt $\omega t_e = n \cdot 2\pi$, keine Energieseparation möglich ist. An diesen Stellen kann weder der Transversalimpuls der Elektronen (vgl. Gleichung 2.11) noch deren Azimuthalwinkel bestimmt werden. Wenn bei der Wahl des Extraktions- und Magnetfeldes auf eine günstige Position der Wiggles geachtet wird, kann die beste Auflösung bei sehr kleinen Energien erreicht werden (im Bild bei $t_e \approx 160$ ns und kleinen Radien R_e). Hier sind Auflösungen von besser als 100 meV möglich (Näheres dazu in Kap. 2.4).

2.3.3 Impulsübertrag und Stoßkinematik

In den zu untersuchenden Stoßprozessen kommt dem Impulsübertrag eine große Bedeutung zu. Seine longitudinale Komponente q_{\parallel} spielt in der Stoßkinematik eine wichtige Rolle, da sie direkt von der auf das Target übertragenen Energie abhängt (siehe Kap. 1.2). Der transversale Impulsübertrag q_{\perp} hängt mit dem Stoßparameter b , also mit dem Abstand zwischen Projektil und Target während des Stoßes zusammen und trägt so zum Verständnis der Stoßdynamik und den beobachteten Ionisationsmechanismen bei. Deshalb ist es wichtig, den Betrag und die Richtung des Impulsübertrags so genau wie möglich zu bestimmen.

Der Impulsübertrag entspricht der negativen Impulsänderung des Projektils $\Delta \mathbf{p}_p$ und kann mit Hilfe der Impulse der Targetfragmente aufgrund der Impulserhaltung bestimmt werden:

$$\mathbf{q} = -\Delta \mathbf{p}_p = \mathbf{p}_r + \sum_j \mathbf{k}_{e,j} . \quad (2.13)$$

2.3. Bestimmung der Impulse

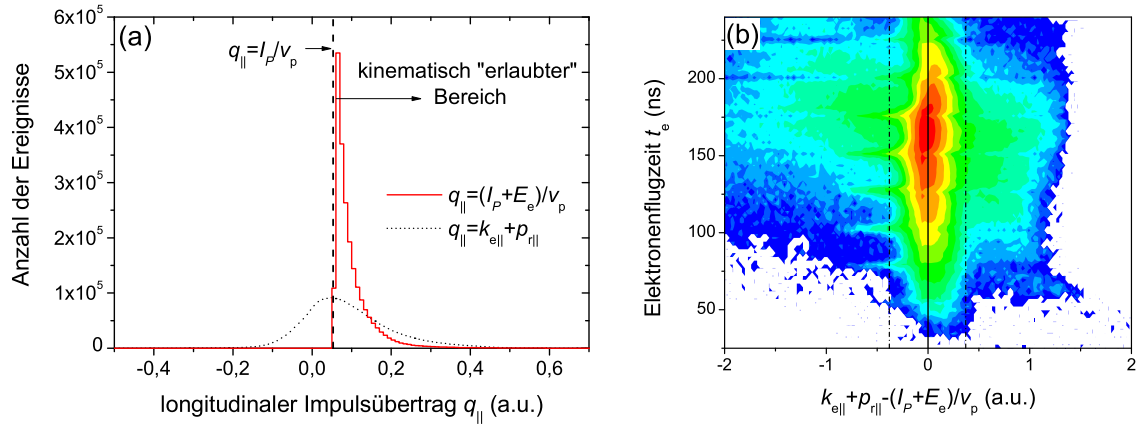


Abbildung 2.9: (a) Der aus Gl. 2.13 (gepunktete Linie) bzw. 2.14 (durchgezogene Linie) bestimmte longitudinale Impulsübertrag in der Einfachionisation von Helium (Ionisationspotential 0,904 a.u.) durch 6 MeV Protonen (Projektilgeschwindigkeit 15,5 a.u.). (b) Elektronenflugzeit in Abhängigkeit von der Differenz der mit Gl. 2.13 und Gl. 2.14 bestimmten longitudinalen Impulsüberträge. Die gestrichelten Linien geben das Bedingungsfenster an, mit dem der Untergrund reduziert werden kann (siehe Text).

Der Index j des Elektronenimpulses wird dann benötigt, wenn mehr als ein Elektron ionisiert wird. Mit der oben gegebenen Gleichung wird allerdings nur der transversale Impulsübertrag q_{\perp} bestimmt. Das Problem bei der Bestimmung des longitudinalen Impulsübertrags nach Gleichung 2.13 besteht darin, daß durch die begrenzte Auflösung des Spektrometers Impulsüberträge bestimmt werden können, die die Bedingungen, die sich aus der Stoßkinematik ergeben, verletzen (siehe Abbildung 2.9 (a), gestrichelte Kurve). Aus Gleichung 1.11 ergibt sich für den longitudinalen Impulsübertrag die Bedingung: $q_{\parallel} > I_P/v_p$. Hierbei ist I_P das Ionisationspotential des Targets und v_p der Projektilgeschwindigkeit. Um einerseits die geforderte kinematische Bedingung zu erfüllen und andererseits eine erheblich bessere Auflösung zu erhalten, wird der longitudinale Impulsübertrag aus Gleichung 1.11, d.h. mit Hilfe der Energieerhaltung, bestimmt. Es ergibt sich (in a.u.):

$$q_{\parallel} = \frac{I_P + E_e}{v_p} . \quad (2.14)$$

Im Fall der Einfachionisation von Helium durch 6 MeV Protonen mit einer Geschwindigkeit von $v_p = 15.5$ a.u., entspricht eine als sehr schlecht angenommene Energieauflösung für die Elektronen von 10 eV bereits einer sehr guten Auflösung für q_{\parallel} von 0,02 a.u.. Der mit Gleichung 2.14 bestimmte Impulsübertrag ist in Abbildung 2.9 (a) durch die durchgehende, rote Kurve dargestellt.

In den Formeln, die in den vorangegangenen Kapiteln zur Impulsberechnung des

Rückstoßions und der Elektronen gegeben wurden, werden ideale Feldverläufe angenommen, d.h. die Bestimmung der Impulskomponenten setzt eine genaue Kenntnis der Feldstärken und der Spektrometergeometrie voraus. In der Praxis werden die Flugbahnen der Teilchen jedoch durch Randfelder, Kontaktpotentialdifferenzen und Verzerrungen des Magnetfeldes beeinflusst. Außerdem ist eine exakte Bestimmung der Feldstärken am Reaktionsort und im gesamten Spektrometerbereich nicht ohne weiteres möglich. Aufgrund der bekannten Stoßkinematik, d.h. weil q_{\parallel} sich auf zwei unabhängige Weisen bestimmen läßt, können jedoch die Parameter, die zur Impulsberechnung benötigt werden, optimiert und somit Abbildungsfehler des Spektrometers zum Teil ausgeglichen werden.

In Abbildung 2.9 (b) ist die Flugzeit des Elektrons gegenüber der Differenz des mit Gl. 2.13 und mit Gl. 2.14 bestimmten longitudinalen Impulsübertrags in einer Dichteverteilung aufgetragen. Unter idealen Bedingungen, d.h. bei sehr guter Auflösung und einer exakten Berechnung der Impulskomponenten, muß diese Differenz unabhängig von der Elektronenflugzeit immer null sein (durchgezogene Linie in der Abbildung). Die in Abbildung 2.9 (b) zu beobachtende endliche Breite der Verteilung beruht vor allem auf der begrenzten Impulsauflösung. Bei den Flugzeiten, an denen sich Wiggles befinden (50 ns, 75 ns, 100 ns usw., vgl. Abb. 2.8), dort wo also keine Energieseparation mehr möglich ist, kann eine zusätzliche Verbreiterung bzw. eine Verzerrung der Verteilung nach links beobachtet werden.

Die Form der Dichteverteilung aus Abb. 2.9 (b), d.h. zum Beispiel eine Abhängigkeit der gemessenen Impulsübertragsdifferenz von der Elektronenflugzeit, ist ein höchst sensitiver Test der zur Impulsberechnung verwendeten Parameter. Das genaue Extraktionspotential U , die Länge von Beschleunigungs- und Driftbereich a und d , und vor allem der absolute Zeitnullpunkt können so mit großer Präzision bestimmt werden. In aller Regel sind die Abbildungsfehler des Spektrometers jedoch sehr klein, und die auf nach oben beschriebener Weise optimierten Parameter weichen nur sehr leicht von den während des Experiments protokollierten Werten ab.

Mit Hilfe der Bedingung, daß die Differenz der auf unterschiedliche Weise bestimmten Impulsüberträge klein sein soll, kann außerdem der Hintergrund reduziert werden. Wird nach einem Ionisationsprozeß ein Elektron gemessen, das nicht von dem in Koinzidenz nachgewiesenen Rückstoßion emittiert wurde, besteht kinematisch keine Relation zwischen dem nachgewiesenen Elektron und dem Rückstoßion. In diesem Fall ist die berechnete Impulsübertragsdifferenz nicht zwingend null, sondern kann auch jeden anderen Wert annehmen. Durch ein Bedingungsfenster (in Abb. 2.9 (a), gestrichelte Linie) können also solche Ereignisse unterdrückt und die Qualität der Daten erhöht werden.

2.4 Auflösung und Akzeptanz des Reaktionsmikroskops

Bei dem Vergleich zwischen experimentell erhaltenen Daten und Rechnungen sind zwei wichtige Faktoren zu berücksichtigen, die die Qualität der experimentellen Ergebnisse einschränken können. Zum einen muß die Auflösung bei der Impulsbestimmung und zum anderen die begrenzte Akzeptanz des Spektrometers berücksichtigt werden. In diesem Kapitel werden beide Faktoren am Beispiel des Experiments zur Ionisation von Helium im Protonenstoß diskutiert. Dabei wird hauptsächlich die Auflösung und Akzeptanz beim Rückstoßionen- und Elektronennachweis untersucht. Für den Impulsübertrag ist eine Bestimmung dieser Einschränkungen deutlich schwieriger und in allgemeiner Form auch nur bedingt zweckmäßig.

2.4.1 Das COLTRIM-Spektrometer

Die erreichbare Auflösung des Rückstoßionenimpuls-Spektrometers wird hauptsächlich durch die Targettemperatur sowie durch die Unsicherheit bei der Orts- und Zeitbestimmung eingeschränkt. Der Fehler bei der Ortsbestimmung wird im wesentlichen durch die Ausdehnung des Reaktionsvolumens, aber auch durch Abbildungsfehler des Spektrometers und die begrenzte Ortsauflösung des Detektors verursacht. Die Unsicherheit bei der Zeitbestimmung liegt sowohl an der zeitlichen Breite des Projektilpulses als auch an der Zeitauflösung des Detektors sowie an Inhomogenitäten der Feldverläufe. In der folgenden Abschätzung wird für den Fehler im Ort $\Delta R_r = 1$ mm und den Fehler in der Zeit $\Delta t_r = 1$ ns angenommen. Die thermische Impulsbreite der Targets wurde bereits in Kapitel 2.2.1 diskutiert und beträgt $\Delta p_{\text{therm}} = 0,24$ a.u. entlang des Targetstrahls und $0,12$ a.u. in den dazu senkrechten Richtungen.

Die aus den oben gegebenen Einschränkungen resultierende Impulsunschärfe kann mit einer Fehlerrechnung, die in erster Ordnung durch die allgemeine Formel

$$\Delta f(x_1, \dots, x_n)^2 = \sum_j \left(\frac{\partial f}{\partial x_j} \Delta x_j \right)^2, \quad (2.15)$$

gegeben ist, abgeschätzt werden (siehe z.B. [Bar89]). Dabei sind x_j die direkt gemessenen Größen, während f eine daraus berechnete Meßgröße ist.

Mit Gleichung 2.6 und 2.8 ergibt sich somit die für die Rückstoßionen erreichbare Auflösung, unter Berücksichtigung der thermischen Impulsbreite Δp_{therm} des Tar-

gets:

$$\Delta p_{r\parallel}^2 = \left(\left(8,039 \times 10^{-3} \frac{\text{cm a.u.}}{\text{eV ns}} \right) \cdot \frac{qU}{a} \right)^2 \cdot \Delta t^2 + \Delta p_{\text{therm}}^2 \quad (2.16)$$

$$\Delta p_{r\perp}^2 = \left(\left(11,6 \frac{\text{a.u.}}{\sqrt{\text{amu eV}}} \right) \cdot \frac{\sqrt{qU \cdot m_r}}{2a + d} \right)^2 \cdot \Delta R_r^2 + \Delta p_{\text{therm}}^2 \quad (2.17)$$

Aufgrund der Flugzeitfokussierung (siehe Kap. 2.2.2) kann der Fehler der Beschleunigungsstrecke a , der durch die longitudinale Ausdehnung des Reaktionsvolumens verursacht wird, bei der Bestimmung der Impulsauflösung vernachlässigt werden.

Da die Temperatur des Targets in der Richtung entlang des Gasjets und senkrecht dazu unterschiedlich ist, muß die Impulsauflösung in jede Raumrichtung separat angegeben werden. Bei den Einstellungen des Spektrometers im Experiment zur Einfachionisation von Helium im Protonenstoß ($U = 23 \text{ V}$), ergibt sich eine erreichbare Impulsauflösung von

$$\begin{aligned} \Delta p_{rx} &= 0,28 \text{ au} \\ \Delta p_{ry} &= 0,35 \text{ au} \\ \Delta p_{rz} = \Delta p_{r\parallel} &= 0,12 \text{ au} . \end{aligned} \quad (2.18)$$

Dabei ist die x -Richtung sowohl zum Projektil- als auch zum Targetstrahl senkrecht, die y -Achse verläuft entlang des Gasjets und die z -Achse entspricht der Extraktions- bzw. Projektilstrahlrichtung. Die beste Impulsauflösung wird also in der Extraktionsrichtung erreicht.

Die Auflösung des Azimutalwinkels φ_r läßt sich ebenfalls mit Gleichung 2.15 ermitteln. Sie kann direkt aus den Unschärfen der Impulskomponenten in x - und y -Richtung bestimmt werden:

$$\Delta \varphi_r = \frac{1}{p_{r\perp}^2} \sqrt{(p_{rx} \cdot \Delta p_{ry})^2 + (p_{ry} \cdot \Delta p_{rx})^2} \quad (2.19)$$

In dem durchgeführten Experiment betrug das Auflösungsvermögen des Azimutalwinkels $\Delta \varphi_r$ also je nach der Richtung des Impulsvektors zwischen $16^\circ/p_{r\perp}$ (Impulsvektor in y -Richtung) und $20^\circ/p_{r\perp}$ (Impulsvektor in x -Richtung).

Die Akzeptanz des Ionenspektrometers hängt von der Höhe der Extraktionsspannung U und der nachzuweisenden Ionensorte ab. In longitudinaler Richtung werden die Ionen, die eine kinetische Energie $E_{r\parallel} > qU$ aufweisen und sich vom Ionendetektor fortbewegen, nicht mehr nachgewiesen. Da diese Bedingung in den beobachteten Stößen praktisch nie auftritt, ist die Akzeptanz in longitudinaler Richtung nicht eingeschränkt. In transversaler Richtung begrenzt die Größe des Ionendetektors die

Akzeptanz. Für den Abstand R_r des Auftreffortes eines Ions auf dem Detektor zur Detektormitte muß gelten: $R_r \lesssim 15$ mm. Bei dem durchgeführten Experiment ergibt sich also aus Gl. 2.8 eine Impulsakzeptanz bis $p_{r\perp} \approx 3,8$ a.u.

2.4.2 Das Elektronenspektrometer

Die Auflösung der Elektronenimpulse ist im Gegensatz zu den Rückstoßionen im wesentlichen unabhängig von der Targettemperatur, da die kinetische Energie, die auf das Elektron während des Stoßes übertragen wird, erheblich höher als die thermische Energie des Targets ist. Die Impulsauflösung wird hier also lediglich durch die Unsicherheit bei der Orts- und Zeitmessung begrenzt. Dabei ist jedoch die Impulsauflösung der Elektronen nicht wie bei den Ionen (vgl. Gl. 2.18) konstant, vielmehr ist sie für jeden Punkt im Endzustandsimpulsraum, aufgrund der Bewegung auf Zyklotronbahnen, unterschiedlich und muß separat bestimmt werden.

Mit Hilfe der Gleichung zur Fehlerfortpflanzung (Gl. 2.15) und den in Kapitel 2.3 hergeleiteten Formeln zur Impulsberechnung (Gl. 2.11 und 2.12) kann das Auflösungsvermögen des Transversalimpulses und des Azimuthalwinkels abhängig von der R_e -Koordinate und der Flugzeit t_e angegeben werden:

$$\Delta k_{e\perp} = \frac{8,04 \times 10^{-3} \frac{\text{a.u.}}{\text{mm Gauß}} \cdot B}{2 |\sin(\frac{1}{2}\omega t_e)|} \sqrt{\Delta R_e^2 + \left(\frac{R_e \omega \cdot \Delta t_e}{2 \tan(\frac{1}{2}\omega t_e)}\right)^2} \quad (2.20)$$

$$\Delta \varphi_e = \sqrt{\left(\frac{\Delta R_e}{R_e}\right)^2 + \left(\frac{\omega}{2} \Delta t_e\right)^2}. \quad (2.21)$$

Für den Longitudinalimpuls erhält man aus $\Delta k_{e\parallel} = (dt_e/dk_{e\parallel})^{-1} \cdot \Delta t_e$ zusammen mit Gleichung 2.4 ebenfalls einen analytischen Ausdruck, der hier aber aufgrund seiner Länge nicht aufgeführt werden soll.

In Abbildung 2.10 ist das Auflösungsvermögen der Impulskomponenten und des Azimuthalwinkels für die Spektrometereinstellungen dargestellt, die beim Experiment zur Ionisation von Helium durch 6 MeV Protonen verwendet wurden. Dabei wurde eine Ortsunsicherheit von $\Delta R_e = 1$ mm und eine Zeitunschärfe von $\Delta t_e = 1$ ns angenommen. Der daraus resultierende Fehler des Longitudinalimpulses variiert über einen großen Flugzeitbereich ($t_e \gtrsim 100$ ns) kaum und liegt dort zwischen 0,01 und 0,02 a.u. (siehe Abbildung 2.10 (a)) und ist somit deutlich geringer als für die Rückstoßionen. Abbildung (b) zeigt ebenfalls die Longitudinalimpulsauflösung jedoch als Funktion des gemessenen Longitudinalimpulses. Hier zeigt sich, daß die Ungenauigkeit für Longitudinalimpulse, die kleiner als 1 a.u. sind, weniger als 0,02 a.u. beträgt. Für höhere longitudinale Impulse steigt der Fehler zwar an, er wird in dem für die untersuchten Stoßsysteme interessanten Bereich jedoch nicht größer als 0,08 a.u..

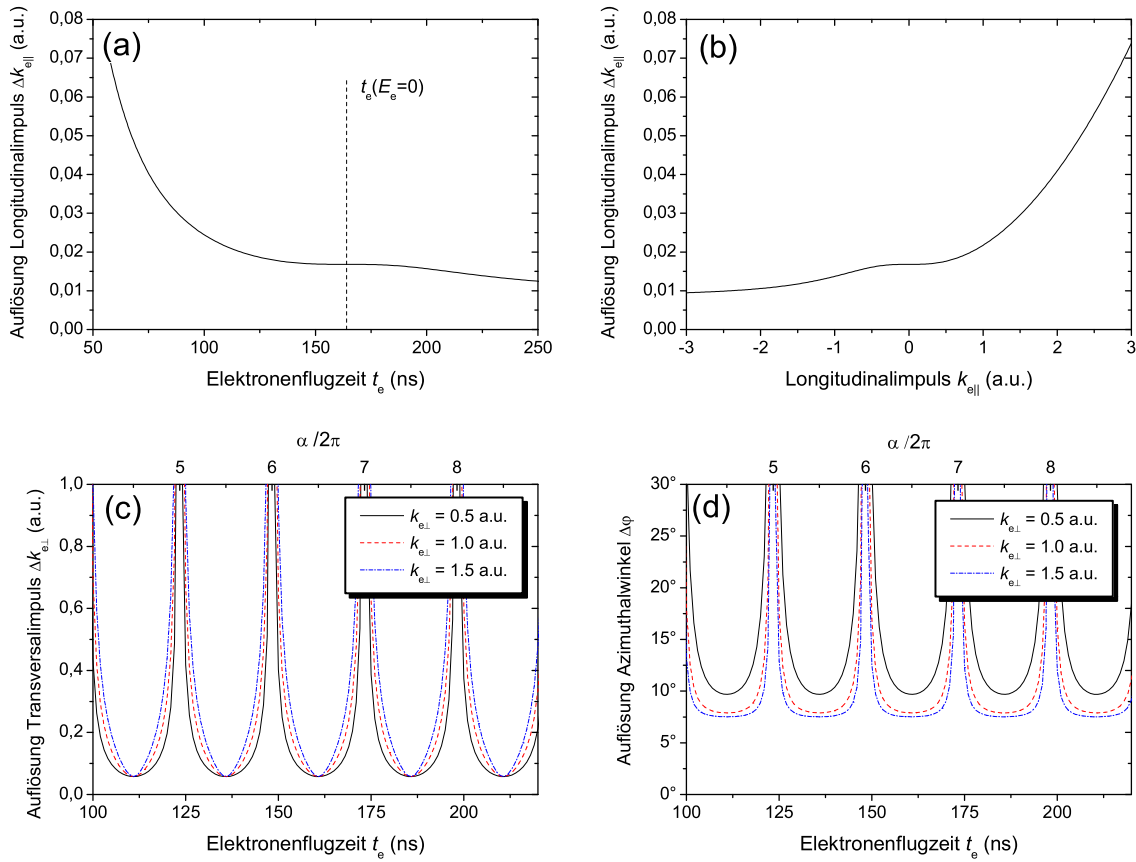


Abbildung 2.10: Auflösungsvermögen der Longitudinal- und Transversalkomponente sowie des Azimuthalwinkels des Elektronen-Impulsvektors im Experiment zur Untersuchung der Ionisation von Helium durch 6 MeV Protonen.

Das Auflösungsvermögen des Transversalimpulses und des Azimuthalwinkels ist in Abbildung 2.10 (c) und (d) als Funktion der Flugzeit t_e dargestellt. Beide zeigen ein periodisches Verhalten bezüglich der Flugzeit der Elektronen. Wie bereits in Kap. 2.3.2 diskutiert, durchlaufen die Elektronen bzgl. der Ebene senkrecht zur Magnetfeldrichtung, also auch senkrecht zum Projektilstrahl, den Winkel α (obere Achse in den Abbildungen). Ist dieser Winkel ein ganzzahliges Vielfaches von 2π , ist die auf dem Detektor gemessene R -Koordinate des Elektrons $R_e = 0$ (vgl. Gl. 2.10) und es kann weder der Transversalimpuls noch der Azimuthalwinkel des Elektronenimpulses bestimmt werden. An diesen Stellen, den Wiggles, treten Singularitäten im Auflösungsvermögen auf. Es sei angemerkt, daß Gleichung 2.15 sehr nahe bei diesen Polen nicht mehr die richtigen Fehler liefert, da mit ihr nur eine Abschätzung in erster Ordnung gegeben wird. In der Mitte zweier solcher Wiggles, also wenn das Elektron den Winkel $\alpha = (n+1/2) \cdot 2\pi$ ($n \in \mathbb{N}$) durchlaufen hat, wird sowohl für den Transversalimpuls als auch für den Azimuthalwinkel die beste Auflösung erreicht.

2.4. Auflösung und Akzeptanz des Reaktionsmikroskops

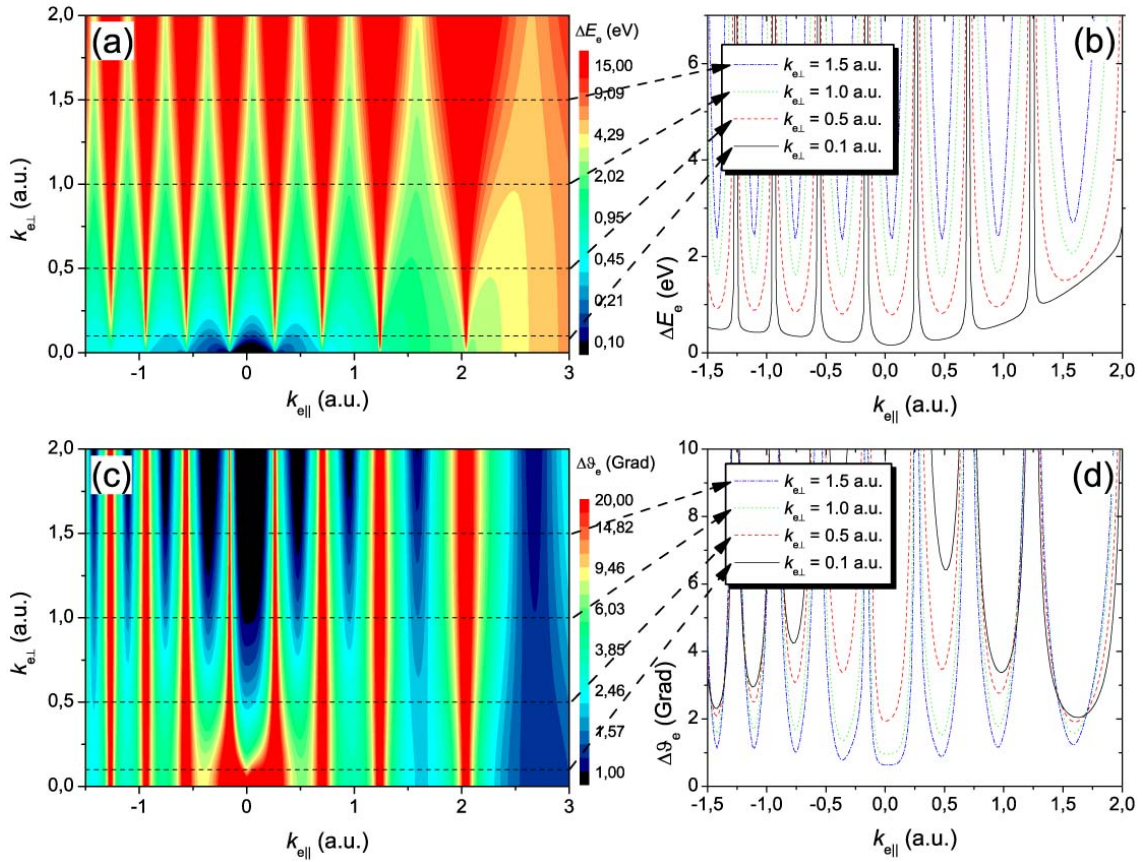


Abbildung 2.11: Die Energie- (a) und Polarwinkelauflösung (c) im Experiment zur Untersuchung der Ionisation von Helium durch 6 MeV Protonen. Abbildung (b) und (d) zeigen Schnitte durch die Spektren (a) und (c) für verschiedene Transversalimpulse.

In dem durchgeführten Experiment beträgt sie $\Delta k_{\text{e}\perp} < 0.1$ a.u. bzw. $\Delta\varphi_e \approx 10^\circ$.

Die Auflösung sowohl des Transversalimpulses als auch des Azimuthalwinkels hängt nicht nur von der Flugzeit sondern auch vom absoluten Wert der R_e -Koordinate bzw. von dem gemessenen Transversalimpuls $k_{\text{e}\perp}$ ab. In Abbildung 2.10 (c) und (d) ist das Auflösungsvermögen für Transversalimpulse von 0,5 a.u., 1,0 a.u. und 1,5 a.u. dargestellt. Es zeigt sich, daß der Azimuthalwinkel für größere Transversalimpulse besser aufgelöst werden kann, während die Transversalimpuls-Auflösung im allgemeinen schlechter wird.

In vielen theoretischen sowie experimentellen Studien werden Wirkungsquerschnitte untersucht, die differentiell bezüglich der Elektronenenergie E_e und dem polaren Emissionswinkel des Elektrons ϑ_e sind (ϑ_e entspricht dem Winkel zwischen Elektronenimpulsvektor und Projekttilstrahl). Deshalb ist es wichtig, das Auflösungsvermögen auch dieser Größen zu kennen. In Abbildung 2.11 sind die Fehler für die Energie-

und Polarwinkelbestimmung in Abhängigkeit von dem Longitudinal- und Transversalimpuls des Elektrons aufgetragen. Die Auflösung beider Größen ist ebenfalls, genau wie Azimuthalwinkel und Transversalimpuls, durch die *wiggles* beeinträchtigt und es zeigen sich Pole an den entsprechenden Flugzeiten bzw. Longitudinalimpulsen.

Die beste Energieauflösung ist erreichbar für sehr kleine Impulse und kann hier weniger als 100 meV betragen. Bei größeren Transversalimpulsen nimmt die Energieauflösung zwar schnell ab, die relative Auflösung $\Delta E_e/E_e$ verbessert sich jedoch. Die Auflösung des Emissionswinkels ϑ_e ist für kleine Impulse hingegen schlechter als für größere. Insgesamt ist jedoch die Auflösung dieses Winkels über weite Bereiche besser als die des Azimuthalwinkels.

Den Einschränkungen der Auflösung, die sich aus der Zyklotronbewegung der Elektronen ergeben, kann häufig dadurch begegnet werden, daß bei der Darstellung der differentiellen Wirkungsquerschnitte die Bereiche mit schlechter Auflösung, also im Bereich der Wiggles, herausgeschnitten werden. Dies ist jedoch nur möglich, wenn gewährleistet ist, daß die Form und Normierung des untersuchten Querschnitts sich nicht durch das Herausschneiden eines Teils des Endzustandsimpulsraums ändert.

Die Akzeptanz des Elektronenspektrometers ist im wesentlichen durch drei Faktoren begrenzt. Erstens können Elektronen, die sich in longitudinaler Richtung mit einer Energie $E_{e\parallel}$ größer als eU vom Elektronendetektor fortbewegen nicht mehr nachgewiesen werden, da sie das Extraktionsfeld auf der dem Elektronendetektor gegenüberliegenden Seite verlassen. Dies führt zur Bedingung

$$k_{e\parallel} > -\sqrt{eU/13.6 \cdot \text{a.u.}/\text{eV}} . \quad (2.22)$$

Zweitens ist die Akzeptanz in transversaler Richtung durch die Größe des Elektronendetektors begrenzt². Im ungünstigsten Fall liegt die Flugzeit der Elektronen genau zwischen zwei Wiggles, und das Verhältnis des auf dem Detektor gemessenen Radiuses zum Transversalimpuls $R_e/k_{e\perp}$ erreicht sein Maximum (siehe Gl. 2.11). Ist R_e^{max} der größtmögliche mit dem Detektor meßbare Radius, folgt die Bedingung für den Transversalimpuls

$$k_{e\perp} < \left(4,02 \times 10^{-3} \frac{\text{a.u.}}{\text{mm Gauß}} \right) \cdot BR_e^{\text{max}} . \quad (2.23)$$

Drittens beschränkt die Totzeit des Elektronendetektors von etwa 10 ns die Akzeptanz bei der Untersuchung von Doppelionisationsprozessen. Hier muß für die Flugzeit

²Auch die Größe des Spektrometers kann die Akzeptanz einschränken. Bei zu großen Transversalimpulsen wird der Radius r der durch das Elektron beschriebenen Spiralbahn so groß, daß das Elektron bereits im Extraktionsbereich auf die Kammerwand bzw. die Spektrometerplatten trifft. In dem im folgenden diskutierten ungünstigsten Fall spielt jedoch nur die Detektorgröße eine Rolle.

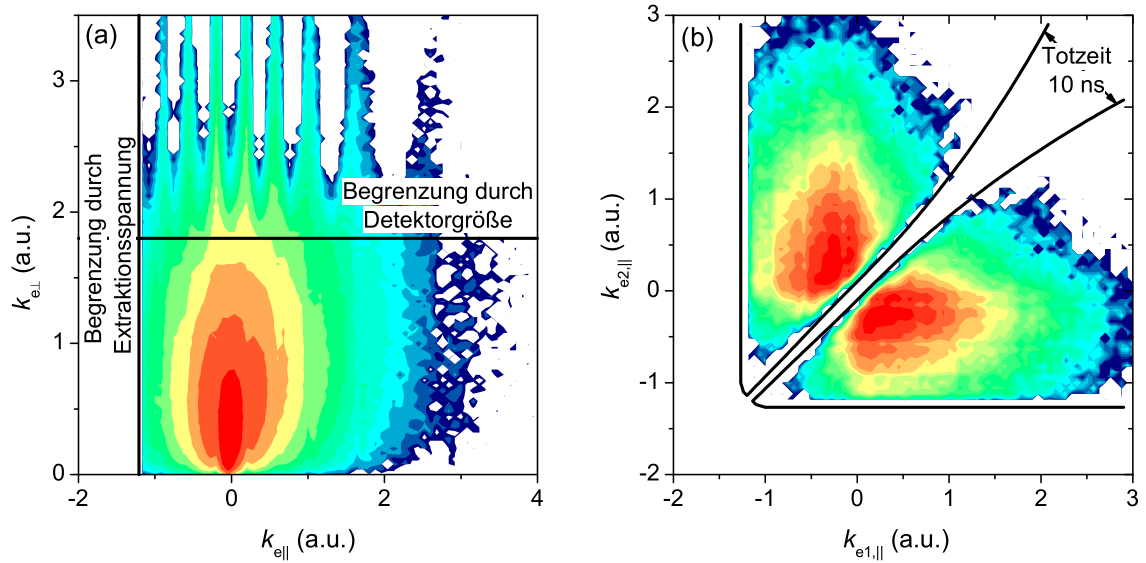


Abbildung 2.12: Impulsverteilung der Elektronen in der Einfach- (a) und Doppelionisation (b) von Helium durch 6 MeV Protonen (in logarithmischer Darstellung). Die Grenzen der Spektromerakzeptanz sind durch die schwarzen Striche angezeigt.

der beiden Elektronen

$$|t_{e1} - t_{e2}| > 10 \text{ ns} \quad (2.24)$$

gelten.

In Abbildung 2.12 sind diese Impulsakzeptanzgrenzen des Spektrometers am Beispiel des Experiments zur Ionisation von Helium im 6 MeV Protonenstoß gezeigt. Abbildung (a) zeigt den doppelt differentiellen Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(dk_{e||}dk_{e\perp})$ bei der Einfachionisation. Aus Gleichung 2.22 ergibt sich als Bedingung für den Logitudinalimpuls: $k_{e||} > -1,3 \text{ a.u.}$ (vertikale Linie in der Abbildung). Die Größe des verwendeten Elektronendetektors bestimmt den Wert von R_e^{max} , der etwa bei 30 bis 35 mm liegt. In dem durchgeführten Experiment wurde eine Magnetfeldstärke von 14 Gauß gewählt, sodaß sich aus Gleichung 2.23 eine Transversalimpulsakzeptanz von 1,7 bis 2,0 a.u. ergibt (horizontale Linie in der Abbildung).

Die Einschränkung der Spektromerakzeptanz durch die Detektortotzeit spielt bei der Messung der Doppelionisation eine große Rolle. In Abbildung 2.12 (b) ist der Querschnitt $d^2\sigma/(dk_{e1||}dk_{e2||})$ für Doppelionisation dargestellt, wobei der Index 1 bzw. 2 die beiden emittierten Elektronen willkürlich numeriert. Neben den Grenzen der longitudinalen Impulsakzeptanz ist auch die errechnete Akzeptanzgrenze durch die Totzeit des Detektors von 10 ns eingezeichnet. In dem dargestellten differentiellen Querschnitt ist der Bereich unterdrückt, in dem beide Elektronen einen ähnlichen Longitudinalimpuls, also auch eine ähnliche Flugzeit, haben.

Die begrenzte Akzeptanz des Spektrometers kann einen Einfluß auf die Form und Normierung der differentiellen Wirkungsquerschnitte haben. Insbesondere bei Wirkungsquerschnitten, die über einen Teil des Impulsraums integriert sind, wird gleichzeitig auch über die Bereiche außerhalb der Akzeptanz integriert (z.B. im Querschnitt $d\sigma/dk_{e\parallel}$). Hier muß der Beitrag aus dem nicht nachgewiesenen Impulsraumsegment abgeschätzt werden. Bei vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten tritt dieses Problem nicht auf, da hier die Akzeptanzgrenzen eindeutig bestimmt werden können.

2.4.3 Test der Spektrometernauffösung

Die in den vorangegangenen Abschnitten diskutierte Auflösung des COLTRIM- und des Elektronenspektrometers läßt sich anhand der experimentellen Daten nur bedingt bestimmen, da die Impulsspektren breit verteilt sind und keine scharfen Strukturen aufweisen (Anm.: dies gilt nicht für Elektroneneinfang [FFD 02]). Im Experiment direkt zugänglich ist lediglich die kombinierte Longitudinalimpulsauffösung des COLTRIM- und des Elektronenspektrometers, nicht aber die transversale Impulsauffösung. Für die longitudinale Impulsbilanz ergibt sich aus Gl. 1.11:

$$k_{e\parallel} + p_{r\parallel} - \frac{k_{e\parallel}^2}{2v_p} = \frac{I_P + k_{e\perp}^2/2}{v_p} . \quad (2.25)$$

Für kleine Transversalimpulse des Elektrons und hohe Projektilgeschwindigkeiten v_p kann der Beitrag von $k_{e\perp}$ vernachlässigt werden, so daß die Summe der Impulse auf der rechten Seite der Gleichung konstant ist. Die Breite der mit den experimentellen Daten errechneten Impulsbilanz liefert dann die kombinierte longitudinale Impulsauffösung für Ionen und Elektronen.

In Abbildung 2.13 ist die mit Gleichung 2.25 errechnete longitudinale Impulsbilanz für Einfachionisation im Proton-Helium-Stoß bei einer Projektilenergie von 6 MeV ($v_p = 15,5$ a.u.) dargestellt. Dabei wurden nur die Ereignisse berücksichtigt, bei denen der Transversalimpuls des Elektrons weniger als 0,1 a.u. betrug. Die durch einen Gauß-Fit bestimmte Breite der Linie beträgt 0,12 a.u. und ist somit in hervorragender Übereinstimmung mit den in Kapitel 2.4.1 und 2.4.2 abgeschätzten Werten ($\Delta p_{r\parallel} \approx 0,12$ a.u., $\Delta k_{e\parallel} \approx 0,01$ a.u.).

Wie bereits erwähnt ist auf eine allgemeine Untersuchung der Auflösung und Akzeptanz bei der Bestimmung des Impulsübertrags verzichtet worden. Im Prinzip lassen sich alle Fehler und die Akzeptanz aus den in Kapitel 2.3.3 gegebenen Formeln herleiten. Dabei müssen jedoch folgende Punkte berücksichtigt werden:

- Die Fehler bei der Bestimmung von Rückstoßionen- und Elektronenimpuls sind nicht unkorreliert. Zwar gibt es sowohl für die Rückstoßionen als auch

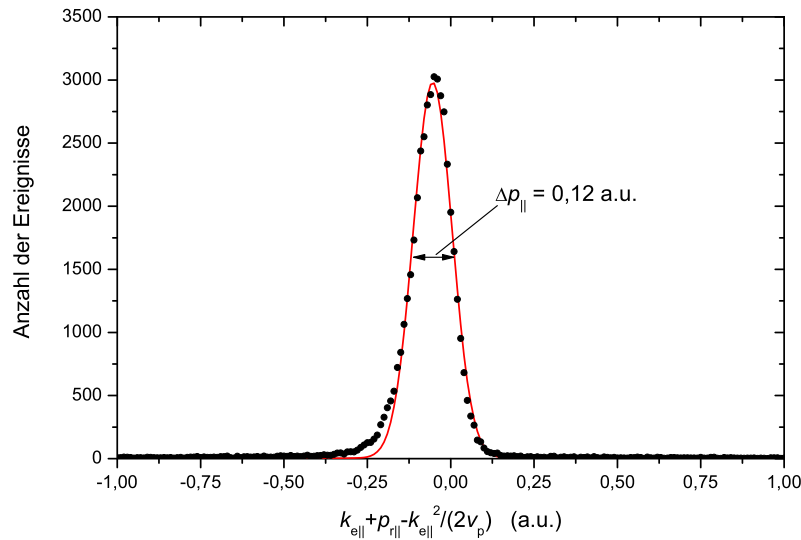


Abbildung 2.13: Experimentell bestimmte longitudinale Impulsaufösung.

für die Elektronen aufgrund der Ausdehnung des Reaktionsvolumens eine Unsicherheit über den Reaktionsort, es ist jedoch bekannt, daß beide Teilchen an exakt demselben Ort starten müssen. Dies führt im allgemeinen zu einer Vergrößerung des Fehlers des Impulsübertrags im Vergleich zur unkorrelierten Fehlerbetrachtung.

- Die Schwierigkeit bei der Angabe eines Akzeptanzbereichs liegt darin, daß sich für jeden beliebigen Impulsübertrag eine Kombination von Rückstoßionen- und Elektronenimpuls finden läßt, die mit dem Spektrometer nicht mehr nachgewiesen werden können. Das bedeutet einerseits, daß es für keinen Impulsübertrag eine vollständige Akzeptanz gibt, und andererseits, daß die quantitative Angabe des nachgewiesenen Anteils eines bestimmten Impulsübertrags die Kenntnis der Wirkungsquerschnitte voraussetzt. Bei der Untersuchung vollständig differentieller Wirkungsquerschnitte tritt dieses Problem jedoch nicht auf, da hier der Impulsraum vollständig bestimmt ist. Bei den untersuchten Stößen sind diese Effekte, zumindest bei kleinen Impulsüberträgen, weitgehend vernachlässigbar.

In der Tat muß bei der Untersuchung von Wirkungsquerschnitten, die differentiell bezüglich des Impulsübertrags sind, auf die Auflösung und Akzeptanz in angemessener Weise geachtet werden. Diese Faktoren wurden jedoch für den Einzelfall, d.h. für den gerade zu untersuchenden Wirkungsquerschnitt, bestimmt und berücksichtigt.

Kapitel 3

Theorie der stoßinduzierten Ionisation

Seit der ersten quantenmechanischen Beschreibung inelastischer atomarer Stöße von Bethe und Born (siehe z.B. [Bet30,Ino71]) wurden zahlreiche klassische, semiklassische und quantenmechanische Ansätze entwickelt, um die Elektronenemission in atomaren Stoßprozessen zu beschreiben (für einen Überblick siehe z.B. [SDR97,US03]). Die Schwierigkeit dabei besteht darin, daß sich die exakten Zustände bereits eines Drei-Körper-Systems, wie es zum Beispiel bei der Ionisation von Wasserstoff im Teilchenstoß auftritt, nicht mehr analytisch bestimmen lassen. Somit müssen Näherungen oder numerische Verfahren verwendet werden, um die Wirkungsquerschnitte zu berechnen.

Bei schnellen Stößen, wenn also die Projektilgeschwindigkeit höher als die Geschwindigkeit des im Target gebundenen Elektrons ist, kann häufig ein perturbativer Ansatz gewählt werden (z.B. in der Born-Theorie oder in *Distorted-Wave*-Modellen, siehe Kap. 3.2 und 3.3). In diesen Näherungen wird die Beschreibung des Systems in zwei Problemstellungen aufgeteilt: Erstens in die Beschreibung des Targetsystems im Anfangs- und im Endzustand (d.h. die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und dem Targetkern) und zweitens in die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Projektil und Target. Bei der Berücksichtigung der Projektil-Target-Wechselwirkung aber auch in der Targetbeschreibung (siehe dazu auch Kapitel 1.1.3 dieser Arbeit) unterscheiden sich verschiedene Ansätze dabei stark.

Nicht-perturbative Methoden werden vor allem bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten verwendet. Besonders erfolgreich sind dabei die *Exterior Complex Scaling*-Methode (ECS, [RBI99]) oder „gekoppelte-Kanäle“-Rechnungen¹ wie die *Convergent Close-Coupling*-Beschreibung (CCC, siehe z.B. [BS92]). Bei diesen Methoden wird

¹In der englischsprachigen Literatur werden dafür die Begriffe *coupled channel* und *close-coupling* verwendet. Beide Begriffe bezeichnen die gleiche Methode.

die zeitunabhängige Schrödingergleichung des Stoßsystems numerisch gelöst. Diese Methoden können jedoch nur für nicht zu schnelle und nicht zu schwere Projektile angewendet werden, da dabei eine Partialwellenentwicklung durchgeführt wird, die für große Projektil-Drehimpulse nicht mehr konvergiert. Ein weiterer Nachteil dieser Methoden ist der immense numerische Aufwand, der zur Lösung des Problems erforderlich ist.

In diesem Kapitel sollen die grundlegenden Konzepte einiger quantenmechanischer Näherungen erläutert werden. Für detailliertere Erläuterungen der theoretischen Methoden wird auf die entsprechende Literatur verwiesen.

3.1 Ein exakter quantenmechanischer Ansatz

Ausgangspunkt der nichtrelativistischen quantenmechanischen Beschreibung eines Stoßsystems ist die Schrödingergleichung. Diese Gleichung legt die Eigenzustände des Systems fest, die dann in Beziehung zu der Übergangswahrscheinlichkeit vom Anfangs- in einen bestimmten Endzustand $\sigma_{i \rightarrow f}$ gebracht werden können. In diesem Kapitel soll ein allgemeiner, exakter Ausdruck dafür gegeben werden, wie mit Hilfe der quantenmechanischen Zustände der Wirkungsquerschnitt bestimmt werden kann.

Sei

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V \\ &= H'_0 + V' \end{aligned} \tag{3.1}$$

der Hamilton-Operator des vollständigen Systems, der im Anfangszustand in einen ungestörten Operator H_0 und in eine Störung V und im Endzustand entsprechend in H'_0 und V' aufgeteilt werden kann. Bei der Beschreibung eines Ionisationsprozesses entspricht $H_0^{(i)}$ der Summe der Hamiltonoperatoren des freien Projektils und des ungestörten Targets ($H_0^{(i)} = H_{\text{Proj}} + H_{\text{Target}}$). $V^{(i)}$ stellt die Wechselwirkung zwischen dem Projektil- und Targetsystem dar. Die Aufteilung ist in diesem Fall für den Anfangs- und Endzustand identisch, d.h. $H_0 = H'_0$ und $V = V'$. Im folgenden soll jedoch die allgemeinere Formulierung aus Gl. 3.1, bei der auch $H_0 \neq H'_0$ und $V \neq V'$ gelten kann (dies ist z.B. bei der Beschreibung von Einfangprozessen zweckmäßig), diskutiert werden.

Die Eigenzustände des vollständigen und des ungestörten Systems $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ bzw. $|\phi'\rangle$ sind gegeben durch die (zeitunabhängige) Schrödingergleichung:

3.1. Ein exakter quantenmechanischer Ansatz

$$(H - E) |\psi\rangle = 0 \quad (3.2a)$$

$$(H_0 - E) |\phi\rangle = 0 \quad (3.2b)$$

$$(H'_0 - E) |\phi'\rangle = 0 . \quad (3.2c)$$

Die entsprechenden Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung sind

$$|\Psi\rangle = e^{-iEt} |\psi\rangle \quad \text{bzw.} \quad |\Phi^{(t)}\rangle = e^{-iEt} |\phi^{(t)}\rangle . \quad (3.3)$$

Zur Zeit $t \rightarrow -\infty$ (bzw. $V \rightarrow 0$) ist das System im (noch ungestörten) Anfangszustand $|\Phi_i\rangle$. Während das Projektil einläuft, ändert sich der Zustand in $|\Psi_i(t)\rangle$. Dieser geänderte Zustand ist Eigenzustand des Hamilton-Operators des vollständigen Systems H , da während des Stoßes die Störung V nicht mehr vernachlässigt werden kann. Anschaulich kann man diese Änderung des Zustands so verstehen, daß sich, sobald die Störung V einsetzt, der Vektor $|\Psi_i(t)\rangle$ bezüglich des Anfangszustandsvektors im Hilbertraum dreht². Somit ist $|\Psi_i(t)\rangle$ eine Superposition aus Eigenzuständen des ungestörten Hamiltonoperators H_0 bzw. H'_0 . Die Wahrscheinlichkeit, das System nach dem Stoß in dem (ungestörten) Endzustand $|\Phi'_f\rangle$ vorzufinden, ergibt sich dann durch die Projektion von $\lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi_i(t)\rangle$ auf diesen Endzustand. Das Übergangsmatrixelement A_{fi} schreibt sich also als

$$A_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Phi'_f | \Psi_i \rangle . \quad (3.4)$$

Mit diesem Übergangsmatrixelement kann dann der Wirkungsquerschnitt durch $\sigma_{i \rightarrow f} \propto |A_{fi}|^2$ ausgerechnet werden.

Der in Gleichung 3.4 gegebene Ausdruck ist jedoch ungeeignet, um das Übergangsmatrixelement zu berechnen. Das Hauptproblem besteht darin, daß diese Gleichung für $t \rightarrow \infty$ aufgrund der Phasen der Zustände (siehe Gl. 3.3) ein oszillierendes Integral enthält. Um also ein anwendbares Ergebnis zu erhalten, muß Gleichung 3.4 weiter umgeformt werden.

Unter der Bedingung, daß $|\Phi'_f\rangle$ und $|\Psi_i\rangle$ im Grenzfall $t \rightarrow -\infty$ orthogonal sind (was in einem Ionisationsprozeß gegeben ist), kann das Übergangsmatrixelement auch geschrieben werden als

$$A_{fi} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi'_f | \Psi_i \rangle . \quad (3.5)$$

²Diese Drehung entspricht der Wirkung eines unitären Zeitentwicklungsoperators. Näheres dazu findet sich in [MC70].

Mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 A_{fi} &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Phi'_f | (H - H'_0) | \Psi_i \rangle \\
 &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Phi'_f | V' | \Psi_i \rangle \\
 &= -i \langle \phi'_f | V' | \psi_i^+ \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E_f - E_i)t} \\
 &= -2\pi i \langle \phi'_f | V' | \psi_i^+ \rangle \delta(E_f - E_i) .
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Das „+“ bei $|\psi_i^+\rangle$ bedeutet, daß dieser Zustand die Randbedingungen für die auslaufende Welle erfüllt, d.h. mit anderen Worten, daß der Zustand $|\psi_i^+\rangle$ sich aus dem Zustand $|\phi_i\rangle$ „entwickelt“.

Das **exakte** Übergangsmatrixelement läßt sich nun schreiben als

$$A_{fi} = -2\pi i T^{fi} \delta(E_f - E_i) \tag{3.7}$$

mit

$$T^{fi} = \langle \phi'_f | V' | \psi_i^+ \rangle \quad \textit{post-Form} \tag{3.8a}$$

$$= \langle \psi_f^- | V | \phi_i \rangle \quad \textit{prior-Form} . \tag{3.8b}$$

Dabei ist T^{fi} die sogenannte T -Matrix. Der in Gl. 3.8a gegebene Ausdruck für T ergibt sich aus Gleichung 3.6 und wird auch *post-Form* genannt. Formal läßt sich die oben durchgeführte Herleitung in der Zeit t auch umkehren, d.h. der Endzustand ändert sich mit der (rückwärtsgerichteten) Zeit durch die Störung V und kann dann im Grenzwert $t \rightarrow -\infty$ auf den Anfangszustand projiziert werden, um das Übergangsmatrixelement zu erhalten. Das dazugehörige T -Matrix-Element schreibt sich dann in der *prior-Form* und ist in Gl. 3.8b gegeben. Dabei muß der Zustand ψ_f^- den Randbedingungen der einlaufenden Welle genügen, was durch das Minus gekennzeichnet ist. Somit sind die beiden Ausdrücke für die T -Matrix identisch, und können beide zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts verwendet werden.

Das mit Gleichung 3.7 und 3.8 gegebene Übergangsmatrixelement ist die exakte Lösung für das Streuproblem. Die Schwierigkeit besteht jedoch darin, den Eigenzustand $|\psi_i^+\rangle$ bzw. $|\psi_f^-\rangle$ des vollständigen Hamilton-Operators H zu bestimmen. Dies ist bereits für die einfachsten Stoßsysteme mit einem Wasserstofftarget nicht mehr analytisch möglich. Trotzdem ist der oben gegebene Ausdruck der Ausgangspunkt vieler quantenmechanischer Rechnungen. Einige dieser Methoden werden in den folgenden Kapiteln vorgestellt.

3.2 Die Bornsche Näherung

In der Bornschen Näherung wird das gesamte Stoßsystem in das Projektil- und das Targetsystem aufgeteilt, die beide vor und nach dem Stoß unabhängig voneinander sind. Somit ist der Hamiltonoperator folgendermaßen gegeben:

$$H = H_0 + V = H_{\text{Proj}} + H_{\text{Target}} + V \quad (3.9)$$

mit

$$V = V' = \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} . \quad (3.10)$$

Dabei ist H_{Proj} der Hamiltonoperator des freien Projektils, H_{Target} der Hamiltonoperator des ungestörten Targets und V die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem Targetsystem. Z_P bzw. Z_T sind die Ladungen des Projektils bzw. des Targetkerns, \mathbf{R} der Ort des Projektils und \mathbf{r}_j der Ort des j -ten Elektrons (der Targetkern ruht im Ursprung). Somit können die Eigenzustände des ungestörten Systems $|\phi\rangle$ bestimmt werden. Es ergibt sich:

$$|\phi\rangle = |\varphi, \mathbf{p}_P\rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}_P \cdot \mathbf{R}} |\varphi\rangle . \quad (3.11)$$

Das Projektil mit dem Impuls \mathbf{p}_P wird durch eine ebene Welle beschrieben, der Zustand des Targetelektrons ist durch $|\varphi\rangle$ gegeben.

Der Zustand $|\psi^\pm\rangle$, der ein Eigenzustand zum Hamiltonoperator H des Gesamtsystems ist, wird in der Bornschen Näherung durch eine Reihenentwicklung bestimmt. Dazu wird ein exakter Ausdruck für die Lösung der Schrödingergleichung $(E - H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle$ verwendet, der iterativ gelöst werden kann. Ein solcher Ausdruck ist durch die „Lippmann-Schwinger-Gleichung“ gegeben:

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm V |\psi^\pm\rangle . \quad (3.12)$$

G_0^\pm ist dabei der freie Greensche Operator, der sich aus

$$G_0^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \quad (3.13)$$

ergibt. Eine genauere Herleitung der Lippmann-Schwinger-Gleichung findet sich z.B. in [MC70]. Mit Hilfe von Gleichung 3.12 kann nun der Zustand $|\psi_i^+\rangle$ iterativ bestimmt werden. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} |\psi_i^{(0)+}\rangle &= |\phi_i\rangle \\ |\psi_i^{(1)+}\rangle &= |\phi_i\rangle + G_0^+ V |\phi_i\rangle \\ |\psi_i^{(2)+}\rangle &= |\phi_i\rangle + G_0^+ V |\phi_i\rangle + G_0^+ V G_0^+ V |\phi_i\rangle \\ |\psi_i^{(3)+}\rangle &= \dots . \end{aligned} \quad (3.14)$$

Setzt man den so bestimmten Zustand in Gleichung 3.8a ein, erhält man die Bornsche Reihe:

$$T^{fi} = \langle \phi_f | V | \phi_i \rangle + \langle \phi_f | V G_0^+ V | \phi_i \rangle + \langle \phi_f | V G_0^+ V G_0^+ V | \phi_i \rangle + \dots \quad (3.15)$$

Diese Reihe ist eine Entwicklung nach den Potenzen des Störoperators V . Für ein durch Gleichung 3.10 gegebenes Störpotential entspricht dies einer Potenzreihenentwicklung nach der Störung $\eta = Z_P/v_P$ (unter Vernachlässigung einer Abhängigkeit von $\ln v_P$, v_P : Projektilgeschwindigkeit). Voraussetzung für die Konvergenz der Bornschen Reihe ist also $\eta < 1$.

Da das Störpotential V die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetsystem darstellt, kann der Ausdruck aus Gleichung 3.15 wie folgt interpretiert werden: Der erste Term entspricht der einmaligen Wechselwirkung von Projektil und Target, also dem Austausch eines „virtuellen“ Photons, der zweite Term entspricht der zweimaligen Wechselwirkung und die weiteren Terme entsprechend mehrfachen Wechselwirkungen. Der freie Greensche Operator G_0^+ stellt dabei die Propagation des Systems zwischen den einzelnen Wechselwirkungen dar.

In der Praxis wird häufig nur der erste Term der Bornschen Reihe berechnet. Hierbei spricht man von der „Ersten Bornschen Näherung“. Ist die Störung η in dem zu untersuchenden Stoßsystem jedoch zu groß, müssen auch „Beiträge höherer Ordnung“ berücksichtigt werden. Dies kann durch die Hinzunahme des zweiten Terms, also in der „Zweiten Bornschen Näherung“, erreicht werden. Hier treten jedoch bereits Schwierigkeiten auf, die nur durch weitere Vereinfachungen gelöst werden können. Weitere Terme der Bornschen Reihe werden in aller Regel nicht berücksichtigt, da ihre Berechnung mit größten Schwierigkeiten verbunden ist.

3.2.1 Die Erste Bornsche Näherung

Bei der Ersten Bornschen Näherung wird in der Bornschen Reihe nur der erste Term berücksichtigt. Die entsprechende T -Matrix ist dann durch

$$T_{1B}^{fi} = \langle \phi_f | V | \phi_i \rangle \quad (3.16)$$

gegeben. Zusammen mit Gleichung 3.10 und 3.11 ergibt sich:

$$T_{1B}^{fi} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{R} d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \varphi_f^*(\mathbf{r}) \left(\frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \right) \varphi_i(\mathbf{r}) . \quad (3.17)$$

Dabei ist \mathbf{q} der Impulsübertrag vom Projektil auf das Target. Wird die Integration über \mathbf{R} durchgeführt, erhält man (Näheres z.B. in [MC70]):

$$T_{1B}^{fi} = \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi_f \left| Z_T - \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right| \varphi_i \right\rangle . \quad (3.18)$$

3.2. Die Bornsche Näherung

Dabei entspricht der Z_T -Anteil des Operators der Kern-Kern-Wechselwirkung, also dem R^{-1} -Anteil des Störoperators. Da der Anfangs- und Endzustand des Targets $|\varphi_i\rangle$ und $|\varphi_f\rangle$ beide Eigenzustände des gleichen Hamiltonoperators H_{Target} sind, sind sie bei einem Ionisationsprozeß orthogonal. Somit verschwindet der erste Teil des Operators, d.h. die Kern-Kern-Wechselwirkung trägt in der Ersten Bornschen Näherung nicht zum Wirkungsquerschnitt bei. Gleichung 3.18 vereinfacht sich also weiter zu

$$T_{1B}^{fi} = \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi_f \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right| \varphi_i \right\rangle. \quad (3.19)$$

Dies ist ein häufig verwendeter Ausdruck zur Bestimmung der Ersten-Born-Amplitude. Um diese explizit zu berechnen, müssen lediglich die gebundenen Zustände $|\varphi_i\rangle$ und die Kontinuumszustände $|\varphi_f\rangle$ des ungestörten Targets bestimmt werden. Im Falle eines Wasserstofftargets ist dies exakt möglich. Hier sind die Zustände gegeben durch:

$$|\varphi_i\rangle = |\varphi_{1s}^H\rangle \quad (3.20a)$$

$$|\varphi_f\rangle = |CW\rangle. \quad (3.20b)$$

Dabei ist $|\varphi_{1s}^H\rangle$ der gebundene $1s$ -Grundzustand des Wasserstoffs und $|CW\rangle$ eine sogenannte „Coulombwelle“ (ein Ausdruck für $|CW\rangle$ findet sich in zahlreichen Lehrbüchern, z.B. [MC70, SDR97]).

Bei Targets mit mehreren Elektronen ist die Verwendung von genauen Wellenfunktionen häufig recht schwierig. Zum einen ist die Bestimmung dieser Eigenzustände mit großem Aufwand verbunden und nur numerisch möglich, zum anderen erschwert die Verwendung dieser Zustände auch die Berechnung der T -Matrix. Darum wird in vielen Rechnungen zur Einfachionisation häufig ein wasserstoffähnliches Target mit einer effektiven Kernladung $Z_{T,\text{eff}}$ angenommen (siehe Kapitel 1.1.3 dieser Arbeit). Bei der Doppelionisation ist dies jedoch nicht mehr möglich. Wird hier die Wellenfunktion der beiden Elektronen als ein unkorreliertes Produkt zweier wasserstoffähnlicher Wellenfunktionen angenommen, verschwindet die in Gl. 3.19 angegebene T -Matrix. Um in der Ersten Bornschen Näherung den Wirkungsquerschnitt der Doppelionisation berechnen zu können muß explizit die Korrelation der beiden Elektronen berücksichtigt werden.

Zusammenfassend kann also festgestellt werden, daß in der Ersten Bornschen Näherung alle Effekte höherer Ordnung in der Projektil-Target-Wechselwirkung vernachlässigt werden. Das heißt, hier werden weder die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem Targetkern noch mehrfache Stöße mit den Targetelektronen berücksichtigt. Außerdem tritt auch keine Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte vom Vorzeichen der Projektilladung auf (aus Gl. 3.19 folgt $\sigma_{i\rightarrow f} \propto \left| T_{1B}^{fi} \right|^2 \propto Z_P^2$). Somit

sind projektilladungsabhangige Effekte wie die *post collision interaction* in diesem Ansatz nicht erklarbar. Zum Teil konnen solche Effekte in der Zweiten Bornschen Naherung berucksichtigt werden.

3.2.2 Die Zweite Bornsche Naherung

In der Zweiten Bornschen Naherung werden die ersten beiden Terme der Bornschen Reihe (Gl. 3.15) berucksichtigt. Deshalb mu zusatzlich zur Amplitude der Ersten Bornschen Naherung auch die Zweite-Born-Amplitude T_{2B}^{fi} berechnet werden. Diese ist gegeben durch

$$T_{2B}^{fi} = \langle \phi_f | V G_0^+ V | \phi_i \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\langle \phi_f \left| V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V \right| \phi_i \right\rangle. \quad (3.21)$$

Ein Problem bei der Bestimmung dieses Matrixelements ist, da der ungestorte Hamiltonoperator H_0 im Nenner des Operators auftritt. Ist jedoch $|\varphi_n, \mathbf{p}_P\rangle$ (vgl. Gl. 3.11) der vollstandige Satz von Eigenfunktionen zu dem Hamiltonoperator H_0 , so kann $\sum_n \int d^3 \mathbf{p}_P |\varphi_n, \mathbf{p}_P\rangle \langle \varphi_n, \mathbf{p}_P| (= 1)$ in Gleichung 3.21 eingefugt werden, soda sich

$$T_{2B}^{fi} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_n \int d^3 \mathbf{p}_P \frac{\langle \phi_f | V | \varphi_n, \mathbf{p}_P \rangle \langle \varphi_n, \mathbf{p}_P | V | \phi_i \rangle}{E - E_n - E_P + i\varepsilon} \quad (3.22)$$

ergibt. Diese Gleichung kann so interpretiert werden, da das System im ersten Schritt vom Anfangszustand $|\phi_i\rangle$ in einen Zwischenzustand $|\varphi_n, \mathbf{p}_P\rangle$ und im zweiten Schritt in den Endzustand $|\phi_f\rangle$ ubergeht. E_n und E_P sind dabei die Energien des Targetsystems und Projektils im Zwischenzustand.

Bei der Berechnung der Zweiten-Born-Amplitude mit Hilfe von Gleichung 3.22 tritt nun ein neues Problem auf: Hier mu eine unendliche Summe gehandhabt werden. Diese Schwierigkeit lasst sich jedoch durch eine einfache Naherung umgehen. Wird die Energie E_n des Targets im Zwischenzustand durch eine gemittelte Energie \bar{E}_n ersetzt, kann die Summe $\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = 1$ ausgefuhrt werden. Bei dieser Naherung spricht man auch von der *closure approximation*. Wird auerdem Gleichung 3.22 so umgeformt, wie dies schon in den Gleichungen 3.17 und 3.18 in der Ersten Bornschen Naherung durchgefuhrt wurde, erhalt man eine Zweite-Born-Amplitude, die sich schreibt als

$$T_{2B}^{fi} = \left(\frac{Z_P}{2\pi^2} \right)^2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3 \mathbf{p}_P \frac{\left\langle \phi_f \left| Z_T^2 - Z_T \sum_j (e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} + e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_j}) + \sum_{i,j} e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j} \right| \phi_i \right\rangle}{q_1^2 q_2^2 (E - \bar{E}_n - E_P + i\varepsilon)}. \quad (3.23)$$

Dabei ist $\mathbf{q}_1 = \mathbf{p}_P^i - \mathbf{p}_P$ der Impuls, der in der ersten Wechselwirkung auf das Target ubertragen wird, und $\mathbf{q}_2 = \mathbf{p}_P - \mathbf{p}_P^f$ der Impulsubertrag in der zweiten Wechselwirkung.

Die verschiedenen Terme in Gleichung 3.23 haben eine einfache physikalische Deutung. Der Teil des Übergangsmatrixelements, der $e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j}$ und $e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_j}$ enthält, beschreibt Stöße, bei denen das Projektil einmal mit dem j -ten Targetelektron und einmal mit dem Targetkern wechselwirkt. Der Term mit $e^{i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_j}$ entspricht Stößen, bei denen das Projektil erst am j -ten und dann am i -ten Elektron gestreut wird. Für $i = j$ wird das Projektil zweimal am gleichen Elektron gestreut. Der Teil des Übergangsmatrixelements mit Z_T^2 stellt die Doppelstreuung des Projektils am Targetkern dar. Für inelastische Stöße verschwindet dieser Beitrag aufgrund der Orthogonalität des Anfangs- und des Endzustands.

Somit kann in der Zweiten Bornschen Näherung die Kern-Kern-Wechselwirkung in einem inelastischen Stoß berücksichtigt werden. Auch ein Doppelionisationsprozeß, bei dem die beiden Elektronen sequentiell durch zwei Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target emittiert werden³, kann bereits mit unkorrelierten elektronischen Zuständen durch Gleichung 3.23 beschrieben werden. Die PCI ist ebenfalls zum Teil berücksichtigt, da ein Elektron nach der eigentlichen Ionisation noch ein zweites Mal mit dem Projektil wechselwirken kann. Auf diese Weise kann unter Berücksichtigung der Zweiten-Born-Amplitude häufig die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment deutlich verbessert werden [MWW98].

Der Wirkungsquerschnitt in der Zweiten Bornschen Näherung ergibt sich aus

$$\sigma_{i \rightarrow f} \propto \left| T_{1B}^{fi} + T_{2B}^{fi} \right|^2 = \alpha_1^{fi} Z_P^2 + \alpha_2^{fi} Z_P^3 + \alpha_3^{fi} Z_P^4 . \quad (3.24)$$

α^{fi} sind dabei Koeffizienten, die sich durch die explizite Berechnung der Übergangsamplituden mit den Gleichungen 3.19 und 3.23 bestimmen lassen. In Gleichung 3.24 entspricht der erste Term dem reinen Ein-Schritt- und der letzte dem reinen Zwei-Schritt-Prozeß. Der mittlere Term stellt die Interferenz zwischen diesen beiden Prozessen dar. Durch diese Interferenz tritt eine Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts vom Vorzeichen der Projektilladung auf.

Wird zusätzlich auch die Dritte-Born-Amplitude, die mit Z_P^3 skaliert, berücksichtigt, ergibt sich durch die Interferenz zwischen der Ersten- und Dritten-Born-Amplitude ein weiterer Beitrag zum Z_P^4 -Term in Gleichung 3.24. Somit enthält die Zweite Bornsche Näherung nur einen Teil des Z_P^4 -Anteils des Wirkungsquerschnitts. Aus diesem Grund wird in vielen Rechnungen mit der Zweiten Bornschen Näherung der letzte Term in Gleichung 3.24 vernachlässigt (siehe z.B. [VNU03]).

3.2.3 Eine alternative Methode: Die 3C-Wellenfunktion

Die Berücksichtigung Höherer-Ordnungs-Effekte in der Bornschen Näherung ist in aller Regel recht schwierig, da hier zumindest die Zweite-Born-Amplitude berechnet

³Hierbei spricht man von einem *two-step* 2-Prozeß (TS2). Siehe auch Anhang A.2.

werden muß. Deshalb wird häufig ein anderer Weg gewählt, um z.B. die PCI in das Modell einzubeziehen.

Ausgehend von der *prior*-Form aus Gleichung 3.8b und dem Störpotential, das durch Gleichung 3.10 gegeben ist, kann mit dem Zustand $|\psi_f^-\rangle$ die T -Matrix bestimmt werden. In der Bornschen Methode wird dieser Zustand nach der Störung entwickelt, sodaß in der Ersten Bornschen Näherung gilt: $|\psi_f^-\rangle = |\phi_f\rangle$. Alternativ kann jedoch versucht werden, den Zustand $|\psi_f^-\rangle$ direkt durch eine „bessere“ Beschreibung, eine sogenannte „Ansatz-Wellenfunktion“, zu nähern (Ein Überblick findet sich z.B. in [LRW99]).

Eine dabei sehr häufig verwendete Beschreibung, die sogenannte 3C-Wellenfunktion, wurde von Brauner *et al.* vorgeschlagen [BBK89, BBK 91]. Hier wird $|\psi_f^-\rangle$ durch das Produkt dreier Coulombwellen genähert:

$$|\psi_f^-\rangle \simeq |3C\rangle = |CW(1)CW(2)CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle . \quad (3.25)$$

Die erste Coulombwelle $CW(1)$ entspricht dabei der Wechselwirkung zwischen dem ionisierten Elektron und dem Targettrumpf, die bereits in der Ersten Bornschen Näherung berücksichtigt wird (vgl. Gl. 3.20b). Die zweite Coulombwelle $CW(2)$ repräsentiert die Wechselwirkung zwischen dem Targettrumpf und dem auslaufenden Projektil. Die dritte Coulombwelle $CW(1 \leftrightarrow 2)$ stellt die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem ionisierten Elektron dar. Somit wird das Drei-Teilchen-Kontinuum im Endzustand durch das Produkt dreier Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen genähert.

Im Vergleich mit Ersten Bornschen Näherung verbessert die Verwendung der Ansatz-Wellenfunktionen im allgemeinen die Übereinstimmung der gerechneten mit den experimentellen Wirkungsquerschnitten deutlich. Dies liegt daran, daß in dieser Methode explizit die PCI einbezogen ist. Dennoch ist vor allem bei großen Störungen, wenn das Projektil die Targetwellenfunktion bereits im Anfangszustand beeinflusst, oder auch wenn das Projektil dem Target im Stoß sehr nahe kommt, die Diskrepanz zwischen Rechnung und Experiment häufig recht groß [LRW99]. In einem systematischerer Ansatz, der durch die *Distorted Wave*-Methoden gegeben ist, kann die Übereinstimmung mit dem Experiment jedoch verbessert werden.

3.3 *Distorted Wave*-Rechnungen

In der Bornschen Näherung wird angenommen, daß das Targetsystem im Anfangs- und im Endzustand nicht durch das Projektil beeinflusst wird. Vor allem bei großen Störungen η ist diese Annahme jedoch, aufgrund der langen Reichweite des Coulombpotentials, nicht mehr gerechtfertigt. Sowohl im Anfangs- als auch im Endzustand kann die Targetwellenfunktion durch das Feld des Projektils „verzerrt“ (engl.:

3.3. Distorted Wave-Rechnungen

distorted) werden. Bei der Bornschen Reihe zeigt sich dieses Phänomen darin, daß die Entwicklung nicht mehr oder nur langsam konvergiert. Das aktive Elektron bewegt sich also nicht nur im Potential des Targetrumpfes, sondern auch im Potential des Projektils. Dabei treten „Zwei-Zentren-Effekte“ auf, die mit Hilfe von *Distorted Wave*-Näherungen berücksichtigt werden können (Ein Überblick findet sich z.B. in [FPR91]).

Bei dieser Methode wird, ausgehend von dem in Kapitel 3.1 gegebenen Ansatz, zunächst der Hamiltonoperator H des Systems für den Anfangs- und den Endzustand in einen ungestörten Anteil und in eine Störung aufgeteilt:

$$H = H_0 + V = H_0 + U + W \quad (3.26a)$$

$$= H'_0 + V' = H'_0 + U' + W' . \quad (3.26b)$$

Dabei sind U und U' sogenannte *Distortion*-Potentiale, die das Verhalten des weitreichenden Coulombfeldes beinhalten. Die zugehörigen Störpotentiale W und W' sind schwächer als die Störung V in der Bornschen Näherung aus Gleichung 3.10. Im allgemeinen sind dabei die Operatoren U und W nicht hermitesch. Die „verzerrten“ Eigenfunktionen $|\chi^\pm\rangle$ des Systems sind dann durch die Schrödinger-Gleichung

$$(H_0 + U - E) |\chi^+\rangle = 0 \quad (3.27a)$$

$$(H'_0 + U' - E) |\chi^-\rangle = 0 \quad (3.27b)$$

gegeben. Für das T -Matrix-Element ergibt sich aus Gleichung 3.8a in der *post*-Form⁴:

$$T^{fi} = \langle \chi_f^- | W'^\dagger | \psi_i^+ \rangle + \langle \chi_f^- | V - W'^\dagger | \phi_i \rangle . \quad (3.28)$$

In dem *Distorted Wave*-Ansatz wird also ein Teil der Wechselwirkung zwischen Projektil und Target in der Endzustandswellenfunktion berücksichtigt, wodurch sich die „Stärke“ des Störoperators (von V' nach W') reduziert. Der hier gegebene Ausdruck für die T -Matrix ist, wie der entsprechende Ausdruck aus Gl. 3.8, exakt. Im Allgemeinen ist dabei der Beitrag des zweiten Terms sehr gering, er verschwindet jedoch nicht⁵. In den allermeisten Fällen wird dieser Term in der Rechnung vernachlässigt und Gleichung 3.28 (in der ersten Ordnung von W') genähert durch (siehe z.B. [FPR91])

$$T^{fi} = \langle \chi_f^- | W'^\dagger | \chi_i^+ \rangle . \quad (3.29)$$

Ausgehend von Gleichung 3.28 bzw. 3.29 gibt es zahlreiche theoretische Modelle, die sich alle durch die Potentiale U und somit durch die verzerrten Zustände $|\chi\rangle$

⁴Die Herleitung dieses Ausdrucks ist nicht trivial und findet sich z.B. in [MC70].

⁵Wie sich leicht zeigen läßt, liegt das Nichtverschwinden des zweiten Terms genau daran, daß der Operator W' im allgemeinen nicht hermitesch bezüglich des Zustandes $|\chi_f^-\rangle$ ist.

unterscheiden. Dabei können zwei unterschiedliche Wege beschrrieben werden. Entweder wird zuerst das Potential U gewählt, wodurch mit Gl. 3.27a bzw. 3.27b die Zustände $|\chi\rangle$ bestimmt sind, oder es werden zunächst die verzerrten Zustände $|\chi\rangle$ festgelegt. Die Wirkung des Störpotentials W' auf den Zustand $|\chi_f^-\rangle$ ergibt sich dann mit Gl. 3.27b zu

$$W' |\chi_f^-\rangle = (H'_0 + U' + W' - E) |\chi_f^-\rangle = (H - E) |\chi_f^-\rangle . \quad (3.30)$$

Eine besonders erfolgreiche *Distorted Wave*-Näherung bei der Beschreibung der Ionisation in Ion-Atom-Stößen ist der *Continuum Distorted Wave – Eikonal Initial State*-Ansatz (CDW-EIS). Mit ihm konnten Elektronenemissionsspektren bis hin zu extrem hohen Störungen reproduziert werden [MFS 99]. Im folgenden Kapitel soll dieser Ansatz näher erläutert werden.

3.3.1 Die CDW-EIS-Näherung

Die erste Beschreibung der Einfachionisation durch *Continuum Distorted Waves* (CDW) wurde von Belkić vorgeschlagen [Bel78]. Dabei wird $|\chi\rangle$ im Anfangs- und im Endzustand wie folgt gewählt:

$$|\chi_{i,f}^{\pm\text{CDW}}\rangle = |\phi_{i,f}\rangle |CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle . \quad (3.31)$$

Die ungestörten Zustände des Targetelektrons $|\phi_{i,f}\rangle$ (siehe Gl. 3.11) werden hier durch die Coulombwelle $|CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle$, also die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron, vor und nach dem Stoß verzerrt.

Im Vergleich mit dem Experiment zeigte sich jedoch, daß dieser sogenannte CDW-Ansatz in vielen Fällen sogar schlechtere Übereinstimmung liefert als die Erste Bornsche Näherung (siehe z.B. [Bel78]). Die Ursache für die beobachteten Abweichungen wurde darin gesehen, daß sich die Zustände $|\chi^{\text{CDW}}\rangle$ nicht richtig normieren lassen [Cro82]. Diese Normierung ist vor allem für den Anfangszustand sehr kritisch. Aus diesem Grund wurde von Crothers *et al.* [CM83] die CDW-EIS-Näherung vorgeschlagen. In diesem Ansatz sind die verzerrten Anfangs- und Endzustände durch

$$|\chi_f^{-\text{CDW}}\rangle = |\phi_f\rangle |CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle \quad (3.32a)$$

$$|\chi_i^{+\text{EIS}}\rangle = |\phi_i\rangle |EP(1 \leftrightarrow 2)\rangle \quad (3.32b)$$

gegeben, d.h. der Endzustand entspricht der Beschreibung in der CDW-Näherung, im Anfangszustand wird jedoch die Coulombwelle $|CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle$ durch eine Eikonal-Phase $|EP(1 \leftrightarrow 2)\rangle$ ersetzt (ein Ausdruck für $|EP\rangle$ findet sich z.B. in [FPR91]).

Diese Eikonalphase, die ebenfalls die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron (im Anfangszustand) beschreibt, hat dasselbe asymptotische Verhalten wie eine Coulombwelle, sie läßt sich darüberhinaus jedoch normieren.

Im Gegensatz zur Ersten und Zweiten Bornschen Näherung werden in dieser Beschreibung Effekte in allen Ordnungen von V (allerdings nicht vollständig) einbezogen. Inzwischen wurde der CDW-EIS-Ansatz, meistens in der semiklassischen Näherung⁶, zur Berechnung der totalen und differentiellen Wirkungsquerschnitte in etlichen Stoßsystemen verwendet. Dabei konnte eine beeindruckende Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment erreicht werden. So wurde z.B. der ECC-*cusp* (siehe Kap. 1.1.1), der dem Einfang eines Elektrons ins Kontinuum des Projektils entspricht und somit ein reiner „Zwei-Zentren-Effekt“ ist, im Rahmen dieser Methode berechnet (z.B. [COG02]). Auch für extrem große Störungen, bei denen starke PCI-Effekte auftreten, konnten experimentelle Elektronenemissionsspektren der Einfachionisation reproduziert werden (z.B. [MFS 99]). Zur Berechnung differentieller Doppelionisationsquerschnitte wurde die CDW-EIS-Näherung ebenfalls erfolgreich eingesetzt, wobei jedoch die Elektronen meist unkorreliert beschrieben werden⁷ (z.B. [McC97, KGM 03]).

Bei der Untersuchung differentieller Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit vom Impulsübertrag wurden bei großen Störungen jedoch Diskrepanzen zwischen Experiment und CDW-EIS-Näherung gefunden [MPS 01]. Diese Abweichungen konnten durch die Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung reduziert werden. Um diese Wechselwirkung in die CDW-EIS-Rechnung einzubeziehen, können die Zustände $|\chi\rangle$ aus Gleichung 3.32 ähnlich der 3C-Wellenfunktion als das Produkt aus drei Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen geschrieben werden. Der Teil der Wellenfunktion, welcher der Kern-Kern-Wechselwirkung entspricht, wird dabei im einfachsten Fall durch eine Coulombwelle [SMF 03a] oder eine Eikonal-Phase [VNU03] ausgedrückt.

3.4 Die Methode der gekoppelten Kanäle

Bei den bisher diskutierten Methoden wird zur Berechnung der T -Matrix der Zustand $|\psi\rangle$ störungstheoretisch genähert. Alternativ kann $|\psi\rangle$ jedoch auch nicht-perturbativ durch Lösen der Schrödingergleichung 3.2a bestimmt werden. Dies ist mit Hilfe sogenannter Gekoppelter-Kanäle-Rechnungen möglich.

Dazu wird eine Basisentwicklung des Zwei-Teilchen-Zustands $|\psi_i^+(\mathbf{R}, \mathbf{r})\rangle$ (für ein

⁶In der semiklassischen Näherung wird das Projektil als klassisches Teilchen angenommen, d.h. es bewegt sich auf einer geraden Trajektorie, die durch $\mathbf{R}(t)$ bestimmt ist, am Target vorbei.

⁷Die Abstoßung der Elektronen im Endzustand wird häufig durch den sog. „Gamov-Faktor“ berücksichtigt.

Ein-Elektronen-Target) durchgeführt:

$$|\psi_i^+(\mathbf{R}, \mathbf{r})\rangle = \sum_n^f |f_n(\mathbf{R})\rangle |\varphi_n(\mathbf{r})\rangle . \quad (3.33)$$

Der Zustand des Gesamtsystems wird also als eine Superposition aller ungestörten (sowohl gebundenen als auch freien) Zustände $|\varphi_n\rangle$ des Targetelektrons geschrieben. Dabei muß über alle gebundenen Zustände summiert und über die Kontinuumszustände integriert werden. Für den Elektronenstoß muß die in Gl. 3.33 gegebene Wellenfunktion entsprechend antisymmetrisiert werden. $|\varphi_n\rangle$ erfüllt die Schrödingergleichung:

$$H_{\text{Target}} |\varphi_n\rangle = \left(-\frac{\Delta_{\mathbf{r}}}{2} - \frac{Z_{\text{T}}}{r} \right) |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle . \quad (3.34)$$

Um mit Hilfe von Gleichung 3.33 den Zustand $|\psi_i^+\rangle$ berechnen zu können, muß zunächst der vom Projektilort \mathbf{R} abhängige Anteil $|f_n\rangle$ der Wellenfunktion bestimmt werden. Eine Bedingung, die diesen Anteil festlegt, ergibt sich aus der Schrödingergleichung 3.2a, mit der man (zusammen mit Gln. 3.33 und 3.34)

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \varphi_n | (H - E) | \psi_i^+ \rangle = \sum_{n'}^f \langle \varphi_n | H | \varphi_{n'} \rangle |f_{n'}\rangle - \sum_{n'}^f \langle \varphi_n | E | \varphi_{n'} \rangle |f_{n'}\rangle \\ &= E_n |f_n\rangle + H_{\text{Proj}} |f_n\rangle + \sum_{n'}^f \langle \varphi_n | V(\mathbf{R} - \mathbf{r}) | \varphi_{n'} \rangle |f_{n'}\rangle - E |f_n\rangle \end{aligned} \quad (3.35)$$

erhält. Daraus ergibt sich die „Gekoppelte-Kanäle“-Gleichung

$$\left(E + \frac{\Delta_{\mathbf{R}}}{2} - E_n \right) |f_n(\mathbf{R})\rangle = \sum_{n'}^f \langle \varphi_n(\mathbf{r}) | V(\mathbf{R} - \mathbf{r}) | \varphi_{n'}(\mathbf{r}) \rangle |f_{n'}(\mathbf{R})\rangle . \quad (3.36)$$

Diese Gleichung kann nun numerisch gelöst werden um $|f_n\rangle$ und somit den Zustand $|\psi_i^+\rangle$ zu erhalten. Die T -Matrix ergibt sich dann aus Gleichung 3.8a.

Beim Lösen von Gleichung 3.36 treten jedoch einige Probleme auf. Zum einen müssen unendlich viele (freie und gebundene) Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ des Targetsystems berücksichtigt werden. Zum anderen sind die freien Zustände nicht diskret, d.h. in diesem Fall müßte über die Zustände integriert statt summiert werden. Dies führt dazu, daß Gleichung 3.36 in dieser Form auch numerisch kaum gelöst werden kann. Deshalb wurde die Methode der gekoppelten Kanäle hauptsächlich zur Berechnung der stoßinduzierten Anregung eingesetzt, wobei die Kontinuumszustände vernachlässigt wurden. In erweiterten Rechnungen wurde auch das Kontinuum durch die Verwendung von diskreten Pseudozuständen berücksichtigt (z.B. [Cal85, vW86, BS92, KM94, BHS 96]), wodurch die Übereinstimmung zwischen den

berechneten und experimentellen Ergebnissen zur Stoßanregung verbessert werden konnte. Einige dieser Ansätze wurden später auch zur Beschreibung der stoßinduzierten Ionisation erweitert, darunter die *R*-Matrix-Methode [Bar98,BSB 02] und die *Convergent Close-Coupling*-Näherung (CCC) [BF96]. Letztere soll in den nächsten Kapiteln näher erläutert werden.

3.4.1 Die *Convergent Close-Coupling*-Näherung

Die CCC-Methode wurde von Bray *et al.* [BS92] ursprünglich zur Berechnung von Anregungsquerschnitten entwickelt. In diesem Ansatz werden die Zustände $|\varphi_n\rangle$ durch eine (endliche) Laguerre-Basis beschrieben. Das Kontinuum wird dabei durch diskrete Pseudozustände aufgespannt. Auf diese Weise wird das Problem der kontinuierlichen freien Zustände umgangen. Später wurde dieser Ansatz auch zur Beschreibung der Ionisation im Elektronenstoß verwendet [BF96].

Diese Methode hat, wie alle Gekoppelten-Kanäle-Rechnungen, einige Nachteile. Erstens ist, im Gegensatz zu perturbativen Rechnungen, ein erheblicher numerischer Aufwand erforderlich, um die Zustände $|\psi_i^+\rangle$ zu bestimmen. Hier finden meist rechenstarke Computer mit Parallelprozessoren Verwendung. Zweitens ist die Prüfung der Konvergenz recht schwierig. In der Gekoppelten-Kanäle-Gleichung 3.36 muß eigentlich über den gesamten Basisraum summiert werden, in der Berechnung werden jedoch nur endlich viele Zustände $|\varphi_{n'}\rangle$ berücksichtigt. Der berechnete Wirkungsquerschnitt wiederum kann von der Auswahl dieser Zustände abhängen.

Ein weiterer Nachteil der CCC-Rechnung gegenüber anderen Methoden ist der, daß in dieser Rechnung eine Partialwellenentwicklung durchgeführt wird. Dadurch ist die Gültigkeit der Näherung auf kleine Projektil-Drehimpulse, also kleine Projektilmassen und -geschwindigkeiten, begrenzt. Somit kann diese Methode nicht im Ionenstoß angewendet werden. Für die Einfachionisation im Elektronenstoß bei geringen und mittleren Stoßgeschwindigkeiten konnte jedoch eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen und theoretischen Resultaten erzielt werden (siehe z.B. [BFK 02, US03]).

3.4.2 Die CCC-Näherung zur Beschreibung der Doppelionisation

Die Schwierigkeit bei der theoretischen Beschreibung der Doppelionisation besteht darin, daß hier die Korrelation der Targetelektronen untereinander (im Anfangs- und Endzustand) von entscheidender Bedeutung für den Ionisationsprozeß ist (siehe Kapitel 5.1 dieser Arbeit). Im Rahmen einer Gekoppelten-Kanäle-Rechnung kann diese Korrelation berücksichtigt werden. Dabei wird nicht die Wellenfunktion $|\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle$

des Gesamtsystems von Projektil und Target mit diesem Ansatz berechnet, sondern der korrelierte Zustand $|\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle$ des Targetsystems mit den beiden Elektronen. Die Wechselwirkung zwischen Projektil und Target kann dann im Rahmen einer perturbativen Beschreibung berücksichtigt werden.

Kheifets *et al.* wendete die *Convergent Close-Coupling*-Methode zunächst zur Beschreibung der Photodoppelionisation an [KB98]. In diesem Ansatz wird der gebundene Anfangszustand durch eine Hylleraas-Wellenfunktion⁸ ausgedrückt und der Endzustand mit Hilfe der CCC-Rechnung bestimmt, wodurch die Korrelation sowohl vor als auch nach dem Stoß berücksichtigt wird. Auf diese Weise wurde eine beeindruckende Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen zur Photodoppelionisation erreicht (siehe z.B. [KKB 02]).

Dieser Ansatz konnte zur Beschreibung der Doppelionisation von Helium im Elektronenstoß modifiziert werden [KBL 99]. Dabei werden der Anfangs- und Endzustand durch die oben diskutierten Wellenfunktionen beschrieben und die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem Target störungstheoretisch im Rahmen der Bornschen Näherung behandelt. Auch hier konnte in der Ersten Bornschen Näherung, vor allem bei großen Stoßgeschwindigkeiten, gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreicht werden [KBL 99, DKS 01, DKS 02]. Bei kleineren Projektilgeschwindigkeiten wurden jedoch Diskrepanzen gefunden. Diese Abweichungen wurden auf mehrfache Wechselwirkungen zwischen Projektil und Targetsystem zurückgeführt. Eine folgerichtige Erweiterung der Theorie durch die Berücksichtigung der Zweiten-Born-Amplitude ergab unlängst eine wesentliche Verbesserung in der Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen [LDD 03, DKS 03, Höh]. Eine genaue Diskussion der Gültigkeitsbereiche und der Grenzen dieses Ansatzes im Vergleich mit experimentellen Daten findet sich in Kapitel 5.2.2 dieser Arbeit.

⁸Die Hylleraas Wellenfunktion stellt eine der besten verfügbaren Näherungen der korrelierten, gebundenen Zwei-Elektronen-Zustände im Helium dar. Dabei ist sie durch eine relativ einfache Beschreibung besonders praktikabel.

Kapitel 4

Einfachionisation

Einfachionisation von neutralen Atomen durch schnelle geladene Projektile ist einer der fundamentalsten und einfachsten Mehr-Teilchen-Prozesse in der Atomphysik. Dabei wird ein Targetelektron durch die Coulomb-Wechselwirkung mit dem Projektil aus einem gebundenen Zustand ins Kontinuum emittiert. Die Dynamik des Stoßes hängt stark von der Störung η des Targetsystems durch das Projektilpotential ab. In der Vergangenheit wurden bereits zahlreiche Stoßsysteme mit verschiedenen Störungen experimentell und theoretisch anhand differentieller Wirkungsquerschnitte untersucht. Für den Ionenstoß wurden jedoch meist nur die Elektronenemissionsspektren experimentell vermessen. Vollständig differentielle Daten liegen erst seit kurzem vor [SMM 01].

Die Beschreibung durch die theoretischen Modelle, die im vorangegangenen Kapitel vorgestellt wurden, gelang häufig in guter Übereinstimmung mit dem Experiment. Für geringe Störungen η kann in vielen Fällen bereits die Erste Bornsche Näherung die experimentellen Ergebnisse reproduzieren. Als Beispiel ist in Abbildung 4.1 ein vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation von Helium im Stoß mit 100 MeV/amu C^{6+} -Ionen ($\eta = 0,1$ a.u.) für eine koplanare Geometrie, d.h. wenn die Impulsvektoren aller am Stoß beteiligten Teilchen in der selben Ebene liegen, dargestellt (aus [MSJ 02]). Die Verteilung weist die bereits in Kapitel 1.3.2 diskutierte Zwei-Linien-Struktur mit dem *Binary-Peak* bei etwa 90° und dem *Recoil-Peak* bei etwa 270° . Die Rechnungen der Ersten Bornschen Näherung für unterschiedliche Targetbeschreibung sind zu Teil in hervorragender Übereinstimmung mit dem experimentellen Querschnitt.

Bei sehr hohen Störungen konnten die Elektronenemissionsspektren mit der CDW-EIS-Näherung beschrieben werden. In Abbildung 4.1 (b) sind doppelt differentielle Wirkungsquerschnitte $d^2\sigma/(2\pi k_{e\perp} dk_{e\perp} dk_{e\parallel})$ aus der Einfachionisation von Helium durch 3,6 MeV/amu Au^{53+} -Ionen ($\eta = 4,41$ a.u.) gezeigt (aus [MFS 99]). Auch hier ist die Übereinstimmung zwischen experimentellen Daten und Rechnung (bei nicht

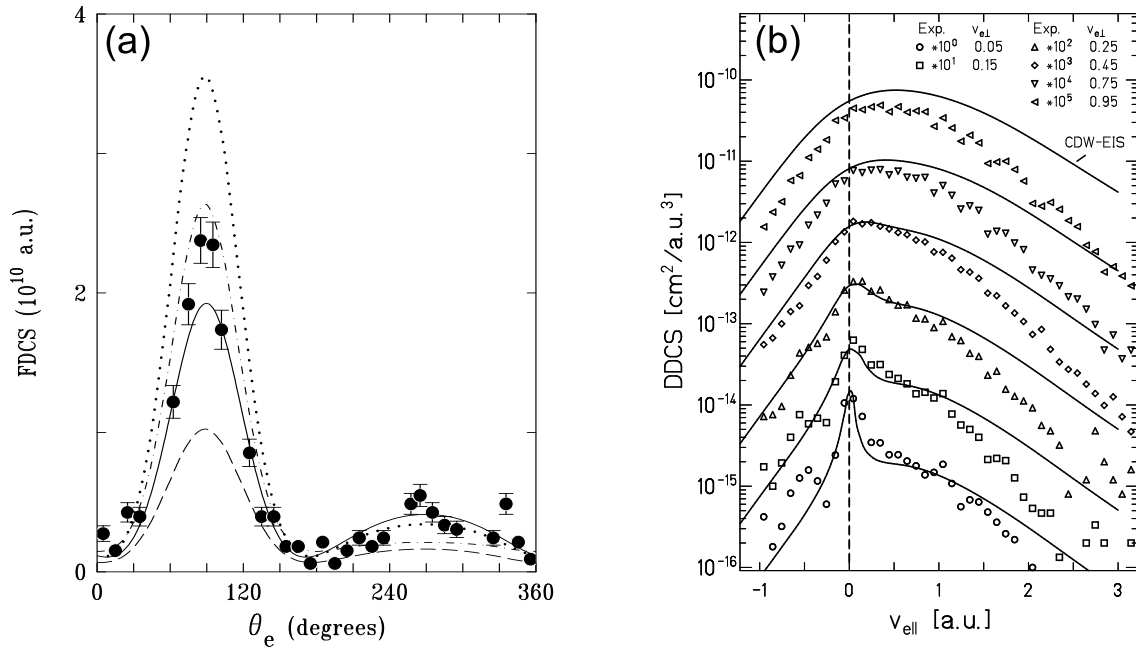


Abbildung 4.1: (a) Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt für die Einfachionisation im 100 MeV/amu C^{6+} -He-Stoß bei koplanarer Geometrie. Die Elektronenenergie beträgt 6,5 eV, der Impulsübertrag 0,88 a.u. (aus [MSJ 02]). Die Kreise stellen die experimentellen Ergebnisse dar, die Linien entsprechen den Resultaten der Ersten Bornschen Näherung. Die Wellenfunktion des aktiven Elektrons wurde in der Rechnung für verschiedene Targetkernpotentiale ermittelt. Verwendet wurde ein Hartree-Fock-Potential (durchgezogene Linie), ein wasserstoffähnliches Potential mit $Z_{\text{eff}} = 1.69$ (gestrichelte Linie) bzw. $Z_{\text{eff}} = 1.34$ (Strichpunkt-Linie) und ein wasserstoffähnliches Potential mit $Z_{\text{eff}} = 1.34$ für den gebundenen Anfangszustand und $Z_{\text{eff}} = 1.0$ für den Kontinuumszustand (gepunktete Linie). (b) Doppelt differentieller Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/(2\pi k_{e\perp} dk_{e\perp} dk_{e\parallel})$ für die Einfachionisation im 3,6 MeV/amu Au^{53+} -He-Stoß (aus [MFS 99]). Gezeigt sind die experimentellen Ergebnisse (offene Symbole) sowie die Resultate einer CDW-EIS-Rechnung (Linien).

zu hohen Longitudinalimpulsen der Elektronen) ausgezeichnet.

Aufgrund dieser Erfolge in der theoretischen Beschreibung, galt die stoßinduzierte Ionisation durch schwere Projektile, zumindest bei nicht zu geringen Projektilgeschwindigkeiten, als weitgehend verstanden. Jedoch beschränkten sich bisherige Studien fast ausschließlich auf spezielle kinematische Situationen bzw. auf Teilaspekte der Mehr-Teilchen-Dynamik. So wurden bei niedriger Störung die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte in den meisten Fällen nur in koplanarer Geometrie untersucht. Wie in diesem Kapitel gezeigt werden wird, sind unter anderen geometrischen Gegebenheiten jedoch erhebliche Diskrepanzen zwischen Experiment und Rechnungen zu beobachten. Bei hoher Störung konzentrierten sich die Studien meist auf die Impulse der Elektronen. Vor kurzem wurde auch hier festgestellt, daß die theoretische Beschreibung der Wirkungsquerschnitte bei hohen Störungen scheitert,

wenn nicht mehr nur die Bewegung des Elektrons, sondern die volle Drei-Teilchen-Dynamik untersucht wird [MPS 01].

In diesem Kapitel wird die Dynamik von Einfachionisationsprozessen von sehr kleinen (6 MeV Protonen, $\eta = 0,065$ a.u.) bis hin zu extrem hohen (3,6 MeV/amu Au⁵³⁺, $\eta = 4,41$ a.u.) Störungen anhand von einfach und vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten systematisch untersucht. Im Vergleich mit verschiedenen Rechnungen sollen die Grenzen der theoretischen Modelle ausgelotet und die Gültigkeit der verwendeten Näherungen untersucht und diskutiert werden. Dabei sind im wesentlichen drei zentrale Fragestellungen zu beantworten, die für das Verständnis der Stoßdynamik von entscheidender Bedeutung sind:

- Auf welche Weise wird das Projektil am Targetsystem gestreut? In der Ersten Bornschen Näherung wird die Ionisation durch den Austausch eines „virtuellen Photons“ zwischen dem Projektil und gebundenen Targetelektron erklärt. Unter welchen Bedingungen ist diese Näherung gerechtfertigt und wann tragen mehrfache Wechselwirkungen zwischen dem Projektil und dem Targetelektron oder die Streuung des Projektils am Targetkern zum Wirkungsquerschnitt bei?
- Wie kann das Targetsystem beschrieben werden? In den in dieser Arbeit untersuchten Stoßsystemen wurde ein Heliumtarget verwendet, d.h. allein das Target ohne Berücksichtigung des Projektils ist bereits ein Drei-Körper-System, wofür es keine analytisch exakte Beschreibung gibt. Bei der Einfachionisation ist die Frage hierbei, wann und auf welche Weise das Target in einem effektiven Ein-Elektronen-Bild beschrieben werden kann, in dem das zweite Elektron lediglich eine statische Abschirmung des Targetkernpotentials verursacht.
- Wie hängen die oben gestellten Fragen von der Störung des Targetsystems durch das Projektilfeld ab? Wie ändert sich die Stoßdynamik mit der Projektilgeschwindigkeit und Ladung? Wann treten Abhängigkeiten vom Vorzeichen der Projektilladung auf?

4.1 Einfach differentielle Wirkungsquerschnitte: Höhere-Ordnungs-Beiträge und Kern-Kern-Wechselwirkung

Bereits in einfach differentiellen Wirkungsquerschnitten lassen sich etliche Eigenschaften von Ionisationsprozessen untersuchen und wichtige Informationen über die Stoßdynamik in Ion-Atom-Stößen gewinnen. So können z.B. die longitudinalen Impulskomponenten der Stoßpartner, also die Komponenten entlang der Projektil-

strahlrichtung, Information über die Projektil-Elektron-Wechselwirkung nach dem eigentlichen Ionisationsprozeß (die sog. PCI, siehe unten) liefern [MSU 97]. Die transversalen Impulse, also die Impulskomponenten senkrecht zur Projektilstrahlrichtung, geben Aufschluß über den Stoßparameter b und zeigen somit, wie nah sich Projektil und Target während des Stoßes kommen. Auch der Beitrag der direkten Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetkern ist in der senkrechten Impulskomponente sichtbar.

Zur Untersuchung der einfach differentiellen Impulsspektren wurde das Stoßsystem mit 2 MeV/amu C^{6+} -Projektilen ausgewählt [FVM 03]. Die im folgenden diskutierten Eigenschaften der Impulsverteilungen und die Abweichungen von der Ersten Bornschen Näherung treten im wesentlichen für alle Stoßsysteme auf, jedoch sind sie für größere Störungen ausgeprägter. Das hier untersuchte Stoßsystem ($\eta = 0,67$ a.u.) eignet sich allerdings besonders für diese Studie, da einerseits die Störung bereits so groß ist, daß Höhere-Ordnungs-Beiträge deutlich auftreten, und andererseits die Störung noch klein genug ist, daß die in der Theorie gemachten Näherungen noch weitgehend ihre Gültigkeit besitzen.

Zum Vergleich mit dem Experiment wurden drei theoretische Modelle verwendet. Der einfachste Ansatz ist die Erste Bornsche Näherung. Hier wird die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetsystem sowohl für den Anfangs- als auch den Endzustand vernachlässigt. Als zweites Modell findet die CDW-EIS-Näherung Verwendung. In diesem Fall sind Beiträge höherer Ordnung in der Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron zum Teil enthalten. Die dritte theoretische Beschreibung beruht ebenfalls auf einer CDW-EIS-Rechnung, wobei hier jedoch die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetrumpf, also die Kern-Kern-Wechselwirkung, durch eine Eikonal-Näherung zusätzlich berücksichtigt wird. Für diese Wechselwirkung wird das Targetrumpfpotential als ein Coulomb-Potential der Punktladung $Z_{r-P} = 1$ angenommen. In allen hier verwendeten Rechnungen wird das Target wasserstoffähnlich beschrieben, wobei eine effektive Kernladung von $Z_{e-P} = 1,345$ angenommen wurde, um die Bindungsenergie des aktiven Elektrons richtig wiederzugeben. Durch den Vergleich dieser drei Näherungen sowohl untereinander als auch mit dem Experiment kann nun herausgearbeitet werden, für welche Wirkungsquerschnitte Höhere-Ordnungs-Beiträge in der Projektil-Elektron-Wechselwirkung bzw. die Kern-Kern-Streuung von Bedeutung sind.

4.1.1 Die longitudinalen Impulsverteilungen

Die longitudinalen Impulsspektren $d\sigma^+/dk_{e\parallel}$ und $d\sigma^+/dp_{r\parallel}$ beinhaltet wichtige Informationen über die Stoßdynamik und speziell über die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetfragmenten nach dem eigentlichen Ionisationsprozeß, der soge-

4.1. Einfach differentielle Wirkungsquerschnitte: Höhere-Ordnungs-Beiträge und Kern-Kern-Wechselwirkung

nannten *Post Collision Interaction* (PCI). Dabei sind $k_{e\parallel}$ und $p_{r\parallel}$ die Komponenten des Elektronenimpulses \mathbf{k}_e bzw. Rückstoßionenimpulses \mathbf{p}_r parallel zur Projektilgeschwindigkeit \mathbf{v}_p . Für die Ionisation von Helium im Stoß mit 2 MeV/amu C^{6+} -Ionen sind diese Verteilungen in Abbildung 4.2 dargestellt. In Abbildung (a) sind sowohl experimentelle als auch theoretische Impulsspektren gezeigt, wobei nur Ereignisse berücksichtigt wurden, bei denen der Transversalimpuls der Elektronen innerhalb der Spektrometerakzeptanz liegt. Bei den gewählten Spektrometereinstellungen entspricht das der Bedingung $k_{e\perp} \leq 0,8$ a.u.. In Abbildung (b) sind nur theoretische Longitudinalimpulsverteilungen gezeigt, wobei in diesem Fall keine einschränkende Bedingung auf den Transversalimpuls der Elektronen $k_{e\perp}$ gesetzt wurde.

Die in Abbildung 4.2 dargestellten Spektren zeigen eine deutliche Asymmetrie bzgl. $p_{\parallel} = 0$ sowohl für die Elektronen als auch für die Rückstoßionen. Die Mehrzahl der Elektronen werden in Vorwärtsrichtung emittiert, d.h. $\langle k_{e\parallel} \rangle > 0$, wohingegen die Rückstoßionen mehrheitlich einen negativen Longitudinalimpuls aufweisen, also $\langle p_{r\parallel} \rangle < 0$. Diese Asymmetrie wurde bereits in etlichen Veröffentlichungen diskutiert (siehe z.B. [MUU 94, MUK 97, WFO97, FR00]) und wie folgt erklärt: Aufgrund der langreichweitigen Coulomb-Anziehung zwischen dem Projektil und dem ionisierten

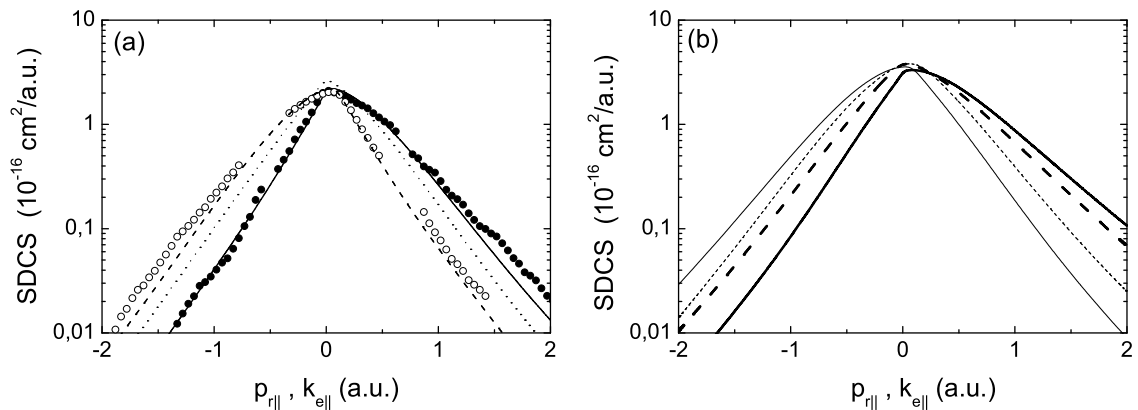


Abbildung 4.2: Longitudinale Impulsverteilungen der Targetfragmente in der Einfachionisation von Helium durch 2 MeV/amu C^{6+} -Ionen. Abb. (a) zeigt die experimentellen Daten für Elektronen (volle Kreise) und für Rückstoßionen (offene Kreise) sowie die nach der Ersten Bornschen Näherung (gepunktete Linie, nur für Elektronen) und dem CDW-EIS-Modell berechneten Querschnitte für Elektronen (durchgezogene Linie) und für die Rückstoßionen (gestrichelte Linie). In (a) sind nur Ereignisse berücksichtigt, bei denen $k_{e\perp} \leq 0,8$ a.u. gilt. Außerdem sind die experimentellen Daten für die Impulsbereiche nicht dargestellt, bei denen die Auflösung der Elektronenimpulse durch die *wiggles* beeinträchtigt ist (siehe Kap. 2.4.2). Abb. (b) zeigt ebenfalls Ergebnisse der Ersten Bornschen Näherung (gestrichelte Linien) sowie der CDW-EIS-Rechnung (durchgezogene Linien) für die Longitudinalimpulsspektren der Elektronen (dicke Linien) und der Rückstoßionen (dünne Linien), jedoch ohne einschränkende Bedingung auf die Elektronenimpulse.

Targetelektron wird das Elektron nach dem eigentlichen Stoß in Richtung des Projektilions beschleunigt. Auf die gleiche Weise wird das Rückstoßion vom Projektil im Endzustand durch die Coulombkraft abgestoßen. Dieser Effekt entspricht der bereits erwähnten PCI.

Um einen tieferen Einblick in die Physik zu erhalten, die dieser longitudinalen Asymmetrie zugrunde liegt, sind in Abbildung 4.2 auch die Ergebnisse der Ersten Bornschen Näherung dargestellt. Dieser Ansatz berücksichtigt die Projektil-Target-Wechselwirkung weder vor noch nach dem Stoß (also *Pre-* und *Post Collision Interaction*), sondern lediglich die einmalige Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron, die zur Ionisation führt. Trotzdem wird eine Asymmetrie für die longitudinale Impulsverteilung für Elektronen und Rückstoßionen vorhergesagt, wobei hier jedoch der Schwerpunkt sowohl der Elektronen- als auch der Rückstoßionenimpulsverteilung leicht in die Vorwärtsrichtung verschoben sind. Dieser Effekt hat in der Ersten Bornschen Näherung eine rein kinematische Ursache. Da der Impulsübertrag auf das Targetsystem immer in Vorwärtsrichtung orientiert ist, d.h. $q_{\parallel} > 0$ (siehe Gl. 1.11), ist eine symmetrische Verteilung der Elektronen- und Rückstoßionenimpulse nicht möglich, sondern der Schwerpunktsimpuls des Targetsystems ist nach vorne gerichtet.

In einer vollständigeren theoretischen Beschreibung der Einfachionisation z.B. durch die CDW-EIS-Näherung ergeben sich zwei weitere Effekte, die im Prinzip zu einer Asymmetrie der longitudinalen Impulsverteilungen führen können. Zunächst können mehrfache Wechselwirkungen, d.h. Höhere-Ordnungs-Beiträge zwischen Projektil und Targetelektron, die Impulse im Endzustand beeinflussen. In der Tat ist es dieser mehrfache Austausch virtueller Photonen, der für die Anziehung von Projektil und Elektron nach dem eigentlichen Ionisationsprozeß verantwortlich ist. Der deutliche Einfluß dieser Beiträge höherer Ordnung auf die longitudinale Impulsverteilung ist in Abbildung 4.2 (b) erkennbar. Der zweite Effekt, der eine Auswirkung auf das longitudinale Impulsgleichgewicht haben könnte, ist die Abstoßung zwischen Targettrumpf und des Projektil, also die Kern-Kern-Wechselwirkung. Wird diese Wechselwirkung nicht vernachlässigt, ändern sich die Impulsverteilungen im Vergleich zur CDW-EIS-Rechnung ohne Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung jedoch kaum (diese Spektren sind daher auch nicht in der Abbildung dargestellt).

Nach einfacher Anschauung könnte angenommen werden, daß die Kern-Kern-Wechselwirkung zwar einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Elektronen-Emissionsspektren hat, daß jedoch die longitudinale Impulsverteilung der Rückstoßionen stark durch sie beeinflusst ist. Wird jedoch durch eine direkte Kern-Kern-Wechselwirkung in longitudinaler Richtung Impuls auf den Targettrumpf übertragen, muß das Rückstoßion gleichzeitig die dabei große Energieänderung des Projektils kompensieren (siehe Gl. 1.9). Aufgrund der großen Masse des Targetkerns würde dies allerdings zu

4.1. Einfach differentielle Wirkungsquerschnitte: Höhere-Ordnungs-Beiträge und Kern-Kern-Wechselwirkung

extrem hohen (transversalen) Impulsen des Targetrumpfes führen. In den meisten Fällen liegen diese Impulse jedoch in derselben Größenordnung wie die Elektronenimpulse, und die kinetische Energie des Targetrumpfes ist folglich vernachlässigbar klein. Dabei führt die Energieerhaltung zu einer direkten Abhängigkeit des longitudinalen Rückstoßionenimpulses $p_{r\parallel}$ vom Elektronenimpuls \mathbf{k}_e . Aus Gl. 1.11 ergibt sich (siehe auch [RWL95]):

$$k_{e\parallel} + p_{r\parallel} = \left(\frac{\mathbf{k}_e^2}{2} + I_P \right) \frac{1}{v_P} . \quad (4.1)$$

Ausgehend davon, daß der Elektronenimpuls praktisch unabhängig von der Kern-Kern-Wechselwirkung ist, ergibt sich aus Gl. 4.1 direkt, daß auch der Rückstoßionenimpuls nicht durch die Kern-Kern-Wechselwirkung beeinflusst wird. Der geringe Einfluß der Kern-Kern-Wechselwirkung auf die longitudinale Impulsbilanz ist auch in Übereinstimmung mit einem einfachen klassischen Bild. In dieser Beschreibung bewegt sich das Projektil auf einer klassischen Trajektorie mit einem Stoßparameter von etwa 1 a.u. am Target vorbei. In sehr guter Näherung kann die Projektiltrajektorie durch eine gerade Linie beschrieben und die Geschwindigkeit des Targetrumpfes vernachlässigt werden. Legt man diese Annahmen zugrunde, so zeigt sich, daß der effektive Einfluß der Kern-Kern-Wechselwirkung auf die longitudinale Bewegung des Targetrumpfes verschwindet, da sich die Kräfte in Richtung der Projektiltrajektorie für das einlaufende und das auslaufende Projektil kompensieren. Diese Argumentation ist jedoch nicht für die Projektil-Elektron-Wechselwirkung gültig, da das Elektron im Anfangszustand im Target gebunden und im Endzustand frei ist, und da es sich mit Geschwindigkeiten, die erheblich über der Geschwindigkeit des Targetrumpfes liegen, bewegt.

Zwei Hauptgründe, die zu einer Asymmetrie der longitudinalen Elektronenimpulsverteilung führen, können nun zusammengefaßt werden: Erstens ist aufgrund der Stoßkinematik der longitudinale Impulsübertrag auf das Targetsystem immer nach vorne gerichtet, d.h. $q_{\parallel} > 0$. Zweitens beeinflusst die Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron nach der eigentlichen Ionisation – also die PCI – den longitudinalen Impuls des Elektrons. Ebenso gibt es einen Einfluß der PCI auf den Longitudinalimpuls des Targetrumpfes, da sich aufgrund der Impuls- und Energieerhaltung gemäß Gl. 4.1 ein direkter Zusammenhang zwischen dem Rückstoßionen- und dem Elektronenimpuls ergibt: $p_{r\parallel} = (\mathbf{k}_e^2/2 + I_P)/v_P - k_{e\parallel}$. Da sich die PCI stark auf die Impuls- und Winkelverteilung des emittierten Elektrons auswirkt, wird auf diese Weise indirekt und sehr effektiv auch die Impulsverteilung des Targetrumpfes beeinflusst. Es zeigt sich jedoch, daß die Kern-Kern-Wechselwirkung für die longitudinalen Impulse der Targetfragmente von vernachlässigbarer Bedeutung ist.

4.1.2 Die transversalen Impulsverteilungen

In der Ebene senkrecht zur Projektilgeschwindigkeit ist die Einschränkung der Impulse der Stoßpartner durch die Energie- und Impulserhaltung (Gleichung 4.1) erheblich geringer als in der longitudinalen Richtung. Deshalb kann die Impulsverteilung der Teilchen in dieser Ebene durch die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem Targetrumpf deutlich stärker beeinflusst werden, als dies in der longitudinalen Richtung möglich ist. Die Untersuchung der transversalen Impulsspektren der Elektronen, Rückstoßionen und Projektilte kann also wichtige Informationen über die Stoßdynamik aufdecken, die durch die Auswertung der Longitudinalimpulse nicht zugänglich sind.

In Abbildung 4.3 sind die experimentellen und theoretischen Ergebnisse der transversalen Impulsverteilung der emittierten Elektronen dargestellt. Wie bereits erläutert, sind die Elektronenimpulse unabhängig von der Kern-Kern-Wechselwirkung. Der Vergleich zwischen der Ersten Bornschen Näherung und der CDW-EIS-Rechnung zeigt, daß sich die unterschiedlichen Näherungen bezüglich der transversalen Elektronenimpulsverteilung nur verhältnismäßig wenig unterscheiden. Offensichtlich ist der Einfluß von Beiträgen höherer Ordnung auf die Elektronenimpulse in der transversalen Richtung deutlich geringer als in Richtung der Projektiltrajektorie. Die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts vom transversalen Impulsübertrag sowie vom Transversalimpuls des Rückstoßions ist in Abbildung 4.4 (a) bzw. (b) dargestellt. Sowohl in den experimentellen als auch in den theoretischen Daten sind nur solche

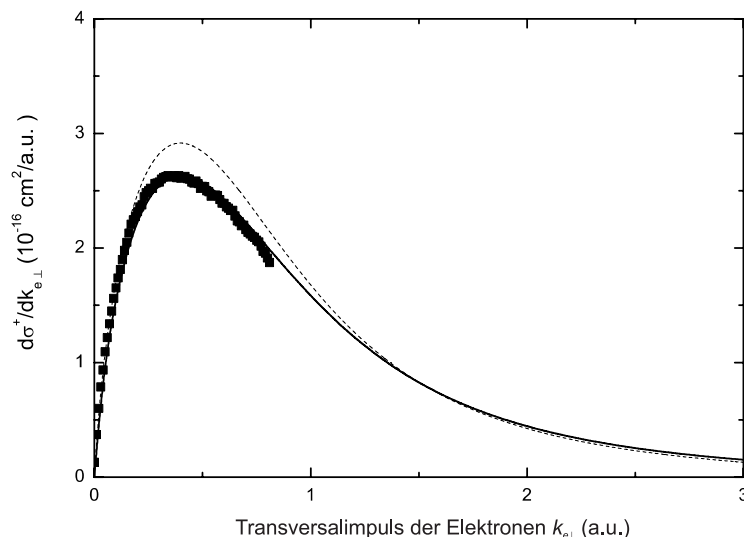


Abbildung 4.3: Transversalimpulsverteilung der Elektronen. Gezeigt sind die experimentellen Daten (volle Quadrate) sowie die theoretischen Resultate der CDW-EIS-Rechnung (durchgehende Linie) und der Ersten Bornschen Näherung (gestrichelte Linie).

4.1. Einfach differentielle Wirkungsquerschnitte: Höhere-Ordnungs-Beiträge und Kern-Kern-Wechselwirkung

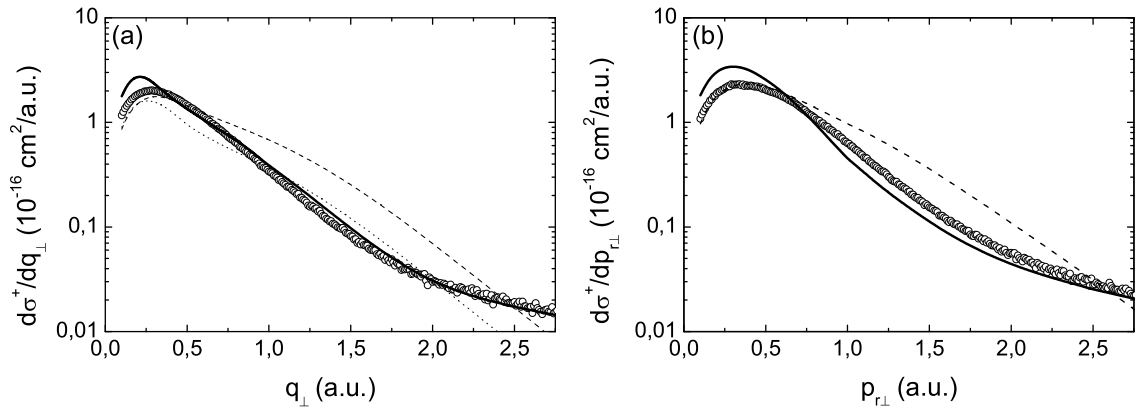


Abbildung 4.4: Verteilung des transversalen Impulsübertrags (a) und des Transversalimpulses der Rückstoßionen (b). In Abb. (a) sind nur Ereignisse berücksichtigt, bei denen die Elektronenenergie kleiner als 9 eV war, Abb. (b) beschränkt sich auf Ereignisse mit $k_{e\perp} < 0,8$ a.u.. Gezeigt sind die experimentellen Ergebnisse (offene Kreise) sowie CDW-EIS-Resultate ohne und mit Kern-Kern-Wechselwirkung (gestrichelte bzw. durchgezogene Linien) und die Ergebnisse der Ersten Bornschen Näherung (gepunktete Linie, nur Abb. (a)). Alle theoretischen Kurven wurden mit einer experimentellen Auflösung von 0,3 a.u. gefaltet.

Ionisationsereignisse berücksichtigt, bei denen Elektronen mit einer Energie kleiner als 9 eV emittiert wurden (in Abb. (a)) bzw. bei denen der Transversalimpuls der Elektronen geringer als 0,8 a.u. war (in Abb. (b)). Darüber hinaus wurden alle theoretischen Ergebnisse mit der experimentellen Auflösung von 0,3 a.u. gefaltet. Es ist klar ersichtlich, daß die Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung in der CDW-EIS-Rechnung einen erheblichen Einfluß auf die Form der Wirkungsquerschnitte hat. Die experimentellen Daten werden durch das theoretische Modell, das die Kern-Kern-Wechselwirkung einschließt, vor allem für Impulse größer als 0,5 a.u., besser beschrieben¹.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt aus Abbildung 4.4 (a) kann in drei Bereiche eingeteilt werden, in denen der Einfluß der Kern-Kern-Wechselwirkung unterschiedlich ist. Für kleine ($q_{\perp} \lesssim 0,5$ a.u.) und für große ($q_{\perp} \gtrsim 2,5$ a.u.) Impulsüberträge wird der Wirkungsquerschnitt durch die Kern-Kern-Wechselwirkung erhöht, wohingegen er für mittlere Impulsüberträge verringert wird. Diese Auswirkungen lassen sich auch bei der Verteilung des Transversalimpulses der Rückstoßionen (siehe Abbildung 4.4 (b)) beobachten.

Der Einfluß der Kern-Kern-Wechselwirkung in den verschiedenen Impulsübertragungsbereichen kann wie folgt erklärt werden. Bei kleinem Impulsübertrag kann im allgemeinen davon ausgegangen werden, daß der Stoßparameter b groß ist, d.h. daß das

¹Für kleinere Impulsüberträge können (vor allem beim Impulsübertrag) komplexere Auflösungs-effekte (siehe dazu auch Kap. 2.4) die Form der experimentellen Wirkungsquerschnitte beeinflussen.

Projektil mit großem Abstand am Targetatom vorbeifliegt. In diesem Fall „sieht“ das Projektil während des Stoßes ein neutrales Target und die Abstoßung des Projektils durch den Targettrumpf wirkt der Anziehung durch das Targetelektron entgegen. Somit sind bei großen Stoßparametern unter Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung kleinere Impulsüberträge zu erwarten. Bei dichten Stößen, also bei kleinen Stoßparametern, kann dagegen durch die zusätzliche direkte Kern-Kern-Streuung mehr Impuls auf das Targetsystem übertragen werden als wenn nur die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron auftritt. Dieser Effekt führt zu einer Erhöhung des Wirkungsquerschnitts für große Impulsüberträge. Im Bereich des mittleren Impulsübertrags kann keine ähnlich anschauliche Erklärung des Einflusses der Kern-Kern-Wechselwirkung auf den Wirkungsquerschnitt gegeben werden. Formal läßt sich die Verringerung des Wirkungsquerschnitts in diesem Bereich jedoch wie folgt begründen. Da die Kern-Kern-Streuung nicht zum totalen Wirkungsquerschnitt beiträgt², muß der differentielle Wirkungsquerschnitt im mittleren Impulsübertragsbereich unterdrückt sein, um die Erhöhung für kleine und große Impulse auszugleichen.

In Abbildung 4.4 (a) ist ebenfalls das Ergebnis der Ersten Bornschen Näherung dargestellt, in der weder die Kern-Kern-Wechselwirkung noch der Austausch mehrerer virtueller Photonen zwischen dem Projektil und dem Targetelektron berücksichtigt ist. Im Vergleich zu den Rechnungen des CDW-EIS-Modells zeigt sich jedoch, daß beide Effekte, also sowohl die Kern-Kern-Streuung als auch Höhere-Ordnungs-Beiträge in der Projektil-Elektron-Wechselwirkung, für die Verteilung des transversalen Impulsübertrags von Bedeutung sind und nicht vernachlässigt werden können.

4.2 Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

Kinematisch vollständige Experimente ermöglichen es, die gesamte Information über den Endzustand (ausschließlich des Spins) nach einem Ionisationsprozeß zu erhalten. Um die Dynamik einer solchen Reaktion und die zugrunde liegenden Mechanismen verstehen zu können, ist es notwendig, die experimentellen Daten mit theoretischen Modellen zu vergleichen. Der genaueste und sensitivste Test der unterschiedlichen theoretischen Ansätze besteht darin, die vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte zu untersuchen. Im Falle der Einfachionisation entspricht dies dem dreifach differentielle Wirkungsquerschnitt, in der Literatur auch häufig TDCS (*triple*

²Dieser Mechanismus ist sehr unwahrscheinlich, da hierbei aufgrund der hohen Targetkernmasse (im Vergleich zum Elektron) ein sehr großer Impuls auf das Target übertragen werden müßte, um das Ionisationspotential zu überwinden. Ein solcher „*Knock-Out*“-Prozeß ist etwa um den Faktor $m_e/m_T \sim 10^{-3}$ unterdrückt, und kann somit vernachlässigt werden.

(*differential cross section*) genannt, der durch

$$\text{TDCS} = \frac{d^3\sigma}{dE_e d\Omega_e dq} \quad (4.2)$$

gegeben ist. Dabei ist E_e die Energie des emittierten Elektrons, Ω_e das Raumwinkel-element, in das das Elektron emittiert wird, und q der Betrag des Impulsübertrags. Die restlichen Größen, wie z.B. der Impuls des Rückstoßions oder der Streuwinkel des Projektils, sind dann durch die Energie- und Impulserhaltung bestimmt.

In der Elektronenstoßionisation werden vollständig differentielle, experimentelle Daten bereits seit mehr als 30 Jahren aufgenommen [EST 69]. Im Ionenstoß sind ähnliche Spektren erst seit wenigen Jahren durch die COLTRIMS-Technik bzw. durch Reaktionsmikroskope zugänglich geworden [SMM 01, SMP 02], wobei sich bisherige Studien auf die Untersuchung der Querschnitte in der Streuebene, also bei koplana-rer Geometrie, konzentrierten.

4.2.1 Der Einfluß der Kern-Kern-Streuung bei kleiner Störung

In Stoßsystemen, bei denen die Störung des Targetsystems durch das Projektil nur sehr gering ist, kann angenommen werden, daß die grundlegenden Eigenschaften eines Ionisationsprozesses sehr gut durch die Erste Bornsche Näherung beschrieben werden können. Diese Annahme wird dadurch gestützt, daß auch andere theoretische Modelle, die Beiträge höherer Ordnung berücksichtigen, für kleine Störungen $\eta = Z_P/v_P$ gegen dasselbe Ergebnis konvergieren, und somit unterschiedliche Höhere-Ordnungs-Effekte (wie z.B. PCI oder Kern-Kern-Streuung) die Stoßdynamik nur unerheblich beeinflussen. Wie bereits erwähnt, wurden bei bisherigen Untersuchungen in der Streuebene auch sehr gute Übereinstimmungen zwischen Experiment und Theorie gefunden [SMM 01, MSJ 02] (siehe auch Abb. 4.1 (a)), sodaß kein Zweifel an der Gültigkeit der theoretischen Modelle für sehr kleine Störungen bestand. Unlängst wurden jedoch, bei der Untersuchung der dreifach differentiiellen Wirkungsquerschnitte außerhalb der Streuebene, überraschend Diskrepanzen zwischen den theoretischen Ergebnissen und dem Experiment beobachtet [SMF 03a]. Diese sollen im folgenden für die Einfachionisation von Helium durch 100 MeV/amu C^{6+} -Ionen, was einer Störung von $\eta = 0,1$ a.u. entspricht, vorgestellt und diskutiert werden.

In Abbildung 4.5 sind die experimentellen (a) und theoretischen (b) vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnitte für dieses Stoßsystem dargestellt. Dabei ist in dreidimensionalen Polarplots der Emissionsraumwinkel Ω_e der Elektronen für einen Impulsübertrag von $q = 0,75$ a.u. und eine Elektronenenergie von $E_e = 6,5$ eV ge-

zeigt. Die Richtung des Projektilstrahls ist in Abb. (a) durch den Vektor \vec{v}_P dargestellt und ist in die z -Richtung orientiert. Der Impulsübertragsvektor \vec{q} zeigt nahezu in x -Richtung. Die Streuebene entspricht der x - z -Ebene, d.h. wird das Elektron in diese Ebene emittiert, sind alle Impulsvektoren koplanar. Die Ebene senkrecht zur Streuebene (und nahezu senkrecht zum Impulsübertrag), also die y - z -Ebene, wird im folgenden als „senkrechte Ebene“ bezeichnet.

Wie oben bereits erwähnt, ähneln sich für das hier untersuchte Stoßsystem die Ergebnisse unterschiedlicher quantenmechanischer Theorien sehr. In Abb. 4.5 (b) wurde das CDW-HF-Modell ausgewählt. In dieser Rechnung wird der Anfangszustand durch eine ebene Welle für das einlaufende Projektil und durch eine Hartree-Fock-Wellenfunktion für das Targetsystem beschrieben. Der Endzustand wird, ähnlich wie in der 3C-Rechnung (siehe Kap. 3.2.3), durch das Produkt dreier Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen genähert, wobei jede von ihnen die paarweise Wechselwirkung zweier Teilchen beschreibt. In dem hier verwendeten Modell sind die Projektil-Targetrumpf- und die Projektil-Elektron-Wechselwirkung durch eine Coulombwelle ausgedrückt, wohingegen die Elektron-Targetrumpf-Wechselwirkung durch die numerische Lösung der Schrödingergleichung mit einem statischen Hartree-Fock-Potential genähert wurde.

Sowohl Experiment als auch Theorie zeigen die charakteristische Doppelkeulen-Struktur mit dem *Binary*- und dem *Recoil-Peak*, die in dieser Arbeit bereits in Kapitel 1.3.2 diskutiert wurde. Dennoch sind zwischen den experimentellen und theoretischen Ergebnissen deutliche Unterschiede sichtbar. Während in der Theorie

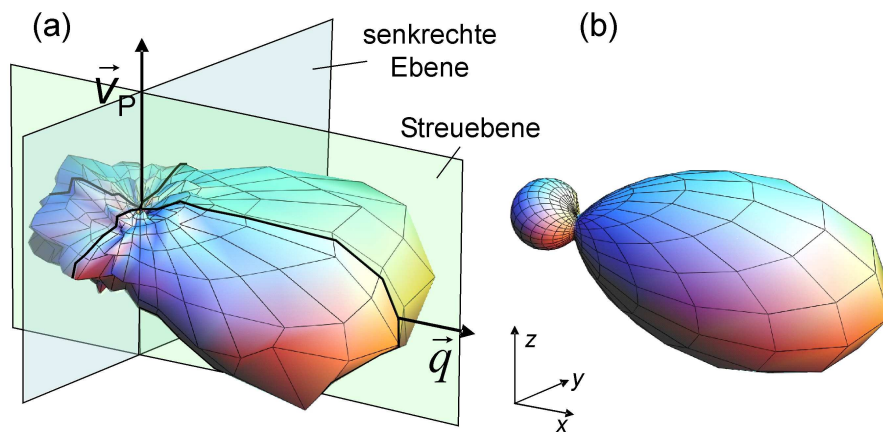


Abbildung 4.5: Dreidimensionale Polarplots des vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitts $d^3\sigma/dE_e d\Omega_e dq$ für die Einfachionisation von Helium durch 100 MeV/amu C^{6+} -Ionenstoß. Experimentelle (a) und theoretische (b) Daten sind für eine Elektronenenergie $E_e = 6,5$ eV und einen Impulsübertrag von $q = 0,75$ a.u. dargestellt.

die Winkelverteilung der Elektronen senkrecht zum Impulsübertrag stark „eingeschnürt“ ist, kann im Experiment um den Impulsvektor des Projektils herum eine reifenähnliche Struktur beobachtet werden. Darüber hinaus sind die experimentellen Daten in der Azimuthalebene, also in der x - y -Ebene, deutlich breiter als die theoretische Verteilung, die nahezu symmetrisch zum Impulsübertragsvektor ist. Diese Symmetrie ist eine allgemeine Eigenschaft der Ersten Bornschen Näherung für die Ionisation eines Elektrons aus dem symmetrischen $1s^2$ -Anfangszustand des Heliums. Die von der CDW-HF-Rechnung vorhergesagte nur geringe Abweichung von dieser Symmetrie deutet darauf hin, daß Beiträge höherer Ordnung nur von untergeordneter Bedeutung für die Ionisationsdynamik sind.

Um die theoretischen und experimentellen Ergebnisse quantitativ zu vergleichen, ist es zweckmäßig, Schnitte durch die dreidimensionale Verteilung aus Abb. 4.5 zu legen. Diese sind in Abb. 4.6 für die Streuebene (a) und die senkrechte Ebene (b) dargestellt. In der Streuebene ist die Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie sehr gut, abgesehen davon, daß die relative Größe des *Recoil-Peaks* im Verhältnis zum *Binary-Peak* von der Rechnung unterschätzt wird. Eine solch gute Reproduktion der experimentellen Daten durch die theoretische Beschreibung ist durchaus typisch bei der Einfachionisation von Helium durch schnelle Projektilen bei kleiner Störung [MWW98, MSJ02]. In der senkrechten Ebene hingegen treten, wie oben bereits erwähnt, erhebliche Unterschiede zwischen Experiment und Theorie auf. Die experimentelle Winkelverteilung zeigt deutliche Maxima bei 90° und 270° wohingegen die theoretische Verteilung (rote Kurve) nahezu isotrop ist.

Um auszuschließen, daß die Diskrepanz in der senkrechten Ebene durch das begrenzte experimentelle Auflösungsvermögen des Azimuthalwinkels (also des Winkels in der x - y -Ebene, der aus den Auftrefforten der Targetfragmente auf dem Detektor bestimmt werden muß, siehe Kap. 2.4) hervorgerufen wird, wurde die Azimuthalwinkelverteilung der theoretischen Daten mit einer Gaußfunktion der Breite 30° gefaltet, was etwa der experimentellen Auflösung entspricht. Die nach dieser Prozedur erhaltene Winkelverteilung ist in Abb. (b) durch die blaue Kurve dargestellt. In der Tat beeinflußt das begrenzte Auflösungsvermögen des Azimuthalwinkels die Winkelverteilung in der senkrechten Ebene. Durch die Faltung weist auch die theoretische Verteilung in Übereinstimmung mit dem Experiment Maxima bei 90° und 270° auf, jedoch kann die absolute Größe der experimentell beobachteten Maxima nicht durch diesen Auflösungseffekt erklärt werden.

Ein möglicher Mechanismus, der zu der in der senkrechten Ebene beobachteten Winkelverteilung führen kann, ist ein Zwei-Schritt-Prozeß. In einem Schritt wird das Elektron durch den Stoß mit dem Projektil ionisiert. Bei diesem Prozeß, der z.B. durch die Erste Bornschen Näherung beschrieben werden kann, wird der Impuls \mathbf{q}' übertragen, und bezüglich dieses Impulsübertrags wird das Elektron entweder

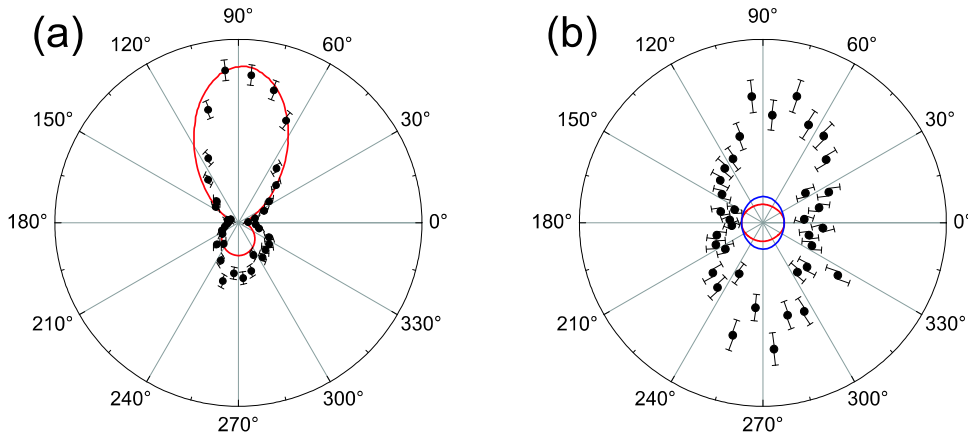


Abbildung 4.6: Der Wirkungsquerschnitt aus Abb. 4.5 für die Streuebene (a) und die senkrechte Ebene (b). Die Kreise entsprechen den experimentellen Daten, die rote Linie den Resultaten der CDW-HF-Rechnung. Die blaue Linie in (b) entspricht den theoretischen Daten, für die die Azimutalwinkelverteilung mit einer Gaußfunktion der Breite 30° gefaltet wurde. Die experimentellen Daten wurden bzgl. des totalen Ionisationsquerschnitts normiert.

als „Binary-Elektron“ in Richtung von \mathbf{q}' oder als *Recoil*-Elektron in Richtung $-\mathbf{q}'$ emittiert. In einem weiteren Schritt wird das Projektil elastisch am Targetkern gestreut wobei zusätzlich der Impuls \mathbf{q}'' auf das Targetsystem übertragen wird, der aus der Ebene bezüglich der Streuung am Elektron herausgerichtet sein kann. Der gemessene Wirkungsquerschnitt ist nun differentiell bezüglich des insgesamt übertragenen Impulses $\mathbf{q} = \mathbf{q}' + \mathbf{q}''$. Dadurch kann der Impulsübertragsvektor \mathbf{q} bezüglich des Vektors \mathbf{q}' durch den Impuls \mathbf{q}'' , also durch die Kern-Kern-Streuung, um die Projektilstrahlachse gedreht werden. Beträgt dieser Drehwinkel 90° , wird das Elektron in die senkrechte Ebene emittiert.

Ist dieser Mechanismus die Ursache der Struktur, die in der senkrechten Ebene beobachtet wird, so ergeben sich daraus weitere Konsequenzen für die Interpretation der Wirkungsquerschnitte. Was in der Streuebene als *Recoil-Peak* erscheint, wird durch die Kern-Kern-Streuung und die Drehung des Impulsübertrages um die Projektilachse in der dreidimensionalen Darstellung des Wirkungsquerschnitts zum *Recoil*-Ring. Dieses Verhalten, welches in den meisten gängigen Näherungen nicht vollständig berücksichtigt ist, kann qualitativ auch die Überhöhung des *Recoil*-Peaks erklären: Wird der Impulsübertragsvektor \mathbf{q} durch die Kern-Kern-Streuung um 180° gedreht, zeigt der Vektor des Elektronenimpulses, der bzgl. des Impulsübertrags \mathbf{q}' im *Binary-Peak* lag, in Richtung von $-\mathbf{q}$. In diesem Fall tritt also ein *Recoil*-Elektron auf, auch wenn – im Widerspruch zur häufig verwendeten Erklärung des *Recoil*-Peaks (siehe Kap. 1.3.2) – das Elektron nicht am Targetrumpf zurückgestreut wurde.

Ist die Kern-Kern-Wechselwirkung in der Tat von solch großer Bedeutung für die

4.2. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

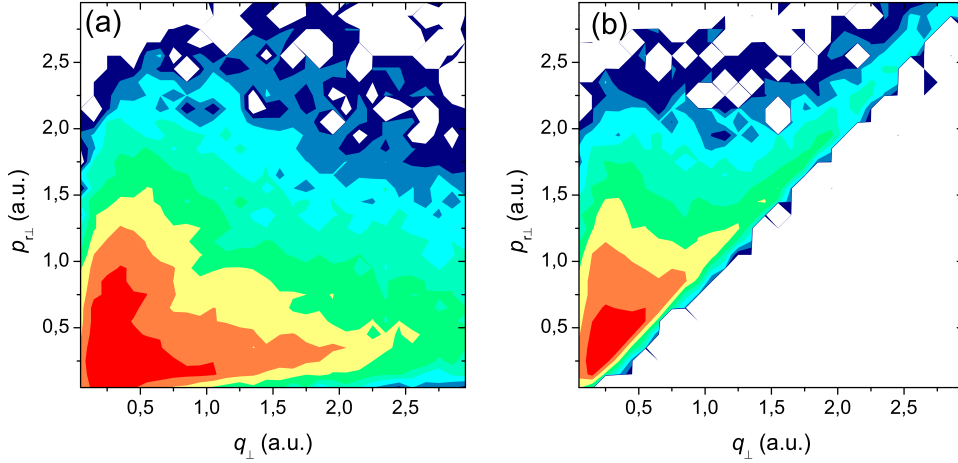


Abbildung 4.7: Doppelt differentielle Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/dp_{\perp}dq_{\perp}$ (in logarithmischer Darstellung) für den 100 MeV/amu C^{6+} -He-Stoß. In Abb. (a) wurden die Elektronen in die Streuebene emittiert, in Abb. (b) in die senkrechte Ebene.

Stoßdynamik, so ist zu erwarten, daß sich dies noch deutlicher in den Wirkungsquerschnitten ausdrückt, die differentiell bezüglich des Rückstoßionenimpulses sind. Für die Projektil-Elektron-Streuung läßt sich die direkte Wechselwirkung zwischen Elektron und Projektil zum Beispiel durch den Wirkungsquerschnitt $d^2\sigma/dE_e dq_{\perp}$ sichtbar machen. Hier ist unter der Bedingung $\sqrt{2E_e} = k_e = q$, also gerade dann, wenn sich die Impulsänderung des Projektils und der Elektronenimpuls kompensieren, ein Maximum (der sog. „Bethe Ridge“) zu beobachten (z.B. [MPS 01]). Ein entsprechender Wirkungsquerschnitt für die Projektil-Targetrumpf-Wechselwirkung, also $d^2\sigma/dp_{\perp}dq_{\perp}$, ist in Abb. 4.7 für die Streuebene (a) und die senkrechte Ebene (b) dargestellt (siehe auch [SMF 03b]). In dieser Darstellung sollte ein signifikanter Beitrag der Kern-Kern-Streuung zu einer Erhöhung des Wirkungsquerschnitts für $p_{\perp} = q_{\perp}$, also entlang der Winkelhalbierenden in den Graphen, führen.

Wird das Elektron in die Streuebene emittiert, können zwei Beiträge aus dem Wirkungsquerschnitt in Abb. 4.7 (a) identifiziert werden. Der erste befindet sich entlang einer Linie, für die der Rückstoßionenimpuls p_{\perp} ungefähr fünfmal kleiner ist als q_{\perp} . Aufgrund der Impulserhaltung muß entlang dieser Linie das Elektron nahezu in Richtung von \mathbf{q} emittiert werden. Der zweite Beitrag befindet sich entlang der Linie, für die $p_{\perp} \approx 3q_{\perp}$ gilt. In diesem Fall kann das Elektron in jede Richtung relativ zu \mathbf{q} emittiert werden. Der dominante Beitrag wird jedoch sicherlich durch den *Recoil-Peak* geliefert, da aufgrund der Impulserhaltung das Elektron einen deutlich höheren Impuls als q bräuchte, um in Richtung von \mathbf{q} emittiert werden zu können. Eine Erhöhung des Querschnitts für $p_{\perp} = q_{\perp}$, die für eine direkte Kern-Kern-Wechselwirkung sprechen würde, ist in Abbildung 4.7 (a) nicht zu erkennen.

Wird das Elektron in die senkrechte Ebene emittiert, muß wegen $\mathbf{q} = \mathbf{k}_e + \mathbf{p}_{r\perp}$ der transversale Rückstoßionenimpuls $p_{r\perp}$ größer als der transversale Impulsübertrag q_{\perp} sein. Deshalb ist der Wirkungsquerschnitt in Abb. 4.7 (b) unterhalb der Winkelhalbierenden Null. Nahe der Diagonalen, im oberen linken Dreieck des Graphen, ist ein Grat zu erkennen, entlang dessen die Intensität erhöht ist. Diese Erhöhung für die Bedingung $p_{r\perp} = q_{\perp}$, die in der Streuebene nicht sichtbar ist, ist eine klare Signatur der Kern-Kern-Streuung ähnlich zum Bethe *Ridge* bei der Projektil-Elektron-Wechselwirkung. Somit scheinen die Elektronen in der Tat aufgrund der Kern-Kern-Streuung in die senkrechte Ebene emittiert zu werden.

Es mag erstaunlich erscheinen, daß ein Effekt höherer Ordnung wie die Kern-Kern-Wechselwirkung in einem Stoßsystem bei der kleinen Störung von nur 0,1 a.u. beobachtbar ist. Der Grund dafür liegt darin, daß dieser Effekt nur unter ganz bestimmten kinematischen Bedingungen auftritt. So ist z.B. der Anteil der Elektronen, die in die senkrechte Ebene emittiert werden, deutlich geringer als der Wirkungsquerschnitt in der Streuebene. Außerdem wird durch die Kern-Kern-Streuung der Wirkungsquerschnitt hauptsächlich umverteilt, da die Ionisationswahrscheinlichkeit durch die direkte Projektil-Targetkern-Wechselwirkung kaum erhöht wird. Eine sukzessive Integration des differentiellen Wirkungsquerschnitts über die verschiedenen Parameter führt deshalb dazu, daß dieser Prozeß in den integrierten Querschnitten nicht mehr beobachtet werden kann [VNU03]. Die in diesem Kapitel vorgestellten Daten widersprechen also der allgemeinen Annahme nicht, daß Beiträge höhere Ordnung bei kleiner Störung nur von geringer Bedeutung sind.

4.2.2 Projektilladungsabhängigkeit bei kleiner Störung

Die Frage nach den Beiträgen höherer Ordnung in den Wirkungsquerschnitten für Einfachionisation durch geladene Projektile ist eng mit der Frage nach der Projektilladungsabhängigkeit verknüpft. Dies liegt daran, daß in der Ersten Bornschen Näherung der Wirkungsquerschnitt proportional zum Quadrat der Projektilladung Z_p^2 ist (siehe Gl. 1.3), sodaß im Rahmen dieser Näherung keine Abhängigkeit vom Vorzeichen der Projektilladung auftreten kann. Bereits in der Zweiten Bornschen Näherung ergibt sich jedoch ein Term im Wirkungsquerschnitt, der mit Z_p^3 skaliert und somit vom Vorzeichen der Projektilladung abhängt. Deshalb sollte bei der Beobachtung von Höheren-Ordnungs-Effekten immer auch eine Abhängigkeit von der Projektilladung auftreten. Diese Abhängigkeit soll in diesem Kapitel experimentell und theoretisch näher untersucht werden.

In einer Studie von Voitkiv *et al.* [VNU03] wurde der Einfluß des Vorzeichens der Projektilladung auf die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte anhand verschiedener theoretischer Modelle untersucht. Dabei wurden Rechnungen in der Er-

4.2. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

sten Bornschen Näherung, in der Zweiten Bornschen Näherung (bis zum Z_P^3 -Term), in der Glauber- und CDW-EIS-Näherung unter Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung durchgeführt. In Abbildung 4.8 sind die Ergebnisse für den Stoß von 100 MeV/amu C^{6+} - bzw. \bar{C}^{6-} -Ionen mit Wasserstoff in der Streuebene (Abb. (a)) und in der senkrechten Ebene (Abb. (b)) dargestellt.

Sowohl in der Streuebene als auch in der senkrechten Ebene lassen sich bei dieser nicht zu hohen Störung einige allgemeine Beobachtungen machen: Erstens, sind die Höheren-Ordnungs-Effekte, also die Abweichung von der Ersten Bornschen Näherung, weitgehend unabhängig davon, ob Glauber-, CDW-EIS- oder Zweite Bornsche Näherung verwendet wurde. Da die verschiedenen Rechenmodelle unabhängig voneinander sind, kann dies auch als Bestätigung der Konsistenz der Theorien gewertet werden. Zweitens sind die Abweichungen von der Ersten Bornschen Näherung für negativ und positiv geladene Projektile entgegengesetzt, d.h. wird unter einem bestimmten Winkel der Wirkungsquerschnitt für positiv geladene Projektile durch Beiträge höherer Ordnung erhöht, so wird er für negativ geladene Projektile entsprechend erniedrigt und umgekehrt. In der Zweiten Bornschen Näherung ist diese Eigenschaft sogar exakt erfüllt, da hier zum Wirkungsquerschnitt der Ersten-

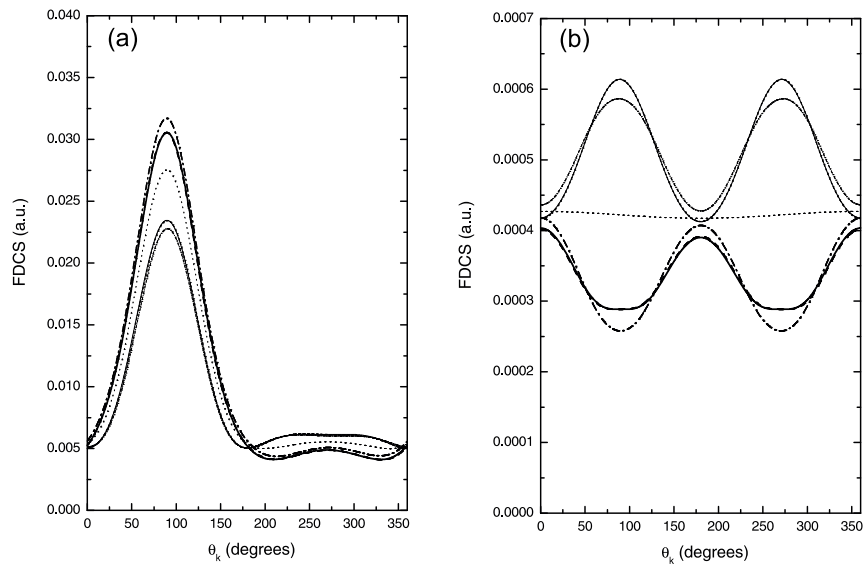


Abbildung 4.8: Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte im Stoß von 100 MeV/amu C^{6+} - bzw. \bar{C}^{6-} -Ionen mit Wasserstoff in der Streuebene (a) und in der senkrechten Ebene (b) (aus [VNU03]). In (a) ist $q_{\perp} = 1$ a.u. und $E_e = 1$ eV, in (b) gilt $q_{\perp} = 1$ a.u. und $E_e = 10$ eV. Dargestellt sind die Ergebnisse der Ersten Bornschen Näherung (gepunktete Linien), der Glauber-Rechnung (durchgehende Linien), der CDW-EIS-Rechnung (gestrichelte Linien) und der Zweiten Bornschen Näherung (Strichpunkt-Linien) für negativ (dünne Linien) und positiv (dicke Linien) geladene Projektile.

Ordnungs-Rechnung ein Beitrag, der mit Z_P^3 skaliert, addiert wird. Des weiteren kann in der Streuebene (Abb. 4.8 (a)) in Übereinstimmung mit früheren Arbeiten [MWW98, MSJ02] beobachtet werden, daß sich die relative Größe des *Recoil-Peaks* durch die Beiträge höherer Ordnung für negativ geladene Projektile erhöht, während sie sich für positiv geladene Projektile verringert. Dieser Effekt wird von Voitkiv *et al.* hauptsächlich auf die Kern-Kern-Wechselwirkung zurückgeführt.

In der senkrechten Ebene (Abb. 4.8 (b)) ergibt sich in der Ersten Bornschen Näherungen eine weitgehend isotrope Verteilung des Emissionswinkels. Dies liegt an der allgemeinen Eigenschaft dieser Näherung, daß der Wirkungsquerschnitt symmetrisch zum Impulsübertrag ist (siehe Kap. 1.3.2). Da der Impulsübertrag (für nicht zu kleine q) nahezu senkrecht zur senkrechten Ebene ist, muß dort also der Emissionswinkel etwa gleichverteilt sein. Im Gegensatz dazu, treten bei den Rechnungen, bei denen Effekte höherer Ordnung berücksichtigt sind, Strukturen in der Winkelverteilung auf. Auch hier wird die Ursache in der Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetkern gesehen. Für negativ geladene Projektile ergeben sich Maxima bei 90° und 270° wohingegen für positiv geladene Projektile an diesen Stellen Minima auftreten. Dies ist jedoch im Widerspruch zu den experimentellen Ergebnissen aus [SMF03a] (siehe auch Kap. 4.2.1), bei denen für C^{6+} -Projektile bei 90° und 270° Maxima auftreten. Diese Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment wird damit erklärt, daß in der Rechnung das Target durch eine Wasserstoffwellenfunktion beschrieben wird. Die beobachtete Abweichung beruht nach dieser Erklärung auf einem Vier-Teilchen-Effekt, der in der Rechnung nicht berücksichtigt ist.

Um von experimenteller Seite die Abhängigkeit Höherer-Ordnungs-Beiträge vom Projektilvorzeichen zu untersuchen, wurden in dieser Arbeit die Wirkungsquerschnitte für die Einfachionisation von Helium durch 6 MeV Protonen ($v_P = 15,5$ a.u.) und 2 keV Elektronen ($v_P = 12,1$ a.u.) verglichen. Die Störung in diesen Stoßsystemen ist also $\eta \approx 0,07$ a.u. bzw. $0,08$ a.u., was in etwa dem Störungsbereich der oben diskutierten Daten entspricht (100 MeV/amu C^{6+} entspricht einer Störung von $\eta \approx 0,1$ a.u.). Wie bereits in Kapitel 1.1.1 erläutert beruht der Hauptunterschied zwischen Protonen- und Elektronenstoß bei dieser Geschwindigkeit auf der unterschiedlichen Ladung, wohingegen die Projektilmasse eine untergeordnete Rolle spielen sollte.

In Abbildung 4.9 sind in dreidimensionalen Polarplots die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte der beiden Stoßsysteme für eine Elektronenenergie von $E_e = 6,5$ eV und einen Impulsübertrag von $q = 0,75$ a.u. dargestellt. Für die Einfachionisation im Protonenstoß (a) weist der Wirkungsquerschnitt eine ähnliche Form wie im 100 MeV/amu C^{6+} -Stoß auf (vgl. Abb. 4.5 (a)). Auch in dieser Winkelverteilung tritt die charakteristische Doppelkeulen-Struktur auf, mit dem *Binary-Peak* in Richtung des Impulsübertrags und dem *Recoil-Peak* in entgegengesetzter Rich-

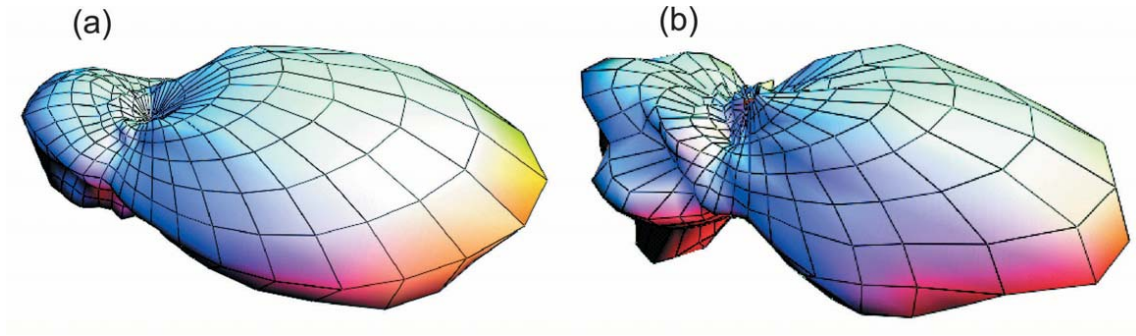


Abbildung 4.9: Dreidimensionale Polarplots (vgl. Abb. 4.5) der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte für Ionisation von Helium durch 6 MeV Protonen (a) und 2 keV Elektronen (b). Die Elektronenenergie beträgt $E_e = 6,5 \text{ eV}$, der Impulsübertrag $q = 0,75 \text{ a.u.}$

tung. Die Verbreiterung der Verteilung in der Azimuthalebene, die in [SMF 03a] und Kap. 4.2.1 dieser Arbeit durch die Kern-Kern-Streuung erklärt wurde, ist auch im Protonenstoß sichtbar. Im Elektronenstoß kann ebenfalls ein Wirkungsquerschnitt mit einer Doppelkeulen-Form beobachtet werden. Hier ist jedoch der *Recoil-Peak* gegenüber dem *Binary-Peak* stärker abgegrenzt, da die reifenähnliche Struktur in der Azimuthalebene nicht auftritt und der Wirkungsquerschnitt in der senkrechten Ebene stärker „eingeschnürt“ ist.

Zum quantitativen Vergleich mit den theoretischen Ergebnissen wurden für diese Stoßsysteme die Wirkungsquerschnitte in der Streuebene und in der senkrechten Ebene bestimmt. Diese sind, für die gleichen kinematischen Bedingungen wie in Abbildung 4.9, in Abbildung 4.10 dargestellt. Zur theoretischen Beschreibung wurde eine Glauber-Rechnung für 6 MeV Protonen und 3,7 MeV Antiprotonen³ durchgeführt. Dabei wurde das Helium-Target durch eine einfache Zwei-Elektronen-Wellenfunktion beschrieben (vgl. Kapitel 3.2 in [VNU03]).

Der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt für die Emission der Elektronen in die Streuebene ist in Abbildung 4.10(a) gezeigt. Wie bereits in Kapitel 4.2.1 für den Stoß von Helium mit C^{6+} -Ionen, wird auch hier die Form der Winkelverteilung durch die Theorie gut beschrieben. Jedoch wird das Verhältnis der Höhe von *Binary-* zu *Recoil-Peak* durch die Rechnung sowohl im Protonen- als auch im Elektronenstoß etwa um den Faktor 1,8 bis 2 unterschätzt. Diese Abweichung ist in etwa in Übereinstimmung mit bisherigen Befunden ähnlicher theoretischer Modelle [MSJ02, SAC90, MWW98] und lässt sich mit der Verwendung aufwendigerer Targetbeschreibungen noch etwas reduzieren. Wie oben schon erwähnt ist nach den Höheren-Ordnungs-Rechnungen aus [VNU03] die relative Höhe des *Recoil-Peaks* für

³Die Geschwindigkeit sowohl von 3,7 MeV Antiprotonen als auch von 2 keV Elektronen beträgt $v_p = 12 \text{ a.u.}$.

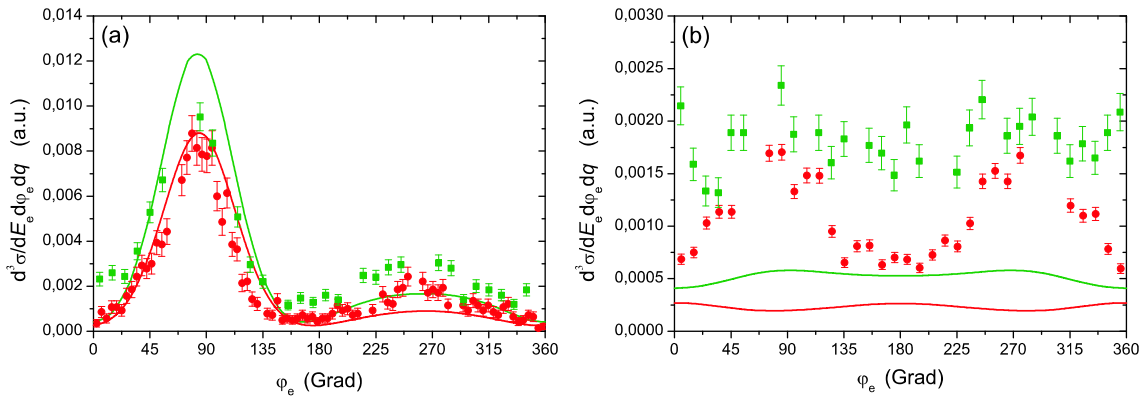


Abbildung 4.10: Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Streuebene (a) und in der senkrechten Ebene (b) bei einem Impulsübertrag von $q = 0,75$ a.u. und einer Elektronenenergie von $E_e = 6,5$ eV. Dargestellt sind die experimentellen Ergebnisse für den Stoß von Helium mit 6 MeV Protonen (rote Kreise) und 2 keV Elektronen (grüne Quadrate) sowie die Resultate der Glauber-Näherung für 6 MeV Protonen (rote Linie) und 3,7 MeV Antiprotonen (grüne Linie). Die experimentellen Daten wurden auf den Wirkungsquerschnitt in der Streuebene normiert.

negativ geladene Projektile größer als für positiv geladene (siehe Abbildung 4.8 (a)). Im Experiment ist eine ähnlich Tendenz für den Elektronenstoß im Vergleich zum Protonenstoß zu beobachten. Jedoch ist der beobachtete Effekt sehr gering, sodaß eine definitive Aussage im Vergleich mit der Theorie sehr schwierig ist. Auf experimenteller Seite ist eine genaue Bestimmung der relativen Höhen von *Binary* und *Recoil-Peak* mit dem verwendeten Spektrometer deshalb mit Problemen behaftet, weil diese Höhen (in der Streuebene) eng mit der Kalibration des Transversalimpulses des Rückstoßions verknüpft ist. Wird dieser Transversalimpuls nur um 5% zu hoch berechnet, so kann die relative Höhe des *Recoil-Peaks* bereits um bis zu 15% überbewertet werden.

Für die senkrechte Ebene ist der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt in Abbildung 4.10 (b) dargestellt. In der Ersten Bornschen Näherung (nicht in der Abbildung dargestellt) ist die Verteilung in der senkrechten Ebene nahezu isotrop. Im Gegensatz dazu ergeben sich im Protonenstoß in der senkrechten Ebene, genau wie im Stoß mit 100 MeV/amu C^{6+} -Ionen (siehe Abb. 4.6 (b)), Maxima bei 90° und bei 270° . Wie in den vorangegangenen Abschnitten bereits diskutiert, liefert die Rechnung, die die Kern-Kern-Wechselwirkung berücksichtigt, für positiv geladene Projektile an diesen Stellen jedoch Minima und unterschätzt insgesamt den Querschnitt in dieser Ebene erheblich.

Wenn die im Experiment beobachteten Strukturen durch Beiträge höherer Ordnung verursacht sind, so muß eine deutliche Projektilladungsabhängigkeit der Winkelverteilung auftreten. Ist zum Beispiel die Zweite Bornsche Näherung (bis zum Z_p^3 -

Term) eine angemessene Methode, um den Stoß zu beschreiben, so muß aufgrund der Winkelverteilung im Protonenstoß unabhängig von der theoretischen Beschreibung des Targets die Winkelverteilung im Elektronenstoß Minima unter 90° und bei 270° aufweisen. Dies ist allein darauf zurückzuführen, daß die Erste Bornsche Näherung gleichverteilt ist, und daß der in der Zweiten-Ordnungs-Näherung hinzugefügte Z_P^3 -Term eine entgegengesetzte Wirkung auf den Querschnitt für positiv und negativ geladene Projektile hat. Für die beiden theoretischen Querschnitte der Glauber-Rechnung ist in der Tat eine gegensätzliche Wirkung der Höheren-Ordnungs-Beiträge für Protonen und Antiprotonen zu beobachten. Treten im Wirkungsquerschnitt für Protonen Maxima auf, so ergeben sich für Antiprotonen Minima und umgekehrt. Auch die experimentellen Daten legen eine Ladungsabhängigkeit der Winkelverteilung nahe, wenngleich im Elektronenstoß im Gegensatz zum Protonenstoß keine statistisch signifikante Struktur mit Maxima bzw. Minima zu beobachten ist (siehe auch [Höh00]).

Diese Beobachtungen zeigen, daß eine Beschreibung des Wirkungsquerschnitts in dieser Ebene durch eine Zweite Bornsche Näherung, die in der Reihenentwicklung nach dem Z_P^3 -Term abbricht, nicht ausreichend ist. Im Widerspruch zum Experiment, liefert dieses theoretische Modell für positiv und negativ geladene Projektile an entgegengesetzten Stellen Maxima und Minima. Es müssen in der Störungsentwicklung also auch Terme mit höheren Potenzen von Z_P berücksichtigt werden. Offensichtlich sind jedoch auch die anderen in [VNU03] diskutierten Höheren-Ordnungs-Näherungen nicht in der Lage, die im Experiment beobachtete Ladungsabhängigkeit richtig zu reproduzieren.

Es kann also festgehalten werden, daß Beiträge höherer Ordnung in jedem Fall in der senkrechten Ebene eine große Rolle spielen. Zum einen gibt die Struktur der Winkelverteilung für positiv geladene Projektile einen ersten Hinweis darauf, da sie im direkten Widerspruch zur Ersten Bornschen Näherung steht. Zum anderen zeigt auch der signifikante Unterschied zwischen positiv und negativ geladenen Projektile, daß Beiträge höherer Ordnung in der Stoßdynamik eine entscheidende Rolle spielen.

Bei Protonen und Elektronen als Projektile besteht nicht nur der oben diskutierte Ladungsunterschied, sondern sie unterscheiden sich auch in ihrer Masse. Wenn auch der Einfluß der Projektillmasse auf die totalen oder niedrig differentielle Wirkungsquerschnitte bei den untersuchten Stoßgeschwindigkeiten sehr gering ist, so kann doch nicht ausgeschlossen werden, daß unter sehr differenzierten kinematischen Bedingungen, wie dies bei den vollständig differentielle Daten der Fall ist, ein Einfluß der Projektillmasse zu beobachten ist. Experimentell kann diese Massenabhängigkeit letztlich nur dadurch geklärt werden, daß vollständig differentielle Daten für die Einfachionisation von Helium im Antiprotonen- bzw. Positronenstoß gewonnen

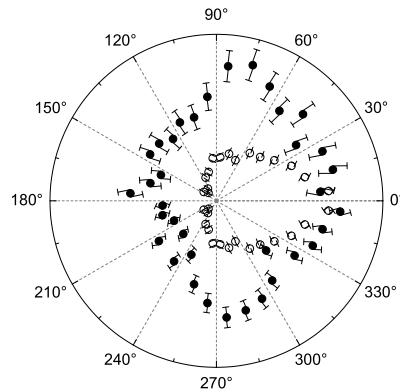


Abbildung 4.11: Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation im C^{6+} -Helium-Stoß bei 2 MeV/amu in der senkrechten Ebene für $E_e = 4 \text{ eV}$ und $q = 0,7 \text{ a.u.}$ (offene Kreise) bzw. $E_e = 1 \text{ eV}$ und $q = 1,5 \text{ a.u.}$ (volle Kreise).

werden.

4.2.3 Die Stoßdynamik bei mittleren Störungen

Wie in den vorangegangenen Kapiteln gezeigt wurde, können mit Hilfe vollständig differentieller Wirkungsquerschnitte Ionisationsmechanismen und Beiträge der Stoßdynamik aufgedeckt werden, die in den totalen bzw. niedrig differentiellen Wirkungsquerschnitten nicht sichtbar sind. Um einerseits die Grenzen theoretischer Modelle zu testen und andererseits einen tieferen Einblick in die Abweichungen von der Ersten Bornschen Näherung und in die zugrunde liegende Dynamik zu erhalten, ist die Untersuchung von Stoßsystemen unterschiedlicher Störungen sehr hilfreich. In diesem Kapitel sollen vollständig differentielle Ergebnisse zum Stoß von 2 MeV/amu C^{6+} -Ionen mit Helium vorgestellt (vergl. Kap. 4.1), mit verschiedenen theoretischen Rechnungen verglichen und diskutiert werden. Bei diesem Stoßsystem beträgt die Störung $\eta = 0,67 \text{ a.u.}$.

In Abbildung 4.11 sind die experimentellen Wirkungsquerschnitte für dieses Stoßsystem in der senkrechten Ebene dargestellt. Im Gegensatz zu den Beobachtungen bei den 100 MeV/amu C^{6+} -Projektile (Kap. 4.2.1) und im Protonenstoß (Kap. 4.2.2), treten in dem hier untersuchten Stoßsystem für eine Elektronenenergie von $E_e = 4 \text{ eV}$ und einen Impulsübertrag von $q = 0,7 \text{ a.u.}$ keine Maxima unter 90° und 270° auf. Wählt man jedoch eine Elektronenenergie von $E_e = 1 \text{ eV}$ und einen Impulsübertrag von $q = 1,5 \text{ a.u.}$, sind auch bei der größeren Störung die Maxima zu beobachten. Unter diesen kinematischen Bedingungen ist der Impulsübertrag q deutlich größer als der Elektronenimpuls k_e , sodaß vom Projektil ein großer Impuls auf das Rückstoßion übertragen werden muß. Da dies am effektivsten durch die direkte Wechselwirkung

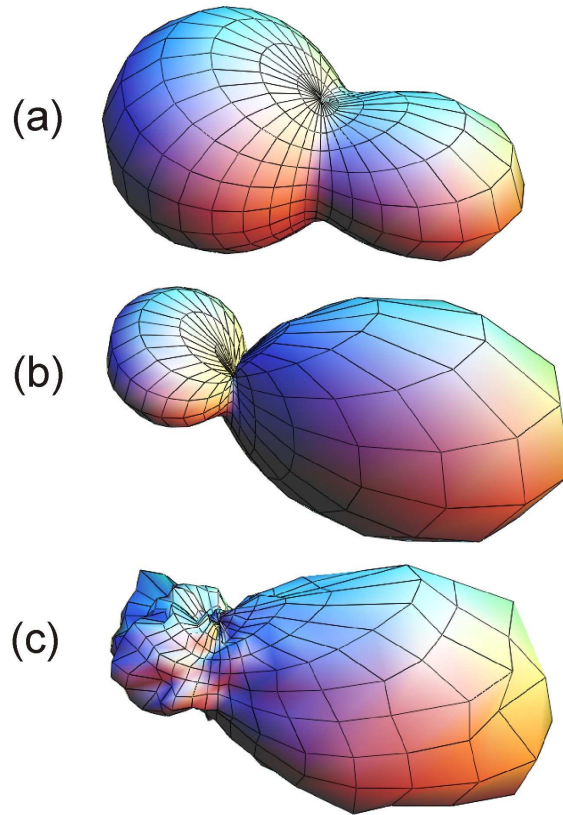


Abbildung 4.12: Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation im 2 MeV/amu C^{6+} -Helium Stoß bei $E_e = 1$ eV und $q = 1,5$ a.u.. Gezeigt sind die Ergebnisse der Ersten Bornschen Näherung (a), der CDW-EIS-Rechnung (b) und des Experiments (c).

zwischen Projektil und Targetrumpf geschieht, kann die Beobachtung aus Abbildung 4.11 als weiterer Hinweis darauf gewertet werden, daß die Kern-Kern-Streuung der entscheidende Mechanismus ist, der die beobachteten Maxima der Winkelverteilung in der senkrechten Ebene verursacht.

Zu dem Wirkungsquerschnitt bei einer Elektronenenergie von $E_e = 1$ eV und bei einem Impulsübertrag von $q = 1,5$ a.u. wurden Rechnungen mit verschiedenen theoretischen Modellen durchgeführt [MFF 03]. In Abbildung 4.12 sind die Ergebnisse nach einer Ersten Bornschen Näherung mit Hartree-Fock-Wellenfunktionen für den Anfangs- und den Endzustand des Targetsystems (a) sowie die Ergebnisse einer CDW-EIS-Rechnung (b) dargestellt. In der CDW-EIS-Näherung wird, ebenfalls unter Verwendung der Hartree-Fock-Methode zur Beschreibung des Targetsystems, die Wechselwirkung aller drei Teilchen quantenmechanisch berücksichtigt (Details der verwendeten Rechnungen finden sich in [MFF 03]). Abbildung (c) zeigt den experimentellen Wirkungsquerschnitt.

Die Erste Bornsche Näherung stimmt in ihrer Form nur schlecht mit den experimentellen Ergebnissen überein. Der Hauptunterschied besteht darin, daß die Rechnung die relative Größe des *Recoil-Peaks* stark überschätzt. Dieses Phänomen ist bei der Verwendung der Hartree-Fock-Wellenfunktion zu beobachten (siehe [FMS 03] und Abb. 4.16). Die Berücksichtigung Höherer-Ordnungs-Beiträge führt jedoch dazu, daß die relative Höhe des *Recoil-Peaks* wieder abnimmt (siehe [MSJ 02, VNU03] und Kap. 4.2.2 dieser Arbeit). In der Beschreibung durch die CDW-EIS-Näherung kann somit eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment erreicht werden. Wie sich im Vergleich mit Ergebnissen von weiterer theoretischer Modelle zeigen läßt (siehe dazu [MFF 03]), beruht die bessere Übereinstimmung der CDW-EIS-Methode mit dem Experiment im Vergleich zur Ersten Bornschen Näherung hauptsächlich auf der Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung.

Im Gegensatz zur Ersten Bornschen Näherung und den Ergebnissen für schnellere Projektilen (vgl. Kap. 4.2.1 und [SMF 03a]) ist der *Recoil-Peak* in dem mit der CDW-EIS-Methode berechneten Wirkungsquerschnitt nun nicht mehr zylindersymmetrisch zur Impulsübertragsrichtung \mathbf{q} . Vielmehr ist er in der Ebene senkrecht zur Projektilstrahlrichtung, also der Azimuthalebene, verbreitert. Diese Beobachtung läßt sich in einem klassischen Bild mit einem Doppel-Streuprozess erklären (vgl. Kap. 4.2.1). Dabei wird der Impulsübertrag durch die Kern-Kern-Streuung gedreht, was zu einer Verbreiterung der Verteilung in der Azimuthalebene führt.

Bei dem mit der CDW-EIS-Methode berechneten Wirkungsquerschnitt kann außerdem beobachtet werden, daß im Gegensatz zu den Berechnungen für die schnelleren Projektilen für das hier vorgestellte Stoßsystem die Maxima qualitativ richtig reproduziert werden⁴. Dieses Ergebnis ist insofern überraschend, da im allgemeinen Stoßsysteme bei kleiner Störung besser durch störungstheoretische Ansätze beschrieben werden können als bei großer Störung. Hier liefert ein und derselbe theoretische Ansatz bei einer Störung von $\eta = 0,67$ a.u. jedoch ein besseres Ergebnis als bei $0,1$ a.u., was in direktem Widerspruch zum Prinzip einer störungstheoretischen Reihenentwicklung steht.

Um diesen scheinbaren Widerspruch aufzulösen, muß die theoretische Beschreibung sowie die Stoßdynamik tiefergehend diskutiert werden. In der hier verwendeten Beschreibung durch die CDW-EIS-Methode sowie bei der CDW-HF-Rechnung wird der Drei-Teilchen-Endzustand durch das Produkt dreier Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen beschrieben (ähnlich wie bei der 3C-Rechnung). Diese Näherung ist exakt, wenn zwei der Teilchen nahe beieinander sind, und sich das dritte Teilchen unendlich weit davon entfernt befindet [KZ97]. Sind sich jedoch alle drei Teilchen sehr nah,

⁴Dies gilt im übrigen auch für die CDW-HF-Rechnung für dieses System, die in Kap. 4.2.1 dieser Arbeit und [SMF 03a] verwendet wurde (siehe auch [MFF 03], dort wird die CDW-HF-Methode „3DW-FBA“ genannt).

stellt die Beschreibung durch diese Wellenfunktion keine angemessene Lösung des Drei-Körper-Problems mehr dar. Befindet sich das Projektil also außerhalb eines gedachten Kreises mit dem Radius r_0 um den Targettrumpf, so ist die in der Rechnung gemachte Näherung sinnvoll, wohingegen für kleinere Abstände Fehler, d.h. Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment, auftreten können.

Dieser Effekt läßt sich grob in einem einfachen klassischen Bild quantifizieren. Wird (stark vereinfacht) angenommen, daß der Impuls des Rückstoßions ausschließlich durch den elastischen Zwei-Körper-Stoß mit dem Projektil übertragen wird, kann jedem Rückstoßionenimpuls unter der Annahme eines Streupotentials ein bestimmter Stoßparameter b zugeordnet werden. Diese Methode läßt sich auf frühere Ergebnisse aus [MSJ02] anwenden, bei denen die Wirkungsquerschnitte in der Streuebene für das Stoßsystem mit $100 \text{ MeV}/\text{amu}$ C^{6+} -Projektilen theoretisch untersucht wurden. Dabei wurden für zwei von drei untersuchten kinematischen Situationen eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie für den *Binary-Peak* erreicht. Gemäß dem vereinfachten klassischen Bild lassen sich den Situationen, bei denen der *Binary-Peak* erfolgreich beschrieben wurde, Stoßparameter von $b = 2 a_0$ bzw. $1,3 a_0$ zuordnen (a_0 : Bohrscher Bahnradius). Im dritten Fall, bei dem die Beschreibung durch das theoretische Modell scheiterte, beträgt der Stoßparameter nur $0,4 a_0$. Für den Anteil des Wirkungsquerschnitts in der senkrechten Ebene, der in Kapitel 4.2.1 diskutiert wurde, ergibt sich unter den dort angenommenen kinematischen Bedingungen ebenfalls ein Stoßparameter von $0,4 a_0$. Im Gegensatz dazu ist für das in Abb. 4.12 dargestellte Beispiel für den Fall, daß das Elektron in die senkrechte Ebene emittiert wird, der Stoßparameter etwa $2 a_0$. Dies ist ein Hinweis darauf, daß die Beschreibung des Drei-Teilchen-Problems durch das Produkt der drei Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen noch bei vergleichsweise kleinen Stoßparametern von etwa dem Bohrschen Bahnradius a_0 gute Resultate liefert, wohingegen diese Methode bei deutlich geringeren Abständen scheitert.

Es kann also festgehalten werden, daß mit Hilfe der dreidimensionalen vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnitte der Ionisationsprozeß sowohl bei sehr kleinen als auch bei größeren Abständen untersucht werden kann. Speziell in der senkrechten Ebene treten dabei sehr kleine Abstände zwischen den Stoßpartnern auf. Im Falle kleiner Störungen kommen sich die Stoßpartner dabei so nahe, daß die Beschreibung durch die entwickelten Mehrfachstreuungsmodelle scheitert. Bei größerer Störung ist die Theorie hingegen in besserer Übereinstimmung mit dem Experiment. Somit ist die Annahme, daß eine geringere Störung eine bessere theoretische Beschreibung impliziert, nicht in jedem Fall gültig.

4.2.4 Die Dynamik in der Streuebene bei mittlerer und großer Störung

Während bei kleiner Störung der Wirkungsquerschnitt in der Streuebene mit störungstheoretischen Methoden durchaus in guter Übereinstimmung mit dem Experiment beschrieben werden kann (siehe z.B. [BBK89, MWW98, JM98, MSJ02] und Abb. 4.1 (a)), sind diese Ansätze bei großer Störung jedoch weniger geeignet, um die Mehr-Teilchen-Dynamik in einem Ionisationsprozeß zu beschreiben. Für die Ionisation im Elektronenstoß wurden deshalb auch nicht-perturbative Methoden entwickelt, wie z.B. die *Convergent Close-Coupling-* (CCC) [BFR98] oder die *Exterior Complex Scaling-*Rechnung (ECS) [RBI99], die bis hin zu geringen Projektilenergien nahe der Ionisationsschwelle angewendet werden können. Mit diesen Ansätzen konnte eine beeindruckende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment für die Ionisation von Wasserstoff erreicht werden [REP97, RBB03].

In Ion-Atom-Stößen stellt die theoretische Beschreibung bei großen Störungen eine ungleich größere Herausforderung dar. Zum einen können hierbei extrem hohe Störungen erreicht werden (experimentell bisher bis $\eta = 4,41$ a.u. [MFS99, MPS01, SMP02]), wohingegen in der Einfachionisation von Helium im Elektronenstoß die Störung aus energetischen Gründen maximal $0,74$ a.u. betragen kann. Zum anderen können nicht-perturbative Ansätze wie die CCC- und ECS-Theorie nicht ohne weiteres auf den Ionenstoß übertragen werden. Dies liegt daran, daß in diesen Theorien eine Entwicklung bezüglich des Drehimpulses des Projektils (ähnlich einer Partialwellenentwicklung) durchgeführt wird. Für schwere Projektile tragen jedoch erheblich größere Drehimpulse zum Wirkungsquerschnitt bei, sodaß eine solche Reihenentwicklung zur Berechnung des Ion-Atom-Stoßes nicht zweckmäßig ist.

Für sehr große Störungen wurden differentielle Wirkungsquerschnitte der Ionisation im Ion-Atom-Stoß bereits in früheren Studien untersucht ($3,6$ MeV/amu Au⁵³⁺-Projektile, $\eta = 4,4$ a.u.). Dabei konnte für die Endzustandsimpulsverteilung der Elektronen eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Ergebnissen und den Resultaten der CDW-EIS-Näherung erreicht werden [MFS99] (siehe auch Abb. 4.1 (b)). Die Beschreibung der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte in der Streuebene durch diese Rechnung scheiterte jedoch. Schulz *et al.* [SMP02] stellte fest, daß der *Recoil-Peak*, d.h. das Maximum des Wirkungsquerschnitts in Richtung von $-\mathbf{q}$, in den experimentellen Spektren vollständig fehlt (siehe Abb. 4.15). Statt dessen wurde eine starke Erhöhung in Vorwärtsrichtung, also in Richtung des auslaufenden Projektils, gefunden, die für kleine Impulsüberträge q den Wirkungsquerschnitt sogar dominiert. Dieses Maximum wurde als *Recoil-Peak* interpretiert, der durch die Endzustands-Wechselwirkung mit dem Projektil (PCI) stark nach vorne verschoben sei. In den Rechnungen nach der CDW-EIS-Näherung aus [SMP02]

zeigt der Wirkungsquerschnitt ein einziges Maximum nahezu in Richtung von \mathbf{q} , nämlich den durch die PCI leicht nach vorne verschobenen *Binary-Peak*. Das völlige Fehlen des *Recoil-Peaks* in der CDW-EIS-Rechnung wurde damit erklärt, daß die Anfangs- und Endzustände nicht orthogonal sind. Dies führt automatisch zu einem nichtphysikalischen Monopolbeitrag in der Übergangsamplitude, der den *Recoil-Peak* unterdrücken kann.

In diesem Kapitel sollen diese Beobachtungen näher beleuchtet werden, wobei der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt als Funktion der Störung untersucht wird (siehe [FMS 03]). In den hier diskutierten Stoßsystemen wurden 2 MeV/amu C^{6+} ($\eta = 0,67$ a.u.), 3,6 MeV/amu Au^{24+} ($\eta = 2,00$ a.u.) sowie 3,6 MeV/amu Au^{53+} -Projektile ($\eta = 4,41$ a.u.) verwendet.

Zum Vergleich mit dem Experiment wurden drei Theorien herangezogen. Die erste Methode ist die Erste Bornsche Näherung. Da die Bornsche Reihe im Bereich großer Störung nicht konvergieren sollte, kann allerdings nicht damit gerechnet werden, daß diese Methode zufriedenstellende Übereinstimmung mit dem Experiment liefert. Die zweite Methode ist eine CDW-EIS-Rechnung, die ähnlich schon in [SMP 02] verwendet wurde. Die dritte Methode ist ebenfalls eine CDW-EIS-Rechnung, wobei hier jedoch die Kern-Kern-Wechselwirkung durch eine Eikonal-Näherung berücksichtigt wird. Für diese Wechselwirkung wird das Targetrumpfpotential als ein Coulomb-Potential der Punktladung $Z_{\text{r-p}} = 1$ angenommen. In allen Rechnungen wird für die Projektil-Elektron-Wechselwirkung das Target wasserstoffähnlich beschrieben, wobei in diesem Fall eine effektive Kernladung von $Z_{\text{e-p}} = 1,345$ verwendet wurde, um das Ionisationspotential richtig zu reproduzieren. Eine komplexere Targetbeschreibung, z.B. durch eine Hartree-Fock-Wellenfunktion, macht die Rechnung, speziell bei der CDW-EIS-Methode mit Kern-Kern-Wechselwirkung, erheblich komplizierter und ist zum jetzigen Zeitpunkt für große Störungen noch nicht möglich.

In Abbildung 4.13 sind die vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte aus dem 2 MeV/amu C^{6+} -He-Stoß dargestellt. Dabei wurden die Elektronen in die Streuebene mit Elektronenenergien von $E_e = 4$ eV (obere Reihe) und 10 eV (untere Reihe) bei Impulsüberträgen von $q = 0,45$ a.u., 0,65 a.u. und 1,0 a.u. emittiert. Für dieses Stoßsystem tritt für alle untersuchten kinematischen Bedingungen ein *Recoil-Peak* auf. Die Spektren sehen speziell für große Impulsüberträge denen bei kleinerer Störung sehr ähnlich (vgl. z.B. [SAC90, SMM01]). Alle theoretischen Querschnitte in Abbildung 4.13 wurden halbiert, da sie den experimentellen Wirkungsquerschnitt systematisch überschätzen. Für die CDW-EIS-Rechnung mit Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung ist die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment bezüglich des Absolutwerts des Wirkungsquerschnitts nahezu unabhängig vom Impulsübertrag, während sich im Falle der CDW-EIS-Rechnung sowie der Ersten Bornschen Näherung für kleinere q eine bessere Übereinstimmung ergibt. Auch in der

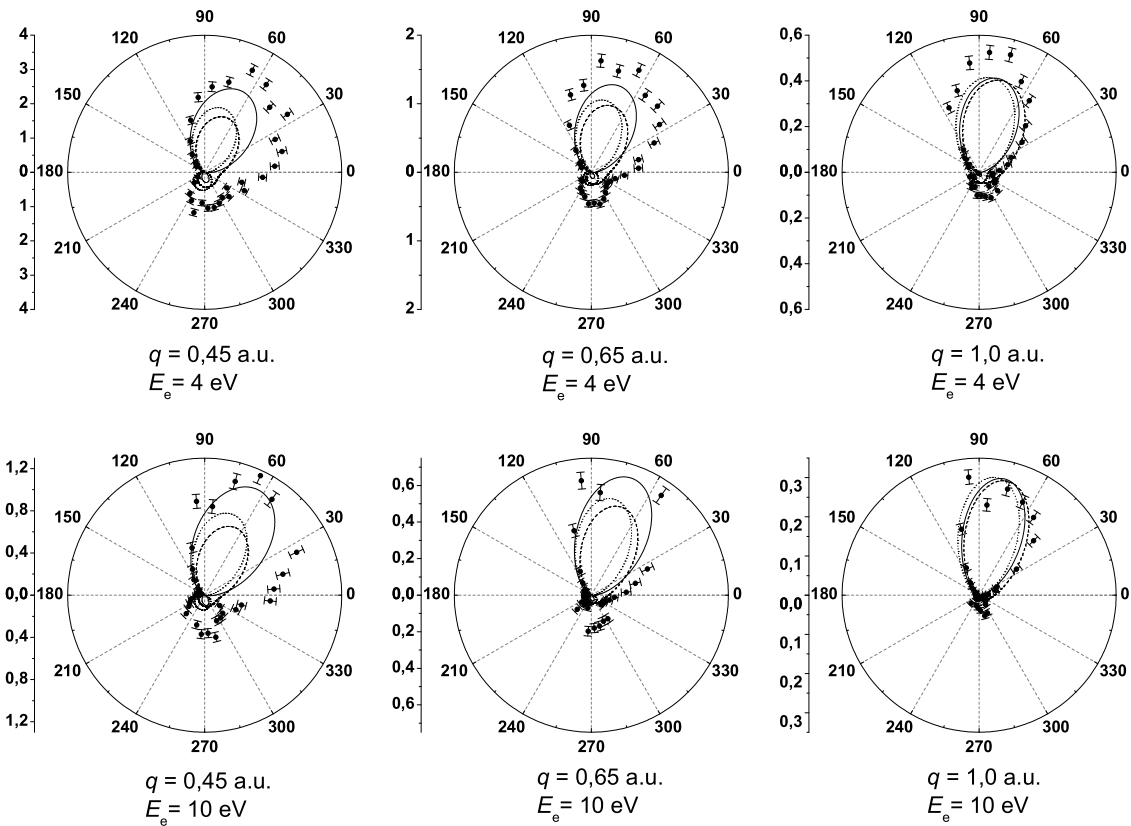


Abbildung 4.13: Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation im 2 MeV/amu C^{6+} -Helium-Stoß in der Streuebene (in a.u.). Dargestellt sind die Ergebnisse der Ersten Bornschen Näherung (gepunktete Linien), der CDW-EIS-Rechnung mit und ohne Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung (gestrichelte bzw. durchgehende Linien) sowie die experimentellen Querschnitte (volle Kreise). Die berechneten Querschnitte wurden durch zwei geteilt.

Form der Winkelverteilung treten bei dieser Störung bereits systematische Abweichungen zwischen Theorie und Experiment auf. Wie in den vorangegangenen Kapiteln schon für kleinere Störungen festgestellt, wird auch hier die relative Intensität des *Recoil-Peaks* von der Rechnung unterschätzt. Dieser Effekt ist besonders bei der CDW-EIS-Rechnung mit Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung ausgeprägt. Des weiteren kann in den experimentellen Querschnitten vor allem für kleine E_e und q ein Beitrag in Vorwärtsrichtung beobachtet werden, der durch keine der hier verwendeten Theorien reproduziert werden kann.

In den Abbildungen 4.14 und 4.15 sind die Wirkungsquerschnitte für den Stoß von Helium mit 3,6 MeV/amu Au^{24+} - bzw. 3,6 MeV/amu Au^{53+} -Ionen unter denselben kinematischen Bedingungen wie in Abb. 4.13 dargestellt. Verglichen mit den Ergebnissen aus dem C^{6+} -Stoß ändert sich die Form der Querschnitte für die größeren

4.2. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

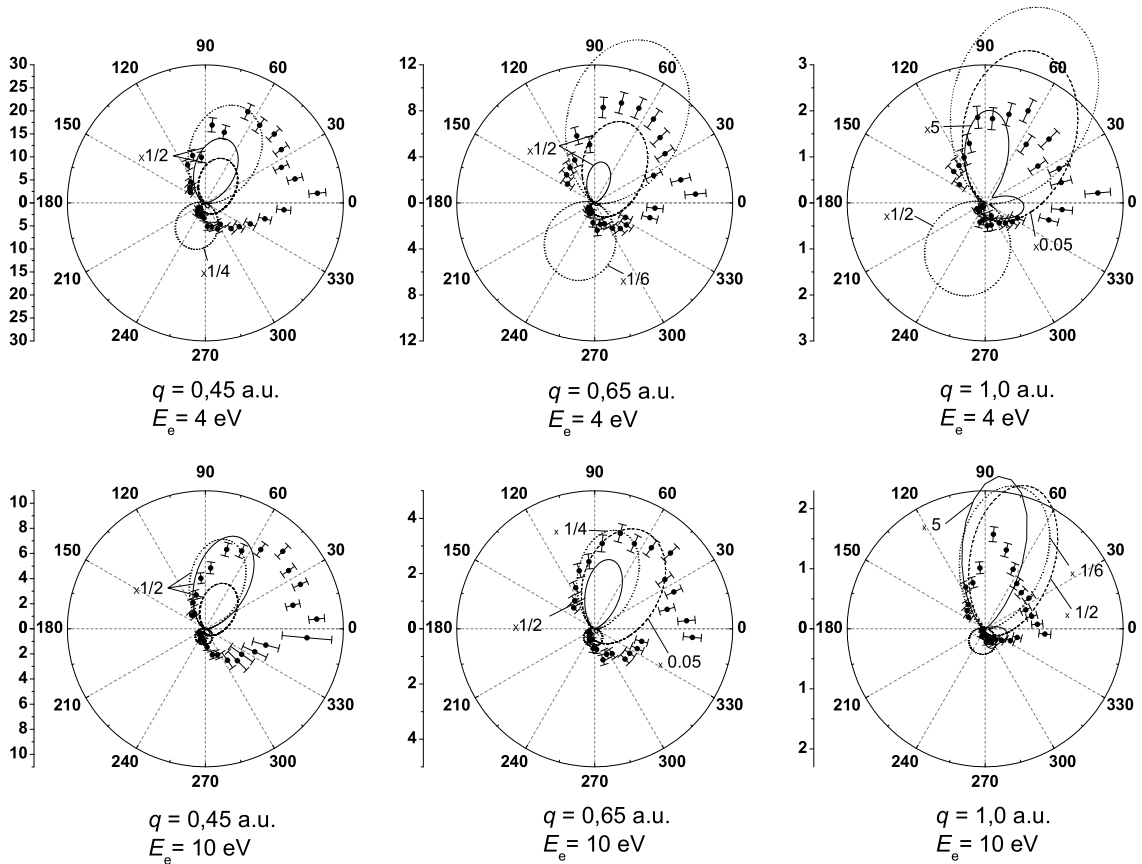


Abbildung 4.14: Wie Abbildung 4.13, aber für $3,6 \text{ MeV/amu Au}^{24+}$ -Projektile. Die Skalierungsfaktoren der berechneten Wirkungsquerschnitte sind in die Graphen eingetragen.

Störungen deutlich, wobei sich die Resultate für die beiden Gold-Projektile qualitativ sehr ähneln. In beiden Fällen ist kein *Recoil-Peak* in Richtung von $-\mathbf{q}$ zu beobachten, es tritt jedoch ein deutliches Maximum in Richtung des auslaufenden Projektils, also bei etwa 0° , auf. Der *Binary-Peak* ist in beiden Fällen bezüglich der Impulsübertragsrichtung nach vorne verschoben. Die Richtung von \mathbf{q} entspricht in den Abbildungen genau der Richtung des *Binary-Peaks* in der Ersten Bornschen Näherung, da der Querschnitt in dieser Rechnung symmetrisch zur Impulsübertragsrichtung ist (siehe Kap. 1.3.2). Im Stoß mit Au^{24+} -Ionen ist der Beitrag des *Binary-Peaks* größer als der des Maximums in Vorwärtsrichtung. Im Gegensatz dazu ist für den Stoß mit Au^{53+} -Projektile das umgekehrte Verhalten zu beobachten. Das Maximum in Vorwärtsrichtung ist hier deutlich stärker ausgeprägt als der *Binary-Peak*. In Übereinstimmung mit [SMP 02] kann außerdem in den Daten die allgemeine Tendenz beobachtet werden, daß für geringer werdende Impulsüberträge die Vorwärtsemission mehr zum Querschnitt beiträgt. Für die Au^{53+} -Projektile tritt ein

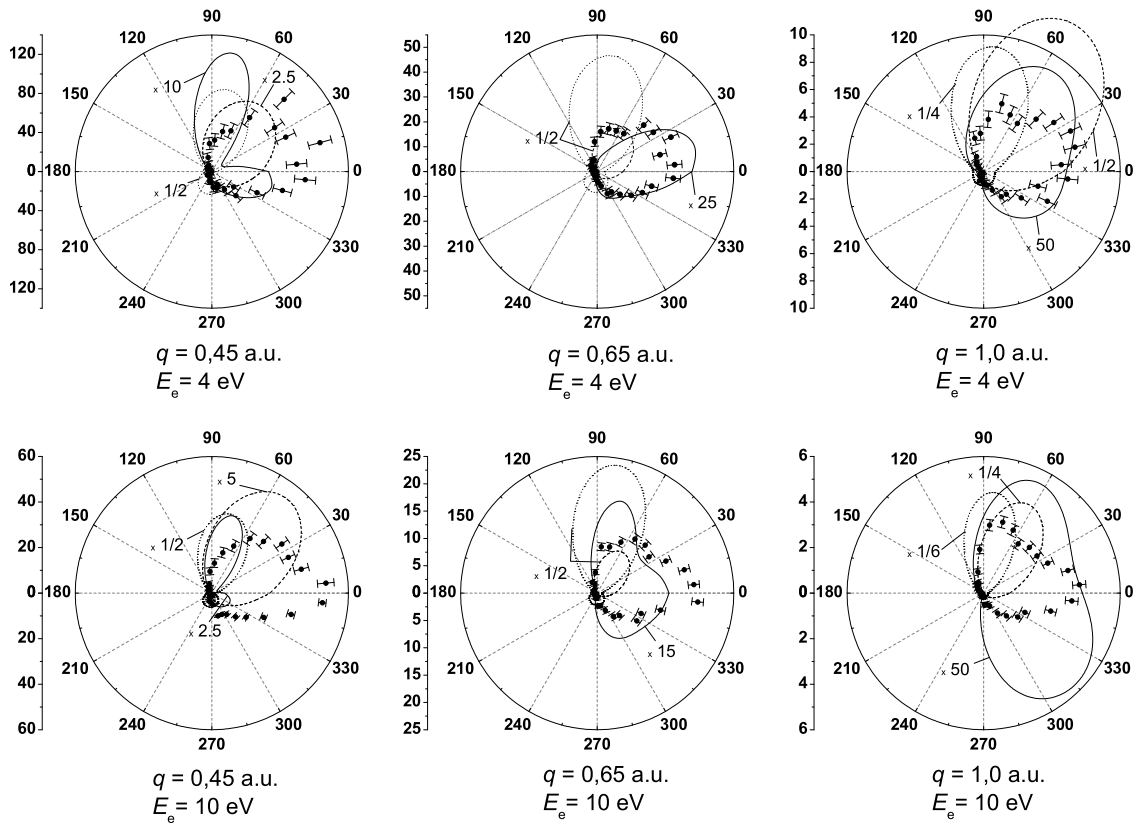


Abbildung 4.15: Wie Abbildung 4.13, aber für 3,6 MeV/amu Au⁵³⁺-Projekte.

deutlich separierter *Binary-Peak* sogar nur für große Energien und Impulsüberträge ($E_e = 10 \text{ eV}$, $q = 1,0 \text{ a.u.}$) auf.

Die theoretische Beschreibung des Ionisationsprozesses durch die Erste Bornsche Näherung bei diesen hohen Störungen ist erwartungsgemäß unzureichend. In den Abbildungen 4.14 und 4.15 ist sie nur der Vollständigkeit halber dargestellt. Im Gegensatz zur Ersten Bornschen Näherung konnten mit dem CDW-EIS-Modell in früheren Arbeiten differentielle Elektronenspektren, wie bereits erwähnt, in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten sogar bei sehr großer Störung reproduziert werden [TRW 98, MFS 99]. Die Beschreibung der hier vorliegenden vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte gelingt mit diesem Modell jedoch offensichtlich nicht. Bereits die absolute Größe der berechneten Querschnitte wird für manche kinematische Bedingungen gegenüber den experimentellen Werten enorm über- bzw. unterschätzt. Man würde erwarten, daß die Rechnung nach dem CDW-EIS-Modell mit Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung die beste Übereinstimmung mit dem Experiment liefern sollte. Zwar kann hier für einige Situationen eine Vorwärtsemission der Elektronen beobachtet werden, in mancher Hinsicht ist die Be-

schreibung durch dieses Modell jedoch sogar schlechter als durch die CDW-EIS-Rechnung (ohne Kern-Kern-Wechselwirkung) und die Erste Bornsche Näherung. So wird zum Beispiel für die Au^{53+} -Projektile unter einigen kinematischen Bedingungen der *Binary-Peak*, im Widerspruch zur PCI und zu den experimentellen Beobachtungen, nach hinten statt nach vorne verschoben.

Im Vergleich der Querschnitte für mittlere und große Störungen ergeben sich interessante neue Aspekte der Dynamik von Stoßprozessen in diesen Störungsbereichen. Wie bereits oben diskutiert, ist in allen hier untersuchten Stoßsystemen, vor allem für kleine Energieüberträge, ein signifikanter Beitrag von Elektronen zu beobachten, die in Vorwärtsrichtung emittiert werden. In [SMP 02] wurde das Auftreten des Maximums bei etwa 0° für große Störungen damit erklärt, daß der *Recoil-Peak* durch die PCI stark nach vorne verschoben sei. Für eine Störung von $\eta = 0,67$ a.u. ist die Vorwärtsemission und der *Recoil-Peak* jedoch simultan zu beobachten. Dies legt die Vermutung nahe, daß die beobachtete Struktur in Vorwärtsrichtung weder mit dem *Binary*- noch mit dem *Recoil-Peak* direkt in Bezug gebracht werden kann. Nichtsdestoweniger scheint es plausibel, daß die Vorwärtsemission durch die PCI verursacht wird, indem das ionisierte Elektron durch die Anziehung des Projektils nach vorne gezogen wird (z.B. [CR70, MUK 97]). Somit müssen die beobachteten Strukturen mit der komplizierten Endzustands-Wechselwirkung aller drei Teilchen in Zusammenhang gebracht werden. In Hinblick auf die Wechselwirkung der drei Teilchen im Endzustand wird sicherlich der CDW-EIS-Ansatz, der die Kern-Kern-Wechselwirkung berücksichtigt, dem physikalischen Problem am ehesten gerecht, da hier alle Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen eingeschlossen sind. Der Vergleich mit dem Experiment für alle hier untersuchten Störungen zeigt jedoch, daß die Beschreibung durch diesen Ansatz ebenfalls äußerst unzureichend ist.

Diese Schwierigkeiten in der theoretischen Beschreibung wurden bereits in einer früheren Arbeit über dasselbe Stoßsystem gefunden [MPS 01], in der die Wirkungsquerschnitte differentiell in der Elektronenenergie sowie im Impulsübertrag untersucht wurden. Dort wurde festgestellt, daß die Qualität der theoretischen Ergebnisse äußerst sensitiv von der Wahl des Wechselwirkungspotentials zwischen dem Projektil und dem Targettrumpf abhängt. So kann zum Beispiel die Abschirmung der Targetkernladung durch das passive Elektron, also durch das im Endzustand gebundene Elektron, einen deutlichen Einfluß auf die Form der Wirkungsquerschnitte haben. Dieser Effekt ist in den hier verwendeten Rechnungen jedoch völlig vernachlässigt. Ein Teil der beobachteten Abweichungen kann also durch die unzureichende Beschreibung der Projektil-Targettrumpf-Wechselwirkung verursacht sein.

Neben dem Problem, welches sich aus der vereinfachten Beschreibung der Projektil-Targettrumpf-Wechselwirkung ergibt, kann auch eine weitere Näherung, nämlich die wasserstoffähnliche Beschreibung der elektronischen Wellenfunktion sowohl im

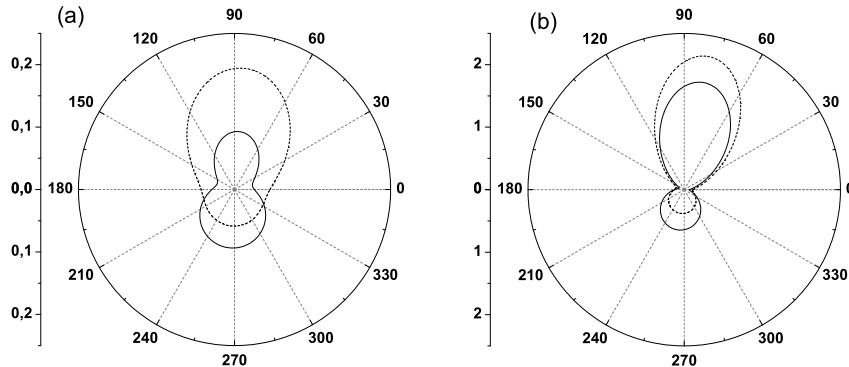


Abbildung 4.16: Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte in der Streuebene, berechnet nach der Ersten Bornschen Näherung für den 2 MeV/amu C^{6+} -He-Stoß bei $E_e = 1$ eV und $q = 1,5$ a.u. (a) bzw. $E_e = 4$ eV und (b) $q = 0,65$ a.u.. Es wurde eine wasserstoffähnliche Wellenfunktion (gepunktete Linien) sowie eine Hartree-Fock-Wellenfunktion (durchgehende Linien) verwendet.

Anfangs- als auch im Endzustand, zur beobachteten Diskrepanz beitragen. Für kleine Störungen konnte bereits früher gezeigt werden, daß die Wahl der Wellenfunktion zwar die absolute Größe der Wirkungsquerschnitte, jedoch ihre Form nur relativ wenig beeinflusst [MSJ02]. Für den hier untersuchten Fall der deutlich größeren Störung von $\eta = 0,67$ a.u., kann im Gegensatz dazu, eine starke Abhängigkeit festgestellt werden. Dies ist in Abbildung 4.16 gezeigt, in der die Ergebnisse nach der Ersten Bornschen Näherung im 2 MeV/amu C^{6+} -He-Stoß für eine wasserstoffähnliche Wellenfunktion (gepunktete Linien) sowie für eine Hartree-Fock-Wellenfunktion (durchgehende Linien) dargestellt sind. Offensichtlich bestehen erhebliche Unterschiede zwischen den Ergebnissen der beiden Rechnungen, vor allem was das Verhältnis der Größe von *Binary*- zu *Recoil-Peak* betrifft. Das experimentell beobachtete Verhältnis wird zwar durch die kompliziertere Hartree-Fock-Wellenfunktion in Verbindung mit der Ersten Bornschen Näherung schlechter reproduziert als durch die wasserstoffähnliche Wellenfunktion, in Kombination mit einer Höheren-Ordnungs-Theorie (z.B. CDW-EIS) läßt sich jedoch eine sehr gute Übereinstimmung erreichen ([MFF03] und Kap. 4.2.3 dieser Arbeit). Dies liegt vor allem daran, daß die relative Größe des *Recoil-Peaks* für positiv geladene Projektile durch Höhere-Ordnungs-Beiträge verringert wird ([MSJ02, VNU03] und Kap. 4.2.2 dieser Arbeit), wodurch seine Überhöhung durch die Hartree-Fock-Wellenfunktion (siehe Abb. 4.16) kompensiert wird.

Für sehr große Störungen läßt sich zum jetzigen Zeitpunkt der Einfluß der gewählten elektronischen Wellenfunktion auf die berechneten Wirkungsquerschnitte noch nicht direkt prüfen. Dies liegt an der Verwendung von Hartree-Fock-Wellenfunktionen in Kombination mit einer Höheren-Ordnungs-Theorie (mit und ohne Berücksichtigung

der Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetrumpf), die für große Störungen einen erheblichen numerischen Aufwand darstellt. Es ist jedoch wahrscheinlich, daß auch hier die Verwendung einer anderen elektronischen Wellenfunktion die Form des berechneten Wirkungsquerschnitts stark verändern kann. Im Rahmen eines Höheren-Ordnungs-Ansatzes (z.B. CDW-EIS) kann dieser Einfluß sogar noch ausgeprägter sein als in der in Abb. 4.16 gezeigten Ersten Bornschen Näherung, da die Winkelverteilung dann nicht mehr symmetrisch zum Impulsübertragsvektor sein muß.

Zur Überprüfung der generellen Gültigkeit des CDW-EIS-Ansatzes im Bereich großer Störung anhand der hier vorgestellten experimentellen Daten müssen von theoretischer Seite also noch zwei Dinge geleistet werden. Zum einen muß die Abschirmung der Targetkernladung durch das passive Elektron, das sowohl im Anfangs- als auch im Endzustand im Helium gebunden ist, in der Beschreibung der Projektil-Targetrumpf-Wechselwirkung angemessen berücksichtigt werden. Zum anderen muß die Wechselwirkung zwischen dem Targetrumpf und dem aktiven Elektron durch eine differenziertere Wellenfunktion beschrieben werden.

Kapitel 5

Doppelionisation

Die Doppelionisation von Helium durch zeitabhängige äußere Felder ist ein grundlegendes Problem in der Atomphysik. Im Gegensatz zur Einfachionisation, die häufig durch ein effektives „Ein-Elektronen-Bild“ mit einem modifizierten Targetkernpotential beschrieben werden kann, ist bei der Doppelionisation die Korrelation der Elektronen untereinander sowohl im Anfangs- und Endzustand als auch während des Stoßes von entscheidender Bedeutung. Zur Erforschung dieser Effekte wurde die Doppelionisation von Helium im Teilchen- und Antiteilchenstoß, durch einzelne Photonen sowie in starken Laserfeldern in zahlreichen Arbeiten untersucht (für einen Überblick, siehe [McG97, US03]).

In den meisten der bisherigen Studien über die Doppelionisation im Stoß mit geladenen Teilchen wurden die totalen Wirkungsquerschnitte untersucht. Durch die Auswertung des Verhältnisses $R = \sigma^{++}/\sigma^+$ der totalen Querschnitte von Doppel- zu Einfachionisation konnten dabei bereits wichtige Hinweise auf die Ionisationsmechanismen gewonnen werden. Ein besonderes Augenmerk lag dabei auf der Untersuchung der Abhängigkeit dieses Verhältnisses R vom Vorzeichen der Projektilladung (vgl. Kap. 5.1).

Kinematisch vollständige Experimente und somit differentielle Studien der Doppelionisation können erst seit wenigen Jahren durchgeführt werden. Die experimentelle Schwierigkeit besteht darin, daß die Impulse von mindestens drei Teilchen im Endzustand simultan bestimmt werden müssen. Mit konventioneller Multikoinzidenz-Elektronenspektroskopie ist dabei die Nachweiseffizienz extrem gering, da die Elektronen meist jeweils nur über ein sehr kleines Raumwinkelsegment gemessen werden können. Trotzdem gelang es 1989, ein erstes sogenanntes $(e, 3e)$ -Experiment an Argon [LDD89], also ein kinematisch vollständiges Experiment zur Doppelionisation im Elektronenstoß, mit einer konventionellen Methode¹ durchzuführen. Für die Doppel-

¹„Konventionell“ heißt in diesem Fall, daß die Impulse des auslaufenden Projektils sowie der ionisierten Elektronen, nicht aber der Impuls des Rückstoßions, bestimmt werden. Dabei werden

lionisation von Helium liegen vollständig differentielle Daten erst seit wenigen Jahren vor [TLD 98]. Weitere $(e, 3e)$ -Experimente folgten [LTD 99], wobei bei etlichen auch Reaktionsmikroskope zum Einsatz kamen [DMS 99, DKS 01, DKS 02, DKS 03]. Inzwischen konnten hochdifferentielle experimentelle Daten für die Elektronenstoß-Doppelionisation bei Projektilenergien von 500 eV bis 5,6 keV gewonnen werden.

Die Doppelionisation im Ionenstoß konnte erst durch die Entwicklung der Reaktionsmikroskope kinematisch vollständig untersucht werden. Bisher wurden Experimente von sehr kleinen Störungen (100 MeV/amu C^{6+} , $\eta = 0,1$ a.u. [BMK 99, BKM 00]) bis hin zu extrem großen Störungen (3,6 MeV/amu Au^{53+} , $\eta = 4,4$ a.u. [PMS 02]) durchgeführt. Da in all diesen Experimenten die statistische Qualität der Daten jedoch zu gering war, um vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte zu extrahieren, wurden bisher nur integrierte Spektren bzw. die sog. Korrelationsfunktion [SMS 00, SMG 01] untersucht.

Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurden die ersten vollständig differentiellen Spektren zur Doppelionisation von Helium durch positiv geladene Projektile gewonnen. In dem dabei untersuchten Stoßsystem wurden Protonen einer Energie von 6 MeV als Projektile verwendet (d.h. $v_P = 15,5$ a.u., $\eta = 0,065$ a.u.). Um die Abhängigkeit der differentiellen Daten vom Vorzeichen der Projektilladung zu untersuchen, wurden die Spektren mit Ergebnissen eines früheren $(e, 3e)$ -Experiments [DKS 01] bei einer Projektilenergie von 2 keV (d.h. $v_P = 12,1$ a.u., $\eta = 0,08$ a.u.) verglichen (siehe dazu auch [FMD 03]). In diesem Kapitel sollen zunächst die Ergebnisse früherer Untersuchungen zu den totalen Ionisationsquerschnitten mit unterschiedlichen Projektilen vorgestellt und die Doppelionisations-Mechanismen diskutiert werden (Kap. 5.1). Daraufhin werden anhand der experimentellen Ergebnisse dieser Arbeit die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte untersucht und mit berechneten Querschnitten verglichen (Kap. 5.2).

5.1 Totale Doppelionisationsquerschnitte und Ionisationsmechanismen

Die Doppelionisation von Helium im Stoß mit geladenen Teilchen ist seit vielen Jahrzehnten Gegenstand der Forschung (siehe [McG97]). Durch die Untersuchung der totalen Ionisationsquerschnitte ergaben sich bereits wichtige Hinweise auf den Charakter der Ionisationsmechanismen. Die Dominanz einzelner Mechanismen, d.h. einzelner Amplituden oder Matrixelemente hängt sowohl von der Geschwindigkeit v_P als auch von der Ladung Z_P des Projektils, also von der Größe der Störung η , ab. Diese Abhängigkeit sowie die zugrunde liegenden Prozesse sollen anhand der

klassische, energiedispersive Spektrometer verwendet.

5.1. Totale Doppelionisationsquerschnitte und Ionisationsmechanismen

Ergebnisse früherer Untersuchungen in diesem Kapitel vorgestellt werden.

In früheren Arbeiten stand häufig das Verhältnis von totalem Doppel- zu Einfachionisationsquerschnitt $R = \sigma^{++}/\sigma^+$ im Zentrum des Interesses. Dieses Verhältnis R ist in Abbildung 5.1 als Funktion der Projektilgeschwindigkeit v_P für verschiedene Projektile dargestellt. Die Untersuchungen konzentrierten sich vor allem auf zwei allgemeine Beobachtungen: Erstens kann ein Grenzwert beobachtet werden, gegen den das Verhältnis R für hohe Geschwindigkeiten konvergiert. Dieser Grenzwert ist unabhängig vom Projektil und wurde für Elektronen [SBK66, MGK 83], Positronen [CAB 88], Protonen, Antiprotonen [AHK 86, AHK 89] und hochgeladene Ionen bis zu Ne^{10+} [UMB 93] experimentell bestätigt. Zweitens wurde für niedrige und mittlere Projektilgeschwindigkeiten einerseits eine starke Abhängigkeit von der Geschwindigkeit und dem Ladungsbetrag des Projektiles und andererseits eine Abhängigkeit vom Vorzeichen der Projektilladung gefunden. Für nicht zu langsame Stöße, also deutlich oberhalb der Doppelionisationsschwelle für leichte Projektile ($v_P \gtrsim 8$ a.u.), ist das Verhalten von R dabei unabhängig von der Projektillmasse. Die Abhängigkeit vom Vorzeichen der Projektilladung muß auf Effekte in der Doppelionisation zurückgeführt werden, da bei mittleren Stoßgeschwindigkeiten im Einfachionisationsquerschnitt kaum Unterschiede für negativ und positiv geladene

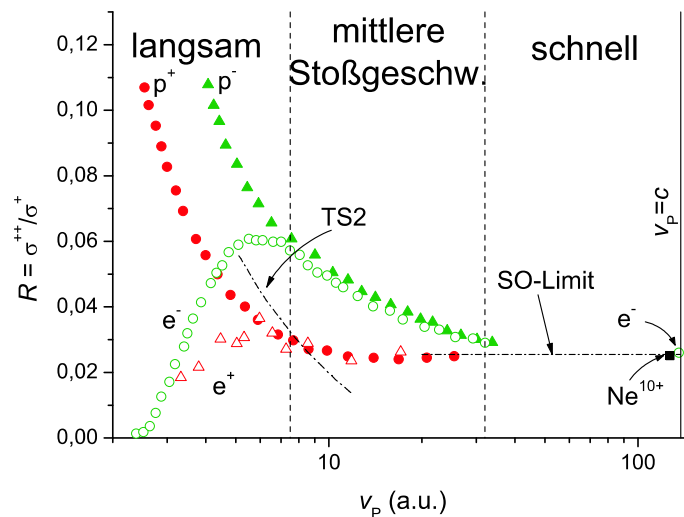


Abbildung 5.1: Verhältnisse $R = \sigma^{++}/\sigma^+$ von totalem Doppel- zu Einfachionisationsquerschnitt als Funktion der Projektilgeschwindigkeit v_P für Protonen (volle rote Kreise, aus [AHK 86]), für Antiprotonen (volle grüne Dreiecke, aus [AHK 86, AHK 89]), für Elektronen (offene grüne Kreise, aus [SBK66, MGK 83]), für Positronen (offene rote Dreiecke, aus [CAB 88]) und für Ne^{10+} (volles Quadrat, aus [UMB 93]). Die Strichpunkt-Linien markieren die theoretische Geschwindigkeitsabhängigkeit des „reinen“ TS2-Prozesses (siehe Text) sowie das Hochenergie-Limit für den *Shakeoff*-Mechanismus (aus [McG82]).

Projektil auftreten.

Dieses Verhalten von R wurde zuerst von McGuire erklärt [McG82]. Er unterschied zwischen zwei Mechanismen, die zur Doppelionisation des Heliumtargets führen können, dem *Shakeoff*- (SO) und dem *Two-Step 2*-Mechanismus (TS2). Der *Shakeoff* beruht auf der Elektron-Elektron-Korrelation und dominiert den Doppelionisationsquerschnitt bei hohen Projektilgeschwindigkeiten. Dabei wird das erste Elektron durch die einmalige Wechselwirkung mit dem Projektil emittiert. Das zweite Elektron erfährt durch diese Emission eine plötzliche Änderung der Abschirmung des Targetkernpotentials. Bei der „Anpassung“ der Wellenfunktion an das geänderte Targetpotential kann auch das zweite Elektron ionisiert werden. In einem einfachen Modell kann die Übergangsamplitude vom Anfangszustand der beiden Elektronen $|i_1 i_2\rangle$ in den Endzustand $|f'_1 f'_2\rangle$ für diesen Korrelationseffekt² wie folgt angegeben werden (siehe z.B. [McG82]):

$$T_{SO}^{f_i} = \langle f'_2 | i_2 \rangle \langle f'_1 | V | i_1 \rangle . \quad (5.1)$$

Dabei ist $\langle f'_1 | V | i_1 \rangle$ die Übergangsamplitude für das erste Elektron (entsprechend der Ersten Bornschen Näherung für das Wechselwirkungspotential V , vgl. z.B. Gl. 1.2) und $\langle f'_2 | i_2 \rangle$ der sog. *Shakeoff*-Faktor. In diesem einfachen Bild ist $\langle f'_2 | i_2 \rangle$ nur deshalb nicht Null, weil der Hamilton-Operator sich für den Anfangs- und den Endzustand aufgrund der Änderung der Abschirmung des Targetpotentials unterscheidet (dies soll durch den Strich in $|f'\rangle$ ausgedrückt werden). Die Korrelation zwischen den Elektronen wird in dieser Näherung also indirekt durch die Änderung des Targetpotentials, nicht aber durch die direkte Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen berücksichtigt. Offensichtlich ist der *Shakeoff*-Faktor unabhängig von der Projektilgeschwindigkeit v_P und der Ladung Z_P , sodaß die Abhängigkeit des totalen Doppelionisationsquerschnitts von den Projektileigenschaften nur aus dem Übergang des ersten Elektrons resultiert. Somit erhält man gemäß der Ersten Bornschen Näherung für den Wirkungsquerschnitt die Proportionalität $\sigma_{SO}^{++} \propto (Z_P/v_P)^2$ (vgl. Gl. 1.3). Da bei schnellen Stößen der Einfachionisationsquerschnitt ebenfalls mit $(Z_P/v_P)^2$ skaliert, ergibt sich für das Verhältnis R ein konstanter Wert.

Bei langsameren Stößen liefert der TS2-Prozeß den dominanten Beitrag zum Doppelionisationsquerschnitt. In diesem Fall ist die Stoßzeit länger, sodaß die beiden Elektronen sequentiell durch zwei Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target ionisiert werden können. Nimmt man wiederum die Elektronen als unabhängig voneinander an (abgesehen von der Änderung der Abschirmung des Targetkernpo-

²Das hier vorgestellte Modell beschreibt den Korrelationseffekt durch unkorrelierte elektronische Wellenfunktionen, d.h. $|i_1 i_2\rangle = |i_1\rangle |i_2\rangle$ und $|f'_1 f'_2\rangle = |f'_1\rangle |f'_2\rangle$. Die Elektron-Elektron-Korrelation wird indirekt durch die Änderung der Ein-Elektronen-Hamilton-Operatoren berücksichtigt.

tentials), so ergibt sich für die Übergangsamplitude

$$T_{\text{TS2}}^{fi} = \langle f'_2 | V | i_2 \rangle \langle f'_1 | V | i_1 \rangle . \quad (5.2)$$

Daraus erhält man eine Doppelionisationswahrscheinlichkeit, die mit $(Z_P/v_P)^4$ skaliert. Da bei nicht zu niedrigen Projektilgeschwindigkeiten der Einfachionisationsquerschnitt nach wie vor proportional zu $(Z_P/v_P)^2$ ist, ergibt sich für das Verhältnis R eine Abhängigkeit von $(Z_P/v_P)^2$.

Durch dieses einfache Modell können bereits viele Eigenschaften von R beschrieben werden. So konnte mit einer semiempirischen Formel von Knudsen *et al.* [KAH 84], die auf oben beschriebenem Modell beruht, das Verhältnis R für eine Vielzahl hochgeladener Projektile reproduziert werden (siehe z.B. [UDB 94]). Diese Formel besteht aus einer Konstanten nebst einem Zusatzterm, der im wesentlichen mit $(Z_P/v_P)^2$ skaliert³. Auf diese Weise wird das Verhalten von R , also sowohl die Abhängigkeit von Z_P und v_P für große Störungen als auch das Hochenergie-Limit für geringe Störungen, richtig beschrieben.

Der Unterschied für positiv und negativ geladene Projektile ist mit der einfachen Formel von Knudsen jedoch nicht erklärbar. Dieser Unterschied ergibt sich aus der Interferenz der Übergangsamplituden von SO und TS2 (vgl. [McG82]), welche darauf beruht, daß der Wirkungsquerschnitt der Doppelionisation wie folgt geschrieben werden muß:

$$\sigma^{++} \propto \left| T_{\text{SO}}^{fi} + T_{\text{TS2}}^{fi} \right|^2 = \left| c_1 Z_P + c_2 Z_P^2 \right|^2 . \quad (5.3)$$

Dabei sind c_1 und c_2 komplexe Koeffizienten, die von der Projektilgeschwindigkeit v_P und den Details der Rechnung abhängen. Aus Gleichung 5.3 ist direkt ersichtlich, daß beim Doppelionisationsquerschnitt nicht nur Terme mit Z_P^2 und Z_P^4 auftreten, sondern daß auch ein Z_P^3 -Term beiträgt, der vom Vorzeichen der Projektilladung abhängt.

Das Modell von McGuire vereinfacht sicherlich viele Aspekte des Ionisationsprozesses stark. Es ist jedoch bereits erkennbar, daß zwei Dinge für die theoretische Beschreibung der Doppelionisation wesentlich sind. Zum einen ist dies die Elektron-Elektron-Korrelation, die vor allem bei niedriger Störung von entscheidender Bedeutung ist. Zum anderen müssen mehrfache Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target berücksichtigt werden. Im Rahmen der Vielteilchen-Störungstheorie werden diese Höheren-Ordnungs-Effekte systematischer klassifiziert als dies in dem oben beschriebenen Modell der Fall ist. Neben dem *Shakeoff* und *Two-Step 2* treten im Rahmen dieser Methode auch *Two-Step 1* (TS1) und *Ground State Correlation* (GSC) als Doppelionisationsmechanismen auf (siehe z.B. [McG97]). Näheres dazu findet sich auch im Anhang A.2.

³In der Formel von Knudsen *et al.* ist auch eine sich mit der Projektilgeschwindigkeit langsam ändernde Abhängigkeit von $\ln v_P$ berücksichtigt.

Die theoretische Beschreibung des Verhältnisses R für positiv und negativ geladene Projektile unter Berücksichtigung der Korrelation und der Höheren-Ordnungseffekte ist sehr schwierig. Zwar konnte im Rahmen einer Ersten Bornschen Näherung mit korrelierten elektronischen Wellenfunktionen der Grenzwert für hohe Projektilgeschwindigkeiten (d.h. das SO-Limit) richtig wiedergegeben werden [FR88], jedoch ist die Beschreibung von R für sehr geringe Projektilgeschwindigkeiten mit einem perturbativen Ansatz nicht möglich. Es gelang aber mit einer *ab initio*-Rechnung, der sog. *Forced Impulse Method* (FIM), auch die Geschwindigkeits- und Ladungsabhängigkeit von R für Protonen und Antiprotonen erfolgreich zu reproduzieren [RF87, BRF98]. In diesem Ansatz wird die Elektron-Elektron-Korrelation dadurch berücksichtigt, daß die sich unabhängig entwickelnden Elektronen nach bestimmten Zeitschritten auf korrelierte Zustände projiziert werden.

Mit Hilfe klassischer Rechnungen auf der Basis der *Classical Trajectory Monte Carlo*-Methode (CTMC) gelang es ebenfalls, Unterschiede in R für positiv und negativ geladene Projektile zu erhalten [Ols87, MMT 02]. Im Rahmen dieser Rechnungen wurde die Erhöhung des Doppelionisationsquerschnitts für Antiprotonen im Vergleich zu Protonen in einem einfachen klassischen Bild wie folgt erklärt [Ols87]: Für große Stoßparameter b , also bei großem Abstand zwischen Projektil und Target, kann das negativ geladene Projektil ein Elektron in das Heliumatom „hineindrücken“, wodurch es mit dem zweiten Elektron zusammenstoßen kann, was zu einer Doppelionisation führt⁴. Für kleine Stoßparameter schirmt das negativ geladene Projektil die positive Kernladung ab, wodurch die Bindung der beiden Elektronen an den Heliumkern geschwächt wird. Beide Effekte führen zur im Experiment beobachteten Erhöhung des Doppelionisationsquerschnitts für Antiprotonen.

Bei den im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Stoßsystemen, wurden Projektilgeschwindigkeiten von $v_P = 12, 1$ bzw. $15,5$ a.u. gewählt [DKS 01, FMD 03]. In diesem Geschwindigkeitsbereich ist einerseits der Unterschied des Verhältnisses R für unterschiedlich geladene Projektile sehr groß, andererseits sind die Effekte aufgrund der kleineren Elektronenmasse aber noch vernachlässigbar gering. Deshalb sind die gewählten Projektilgeschwindigkeiten ausgezeichnet dazu geeignet, Höhere-Ordnungseffekte in den differentiellen Querschnitten, die im Elektronenstoß bereits gefunden wurden [DKS 01, DKS 03], bezüglich ihrer Ladungsabhängigkeit zu untersuchen.

⁴Der hier beschriebene Mechanismus entspricht dem *Two-Step 1*-Prozeß (TS1) aus der Vielteilchen-Störungstheorie (siehe Anhang A.2).

5.2 Projektilladungsabhängigkeit in den vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten

Genau wie bei der Einfachionisation ist auch bei der Doppelionisation die detaillierteste Information über den Stoß durch die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte zugänglich. Dabei wird der Wirkungsquerschnitt in aller Regel differentiell bezüglich des Betrags des Impulsübertrags q , der Energien $E_{e1,2}$ und der dreidimensionalen Emissionsraumwinkel $\Omega_{e1,2}$ der beiden Elektronen untersucht. Der Winkel des Impulsübertragsvektors und die Impulskomponenten des Rückstoßions sind dann durch die Energie- und Impulserhaltung vollständig bestimmt (siehe Kap. 1.2). Der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt FDCS (*fully* bzw. *fivefold differential cross section*) schreibt sich als

$$\text{FDCS} = \frac{d^5\sigma}{dE_{e1}dE_{e2}d\Omega_{e1}d\Omega_{e2}dq} . \quad (5.4)$$

In diesem Kapitel werden vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für die Doppelionisation von Helium durch 2 keV Elektronen und 6 MeV Protonen vorgestellt und mit den Ergebnissen der *Convergent Close-Coupling*-Näherung (CCC) verglichen.

5.2.1 Experimentelle Ergebnisse

Die Durchführung eines kinematisch vollständigen Experiments zur Gewinnung vollständig differentieller Wirkungsquerschnitte mit guter statistischer Qualität und geringem Untergrund ist mit großen Schwierigkeiten verbunden. Zum einen liegt dies daran, daß bereits der totale Doppelionisationsquerschnitt um etwa zwei Größenordnungen geringer ist als der für die Einfachionisation. Zum anderen muß auch der Impuls eines weiteren Teilchens, des zweiten Elektrons, bestimmt werden. Dadurch werden zunächst die zu untersuchenden Querschnitte im Vergleich zur Einfachionisation höher differentiell (fünffach statt dreifach). Darüber hinaus wird der Anteil der vollständig vermessenen Ionisationsereignisse durch die begrenzte Nachweisefizienz des Elektronendetektors (etwa 50%) und die Akzeptanz des Spektrometers weiter reduziert. Trotz dieser Schwierigkeiten konnten in dem im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experiment etwa 250 000 Doppelionisationsereignisse kinematisch vollständig gemessen werden. Dadurch war es erstmals möglich, vollständig differentielle Spektren mit ausreichender statistischer Signifikanz aus den Meßdaten zu extrahieren.

In Abbildung 5.2 sind die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte für den 6 MeV Proton-Helium-Stoß ($v_P = 15,5$ a.u.) den Ergebnissen des 2 keV Elektron-

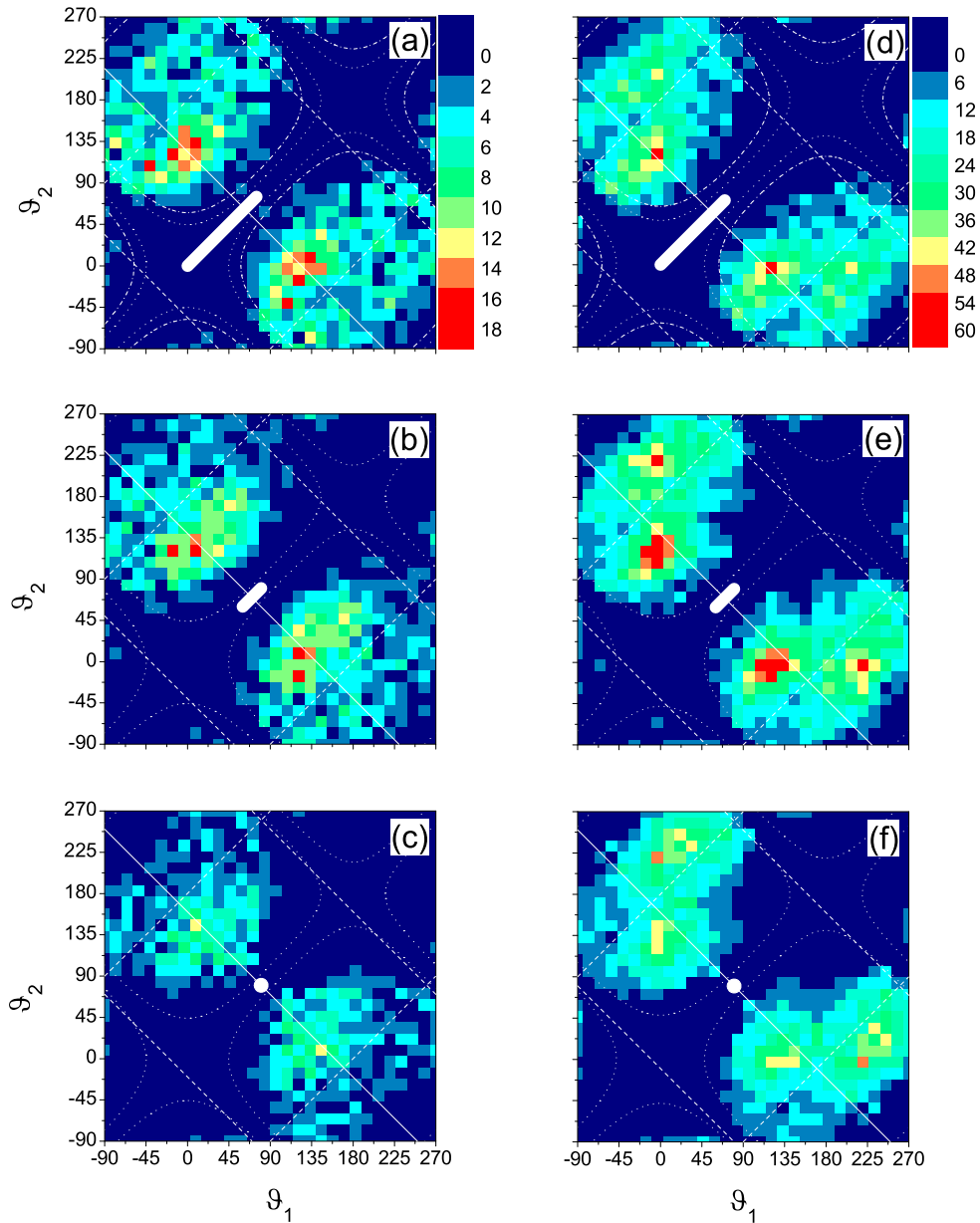


Abbildung 5.2: Winkelverteilung der beiden emittierten Elektronen ($\vartheta_{1,2}$: Polarwinkel bezüglich der Projektionsstrahlrichtung) in koplanarer Geometrie für den 6 MeV Protonenstoß (a,b,c) und den 2 keV Elektronenstoß (d,e,f). Der Impulsübertrag q beträgt 0,2–0,8 a.u. (a,d), 0,8–1,4 a.u. (b,e) bzw. 1,4–2,0 a.u. (c,f). Außerdem wurde eine symmetrische Energieaufteilung gewählt ($|E_{e1} - E_{e2}| < 2,5$ eV) und über alle Energien mit $E_{e1,2} < 25$ eV integriert. Die breite, weiße Markierung in der Mitte der Diagramme zeigt die kinematisch erlaubten Winkel des Impulsübertragsvektors an. Für (a,d) liegt der erlaubte Winkelbereich etwa zwischen 0° und 75° , für (b,e) zwischen 60° und 80° und für (c,f) zwischen 75° und 85° . Die für die Erste Bornsche Näherung gültige Symmetrieachse ist (für einen gemittelten Impulsübertragswinkel) jeweils durch die durchgehende weiße Linie dargestellt. Gestrichelte, gepunktete und strichpunktierte Linien, vgl. Text.

Helium-Stoßes ($v_P = 12,1$ a.u.) gegenübergestellt. Dabei wurde eine koplanare Geometrie ausgewählt, d.h. die Impulsvektoren aller beteiligten Teilchen liegen in derselben Ebene⁵. Die dargestellten Diagramme entsprechen der Winkelverteilung der beiden Elektronen bezüglich der Vorwärtsrichtung des Projektilstrahls für kleine (0,2–0,8 a.u.), mittlere (0,8–1,4 a.u.) und große (1,4–2,0 a.u.) Impulsüberträge q und für symmetrische Energieaufteilung der beiden Elektronen ($|E_{e1} - E_{e2}| < 2,5$ eV). Aufgrund der noch immer begrenzten statistischen Qualität der Daten des Proton-Helium-Experiments, mußte über Elektronenenergien von $E_{e1,2} = 0$ bis 25 eV integriert werden. Trotz der etwas besseren Statistik der Daten des Elektronenstoß-Experiments, wurden hier identische Projektionen und Bedingungen für den Vergleich mit den Ergebnissen des Protonenstoßes gewählt. Durch die Festlegung des Impulsübertrags q und der Elektronenenergien $E_{e1,2}$ ist auch der Winkel des Impulsübertragsvektors \mathbf{q} bestimmt (siehe Kapitel 1.2). Dieser Winkel, bzw. der erlaubte Winkelbereich, ist durch die weißen, breiten Linien in der Mitte der Diagramme gekennzeichnet. Er reicht für die kleinen Impulsüberträge q etwa von 0° bis 75° (Abbn. (a,d)), für mittlere q von 60° bis 80° (Abbn. (b,e)) und für große q von 75° bis 85° (Abbn. (c,f)).

Die Totzeit des Elektronendetektors verursacht eine Begrenzung der Winkelakzeptanz des Spektrometers (siehe Kapitel 2.4.2). Da diese Akzeptanz von der Energie der Elektronen abhängt, muß der betroffene Winkelbereich für alle möglichen Elektronenenergien separat berechnet werden. Exemplarisch sind die Bereiche, die für Elektronenenergien von $E_{e1,2} = 5$ eV und $E_{e1,2} = 20$ eV nicht durch die Spektrometerakzeptanz beeinträchtigt sind, in Abb. 5.2 durch die Strichpunkt-Linie (5 eV, nur Abbn. (a,d)) bzw. die gepunktete Linie (20 eV) umschlossen. Zwar ist durch die begrenzte Akzeptanz nicht der volle Winkelbereich zugänglich, es ist jedoch zu erwarten, daß aufgrund der Ähnlichkeit zur Photodoppelionisation (siehe Kap. 1.3.3) der betroffene Winkelbereich nur wenig zum Wirkungsquerschnitt beiträgt.

Alle in der Abbildung gezeigten Winkelverteilungen zeigen die bereits in Kapitel 1.3.3 diskutierte Struktur mit vier Maxima, die sich aus den Dipolauswahlregeln und der Abstoßung der Elektronen im Endzustand ergibt. Da für den hier untersuchten Fall der symmetrischen Energieaufteilung die beiden Elektronen ununterscheidbar sind, wurden die Spektren an der Winkelhalbierenden gespiegelt. Somit entsprechen die beiden Maxima links oben jeweils denen rechts unten. Sie können im Vergleich mit der Einfachionisation als *Binary-* und *Recoil-Peak* identifiziert werden. Bei den beiden Maxima, die sich weiter im Zentrum der Diagramme befinden, zeigt der Vektor des Summenimpulses der beiden Elektronen in Richtung des Impulsübertrags \mathbf{q} , was dem *Binary-Peak* entspricht. Bei den beiden äußeren Maxima weist der Sum-

⁵Bei den in Abb. 5.2 gezeigten Spektren liegen die Impulsvektoren der beiden Elektronen in der Streuebene innerhalb eines Winkelfensters von $\pm 30^\circ$.

menimpuls der Elektronen, wie beim *Recoil-Peak*, in die Richtung von $-\mathbf{q}$.

Im Vergleich zwischen dem Protonen- und Elektronenstoß sind in Abbildung 5.2 erhebliche Unterschiede sichtbar. Zum einen sind für alle untersuchten kinematischen Situationen die relativen Beiträge des *Recoil-Peaks* im Elektronenstoß größer als im Protonenstoß. Diese Eigenschaft wurde auch in einer theoretischen Studie für die Einfachionisation gefunden [VNU03], in der dreifach differentielle Wirkungsquerschnitte für positiv und negativ geladene Projektile untersucht wurden (siehe auch Kapitel 4.2.2). Ein zweiter Unterschied besteht darin, daß die Winkelverteilung im Elektronenstoß eine Asymmetrie bezüglich der diagonalen, durchgezogenen Linie in den Diagrammen aufweist, wohingegen im Protonenstoß die Verteilung nahezu symmetrisch zu dieser Linie ist. Diese Linie entspricht der Situation, daß der Vektor des Summenimpulses der beiden Elektronen dieselbe Orientierung wie der Impulsübertrag \mathbf{q} hat und stellt somit die sich in der Ersten Bornschen Näherung ergebende Symmetrieachse dar (siehe Kapitel 1.3.3).

Die Beobachtung, daß der *Recoil-Peak* im Elektronenstoß höher ist als im Protonenstoß, läßt sich im Rahmen des klassischen Bildes aus [Ols87] (siehe auch Kap. 5.1) wie folgt verstehen: Für nicht zu kleine Stoßparameter b „drückt“ das negativ geladene Projektil ein Elektron in Richtung des Heliumatoms. Dadurch spielt die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und dem Targetkern, sowie die direkte, gegenseitige Wechselwirkung der Elektronen untereinander eine größere Rolle. Dieser Mechanismus könnte dazu führen, daß die Elektronen mit einer höheren Wahrscheinlichkeit am Targetkern zurückgestreut werden, was in einer Emission in Richtung des *Recoil-Peaks* resultiert.

Die Feststellung, daß die Symmetriebedingung der Ersten Bornschen Näherung für negativ geladene Projektile verletzt wird wohingegen sie im Protonenstoß nahezu erfüllt ist, läßt sich innerhalb der perturbativen quantenmechanischen Beschreibung erklären. Die für den Elektronenstoß beobachtete Asymmetrie muß durch Beiträge höherer Ordnung in der Projektil-Target-Wechselwirkung verursacht sein, da die Winkelverteilung in der Ersten Bornschen Näherung symmetrisch ist. Diese Höheren-Ordnungs-Beiträge sind in der Bornschen Reihe $\sigma^{++} = \alpha_1 Z_P^2 + \alpha_2 Z_P^3 + \alpha_3 Z_P^4 + \dots$ (vgl. Gl. 5.3) durch die Terme mit den dritten und höheren Potenzen von Z_P gegeben. Der Unterschied zwischen positiv und negativ geladenen Projektile rührt nur vom Vorzeichen der ungeraden Potenzen von Z_P her, nicht aber von den Koeffizienten α_i . Die Tatsache, daß im Elektronenstoß nun eine Asymmetrie auftritt und im Protonenstoß nicht, kann nur dadurch erklärt werden, daß die Höheren-Ordnungs-Beiträge sich für positiv geladene Projektile zu einer symmetrischen Winkelverteilung addieren, wohingegen sie bei negativ geladenen Projektile die Asymmetrie verursachen. Dieses Verhalten zeigt, daß die Reihenentwicklung nicht nach dem Z_P^3 -Term abgebrochen werden kann, sondern daß auch Terme mit

höheren Potenzen von Z_P berücksichtigt werden müssen. Dies entspricht der Beobachtung, die bereits bei den Wirkungsquerschnitten der Einfachionisation in der senkrechten Ebene für den Proton-Helium- und den Elektron-Helium-Stoß gemacht wurde (siehe Kapitel 4.2.2).

In einer früheren semiempirischen Untersuchung der totalen Ionisationsquerschnitte und des Verhältnisses $R = \sigma^{++}/\sigma^+$ [AHK 87] wurde die schnellere Konvergenz von R für Protonen im Vergleich zu Antiprotonen darauf zurückgeführt (siehe Abbildung 5.1), daß sich für positiv geladene Projektile die Höheren-Ordnungs-Beiträge gegenseitig aufheben, wohingegen sie sich für negativ geladene Projektile zu einem signifikanten Beitrag addieren. Diese Interpretation ist durchaus konsistent mit den hier gemachten Beobachtungen für die vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte. Es gibt jedoch keinen offensichtlichen physikalischen Grund dafür, daß Höhere-Ordnungs-Terme für negativ geladene Projektile sowohl in den totalen als auch in den differentielle Wirkungsquerschnitten eine größere Rolle zu spielen scheinen als für positiv geladene Projektile. In jedem Fall sind für ein detaillierteres Verständnis der Vier-Teilchen-Dynamik theoretische Ansätze nötig, die in der Lage sind, vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte unter Berücksichtigung von Höheren-Ordnungs-Prozessen zu berechnen.

5.2.2 Vergleich mit der Theorie

Die Schwierigkeit bei der theoretischen Beschreibung der Doppelionisation von Helium besteht darin, daß nicht nur mehrfache Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target sondern auch die Korrelation der Elektronen untereinander von entscheidender Bedeutung für den Ionisationsprozeß sind. Bereits im Zusammenhang mit der Photodoppelionisation wurden Methoden entwickelt, die diese Korrelationseffekte berücksichtigen (für einen Überblick siehe [BS00]). Besonders erfolgreich bei der Beschreibung der differentielle Wirkungsquerschnitte in der Photodoppelionisation war dabei die *Convergent Close-Coupling*-Näherung (CCC) [KB98]. Dieser Ansatz wurde später auch zur Beschreibung der stoßinduzierten Doppelionisation eingesetzt (z.B. [KBL 99, DKS 01, DKS 02, LDD 03, DKS 03, Höh]).

In der CCC-Näherung zur Beschreibung der Doppelionisation wird der korrelierte Endzustand des Targetsystems mit Hilfe einer Gekoppelten-Kanäle Rechnung numerisch bestimmt. Die Wechselwirkung zwischen Projektil und Target wird dann im Rahmen der Ersten bzw. Zweiten Bornschen Näherung beschrieben (siehe Kapitel 3.4.2 dieser Arbeit). In diesem Kapitel sollen, im Vergleich mit den im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten experimentellen Ergebnissen sowie im Vergleich mit einem $(e, 3e)$ -Experiment bei 500 eV Projektilenergie [DKS 03, Höh], die Möglichkeiten und Grenzen der momentanen am weitesten entwickelten Version des CCC-Ansatzes

ausgelotet und diskutiert werden.

Bei den hier gezeigten theoretischen Ergebnissen der CCC-Beschreibung wurden Erste und Zweite Bornsche Näherungen für den Elektronen- und Positronenstoß durchgeführt⁶. Die Details des Modells, das bei der Ersten Bornschen Näherung benutzt wurde, sind in [KBL 99] beschrieben.

Bei der Zweiten Bornschen Näherung müssen weitere Vereinfachungen gemacht werden, um die entsprechende Übergangsamplitude berechnen zu können (weitere Details zu den gemachten Näherungen finden sich in [DKS 03]). Diese Amplitude entspricht einem Zwei-Schritt-Prozeß, bei dem das System zunächst vom Anfangszustand in einen Zwischenzustand übergeht, um dann erst in einem nachfolgenden Schritt den Endzustand zu erreichen. Bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit muß über alle möglichen Zwischenzustände summiert werden, wobei diese abhängig von ihrer Energie gewichtet werden. In dem hier verwendeten Modell wurde die sog. *Closure Approximation* angewendet, bei der die Zwischenzustände alle gleich, also mit einer gemittelten Energie, gewichtet werden (siehe Kap. 3.2.2). Diese gemittelte Energie kann in gewissen Grenzen willkürlich gewählt werden, ohne daß ein großer Einfluß auf die berechneten Wirkungsquerschnitte zu beobachten ist. In dem hier vorgestellten Modell wurde der Impuls des Projektils im Zwischenzustand (also auch die Energie) durch $\bar{p}_P^n = \sqrt{p_P^i p_P^f}$ entsprechend [RBR98] gemittelt (p_P^i und p_P^f sind dabei die Projektilimpulse im Anfangs- bzw. Endzustand).

Um die Berechnung der Zweiten Bornschen Näherung weiter zu vereinfachen, wurde außerdem eine Dipolnäherung durchgeführt (siehe Kap. 1.3.1 dieser Arbeit, [FA95]). Dabei wird der Born-Operator $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ bzgl. des Impulsübertrags q entwickelt. Bei der Berechnung der Amplitude wird dann nur der führende Term der Reihenentwicklung berücksichtigt. Diese Näherung ist somit dann gültig, wenn in beiden Ionisationsschritten, also in beiden Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target, der Impulsübertrag gering ist. Generell kann die Dipolnäherung nur bei kleinen Impulsüberträgen q verwendet werden. In der hier durchgeführten Rechnung wurde der Born-Operator $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ durch eine sphärischer Besselfunktionen genähert und nicht, wie in der in Kap. 1.3.1 und [FA95] vorgeschlagene Näherung, durch den linearen Beitrag $i\mathbf{q}\mathbf{r}$ des Born-Operators.

In Abbildung 5.3 sind die experimentellen und theoretischen Winkelverteilungen der ionisierten Elektronen für den 500 eV Elektron-Helium-Stoß ($v_P = 6$ a.u.) in koplanaarer Geometrie dargestellt. Der Impulsübertrag beträgt dabei $q \approx 0,8$ a.u. und ist somit recht nah an dem für diese Stoßgeschwindigkeit kleinstmöglichen Impulsübertrag

⁶Bisher kann die CCC-Rechnung nicht auf schwere Projektile, also z.B. Protonen, angewendet werden. Bei den hier untersuchten Projektilgeschwindigkeiten sollten die Unterschiede zwischen Elektronen- und Protonenstoß jedoch hauptsächlich auf der unterschiedlichen Projektilladung beruhen.

von $q_{\min} = 0,55$ a.u.. Die Energie der emittierten Elektronen beträgt $E_{e1,2} \approx 5$ eV. Im Vergleich der experimentellen Ergebnisse für dieses Stoßsystem mit denen für den 2 keV Elektronenstoß aus dem vorangegangenen Kapitel (siehe Abb. 5.2 (d)) zeigt sich, daß die generelle Struktur des Wirkungsquerschnitts in den beiden Fällen recht ähnlich ist. Sowohl für die langsameren als auch für die schnelleren Stoßgeschwindigkeiten gibt es in der Winkelverteilung vier Maxima. Die beiden Maxima, welche näher am weißen Punkt liegen, der die Impulsübertragsrichtung markiert, entsprechen dabei dem *Binary-Peak*, da hier der Summenimpuls der beiden Elektronen in Richtung des Impulsübertrags \mathbf{q} zeigt. Die anderen beiden Maxima wurden bei den höheren Stoßgeschwindigkeiten als *Recoil-Peaks* interpretiert. Für die langsamere Stoßgeschwindigkeit sind diese Maxima jedoch stark bezüglich der Impulsübertragsrichtung zu größeren Winkel verschoben und verletzen somit die in der Ersten Bornschen Näherung gegebene Symmetriebedingung (durchgezogene Linien in Abb. 5.3). Weiterhin werden unter dieser Geometrie die beiden Elektronen nahezu in entgegengesetzter Richtung emittiert, wodurch die Dipolauswahlregeln (siehe Kap. 1.3.3) verletzt werden (gestrichelte Linien). Diese Emission in entgegengesetzter Richtung gibt ebenfalls, wie die Asymmetrie bzgl. der Impulsübertragsrichtung, einen Hinweis auf Höhere-Ordnungs-Beiträge, da zwei Dipol-Wechselwirkungen den Monopol- bzw. Quadrupolübergängen entsprechen, für die die Dipol-Auswahlregeln naturgemäß nicht gelten. Diese beobachteten Abweichungen von der Ersten-Ordnung-Näherung sind in der Tendenz bereits für die schnelleren Projektile zu beobachten, sie treten für den hier untersuchten Fall jedoch verstärkt auf.

In der Ersten Bornschen Näherung aus Abbildung 5.3 (b) können, wie zu erwarten, weder die im Experiment beobachtete Asymmetrie noch der für Dipolübergänge verbotene Beitrag reproduziert werden. Die Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment wird jedoch erheblich verbessert, wenn auch die Zweite Born Amplitude berücksichtigt wird. Zwar sind in den theoretischen Ergebnissen deutlich Beiträge zu erkennen, die außerhalb des Akzeptanzbereichs des Spektrometers liegen, innerhalb dieses Bereichs ist die Beschreibung des Experiments durch die Theorie jedoch sehr gut. Somit scheint die CCC-Beschreibung kombiniert mit der Zweiten Bornschen Näherung ein geeignetes Mittel zu sein, um den Doppelionisationsprozeß selbst bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten zu beschreiben.

In Abb. 5.4 sind die experimentellen Ergebnisse für den 6 MeV Protonen- und den 2 keV Elektronenstoß den theoretischen Resultaten der CCC-Rechnung gegenübergestellt. Die theoretischen Ergebnisse sind dabei für einen 2 keV Elektron- und einen 2 keV Positron-Helium-Stoß berechnet. Zwar unterscheiden sich die Stoßsysteme mit den Protonen und Positronen durch die leicht unterschiedliche Projektilgeschwindigkeit ($v_P = 15,5$ a.u. für die Protonen im Experiment, $v_P = 121$ a.u. für die Positronen in der CCC-Rechnung) und die verschiedenen Massen der beiden Projektile, die

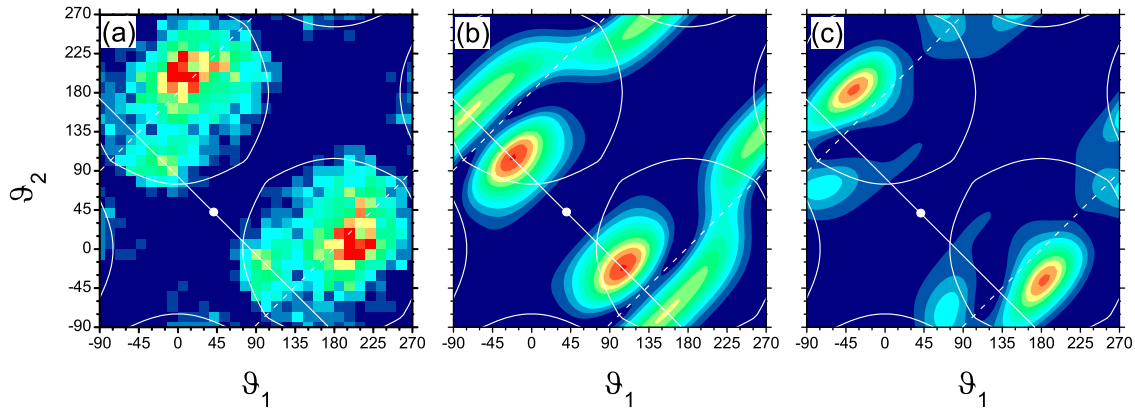


Abbildung 5.3: Winkelverteilung der beiden emittierten Elektronen in koplanarer Geometrie für den 500 eV Elektron-Helium-Stoß. Abb. (a) zeigt die experimentellen Ergebnisse für $q = 0,8 \pm 0,1$ a.u. und $E_{e1,2} = 5 \pm 2$ eV. In Abb. (b) und (c) sind die entsprechenden Ergebnisse der Ersten bzw. Zweiten Bornschen Näherung der CCC-Näherung dargestellt (Ergebnisse sind aus [DKS03, Höh]). Die Impulsübertragsrichtung entspricht dem weißen Punkt in der Mitte der Diagramme, die durchgezogene Linie stellt die Symmetrieachse der Ersten Bornschen Näherung dar, die gestrichelten Linien markieren die für Dipolübergänge verbotene Emission der Elektronen in entgegengesetzten Richtungen. Der Winkelbereich, der nicht durch die Akzeptanz des Spektrometers beeinträchtigt ist, wird von den durchgezogenen Linien umschlossen.

Stoßdynamik und somit auch die differentiellen Wirkungsquerschnitte sollten jedoch, wie bereits an anderer Stelle in dieser Arbeit diskutiert, trotz dieser Unterschiede durchaus vergleichbar sein.

Da durch die Dipolnäherung die Zweite-Born-Rechnung nur für kleine Impulsüberträge q gültig ist, wurde im Experiment ein Impulsübertrag $q = 0,2$ bis $0,8$ a.u. und in der Rechnung von $q = 0,6$ a.u. gewählt. Bei den experimentellen Wirkungsquerschnitten teilen sich die beiden emittierten Elektronen die übertragene Energie zwar symmetrisch auf, aufgrund der statistischen Qualität der Daten mußte jedoch über den Energiebereich von $E_{e1,2} = 0$ bis 25 eV integriert werden. Auf theoretischer Seite ist eine Integration über diesen Energiebereich mit großem Aufwand verbunden. Deshalb sind exemplarisch die theoretischen Ergebnisse für Elektronenenergien von $E_{e1,2} = 5$ eV (mittlere Reihe) und $E_{e1,2} = 20$ eV (untere Reihe) gezeigt. Da der Wirkungsquerschnitt mit der auf das Target übertragenen Energie abnimmt, tragen kleinere Energien sicherlich stärker zu dem über die Energie integrierten Querschnitt bei.

Im Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den Rechnungen zur Elektronenenergie $E_{e1,2} = 5$ eV zeigt sich, daß einige Eigenschaften der Winkelverteilungen gut durch die Theorie beschrieben werden. Sowohl in der Rechnung als auch im Experiment ist der *Binary-Peak*, also die Maxima näher der Mitte der Spektren, für beide

5.2. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

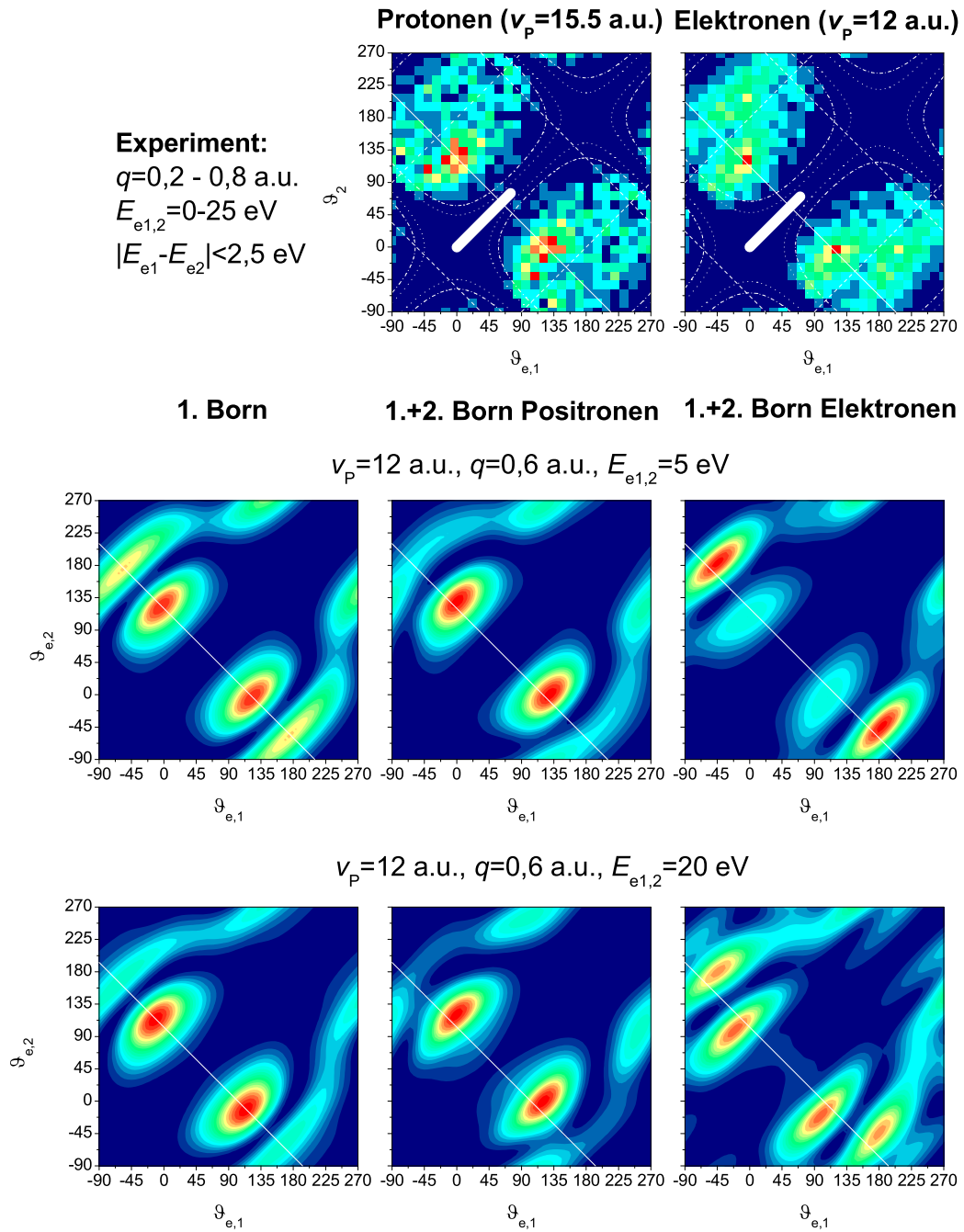


Abbildung 5.4: Winkelverteilung der beiden emittierten Elektronen in koplanarer Geometrie im Experiment und in der CCC-Rechnung. Die obere Reihe zeigt die experimentellen Ergebnisse im 6 MeV Protonen- und 2 keV Elektronenstoß (vgl. Abb. 5.2 (a) und (d)). In der mittleren und unteren Reihe sind die Ergebnisse der Ersten (erste Spalte) und Zweiten Bornschen Näherung für 2 keV Positronen (zweite Spalte) und 2 keV Elektronen (dritte Spalte) dargestellt. Die Erste Bornsche Näherung ist dabei unabhängig vom Ladungsvorzeichen des Projektils. Die Energie der emittierten Elektronen beträgt $E_{e1,2} = 5$ eV (mittlere Reihe) bzw. $E_{e1,2} = 20$ eV (untere Reihe).

Projektiladungen nahezu symmetrisch zur Impulsübertragsrichtung (durchgezogene Linien). Für positiv geladene Projektile ist in der Rechnung der *Recoil-Peak*, also die beiden äußeren Maxima, deutlich zu kleineren Winkeln bezüglich der Symmetrieachse verschoben. Aufgrund der statistischen Einschränkung und der begrenzten Akzeptanz des Spektrometers kann für die experimentellen Ergebnisse aus dem Protonenstoß keine eindeutige Verschiebung des *Recoil-Peaks* festgestellt werden. Für negativ geladene Projektile ist der *Recoil-Peak* sowohl im Experiment als auch in der Rechnung zu größeren Winkeln verschoben. Dabei ist dieses Phänomen im Experiment ausgeprägter als in der Rechnung. In der Rechnung für höhere Elektronenenergien ($E_{e1,2} = 20 \text{ eV}$) treten im wesentlichen dieselben Asymmetrien wie bei den niedrigeren Elektronenenergien auf. Hier ist jedoch für beide Projektiladungen auch eine leichte Verschiebung des *Binary-Peaks* zu beobachten. Somit sind die Symmetrieeigenschaften im Experiment und in der CCC-Näherung weitgehend in Übereinstimmung.

Bezüglich der relativen Intensität des *Binary-* bzw. *Recoil-Peaks* stimmt die Theorie jedoch nur sehr unzureichend mit dem Experiment überein. Für positiv geladene Projektile ist die Übereinstimmung zwischen Zweiter Bornscher Näherung und Experiment zwar zufriedenstellend, für negativ geladene Projektile wird jedoch die relative Höhe des *Recoil-Peaks* stark überschätzt. Hier liefert die Erste Bornsche Näherung eine erheblich bessere Beschreibung des Wirkungsquerschnitts.

Aufgrund der etwas besseren Statistik im Elektronenstoß-Experiment, konnte hier bei der Bestimmung der Wirkungsquerschnitte auch über schmalere Energiebereiche integriert werden, sodaß eine nähere Untersuchung der relativen Höhe des *Recoil-Peaks* in Abhängigkeit von der Energie der emittierten Elektronen möglich ist. Die so erhaltenen Winkelverteilungen sind in Abbildung 5.5 für einen Impulsübertrag $q \approx 0,6 \text{ a.u.}$ und Elektronenenergien von $E_{e1,2} \approx 5 \text{ eV}$ (a) bzw. $E_{e1,2} \approx 20 \text{ eV}$ (b) dargestellt. Die kinematischen Bedingungen stimmen somit genau mit denen der Rechnung aus Abb. 5.4 überein. Die Diskrepanz zwischen dem Experiment und den theoretischen Ergebnissen bleibt auch unter diesen genauer bestimmten kinematischen Bedingungen bestehen und ist deshalb nicht auf die Integration über einen größeren Energiebereich zurückzuführen. Die Abhängigkeit der relativen Intensität des *Recoil-Peaks* von der Energie der emittierten Elektronen wird durch die Theorie jedoch richtig wiedergegeben. Sowohl im Experiment als auch in der Ersten und Zweiten Bornschen Näherung nimmt die Höhe des *Recoil-Peaks* mit der Elektronenenergie ab. Diese Eigenschaft ist auch für die Einfachionisation wohlbekannt [SAC90, SMM01].

Es kann also festgehalten werden, daß der CCC-Ansatz in Kombination mit der Zweiten Bornschen Näherung durchaus in der Lage ist, viele Eigenschaften der differentiellen Wirkungsquerschnitte, wie z.B. die Asymmetrie bzgl. der Impulsüber-

5.2. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

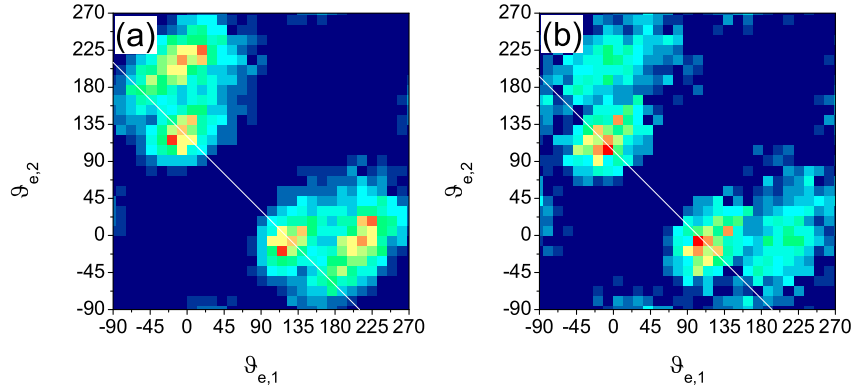


Abbildung 5.5: Differentieller Wirkungsquerschnitt für den 2 keV Elektronenstoß wie in Abb. 5.4 rechts oben. Hier wurde jedoch der Impulsübertrag $q \approx 0,6$ a.u. und die Elektronenergie $E_{e1,2} = 5$ eV (a) bzw. $E_{e1,2} = 20$ eV (b) gewählt (aus [DKS 01]).

tragsrichtung, zu reproduzieren. Die Beschreibung des Elektron-Helium-Stoßes bei niedrigen Projektilenergien ($v_P = 6$ a.u., Abb. 5.3) ist dabei in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment. Auch für den 6 MeV Proton-Helium-Stoß ($v_P = 15,5$ a.u.) sind keine signifikanten Diskrepanzen mit der Rechnung (für 2 keV Positronen, $v_P = 12$ a.u.) erkennbar. Für den schnellen Elektron-Helium-Stoß ($v_P = 12$ a.u.) wird jedoch die relative Höhe des *Recoil-Peaks* von der Zweiten Bornschen Näherung stark überschätzt.

Die Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie muß auf die in der Rechnung verwendeten Näherungen zurückgeführt werden. Da sich die Beschreibung des Anfangs- und des Endzustands in der CCC-Näherung für die Photodoppelionisation als sehr erfolgreich gezeigt hat, schränken im Teilchenstoß wohl vor allem die Näherungen in der Projektil-Target-Wechselwirkung die Genauigkeit der Rechnung ein. An erster Stelle ist hier die Dipolnäherung in der Zweiten-Born-Amplitude zu nennen, deren Verwendung bereits bei dem hier untersuchten, relativ geringen Impulsübertrag von $q = 0,6$ a.u. fragwürdig ist. Weiterhin ist durch die *Closure Approximation* die unterschiedliche Gewichtung der möglichen Zwischenzustände vernachlässigt. Außerdem ist die Berücksichtigung von nur zwei Wechselwirkungen zwischen Projektil und Target unter Umständen nicht ausreichend. Die Bornsche Reihe ergibt sich aus der Störungsentwicklung wie folgt:

$$\begin{aligned} \sigma &\propto \left| T_{1B}^{fi} + T_{2B}^{fi} + T_{3B}^{fi} + \dots \right|^2 \approx \left| c_1 \frac{Z_P}{v_P} + c_2 \frac{Z_P^2}{v_P^2} + c_3 \frac{Z_P^3}{v_P^3} + \dots \right|^2 \\ &= \alpha_1 \frac{Z_P^2}{v_P^2} + \alpha_2 \frac{Z_P^3}{v_P^3} + \alpha_3 \frac{Z_P^4}{v_P^4} + \dots \end{aligned} \quad (5.5)$$

Dabei sind T^{fi} die Born Amplituden, c_i komplexe und α_i reelle Koeffizienten. Die hier

verwendete Rechnung beinhaltet zwar den Z_P^4 -Term der Bornschen Reihe, der Anteil des Terms, der sich aus dem Produkt der Ersten mit der Dritten Born Amplitude ergibt, ist jedoch bereits vernachlässigt. Diese nur teilweise Berücksichtigung des Z_P^4 -Terms ist sicherlich eine Schwäche des verwendeten Modells.

Nach den hier gemachten Beobachtungen, liefert die CCC-Rechnung für langsame Elektron-Helium-Stöße bessere Übereinstimmung mit dem Experiment als für schnelle Kollisionen. Die Bornsche Näherung sollte jedoch gerade für die höheren Stoßgeschwindigkeiten eine bessere Beschreibung darstellen. Die Tatsache, daß dies nicht den hier diskutierten Ergebnissen entspricht, kann jedoch ein Hinweis dafür sein, daß die sehr gute Übereinstimmung der Spektren aus Abb. 5.3 für den 500 eV Elektron-Helium-Stoß nur zufällig ist. Nichtsdestoweniger ist ersichtlich, daß die Rechnung für die untersuchten Projektilgeschwindigkeiten die Höheren-Ordnungseffekte in der Tendenz richtig beschreiben kann auch wenn eine exakte Reproduktion der experimentellen Ergebnisse bisher nicht möglich ist. Um systematische Abweichungen der theoretischen Ergebnisse und die Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte von der Projektilladung tiefergehend zu untersuchen, ist es jedoch notwendig, experimentelle Daten auch bei niedrigeren Stoßgeschwindigkeiten, insbesondere für positiv geladene Projektile, zu gewinnen. Auch die Frage nach dem Einfluß der Projektilladung, die in diesem Kapitel nicht diskutiert wurde, ist im Detail bisher noch unklar, sie kann jedoch durch Untersuchungen von Antiteilchen-Helium-Stößen in Zukunft geklärt werden.

Neben der hier diskutierten CCC-Näherung gibt es noch weitere theoretische Ansätze, die versuchen die vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte der stoßinduzierten Doppelionisation zu beschreiben (für einen aktuellen Überblick siehe [BLD03]). Dazu gehört z.B. die 6C-Rechnung, die die paarweise Wechselwirkung aller vier Teilchen im Endzustand berücksichtigt und somit ebenfalls eine Abhängigkeit von der Projektilladung aufweist [GWB03]. Bisher ist mit dieser Methode eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit experimentellen Daten jedoch noch nicht gelungen. Die rasante Entwicklung der experimentellen Möglichkeiten und die Vielzahl neuester experimenteller Ergebnisse findet jedoch großes Interesse von theoretischer Seite, sodaß in der nächsten Zeit weiter verbesserte Modelle und Beschreibungen zu erwarten sind.

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden schnelle Ion-Helium-Stöße, bei denen das Heliumtarget einfach oder doppelt ionisiert wird, kinematisch vollständig vermessen. Trotz der Einfachheit der zu untersuchenden Systeme, die nur aus vier Körpern bestehen, nämlich dem Projektil, den beiden Targetelektronen und dem Heliumkern, erweist sich sowohl die theoretische als auch die experimentelle Untersuchung solcher Ionisationsprozesse als sehr schwierig. Dies trifft vor allem dann zu, wenn nicht nur die totale Ionisationswahrscheinlichkeit oder die Impulsverteilung einzelner Targetfragmente, sondern gleichzeitig der Energie- und Impulsübertrag vom Projektil auf das Target sowie die Emissionscharakteristik der ionisierten Elektronen ermittelt werden sollen. Die Analyse des vollständig aufgelösten Endzustands-Impulsraums erlaubt dabei tiefe Einblicke in die Dynamik, die den untersuchten Ionisationsprozessen zugrunde liegt.

Die kinematisch vollständige Vermessung von Ionisationsprozessen in Ion-Atom-Stößen ist erst seit wenigen Jahren durch die Entwicklung von „Reaktionsmikroskopen“ experimentell möglich. Bei dieser Technik ist ein hochauflösendes Elektronenspektrometer mit einem Rückstoßionenimpulsspektrometer kombiniert. Auch bei den im Rahmen dieser Doktorarbeit durchgeführten Experimenten kam ein solches Reaktionsmikroskop zum Einsatz. Am Tandem-Beschleuniger des Max-Planck-Instituts für Kernphysik wurden Experimente durchgeführt, in denen die Ionisation von Helium untersucht wurde. Im ersten Experiment wurden Protonen einer Energie von 6 MeV ($\eta = 0,065$ a.u.) und im zweiten C^{6+} -Ionen einer Energie von 2 MeV/amu ($\eta = 0,67$ a.u.) als Projektile verwendet. Um einen Einblick in die Abhängigkeit verschiedener dynamischer Mechanismen von der Störung $\eta = Z_P/v_P$ und vom Vorzeichen der Projektilladung zu erhalten, wurden auch Datensätze aus früheren Experimenten zum Ion-Atom-Stoß mit Störungen bis $\eta = 4,41$ a.u. sowie experimentelle Ergebnisse aus der Elektronenstoß-Ionisation zum Vergleich herangezogen.

Für die Einfachionisation wurde die Stoßdynamik anhand von sowohl einfach als auch vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten untersucht. Im Vergleich mit

verschiedenen theoretischen Modellen wurden die Grenzen der Rechnungen ausgelotet und die Gültigkeit der verwendeten Näherungen in Abhängigkeit der Stärke der Störung untersucht und diskutiert.

Bereits für die einfach differentiellen Wirkungsquerschnitte bei mittlerer Störung ($\eta = 0,7$ a.u.) wurde ein Einfluß von mehrfachen Wechselwirkungen zwischen dem Projektil und dem Targetelektron sowie der Projektil-Targetkern-Streuung gefunden [FVM 03]. Die Signatur von Beiträgen höherer Ordnung (jenseits der Ersten Bornschen Näherung) in der Projektil-Elektron-Wechselwirkung sind dabei besonders in den longitudinalen Impulsverteilungen sichtbar. Die hier beobachteten Effekte wurden hauptsächlich auf die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und dem ionisierten Elektron im Endzustand, die *Post Collision Interaction*, zurückgeführt. In der Richtung senkrecht zur Projektilstrahlachse beeinflusst vor allem die Kern-Kern-Streuung die Form der Impulsverteilungen von Projektil und Targettrumpf. Mit einer CDW-EIS-Rechnung, welche die Projektil-Targetkern-Wechselwirkung berücksichtigt und das Target wasserstoffähnlich beschreibt, konnten die experimentellen Ergebnisse in guter Übereinstimmung reproduziert werden.

Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für die Einfachionisation wurden im Rahmen dieser Arbeit von sehr kleiner bis hin zu extrem großer Störung analysiert. Für die Ionisation im Ionenstoß liegen volldifferentielle Daten erst seit kurzem vor [SMM 01]. Sowohl im Ion-Atom-Stoß als auch in früheren Experimenten zur Einfachionisation im Elektronenstoß konzentrierte sich die Untersuchung der Wirkungsquerschnitte auf die koplanare Geometrie, also wenn die Impulsvektoren aller Stoßpartner in derselben Ebene liegen. In dieser Ebene wird bei geringer Störung der Wirkungsquerschnitt gut durch die Erste Bornsche Näherung oder die CDW-EIS-Rechnung beschrieben [MSJ 02]. In der hier vorliegenden Arbeit wurde auch die Ebene senkrecht dazu, also wenn das ionisierte Elektron senkrecht zum Impulsübertragsvektor emittiert wird, untersucht. Hier konnten überraschende Abweichungen zwischen der Ersten Bornschen Näherung und den experimentellen Daten beobachtet werden [SMF 03a], die in einem einfachen klassischen Bild mit der Kern-Kern-Streuung erklärt wurden. Die beobachteten Strukturen, die sich für positiv und negativ geladene Projektile unterscheiden, können bisher jedoch von keiner quantenmechanischen Theorie reproduziert werden. Erstaunlicherweise ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment bei größerer Störung ($\eta = 0,67$ a.u.) erheblich besser [MFF 03]. Eine mögliche Ursache dafür liegt darin, daß der Drei-Teilchen-Endzustand in der Rechnung durch eine 3C-Wellenfunktion genähert wird. Diese Näherung scheint jedoch nur dann anwendbar zu sein, wenn sich die drei Körper im Stoß nicht zu nahe kommen, d.h. wenn mindestens ein Teilchen weit entfernt ist. Bei größerer Störungen ist der Stoßparameter, also der minimale Abstand zwischen Projektil und Targetkern während des Stoßes, im allgemeinen größer als bei

kleinen Störungen, wodurch die Rechnung hier bessere Resultate liefert.

Für extrem hohe Störungen ($\eta = 2,00$ bzw. $4,41$ a.u.) konnte in früheren Arbeiten gezeigt werden, daß die Elektronenemissionsspektren gut durch die CDW-EIS-Näherung beschrieben werden [MFS 99]. Bei der Beschreibung der in der vorliegenden Arbeit untersuchten vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte scheitert die Rechnung jedoch völlig [FMS 03]. Worin letztlich die Ursache für die beobachteten Diskrepanzen liegt, ist bis heute unklar. Fraglich ist zum einen, ob die CDW-EIS-Näherung in diesem Störungsbereich generell noch gültig ist. Zum anderen spielt möglicherweise auch das zweite, passive Elektron des Heliumtargets bei großen Störungen eine entscheidende Rolle, sodaß selbst bei der Einfachionisation von Helium explizit das Vier-Teilchen-Problem gelöst werden müßte. Um diese Frage zu klären werden in naher Zukunft, im Rahmen einer weiteren Doktorarbeit, Messungen zur Einfachionisation von Wasserstoff durchgeführt.

Für die Doppelionisation durch positiv geladene Projektile konnten im Rahmen dieser Doktorarbeit zum ersten Mal vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte gewonnen werden [FMD 03]. Dabei wurde die Ionisation durch 6 MeV Protonen ($\eta = 0,065$ a.u.) untersucht. Durch den Vergleich mit früheren Daten zur Elektronenstoß-Doppelionisation bei einer Projektilenergie von 2 keV ($\eta = 0,08$ a.u.), konnten anhand der Symmetrieeigenschaften der Wirkungsquerschnitte nichtlineare Prozesse, die bereits beim Vergleich der totalen Doppelionisationsquerschnitte im Protonen- und Antiprotonenstoß identifiziert wurden [AHK 86], beobachtet werden.

Zum Vergleich mit der Theorie wurde der Convergent Close-Coupling-Ansatz (CCC) herangezogen, in dem der korrelierte Anfangs- und Endzustand des Targetsystems numerisch ermittelt und die Wechselwirkung mit dem Projektil störungstheoretisch behandelt wird. Die CCC-Näherung wurde bereits in früheren Studien sowohl in der ersten als auch in der zweiten Ordnung der Projektil-Target-Wechselwirkung verwendet [DKS 01, DKS 03, LDD 03], wobei eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Elektronenstoß-Experimenten erreicht wurde. In der im Rahmen dieser Doktorarbeit durchgeführten Untersuchung konnte die CCC-Näherung die experimentellen Spektren nur bedingt reproduzieren. Die beobachteten Diskrepanzen wurden auf Schwächen des theoretischen Ansatzes bezüglich der Beschreibung der Projektil-Target-Wechselwirkung zurückgeführt.

In dieser Arbeit wurde gezeigt, daß anhand differentieller Wirkungsquerschnitte im Vergleich zwischen experimentellen Ergebnissen und theoretischen Modellen verschiedene dynamische Mechanismen durch die Wahl bestimmter kinematischer und geometrischer Situationen identifiziert und zum Teil auch separiert werden können, wodurch ein sensitiver Test unterschiedlicher Rechnungen möglich ist. Auf theoretischer

tischer Seite wurden in den letzten Jahren durch die Entwicklung neuer Modelle, wie z.B. der *Exterior Complex Scaling*-Rechnung, und die Erweiterung älterer Methoden, z.B. im Rahmen von *Distorted Wave*-Näherungen, große Fortschritte erzielt. Trotzdem ist es für den allgemeinen Fall bis heute nicht möglich, mit Hilfe der zur Verfügung stehenden theoretischen Methoden die vollständige Drei- bzw. Vier-Teilchen-Dynamik zu beschreiben oder Vorhersagen über die Wirkungsquerschnitte zu treffen. Der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen ist deshalb noch immer unabdingbar. Dazu müssen weitere Experimente durchgeführt werden, die systematisch die Abhängigkeit der Stoßdynamik von der Projektilgeschwindigkeit, der Projektilmasse und vom Betrag und Vorzeichen der Projektilladung untersuchen. Für extrem hohe Projektilgeschwindigkeiten werden von der Theorie relativistische Effekte in den vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten vorhergesagt [VU01], die experimentell bisher nicht beobachtet wurden. Die Abhängigkeit vom Vorzeichen der Projektilladung soll durch Experimente mit Antiprotonen untersucht werden. Diese Experimente sind derzeit aufgrund nicht zur Verfügung stehender, ausreichend hoher Antiprotonen-Strahldichten noch nicht durchführbar. Nach Genehmigung des FLAIR-Projekts⁷ sollten sie jedoch an der Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt möglich werden. Auf diese Weise können dann Stoßsysteme verglichen werden, die sich allein durch das Vorzeichen der Projektilladung unterscheiden. Gleichzeitig verspricht der Vergleich zwischen der Ionisation im Elektronen- und im Antiprotonenstoß Einblicke in die Abhängigkeit der Stoßdynamik von der Projektilmasse zu erhalten, die in vielen Näherungen vernachlässigt ist. Ziel ist es mit Hilfe experimenteller und theoretischer Mittel ein geschlossenes Bild der Dynamik von atomaren Stößen, also eines der einfachsten und fundamentalsten Mehr-Teilchen-Probleme in der Atomphysik, zu gewinnen.

⁷Nähere Informationen dazu gibt es im WWW unter <http://www-new.gsi.de/zukunftsprojekt/>.

Anhang A

A.1 Der Rutherfordstreuquerschnitt

Der differentielle Wirkungsquerschnitt bei der elastischen Streuung eines geladenen Projektils an einem Elektron wird üblicherweise im Schwerpunktsystem der beiden Teilchen durch die Rutherfordformel angegeben (z.B. [Daw92]):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \left(\frac{Z_P}{2\mu v_P^2 \sin^2(\vartheta/2)} \right)^2. \quad (\text{A.1})$$

Dabei ist Z_P die Projektilladung, $\mu = m_P m_e / (m_P + m_e)$ die reduzierte Masse, ϑ der Streuwinkel im Schwerpunktsystem und v_P die Relativgeschwindigkeit der beiden Teilchen bzw. die Projektilgeschwindigkeit im Laborsystem, in dem das Elektron vor dem Stoß ruht (siehe Abb. A.1). Die zu beobachtende Größe ist jedoch häufig nicht der Winkel ϑ , sondern vielmehr die Energie E_e , die im Laborsystem durch den Stoß auf das zuvor ruhende Elektron übertragen wird. Um aus Gl. A.1 den entsprechenden differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dE_e$ zu erhalten, muß zunächst die Abhängigkeit der Energie E_e vom Winkel ϑ bestimmt werden.

Die Transformation einer Geschwindigkeit \mathbf{v} vom Schwerpunkts- in das Laborsystem ergibt sich aus der Beziehung

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{V} \quad (\text{A.2})$$

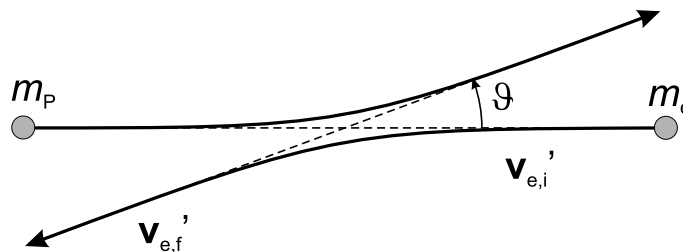


Abbildung A.1: Rutherfordstreuung eines Projektils der Masse m_P an einem Elektron der Masse m_e im Schwerpunktsystem (siehe Text).

(der Strich kennzeichnet dabei die Geschwindigkeit im Schwerpunktsystem) wobei die Schwerpunkts­geschwindigkeit \mathbf{V} während des Stoßes erhalten bleibt und durch die Gleichung

$$\mathbf{V} = \frac{m_e \mathbf{v}_e + m_P \mathbf{v}_P}{m_e + m_P} \quad (\text{A.3})$$

gegeben ist. Unter der Annahme, daß im Laborsystem die Geschwindigkeit des Elektrons vor dem Stoß $\mathbf{v}_{e,i}$ null ist (der Index i steht für den Anfangszustand) und daß das Projektil die Geschwindigkeit \mathbf{v}_P hat, ergibt sich aus Gl. A.3

$$\mathbf{V} = \frac{\mu}{m_e} \mathbf{v}_P . \quad (\text{A.4})$$

Im Schwerpunkts­system ändert sich die Energie E'_e und somit der Betrag der Geschwindigkeit des Elektrons vor und nach dem elastischen Stoß nicht ($v'_{e,i} = v'_{e,f} = V$, der Index f kennzeichnet den Endzustand). Im Laborsystem wird jedoch Energie vom Projektil auf das zuvor ruhende Elektron übertragen. Die Energie des Elektrons nach dem Stoß ist dann (mit Gl. A.2)

$$E_e = \frac{1}{2} m_e (\mathbf{v}'_{e,f} + \mathbf{V})^2 = \frac{1}{2} m_e v'_{e,f}{}^2 + \frac{1}{2} m_e V^2 + m_e \mathbf{v}'_{e,f} \cdot \mathbf{V} . \quad (\text{A.5})$$

Aus dem Skalarprodukt der beiden Geschwindigkeiten in Gleichung A.5 erhält man die Abhängigkeit vom Streuwinkel ϑ :

$$\mathbf{v}'_{e,f} \cdot \mathbf{V} = -v'_{e,f} V \cos \vartheta . \quad (\text{A.6})$$

Setzt man Gleichung A.6 und A.4 in Gleichung A.5 ein, ergibt sich mit der Bedingung $v'_{e,i} = v'_{e,f} = V$ der Zusammenhang zwischen dem Streuwinkel ϑ im Schwerpunkts­system und der Energie E_e , die im Laborsystem auf das Elektron übertragen wird

$$E_e = \frac{\mu^2 v_P^2}{m} (1 - \cos \vartheta) . \quad (\text{A.7})$$

Aus Gl. A.1 und A.7 kann nun der differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/dE_e$ berechnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE_e} &= \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{dE_e} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot \left(\frac{dE_e}{2\pi \sin \vartheta d\vartheta} \right)^{-1} \\ &\propto \frac{2\pi}{m_e v_P^2} \left(\frac{Z_P}{E_e} \right)^2 . \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

A.2 Doppelionisationsmechanismen in der Vielteilchen-Störungstheorie

Die Vielteilchen-Störungstheorie (MBPT, *many body perturbation theory*) ist ein Ansatz, mit dem verschiedene Eigenschaften von Mehr-Teilchen-Systemen untersucht werden können (siehe z.B. [McG97]). Zwar ist diese Methode wenig zweckmäßig, um differentielle Wirkungsquerschnitte zu berechnen, jedoch können damit unterschiedliche Ionisationsmechanismen systematisch und anschaulich getrennt werden.

In der MBPT wird der Hamilton-Operator zur Beschreibung der stoßinduzierten Doppelionisation von Helium wie folgt aufgeteilt:

$$H = H_{e1} + H_{e2} + H_{\text{Proj}} + V + v . \quad (\text{A.9})$$

Dabei sind $H_{e1,2}$ die Hamiltonoperatoren der beiden Elektronen, H_{Proj} der Hamilton-Operator des Projektils, V die Wechselwirkung zwischen dem Projektil und den Elektronen und v die Wechselwirkung der Elektronen untereinander, d.h. die Elektron-Elektron-Korrelation. Voraussetzung für die Gültigkeit des Ansatzes ist, daß sowohl V als auch v „schwache“ Störungen sind. Durch diese Formulierung können nun die Übergangsamplituden bzw. die T -Matrix-Elemente, ähnlich wie in der Bornschen Näherung, berechnet werden.

Die MBPT-Übergangsamplituden werden häufig durch Diagramme ausgedrückt. In diesen Diagrammen (siehe Abb. A.2) läuft die Zeitrichtung von unten nach oben. Der Grundzustand der Elektronen wird nicht dargestellt. Angeregte Zustände werden durch Teilchen-Loch-Paare repräsentiert, wobei das Loch einem Teilchen entspricht, das rückwärts in der Zeit propagiert. Die Wechselwirkung V zwischen dem Projektil und den Targetelektronen wird durch gewellte Linien dargestellt, gestrichelte Linien entsprechen der Elektron-Elektron-Korrelation v .

In Abbildung A.2 sind die Zweiten-Ordnungs-Diagramme dargestellt, die zur Doppelionisation des Heliumtargets führen können. Das erste Diagramm zeigt den *Two-Step 1*-Prozeß (TS1). Hier wird zunächst ein Elektron im Zustand $|i_1\rangle$ durch die Wechselwirkung V mit dem Projektil in den Zustand $|k\rangle$ angeregt und stößt dann mit dem zweiten Elektron (über die Wechselwirkung v), wodurch beide Elektronen emittiert werden und in den Endzustand $|f_1\rangle$ bzw. $|f_2\rangle$ übergehen. Die T -Matrix für diesen Prozeß ist (ähnlich der Zweiten Bornschen Näherung, vgl. Gl. 3.22)

$$T_{\text{TS1}} = \sum_k \langle f_2 f_1 | v | k i_2 \rangle (\epsilon_{i_1} + E_{P_i} - \epsilon_k - E_{P_f} + i0)^{-1} \langle k | V | i_1 \rangle . \quad (\text{A.10})$$

Dabei entspricht ϵ den Eigenenergien der Zustände, die durch den Index angegeben sind, und $E_{P_{i,f}}$ der Projektilenergie vor bzw. nach dem Stoß.

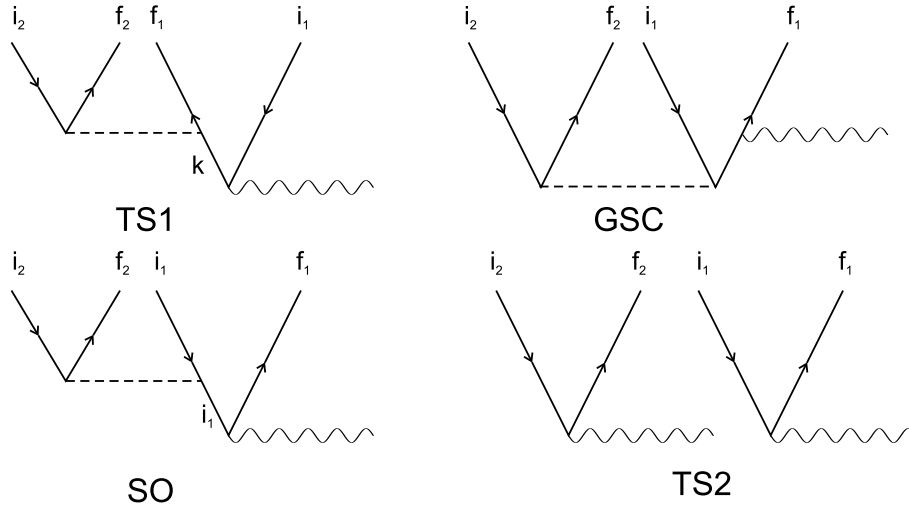


Abbildung A.2: Diagramme der Vielteilchen-Störungstheorie für die Zweiten-Ordnungs-Prozesse *Two-Step 1* (TS1), *Ground State Correlation* (GSC), *Shakeoff* (SO) und *Two-Step 2* (TS2).

Bei der *Ground State Correlation* (GSC) wechselwirken zunächst die beiden Elektronen untereinander (über v), wobei ein Elektron in den Zustand $|k\rangle$ übergeht und das andere direkt den Endzustand $|f_2\rangle$ erreicht. Dabei ist die Energie nicht erhalten. Durch die Wechselwirkung mit dem Projektil V gelangt daraufhin das erste Elektron in seinen Endzustand $|f_1\rangle$. Die zugehörige T -Matrix schreibt sich wie folgt:

$$T_{\text{GSC}} = \sum_k \langle f_1 | V | i_1 \rangle (\epsilon_{i_1} + \epsilon_{i_2} - \epsilon_k - \epsilon_{f_2} + i0)^{-1} \langle f_2 k | v | i_1 i_2 \rangle . \quad (\text{A.11})$$

Der nächste Doppelionisations-Mechanismus ist der *Shakeoff* (SO), der bereits in Kapitel 5.1 diskutiert wurde. In der MBPT beruht dieser Prozeß auf der Streuung des Loches des ersten Elektrons am zweiten Elektron. Für die T -Matrix ergibt sich

$$T_{\text{SO}} = - \langle f_1 i_1 | v | i_1 i_2 \rangle (\epsilon_{i_1} + E_{P_i} - \epsilon_{f_1} - E_{P_f} + i0)^{-1} \langle f_1 | V | i_1 \rangle . \quad (\text{A.12})$$

Bei dem *Two-Step 2*-Prozeß tritt keine Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen auf. Hier werden die beiden Elektronen sequentiell durch zwei Wechselwirkungen mit dem Projektil ionisiert. Die Amplitude ist gegeben durch

$$T_{\text{TS1}} = \sum_k \langle f_2 | V | i_2 \rangle (\epsilon_{i_1} + E_{P_i} - \epsilon_{f_1} - E_{P_f} + i0)^{-1} \langle f_1 | V | i_1 \rangle . \quad (\text{A.13})$$

A.3 Atomare Einheiten

In der Atomphysik werden häufig die *atomaren Einheiten* verwendet. Die Basiseinheiten dieses Systems für Länge, Masse, Ladung und Geschwindigkeiten richten sich nach entsprechenden Größen für ein Elektron im Grundzustand des Wasserstoffs. Demnach ergeben sich folgende Basisgrößen und Naturkonstanten:

Basiseinheiten und Naturkonstanten

$r_e = 1 \text{ au} = 5,2918 \cdot 10^{-11} \text{ m}$	Bohrscher K-Schalenradius des Wasserstoff
$v_e = 1 \text{ au} = 2,1877 \cdot 10^6 \text{ m/s}$	Geschwindigkeit auf der Bohrschen Bahn
$m_e = 1 \text{ au} = 9,1095 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	Ruhemasse des Elektrons
$q_e = e = 1 \text{ au} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ As}$	Elektronenladung
$\hbar = m_e v_e r_e = 1 \text{ au}$	Drehimpulsquantum
$c = e^2 / (\hbar \alpha) = 137 \text{ au}$	Lichtgeschwindigkeit

Hilfreich ist oft die Kenntnis der Umrechnungsfaktoren zwischen atomaren Einheiten und andere gängigen Einheiten:

Umrechnungsfaktoren

Energie	$E [\text{eV}] = 27,2 \cdot E [\text{au}]$
Impuls	$p [\text{kg m/s}] = 1,995 \cdot 10^{-24} \cdot p [\text{au}]$
Geschwindigkeit	$v [\text{m/s}] = 2,1877 \cdot 10^6 \cdot v [\text{au}]$

Literaturverzeichnis

- [AHK 86] Andersen, L.H. ; Hvelplund, P. ; Knudsen, H. ; Møller, S.P. ; Elsener, K. ; K.-G.Rensfelt ; Uggerhøj, E.: Single and Double Ionization of Helium by Fast Antiproton and Proton Impact. In: *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986), S. 2147–2150
- [AHK 87] Andersen, L.H. ; Hvelplund, P. ; Knudsen, H. ; Møller, S.P. ; Sørensen, A.H. ; Elsener, K. ; Rensfelt, K.-G. ; Uggerhøj, E.: Multiple Ionization of He, Ne, and Ar by Fast Protons and Antiprotons. In: *Phys. Rev. A* **36** (1987), S. 3612–3629
- [AHK 89] Andersen, L.H. ; Hvelplund, P. ; Knudsen, H. ; Møller, S.P. ; Pedersen, J.O.P. ; Tang-Petersen, S. ; Uggerhøj, E. ; Elsener, K. ; Morenzoni, E.: Further Studies of Double Ionization of He, Ne, and Ar by Fast and Slow Antiprotons. In: *Phys. Rev. A* **40** (1989), S. 7366–7368
- [Bar89] Barlow, R.: *Statistics: A Guide to the Use of Statistical Methods in the Physical Sciences*. Chichester : John Wiley & Sons Ltd., 1989
- [Bar98] Bartschat, K.: The *R*-Matrix with Pseudo-States Method: Theory and Applications to Electron Scattering and Photoionization. In: *Comput. Phys. Commun.* **114** (1998), S. 168–182
- [BB88] Bertulani, C.A. ; Baur, G.: Electromagnetic Processes in Relativistic Heavy Ion Collisions. In: *Phys. Rep.* **163** (1988), S. 299–408
- [BB94] Berakdar, J. ; Briggs, J.S.: Interference Effects in (e,2e)-Differential Cross Sections in Doubly Symmetric Geometry. In: *J. Phys. B* **27** (1994), S. 4271–4280
- [BBK89] Brauner, M. ; Briggs, J.S. ; Klar, H.: Triply-Differential Cross Sections for Ionisation of Hydrogen Atoms by Electrons and Positrons. In: *J. Phys. B* **22** (1989), S. 2265–2287

-
- [BBK 91] Brauner, M. ; Briggs, J.S. ; Klar, H. ; Broad, J.T. ; Rösel, T. ; Jung, K. ; Ehrhardt, H.: Triply Differential Cross Sections for Ionization of Hydrogen Atoms by Electrons: The Intermediate and Threshold Energy Regions. In: *J. Phys. B* **24** (1991), S. 657–673
- [Bel78] Belkić, Dž.: A Quantum Theory of Ionisation in Fast Collisions Between Ions and Atomic Systems. In: *J. Phys. B* **11** (1978), S. 3529–3551
- [Bet30] Bethe, H.: Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. In: *Ann. Physik* **5** (1930), S. 325–400
- [BF96] Bray, I. ; Fursa, D.V.: Calculation Within the Close-Coupling Formalism. In: *Phys. Rev. A* **54** (1996), S. 2991–3004
- [BFK 02] Bray, I. ; Fursa, D.V. ; Kheifets, A.S. ; Stelbovics, A.T.: Electrons and Photons Colliding with Atoms: Development and Application of the Convergent Close-Coupling Method. In: *J. Phys. B* **35** (2002), S. R117–R146
- [BFR 98] Bray, I. ; Fursa, D.V. ; Röder, J. ; Ehrhardt, H.: Low-Energy Electron-Impact Ionization of Helium. In: *Phys. Rev. A* **57** (1998), S. R3161–R3164
- [BHS 96] Bartschat, K. ; Hudson, E.T. ; Scott, M.P. ; Burke, P.G. ; Burke, V.M.: Electron–Atom Scattering at Low and Intermediate Energies Using a Pseudo-state/*R*-Matrix Basis. In: *J. Phys. B* **29** (1996), S. 115–123
- [BK] Brabec, T. ; Kapteyn, H.: *Strong Field Laser Physics*. Berlin : Springer-Verlag. – im Druck
- [BKM 00] Bapat, B. ; Keller, S. ; Moshhammer, R. ; Mann, R. ; Ullrich, J.: Double Ionization of Helium in Fast Ion Collisions: the Role of the Correlated Initial State. In: *J. Phys. B* **33** (2000), S. 1437–1446
- [BLD03] Berakdar, J. ; Lahmam-Bennani, A. ; Dal Cappello, C.: The Electron-Impact Double Ionization of Atoms: An Insight Into the Four-Body Coulomb Scattering Dynamics. In: *Phys. Rep.* **374** (2003), S. 91–164
- [BMK 99] Bapat, B. ; Moshhammer, R. ; Keller, S. ; Schmitt, W. ; Cassimi, A. ; Adoui, L. ; Kollmus, H. ; Dörner, R. ; Weber, Th. ; Khayyat, K. ; Mann, R. ; Grandin, J.P. ; Ullrich, J.: Double Ionization of Helium in Fast Ion Collisions: The Role of Momentum Transfer. In: *J. Phys. B* **32** (1999), S. 1859–1872

- [BRF98] Bronk, T. ; Reading, J.F. ; Ford, A.L.: Intermediate-State Dynamic Correlation in the Ionization of Helium. In: *J. Phys. B* **31** (1998), S. 2477–2488
- [BS92] Bray, I. ; Stelbovics, A.T.: Convergent Close-Coupling Calculations of Electron-Hydrogen Scattering. In: *Phys. Rev. A* **46** (1992), S. 6995–7011
- [BS00] Briggs, J.S. ; Schmidt, V.: Differential Cross Sections for Photo-Double-Ionization of the Helium Atom. In: *J. Phys. B* **33** (2000), S. R1–R48
- [BSB 02] Bartschat, K. ; Scott, M.P. ; Burke, P.G. ; Stitt, T. ; Scott, N.S. ; Grum-Grzhimailo, A.N. ; Riordan, S. ; Ver Steeg, G. ; Strakhova, S.I.: Convergence of Energy-Differential Ionization Cross Sections Obtained from a *T*-Matrix Approach with *R*-Matrix Wave Functions. In: *Phys. Rev. A* **65** (2002), S. 062715
- [BUU 03] Baltuška, A. ; Udern, Th. ; Uiberacker, M. ; Hentschel, M. ; Goulielmakis, E. ; Gohle, Ch. ; Holzwarth, R. ; Yakovlev, V.S. ; Scrinzi, A. ; Hänsch, T.W. ; Krausz, F.: Attosecond Control of Electronic Processes by Intense Laser Fields. In: *Nature* **421** (2003), S. 611–615
- [CAB 88] Charlton, M. ; Andersen, L.H. ; Brun-Nilsen, L. ; Deutch, B.I. ; Hvelplund, P. ; Jacobsen, F.M. ; Knudsen, H. ; Laricchia, G. ; Poulsen, M. R. ; Pedersen, J.O.: Positron and Electron Impact Double Ionisation of Helium. In: *J. Phys. B* **21** (1988), S. L545–L549
- [Cal85] Callaway, J.: Scattering of Electrons by Atomic Hydrogen at Intermediate Energies: Elastic Scattering and $n = 2$ Excitation from 12 to 54 eV. In: *Phys. Rev. A* **32** (1985), S. 775–783
- [CM83] Crothers, D.S.F. ; McCann, J.F.: Ionisation of Atoms by Ion Impact. In: *J. Phys. B* **16** (1983), S. 3229–3242
- [CMD94] Coplan, M.A. ; Moore, J.H. ; Doering, J.P.: ($e, 2e$) Spectroscopy. In: *Rev. Mod. Phys.* **66** (1994), S. 985–1014
- [COG02] Ciappina, M.F. ; Otranto, S. ; Garibotti, C.R.: Correlated Eikonal Initial State in Ion-Atom Collisions. In: *Phys. Rev. A* **66** (2002), S. 052711
- [CR70] Crooks, G.B. ; Rudd, M.E.: Experimental Evidence for the Mechanism of Charge Transfer Into Continuum States. In: *Phys. Rev. Lett.* **25** (1970), S. 1599–1601

- [Cro82] Crothers, D.S.F.: Refined Orthogonal Variational Treatment of Continuum Distorted Waves. In: *J. Phys. B* **15** (1982), S. 2061–2074
- [Daw92] Dawydow, A.S.: *Quantenmechanik*. 8. Aufl. Leipzig : Barth, 1992
- [DKS 01] Dorn, A. ; Kheifets, A. ; Schröter, C.D. ; Najjari, B. ; Höhr, C. ; Moshhammer, R. ; Ullrich, J.: Double Ionization of Helium by Electron-Impact: Complete Pictures of the Four-Body Breakup Dynamics. In: *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001), S. 3755–3758
- [DKS 02] Dorn, A. ; Kheifets, A. ; Schröter, C.D. ; Najjari, B. ; Höhr, C. ; Moshhammer, R. ; Ullrich, J.: Double Ionization of Helium by Electron Impact in the Impulsive Regime. In: *Phys. Rev. A* **65** (2002), S. 032709
- [DKS 03] Dorn, A. ; Kheifets, A. ; Schröter, C.D. ; Höhr, C. ; Sakhelashvili, G. ; Moshhammer, R. ; Lower, J. ; Ullrich, J.: Appearance and Disappearance of the Second Born Effects in the ($e, 3e$) Reaction on He. In: *Phys. Rev. A* **68** (2003), S. 012715
- [DMJ 00] Dörner, R. ; Mergel, V. ; Jagutzki, O. ; Spielberger, L. ; Ullrich, J. ; Moshhammer, R. ; Schmidt-Böcking, H.: Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy: A 'Momentum Microscope' to View Atomic Collision Dynamics. In: *Phys. Rep.* **330** (2000), S. 95–192
- [DMS 99] Dorn, A. ; Moshhammer, R. ; Schröter, C.D. ; Zouros, T.J.M. ; Schmitt, W. ; Kollmus, H. ; Mann, R. ; Ullrich, J.: Double Ionization of Helium by Fast Electron Impact. In: *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999), S. 2496–2499
- [DuM33] DuMond, J.W.M.: The Linear Momenta of Electrons in Atoms and in Solid Bodies as Revealed By X-Ray Scattering. In: *Rev. Mod. Phys.* **5** (1933), S. 1–33
- [ECM 92] Engel, E. ; Chevary, J.A. ; MacDonald, L.D. ; Vosko, S.H.: Asymptotic Properties of Exchange Energy Density and the Exchange Potential of Finite Systems: Relevance for Generalized Gradient Approximations. In: *Z. Phys. D* **23** (1992), S. 7–14
- [EJK 86] Ehrhardt, H. ; Jung, K. ; Knoth, G. ; Schlemmer, P.: Differential Cross Sections of Direct Single Electron Impact Ionization. In: *Z. Phys. D* **1** (1986), S. 3–32
- [EST 69] Ehrhardt, H. ; Schulz, M. ; Tekaats, T. ; Willmann, K.: Ionization of Helium: Angular Correlation of the Scattered and Ejected Electrons. In: *Phys. Rev. Lett.* **22** (1969), S. 89–92

- [FA95] Franz, A. ; Altick, P.L.: Electron-Impact Ionization-Excitation Cross Sections of Helium. In: *J. Phys. B* **28** (1995), S. 4639–4649
- [FFD 02] Fischer, D. ; Feuerstein, B. ; DuBois, R.D. ; Moshhammer, R. ; Crespo López-Urrutia, J.R. ; Draganic, I. ; Lörch, H. ; Perumal, A.N. ; Ullrich, J.: State-Resolved Measurements of Single-Electron Capture in Slow Ne^{7+} - and Ne^{8+} -Helium Collisions. In: *J. Phys. B* **35** (2002), S. 1369–1377
- [FGM 96] Fainstein, P.D. ; Gulyás, L. ; Martín, F. ; Salin, A.: Angular Asymmetry of Low-Energy Electron Emission in Ion-Atom Collisions. In: *Phys. Rev. A* **53** (1996), S. 3243–3246
- [Fis00] Fischer, Daniel: *Aufbau eines Reaktionsmikroskops zur Untersuchung von Ion-Atom-Stößen*, Albert-Ludwigs-Universität, Freiburg, Diplomarbeit, 2000
- [FMD 03] Fischer, D. ; Moshhammer, R. ; Dorn, A. ; Crespo López-Urrutia, J.R. ; Feuerstein, B. ; Höhr, C. ; Schröter, C.D. ; Hagmann, S. ; Kollmus, H. ; Mann, R. ; Bapat, B. ; Ullrich, J.: Projectile-Charge Sign Dependence of Four-Particle Dynamics in Helium Double Ionization. In: *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003), S. 243201
- [FMS 03] Fischer, D. ; Moshhammer, R. ; Schulz, M. ; Voitkiv, A. ; Ullrich, J.: Fully Differential Cross Sections for the Single Ionization of Helium by Ion Impact. In: *J. Phys. B* **36** (2003), S. 3555–3567
- [FMU01] Fainstein, P.D. ; Moshhammer, R. ; Ullrich, J.: Target Dependence of Slow Electrons Emitted in Swift Ion-Atom Collisions. In: *Phys. Rev. A* **63** (2001), S. 062720
- [FPR87] Fainstein, P.D. ; Ponce, V.H. ; Rivarola, R.D.: Z_p^3 Effects in the Ionization of Helium by Ion Impact. In: *Phys. Rev. A* **36** (1987), S. 3639–3641
- [FPR88] Fainstein, P.D. ; Ponce, V.H. ; Rivarola, R.D.: Ionisation of Helium by Antiproton and Proton Impact. In: *J. Phys. B* **21** (1988), S. 2989–2998
- [FPR91] Fainstein, P.D. ; Ponce, V.H. ; Rivarola, R.D.: Two-Centre Effects in Ionization by Ion Impact. In: *J. Phys. B* **24** (1991), S. 3091–3119
- [FR88] Ford, A.L. ; Reading, J.F.: First Born Calculations of Double Ionisation of Helium by Bare-Ion Projectiles: Contributions from d Orbitals. In: *J. Phys. B* **21** (1988), S. L685–L690

-
- [FR00] Fainstein, P.D. ; Rodríguez, V.D.: Mean Recoil-Ion and Electron Longitudinal Momentum in He Single Ionization by Proton and Antiproton Impact. In: *J. Phys. B* **33** (2000), S. 4637–4645
- [FVM03] Fischer, D. ; Voitkiv, A. ; Moshhammer, R. ; Ullrich, J.: Three-Body Momentum Exchange in Singly Ionizing 2 MeV/u C⁶⁺-Helium Collisions. In: *Phys. Rev. A* **68** (2003), S. 032709
- [GKS00] Gulyás, L. ; Kirchner, T. ; Shirai, T. ; Horbatsch, M.: Origin of Structures in the Low-Energy Single-Electron Continuum in Calculations for Ion Collisions from Argon. In: *Phys. Rev. A* **62** (2000), S. 022702
- [GWB03] Götz, J.R. ; Walter, M. ; Briggs, J.S.: Appearance of Non-First-Born Effects in (*e*, 3*e*) on Helium. In: *J. Phys. B* **36** (2003), S. L77–L83
- [Höh] Höhr, Cornelia: *Kinematisch vollständige Experimente zur Ionisation im Elektronenstoß und Laserfeld*, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation. – in Vorbereitung
- [Höh00] Höhr, Cornelia: *Elektronenstoßexperimente unter Verwendung einer laserangepulsten Elektronenquelle*, Albert-Ludwigs-Universität, Freiburg, Diplomarbeit, 2000
- [HS63] Herman, F. ; Skillman, S.: *Atomic Structure Calculations*. New Jersey : Prentice-Hall, 1963
- [HSW91] Huetz, A. ; Selles, P. ; Waymel, D. ; Mazeau, J.: Wannier Theory for Double Photoionization of Noble Gases. In: *J. Phys. B* **24** (1991), S. 1917–1933
- [Ino71] Inokuti, M.: Inelastic Collisions of Fast Charged Projectiles with Atoms and Molecules – The Bethe Theory Revisited. In: *Reviews of Modern Physics* **43** (1971), S. 297–347
- [Jac62] Jackson, J.D.: *Classical Electrodynamics*. New York : John Wiley & Sons, 1962
- [JKK01] Jäckel, O. ; Krämer, M. ; Karger, C.P. ; Debus, J.: Treatment Planning for Heavy Ion Radiotherapy: Clinical Implementation and Application. In: *Phys. Med. Biol.* **46** (2001), S. 1101–1116
- [JM98] Jones, S. ; Madison, D.H.: Evidence of Initial-State Two-Center Effects for (*e*, 2*e*) Reactions. In: *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), S. 2886–2889

- [KAH 84] Knudsen, H. ; Andersen, L.H. ; Hvelplund, P. ; Astner, G. ; Cederquist, H. ; Danared, H. ; Liljeby, L. ; Rensfelt, K.-G.: An Experimental Investigation of Double Ionisation of Helium Atoms in Collisions with Fast, Fully Stripped Ions. In: *J. Phys. B* **17** (1984), S. 3545–3564
- [KAL 03] Keim, M. ; Achenbach, A. ; Lüdde, H.J. ; Kirchner, T.: Microscopic Response Effects in Collisions of Antiprotons with Helium Atoms and Lithium Ions. In: *Phys. Rev. A* **67** (2003), S. 062711
- [KB98] Kheifets, A.S. ; Bray, I.: Photoionization with Excitation and Double Photoionization of the Helium Isoelectronic Sequence. In: *Phys. Rev. A* **58** (1998), S. 4501–4511
- [KBL 99] Kheifets, A. ; Bray, I. ; Lahmam-Bennani, A. ; Duguet, A. ; Taouil, I.: A Comparative Experimental and Theoretical Investigation of the Electron-Impact Double Ionization of He in the keV Regime. In: *J. Phys. B* **32** (1999), S. 5047–5065
- [KGM 03] Kirchner, T. ; Gulyás, L. ; Moshhammer, R. ; Schulz, M. ; Ullrich, J.: Correlation Effects in Differential Electron-Emission Spectra Obtained from Double Ionisation of He by Fast Au⁵³⁺ Impact. In: *Nucl. Instr. Meth. B* **205** (2003), S. 479–483
- [KKB 02] Knapp, A. ; Kheifets, A. ; Bray, I. ; Weber, Th. ; Landers, A.L. ; Schössler, S. ; Jahnke, T. ; Nickles, J. ; Kammer, S. ; Jagutzki, O. ; Schmidt, L.Ph.H. ; Osipov, T. ; Rösch, J. ; Prior, M.H. ; Schmidt-Böcking, H. ; Cocke, C.L. ; Dörner, R.: Mechanisms of Photo Double Ionization of Helium by 530 eV Photons. In: *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002), S. 033004
- [KM94] Konovalov, D.A. ; McCarthy, I.E.: Convergent *J*-Matrix Calculations of the Poet–Temkin Model of Electron–Hydrogen Scattering. In: *J. Phys. B* **27** (1994), S. L407–L412
- [KUR 86] Kelbch, S. ; Ullrich, J. ; Rauch, W. ; Schmidt-Böcking, H. ; Horbatsch, M. ; Dreizler, R.M. ; Hagmann, S. ; Anholt, R. ; Schlachter, A.S. ; Müller, A. ; Richard, P. ; Stoller, C. ; Cocke, C.L. ; Mann, R. ; Meyerhof, W.E. ; Rasmussen, J.D.: Multiple Ionisation of Ne, Ar, Kr and I by Nearly Relativistic U Ions. In: *J. Phys. B* **19** (1986), S. L47–L52
- [KWD 99] Khayyat, Kh. ; Weber, T. ; Dörner, R. ; Achler, M. ; Mergel, V. ; Spielberger, L. ; Jagutzki, O. ; Meyer, U. ; Ullrich, J. ; Moshhammer, R. ; Schmitt, W. ; Knudsen, H. ; Mikkelsen, U. ; Aggerholm, P. ; Uggerhøj, E. ; Møller,

- S.P. ; Rodríguez, V.D. ; O'Rourke, S.F.C. ; Olson, R.E. ; Fainstein, P.D. ; McGuire, J.H. ; Schmidt-Böcking, H.: Differential Cross Sections in Antiproton- and Proton-Helium Collisions. In: *J. Phys. B* **32** (1999), S. L73–L79
- [KZ97] Kim, Y.E. ; Zubarev, A.L.: Asymptotic Continuum Wave Functions for Three Charged Particles. In: *Phys. Rev. A* **56** (1997), S. 521–526
- [Lah91] Lahmam-Bennani, A.: Recent Developments and Trends in $(e, 2e)$ and $(e, 3e)$ Studies. In: *J. Phys. B* **24** (1991), S. 2401–2442
- [Lah02] Lahmam-Bennani, A.: Thirty Years of Experimental Electron–Electron $(e, 2e)$ Coincidence Studies: Achievements and Perspectives. In: *J. Electron Spectrosc.* **123** (2002), S. 365–376
- [LDD89] Lahmam-Bennani, A. ; Dupré, C. ; Duguet, A.: Electron-Impact Double Ionization of Argon Studied by Double and Triple Coincidence Techniques: The First $(e, 3e)$ Experiment. In: *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989), S. 1582–1585
- [LDD 03] Lahmam-Bennani, A. ; Duguet, A. ; Dal Cappello, C. ; Nebdi, H. ; Piraux, B.: Importance of Non-First-Order Effects in the $(e, 3e)$ Double Ionization of Helium. In: *Phys. Rev. A* **67** (2003), S. 010701
- [LRW99] Lucey, S.P. ; Rasch, J. ; Whelan, C.T.: On the Use of Analytic Ansatz Three-Body Wave Functions in the Study of $(e, 2e)$ and Related Processes. In: *Proc. R. Soc. Lond. A* **455** (1999), S. 349–383
- [LRZ 90] Lee, D.H. ; Richard, P. ; Zouros, T.J.M. ; Sanders, J.M. ; Shinpaugh, J.L. ; Hidmi, H.: Binary-Encounter Electrons Observed in 0° in Collisions of 1–2-MeV/amu H^+ , C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} , and F^{9+} Ions with H_2 and He Targets. In: *Phys. Rev. A* **41** (1990), S. 4816–4823
- [LTD 99] Lahmam-Bennani, A. ; Taouil, I. ; Duguet, A. ; Lecas, M. ; Avaldi, L. ; Berakdar, J.: Origin of Dips and Peaks in the Absolute Fully Resolved Cross Sections for the Electron-Impact Double Ionization of He. In: *Phys. Rev. A* **59** (1999), S. 3548–3555
- [MC70] McDowell, M.R.C. ; Coleman, J.P.: *Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions*. Amsterdam : North-Holland Publishing Company, 1970
- [McC97] McCartney, M.: The Double Ionization of Helium by Ion Impact. In: *J. Phys. B* **30** (1997), S. L155–L160

- [McG82] McGuire, J.H.: Double Ionization of Helium by Protons and Electrons at High Velocities. In: *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982), S. 1153–1157
- [McG97] McGuire, J.H.: *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions*. Cambridge : Cambridge University Press, 1997
- [MCH72] McConkey, J.W. ; Crowe, A. ; Hender, M.A.: Differential Cross Sections in the Electron Impact Ionization of Atoms and Molecules. In: *Phys. Rev. Lett.* **29** (1972), S. 1–4
- [MFF 03] Madison, D.H. ; Fischer, D. ; Foster, M. ; Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Jones, S. ; Ullrich, J.: Probing Scattering Wave Functions Close to the Nucleus. In: *Phys. Rev. Lett.* (2003). – zur Publikation angenommen
- [MFS 99] Moshhammer, R. ; Fainstein, P.D. ; Schulz, M. ; Schmitt, W. ; Kollmus, H. ; Mann, R. ; Hagmann, S. ; Ullrich, J.: Initial State Dependence of Low-Energy Electron Emission in Fast Ion Atom Collisions. In: *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999), S. 4721–4724
- [MGK 83] Müller, A. ; Groh, W. ; Kneissl, U. ; Heil, R. ; Ströher, H. ; Salzborn, E.: Production of Multiply Charged Rare-Gas Ions by Relativistic Electrons. In: *J. Phys. B* **16** (1983), S. 2039–2052
- [Mil88] Miller, D.R.: Free Jet Sources. In: *Atomic and Molecular Beam Methods*. Oxford/New York : Oxford University Press, 1988, S. 14–53
- [MM33] Massey, H.S.W. ; Mohr, C.B.O.: The Collision of Slow Electrons with Atoms. II. General Theory and Elastic Collisions. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **139** (1933), S. 187–201
- [MMT 02] Morita, S. ; Matsuda, N. ; Toshima, N. ; Hino, K.: Ionization of Stabilized Helium Atoms by Proton and Antiproton Impacts. In: *Phys. Rev. A* **66** (2002), S. 042719
- [MO98] Macek, J.H. ; Ovchinnikov, S.Yu.: Theory of Rapidly Oscillating Electron Angular Distributions in Slow Ion-Atom Collisions. In: *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998), S. 2298–2301
- [MPS 01] Moshhammer, R. ; Perumal, A.N. ; Schulz, M. ; Rodríguez, V.D. ; Kollmus, H. ; Hagmann, S. ; Ullrich, J.: Three-Body Coulomb Problem Probed by Mapping the Bethe Surface in Ionizing Ion-Atom Collisions. In: *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), S. 223201

-
- [MSJ02] Madison, D. ; Schulz, M. ; Jones, S. ; Foster, M. ; Moshhammer, R. ; Ullrich, J.: Comparison of Theoretical and Absolute Experimental Fully Differential Cross Sections for Ion–Atom Impact Ionization. In: *J. Phys. B* **35** (2002), S. 3297–3314
- [MSU97] Moshhammer, R. ; Schmitt, W. ; Ullrich, J. ; Kollmus, H. ; Cassimi, A. ; Dörner, R. ; Jagutzki, O. ; Mann, R. ; Olson, R.E. ; Prinz, H.T. ; Schmidt-Böcking, H. ; Spielberger, L.: Ionization of Helium in the Attosecond Equivalent Light Pulse of 1 GeV/Nucleon U^{92+} Projectiles. In: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997), S. 3621–3624
- [MUK97] Moshhammer, R. ; Ullrich, J. ; Kollmus, H. ; Schmitt, W. ; Unverzagt, M. ; Schmidt-Böcking, H. ; Wood, C.J. ; Olson, R.E.: Complete Momentum Balance for Single Ionization of Helium by Fast Ion Impact: Experiment. In: *Phys. Rev. A* **56** (1997), S. 1351–1363
- [MUS96] Moshhammer, R. ; Unverzagt, M. ; Schmitt, W. ; Ullrich, J. ; Schmidt-Böcking, H.: A 4π Recoil-Ion Electron Momentum Analyzer: A High-Resolution „Microscope“ for the Investigation of Dynamics of Atomic, Molecular and Nuclear Reactions. In: *Nucl. Instr. Meth. B* **108** (1996), S. 425–445
- [MUU94] Moshhammer, R. ; Ullrich, J. ; Unverzagt, M. ; Schmidt, W. ; Jardin, P. ; Olson, R.E. ; Mann, R. ; Dörner, R. ; Mergel, V. ; Buck, U. ; Schmidt-Böcking, H.: Low-Energy Electrons and Their Dynamical Correlation with Recoil Ions for Single Ionization of Helium by Fast, Heavy-Ion Impact. In: *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994), S. 3371–3374
- [MWW98] Marchalant, P.J. ; Whelan, C.T. ; Walters, H.R.J.: Second-Order Effects in (e,2e) Excitation–Ionization of Helium to He^+ ($n = 2$). In: *J. Phys. B* **31** (1998), S. 1141–1178
- [OF01] Olson, R.E. ; Fiol, J.: Mapping of the Bethe Surface in Single-Ionization Ion–Atom Collisions. In: *J. Phys. B* **34** (2001), S. L625–L631
- [OKS96] Ogurtsov, G.N. ; Kroupyshev, A.G. ; Sargsya, M.G. ; Gordeev, Yu.S. ; Ovchinnikov, S.Yu.: Direct Ionization in the Quasimolecule H-He. In: *Phys. Rev. A* **53** (1996), S. 2391–2398
- [Ols86] Olson, R.E.: $v/2$ Electrons in $H^+ + H$ Ionizing Collisions. In: *Phys. Rev. A* **33** (1986), S. 4397–4399

- [Ols87] Olson, R.E.: Collisional Mechanisms for Single and Double Ionization of He by Protons and Antiprotons. In: *Phys. Rev. A* **36** (1987), S. 1519–1521
- [PMS 02] Perumal, A.N. ; Moshhammer, R. ; Schulz, M. ; Ullrich, J.: Dynamics of He Double Ionization in the Non-Perturbative Regime: The Reduction to an Effective Three-Particle Problem. In: *J. Phys. B* **35** (2002), S. 2133–2147
- [RBB03] Röder, J. ; Baertschy, M. ; Bray, I.: Measurements of the Ionization of Atomic Hydrogen by 17.6-eV Electrons. In: *Phys. Rev. A* **67** (2003), S. 010702
- [RBI 99] Rescigno, T.N. ; Baertschy, M. ; Isaacs, W.A. ; McCurdy, C.W.: Collision Breakup in a Quantum System of Three Charged Particles. In: *Science* **286** (1999), S. 2474–2479
- [RBR98] Reid, R.H.G. ; Bartschat, K. ; Raeker, A.: Initial-State, Final-State and Higher-Order Effects in Electron Impact Ionization of Helium Atoms. In: *J. Phys. B* **31** (1998), S. 563–571
- [RDT 83] Rudd, M.E. ; DuBois, R.D. ; Toburen, L.H. ; Radcliffe, C.A. ; Goffe, T.V.: Cross Sections for Ionization of Gases by 5–400-keV Protons and for Electron Capture by 5–150-keV Protons. In: *Phys. Rev. A* **28** (1983), S. 3244–3257
- [REP 97] Röder, J. ; Ehrhardt, H. ; Pan, C. ; Starace, A.F. ; Bray, I. ; Fursa, D.V.: Absolute Triply Differential (e,2e) Cross Section Measurements for H with Comparison to Theory. In: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997), S. 1666–1669
- [RF87] Reading, J.F. ; Ford, A.L.: Double Ionization of Helium by Protons and Antiprotons in the Energy Range 0.30 and 40 MeV. In: *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987), S. 543–546
- [RJ63] Rudd, M.E. ; Jorgensen, Jr., T.: Energy and Angular Distribution of Electrons Ejected from Hydrogen and Helium Gas by Protons. In: *Phys. Rev.* **131** (1963), S. 666–675
- [RKM 92] Rudd, M.E. ; Kim, Y.-K. ; Madison, D.H. ; Gay, T.J.: Electron Production in Proton Collisions with Atoms and Molecules: Energy Distributions. In: *Rev. Mod. Phys.* **64** (1992), S. 441–490

- [Rod03] Rodríguez, V.D.: CDW-EIS Theoretical Calculations of Projectile Deflection for Single Ionization in Highly Charged Ion-Atom Collisions. In: *Nucl. Instr. and Meth.* **205** (2003), S. 498–503
- [RUK85] Richard, P. ; Ullrich, J. ; Kelbch, S. ; Schmidt-Böcking, H. ; Mann, R. ; Cocke, C.L.: The Production of Highly Charged Ar and Xe Recoil Ions by Fast Uranium Impact. In: *Nucl. Instr. and Meth. A* **240** (1985), S. 532–537
- [Rut11] Rutherford, E.: The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom. In: *Phil. Mag.* **21** (1911), S. 669–688
- [RWL95] Rodríguez, V.D. ; Wang, Y.D. ; Lin, C.D.: Theory of Longitudinal Recoil-Ion Momentum Distributions in Ion-Atom Ionization. In: *Phys. Rev. A* **52** (1995), S. R9–R12
- [SAC90] Stefani, G. ; Avaldi, L. ; Camilloni, R.: On the Relevance of the Final Ionic State to the (e,2e) TDCS. In: *J. Phys. B* **23** (1990), S. L227–L231
- [SBK66] Schram, B.L. ; Boerboom, A.J.H. ; Kistemaker, J.: Partial Ionization Cross Sections of Noble Gases for Electrons with Energy 0.5–16 keV.: I. Helium and Neon. In: *Physica* **32** (1966), S. 185–196
- [Sch94] Schmitt, Wolfgang: *Entwicklung und Test eines Rückstoßionen-Spektrometers für das interne Gastarget des ESR*, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt, Diplomarbeit, 1994
- [Sch98] Schmitt, Wolfgang: *Kinematisch vollständige Experimente zur Einfachionisation von Helium durch hochenergetische Schwerionen*, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt, Dissertation, 1998
- [SDR97] Stolterfoht, N. ; DuBois, R.D. ; Rivarola, R.D.: *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions*. Berlin : Springer-Verlag, 1997
- [SG85] Shah, M.B. ; Gilbody, H.B.: Single and Double Ionisation of Helium by H^+ , He^{2+} and Li^{3+} Ions. In: *J. Phys. B* **18** (1985), S. 899–931
- [SMF03a] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Fischer, D. ; Kollmus, H. ; Madison, D.H. ; Jones, S. ; Ullrich, J.: Three-Dimensional Imaging of Atomic Four-Body Processes. In: *Nature* **422** (2003), S. 48–50
- [SMF03b] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Fischer, D. ; Ullrich, J.: Evidence for Significant Projectile–Target Nucleus Scattering in Single Ionization of Helium. (2003). – zur Publikation eingereicht

- [SMG 01] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Gerchikov, L.G. ; Sheinerman, S.A. ; Ullrich, J.: Mapping of Many-Electron Bound States Using the Correlation Function. In: *J. Phys. B* **34** (2001), S. L795–L801
- [SMM 01] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Madison, D.H. ; Olson, R.E. ; Marchalant, P. ; Whelan, C.T. ; Walters, H.R.J. ; Jones, S. ; Foster, M. ; Kollmus, H. ; Cassimi, A. ; Ullrich, J.: Triply Differential Single Ionization Cross Sections in Coplanar and Non-Coplanar Geometry for Fast Heavy Ion-Atom Collisions. In: *J. Phys. B* **34** (2001), S. L305–L311
- [SMP 02] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Perumal, A.N. ; Ullrich, J.: Triply Differential Single-Ionization Cross Sections in Fast Ion–Atom Collisions at Large Perturbations. In: *J. Phys. B* **35** (2002), S. L161–L166
- [SMS 00] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Schmitt, W. ; Kollmus, H. ; Feuerstein, B. ; Mann, R. ; Hagmann, S. ; Ullrich, J.: Electron Correlations Observed Through Intensity Interferometry. In: *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000), S. 863–866
- [SSH 01] Stolterfoht, N. ; Sulik, B. ; Hoffmann, V. ; Skogvall, B. ; Chesnel, J.Y. ; Rangama, J. ; Frémont, F. ; Hennecart, D. ; Cassimi, A. ; Husson, X. ; Landers, A.L. ; Tanis, J.A. ; Galassi, M.E. ; Rivarola, R.D.: Evidence for Interference Effects in Electron Emission from H₂ Colliding with 60 MeV/u Kr³⁴⁺ Ions. In: *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), S. 023201
- [SSS 90] Stolterfoht, N. ; Sommer, K. ; Swenson, J.K. ; Havener, C.C. ; Meyer, F.W.: Electron-Correlation Effects in Double-Electron-Capture Collisions of 60-keV C⁶⁺ with He. In: *Phys. Rev. A* **42** (1990), S. 5396–5404
- [TLD 98] Taouil, I. ; Lahmam-Bennani, A. ; Duguet, A. ; Avaldi, L.: Fully Determined (*e*, 3*e*) Experiments for the Double Ionization of Helium. In: *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), S. 4600–4603
- [TRW 98] Tribedi, L.C. ; Richards, P. ; Wang, Y.D. ; Lin, C.D. ; Gulyás, L. ; Rudd, M.E.: Ionization Dynamics in Fast Ion-Atom Collisions. In: *Phys. Rev. A* **58** (1998), S. 3619–3625
- [TS76] Talman, J.D. ; Shadwick, W.F.: Optimized Effective Atomic Central Potential. In: *Phys. Rev. A* **14** (1976), S. 36–40
- [UDB 94] Ullrich, J. ; Dörner, R. ; Berg, H. ; Cocke, C.L. ; Euler, J. ; Froschauer, K. ; Hagmann, S. ; Jagutzki, O. ; Lencinas, S. ; Mann, R. ; Mergel, V. ; Moshhammer, R. ; Schmidt-Böcking, H. ; Tawara, H. ; Unverzagt,

- M.: Single and Double Ionization of Helium for Fast, Highly-Charged Ion-Impact. In: *Nucl. Instr. Meth. B* **87** (1994), S. 70–75
- [UMB 93] Ullrich, J. ; Moshhammer, R. ; Berg, H. ; Mann, R. ; Tawara, H. ; Dörner, R. ; Euler, J. ; Schmidt-Böcking, H. ; Hagmann, S. ; Cocke, C.L. ; Unverzagt, M. ; Lencinas, S. ; Mergel, V.: High-Velocity Limit for the Ratio of Helium Double-to-Single Ionization for Highly Charged, Bare-Ion Impact. In: *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993), S. 1697–1700
- [UMD 97] Ullrich, J. ; Moshhammer, R. ; Dörner, R. ; Jagutzki, O. ; Mergel, V. ; Schmidt-Böcking, H. ; Spielberger, L.: Recoil-Ion Momentum Spectroscopy. In: *J. Phys. B.* **30** (1997), S. 2917–2974
- [UMD 03] Ullrich, J. ; Moshhammer, R. ; Dorn, A. ; Dörner, R. ; Schmidt, L.Ph.H. ; Schmidt-Böcking, H.: Recoil-Ion and Electron Momentum Spectroscopy: Reaction-Microscopes. In: *Rep. Prog. Phys.* **66** (2003), S. 1463–1545
- [US03] Ullrich, J. ; Shevelko, S.: *Many Particle Quantum-Dynamics in Atomic and Molecular Fragmentation*. Berlin : Springer-Verlag, 2003
- [VNU03] Voitkiv, A.B. ; Najjari, B. ; Ullrich, J.: On the Higher-Order Effect in Target Single Ionization by Bare Ions in the Perturbative Regime. In: *J. Phys. B* **36** (2003), S. 2591–2609
- [Völ75] Völlinger, Peter: *Die Erzeugung subnanosekunden gepulster Schwerionenstrahlen am MP-Tandem Van de Graaff Beschleuniger*, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 1975
- [Vri67] Vriens, L.: Binary-Encounter Proton-Atom Collision Theory. In: *Proc. Phys. Soc.* **90** (1967), S. 935–944
- [VU01] Voitkiv, A.B. ; Ullrich, J.: On the Inter-Relation Between Ionization of Light Atoms by Virtual and Real Photons. In: *J. Phys. B* **34** (2001), S. 4513–4520
- [vW86] van Wyngaarden, W.L. ; Walters, H.R.J.: Elastic Scattering and Excitation of the $1s \rightarrow 2s$ and $1s \rightarrow 2p$ Transitions in Atomic Hydrogen by Electrons at Medium to High Energies. In: *J. Phys. B* **19** (1986), S. 929–968
- [Wei34] Weizsäcker, C.F.: Ausstrahlung bei Stößen sehr schneller Elektronen. In: *Z. Phys.* **88** (1934), S. 612–625

- [WFO97] Wood, C.J. ; Feeler, C.R. ; Olson, R.E.: Projectile Charge-State Dependence on Final-State Momentum Distributions for Single Ionization of Helium. In: *Phys. Rev. A* **56** (1997), S. 3701–3709
- [Wil34] Williams, E.J.: Nature of the High Energy Particles of Penetrating Radiation and Status of Ionization and Radiation Formulae. In: *Phys. Rev.* **45** (1934), S. 729–730
- [WKD01] Weber, T. ; Khayyat, K. ; Dörner, R. ; Rodríguez, V.D. ; Mergel, V. ; Jagutzki, O. ; Schmitt, L. ; Müller, K.A. ; Afaneh, F. ; Gonzales, A. ; Schmidt-Böcking, H.: Abrupt Rise of the Longitudinal Recoil Ion Momentum Distribution for Ionizing Collisions. In: *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001), S. 224–227

Danksagung

Der Aufbau und die Durchführung eines komplexen Experiments, die Analyse der Daten, die theoretische Beschreibung und die Interpretation der Ergebnisse kann nur durch die Zusammenarbeit, Hilfe und Unterstützung Vieler erfolgreich sein. In den letzten Jahren erhielt ich reichlich dieser Hilfe und Unterstützung. Deshalb möchte ich an dieser Stelle allen danken, die an der Entstehung und am Gelingen dieser Arbeit beteiligt waren.

An erster Stelle danke ich Joachim Ullrich für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe und die Bereitstellung einer Doktorandenstelle. Durch seinen Überblick und seine Diskussionsbereitschaft gab er entscheidende Impulse zum Verständnis und zur Interpretation der Ergebnisse. Besonders schätzen lernte ich in den letzten Jahren seine Begeisterung für die Physik, die nicht selten ansteckend wirkte und noch wirkt.

Besonders herzlich bedanke ich mich bei meinem Betreuer Robert Moshhammer. Ohne sein stetes Interesse, sein *Know-How* in experimentellen Fragen, seine Hilfe bei der Datenanalyse, seine Ideen zur Interpretation der Ergebnisse und seine kritischen Fragen wäre das Gelingen dieser Arbeit undenkbar gewesen. Kurz: Er war immer „am Start“ wenn „was ging“.

Alexander Dorn danke ich für die Bereitstellung der $(e, 2e)$ - und $(e, 3e)$ -Daten, für seine Hilfe bei den Strahlzeiten und seine Diskussionsbereitschaft.

Claus Dieter Schröter gebührt Dank für seine Unterstützung bei der Durchführung der Experimente. Nicht zuletzt danke ich ihm für das kritische Korrekturlesen dieser Arbeit, das weit über das einfache Korrigieren von Rechtschreib- und Grammatikfehlern hinausging.

All denen, die beim Aufbau des Experiments und während der Strahlzeiten geholfen haben, sei herzlich gedankt. Dies sind (außer den bereits oben genannten) José Ramón Crespo López-Urrutia, Bhas Bapat, Bernold Feuerstein, Siegbert Hagmann, Conny Höhr, Holger Kollmus und Rido Mann.

Zu Dank verpflichtet bin ich Michael Schulz, der einen wesentlichen Anteil an der Auswertung der Daten und der Interpretation und Veröffentlichung der Ergebnisse hatte. Alexander Voitkiv, Don Madison (und Mitarbeitern) und Anatoli Kheifets danke ich für die Unterstützung von theoretischer Seite und die Bereitstellung ihrer Resultate.

Herzlich bedanke ich mich bei den „technischen“ Mitarbeitern des Max-Planck-Instituts, die die Durchführung der Experimente erst möglich gemacht haben. Besonderer Dank gilt Herrn Hahn und seinen Kollegen für die unkomplizierte, schnelle und kompetente Hilfe beim Aufbau des Experiments. Herrn Repnow und der Beschleuniger-Mannschaft sei für die exzellente Arbeit bei der Bereitstellung der

Ionenstrahlen gedankt.

Bei Alexander Voitkiv, Bennaceur Najjari und Tom Kirchner bedanke ich mich herzlich für die Beantwortung zahlloser, nicht immer intelligenter, „kurzer“, theoretischer Fragen („I have a short question . . .“). In stundenlangen Diskussionen haben sie geduldig (und hoffentlich erfolgreich) versucht, mir die Theorie atomarer Stöße näherzubringen.

Ein besonders herzlicher Dank gilt meiner Mit-Doktorandin Conny Höhr. Sie ist nicht nur meine Lieblingszimmerkollegin, sie hat mir auch durch ihre Unterstützung über so manches physikalische aber auch private Tief hinweggeholfen.

Zu Dank verpflichtet bin ich weiterhin all denjenigen, die meine Zeit in Heidelberg auf die ein oder andere Weise geprägt haben. Stellvertretend für alle aus unserer Gruppe, die mir in den letzten Jahren zu guten Freunden geworden sind, möchte ich Vitor Luiz Bastos de Jesus, Rosario Soria Orts und Antonio Javier González Martínez nennen. Sie und viele andere haben dazu beigetragen, daß neben der Physik auch das Privatleben nicht zu kurz kam.

Zuletzt und vor allem gilt mein Dank meinen Eltern. Ohne ihre materielle und vor allem ohne ihre moralische Unterstützung, wäre diese Arbeit wohl nie vollendet worden.