

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

vorgelegt von  
Dipl.-Phys. Thomas Ferger  
aus Hadamar

Tag der mündlichen Prüfung: 19. Juli 2006



Untersuchung der Mehr-Teilchen-Dynamik  
in Stößen von 200 keV  $H^-$  mit Helium  
und  
Aufbau eines kalten atomaren  
Wasserstofftargets für  
Ionisationsexperimente

Gutachter: Priv. Doz. Dr. Robert Moshhammer  
Prof. Dr. Dirk Schwalm



## **Zusammenfassung:**

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde die simultane Ionisation von Projektil und Target im Stoß eines He-Targets mit einem  $H^-$ -Projektil bei einer Projektilenergie von 200 keV kinematisch vollständig untersucht. Die emittierten Elektronen und das Targetion wurden koinzident und impulsaufgelöst über den vollen Raumwinkel detektiert. Durch Vergleich der experimentellen Daten sowohl mit theoretischen Vorhersagen als auch mit aktuellen Elektronenstoßexperimenten konnte gezeigt werden, dass die Ionisation des Targets durch eine Wechselwirkung mit dem nur schwach gebundenen aktiven Elektron des  $H^-$ -Projektils erfolgt und damit alle Merkmale einer reinen Elektronenstoßionisation aufweist. Es zeigte sich aber auch, dass die zugrunde liegende Dynamik, bei der mindestens vier Teilchen aktiv beteiligt sind, zu komplex ist um alle Aspekte theoretisch befriedigend zu beschreiben. Die Emissionscharakteristik des Projektil-Elektrons wird von keiner Rechnung korrekt wiedergegeben. Im zweiten Teil der Arbeit wurde ein Target aus kaltem atomarem Wasserstoff für Ion-Atom Experimente entwickelt und aufgebaut. Da es sich bei atomarem Wasserstoff um das einfachste Atom handelt dessen elektronische Zustände analytisch exakt berechnet werden können, wird es damit erstmals möglich sein die Dynamik des Drei-Körper Systems im Ion-Atom Stoß experimentell zu untersuchen.

## **Abstract:**

In the first part of this work the mutual ionization of target and projectile in collision of a He-target with an  $H^-$ -projectile at 200 keV was investigated in a kinematically complete experiment. The emitted electrons as well as the target ion were detected in coincidence with the ionized projectile. This experiment represents the most detailed measurement of fully differential cross sections for mutual ionization. It could be shown in comparison with theoretical predictions and latest (e,2e) experiments, that the ionization of the target can be described in terms of a pure electron-electron interaction. On the other hand, the ionization of the  $H^-$ -projectile revealed large discrepancies between theories and the performed experiment. None of the existing theories can describe the properties of this four-body system in order to account for the behaviour of the electrons emitted from the  $H^-$ -projectile.

In the second part of this work a target of cold atomic hydrogen was developed and built up. Since atomic hydrogen is the simplest atom, which can be described analytically, it is now possible for the first time to study experimentally the dynamics of three-body systems in detail using ion-atom collisions.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Stoßionisation von Atomen mit geladenen Teilchen</b>	<b>5</b>
1.1 Die Stoßkinematik . . . . .	5
1.2 Die Eigenschaften des Projektils . . . . .	7
1.2.1 Projektilladung und Geschwindigkeit . . . . .	7
1.2.2 Der Einfluss der Projektilmasse . . . . .	8
1.3 Die Eigenschaften eines atomaren Targets . . . . .	8
1.3.1 Das Compton-Profil . . . . .	9
1.3.2 Der Einfluss des Targetkerns . . . . .	9
1.3.3 Beschreibung von Mehrelektronensystemen . . . . .	9
1.4 Ionisationsprozesse . . . . .	11
1.4.1 Die Einfachionisation des Targets . . . . .	11
1.4.2 Die simultane Ionisation von Target und Projektil . . . . .	17
<b>2 Theorie der Ionisation im Ion-Atom-Stoß</b>	<b>23</b>
2.1 Formale Beschreibung der Streuung . . . . .	24
2.2 Die Bornsche Näherung . . . . .	26
2.2.1 Die Erste Bornsche Näherung . . . . .	27
2.2.2 Die Zweite Bornsche Näherung . . . . .	28
2.3 Die 3C Wellenfunktion . . . . .	29
2.4 Die <i>Distorted Wave</i> -Näherung . . . . .	30
2.4.1 CDW-EIS . . . . .	31
2.5 Weitere nicht perturbative Methoden . . . . .	32
2.5.1 Die <i>Exterior Complex Scaling</i> -Methode . . . . .	32
2.5.2 Die <i>Convergent Close Coupling</i> -Näherung . . . . .	33
2.6 Klassische Monte-Carlo Simulation . . . . .	34
2.7 Simultane Target- und Projektilionisation . . . . .	35

<b>3</b>	<b>Experimenteller Aufbau</b>	<b>39</b>
3.1	Hochenergie-Strahlrohr . . . . .	40
3.2	Das Reaktionsmikroskop . . . . .	41
3.2.1	Spektrometer . . . . .	41
3.2.2	Überschall-Gasjet . . . . .	43
3.3	Impulsbestimmung . . . . .	49
3.3.1	Rekonstruktion der Longitudinalimpulse . . . . .	49
3.3.2	Rekonstruktion der Transversalimpulse und der Azimuthal- winkel . . . . .	51
3.4	Akzeptanz und Auflösungsvermögen des Reaktionsmikroskopes . . . . .	54
3.4.1	Akzeptanz . . . . .	54
3.4.2	Auflösung . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Simultane Ionisation bei 200 keV <math>H^- + He</math> Stößen</b>	<b>59</b>
4.1	Das Experiment . . . . .	59
4.2	Einfachdifferentielle Wirkungsquerschnitte . . . . .	61
4.2.1	Longitudinale Impulsverteilung der Elektronen . . . . .	61
4.2.2	Transversale Impulsverteilung der Elektronen . . . . .	65
4.2.3	Energieverteilung der Elektronen . . . . .	66
4.2.4	Impulsverteilung der Rückstoßionen . . . . .	67
4.3	Höher differentielle Wirkungsquerschnitte . . . . .	67
4.3.1	Winkelverteilungen in der Azimuthalebene . . . . .	67
4.4	Untersuchung der Mehr-Teilchen-Wechselwirkung . . . . .	73
4.4.1	Dalitz-Spektren . . . . .	73
4.5	Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte . . . . .	78
4.5.1	Ionisation von He durch $H^-$ . . . . .	78
4.5.2	Vergleich zur Einfachionisation von He im Elektronenstoß . . . . .	85
4.5.3	Ionisation von $H^-$ durch das He-Atom . . . . .	87
<b>5</b>	<b>Das Wasserstofftarget</b>	<b>93</b>
5.1	Erzeugung eines kalten atomaren Wasserstofftargets . . . . .	94
5.1.1	Atomstrahlquellen für atomaren Wasserstoff . . . . .	94
5.1.2	Dissoziationsmechanismen von $H_2$ . . . . .	96
5.1.3	Rekombinationsmechanismen von H . . . . .	97
5.1.4	Temperaturabhängigkeit der Wandrekombination . . . . .	99
5.1.5	Überschallexpansion mit atomarem Wasserstoff . . . . .	100
5.2	Experimentelle Umsetzung und Test des Wasserstofftargets . . . . .	102
5.2.1	Hochfrequenz-Dissoziator . . . . .	102
5.2.2	Aufbau und Test des Gasjets . . . . .	104
5.2.3	Erreichbare Targetdichte und Impulsauffösung . . . . .	107



5.3	Das Wasserstofftarget am Reaktionsmikroskop . . . . .	108
5.3.1	Einbau der Atomstrahlquelle in das Reaktionsmikroskop . . .	109
5.4	Erste Testmessung: Einfachionisation von $H_2/D_2$ durch $C^{4+}$ . . . . .	111
5.4.1	Der Einfluss der dissoziativen Ionisation . . . . .	114
	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>117</b>
	<b>A Anhang</b>	<b>121</b>
A.1	Jetparameter . . . . .	121
A.2	Atomare Einheiten . . . . .	121
A.3	Weitere verwendete Konstanten . . . . .	122
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>123</b>



# Einleitung

Die Untersuchung von Stößen geladener Teilchen mit Atomen ist ein grundlegender Forschungsbereich, der seit Beginn des 20. Jahrhunderts, ausgehend von den ersten Messungen der Streuung von geladenen Teilchen an Atomen von Rutherford [Rut11], entscheidend zur Entwicklung der Quantentheorie beigetragen und somit erhebliche Auswirkungen auf unser heutiges naturwissenschaftliches Weltbild hat.

Unsere heutige Kenntnis atomarer Systeme ist vor allem bezüglich ihrer Struktur sehr detailliert. Mit Hilfe moderner Methoden in der Laserspektroskopie, können elektronische Übergangsenergien mit erstaunlicher Präzision gemessen werden [NHR 00]. Auch auf theoretischer Seite gibt es heute Ansätze, die die Bindungsenergien selbst komplexer Atome unter Berücksichtigung der elektronischen Korrelation (z.B. Multi-Konfigurations-Rechnungen [FS83]) und quantenelektrodynamischer (QED) Effekte [JKB 05] mit enormer Genauigkeit vorhersagen können.

Das Verständnis zeitabhängiger Prozesse hingegen, also der Dynamik in atomaren Vielteilchen-Systemen, ist erheblich weniger detailliert als die Kenntnis atomarer Strukturen, obwohl die zugrunde liegende Wechselwirkung, die Coulombkraft, sehr gut verstanden ist.

Die Bedeutung dieser zeitabhängigen Prozesse reicht bis ins tägliche Leben. Ein Verständnis der zugrunde liegenden Dynamik ist notwendig zur Beschreibung verschiedener biologischer und chemischer Prozesse, wie z.B. der Entstehung von Molekülen. Bei der Tumorthherapie mit schnellen Ionen ist es wichtig, die Energie- und Winkelverteilungen der Elektronen, die bei der Ionisation des bestrahlten Gewebes freigesetzt werden, sowie deren Auswirkungen auf das Gewebe zu kennen, denn gerade letztere sind in entscheidendem Maße für die Zerstörung von DNA-Zellen verantwortlich [BCH 00]. Insgesamt spielt die Dynamik atomarer Stöße in vielen Bereichen der Physik wie beispielsweise in der Plasma-, Astro- und natürlich Atom- und Molekülphysik eine bedeutende Rolle.

Mit der „COLTRIM“-Spektroskopie (COLD Target Recoil Ion Momentum) und dem so genannten „Reaktionsmikroskop“ [UMD 97, UMD 03] steht seit etwas mehr als 10 Jahren die experimentelle Möglichkeit zur Verfügung, detaillierte Daten zur atomaren Dynamik in Stoßprozessen zu gewinnen. Dabei können die geladenen Frag-

mente nach einem atomaren Stoß impuls aufgelöst über den gesamten Raumwinkel in Koinzidenz gemessen werden. Mit Hilfe dieser Technik war es bereits möglich, verschiedene Mechanismen im Stoß von Atomen mit Ionen [SMF 03], Elektronen [DKS01] und Photonen [BDM05, THM00] zu identifizieren sowie mit bestehenden Theorien zu vergleichen. Die Einfachionisation eines H-Targets im Elektronenstoß bei niedrigen Projektilenergien wird als numerisch exakt gelöst betrachtet [RBI99]. Beim Ionenstoß hingegen konnten unter anderem Schwächen theoretischer Modelle in der Beschreibung selbst einfachster Systeme, z.B. der Einfachionisation von Helium in Stößen mit sehr schnellen  $C^{6+}$ -Ionen [SMF 03], aufgedeckt werden, die bis heute allerdings noch nicht vollständig verstanden sind.

Das Ziel dieser Arbeit war die Erweiterung des Verständnisses von Ion-Atom-Stößen. Dazu standen zwei unterschiedliche Aspekte der Ionisation im Vordergrund. Im ersten Teil dieser Arbeit wurde die simultane Ionisation von Target und Projektil untersucht. Der zweite Teil dieser Arbeit befasst sich mit der Herstellung eines kalten atomaren Wasserstofftargets, dass aus theoretischer Sicht das einfachste atomare Target darstellt.

Die Besonderheit des durchgeführten Experiments zur simultanen Projektil- und Targetionisation bestand darin, dass ein  $H^-$ -Projektil verwendet wurde, dessen Elektron nur mit einer Bindungsenergie von 0,75 eV gebunden ist. Dadurch kann man das Elektron als „quasifrei“ betrachten, und die Ionisation des Targets durch den Stoß mit diesem Projektilelektron beschreiben sowie mit bestehenden Theorien vergleichen. Auf diese Weise ist es möglich Elektron-Atom Stöße bei niedrigen Energien zu untersuchen, die direkt, z.B. mit Hilfe eines monoenergetischen Elektronenstrahls, nur sehr schwer zugänglich sind. Dadurch, dass das Projektil beim Ionisationsprozess neutralisiert wird, also nach dem Stoß nicht mehr durch die langreichweitige Coulombkraft mit dem Target wechselwirkt, verstärkt sich die Analogie dieses Stoßsystems mit einem  $(e,2e)$ -Stoß<sup>1</sup>. Inwieweit dieses Bild des quasifreien Projektilelektrons zutrifft und welchen Einfluss die innere Struktur des  $H^-$ -Ions auf die Dynamik der Ionisation hat, wurde ebenfalls untersucht. Dazu wurden die gemessenen Daten zur Ionisation eines He-Targets durch das  $H^-$ -Projektil mit verschiedenen theoretischen Vorhersagen und einem  $(e,2e)$ -Experiment verglichen.

Ein weiterer Aspekt dieser Messung war die Untersuchung der Projektilionisation durch das neutrale He-Target. In den Fällen, in denen der Targetkern unbeteiligt am Stoß ist, kann die Ionisation des Projektilions als eine Ionisation durch ein quasifreies Elektron betrachtet werden. Dies entspricht der Elektronenstoßionisation eines Ions, also einem Prozess, der von grundlegender Bedeutung zur Beschreibung aller

---

<sup>1</sup>In der Literatur wird die Einfachionisation eines Targets im Elektronenstoß häufig als  $(e,2e)$ -Prozess bezeichnet, wobei sich diese Notation auf die Anzahl der freien Elektronen im Anfangs- bzw. Endzustand bezieht.

Plasmen ist.

Die experimentelle Separation der Ionisation des Targets durch das Projektilektron bzw. durch den Projektilkern gelang erstmals Montenegro *et al.* [MMM 92]. Dabei wurde der totale Wirkungsquerschnitt beim Stoß eines He-Targets mit einem He<sup>+</sup>-Ion gemessen und mit einer semiklassischen theoretischen Vorhersage verglichen. Die erste ereignisweise Trennung dieser beiden Prozesse anhand der Winkel der Stoßfragmente zueinander konnte von Kollmus *et al.* [KMO 02] bei der Kollision von Helium mit einem C<sup>2+</sup>-Projektil durchgeführt werden. Bei all diesen Messungen war das aktive Projektilektron ähnlich stark wie das aktive Targetelektron gebunden. Zur Zeit liefern direkte Messungen des Elektron-Ion Stoßes aufgrund der geringen Luminosität in Elektronenkühlern oder Speicherringen differentielle Wirkungsquerschnitte lediglich für bestimmte Geometrien und langsame Stöße [Mue96, BZG 04]. Mit der Messung der Projektilionisation durch das He-Target können also ansonsten nicht zugängliche hochdifferentielle Wirkungsquerschnitte gewonnen werden.

Der zweite Teil dieser Arbeit befasste sich mit der Herstellung eines kalten atomaren Wasserstofftargets zur Untersuchung von Ion-Atom Stößen. Wie oben bereits erwähnt treten selbst bei den besten zur Verfügung stehenden Theorien signifikante Abweichungen bei allen bisher durchgeführten kinematisch vollständigen Experimenten auf [SMF 03].

Das einfachste bisher verwendete Target ist Helium. Ein möglicher Grund für das Versagen der Rechnungen könnte daher die Elektron-Elektron Korrelation im He-Grundzustand sein, die in den theoretischen Modellen nur näherungsweise oder gar nicht berücksichtigt werden kann. Damit ist allerdings nicht auszuschließen, dass neben der genannten Schwierigkeit ein grundlegendes Problem bei der theoretischen Behandlung der Ionenstoß induzierten Ionisation besteht. Um dies zu testen sind Experimente zum einfachsten System, der Ionisation von H-Atomen in Stößen mit schnellen Protonen, unumgänglich. Nur für diesen Fall ist der elektronische Anfangszustand des Targets analytisch zugänglich und nur dann handelt es sich um ein rein quantenmechanisches Drei-Körper-Coulomb-Problem. Der Vergleich mit theoretischen Vorhersagen wird klären, ob nur die korrelierte Bewegung der Elektronen im Targetatom für die beobachtete Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie verantwortlich ist, oder ob tatsächlich grundlegende Probleme bei der Beschreibung der Ionisationsdynamik bestehen.

Für das in dieser Arbeit aufgebaute Target für atomaren Wasserstoff bestehen im Wesentlichen zwei Anforderungen, damit Ionenstoß-Experimente durchgeführt werden können. Zum einen muss die Geschwindigkeitsverteilung der erzeugten H-Atome möglichst schmal sein, d.h. die Atome sollen kalt sein, um eine hohe Auflösung zu erlauben. Zum anderen muss ein geometrisch enger und wohl begrenzter Strahl mit ausreichend hoher Dichte geformt werden, der in das bereits bestehende Reakti-

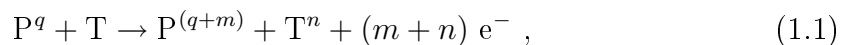
onsmikroskop eingebaut werden kann. In dieser Arbeit wird beschrieben, wie dies erreicht wurde und in einer ersten Testmessung verwendet werden konnte.

Im ersten Kapitel dieser Arbeit wird ein Überblick über die grundlegenden Eigenschaften der stoßinduzierten Ionisation gegeben. In Kapitel 2 wird kurz auf die formale theoretische Beschreibung der Streuung eingegangen, sowie auf verschiedene quantenmechanische und klassische Rechnungen, auf die in dieser Arbeit verwiesen wird. Kapitel 3 beschreibt die Eigenschaften des verwendeten experimentellen Aufbaus. Die Funktionsweise des verwendeten Reaktionsmikroskopes wird beschrieben, sowie Auflösung und Akzeptanz der durchgeführten Messung. Die Ergebnisse zur simultanen Ionisation von Helium im Stoß mit einem  $\text{H}^-$ -Projektil bei einer Stoßenergie von 200 keV werden in Kapitel 4 diskutiert. Anhand von einfach- und mehrfach differentiellen Wirkungsquerschnitten wird die Ionisation des He-Targets und des  $\text{H}^-$ -Projektils auf zugrunde liegende Wechselwirkungen zwischen den beteiligten Stoßpartnern untersucht. In Kapitel 5 werden der Aufbau des kalten atomaren Wasserstofftargets für Ion-Atom-Stoßexperimente beschrieben und Ergebnisse einer ersten Testmessung vorgestellt.

# Kapitel 1

## Stoßionisation von Atomen mit geladenen Teilchen

In dieser Arbeit wird sowohl auf die Ionisation des neutralen atomaren Targets als auch auf die gleichzeitige Ionisation von Target und Projektil eingegangen. Generell lassen sich diese Mechanismen beschreiben durch die Reaktionsgleichung



wobei das q-fach geladene Projektil (P) vor dem Stoß positiv oder negativ geladen sein kann. Die Anzahl der emittierten Elektronen setzt sich aus der Ladungsänderung  $m$  des Projektils und der Ladungsänderung  $n$  des Targets (T) zusammen. Das ionisierte Targetatom wird als „Rückstoßion“ (engl.: *recoil ion*) bezeichnet. Die emittierten Elektronen des Targets und des Projektils werden als Targetelektron bzw. Projektilelektron bezeichnet.

Im Folgenden werden einige grundlegende Eigenschaften unterschiedlicher Stoßsysteme diskutiert.

### 1.1 Die Stoßkinematik

Bei den in dieser Arbeit betrachteten Stoßsystemen verändert sich beim Stoß der Ladungszustand der Stoßpartner durch die Emission von einem oder mehreren Elektronen. Unter der Annahme, dass das Target vor dem Stoß in Ruhe ist führt die Impuls- und Energieerhaltung zu:

$$\mathbf{p}_p^i = \mathbf{p}_p^f + \sum_{j=1}^n \mathbf{k}_{e,j} + \mathbf{p}_r \quad (1.2)$$

$$E_p^i = E_p^f + \varepsilon_b + \sum_{j=1}^n E_{e,j} + E_r . \quad (1.3)$$

Hierbei ist  $\mathbf{p}_p^i$  der Impuls des Projektils vor dem Stoß und  $\mathbf{p}_p^f$  die Summe der Impulse aller Projekttilfragmente nach dem Stoß im Ruhesystem des Targets.  $\mathbf{p}_r^f$  ist dementsprechend der Impuls des Rückstoßions und  $\mathbf{k}_{e,j}$  sind die Impulse der Targetelektronen nach dem Stoß.

In Gleichung (1.3) sind  $E_p^{(i,f)}$  die Energien aller Projekttilfragmente vor und nach dem Stoß ebenfalls im Ruhesystem des Targets,  $E_r$  ist die Energie des Rückstoßions und  $E_{e,j}$  sind die Energien der Targetelektronen.  $\varepsilon_b$  ist die (positive) Bindungsenergie die überwunden werden muss, um die Target- und gegebenenfalls Projektilelektronen ins Kontinuum zu emittieren. In Gleichung (1.3) wird angenommen, dass im Stoß keine elektronische Anregung stattfindet.

Bei gleichen Impulsen von Rückstoßion und Elektronen ist die kinetische Energie des Rückstoßions um den Faktor  $M_T \cdot 1836$  ( $M_T$  ist die Masse des Targets in amu) kleiner als die Energie der emittierten Elektronen. Daher kann in den meisten Fällen die Energie des Rückstoßions bei der Energieerhaltung vernachlässigt werden. Für Stoßsysteme mit großen Projektilenergien ist die Impulsänderung  $\Delta\mathbf{p}$  des Projektils

$$\Delta\mathbf{p} = \mathbf{p}_p^f - \mathbf{p}_p^i \quad (1.4)$$

relativ klein. In diesem Fall kann die Änderung der kinetischen Energie  $\Delta E_p$  des Projektilsystems in sehr guter Näherung als

$$\Delta E_p = E_p^f - E_p^i \approx \frac{\mathbf{p}_p^i}{M_p} \cdot \Delta\mathbf{p}_p + \sum_{k=1}^m E_{e,k}^{(PS)} \quad (1.5)$$

geschrieben werden. Dabei ist  $M_p$  die Masse des Projektils und  $E_{e,k}^{(PS)}$  sind die Energien der emittierten Projektilelektronen im Ruhesystem des Projektils.

Der Impuls des Projektils kann in einen Anteil parallel zum einlaufenden Projekttilstrahl  $\mathbf{p}_{\parallel} = (0, 0, p_z)$  und in einen Anteil senkrecht dazu  $\mathbf{p}_{\perp} = (p_x, p_y, 0)$  aufgeteilt werden, wobei die z-Achse in Richtung des Projekttilstrahls verläuft. Gleichung (1.5) vereinfacht sich daher mit  $|\mathbf{p}_p^i| = |\mathbf{p}_{\parallel}| = M_p \cdot v_p$  zu

$$\Delta E_p \approx v_p \cdot \Delta p_{p\parallel} + \sum_{k=1}^m E_{e,k}^{(PS)} . \quad (1.6)$$

$v_p$  ist die Projektilgeschwindigkeit vor dem Stoß.

Der Impulsübertrag  $\mathbf{q}$  des Projektils auf das Target wird ganz allgemein definiert als:

$$\mathbf{q} = -\Delta\mathbf{p} = \sum_{j=1}^n \mathbf{k}_{e,j} + \mathbf{p}_r . \quad (1.7)$$



Mit Gleichung (1.6) und der Energieerhaltung (1.3) kann der Anteil des Impulsübertrages in  $z$ -Richtung  $q_{\parallel}$  geschrieben werden als:

$$q_{\parallel} = \frac{\Delta E_p}{v_p} = \left( \varepsilon_b + \sum_{j=1}^n E_{e,j} + \sum_{k=1}^m E_{e,k}^{(PS)} \right) \cdot \frac{1}{v_p} . \quad (1.8)$$

Damit können alleine durch die Bestimmung von  $q_{\parallel}$  wichtige Aussagen über die Energiebilanz des Stoßes gemacht werden. Der minimale Impulsübertrag  $q_{\min}$ , der notwendig zur Ionisation des Targets und gegebenenfalls des Projektils ist, ergibt sich aus Gleichung (1.8) für den Fall, dass die kinetische Energie der emittierten Elektronen  $E_e = 0$  ist, zu  $q_{\min} = \varepsilon_b/v_p$ .

## 1.2 Die Eigenschaften des Projektils

### 1.2.1 Projektilladung und Geschwindigkeit

In der Beschreibung des Stoßes durch die „Erste Bornsche Näherung“ (s. Kapitel 2.2.1) gilt für den Wirkungsquerschnitt  $\sigma \sim (Z_p/v_p)^2$  (unter Vernachlässigung eines sich langsam ändernden Beitrags von  $\ln v_p$ ). Die Größe  $\eta = Z_p/v_p$  ist dabei ein Maß für die Störung des Targetsystems durch das Projektil. Anschaulich entspricht dies dem Umstand, dass die Stoßzeit bei langsamerer Projektilgeschwindigkeit länger wird, wodurch die Wahrscheinlichkeit einer Ionisation steigt.

Das Vorzeichen des Projektils hat in der Ersten Bornschen Näherung, aufgrund der Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes von  $(Z_p/v_p)^2$ , keinen Einfluss. Allerdings wird das Targetelektron vor und nach dem Stoß durch das langreichweitige Coulombpotential des Projektils beeinflusst. Diese „Zwei-Zentren-Effekte“ sind so genannte „Beiträge höherer Ordnung“ bei denen das Projektil mehrmals mit dem Target wechselwirkt ([FPR91, SDR97] und Kapitel 2). Bei der Ersten Bornschen Näherung hingegen werden nur Beiträge erster Ordnung betrachtet, also Mechanismen bei denen das Projektil nur einmal mit dem Target wechselwirkt.

Unterschiedliche Projektilladungen beeinflussen außerdem die Dynamik des Stoßprozesses. So kann das emittierte Elektron durch eine Wechselwirkung mit dem auslaufenden Projektil abgelenkt werden. Bei einer negativen Ladung des Projektils erfährt das Elektron eine repulsive Kraft, bei einer positiven Ladung eine attraktive. Diese so genannte *Post Collision Interaction* (PCI) äußert sich beispielsweise darin, dass Elektronen bei einem positiven Projektil bevorzugt nach vorne emittiert werden, bei einem negativen Projektil hingegen nach hinten.

### 1.2.2 Der Einfluss der Projektilmasse

Neben dem Vorzeichen der Projektilladung ist der Wirkungsquerschnitt in der Ersten Bornschen Näherung ebenfalls unabhängig von der Projektilmasse. Allerdings unterscheidet sich beispielsweise der Impuls eines Protons und eines Elektrons bei der gleichen Geschwindigkeit um einen Faktor  $m_p/m_e=1836$ . Auch die Energie, die bei einem Protonenstoß auf ein Elektron übertragen werden kann ist wesentlich größer als bei einem Elektronenstoß. So kann das emittierte Elektron im Proton-Atom-Stoß die maximale Energie von

$$E_{e, \max} = 2 \cdot v_P^2 \quad (1.9)$$

aufnehmen. Dies ist genau dann möglich, wenn das Projektil zentral mit dem Targetelektron stößt (*Binary Encounter* [SDR97]). Das Targetelektron wird dabei mit der doppelten Projektilgeschwindigkeit emittiert. Beim Elektron-Atom-Stoß ist der maximale Energieübertrag auf das Targetelektron deutlich geringer:

$$E_{e, \max} = \frac{1}{2} \left( \frac{v_P^2}{2} - \varepsilon_b \right) . \quad (1.10)$$

Er ist dann maximal, wenn die ursprüngliche Energie symmetrisch auf das Target- und das Projektilektron verteilt wird. Der Einfluss der Projektilmasse wird besonders bei niedrigen Projektilgeschwindigkeiten spürbar.

## 1.3 Die Eigenschaften eines atomaren Targets

In einem einfachen theoretischen Ansatz zur Beschreibung der Stoßionisation kann man das Target als ein ruhendes Elektron betrachten. Damit kann der differentielle Wirkungsquerschnitt dieses auf ein Zwei-Körper-Problem reduzierten Stoßsystems in Abhängigkeit von der Energie  $E_e$  des emittierten Elektrons mit der Rutherfordformel

$$\frac{d\sigma}{dE_e} \propto \frac{1}{m_e v_P^2} \left( \frac{Z_P}{E_e + \varepsilon_b} \right)^2 \quad (1.11)$$

berechnet werden [RKM 92]. Hier zeigt sich die gleiche Abhängigkeit von der Projektilladung  $Z_P$  und der Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  wie in der Ersten Bornschen Näherung. Auch ist die Bindungsenergie  $\varepsilon_b$  des Elektrons berücksichtigt.

Für große Projektilgeschwindigkeiten stellt dieser Ansatz eine gute Näherung dar, ebenso für direkte Stöße des Projektils mit dem Targetelektron. Für niedrige Emissionsenergien allerdings unterschätzt diese Darstellung systematisch die Wirkungsquerschnitte. In diesen Fällen ist eine quantenmechanische Beschreibung des Stoßes notwendig.

### 1.3.1 Das Compton-Profil

Ein entscheidender Punkt, der in der oben erwähnten Näherung nicht berücksichtigt wird, ist die Tatsache, dass sich das gebundene Elektron nicht in Ruhe befindet, sondern eine Impuls- bzw. Geschwindigkeitsverteilung aufweist. Diese ist unter anderem abhängig von der Bindungsenergie und wird als „Compton-Profil“ bezeichnet. Die Breite der Impulsverteilung im Grundzustand führt daher auch zu einer Verbreiterung der Impulsverteilung der emittierten Elektronen nach dem Stoß. Diese Verbreiterung ist im Allgemeinen für niedrige Bindungsenergien geringer als für große Bindungsenergien. In den quantenmechanischen Beschreibungen der Stoßionisation ist dieses Compton-Profil bereits enthalten, bei klassischen Rechnungen wie beispielsweise der CTMC-Rechnung (Kapitel 2.6) muss diese quantenmechanische Eigenschaft des Targets zusätzlich hinzugefügt werden.

### 1.3.2 Der Einfluss des Targetkerns

Eine weitere strukturelle Eigenschaft des Targets ist ebenfalls nicht in der Rutherfordformel (1.11) enthalten. Neben den Elektronen besteht das Target natürlich auch aus einem Targetkern. Damit kommen zwei Aspekte hinzu, die bei der Beschreibung der Stoßionisation berücksichtigt werden müssen. Erstens kann die Bewegung des emittierten Elektrons nach dem Stoß nicht mehr als kräftefrei beschrieben werden und zweitens kann das Projektil auch am Targetkern gestreut werden. Der erste Punkt führt dazu, dass es sich selbst im einfachsten Fall bei der Ionisation eines H-Atoms durch ein strukturloses Projektil um ein Drei-Körper-Problem handelt, das nicht analytisch gelöst werden kann. Generell kann der Einfluss des Targetkerns auf das emittierte Elektron quantenmechanisch durch eine Coulombwelle beschrieben werden (Kapitel 2.2.1). Diese Beschreibung ist aber nur für ein H-Atom exakt. Der Einfluss des Targetkerns auf das emittierte Elektron ist bei niedrigen Emissionsenergien [FGM 96] besonders groß.

Darüber hinaus wurde bis vor kurzem davon ausgegangen, dass die Kern-Kern-Wechselwirkung zwischen Target- und Projektilkern bei kleinen Störungen  $\eta$  keinen Einfluss auf den Stoßprozess hat. In neuesten Experimenten [SMF 03] (s. Kapitel 1.4.1) wurde allerdings gezeigt, dass die Kern-Kern-Wechselwirkung notwendig ist zum Verständnis der Stoßdynamik. Dieser Beitrag kann beispielsweise durch *Distorted-Wave-Methoden* (Kapitel 2.4) berücksichtigt werden.

### 1.3.3 Beschreibung von Mehrelektronensystemen

Das am einfachsten theoretisch zu beschreibende Target ist atomarer Wasserstoff. Da es sich dabei um ein Zwei-Körper-System handelt kann es sogar analytisch exakt

beschrieben werden. Helium ist nach Wasserstoff das einfachste Mehr-Elektronen-System. Da dieses System nicht mehr exakt beschrieben werden kann müssen Näherungen verwendet werden, die im Folgenden kurz diskutiert werden.

### Das effektive Potential

In den meisten Rechnungen wird nur die Wechselwirkung eines aktiven Elektrons mit dem Projektil betrachtet. Der Einfluss des zweiten Elektrons wird lediglich durch eine Abschirmung der Kernladung berücksichtigt. Das Target kann dadurch wie ein Wasserstoffatom beschrieben werden, allerdings mit einer effektiven Kernladung  $Z_{\text{eff}}$ , die definiert ist über:

$$Z_{\text{eff}} = \sqrt{2\varepsilon_b} , \quad (1.12)$$

wobei  $\varepsilon_b$  die (positive) Bindungsenergie des aktiven Targetelektrons ist. Die effektive Kernladung von Helium bei einer Bindungsenergie  $\varepsilon_b = 24,6$  eV ist damit  $Z_{\text{eff}} = 1,345$  a.u. (Definition der atomaren Einheiten (a.u.) in Anhang A.2). Das Potential des Targets kann damit durch ein zentrales Coulombpotential  $\sim Z_{\text{eff}}/r^2$  beschrieben werden, wobei  $r$  der Abstand vom Targetkern ist.

Diese Näherung setzt allerdings voraus, dass die Abschirmung des Targetkerns durch das zweite Targetelektron unabhängig von  $r$  ist. Aus diesem Grund wird häufig eine kompliziertere Form des Kernpotentials verwendet. Durch eine numerische Lösung der Schrödingergleichung werden dann die gebundenen und die Kontinuumszustände des Targetelektrons berechnet. Die Theorien mit denen die experimentellen Ergebnisse dieser Arbeit verglichen werden, verwenden die Hartree-Fock-Slater-Potentiale [HS63].

### Die Elektron-Elektron-Korrelation

Neben der Abschirmung der Kernladung können durch zusätzliche Targetelektronen andere Effekte, wie die „Korrelation“ der Elektronen untereinander auftreten (s. [McG97]). Wenn die Targetelektronen unabhängig voneinander sind kann die Gesamtwellenfunktion der Elektronen als ein Produkt der einzelnen Wellenfunktion geschrieben werden. Sobald die Elektronen sich aber nicht mehr unabhängig voneinander verhalten ist dies nicht mehr möglich.

Diese Korrelation zwischen den beiden Elektronen ist sehr schwer bei der Betrachtung des Stoßsystems zu berücksichtigen und wird daher bei den meisten Theorien zur Beschreibung der Einfachionisation vernachlässigt. Erfolgreich wurde die Korrelation der Elektronen beispielsweise bei der CCC-Rechnung (*Convergent Close-Coupling*, s. Kapitel 2.5.2) zur Beschreibung der stoßinduzierten Doppelsonionisation berücksichtigt [Fis03].

## 1.4 Ionisationsprozesse

In diesem Kapitel wird auf zwei Ionisationsmechanismen eingegangen die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden. Dabei handelt es sich um die Einfachionisation des Targets und um die simultane Ionisation von Target und Projektil. Auf andere grundlegende Ionisationsmechanismen wie die Mehrfachionisation des Targets wird nicht eingegangen. Ein Überblick dazu findet sich in [US03].

### 1.4.1 Die Einfachionisation des Targets

Die Einfachionisation eines neutralen Targets durch ein geladenes Teilchen unter gewissen Voraussetzungen mit der Photoionisation verglichen werden. Bei hochenergetischen, relativistischen Stößen kann beispielsweise die Methode der äquivalenten Photonen von Weizsäcker und Williams [Wei34, Wil34] zur Beschreibung der Elektronenemission verwendet werden [MSU 97]. Das Prinzip dieser Methode besteht darin, dass das Feld eines relativistischen Projektils bei nicht zu dichten Stößen durch den Puls eines Photonenfeldes beschrieben werden kann. Aber auch bei nicht-relativistischen Stößen wird die Ähnlichkeit der Stoßionisation durch ein geladenes Teilchen mit der Photoionisation bei der Betrachtung des Übergangsmatrixelementes  $T^{1B}$  in der Ersten Bornschen Näherung deutlich (s. Kapitel 2.2.1):

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

$|\varphi_{(i,f)}\rangle$  ist der Anfangs- bzw. Endzustand des Targetelektrons,  $\mathbf{q}$  ist der Impulsübertrag vom Projektil auf das Target und  $\mathbf{r}$  der Abstand des aktiven Elektrons vom Targetkern. Für kleine Impulsüberträge kann die auftretende Exponentialfunktion als

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \mathbf{1} + i\mathbf{q}\mathbf{r} + \dots \quad (1.14)$$

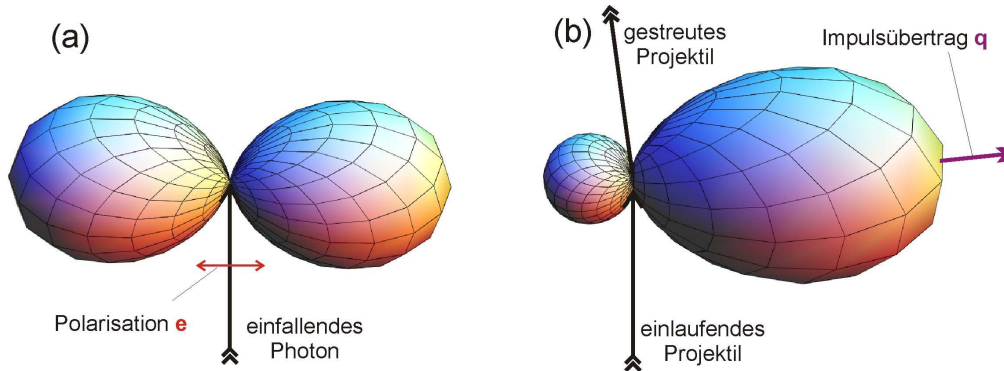
entwickelt werden. Beim Einsetzen in Gleichung (1.13) entfällt der erste Term aufgrund der Orthogonalität der Zustände und man erhält in der Dipolnäherung:

$$T_{fi}^{1B} \sim \frac{i}{q^2} \langle \varphi_f | \mathbf{q}\mathbf{r} | \varphi_i \rangle . \quad (1.15)$$

Die formale Ähnlichkeit zur Dipolübergangsamplitude  $T_{fi}^\gamma$  bei der Photoionisation

$$T_{fi}^\gamma \sim i\omega \langle \varphi_f | \mathbf{e}\mathbf{r} | \varphi_i \rangle \quad (1.16)$$

ist groß, wobei der Polarisationsvektor  $\mathbf{e}$  des absorbierten Photons dem Impulsübertrag  $\mathbf{q}$  entspricht. In Gleichung (1.16) ist  $\omega$  die Energie des absorbierten Photons. Die Ähnlichkeiten in Gleichung (1.15) und (1.16) treten besonders dann auf, wenn



**Abbildung 1.1:** Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte (FDCS) der Emission eines Elektrons aus einem s-Zustand. Abb. (a): Ionisation durch Photoionisation; Abb. (b): Ionisation durch ein geladenes Projektil in Erster Bornscher Näherung.

$\mathbf{q}$  und die Störung  $\eta$  möglichst klein sind. Für diesen Fall ist in Abbildung 1.1 der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt (engl.: *Fully Differential Cross Section*, FDCS) in der Ersten Bornschen Näherung für die Ionisation eines Elektrons im s-Zustand durch ein Photon (Abb. (a)) und durch ein geladenes Projektil (Abb. (b)) abgebildet.

Die Abbildung dieser vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnitte ist so zu verstehen, dass der Abstand vom Wechselwirkungspunkt zum betrachteten Punkt auf der Oberfläche dieses Wirkungsquerschnittes die Wahrscheinlichkeit widerspiegelt, unter der das Elektron in diese Richtung emittiert wird.

Da sich das Elektron nach der Photoionisation (Abb. (a)) in einem p-Zustand befindet ergibt sich diese keulenförmige  $\cos^2$ -Verteilung. Diese Verteilung ist rotationssymmetrisch zur Polarisation  $\mathbf{e}$  und symmetrisch zur Richtung des einfallenden Photons. Bei der Stoßionisation (Abb. (b)) ist der Wirkungsquerschnitt ebenfalls rotationssymmetrisch zu  $\mathbf{q}$ , allerdings nicht symmetrisch zur Richtung des einlaufenden Projektils. Senkrecht zu  $\mathbf{q}$  tritt auf Grund der Dipolauswahlregeln ein deutliches Minimum auf, wodurch sich ebenfalls zwei Keulen ergeben.

Die beiden Keulen, die bei der Stoßionisation auftreten haben unterschiedliche Ursachen. Die größere Keule, der so genannte *Binary Peak* entsteht durch Elektronen, die auf Grund eines direkten, binären Stoßes mit dem Projektil in die Richtung des Impulsübertrages  $\mathbf{q}$  emittiert werden. Bei der zweiten Keule, der so genannte *Recoil Peak*, stoßen die Elektronen mit dem Projektil, werden aber durch eine Streuung am Targetkern in entgegengesetzte Richtung von  $\mathbf{q}$  zurückgestreut [MCH72]. Der Rückstoß (engl.: *recoil*) das emittierten Elektrons wird dabei vom Targetkern kompensiert. Die keulenförmige Form des vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnittes wurde experimentell sowohl im Elektronenstoß [Lah91, CMD94, Lah02] als auch im Ionenstoß [SMM 01] nachgewiesen.

Durch die Vermessung von vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten können Theorien umfassend und im Detail getestet werden. Aber auch bereits das Verhältnis der Höhe von *Binary-* zu *Recoil-Peak* liefert einen guten Anhaltspunkt über die Qualität von theoretischen Rechnungen. Dieses Verhältnis hängt sehr stark von den untersuchten kinematischen Bedingungen ab. Mit steigender Emissionsenergie des Elektrons nimmt die Höhe des *Recoil-Peaks* im Verhältnis zum *Binary-Peak* ab. Bei kleinen Impulsüberträgen hingegen nimmt die relative Höhe des *Recoil-Peaks* zu, bis die Höhe der beiden Keulen nahezu gleich ist. Dabei handelt es sich um das so genannten *Photolimit*. Bei großen Impulsüberträgen, dem *Binary Limit*, verschwindet der *Recoil-Peak* vollkommen.

Ein weiterer Vorteil der Analyse von vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten ist, dass Beiträge höherer Ordnung deutlich werden, also jene Beiträge die nicht in der Ersten Bornschen Näherung enthalten sind. Werden beispielsweise die Elektronen relativ zur Ersten Bornschen Näherung mehr in Vorwärtsrichtung emittiert, kann dies meist mit einer PCI (Kapitel 1.2.1) mit dem positiven Projektil in Verbindung gebracht werden.

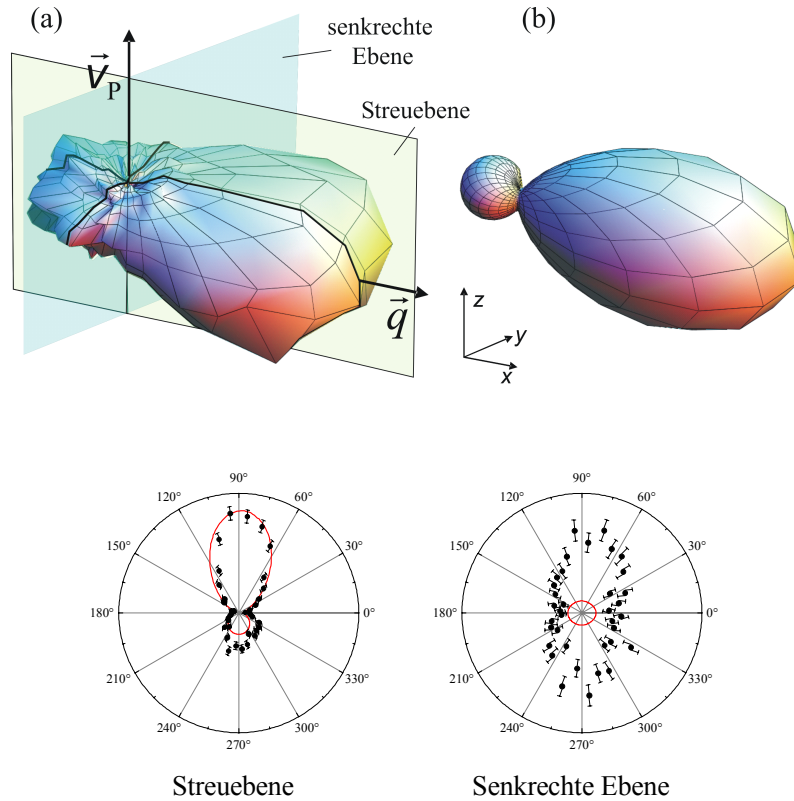
#### **Einfachionisation im Ionenstoß**

In Abbildung 1.2 ist der in [SMF 03] gemessene vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt (FDCS) für die Einfachionisation von Helium durch einen Stoß mit  $C^{6+}$  bei 100 MeV/amu dargestellt.

In Abb. (a) ist der gemessene FDCS zu sehen, in Abb. (b) der durch einen CDW-HF Ansatz (s. Kapitel 2.4) berechnete. Bei diesem Ansatz wird der Anfangszustand durch eine ebene Welle für das Projektil und eine Hartree-Fock-Wellenfunktion für das Targetsystem beschrieben. Der Endzustand wird durch das Produkt dreier Zweiteilchen-Wellenfunktionen beschrieben, wobei bei jeder dieser Wellenfunktionen die paarweise Wechselwirkung zweier Teilchen berücksichtigt wird. Dadurch wird die Projektil-Targetkern- und die Projektil-Targetelektron-Wechselwirkung berücksichtigt.

Sowohl Experiment und Theorie zeigen die typische Keulenform mit Binary- und Recoil-Peak. Im Experiment zeigt sich, dass ein signifikanter Anteil der Elektronen in Richtungen emittiert wurden, die durch die Dipolauswahlregeln verboten sind. In der Theorie ist die Winkelverteilung an diesen Stellen deutlich eingeschnürt.

In der unteren Abbildung ist ein Schnitt durch die Streuebene (links) und durch die senkrechte Ebene (rechts) zu sehen. Die Streuebene (s. Abb. 1.2 (a)) wird aufgespannt durch den Impulsübertrag  $\mathbf{q}$  und die Richtung des ankommenden Projektils  $\mathbf{v}_P$ , die Senkrechte Ebene steht senkrecht zu dieser Ebene. In der Streuebene (unten links) wird die Verteilung der emittierten Elektronen sehr gut durch die Theorie wiedergegeben, auch wenn die relative Größe des Recoil-Peaks von der Theorie et-



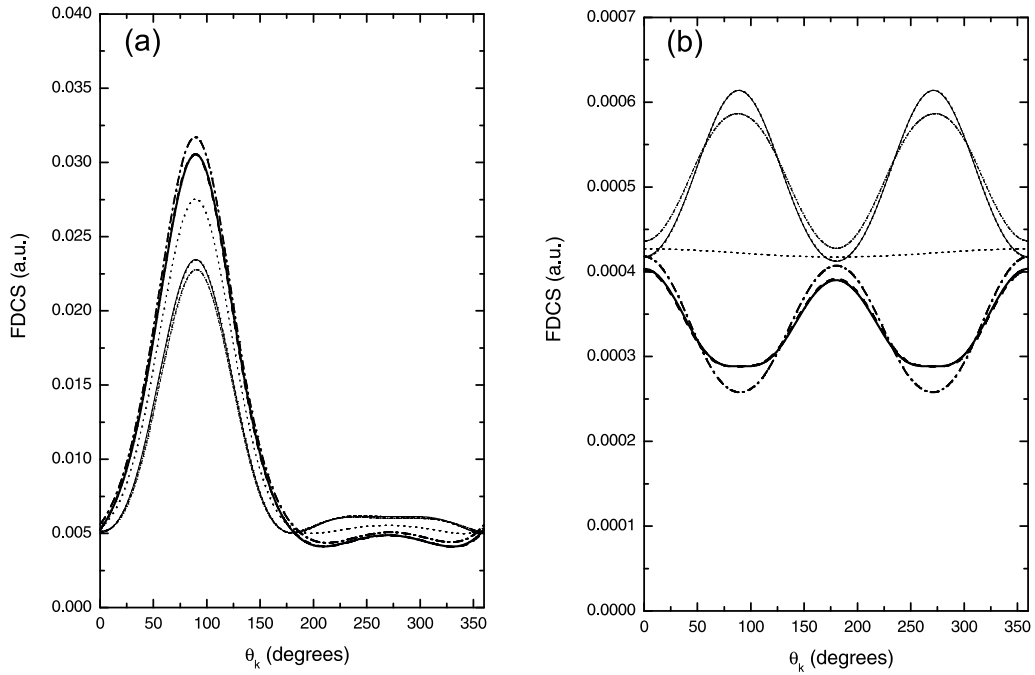
**Abbildung 1.2:** FDCS für die Einfachionisation von Helium durch  $C^{6+}$  bei 100 MeV/amu. Die Energie des emittierten Elektrons ist  $E_e = 6,5$  eV, der Impulsübertrag  $q = 0,75$  a.u.. Abb. (a): experimenteller vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt; Abb. (b): entsprechende CDW-Rechnung; unten links: Schnitt durch die Streuebene mit experimentellen Daten (Punkte) und Theorie (durchgehende rote Linie); unten rechts: Schnitt durch die senkrechte Ebene [SMF 03].

was unterschätzt wird. Die Senkrechte Ebene (unten rechts) hingegen zeigt, dass die Emission der Elektronen unter  $90^\circ$  und  $270^\circ$  deutlich unterschätzt wird.

Bis heute konnte nicht geklärt werden, welche Mechanismen für diese Diskrepanz verantwortlich sind. Eine mögliche Erklärung ist ein Zwei-Schritt-Prozess bei dem im ersten Schritt das Elektron durch einen Stoß mit dem Projektil ionisiert wird und im zweiten Schritt das Projektil elastisch am Targetkern gestreut wird. Dadurch wird die Richtung des Impulsübertrages um die Projektilachse gedreht und die beobachtete Ringstruktur könnte entstehen. Eine andere Möglichkeit ist, dass die Korrelation zwischen dem aktiven Elektron und dem zweiten Elektron des Heliumatoms (s. Kapitel 1.3.3) die Emission des aktiven Elektrons beeinflusst.

In einer Studie von Voitkiv *et al.* [VNU03] wurde gezeigt, dass diese Unterschätzung der Emission in die Senkrechte Ebene bei allen gängigen Theorien und positiven Projektilladungen auftritt. In Abbildung 1.3 sind die FDCS für verschiedene Theorien in der Streuebene (Abb. (a)) und in der Senkrechten Ebene (Abb. (b)) dargestellt.





**Abbildung 1.3:** Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für die Einfachionisation von Wasserstoff durch  $C^{6+}$  bzw.  $C^{6-}$  in der Streuebene (Abb. (a)) und in der Senkrechten Ebene (Abb. (b)) [VNU03]. In Abb. (a) ist  $q_{\perp} = 1$  a.u. und  $E_e = 1$  eV, in Abb. (b) ist  $q_{\perp} = 1$  a.u. und  $E_e = 10$  eV. gepunktete Linie: Erste Bornsche Näherung; durchgehende Linie: Glauber-Rechnung; strichpunktierte Linie: Zweite Bornsche Näherung, gestrichelte Linie: CDW-EIS-Rechnung. Dünne Linien bezeichnen die Rechnungen für das negative Projektil, dicke Linien die Rechnungen für das positive Projektil.

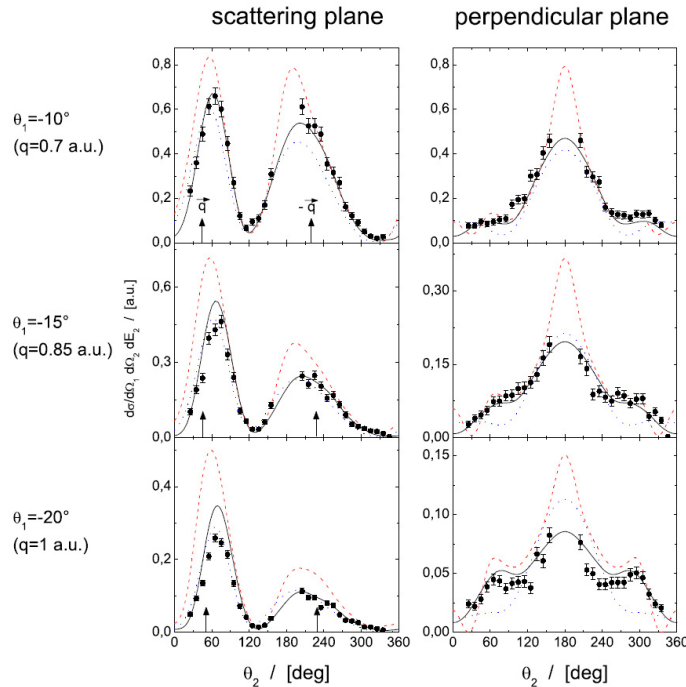
In der Streuebene stimmen die verschiedenen Theorien im Wesentlichen überein, auch wenn das Verhältnis von Recoil- zu Binary-Peak etwas unterschiedlich ist. In der senkrechten Ebene erhält man durch die Erste Bornsche Näherung eine weitgehende isotrope Verteilung. Bei all jenen Theorien die Effekte höherer Ordnung berücksichtigen (Zweite Bornsche Näherung, Glauber-Rechnung, CDW-EIS-Rechnung) wird die Emission in die Senkrechte Ebene qualitativ gleich beschrieben. Im Vergleich zum Experiment (Abb. 1.2) zeigt sich allerdings, dass in der Senkrechten Ebene bei  $90^{\circ}$  und  $270^{\circ}$  Minima auftreten während im Experiment bei diesen Winkeln Maxima beobachtet werden. Maxima wie im Experiment erscheinen in den theoretischen Wirkungsquerschnitten nur wenn die Rechnungen mit  $C^{6-}$ -Projektilen durchgeführt werden. Damit scheint es sich um eine systematische Differenz zwischen Theorie und Experiment beim Ionenstoß zu handeln.

Die beobachtete Abweichung wird in [VNU03] dadurch erklärt, dass zur Beschreibung des He-Atoms Wasserstoffwellenfunktionen verwendet werden und dadurch die Vier-Teilchen-Effekte, verursacht durch das zweite Targetelektron, nicht berücksich-

tigt werden.

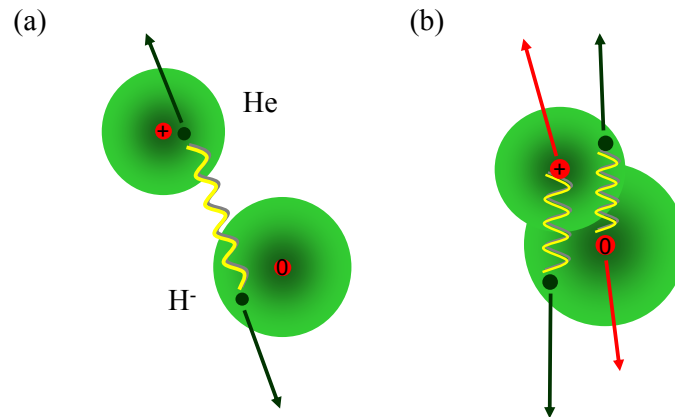
Diese Erklärung der Diskrepanzen kann nur durch eine Messung der Einfachionisation von atomarem Wasserstoff überprüft werden. Da beim Wasserstoff die Korrelationen zwischen den Targetelektronen entfallen, können diese Vier-Teilchen-Effekte nicht auftreten. Falls die oben genannte Erklärung stimmt müssten die experimentellen Wirkungsquerschnitte der Einfachionisation von atomarem Wasserstoff dann Minima bei  $90^\circ$  und  $270^\circ$  aufweisen.

### Einfachionisation im Elektronenstoß



**Abbildung 1.4:** FDCS (in atomaren Einheiten) für die Einfachionisation von Helium durch Elektronenstoß bei einer Projektilenergie von 102 eV bei verschiedenen Impulsüberträgen. Die Energie des emittierten Elektrons ist 10 eV. linke Spalte: Schnitt in der Streuebene; rechte Spalte: Schnitt in der Senkrechten Ebene. durchgehende Linie: CCC; gestrichelte Linie: DWB2; punktierte Linie: 3C

Die Einfachionisation des Targets durch ein Elektron wird auch als (e,2e)-Stoß bezeichnet. Im Allgemeinen ist beim Elektronenstoß die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment besser als im Ionenstoß. In Abbildung 1.4 sind Ergebnisse von jüngsten Messungen des FDCS zur Einfachionisation von Helium durch Elektronenstoß bei einer Projektilenergie von 102 eV gezeigt ([Dür06] und Kapitel 4.5.2). Die Energie des emittierten Elektrons ist 10 eV. Zusätzlich sind verschiedene theoretische FDCS für dieses Stoßsystem eingetragen. In der linken Spalte ist der Schnitt in



**Abbildung 1.5:** Schematische Darstellung der (e,e)-Wechselwirkung (Abb. (a)) und der (n,e)-Wechselwirkung (Abb. (b)) bei der simultanen Ionisation von Target und Projektil.

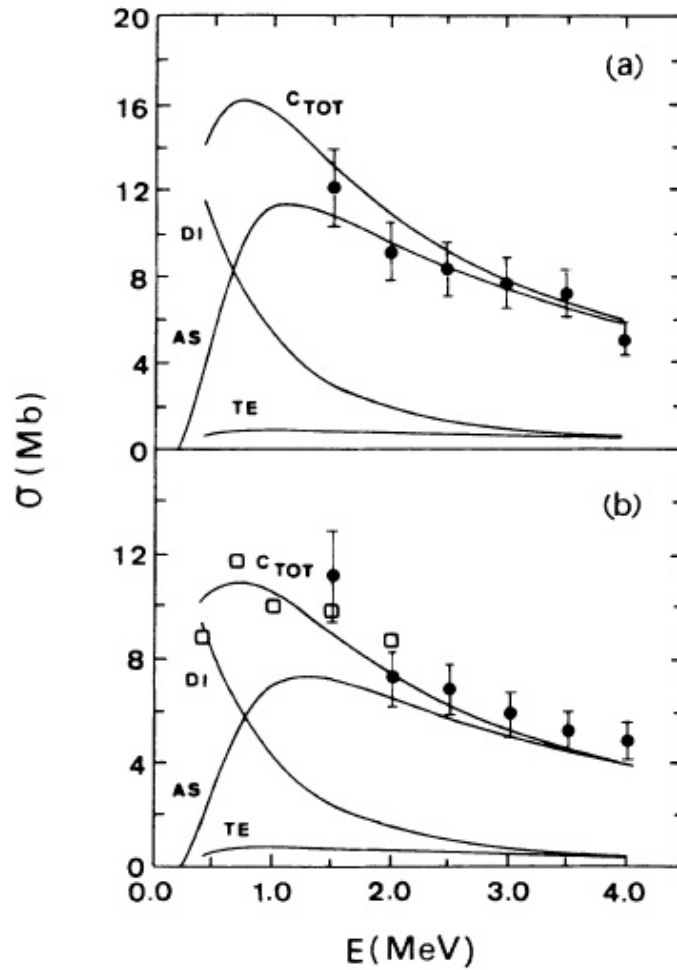
der Streuebene, in der rechten Spalte der Schnitt in der Senkrechten Ebene für verschiedene Impulsüberträge bzw. Streuwinkel abgebildet. Alle Theorien, die in dieser Abbildung eingezeichnet sind beinhalten Beiträge höherer Ordnung, wie die Wechselwirkung des Projektils mit dem Targetelektron vor und nach dem Stoß (s. Kapitel 2).

Sowohl die Verteilung in der Streuebene als auch in der Senkrechten Ebene wird am besten von der CCC-Rechnung (durchgehende Linie) wiedergegeben. Bis auf eine kleine Überschätzung des Binary-Peaks bei  $q = 1$  a.u. stimmt diese Theorie hervorragend mit den experimentellen Daten überein. Qualitativ werden die FDCS von allen Theorien wiedergegeben, bis auf eine Unterschätzung der Emission unter  $60^\circ$  bzw.  $300^\circ$  in der Senkrechten Ebene, die nur von der CCC-Rechnung und annähernd von der DWB2 korrekt wiedergegeben werden.

### 1.4.2 Die simultane Ionisation von Target und Projektil

Bei der simultanen Ionisation von Target und Projektil kommt es im einfachsten Fall nur zu einer Wechselwirkung zwischen dem aktiven Elektron des Targets und jenem des Projektils wobei beide Elektronen emittiert werden ((e,e)-Mechanismus, Abb. 1.5 (a)). Dabei wird das vom Target emittierte Elektron als Targetelektron bezeichnet, das vom Projektil emittierte Elektron als Projektilelektron. Dieser Fall kann verglichen werden mit einem (e,2e)-Stoß wie er in Kapitel 1.4.1 beschrieben wurde. Ein anderer Mechanismus ((n,e)-Mechanismus, Abb. 1.5 (b)) ist ebenfalls möglich. Hier wird das Targetelektron durch einen Stoß mit dem Projektilkern ionisiert und das Projektilelektron durch eine Wechselwirkung mit dem Targetkern. Für diesen Mechanismus sind also zwei Wechselwirkungen zwischen Target und Projektil notwendig.

Die erste experimentelle Separation dieser beiden Mechanismen ((e,e) und (n,e)) gelang Montenegro *et al.* [MMM 92] anhand von gemessenen totalen Wirkungsquerschnitten. Bei diesem Versuch wurde unter anderem die simultane Ionisation eines  $\text{He}^+$ -Projektils und eines  $\text{He}$ - bzw.  $\text{H}_2$ -Targets bei Projektilenergien von 1,5 - 4,0 MeV untersucht. In Abbildung 1.6 ist das Ergebnis dieser Experimente dargestellt. Die totalen Wirkungsquerschnitte wurden mit einer semiklassischen Rechnung

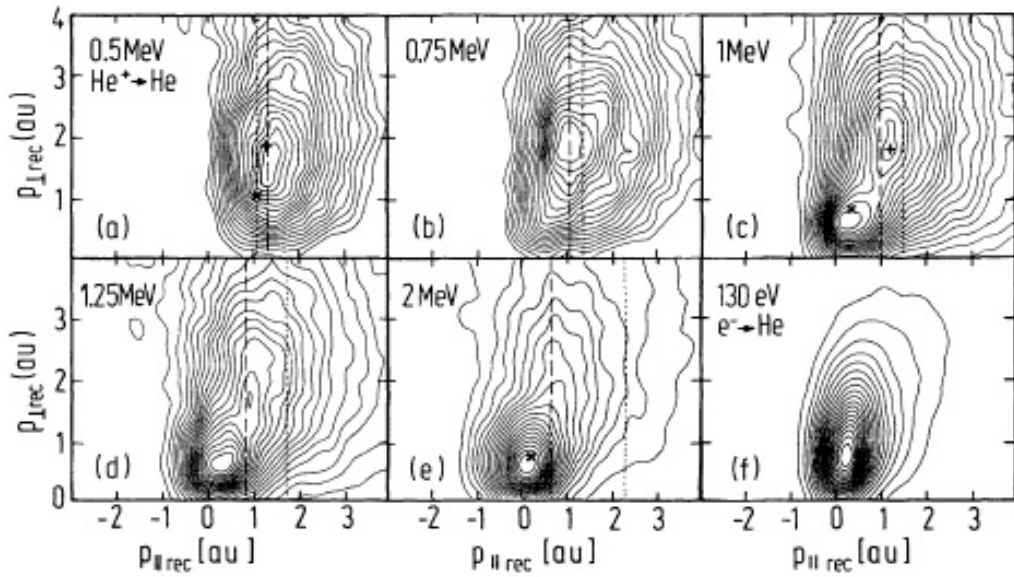


**Abbildung 1.6:** Erste Separation der (e,e)- und der (n,e)-Wechselwirkung anhand des totalen Wirkungsquerschnittes bei  $\text{He}^+ + (\text{H}_2, \text{He}) \rightarrow \text{He}^{2+} + (\text{H}_2^+, \text{He}^+) + 2e^-$  [MMM 92]. Abb. (a):  $\text{H}_2$ -Target; Abb. (b):  $\text{He}$ -Target. Weitere Erläuterungen siehe Text.

(SCA) verglichen, bei der sich das Projektil auf einer klassischen Trajektorie bewegt. Diese Theorie liefert die Beiträge für die simultane Ionisation durch die (e,e)-Wechselwirkung (in diesem Fall als *antiscreening* (AS) bezeichnet), für die (n,e)-Wechselwirkung (*two-center double ionization* (DI)) und die Anregung des Targets (*target excitation* (TE)). Letztere muss vom (n,e)-Beitrag abgezogen werden, da sie nicht zu einer simultanen Ionisation von Projektil und Target führt.  $c_{\text{Tot}}$  ist damit

der berechnete totale Wirkungsquerschnitt bestehend aus (e,e)- und (n,e)-Beitrag. Damit konnte erstmals gezeigt werden, dass die (e,e)-Wechselwirkung die simultane Ionisation bei Projektilenergien oberhalb von 2,0 MeV dominiert. Bei niedrigeren Energien hingegen dominiert die (n,e)-Wechselwirkung.

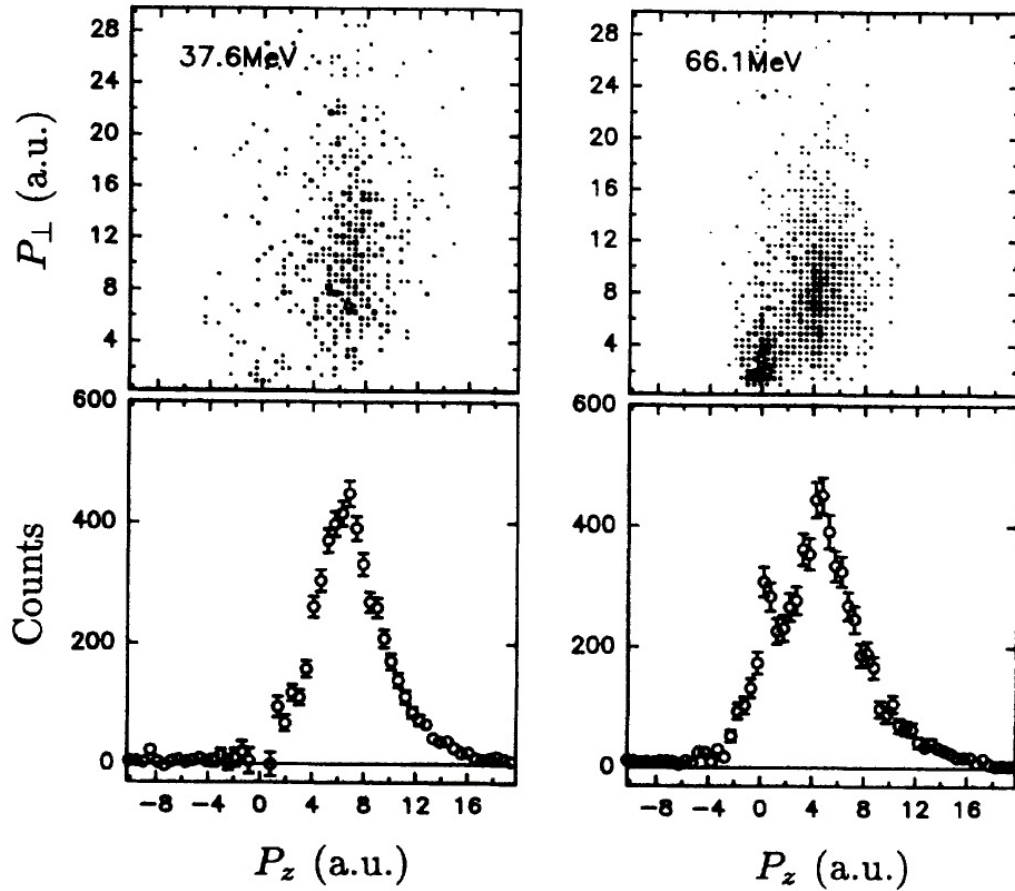
Eine Separation des (e,e)- und (n,e)-Mechanismuses anhand von zweifach differentiellen Wirkungsquerschnitten (DDCS) gelang erstmals Wu *et al.* [WWA 94] und Dörner *et al.* [DMA 94]. Dabei verwendeten sie die Rückstoßionenspektroskopie RIMS (eng.: *Recoil Ion Momentum Spectroscopy*) [UMD 97] um die Impulse der Rückstoßionen zu detektieren.



**Abbildung 1.7:** DDCS für  $He^+ + He \rightarrow He^{2+} + He^+ + 2e^-$  für Projektilenergien von 0,5 bis 2 MeV [DMA 94].

Da bei einer (e,e)-Wechselwirkung das Rückstoßion keinen Impuls aufnimmt kann dieser Mechanismus in den DDCS dadurch identifiziert werden, dass ein Maximum bei einem Longitudinalimpuls  $p_{\parallel} \approx 0$  und für kleine Transversalimpulse  $p_{\perp}$  auftritt. Beim (n,e)-Mechanismus hingegen wechselwirkt das Projektilektron mit dem Targetkern und das Rückstoßion erhält einen signifikanten Impuls. Diese beiden Maxima sind sowohl bei der Messung von Dörner *et al.* in Abbildung 1.7 als auch bei Wu *et al.* in Abbildung 1.8 für unterschiedliche Stoßsysteme zu erkennen. In Abbildung 1.7 wird deutlich, wie der Anteil der (e,e)-Wechselwirkung für größere Energien zunimmt, bis schließlich der (n,e)-Anteil komplett verschwindet. Zum Vergleich ist ebenfalls der DDCS für einen (e,2e)-Stoß der entsprechenden  $He^+$ -Projektilenergie von 1 MeV abgebildet (Abb. (f)). Dort ist deutlich die Lage des Maximums für den (e,e)-Anteil zu sehen.

Für ein  $Fe^{8+}$ -Projektil ist dieses Verhalten auch bei der Messung von Wu *et al.* in

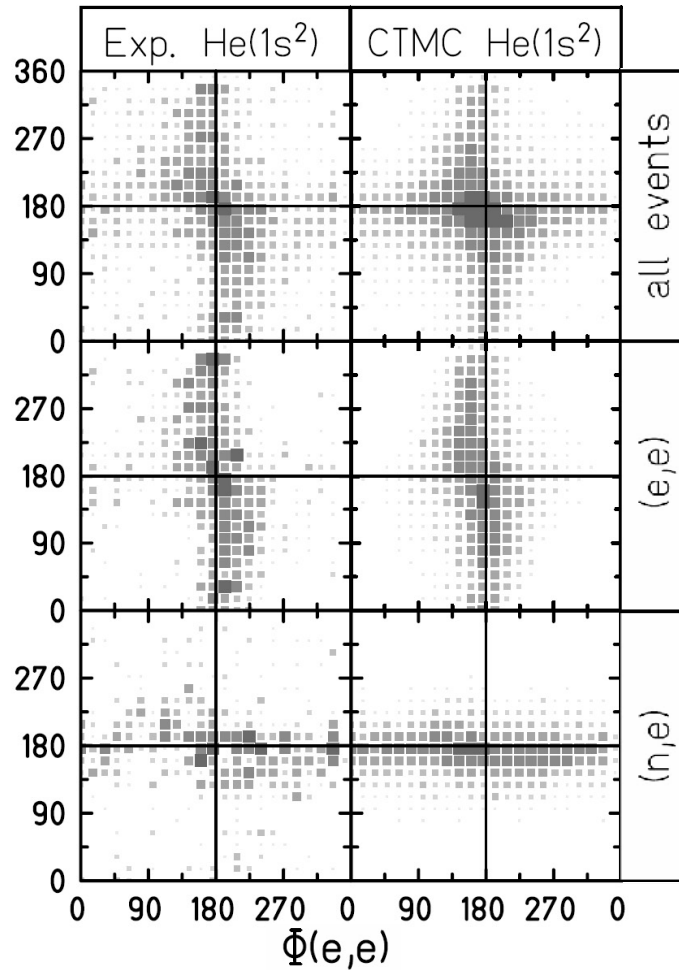


**Abbildung 1.8:** DDCS sowie Projektionen auf die  $P_z$ -Achse für  $Fe^{8+} + He \rightarrow Fe^{9+} + He^+ + 2e^-$  bei Projektilenergien von 37,6 MeV und 66,1 MeV [WWA 94].

Abbildung 1.8 zu sehen. Wieder taucht bei einer höheren Energie im differentiellen Wirkungsquerschnitt (DDCS) neben dem Maximum bei  $p_{r\parallel} \approx 4$  a.u. ein deutliches Maximum bei  $p_{r\parallel} \approx 0$  a.u. auf, das der (e,e)-Wechselwirkung zugeordnet werden kann.

Mit Hilfe eines Reaktionsmikroskops [UMD 03] gelang es Kollmus *et al.* [KMO 02] erstmals die Impulse und Energien der emittierten Elektronen, sowie des Rückstoßions zu detektieren. Durch dieses kinematisch vollständige Experiment war es möglich für jedes einzelne Ereignis zu unterscheiden, ob die simultane Ionisation durch eine (e,e)-Wechselwirkung oder durch eine (n,e)-Wechselwirkung zustande kam.

Für das untersuchte Stoßsystem  $C^{2+} + He \rightarrow C^{3+} + He^+ + 2e^-$  bei einer Projektilenergie von 3,6 MeV/amu wurde unter anderem anhand der Winkel  $\phi(e, e)$  zwischen den emittierten Elektronen und dem Winkel  $\phi(n, e)$  zwischen dem Projektilektron und dem Rückstoßion der Beitrag der (e,e)- bzw. (n,e)-Wechselwirkung untersucht. Die erhaltenen Resultate wurden mit einer CTMC-Simulation verglichen. In Ab-



**Abbildung 1.9:** Abbildung der Azimutalwinkel  $\phi(e, e)$  zwischen den emittierten Elektronen und  $\phi(n, e)$  zwischen dem Projektilektron und dem Rückstoßion für verschiedene kinematische Bedingungen für das untersuchte Stoßsystem  $C^{2+} + He \rightarrow C^{3+} + He^+$  bei einer Projektilenergie von 3,6 MeV/amu [KMO 02].

bildung 1.9 ist das Ergebnis dieses Experiments zu sehen. Die Winkel  $\phi(e, e)$  bzw.  $\phi(n, e)$  sind dabei die Winkel zwischen den entsprechenden Fragmenten in der Azimutalebene. Diese Ebene steht senkrecht zum ankommenden Projektilstrahl.

In Abbildung 1.9 wurden diese Winkel unter drei verschiedenen kinematischen Bedingungen untersucht. Bei der oberen Reihe wurden alle Ereignisse betrachtet. Für die mittlere Reihe gilt die Bedingung, dass der Impuls des Targetelektrons  $p_{et}$  größer oder gleich dem Impuls des Rückstoßions  $p_r$  ist ( $p_{et} \geq p_r$ ). Dies bedeutet, dass in diesem Fall das Targetelektron durch eine (e,e)-Wechselwirkung emittiert wird. Die Abbildungen der mittleren Reihe zeigen, dass die beiden Elektronen unter einem Winkel  $\phi(e, e)$  von  $180^\circ$  zueinander emittiert werden, unabhängig vom Winkel  $\phi(n, e)$  zwischen Rückstoßion und Projektilektron. Damit sind die beiden Elektro-

nen eindeutig miteinander korreliert.

Bei der unteren Reihe wurde die entgegengesetzte Bedingung  $p_r \geq p_{et}$  verwendet. In diesem Fall übernimmt der Targetkern die aktive Rolle und die (n,e)-Wechselwirkung dominiert. Anders als in der mittleren Reihe beträgt hier der Winkel  $\phi(n, e)$  zwischen dem Projektilektron und dem Rückstoßion  $180^\circ$ , unabhängig vom Winkel zwischen den beiden Elektronen. In diesem Fall ist also das Rückstoßion eindeutig mit dem Projektilektron korreliert. Ein Vergleich der Abbildungen der mittleren ((e,e)-Wechselwirkung) und der unteren Reihe ((n,e)-Wechselwirkung) mit der oberen Reihe ohne Bedingung zeigt, dass bei diesem untersuchten Stoßsystem die simultane Ionisation überwiegend durch die (e,e)-Wechselwirkung geschieht.

Die Ergebnisse dieses Experiments stimmen sehr gut mit einer klassischen CTMC-Simulation (rechte Spalte) überein, bei der die Wechselwirkungen zwischen allen beim Stoß beteiligten Teilchen berücksichtigt wurde.



# Kapitel 2

## Theorie der Ionisation im Ion-Atom-Stoß

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der Elektronenemission in Stößen von geladenen Teilchen mit Atomen behandelt und verschiedene theoretische Modelle vorgestellt. Seit der ersten quantenmechanischen Beschreibung durch Bethe und Born ([Bet30], siehe auch [Ino71]) wurden zahlreiche quantenmechanische, klassische und semiklassische Methoden entwickelt. Ein Überblick findet sich beispielsweise in [SDR97, US03]. Im Folgenden wird nur auf jene Modelle eingegangen, die für ein Verständnis der vorliegenden Arbeit von Nutzen sind.

Die generelle Schwierigkeit bei der theoretischen Behandlung der Stoßionisation äußert sich dadurch, dass bereits ein Drei-Körper-System weder klassisch noch quantenmechanisch analytisch beschrieben werden kann. Dies bedeutet, dass selbst der einfachste Ionisationsprozess, die Ionisation von atomarem Wasserstoff durch ein punktförmiges geladenes Teilchen, nicht analytisch exakt berechnet werden kann. Man ist deshalb auf Näherungen angewiesen, bei denen es sich entweder um perturbative oder nicht-perturbative Ansätze handelt.

Für die Beschreibung der Stoßionisation durch ein schnelles Projektil kann meist ein perturbativer Ansatz gewählt werden. Diese perturbativen Methoden stellen dann eine gute Näherung dar, wenn die Projektilgeschwindigkeit größer ist als die Geschwindigkeit des im Target gebundenen Elektrons. Für die Ionisation durch ein schnelles Ion sind die Bornsche Näherung (Kapitel 2.2), die *Distorted Wave*-Methode (Kapitel 2.4) sowie die 3C-Methode (Kapitel 2.3) die erfolgreichsten Ansätze. Die Unterschiede zwischen diesen Ansätzen werden in den entsprechenden Kapiteln behandelt.

Bei kleinen Projektilgeschwindigkeiten haben sich die *Exterior Complex Scaling*-Methode (ECS) [RBI99] und die *Convergent Close Coupling*-Methode (CCC) [BS92] bewährt. Bei diesen Methoden handelt es sich um nicht-perturbative Ansätze, bei

denen die Schrödingergleichung numerisch gelöst wird. Eine ausführlichere Beschreibung dieser Methoden findet sich in Kapitel 2.5.1 und 2.5.2. Der Nachteil dieser Methoden ist, dass sie nur anwendbar sind für Systeme, bei denen die Projektile nicht zu schnell und nicht zu schwer sind, da ansonsten Konvergenzprobleme auftreten. Für Elektronenstoß-Ionisation bei niedrigen Energien liefern diese Methoden allerdings die besten Ergebnisse.

Ein klassischer Ansatz zur Beschreibung der Ionisation wird in Kapitel 2.6 vorgestellt. Bei dieser *Classical Trajectory Monte Carlo*-Simulation (CTMC) [OUSB89] werden sowohl der Anfangszustand von Projektil- und Targetsystem als auch die Wechselwirkung zwischen den Komponenten rein klassisch durch den Lagrange-Formalismus beschrieben.

Das erste Kapitel liefert die theoretischen Grundlagen der Stoßionisation ausgehend von der Schrödingergleichung. Auf diesem exakten Ansatz bauen alle weiteren Theorien auf.

## 2.1 Formale Beschreibung der Streuung

Eine Beschreibung der Stoßionisation ist möglich durch die Verwendung einer zeitabhängigen Wechselwirkung, einer zeitabhängigen Zustandsbeschreibung oder einer Mischung aus beidem. Im Schrödingerbild beruht die Beschreibung darauf, dass die Wechselwirkung zwischen den Stoßpartnern zeitunabhängig ist und die gesamte Zeitabhängigkeit nur in der Zustandsbeschreibung enthalten ist. Der Hamiltonoperator des gesamten Stoßsystems ist:

$$H = H_0 + V , \quad (2.1)$$

wobei  $H_0$  der Hamiltonoperator der ungestörten Untersysteme von Target und Projektil ist.  $V$  beschreibt die Wechselwirkung zwischen Target- und Projektilsystem. Die Eigenzustände des Gesamtsystems  $|\psi\rangle$  bzw. des ungestörten Systems  $|\phi\rangle$  sind Lösungen der statischen Schrödingergleichung:

$$(H - E) |\psi\rangle = 0 \quad \text{bzw.} \quad (2.2)$$

$$(H_0 - E) |\phi\rangle = 0 . \quad (2.3)$$

Die entsprechenden Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung für das Gesamtsystem bzw. für das ungestörte System sind damit:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi\rangle = e^{-iEt} |\psi\rangle \quad \text{bzw.} \quad (2.4)$$

$$|\Phi(t)\rangle = |\Phi\rangle = e^{-iEt} |\phi\rangle . \quad (2.5)$$

Die Übergangsamplitude von einem Anfangszustand  $|\Psi_i\rangle$  in einen Zustand  $|\Phi_f\rangle$  nach

## 2.1. Formale Beschreibung der Streuung

---

dem Stoß ergibt sich durch die Berechnung des Matrixelementes

$$S_{fi} = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \langle \Phi_f(t) | \Psi_i(t_0) \rangle . \quad (2.6)$$

Diese Matrix wird als Streumatrix  $S$  bezeichnet.

Für den Ionisationsprozess kann dieses Matrixelement mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung umgeschrieben werden zu

$$\begin{aligned} S_{fi} &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Phi_f | (H - H_0) | \Psi_i \rangle \\ &= -2\pi i \langle \phi_f | V | \psi_i^+ \rangle \delta(E_f - E_i) . \end{aligned} \quad (2.7)$$

Die Streuwellenfunktionen  $|\psi_i^{(\pm)}\rangle$  erfüllen die Randbedingungen für die einlaufende Welle (-), bzw. die auslaufende (+) Welle und können über die „Lippmann-Schwinger-Gleichung“

$$|\psi_i^{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_0^{\pm} V |\psi_i^{\pm}\rangle , \quad (2.8)$$

berechnet werden, die eine exakte Lösung der Schrödingergleichung darstellt. In Gleichung (2.8) ist

$$G_0^{\pm} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \quad (2.9)$$

der freie Greensche Operator. Eine Herleitung dieser Gleichungen wurde hier nicht durchgeführt, eine ausführliche Beschreibung kann z. B. in [MC70] nachgelesen werden.

Die häufig verwendete Schreibweise der S-Matrix in der Form

$$S_{fi} = -2\pi i T_{fi} \delta(E_f - E_i) \quad (2.10)$$

beinhaltet die so genannte T-Matrix

$$T_{fi} = \langle \phi_f | V | \psi_i^+ \rangle . \quad (2.11)$$

Der experimentell gemessene Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  ist mit der T-Matrix verknüpft über:

$$\sigma = \frac{(2\pi)}{v_p} |T_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f) . \quad (2.12)$$

$v_p$  ist die Projektilgeschwindigkeit vor dem Stoß in atomaren Einheiten.

Die bis jetzt beschriebene Vorgehensweise beinhaltet keine Näherungen, ist also eine exakte Beschreibung des Stoßsystems. Eine Lösung der Schrödingergleichung mit dem vollständigen Hamiltonoperator  $H$  ist allerdings bereits für die Ionisation eines Wasserstoffatoms analytisch nicht möglich. Aus diesem Grund werden Näherungsverfahren verwendet, von denen die meisten auf dem oben beschriebenen Ansatz aufbauen. In den folgenden Kapiteln werden einige dieser Verfahren vorgestellt.

## 2.2 Die Bornsche Näherung

Die Bornsche Näherung nutzt die Beschreibung der Streuwellenfunktionen durch die oben genannte Lippmann-Schwinger-Gleichung. Der Hamiltonoperator  $H$  des gestörten Systems wird dabei in einen ungestörten Operator  $H_0$  und eine Störung  $V$  aufgeteilt. Der ungestörte Hamiltonoperator kann als die Summe der Hamiltonoperatoren des Target- ( $H_{\text{Target}}$ ) und des Projektilsystems ( $H_{\text{Proj}}$ ) geschrieben werden:

$$H = H_0 + V = H_{\text{Target}} + H_{\text{Proj}} + V . \quad (2.13)$$

Damit ist es möglich Target- und Projektilsystem unabhängig voneinander zu beschreiben. Das Potential  $V$  ist die Wechselwirkung zwischen dem Projektil- und dem Targetsystem und hat für den allgemeinen Fall, dass im Anfangszustand sowohl im Target als auch im Projektil Elektronen gebunden sind folgende Form:

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} - \sum_k \frac{Z_T}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_k|} + \sum_{j,k} \frac{1}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_k - \mathbf{r}_j|} . \quad (2.14)$$

Die Bezeichnungen der Abstandsvektoren sind in Abbildung 2.1 definiert,  $Z_T$  und  $Z_P$  sind die Ladungen des Targetkerns bzw. des Projektilkerns.

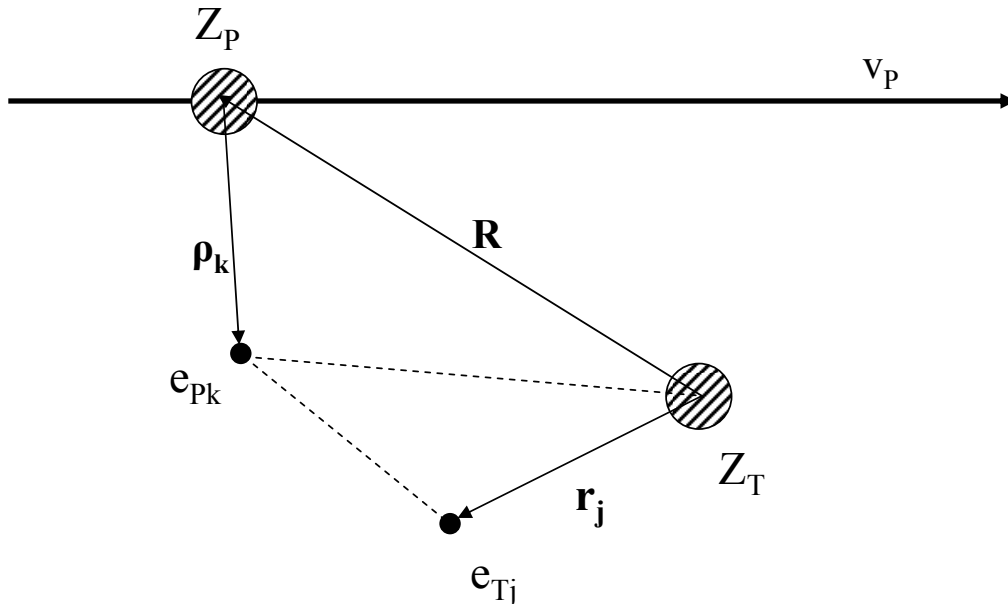


Abbildung 2.1: Definition der verwendeten Relativkoordinaten.

Mit Hilfe des freien Greenschen Operators (2.9) kann der Zustand der auslaufenden

## 2.2. Die Bornsche Näherung

---

Welle  $|\psi_i^+\rangle$  iterativ entwickelt werden:

$$\begin{aligned}
 |\psi_i^{(0)+}\rangle &= |\phi_i\rangle \\
 |\psi_i^{(1)+}\rangle &= |\phi_i\rangle + G_0^+ V |\phi_i\rangle \\
 |\psi_i^{(2)+}\rangle &= |\phi_i\rangle + G_0^+ V |\phi_i\rangle + G_0^+ V G_0^+ V |\phi_i\rangle \\
 &\vdots \quad , \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

wobei  $|\phi_i\rangle$  Lösungen des ungestörten Systems sind.

Die Bornsche Reihe erhält man durch das Einsetzen dieses so gefundenen Zustandes in die T-Matrix (2.11)

$$T_{fi} = \langle \phi_f | V | \phi_i \rangle + \langle \phi_f | V G_0^+ V | \phi_i \rangle + \langle \phi_f | V G_0^+ V G_0^+ V | \phi_i \rangle + \dots \quad (2.16)$$

Diese Reihe entspricht einer Entwicklung nach den Potenzen von  $V$  und konvergiert daher nur, wenn  $\eta = Z_p/v_p < 1$  ist, wobei  $v_p$  die Geschwindigkeit des Projektils ist.

### 2.2.1 Die Erste Bornsche Näherung

Die Erste Bornsche Näherung wird in der englischsprachigen Literatur als „*First Born Approximation*“ bezeichnet, daher wird im Folgenden zur Vereinfachung die Abkürzung *FBA* verwendet. In der Ersten Bornschen Näherung (*FBA*) wird nur der erste Term der Bornschen Reihe (2.16) berücksichtigt. Die *T*-Matrix hat daher die Form:

$$T_{fi}^{1B} = \langle \phi_f | V | \phi_i \rangle \quad (2.17)$$

Zur Veranschaulichung der Vorgehensweise der *FBA* wird an dieser Stelle die Einfachionisation des Targets durch ein punktförmiges Projektil betrachtet. Das Potential  $V$  (2.14) ergibt sich dann aus der Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetkern, sowie zwischen Projektil und Targetelektron:

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \quad (2.18)$$

Bei einer Beschreibung des Projektils mit Impuls  $\mathbf{p}_P$  durch eine ebene Welle sind die Eigenzustände des ungestörten Systems  $|\phi\rangle$  gegeben durch

$$|\phi\rangle = |\varphi, \mathbf{p}_P\rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}_P \cdot \mathbf{R}} |\varphi\rangle \quad (2.19)$$

wobei  $|\varphi\rangle$  der Zustand des Targetelektrons ist. Mit dieser Näherung (*plane wave approximation*) ist

$$\begin{aligned} T_{fi}^{1B} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{R} d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \varphi_f^*(\mathbf{r}) \left( \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \right) \varphi_i(\mathbf{r}) , \text{ bzw.} \\ T_{fi}^{1B} &= \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi_f \left| Z_T - \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right| \varphi_i \right\rangle \end{aligned} \quad (2.20)$$

nach der Integration über  $\mathbf{R}$  mit Hilfe des Bethe Integrals [McG97].  $\mathbf{q} = \mathbf{p}_{Pi} - \mathbf{p}_{Pf}$  ist der im Stoß vom Projektil übertragene Impuls. Da die Eigenzustände von  $H_{\text{Target}}$  ( $|\varphi_i\rangle$  und  $|\varphi_f\rangle$ ) bei einer Stoßionisation orthogonal zueinander sind, verschwindet der Beitrag der Kern-Kern-Wechselwirkung ( $\sim Z_T Z_P$ ) aus  $T_{fi}^{1B}$ .

Dadurch erhält man den für die FBA bekannten Ausdruck

$$T_{fi}^{1B} = \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi_f \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right| \varphi_i \right\rangle , \quad (2.21)$$

bei dem nur noch die Projektil-Elektron Wechselwirkung berücksichtigt wird. Diese Wechselwirkung kann bei kleinen Impulsüberträgen  $\mathbf{q}$  als der Austausch eines virtuellen Photons zwischen Projektil und Target verstanden werden, durch das Energie und Impuls transferiert wird. Bei einem bekannten Anfangs- und Endzustand hängt diese Übergangsamplitude nur vom Impulsübertrag  $\mathbf{q}$  ab, der daher die einzige ausgezeichnete Richtung darstellt. Die differentiellen Wirkungsquerschnitte sind daher symmetrisch zu  $\mathbf{q}$ . Die Wechselwirkung zwischen dem emittierten Targetelektron und dem positiven Targetkern kann mit der Beschreibung des Endzustandes durch eine Coulombwelle  $|CW(1)\rangle$  (z.B. [McG97, SDR97]) berücksichtigt werden. Eine Wechselwirkung nach dem Stoß zwischen dem Targetelektron und dem Projektil wird in der FBA hingegen nicht berücksichtigt.

Der Wirkungsquerschnitt aus Gleichung (2.12) lautet damit in der Ersten Bornschen Näherung

$$\begin{aligned} \sigma^{1B} &= \frac{2\pi}{v_p} |T_{fi}^{1B}|^2 \delta(E_i - E_f) \\ &= \frac{1}{\pi q^4} \frac{Z_P^2}{v_p} \left\langle \varphi_f \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right| \varphi_i \right\rangle \delta(E_i - E_f) . \end{aligned} \quad (2.22)$$

## 2.2.2 Die Zweite Bornsche Näherung

Wie der Name schon andeutet, werden in der Zweiten Bornschen Näherung die beiden ersten Terme der Bornschen Reihe (2.16) berücksichtigt. Zusätzlich zum Matrixelement der Ersten Bornschen Näherung muss die Zweite-Born-Amplitude berechnet

### 2.3. Die 3C Wellenfunktion

---

werden. Nach Gleichung (2.16) lautet diese

$$T_{fi}^{2B} = \langle \phi_f | V G_0^+ V | \phi_i \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\langle \phi_f \left| V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} V \right| \phi_i \right\rangle . \quad (2.23)$$

Analog zur Ersten Bornschen Näherung kann die Beschreibung des Stoßprozesses durch die Zweite Bornsche Näherung als ein Stoß mit zwei Wechselwirkungen interpretiert werden, bei denen jeweils ein virtuelles Photon ausgetauscht wird. Nach der ersten Wechselwirkung befindet sich das System in einem Zwischenzustand des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$  und wird erst mit der zweiten Wechselwirkung in den Endzustand überführt. Der freie Greensche Operator  $G_0^+$  stellt die Propagation des Systems zwischen den beiden Wechselwirkungen dar. Durch diesen doppelten Stoß kann beispielsweise der Einfluss der Kern-Kern-Wechselwirkung auf die Streuung des Projektils bei der Ionisation mitberücksichtigt werden.

Der Wirkungsquerschnitt in der Zweiten Bornschen Näherung ist gegeben durch:

$$\sigma_{i \rightarrow f} \propto |T_{fi}^{1B} + T_{fi}^{2B}|^2 \approx \alpha_1^{fi} Z_P^2 + \alpha_2^{fi} Z_P^3 + \dots , \quad (2.24)$$

wobei die Koeffizienten  $\alpha_i^{fi}$  durch die Berechnung der Übergangsamplituden bestimmt werden müssen. Durch die Interferenz der beiden Amplituden  $T_{fi}^{1B}$  und  $T_{fi}^{2B}$  tritt eine Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes vom Vorzeichen ( $\sim Z_P^3$ ) des Projektils auf. Der Term  $\sim Z_P^4$ , der teilweise durch die Zweite-Bornsche-Amplitude enthalten ist wird hier nicht aufgeführt, da erst mit der Dritten-Born-Amplitude dieser  $Z_P^4$ -Beitrag vollständig beschrieben wird [VNU03].

Weitere Methoden zur Untersuchung dieser Effekte höherer Ordnung werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

## 2.3 Die 3C Wellenfunktion

Die Wellenfunktion zweier geladener Teilchen, die nicht gebunden sind, ist gegeben durch eine Coulombwelle. Der Ansatz der 3C Wellenfunktion wie er von Brauner *et al.* [BBK89, BBK 91] vorgeschlagen wurde, nutzt diese Wellenfunktion, um die Wechselwirkung zwischen auslaufendem Projektil und Targetsystem zu berücksichtigen. Wie in Kapitel 2.2.1 erwähnt, kann die Wechselwirkung zwischen Targetelektron und Targetkern nach dem Stoß mit einer Coulombwelle ( $|CW(1)\rangle$ ) beschrieben werden. Ebenso wird die Wechselwirkung zwischen Targetkern und Projektil ( $|CW(2)\rangle$ ) sowie zwischen Targetelektron und Projektil ( $|CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle$ ) durch die Verwendung von Coulombwellen berücksichtigt. Die Streuwellenfunktion  $|\psi_f^-\rangle$  des Endzustandes hat damit folgende Form:

$$|\psi_f^-\rangle \simeq |3C\rangle = |CW(1)CW(2)CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle . \quad (2.25)$$

Das Drei-Teilchen-Kontinuum im Endzustand wird also durch das Produkt dreier Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen genähert. Diese Wellenfunktionen beschreiben die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung korrekt, wenn der Einfluss des dritten nicht spürbar ist, es sich also in einem unendlichem Abstand befindet. Der Einfluss des dritten Teilchens kann beispielsweise durch eine dynamische Abschirmung (engl.: *dynamical screening*) in der DS3C-Methode berücksichtigt werden. Im Vergleich zur ersten Bornschen Näherung ist die Übereinstimmung mit dem Experiment durch die Berücksichtigung der PCI deutlich verbessert. Für die Einfachionisation im Elektronenstoß bei niedrigen Projektilenergien wurden mit dieser Methode gute Ergebnisse erzielt [BB94].

Bei einer großen Störung, in den Fällen also, wenn das Projektil nicht nur den Endzustand sondern noch vor dem Stoß auch den Anfangszustand des Targets beeinflusst, ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment deutlich schlechter [LRW99]. Der Einfluss auf den Anfangszustand kann durch die *Distorted Wave*-Methoden berücksichtigt werden, welche im folgenden Kapitel beschrieben werden.

## 2.4 Die *Distorted Wave*-Näherung

Wie oben bereits erwähnt ist die Bornsche Reihe nur für eine Störung  $\eta < 1$  konvergent. Für größere Störungen muss der Einfluss des Projektils auf das Targetsystem sowohl vor als auch nach dem Stoß berücksichtigt werden. Das Targetelektron bewegt sich also nicht nur im Potential des Targetkerns, sondern auch im langreichweitigen Coulombpotential des Projektils. Die dabei auftretenden „Zwei-Zentren-Effekte“ führen zu einer Verzerrung (engl.: *distortion*) der Targetwellenfunktion [FPR91], die durch die *Distorted Wave*-Methode (DW) berücksichtigt werden können.

Anders als bei der Bornschen Reihe, wo der Hamiltonoperator des Target- und des Projektilsystems, als auch die Wechselwirkung zwischen Target- und Projektilsystem vor und nach dem Stoß gleich waren, wird bei der *Distorted Wave*-Methode der Hamiltonoperator  $H$  wie folgt aufgeteilt:

$$H = H_i + V_i = H_i + U_i + W_i \quad (2.26a)$$

$$H = H_f + V_f = H_f + U_f + W_f . \quad (2.26b)$$

Die Eigenfunktionen  $|\chi^\pm\rangle$  des „verzerrten“ Systems erfüllen die Schrödingergleichung

$$(H_i + U_i - E) |\chi^+\rangle = 0 \quad , \text{ bzw.} \quad (2.27a)$$

$$(H_f + U_f - E) |\chi^-\rangle = 0 . \quad (2.27b)$$

Das weitreichende Coulombpotential des Projektils ist in dem Störpotentialen  $U_{i,f}$  enthalten. Generell sind zwei Möglichkeiten vorhanden um  $U$  und  $|\chi^\pm\rangle$  zu erhalten.



Es kann zuerst  $U$  festgelegt werden und dann über Gleichung (2.26a) bzw. (2.26b) die Eigenfunktionen  $|\chi^\pm\rangle$  bestimmt werden, oder man legt  $|\chi^\pm\rangle$  fest und bestimmt daraus  $U$ . Da  $W$  und  $U$  frei gewählt werden können, ist es möglich,  $U$  so festzulegen, dass die exakten Eigenwerte  $E$  zu  $|\chi^\pm\rangle$  einfach zu finden sind. Das Störpotential  $W$  wird folgendermaßen bestimmt:

$$W_i |\chi_i^+\rangle = (H_i + U_i + W_i - E) |\chi_i^+\rangle = (H - E) |\chi_i^+\rangle, \text{ bzw.} \quad (2.28a)$$

$$W_f |\chi_f^-\rangle = (H_f + U_f + W_f - E) |\chi_f^-\rangle = (H - E) |\chi_f^-\rangle \quad (2.28b)$$

wobei meist ein Störungsansatz benutzt wird.

Für die  $T$ -Matrix folgt in der *post*-Form (s. Gleichung (2.11)):

$$T_{fi} = \langle \chi_f^- | W_f | \psi_i^+ \rangle + \langle \chi_f^- | V_i - W_f | \phi_i \rangle. \quad (2.29)$$

Eine Herleitung dieses Ausdruckes findet sich in [MC70]. Da der Beitrag des zweiten Terms zum Wirkungsquerschnitt klein ist, wird er in den meisten Rechnungen vernachlässigt und Gleichung (2.29) geht über in

$$T_{fi} = \langle \chi_f^- | W_f | \chi_i^+ \rangle. \quad (2.30)$$

Im Allgemeinen wird durch die DW-Näherung eine schnellere Konvergenz der Rechnung erreicht, als bei der Bornschen Reihe.

Zur Beschreibung der Einfachionisation wurde die häufig verwendete so genannten *Continuum Distorted Wave*-Methode erstmals von Belkić [Bel78] vorgeschlagen. Der Anfangs- und Endzustand wird dabei dargestellt durch

$$|\chi_{i,f}^{\pm\text{CDW}}\rangle = |\phi_{i,f}\rangle |CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle, \quad (2.31)$$

wobei die ungestörten Zustände des Targetelektrons  $|\phi_{i,f}\rangle$  durch das Projektil in Form einer Coulombwelle  $|CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle$  [McG97, SDR97] verzerrt werden. Dadurch wird die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetelektron vor und nach dem Stoß berücksichtigt.

### 2.4.1 CDW-EIS

Für  $v_p \rightarrow \infty$  konvergieren die DW-Rechnungen mit den Ergebnissen der Ersten Bornschen Näherung, und stimmen mit Experimenten bei hohen Geschwindigkeiten gut überein. Bei mittleren Geschwindigkeiten ( $v_p \approx k_e$ ) weichen die DW-Rechnungen allerdings stark vom Experiment ab, denn die Wellenfunktion (2.31) kann nicht richtig normiert werden [Cro82].

Aus diesem Grund wurde von Crothers *et al.* [CM83] als modifizierter Ansatz die

CDW-EIS-Näherung (*Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State*) vorgeschlagen. In diesem Ansatz werden folgende Anfangs- und Endzustände gewählt:

$$|\chi_f^{-\text{CDW}}\rangle = |\phi_f\rangle |CW(1 \leftrightarrow 2)\rangle \quad (2.32a)$$

$$|\chi_i^{+\text{EIS}}\rangle = |\phi_i\rangle |EP(1 \leftrightarrow 2)\rangle . \quad (2.32b)$$

Der Endzustand  $|\chi_f^{-\text{CDW}}\rangle$  ist identisch mit dem Endzustand der DW-Näherung (2.31), beim Anfangszustand wird die Coulombwelle jedoch durch eine Eikonalphase  $|EP(1 \leftrightarrow 2)\rangle$  ersetzt. Aus dieser Vorgehensweise leitet sich auch der Name dieser Methode ab. Ein Ausdruck für diese Eikonalphase findet sich beispielsweise in [FPR91, SDR97]. Der Vorteil dieser Phase ist ihre Normierbarkeit, wobei sie das gleiche asymptotische Verhalten wie eine Coulombwelle aufweist. Gleichzeitig ist die Wechselwirkung im Anfangszustand zwischen Projektil und Targetelektron in dieser Rechnung ebenfalls berücksichtigt. Mit der CDW-EIS-Methode wurden in den letzten Jahren beeindruckende Übereinstimmungen mit experimentellen Daten zum Ionenstoß erzielt [SMF 03, US03]. Dennoch, trotz der Fortschritte bei der theoretischen Beschreibung kann die Stoßionisation noch immer nicht vollständig beschrieben werden. So treten selbst für die Einfachionisation von Helium bei einer geringen Störung große Unterschiede zu experimentellen Daten auf [SMF 03].

## 2.5 Weitere nicht perturbative Methoden

Durch die fortschreitende Entwicklung in der Computertechnologie besteht heute die Möglichkeit, die Schrödingergleichung in einer akzeptablen Zeit numerisch zu lösen. Die erste numerisch exakte Lösung der Einfachionisation von Wasserstoff im Elektronenstoß bei niedrigen Projektilenergien [RBI 99] zeigte eine beeindruckende Übereinstimmung mit dem Experiment. Die dort verwendete Rechenmethode wird als *Exterior Complex Scaling* (ECS) bezeichnet [MBR04].

### 2.5.1 Die *Exterior Complex Scaling*-Methode

Bei dieser Methode wird die Wellenfunktion  $\Psi^+$  aufgeteilt in die Wellenfunktion des ungestörten Anfangszustandes  $\Phi_0$  und die Streuwellenfunktion  $\Psi_{\text{sc}}$  für die auslaufende Welle, so dass

$$\Psi^+ = \Phi_0 + \Psi_{\text{sc}} . \quad (2.33)$$

Die Schrödingergleichung kann dadurch umgeschrieben werden zu

$$(E - H)\Psi_{\text{sc}} = (H - E)\Phi_0 . \quad (2.34)$$

Diese Gleichung muss für die Randbedingungen der auslaufenden Welle gelöst werden und ist der Ausgangspunkt für die ECS-Rechnung. Dazu werden die Elektronenkoordinaten außerhalb eines Punktes  $R_0$  analytisch in eine komplexe Ebene transformiert, so dass für die neue Elektronenkoordinate  $R(r)$  gilt:

$$R(r) = \begin{cases} r & \text{für } r < R_0 \\ R_0 + (r - R_0)e^{i\theta} & \text{für } r \geq R_0 \end{cases} . \quad (2.35)$$

Anfangs wurde Gleichung (2.34) gelöst, indem die Wellenfunktion auf einem diskreten numerischen Gitter expandiert wurde und die daraus resultierenden linearen Gleichungen berechnet wurden. Da allerdings bereits bei wenigen Teilchen das Gleichungssystem sehr umfangreich wird, geht man in letzter Zeit dazu über, das Eigenwertproblem durch eine äquivalente zeitabhängige Schrödingergleichung zu vereinfachen [MHR02, HMR05]. Die Entwicklung dieser Methode befindet sich weiterhin in der Entwicklung und hat sich bis jetzt nur für niedrige Projektilenergien und niedrige Drehimpulse bewährt. Damit ist zur Zeit keine Beschreibung der Ionenstoßionisation möglich.

### 2.5.2 Die *Convergent Close Coupling*-Näherung

Die *Convergent Close Coupling*-Methode (CCC) wurde von Bray *et al.* [BS92] ursprünglich zur Berechnung von Anregungsprozessen in Elektron-Atom-Stößen und nicht für Ionisationsprozesse entwickelt. Bei der CCC-Methode handelt es sich um eine Weiterentwicklung der Methode der gekoppelten Kanäle (*Close Coupling*), zu denen auch die *R*-Matrix-Methode [BSB 02] zählt.

Bei den *Close Coupling*-Methoden wird nicht die Schrödingergleichung

$$(H - E) |\Psi_i^{(+)}\rangle = 0 \quad (2.36)$$

gelöst, sondern die *T*-Matrix

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | H - E | \Psi_i^{(+)} \rangle . \quad (2.37)$$

$E$  und  $|\Psi_i^{(+)}\rangle$  sind die Eigenwerte und Streuwellenfunktionen zu  $H$ , wobei  $|\Psi_i^{(+)}\rangle$  die Bedingungen für die auslaufende Welle erfüllt.  $|\Phi_f\rangle$  ist die asymptotische Wellenfunktion des ungestörten Hamiltonoperators  $H_0$ . Im Falle eines Ein-Elektron-Targets wird der Zwei-Teilchen-Zustand  $|\Psi_i^{(+)}\rangle$  durch eine Basis-Entwicklung geschrieben als

$$|\psi_i^+\rangle = \sum_n^f |f_n\rangle |\varphi_n\rangle , \quad (2.38)$$

die Koeffizienten  $f_n = \langle \varphi_n | \Psi_i^+ \rangle$  werden durch die Lösung der Lippmann-Schwinger (Gleichung (2.8)) berechnet. Der Zustand des Gesamtsystems entspricht also einer Superposition aller ungestörten Targetzustände  $|\varphi_n\rangle$ , sowohl der gebundenen als auch der Kontinuumszustände. Die einzige Näherung, die bis jetzt gemacht wurde ist die Anzahl  $n$  der Zustände über die summiert wird. Da die Kontinuumszustände nicht in diskreter, sondern in kontinuierlicher Form vorliegen, wurden diese zunächst vernachlässigt. Dadurch konnten nur Anregungsprozesse und keine Ionisationsprozesse behandelt werden. Durch die Beschreibung der Kontinuumszustände mit diskreten Pseudozuständen [Cal85, WW86] können nun auch Ionisationsprozesse untersucht werden.

Bei der CCC-Methode werden die Targetzustände  $|\varphi_n\rangle$  durch eine endliche Laguerre-Basis beschrieben. Das gestreute Projektil hingegen wird im asymptotische Endzustand  $|\phi_f\rangle$  als eine ebene Welle angenommen. Die gesamte Dynamik des Stoßprozesses ist damit nur durch die Koeffizienten  $f_n$  gegeben. Ein Überblick über die Entwicklung der CCC-Methode findet sich in [BF96, BFK 02].

Der Vorteil dieser Methode gegenüber der ECS-Methode (Kapitel 2.5.1) ist, dass sie auf komplexere Systeme mit mehreren gebundenen Elektronen einfach erweitert werden kann. Zu erwähnen ist allerdings, ähnlich wie bei der ECS-Methode, der immense numerische Aufwand zu Bestimmung der gesuchten Zustände. Problematisch ist auch, dass bei der CCC-Methode nur über endlich viele Zustände summiert wird, was einen Einfluss auf die berechneten Wirkungsquerschnitte haben kann. Durch die vorgenommene Partialwellenzerlegung ist die CCC-Methode nur für kleine Projektil-Drehimpulse gültig. Bei großen Projektilmassen, wie im Ionenstoß, oder hohen Geschwindigkeiten ist sie damit nicht anwendbar.

Im Elektronenstoß bei geringen und mittleren Projektilenergien hat die CCC-Methode in den letzten Jahren allerdings zu beeindruckenden Übereinstimmungen zwischen Experiment und Theorie geführt. Ein Überblick findet sich in [US03, BFK 02].

## 2.6 Klassische Monte-Carlo Simulation

Abgesehen von den oben erwähnten quantenmechanischen Rechnungen existiert die Möglichkeit das gesamte Stoßsystem klassisch zu simulieren. In der CTMC-Simulation (*Classical Trajectory Monte Carlo*) [OUSB89] wird der Stoßprozess mit Hilfe des klassischen Lagrange-Formalismus beschrieben. Über die Lagrange-gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad i = 1, \dots, f \quad (2.39)$$

und

$$\begin{aligned}\frac{dq_i}{dt} &= \frac{\partial L}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial L}{\partial q_i}\end{aligned}\tag{2.40}$$

werden die generalisierten Koordinaten  $p_i$  und Impulse  $q_i$  der Teilchen eingeführt.  $f$  ist hierbei die Anzahl der Freiheitsgrade des Systems. Die Lagrange-Funktion  $L = T - U$  erhält man aus der Differenz der kinetischen Energie  $T$  und der potentiellen Energie  $U$  des gesamten Systems. Die Integration dieses Systems aus gekoppelten Differentialgleichungen wird numerisch durchgeführt.

Mit diesem klassischen Ansatz können damit die Wechselwirkungen aller Targetkomponenten als auch aller Projektilkomponenten vor und nach dem Stoß berücksichtigt werden. Der Nachteil dieser Simulation ist, dass nicht gleichzeitig die Impuls- und Ortsverteilung klassisch beschrieben werden kann. Bei einer klassischen Beschreibung der Ortsverteilung muss daher die quantenmechanische Impulsverteilung verwendet werden. Entsprechend dieser Verteilung werden dann Stöße simuliert. Die Bewegungen aller Teilchen werden dabei durch klassische Trajektorien beschrieben.

## 2.7 Simultane Target- und Projektilionisation

In diesem Kapitel wird diskutiert, wie die oben erwähnten Theorien verwendet werden können um die simultane Ionisation von Target und Projektil zu beschreiben. Generell ist dies bisher nur mit der Ersten Bornschen Näherung, mit der CDW-Methode und im Rahmen von CTMC-Simulationen gelungen.

### Die Erste Bornsche Näherung

Der ersten theoretischen Arbeiten zur simultanen Ionisation von Projektil und Target wurden von Bates und Griffing [BG53, BG55] durchgeführt. Sie verwendeten die Erste Bornsche Näherung um die Ionisation eines H-Projektiles im Stoß mit einem H-Target zu untersuchen. Ein Überblick über die seitdem erschienen zahlreichen experimentellen und theoretischen Untersuchungen, die auf diesen Ansatz aufbauen, findet sich in [MMM94, SDR97, McG97].

Das Störpotential welches sämtliche Wechselwirkungen zwischen dem Target- und Projektilsystem berücksichtigt wurde schon in Kapitel 2.2 in der Gleichung (2.14) erwähnt. Zur besseren Übersicht wird es hier noch einmal dargestellt

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} - \sum_k \frac{Z_T}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_k|} + \sum_{j,k} \frac{1}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_k - \mathbf{r}_j|}.$$

Da die ungestörten Anfangs- und Endzustände von Projektil und Target  $|\phi_i^{T,P}\rangle$  und  $|\phi_f^{T,P}\rangle$  im Grenzfall  $t \rightarrow \pm\infty$  orthogonal zueinander sind, kann die Streumatrix  $S$  (Gleichung (2.7)) in der Ersten Bornschen Näherung geschrieben werden als

$$\begin{aligned} S_{fi}^{1B} &= -i2\pi \langle \phi_f^T \phi_f^P | V | \phi_i^P \phi_i^T \rangle \delta(\Delta E) \quad , \text{ wobei} \\ \Delta E &= \varepsilon_f^P + \varepsilon_f^T - \varepsilon_i^P - \varepsilon_i^T \end{aligned} \quad (2.41)$$

die Energiedifferenz zwischen dem End- und Anfangszustand ist und  $V$  das oben erwähnte Potential. In Gleichung (2.41) bleibt nur der Term übrig, der sowohl von  $\mathbf{r}$  als auch von  $\boldsymbol{\rho}$  abhängt. Alle anderen Terme verschwinden aufgrund der Orthogonalität der Anfangs- und Endzustände. Die  $S$ -Matrix vereinfacht sich daher zu

$$\begin{aligned} S_{fi}^{1B} &= i2\pi \left\langle \phi_f^T \phi_f^P \left| \frac{1}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho} - \mathbf{r}|} \right| \phi_i^P \phi_i^T \right\rangle \delta(\Delta E) \quad , \text{ bzw.} \quad (2.42) \\ S_{fi}^{1B} &= \frac{i}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{R} \left\langle \varphi_f^T \varphi_f^P \left| e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \left( \frac{1}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho} - \mathbf{r}|} \right) \right| \varphi_i^P \varphi_i^T \right\rangle \delta(\Delta E) \end{aligned}$$

wobei das Projektil als ebene Welle angenommen wird (Gleichung (2.19)) und  $\mathbf{q}$  der Impulsübertrag ist.  $|\varphi_{(i,f)}^{(T,P)}\rangle$  bezeichnet wieder die ungestörten Anfangs- und Kontinuumszustände des Target- und des Projektilelektrons.

Die Integration über  $\mathbf{R}$  führt schließlich zu einer Beschreibung der  $S$ -Matrix durch

$$S_{fi}^{1B} = \frac{i}{\pi q^2} \langle \varphi_f^T \varphi_f^P | e^{-i\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho}-\mathbf{r})} | \varphi_i^P \varphi_i^T \rangle \delta(\Delta E) . \quad (2.43)$$

Abgesehen vom Energieverlust  $\Delta E$  wird die simultane Ionisation von Target und Projektil damit nur durch eine Wechselwirkung zwischen den beiden aktiven Elektronen beschrieben.

Das kurzreichweitige Potential in dem sich das aktive Projektilelektron im vorliegenden Experiment um den neutralen Projektilkern ( $H^0$ ) bewegt wird durch ein Yukawa-Potential (FBA-Y) beschrieben [CF86]. Ausgehend von diesem Yukawa-Potential werden die Anfangs- und Endzustände des Projektilelektrons  $|\varphi_{(i,f)}^P\rangle$  über die Hartree-Fock-Methode berechnet.

### **Distorted Wave-Methoden**

Mit Hilfe der *Distorted Wave*-Methode werden beim Ionenstoß die Wechselwirkungen zwischen Projektil- und Targetsystem im Anfangs- und Endzustand im Allgemeinen gut beschrieben. Betrachtet man allerdings ein strukturiertes Projektil sind die Rechnungen nicht mehr durchführbar und weitere Näherungen müssen vorgenommen werden. So ist es mit der oben beschriebenen CDW-EIS nur möglich, die

Ionisation des Heliumtargets durch ein punktförmiges Projektil (z.B. Antiproton, Proton) zu berechnen.

Eine Vereinfachung der CDW-EIS-Methode stellt die so genannte SEA (*symmetric eikonal approximation*) [VN04] dar, die zur Beschreibung der simultanen Ionisation von Target und Projektil in relativistischen Stößen entwickelt wurde [Voi05]. Bei der CDW-EIS-Methode wird lediglich der Anfangszustand durch eine Eikonalphase modifiziert. Bei der SEA-Methode wird als Vereinfachung auch für den Endzustand die gleiche Eikonalphase wie für den Anfangszustand gewählt. Die Eikonalphase hängt nur ab von der Wechselwirkung zwischen dem Targetkern und dem Projektilelektron. Da durch diese Eikonalphase die Anfangs- und Endzustände nicht mehr orthogonal zueinander sind, hängt der Wirkungsquerschnitt zusätzlich zur Elektron-Elektron Wechselwirkung auch von der Wechselwirkung zwischen Targetkern und Projektilelektron ab.

### Vergleich mit (e,2e)

Mit anderen quantenmechanischen Ansätzen ist eine Beschreibung der simultanen Ionisation bisher nicht gelungen. Da das Projektilektron im vorliegenden Fall aber lediglich mit 0,75 eV an den  $H^0$ -Kern gebunden ist, ist es nahe liegend dieses Elektron als ein quasi-freies Elektron zu betrachten und die Targetionisation durch einen Stoß mit diesem freien Elektron zu beschreiben. Die Energie des Projektilelektrons beträgt 109 eV bei der im vorliegenden Experiment gewählten Einschußenergie von 200 keV für das  $H^-$ -Projektil ( $v_p = 2,83$  a.u.).

Für große Projektilenergien liefert die CTMC-Simulation ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Beim einem Stoß mit Elektronen oder langsamen Ionen zeigen diese Simulationen allerdings keine gute Übereinstimmung und wurden daher auch nicht zur Beschreibung des in dieser Arbeit durchgeführten Experiments verwendet.





# Kapitel 3

## Experimenteller Aufbau

Mit Hilfe des verwendeten Reaktionsmikroskopes können die Impulse aller im Stoß entstandenen geladenen Fragmente eines Target-Atoms oder Moleküls über nahezu den gesamten Raumwinkel gemessen werden. Das Reaktionsmikroskop besteht aus der Kombination eines COLTRIMS Spektrometers (*Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy*) zur Bestimmung der Impulse des ionisierten Targets und einem Elektronenspektrometer, mit welchem eins oder mehrere Elektronen über nahezu den gesamten Raumwinkel detektiert werden können. Dabei ist die Akzeptanz im Wesentlichen durch die am Spektrometer angelegten Felder vorgegeben.

Da die Impulse aller Stoßprodukte bestimmt werden ist es möglich, kinematisch vollständige Experimente der verschiedensten Stoßsysteme durchzuführen. Ein Überblick über durchgeführte Experimente und die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten findet sich in [DMJ 00, US03, UMD 03].

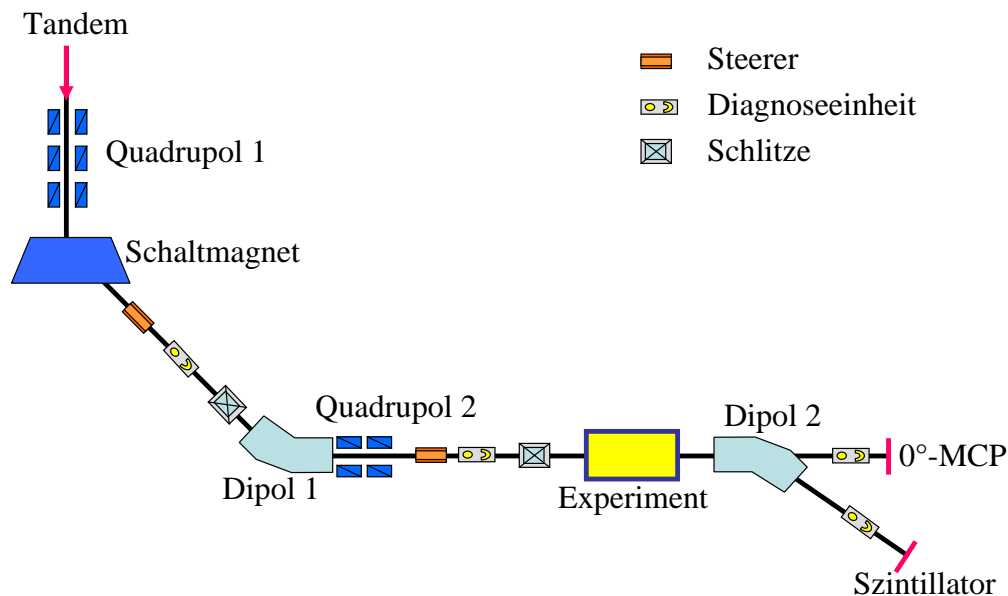
Entscheidend für eine hohe Auflösung bei Messungen mit einem Reaktionsmikroskop ist die Temperatur des Targets. So entspricht eine Impulsauflösung von 0,1 a.u. einer Targettemperatur von 218 mK. Ein Überschall-Gasjet, wie er in dieser Arbeit verwendet wird, erlaubt auch das Kühlen einfacher atomarer Systeme. Um Mechanismen in der Stoßdynamik von Prozessen zu untersuchen (z.B. Einfach- und Doppelionisation) eignen sich diese atomaren Systeme mit möglichst wenig Elektronen besonders, wie Helium oder Wasserstoff, bei dem es sich als einfachstes Atom um ein Einelektronensystem handelt. Diese Atome haben den Vorteil, dass sie theoretisch leichter zu beschreiben sind, atomarer Wasserstoff ist sogar als einziges System analytisch beschreibbar. Helium ist experimentell am leichtesten zugänglich, da es schon in atomarer Form vorliegt. Um atomaren Wasserstoff zu erhalten müssen erst die Wasserstoffmoleküle des Gases dissoziiert werden. Da die Produktion von kaltem atomarem Wasserstoff ein Teil dieser Arbeit ist, wird in späteren Kapiteln näher auf die Dissoziation (s. Kapitel 5.2.1) eingegangen.

In den folgenden Kapiteln wird die Funktionsweise des Reaktionsmikroskopes be-

schrieben, sowie die Eigenschaften des verwendeten Gasjets. Zum Schluss wird die Akzeptanz und das Auflösungsvermögen des verwendeten Aufbaus diskutiert. Da in dieser Arbeit die ersten Messungen am neuen Hochenergie-Strahlrohr L6 am Tandem Beschleuniger des Max-Planck-Instituts für Kernphysik durchgeführt wurden, werden zuerst einige Eigenschaften dieses Strahlplatzes vorgestellt.

### 3.1 Hochenergie-Strahlrohr

Das Strahlrohr ist über einen  $90^\circ$ -Magnet mit dem 12 MV MP-Tandem Beschleuniger des Max-Planck-Instituts für Kernphysik (MPI-K) in Heidelberg verbunden und für Projektilenergien bis zu  $12 \text{ MeV} \cdot q$  ausgelegt, wobei  $q$  die Ladung des Projektils ist. Entlang des Strahlrohres dient ein Quadrupol-Trippllett und ein Quadrupol-Duplett mit anschließenden Steuerern zum Fokussieren und Lenken des Projektilstrahles (siehe Abb. 3.1). Nach jeder dieser Magneteinheiten kann je eine Diagnoseeinheit, bestehend aus Farady-Cup und Szintillationsquarz, zur Intensitäts- und Positionsbestimmung verwendet werden. Mit den beiden xy-Schlitzpaaren ist es möglich einen kollimierten Strahl herauszuschneiden, der dann zum Experiment geführt wird.



**Abbildung 3.1:** Schematischer Aufbau des Hochenergie-Strahlrohres L6. Eingezeichnet sind Magnete und Diagnoseeinheiten zur Fokussierung und Charakterisierung des Strahls sowie die Detektoren zur Projektildetektion.

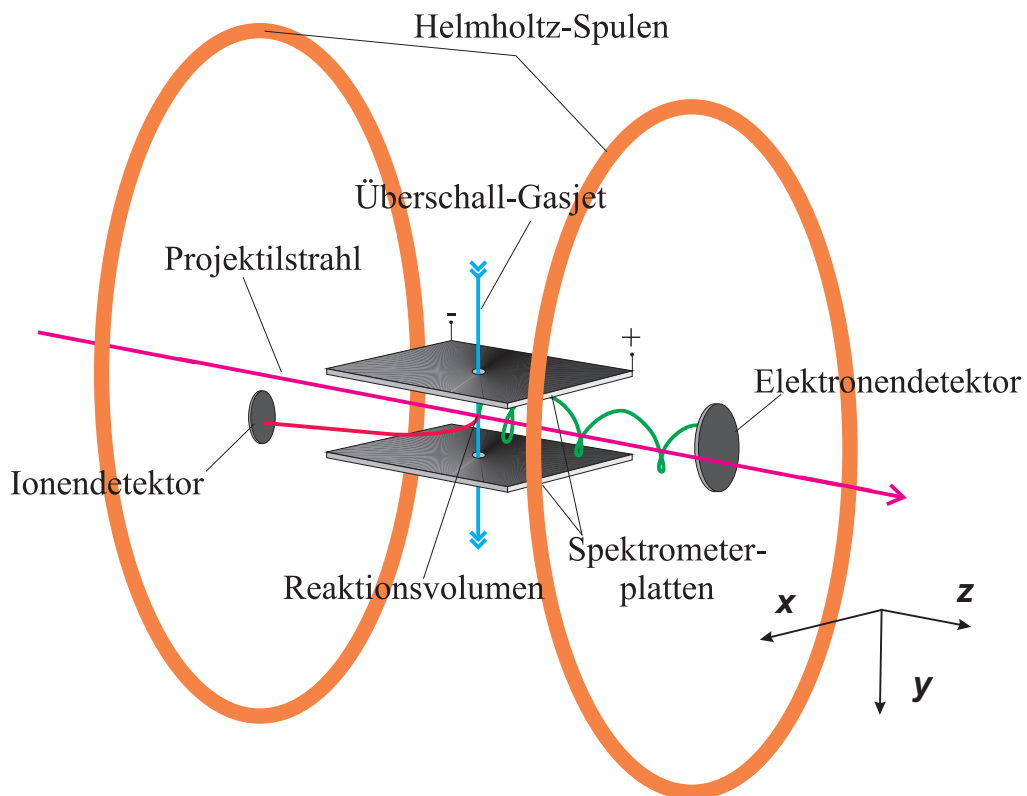
Nach dem Experiment können die Projektile ladungsselektiv mit einem zweiten Dipolmagnet abgelenkt werden. So ist es möglich Reaktionen zu vermessen, bei denen

das ionisierte Target selektiv in Koinzidenz zu umgeladenen Projektilen detektiert wird, z.B. bei simultaner Ionisation von Target und Projektil. Bei der Messung zur gleichzeitigen Ionisation von He-Target und  $H^-$ -Projektil wurden so z.B. alle geladenen Projektilen abgelenkt, und nur die neutralen Projektilen, die vom Magnetfeld unbeeinflusst blieben, wurden auf dem  $0^\circ$ -Detektor detektiert.

## 3.2 Das Reaktionsmikroskop

### 3.2.1 Spektrometer

Im Reaktionsmikroskop [MUS 96] werden ionisierte Targetatome durch ein schwaches, homogenes elektrisches Feld von wenigen V/cm auf einen orts- und zeitauffösenden Detektor abgebildet. Die dabei gemessene Flugzeit und der Auftreffort des Ions auf dem Detektor werden verwendet, um den Impuls mit dem das Ion aus der Reaktion hervorgeht, zu bestimmen. Durch das angelegte elektrische Feld werden



**Abbildung 3.2:** Schematische Darstellung des Reaktionsmikroskops (aus [Fis03]).

die Elektronen ebenfalls abgelenkt, aufgrund ihrer negativen Ladung allerdings in entgegengesetzter Richtung zu den Ionen. Da die Energie der Elektronen wesentlich

größer ist als die Energie der Ionen (einige eV im Vergleich zu wenigen meV für die Rückstoßionen), genügt das elektrische Feld alleine nicht, um die Elektronen auf einen zweiten orts- und zeitauflösenden Detektor zu führen. Dieses Problem wird durch ein homogenes magnetisches Feld von einigen Gauß behoben, welches durch ein Helmholtz-Spulen-Paar erzeugt wird (siehe Abb. 3.2). Durch dieses Feld werden die Elektronen auf Zyklotronbahnen gezwungen und auf den Elektronendetektor gelenkt. Aufgrund der höheren Masse verändert sich die Flugbahn der Ionen durch dieses Magnetfeld nur unwesentlich und kann korrigiert werden. Die Berechnung der Elektronenimpulse ist durch die Zyklotronbewegung etwas komplizierter, kann aber fast im gesamten Impulsraum der emittierten Elektronen durchgeführt werden.

In Abb. 3.2 ist der Aufbau des Reaktionsmikroskopes skizziert. Das Gastarget strömt senkrecht zum Projektilstrahl in das Reaktionsvolumen, in dem die Elektronen und Ionen erzeugt werden. Oberhalb und unterhalb des Projektilstrahls sind zwei hochohmig beschichtete Keramikplatten angebracht (20 x 22 cm). An die Ecken dieser Platten wird das gewünschte Potential zum Extrahieren der Ionen und Elektronen gelegt. Durch die hochohmige Beschichtung fällt dieses Potential gleichmäßig entlang der Platten ab und erzeugt ein homogenes elektrisches Feld [Sch94, MUS 96, Fis00] in Richtung der Projektilachse (Extraktionsrichtung).

Da das Reaktionsvolumen durch die Breite des Targets (etwa 1 mm) in z-Richtung ausgedehnt ist, ist es notwendig, die dadurch auftretende Unschärfe in der Flugzeit durch die so genannte Flugzeitfokussierung [Fis00, US03] zu korrigieren. Dazu schließt an beiden Seiten der Spektrometerplatten je eine Driftröhre an, die auf dem gleichen Potential wie die Plattenenden liegen. Dadurch wird ein feldfreier Bereich mit exakt der doppelten Länge (22 cm) wie die Beschleunigungsstrecke erzeugt. Damit wird erreicht, dass die Flugzeit für Teilchen die mit dem gleichen Impuls an leicht unterschiedlichen Orten entlang des Projektilstrahls erzeugt wurden zur gleichen Zeit am Detektor ankommen. Diese Flugzeitfokussierung gilt sowohl für die emittierten Elektronen als auch für die Recoilionen. Die beste erreichte Impulsauflösung beträgt mit dieser Fokussierung 0,07 a.u. [UMD 97] und ist für die Ionen im Wesentlichen nur durch die Targettemperatur begrenzt. Eine Veränderung der Potentiale verändert die Akzeptanz des Spektrometers senkrecht zum Projektilstrahl sowie die Flugzeit der Elektronen und Ionen. Durch ein höheres Potential steigt die Akzeptanz des Spektrometers, allerdings wird auch die Impuls- und Energieauflösung verschlechtert, so dass abhängig vom durchgeführten Experiment der beste Kompromiss zwischen Auflösung und Akzeptanz getroffen werden kann.

Zur Detektion der Ionen wird ein *Microchannelplate*-Detektor (MCP) (Durchmesser 4cm) in Kombination mit einer *Wedge&Strip*-Anode verwendet [Fis00, US03]. Das schnelle Signal des MCP dient der Messung der Flugzeit des Ions, aus den Signalen der *Wedge&Strip*-Anode lässt sich der Auftreffort der Ionen rekonstruieren. Durch

den Impuls der Gasatome in Jetrichtung (etwa 5,9 a.u.) erhalten die Recoilionen ebenfalls einen Impuls in diese Richtung. Aus diesem Grund ist der Recoildetektor unterhalb der Projektilachse angebracht. Eine Veränderung der Potentiale an den Spektrometerplatten kann den Ort der Recoilionen auf dem Detektor ebenfalls etwas verändern. Dies wird je nach verwendetem Targetgas genutzt, um den Detektor möglichst in der Mitte zu treffen und damit eine maximale Akzeptanz in transversaler Richtung zu erhalten.

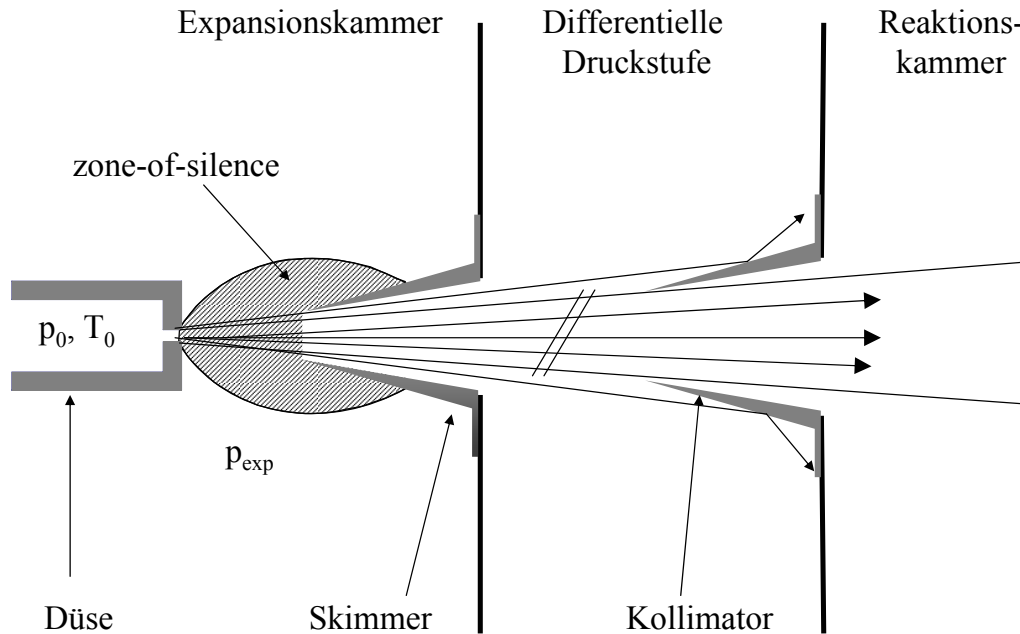
Zum Detektieren der Elektronen wird ebenfalls ein MCP-Detektor (Durchmesser 8 cm) verwendet, allerdings in Kombination mit einer *Delay-Line*-Anode [Fis00, US03]. Diese Anode hat den Vorteil, dass zwei oder mehr Elektronen innerhalb kürzester Zeit detektiert werden können (*multihit*-Ereignisse). Eine solche Anode hat eine typische Totzeit von 10 ns und ermöglicht dadurch beispielsweise die Detektion beider Elektronen einer Doppelionisation des Targets. Der Elektronendetektor ist seitlich von der Projektilachse angebracht, um zu verhindern, dass er von Projektilen getroffen wird. Die ionisierten Elektronen werden durch eine leichte Verkipfung der Magnetfeldachse gegenüber der Projektil- bzw. Spektrometerachse vom Reaktionsvolumen auf die Mitte des Elektronendetektors geführt.

#### 3.2.2 Überschall-Gasjet

Bei einem Überschall-Gasjet expandiert das Gas von einem Bereich mit hohem Druck  $p_0$  (mehrere bar bei einem Heliumjet) über eine Düse in ein Reservoir mit niedrigerem Druck  $p_{exp}$  ( $\approx 10^{-3}$  mbar). Ist das Verhältnis von  $p_0/p_{exp}$  größer als ein bestimmter kritischer Wert (der für alle Gase kleiner als 2,1 ist), erfolgt diese Expansion adiabatisch. Dabei wird im Idealfall die gesamte innere Energie des Gases (also die freie Enthalpie  $H$ , die der Summe aus der thermischen Energie und der durch den Druck pro Gasatom gespeicherten Arbeit entspricht) in gerichtete kinetische Energie  $E$  umgewandelt. Die so expandierten Gasatome erreichen eine Geschwindigkeit  $v_{jet}$ , die größer ist als die lokale Schallgeschwindigkeit. Durch Stöße mit dem Hintergrundgas kommt es allerdings zu Schockfronten, die den Bereich, in dem die Geschwindigkeitsverteilung der Atome sehr scharf ist, die so genannte *Zone-of-Silence*, vom Hintergrundgas trennt. Die Stöße an den Schockfronten führen dort zu einer breiteren Geschwindigkeitsverteilung und machen es notwendig, aus der *Zone-of-Silence* mit Hilfe eines *Skimmers* jenen Anteil des Jets herauszuschneiden, der eine scharfe Geschwindigkeitsverteilung aufweist. Dazu wird ein Aufbau wie in Abbildung 3.3 dargestellt verwendet.

Der *Skimmer* wird so positioniert, dass er in die *Zone-of-Silence* hinein ragt. Um einen Anstieg des Hintergrunddrucks in der Experimentierkammer durch den Jetbetrieb zu minimieren und die Größe des Gasjets am Reaktionsort geometrisch zu ver-

kleinern wird ein zweiter *Skimmer* als Kollimator verwendet. Der Bereich zwischen den beiden *Skimmern* wird separat gepumpt und so als differentielle Pumpstufe genutzt. Dadurch wird das Vakuum am Reaktionsort ( $10^{-8}$  -  $10^{-9}$  mbar) durch den Betrieb des Jets kaum verschlechtert.



**Abbildung 3.3:** Skizze der Skimmeranordnung zur Erzeugung eines lokalisierten Überschall-Gasjets.

### Impulsverteilung eines Überschall-Gasjets

Unter der Annahme, dass die gesamte Enthalpie

$$H = \frac{5}{2} k_B T_0 \quad (3.1)$$

in gerichtete kinetische Energie

$$E = \frac{p_{jet}^2}{2m}, \quad (3.2)$$

umgewandelt wird, ergibt sich ein Impuls der Targetatome von

$$p_{jet} = \sqrt{5 k_B T_0 m} = m v_{jet}, \quad (3.3)$$

wobei  $k_B$  die Boltzmannkonstante,  $T_0$  die Temperatur des Gases vor der Expansion und  $m$  die Masse der Targetatome ist.

Die komplette Umwandlung der freien Enthalpie in kinetische Energie erfolgt aber nur im Idealfall, bei dem das Gas nach der Expansion eine interne Temperatur von

### 3.2. Das Reaktionsmikroskop

---

$T = 0\text{ K}$  hat. Bei einer realen Expansion hingegen ist die erreichbare Temperatur durch das so genannte *Speedratio*  $S$  festgelegt

$$S = \frac{v_{\text{jet}}}{v_{\text{therm}}} = \sqrt{\frac{5 T_0}{2 T}}. \quad (3.4)$$

Diese Größe steht für das Verhältnis zwischen der Jetgeschwindigkeit  $v_{\text{jet}}$  und der thermischen Geschwindigkeit  $v_{\text{therm}}$  zwischen den einzelnen Gasatomen des Jets nach der Expansion. Bei bekanntem *Speedratio* lässt sich damit aus der Temperatur des Gases  $T_0$  vor der Expansion die thermische Breite  $T$  des Jets nach der Expansion bestimmen. Die Impulsbreite  $\Delta p$  des Jets nach der Expansion ist über

$$\Delta p = \sqrt{2 k_B T m} = m v_{\text{therm}} \quad (3.5)$$

mit der thermischen Breite des Jets verknüpft.

In der Praxis hängt das *Speedratio* außer von der Temperatur  $T_0$  des Gases allerdings noch von weiteren Parametern ab. So verändern der Durchmesser  $d$  der verwendeten Düse, der Vordruck  $p_0$  des Gases vor der Düse sowie Stöße zwischen den Gasatomen die Expansionseigenschaften des Jets [Mil88]. All diese Einflüsse werden in der mit *Terminal Parallel Speed Ratio*  $S_{||\infty}$  bezeichneten Formel

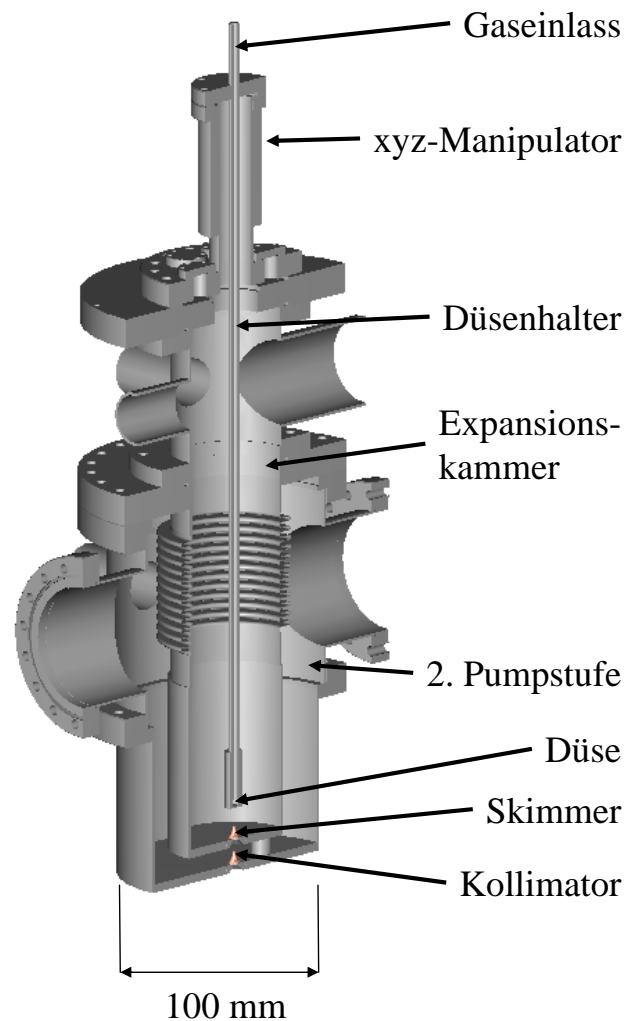
$$S_{||\infty} = A \left[ \sqrt{2} \frac{3 p_0 d}{4 k_B T_0} \left( \frac{53 C}{k_B T_0} \right)^{1/3} \right]^B \quad (3.6)$$

berücksichtigt.  $A$ ,  $B$  und  $C$  sind gasspezifische Konstanten, die unter anderem die Stöße der Gasatome untereinander berücksichtigen (siehe Tabellen A.1, A.2). Der Druck  $p_0$  wird in dieser Formel in mbar,  $d$  in cm und  $T$  in K angegeben. Aus Gleichung (3.4) - (3.6) erhält man die nach der Expansion erwartete Impulsbreite

$$\Delta p = \sqrt{5 k_B \frac{T_0}{S_{||\infty}^2} m}. \quad (3.7)$$

Im Wesentlichen existieren drei Möglichkeiten, um das *Speedratio* und damit die Impulsauflösung zu erhöhen, die alle ihre Vor- und Nachteile besitzen. Eine Erhöhung des Vordrucks ist bei den meisten Gasen der einfachste und effektivste Weg, um das *Speedratio* und so auch die Impulsauflösung zu erhöhen. So ergibt eine Vervierfachung des Vordrucks eine Verdopplung von  $S_{\infty}$ , also eine Halbierung der Impulsbreite. Das gleiche gilt bei einer Vervierfachung des Düsendurchmessers  $d$ , allerdings steigt die auftretende Gaslast in der Expansionskammer mit  $p_0 d^2$  (siehe z. B. [MW88]), so dass eine Vergrößerung des Düsendurchmessers eine rapide Verschlechterung des Vakuums in der Expansionskammer und damit eine Zerstörung der *Zone-of-Silence* zur Folge hat.

Die Vorkühlung des Gases auf eine niedrigere Temperatur ist ebenfalls sehr effektiv, erfordert allerdings einen hohen technischen Aufwand, da die Kühlung innerhalb des Vakuumsystems erfolgen muss. So kann zum Beispiel die Düse mit einem Kaltkopf gekühlt werden [KS99] oder das Gas durch ein Bad mit flüssigem Stickstoff bzw. Helium geleitet werden [WS82].



**Abbildung 3.4:** Aufbau des Helium-Gasjets. Zu sehen sind die beiden differentiellen Pumpstufen (Expansionsstufe und 2. Pumpstufe), sowie Skimmeranordnung und xyz-Manipulator zum Justieren der Düse.

Bei einem typischen Heliumjet, wie er in dieser Arbeit verwendet wurde, wird eine Düse mit Düsendurchmesser  $d = 30 \mu\text{m}$  und ein Vordruck von  $p_0 = 11 \text{ bar}$  verwendet. Aus Formel (3.6), sowie  $A$ ,  $B$ ,  $C_6/k_B$  aus A.1 und A.2 folgt daraus, dass auf diese Weise ein *Speedratio* von etwa 30 erreicht werden kann. Hat das Gas vor der



Expansion eine Temperatur von 300 K liegt nach Formel (3.4) die interne Temperatur nach der Expansion bei  $T = 833 \text{ mK}$ , was einer Breite der Impulsverteilung von  $\Delta p \approx 0,20 \text{ a.u.}$  entspricht.

Der Aufbau des verwendeten Helium-Gasjets ist in Abbildung 3.4 skizziert. Der xyz-Manipulator dient zum Einjustieren der Düse auf die Skimmer. Während unserer Experimente wurde in der Expansionskammer bei laufendem Jet mit einem Vor- druck von 11 bar ein Druck von  $3 \cdot 10^{-2} \text{ mbar}$  und in der zweiten Pumpstufe ein Druck von  $2 \cdot 10^{-7} \text{ mbar}$  erreicht.

#### Dichte eines Überschall-Gasjets

Wie bereits erwähnt wird bei der Expansion des Gases thermische Energie des Gases in gerichtete kinetische Energie umgewandelt. Dadurch ergibt sich für die Geschwindigkeit des Gases nach der Expansion

$$v_{jet}^2 = 2 \int_T^{T_0} c_p dT, \quad (3.8)$$

wobei

$$c_p = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \cdot \frac{k_B}{m} \quad (3.9)$$

die spezifische Wärme bei konstantem Druck ist. Mit  $f$  als der Anzahl der Freiheitsgrade des Gases ist der Adiabatenexponent  $\gamma$  definiert als  $\gamma = (f + 2)/2$ . Unter der Annahme, dass  $c_p$  über den betrachteten Temperaturbereich konstant ist, ergibt sich für die Geschwindigkeit

$$v_{jet}^2 = 2c_p(T_0 - T) = 2 \frac{\gamma}{\gamma - 1} \cdot \frac{k_B}{m} (T_0 - T). \quad (3.10)$$

Durch die Definition der Machzahl  $M$  als  $M = v_{jet}/a$ , wobei  $a = \sqrt{\gamma T k_B/m}$  die Schallgeschwindigkeit in einem Gas ist, folgen aus Gleichung (3.10) folgende Relationen für die Temperatur  $T$  und die Geschwindigkeit  $v_{jet}$ :

$$\frac{T}{T_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{-1}, \quad (3.11a)$$

$$v_{jet} = M \sqrt{\frac{\gamma k_B T_0}{m}} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{-1/2}, \quad (3.11b)$$

sowie mit Hilfe der Adiabatengleichung ( $p \sim T^{\gamma/(\gamma-1)}$ ) für die Teilchendichte  $n$ :

$$\frac{n}{n_0} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{-1/(\gamma-1)}. \quad (3.11c)$$

Der Index 0 bezeichnet die Bedingungen vor der Expansion. Aus diesen Relationen kann der Teilchenfluss  $\dot{N} = n v_{jet} A_d$  durch eine Düse mit der Fläche  $A_d$  bestimmt werden.

Da die Anzahl der Teilchen vor und nach der Düse identisch sein muss, können zur Berechnung des Teilchenflusses die Konditionen an der Düse verwendet werden [Mil88]. Dort entspricht die Geschwindigkeit des Gases gerade der Schallgeschwindigkeit (effusiver Strahl) und damit ist  $M = 1$ . So ergibt sich für den Teilchenfluss:

$$\dot{N} = F(\gamma) n_0 \sqrt{\frac{2k_B T_0}{m}} A_d \quad (3.12)$$

mit

$$F(\gamma) = \left( \frac{\gamma}{\gamma + 1} \right)^{1/2} \left( \frac{2}{\gamma + 1} \right)^{1/(\gamma-1)}. \quad (3.13)$$

Damit ist es möglich, die ideale Intensität  $I_0$  des Gasjets entlang der Mittelachse zu berechnen. Die Intensität, in Atome pro Sekunde und Steradian, ist proportional zum Teilchenfluss und berechnet sich, mit  $p = nk_B T$ , über

$$I_0 = \frac{\kappa}{\pi} \cdot \dot{N} = \kappa F(\gamma) p_0 \sqrt{\frac{2}{k_B T_0 m}} \frac{d^2}{4}. \quad (3.14)$$

$d$  ist der Durchmesser der verwendeten Düse (in cm) und  $\kappa$  ein Proportionalitätsfaktor für verschiedene Adiabatenexponenten  $\gamma$ . Einige experimentell bestimmte Werte für  $\kappa$  bei verschiedenen Adiabatenexponenten sind in Tabelle A.1 aufgeführt.

Durch Kollisionen untereinander oder durch Kollisionen mit vom Skimmer reflektierten Atome werden Gasatome aus dem Gasjet heraus gestreut und die Intensität des Jets dadurch verringert. Eine Abschätzung der absoluten Intensität  $I$  am Targetort unter Berücksichtigung dieser Effekte [BV81] führt zu

$$I = I_0 \cdot 1,138 \cdot e^{-0,37\lambda_s/d_s}, \quad (3.15)$$

wobei  $d_s$  der Durchmesser der Skimmeröffnung und  $\lambda_s$  die freie Weglänge am Ort des Skimmers ist. Die Dichte  $n_{exp}$  am Wechselwirkungsort berechnet sich dann über

$$n_{exp} = \frac{I\Omega}{v_{jet} A_{exp}} = \frac{I}{v_{jet} r^2}. \quad (3.16)$$

Hierbei ist  $v_{jet}$  die Geschwindigkeit der Gasatome nach der Expansion,  $A_{exp}$  die Fläche des Jets am Wechselwirkungsort,  $r$  der Abstand von Düse zum Wechselwirkungsort. Damit ist  $A_{exp}/r^2 = \Omega$  der Raumwinkel, in den das Gas expandiert. Für den in diesem Experiment verwendeten Heliumgasjet ergibt sich eine Targetdichte am Wechselwirkungsort von  $10^{12}$  Atome/cm<sup>3</sup> bei 10 bar Vordruck und stimmt somit genau mit der gemessenen Targetdichte überein.

### 3.3 Impulsbestimmung

Wie in Kapitel 3.2.1 bereits erwähnt, ist es möglich durch die Messung des Auftreffortes und der Flugzeit von Elektronen bzw. Recoilionen den jeweiligen Impulsvektor zu berechnen. In diesem Kapitel wird beschrieben, wie die Impulse in Extraktionsrichtung (longitudinal) und senkrecht (transversal) dazu rekonstruiert werden.

Da die Elektronen und Ionen entlang des Projektilstrahls extrahiert werden (longitudinale Extraktion), entspricht die Symmetrieachse des Stoßprozesses der Symmetrieachse des Spektrometers. Daher ist es nützlich die Impuls der Stoßprodukte in Zylinderkoordinaten auszudrücken, d.h. in einen longitudinalen Anteil  $p_{\parallel}$  (parallel zur Projektilachse) und einen transversalen Anteil  $p_{\perp}$ . Für eine vollständige Beschreibung des Impulses in drei Dimensionen wird zusätzlich der Azimuthalwinkel  $\varphi$  in der Ebene senkrecht zum Projektilstrahl benötigt. Durch diese drei Größen ist es möglich den gesamten Impulsraum der Elektronen und Recoilionen durch Zylinderkoordinaten zu beschreiben.

Der Impuls des Projektils kann in der Regel bei diesen hohen Projektilenergien nicht direkt bestimmt werden, da der Streuwinkel des Projektils weniger als 0,1 mrad beträgt. Dies bedeutet eine Ablenkung um 1 mm nach einer Strecke von 10 m, was nicht mit genügend Auflösung detektiert werden kann. Die Bestimmung des Projektilimpulses ist aber auch nicht nötig, da es auf Grund der Impulserhaltung genügt, die Impulse aller anderen Fragmente zu messen.

#### 3.3.1 Rekonstruktion der Longitudinalimpulse

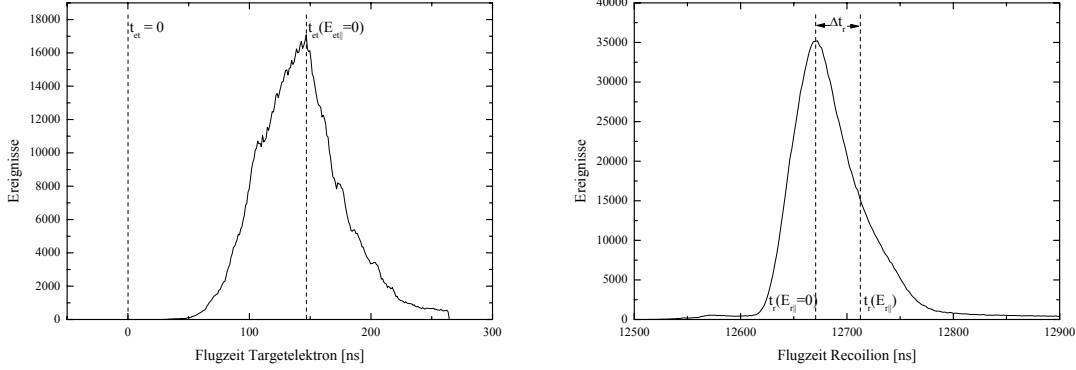
Ein geladenes Teilchen welches im Reaktionsvolumen erzeugt wird erhält durch den Stoß einen Anfangsimpuls in longitudinaler Richtung von  $p_{\parallel} = \pm\sqrt{2mE_{\parallel}}$ . Hierbei ist  $m$  die Masse und  $E_{\parallel}$  die Startenergie des Teilchens in longitudinaler Richtung. Der Anfangsimpuls ist positiv („+“), falls es sich in Richtung des Detektors bewegt, andernfalls ist er negativ („-“). Auf dem Weg durch das Extraktionsfeld der Länge  $a$  nimmt es, abhängig von seiner Ladung  $q$  und dem Extraktionspotential  $U$ , die zusätzliche Energie  $q \cdot U$  auf. Nach der feldfreien Driftstrecke der Länge  $d$  ist die Gesamtflugzeit  $t_{\pm}$  bis zum Detektor damit

$$t_{\pm}(E_{\parallel}) = f \cdot \sqrt{m} \cdot \left[ \frac{2a}{\sqrt{E_{\parallel} + qU} \pm \sqrt{E_{\parallel}}} + \frac{d}{\sqrt{E_{\parallel} + qU}} \right] \quad (3.17)$$

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

Der Vorfaktor  $f$  ist gültig für den Fall, dass  $t$  in ns,  $a$  und  $d$  in cm,  $E_{\parallel}$  und  $qU$  in eV und die Masse  $m$  des Teilchens in atomaren Masseneinheiten amu ( $1 \text{ amu} = \frac{1}{12} {}^{12}\text{C}$ )

bzw. in atomaren Einheiten a.u. ( $1 \text{ a.u.} = m_e$ ) angegeben wird. Die Definition der atomaren Einheiten befindet sich in A.2.



**Abbildung 3.5:** Flugzeiten von Elektronen (links) und  $\text{He}^+$ -Ionen (rechts) bei der Einfachionisation von He. Die Spektrometerspannung betrug 25 V ( $\sim 2,3 \text{ V/cm}$ ).

Zur Bestimmung des Longitudinalimpulses muss Gleichung (3.17) nach  $E_{\parallel}$  aufgelöst werden. Dies ist aber nicht ohne weiteres möglich, da für die Umkehrfunktion keine analytische Lösung existiert. Für Recoilionen und Elektronen werden daher zwei unterschiedliche Methoden zur Lösung dieses Problems verwendet.

### Longitudinalimpuls der Recoilionen

Bei den Recoilionen vereinfacht sich das Problem dadurch, dass die Energie, welche die Ionen durch das angelegte Feld aufnehmen, viel größer ist, als die beim Stoß übertragene Anfangsenergie (eV bzw. meV). Die Flugzeitdifferenz  $\Delta t_r$  für ein Ion ohne Anfangsenergie ( $E_{r\parallel} = 0$ ) und einem Ion mit Anfangsenergie ( $E_{r\parallel} \neq 0$ ) kann man daher durch eine Entwicklung an der Stelle  $p_{r\parallel} = 0$  erhalten:

$$\Delta t_r = t(E_{r\parallel}) - t(E_{r\parallel} = 0) \approx \left[ \frac{dt_r(E_{r\parallel})}{dE_{r\parallel}} \cdot \frac{dE_{r\parallel}}{dp_{r\parallel}} \right]_{p_{r\parallel}=0} \cdot p_{r\parallel}. \quad (3.18)$$

Zusammen mit Gleichung (3.17) folgt dann für den Longitudinalimpuls des Recoils

$$p_{r\parallel} = \left( 8,04 \times 10^{-3} \frac{\text{cm a.u.}}{\text{eV ns}} \right) \cdot \frac{qU}{a} \Delta t_r. \quad (3.19)$$

Der Nullpunkt zur Bestimmung von  $\Delta t_r$  liegt nahe beim Maximum der Flugzeitverteilung (Abb. 3.5, rechts). Eine genauere Bestimmung des Nullpunktes ist durch die Betrachtung der Stoßkinematik (Kapitel 1.1) möglich.

Da die Anfangsenergie der Recoilionen klein gegenüber der im Feld aufgenommenen Energie ist, vereinfacht sich die Bestimmung der Flugzeit (Gleichung (3.17)) zu

$$t_r(E_{r\parallel} = 0) = t_r = f \cdot \sqrt{\frac{m}{q}} \cdot \frac{(2a + d)}{\sqrt{U}}. \quad (3.20)$$

Dadurch wird die Identifikation der Ionen im Flugzeitspektrum wesentlich erleichtert.

#### Longitudinalimpuls der Elektronen

Die Bestimmung des Longitudinalimpulses der Elektronen ist schwieriger, da die Anfangsenergie der Elektronen nach dem Stoß etwa genauso groß ist, wie das angelegte Extraktionspotential ( $E_{e\parallel} \sim eU$ ). Eine Näherung wie im Falle der Recoilionen kann daher nicht angewendet werden. Mit Hilfe des Newtonverfahrens (z.B. [BS89]) wird aber eine Lösung für dieses Problem gefunden. Wie bei der Bestimmung des Longitudinalimpulses der Recoilionen muss auch bei diesem Verfahren die absolute Flugzeit der Elektronen bekannt sein. Eine direkte Messung der absoluten Flugzeit ist in der Regel nicht möglich, daher werden zwei Verfahren angewendet, mit denen der Zeitnullpunkt der Flugzeit indirekt bestimmt werden kann. Das erste Verfahren verwendet die Tatsache, dass die Elektronen durch das externe Magnetfeld auf Zyklotronbahnen gezwungen wird. Die Zeit für einen vollen Umlauf ist unabhängig von der Startenergie der Elektronen. Daher kann durch die Bestimmung der Zyklotronperiode der Zeitnullpunkt extrapoliert werden. In Kapitel 3.3.2 wird näher auf diese Kalibration des Nullpunktes eingegangen. Aus diesem Verfahren erhält man einen groben Wert für den Zeitnullpunkt. Wie bei der Rekonstruktion der Longitudinalimpulse der Recoilionen kann diese Abschätzung, und damit die Kalibration in longitudinaler Richtung, durch die Betrachtung der Stoßkinematik (Kapitel 1.1) weiter verbessert werden.

#### 3.3.2 Rekonstruktion der Transversalimpulse und der Azimuthalwinkel

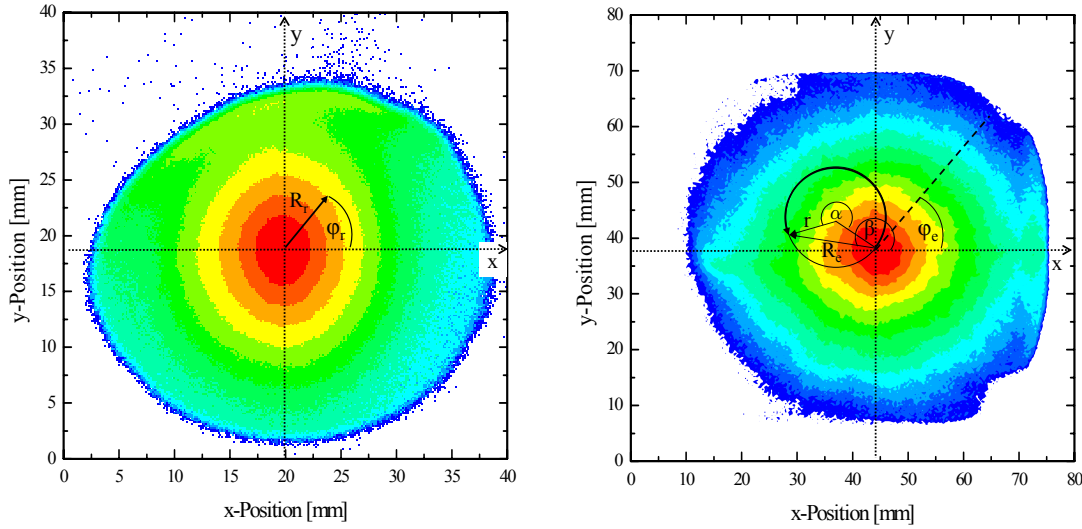
Für die Rekonstruktion des Transversalimpulses der Recoilionen und Elektronen wird die Ortsinformation des detektierten Teilchens benötigt. Da die Flugbahn der Recoilionen durch das angelegte Magnetfeld kaum beeinflusst wird, vereinfacht sich die Rekonstruktion der Recoilionen im Vergleich zu den Elektronen, die auf Zyklotronbahnen auf den Detektor gelenkt werden.

#### Transversalimpuls und Azimuthalwinkel der Recoilionen

In Abbildung 3.6 (links) ist das Ortsbild der  $\text{He}^+$ -Ionen zu sehen. Der Schwerpunkt der Ortsverteilung ist durch ein Fadenkreuz markiert. Auf diesen Punkt werden alle Ionen abgebildet, die aus dem Stoß ohne transversalen Impulsübertrag hervorgehen ( $p_{r\perp} = 0$ ). Für  $p_{r\perp} \neq 0$ , also für den Fall, dass das Ion transversalen Impuls und

damit transversale Energie ( $E_{r\perp}$ ) übernommen hat, folgt für den Radius  $R_r$  des Ions

$$R_r = \sqrt{\frac{2E_{r\perp}}{m_r}} t(E_{r\parallel}) . \quad (3.21)$$



**Abbildung 3.6:** Ortsbild Recoils (links) und Ortsbild Elektronen (rechts) in logarithmischer Darstellung

Die Flugzeit des Ions  $t(E_{r\parallel} = 0)$  kann durch Gleichung (3.20) berechnet werden, da die Anfangsenergie des Recoilions vernachlässigbar ist. Die Flugzeitverbreiterung aufgrund der Anfangsenergie beträgt etwa 100 ns im Vergleich zu mehr als 12  $\mu\text{s}$  Flugzeit.

Aus dem Radius des Recoilions folgt damit für den Transversalimpuls

$$p_{r\perp} = \left( 11,6 \frac{\text{a.u.}}{\sqrt{\text{amu eV}}} \right) \frac{\sqrt{m_r qU}}{2a + d} R_r, \quad (3.22)$$

der Azimutalwinkel  $\varphi_r$  wird über

$$\varphi_r = 90^\circ - \tan^{-1} \left( \frac{\Delta y}{\Delta x} \right) \quad \text{für } \Delta x > 0 \text{ bzw.} \quad (3.23)$$

$$\varphi_r = 270^\circ - \tan^{-1} \left( \frac{\Delta y}{\Delta x} \right) \quad \text{für } \Delta x < 0 \quad (3.24)$$

direkt aus den Rohdaten bestimmt, wobei  $\Delta x$  und  $\Delta y$  der Abstand zwischen dem Auftreffort des Ions und der x- bzw. y-Koordinate des Schwerpunktes ist.

#### Transversalimpuls und Azimuthalwinkel der Elektronen

Die Elektronen durchlaufen auf dem Weg durch das externe Magnetfeld  $B$  zum Detektor eine Kreisbahn mit Radius

$$r = \frac{k_{e\perp}}{eB}, \quad (3.25)$$

der vom Transversalimpuls  $k_{e\perp}$  des Elektrons abhängt. Die Zyklotronfrequenz

$$\omega = eB/m_e, \quad (3.26)$$

und damit die Zeit für einen vollen Umlauf des Elektrons auf der Zyklotronbahn, ist unabhängig von  $k_{e\perp}$ . Somit hängt der durchlaufene Winkel  $\alpha = \omega t_e$  bei konstantem Magnetfeld nur von der Flugzeit  $t_e$  des Elektrons ab. Da der Radius  $r$  der Spiralbahn nicht direkt bestimmt werden kann, muss  $r$  indirekt über

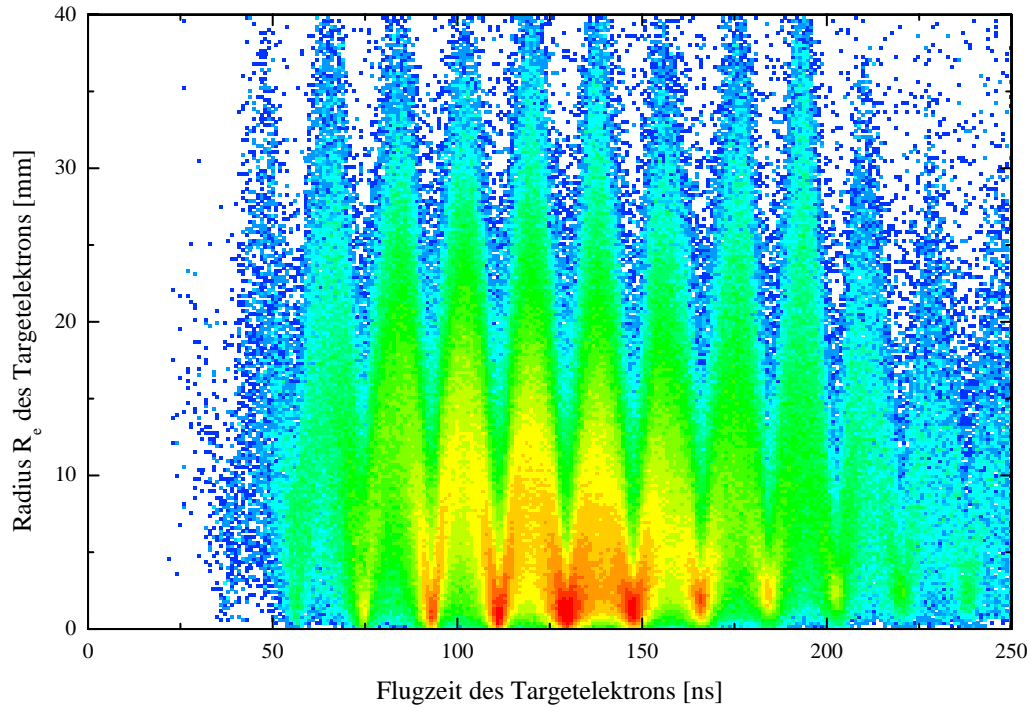
$$r = \frac{R_e}{2 \left| \sin \frac{\alpha}{2} \right|} = \frac{R_e}{2 \left| \sin \left( \frac{1}{2} \omega t_e \right) \right|} \quad (3.27)$$

bestimmt werden. Wie im Falle der Recoilionen ist  $R_e$  der Abstand des Auftreffortes des Elektrons zum Schwerpunkt der Ortsverteilung (Abb. 3.6 rechts). Aus den Gleichungen (3.25) und (3.27) folgt dann für den Transversalimpuls der Elektronen

$$k_{e\perp} = \left( 8,04 \times 10^{-3} \frac{\text{a.u.}}{\text{mm Gauß}} \right) \cdot \frac{R_e B}{2 \left| \sin \left( \frac{1}{2} \omega t_e \right) \right|}. \quad (3.28)$$

Für Flugzeiten  $t_e$  die ein ganzzahliges Vielfaches der Umlaufzeit  $T$  sind, hat Gleichung (3.28) Polstellen, eine Bestimmung des Transversalimpulses ist damit zu diesen Zeiten nicht möglich. Zu diesen Zeiten treffen Elektronen immer im Schwerpunkt der Ortsverteilung mit einem Radius  $R_e = 0$  auf den Detektor. In Abb. 3.7 ist der Radius der Targetelektronen in Abhängigkeit von der Flugzeit aufgetragen. Man sieht deutlich die periodische Struktur mit Einschnürungen in gleichmäßigen Abständen. Die Einschnürungen zu diesen Zeiten werden als *Wiggles* bezeichnet und treten immer zu einem Vielfachen der Umlaufzeit auf. Durch die geeignete Wahl des Magnetfeldes und der Extraktionsspannung lässt sich die Position dieser Wiggles so beeinflussen, dass die beste Auflösung bei kleinen Energien und kleinen Radien erreicht wird (siehe Kapitel 3.4.2).

Wie in Kapitel 3.3.1 bereits erwähnt kann mit Hilfe der Wiggles der Zeitnullpunkt der Elektronenflugzeit bestimmt werden. Da die Abstände der Wiggles der Umlaufzeit der Elektronen im Magnetfeld entsprechen, muss ein Elektron, welches einen unendlichen Longitudinalimpuls besitzt, also zum Zeitpunkt  $t_e = 0$  gestartet ist, mit einem Wiggle zusammenfallen. Der Zeitnullpunkt kann durch eine lineare Extrapolation der äquidistanten Wigglepositionen bestimmt werden. Zusätzlich zum



**Abbildung 3.7:** Radius gegen Flugzeit des Targetelektrons in logarithmischer Darstellung.

Zeitnullpunkt kann indirekt das Magnetfeld aus dem Abstand der Wiggles (18,3 ns) über  $\omega = eB/m_e = 2\pi/T$  bestimmt werden. Bei diesem Experiment beträgt die magnetische Feldstärke etwa 20 Gauß.

Der Azimuthalwinkel des Elektrons  $\varphi_e$  berechnet sich aus

$$\varphi_e = \beta - \omega t/2, \quad (3.29)$$

wobei  $\beta$  der in Abbildung 3.6 (rechts) definierte Winkel zwischen dem Auftreffort des Elektrons und der x-Achse ist.

## 3.4 Akzeptanz und Auflösungsvermögen des Reaktionsmikroskopes

### 3.4.1 Akzeptanz

Um die experimentelle Daten mit theoretischen Vorhersagen zu vergleichen muss sowohl die experimentell Auflösung, also auch die Akzeptanz berücksichtigt werden. Die Akzeptanz des Reaktionsmikroskopes für Elektronen und Recoilionen ist im Wesentlichen beschränkt durch die Detektorgröße in transversaler Richtung und die



angelegte Extraktionsspannung in longitudinaler Richtung. Werden mehrere Elektronen detektiert (*Multihit*), begrenzt außerdem die Totzeit des Elektronendetektors die Akzeptanz.

Bewegt sich ein Elektron oder ein Ion vom Detektor weg mit einer Anfangsenergie, die größer als das angelegte Extraktionsfeld ist, kann dieses Teilchen nicht mehr nachgewiesen werden. Bei den untersuchten Recoilionen kann dies praktisch nicht vorkommen, da die Anfangsenergie nur wenige meV beträgt, die Anfangsenergie der Elektronen allerdings ist vergleichbar mit der Extraktionsspannung von 25 V. Daher können Elektronen nur dann detektiert werden, wenn deren Longitudinalimpuls größer ist als der minimale Longitudinalimpuls  $k_{e\parallel}^{\min} = -1.4$  a.u..

Bedingt durch seine Größe kann der Recoildetektor Ionen bis zu einem Radius  $R_r^{\max}$  von etwa 15 mm (siehe Abb. 3.6 (links)) detektieren. Dies entspricht nach Gleichung (3.22) einem maximalen Transversalimpuls von  $p_{r\perp}^{\max} = 4$  a.u.. Beim Elektronendetektor beträgt der maximale Radius  $R_e^{\max}$  etwa 30 mm, dementsprechend ist für Elektronen nach Gleichung (3.28) der maximale Transversalimpuls  $k_{e\perp}^{\max} = 2,3$  a.u. bei dem verwendeten Magnetfeld von 20 Gauß.

#### 3.4.2 Auflösung

Die mögliche Auflösung des Spektrometers ist beschränkt durch die Zeitauflösung  $\Delta t$ , sowie der Ortsauflösung  $\Delta R$  der Detektoren. Bei der Bestimmung des Recoilimpulses ist außerdem die thermische Impulsbreite  $\Delta p_{\text{therm}}$  des Targets zu berücksichtigen (Kapitel 3.2.2).

Mit Hilfe der Gaußschen Fehlerfortpflanzung

$$\Delta f(x_1, \dots, x_n)^2 = \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial x_j} \Delta x_j \right)^2, \quad (3.30)$$

kann aus den oben genannten Fehlern der Gesamtfehler des Spektrometers bestimmt werden.

#### Recoil-Spektrometer

Die Berechnung des Longitudinal- und Transversalimpulses des Recoilions wurde in den Abschnitten 3.3.1 und 3.3.2 beschrieben. Aus Gleichung (3.30) folgt mit Gleichung (3.19) und (3.22) für die Absolutfehler in longitudinaler und transversaler Richtung ( $\Delta p_{r\parallel}$  bzw.  $\Delta p_{r\perp}$ )

$$\Delta p_{r\parallel}^2 = \left( \left( 8,039 \times 10^{-3} \frac{\text{cm a.u.}}{\text{eV ns}} \right) \cdot \frac{qU}{a} \right)^2 \cdot \Delta t^2 + \Delta p_{\text{therm}}^2 \quad (3.31)$$

$$\Delta p_{r\perp}^2 = \left( \left( 11,6 \frac{\text{a.u.}}{\sqrt{\text{amu eV}}} \right) \cdot \frac{\sqrt{qU \cdot m_r}}{2a + d} \right)^2 \cdot \Delta R_r^2 + \Delta p_{\text{therm}}^2. \quad (3.32)$$

Der Fehler in der Flugzeitbestimmung  $\Delta t$  betragt 1 ns, der Fehler der Ortsauflosung  $\Delta R_r$  ist 1 mm. Die thermische Impulsbreite des Gasjets in Expansionsrichtung ist 0,24 a.u. und 0,12 a.u. senkrecht zur Expansionsrichtung. Da sich die Impulsbreite des Gasjets je nach Richtung unterscheidet, ist auch der Fehler in den entsprechenden Richtungen verschieden. Die Bezeichnung der Richtungen erfolgt nach Abbildung 3.2. Fur die Fehler senkrecht ( $p_{r,x}$  und  $p_{r,y}$ ) und longitudinal ( $p_{r,z}$ ) zur Extraktionsrichtung ergibt sich:

$$\begin{aligned}\Delta p_{rx} &= 0,29 \text{ a.u.} \\ \Delta p_{ry} &= 0,36 \text{ a.u.} \\ \Delta p_{rz} &= 0,12 \text{ a.u.} .\end{aligned}\tag{3.33}$$

Der Azimuthalwinkel wird uber Gleichung (3.23) direkt aus den Rohdaten bestimmt. Es besteht aber auch der Zusammenhang

$$\begin{aligned}p_{rx} &= p_{r\perp} \cdot \cos \varphi \quad , \text{ bzw.} \\ p_{ry} &= p_{r\perp} \cdot \sin \varphi.\end{aligned}\tag{3.34}$$

Daraus lasst sich mit Gleichung (3.30) der Fehler des Azimuthalwinkels

$$\Delta \varphi_r = \frac{1}{p_{r\perp}^2} \sqrt{(p_{rx} \cdot \Delta p_{ry})^2 + (p_{ry} \cdot \Delta p_{rx})^2}\tag{3.35}$$

bestimmen. Zeigt der Impuls des Recoilions bei  $p_{r\perp} = 1$  a.u. in x-Richtung, betragt der Fehler  $21^\circ$  und  $17^\circ$ , falls der Impulsvektor in y-Richtung zeigt.

### Elektronenspektrometer

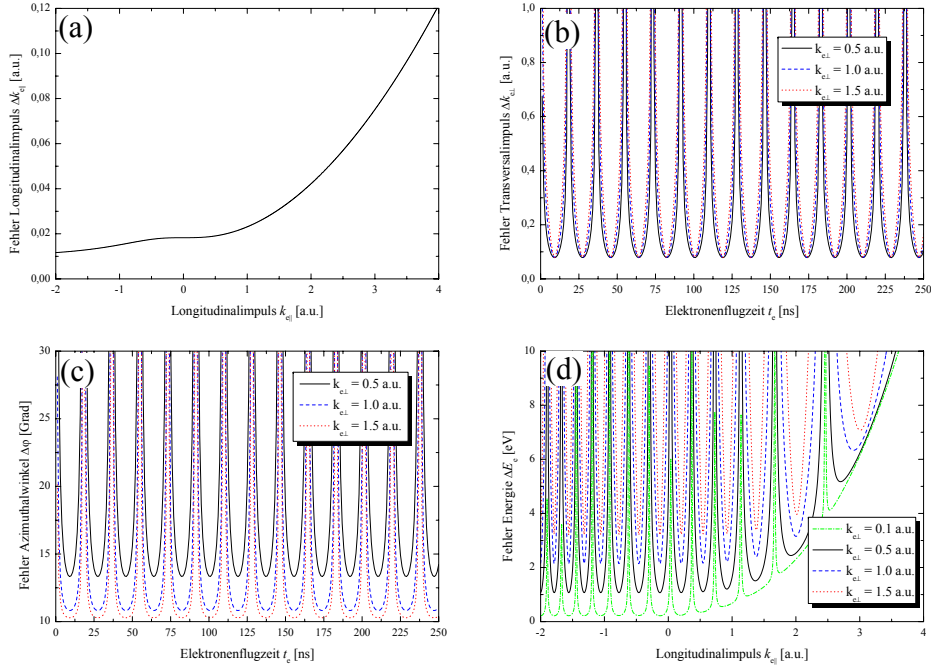
Da die Anfangsenergie des Elektrons viel groer ist als die des Recoilions und daher im Vergleich mit der Energie, die das Elektron im Extraktionsfeld aufnimmt nicht mehr vernachlassigt werden kann, ist die Auflosung der Elektronen abhangig von der Energie. Die Beeintrachtigung der Auflosung durch die Targettemperatur kann vernachlassigt werden, da die thermische Energie des Gases wesentlich kleiner ist als die kinetische Energie des Elektrons.

Aus Gleichung (3.17) und  $\Delta k_{e\parallel} = (dt_e/dk_{e\parallel})^{-1} \cdot \Delta t_e$  folgt fur die Auflosung in longitudinaler Richtung

$$\Delta k_{e\parallel} = \frac{1}{2af} \cdot \frac{\pm A^3 \left( A \pm F \sqrt{k_{e\parallel}^2} \right)^2}{F \left( \pm A^3 + A^2 F k_{e\parallel} + F k_{e\parallel} \left( A \pm F \sqrt{k_{e\parallel}^2} \right)^2 \right)} \cdot \Delta t_e .\tag{3.36}$$

Hierbei ist  $F^2 = 13,6$  eV und  $A^2 = F^2 \cdot k_{e\parallel}^2 + qU$ , das „+“ steht fur Elektronen, die in Richtung des Detektors fliegen, „-“ fur Elektronen in entgegengesetzter Richtung.

### 3.4. Akzeptanz und Auflösungsvermögen des Reaktionsmikroskopes



**Abbildung 3.8:** Fehler in der Bestimmung der Impulse, der Energie sowie des Azimutalwinkels der Elektronen. Erklärungen zu den Spektren werden im Text gegeben.

Die Einheiten der Parameter und des Vorfaktors  $f$  sind entsprechend Formel (3.17) gewählt.

Für die Auflösung in transversaler Richtung und den Azimutalwinkel folgt aus den entsprechenden Formeln zur Impulsbestimmung ((3.28), (3.29)) und Gleichung (3.30)

$$\Delta k_{e\perp} = \frac{8,04 \times 10^{-3} \frac{\text{a.u.}}{\text{mm Gau\ss}} \cdot B}{2 \left| \sin\left(\frac{1}{2}\omega t_e\right) \right|} \sqrt{\Delta R_e^2 + \left( \frac{R_e \omega \cdot \Delta t_e}{2 \tan\left(\frac{1}{2}\omega t_e\right)} \right)^2} \quad (3.37)$$

$$\Delta \varphi_e = \sqrt{\left( \frac{\Delta R_e}{R_e} \right)^2 + \left( \frac{\omega}{2} \Delta t_e \right)^2}. \quad (3.38)$$

In Abbildung 3.8 ist das Auflösungsvermögen unter den Bedingungen dargestellt, wie sie im in Kapitel 4 beschriebenen Experiment zur simultanen Ionisation von He-Target und  $\text{H}^-$ -Projektil herrschten. Als Fehler wurde  $\Delta R_e = 1$  mm für den Ort und  $\Delta t_e = 1$  ns für die Flugzeit angenommen, das Magnetfeld hatte eine Stärke von 19,5 Gauß. Abbildung 3.8 (a) zeigt  $\Delta k_{e||}$  als Funktion des Longitudinalimpulses der Elektronen  $k_{e||}$ . Für große Longitudinalimpulse in Richtung des Elektronendetektors, dies bedeutet kürzere Flugzeiten, steigt auch der Fehler der Longitudinalimpulsbestimmung. So ist für ein Elektron mit  $k_{e||} = 2,8$  a.u. der Fehler  $\Delta k_{e||} = 0,07$  a.u., für  $k_{e||} = 0$  a.u. ist der Fehler mit  $\Delta k_{e||} = 0,02$  a.u. entsprechend geringer.

Der Fehler in transversaler Richtung  $\Delta k_{e\perp}$  (Abb. 3.8 (b)) hat zu den Zeiten an denen Wiggles auftreten eine Polstelle, genau zwischen diesen Wiggles ist der Fehler am kleinsten und ein Auflösungsvermögen von 0,08 a.u. ist erreichbar. Aus den Gleichungen (3.25) und (3.27) wird deutlich, dass der Fehler des Azimutalwinkels  $\Delta\varphi_e$  zu den gleichen Zeiten eine Polstelle besitzt wie  $\Delta k_{e\perp}$ . In (Abb. 3.8 (c)) ist das Verhalten von  $\Delta\varphi_e$  in Abhängigkeit von  $k_{e\parallel}$  für verschiedene Transversalimpulse  $k_{e\perp}$  dargestellt. Da für größerer  $k_{e\perp}$  auch der Abstand des Elektrons von der Detektormitte größer wird, ist auch  $\Delta\varphi_e$  für größere  $k_{e\perp}$  besser.

Die Energieauflösung des Elektronenspektrometers  $\Delta E_e$  ist in (Abb. 3.8 (d)) zu sehen. Da in  $\Delta E_e$  der Fehler in longitudinaler und in transversaler Richtung einfließen, steigt  $\Delta E_e$  zu größeren  $k_{e\parallel}$  schnell an. Zu kleinen  $k_{e\parallel}$  hingegen kann bei diesem Magnetfeld von 19,5 Gauss eine Energieauflösung von  $\Delta E_e = 100$  meV erreicht werden.

# Kapitel 4

## Simultane Ionisation von Target und Projektil in 200 keV $\text{H}^- + \text{He}$ Stößen

In Kapitel 1.4.2 wurden bereits die beiden möglichen Mechanismen beschrieben, die zu einer simultanen Ionisation des Targets und des Projektils führen können. Zum einen kann das Target- und das Projektilelektron durch einen Stoß untereinander emittiert werden ((e,e)-Mechanismus), zum anderen ist es möglich, dass die Elektronen durch Stöße mit dem Kern des Stoßpartners emittiert werden.

Da das zusätzliche Elektron des Projektils mit einer sehr geringen Bindungsenergie gebunden ist (0,75 eV im Vergleich zu 24,6 eV im He-Atom) kann dieses Elektron als quasi-freies Elektron betrachtet werden, wodurch die gemessenen Daten die charakteristischen Eigenschaften eines (e,2e)-Stoßes bei einer entsprechenden Projektilenergie von 109 eV aufweisen sollten. Dadurch, dass das Projektil beim Ionisationsprozess neutralisiert wird, ist zu erwarten, dass die beiden Elektronen ohne PCI mit dem Projektil emittiert werden. Dies verstärkt die Analogie dieses Stoßsystems mit einem (e,2e)-Stoß, wobei allerdings die interne Struktur des  $\text{H}^-$ -Ions einen großen Einfluss auf die Ionisation der Elektronen haben kann. Falls das der Fall sein sollte, stellt sich die Frage, wie sich dies äußert und ob eine abstoßende Wechselwirkung zwischen den beiden emittierten Elektronen zu finden ist.

Im Vergleich zum Experiment von Kollmus *et al.* [KMO02] (Kapitel 1.4.2) ist in unserem Experiment die Störung  $\eta = 0,35$  etwa doppelt so groß. Dies bedeutet, dass Effekte höherer Ordnung eventuell an Bedeutung gewinnen, die dann ebenfalls detailliert untersucht werden können.

### 4.1 Das Experiment

Das Experiment wurde am Hochenergiestrahrohr des MPI-K durchgeführt (s. Kapitel 3.1). Im Experiment wurde der Beschleuniger allerdings nicht verwendet. Die

Energie der  $H^-$ -Ionen war also ausschließlich durch das Potential der Ionenquelle bestimmt, das in unserem Fall 200 kV betrug. Da ohne den Tandembeschleuniger keine Pulsung des Projektilstrahls möglich ist, wurde die Messung mit einem kontinuierlichen Strahl durchgeführt.

Zur Produktion der negativen Wasserstoffionen wurde eine Duoplasmatronquelle verwendet. Dabei wird im ersten Schritt aus Wasserstoffgas mit Hilfe eines Elektronenstrahls ein Plasma erzeugt. Aus diesem Plasma werden die Ionen mit einem Extraktionsfeld abgezogen und durch eine Zelle gefüllt mit gasförmigem Lithium geleitet. Durch Ladungsaustausch mit den Lithiumatomen können die Wasserstoffionen bis zu zwei Elektronen aufnehmen. Die so entstandenen  $H^-$ -Ionen werden anschließend zum Experiment geführt.

Im Reaktionsmikroskop wurde das Projektil mit dem Helium-Gastarget gekreuzt (s. Kapitel 3.2). Nach dem Reaktionsmikroskop wurde der Strahl der geladenen Projektilen durch einen Dipolmagneten abgelenkt, so dass nur die Projektilen, die im Stoß neutralisiert wurden, auf dem  $0^\circ$ -MCP-Detektor detektiert wurden. Das Zeitsignal dieses Detektors diente als Referenzsignal für die Flugzeitmessung der Elektronen und Rückstoßionen. Bei jedem Ionisationsereignis wurde koinzident das Projektil, die emittierten Elektronen, sowie das Rückstoßion detektiert. Die verminderte Akzeptanz für das zweite Elektron durch die Detektortotzeit von etwa 10 ns ist aufgrund der sehr unterschiedlichen Elektronenflugzeiten für die meisten Ereignisse nicht von Bedeutung. Für das Targetelektron ist die Flugzeit etwa 150 ns, für das Projektilelektron lediglich 50 ns. Da nicht immer eindeutig eine Unterscheidung der beiden Elektronen nur über die unterschiedliche Flugzeit möglich ist, wird das schnellere Elektron im Laufe dieser Arbeit als Projektilelektron, das langsamere als Targetelektron bezeichnet.

Wie in Kapitel 3.4.2 beschrieben, hängt das Auflösungsvermögen der Elektronen von deren Impuls ab, das Auflösungsvermögen der Rückstoßionen ist unabhängig vom Impuls. Das Auflösungsvermögen in longitudinaler Richtung (z-Richtung) ist 0,1 a.u. für Elektronen und Rückstoßionen, in transversaler Richtung 0,2 a.u. und 0,3 a.u. für die Elektronen bzw. Rückstoßionen.

In diesem Experiment wurden keine Messungen der absoluten Wirkungsquerschnitte durchgeführt. Bei einigen Vergleichen zwischen experimentellen Daten und Theorien werden differentielle Wirkungsquerschnitte in absoluten Einheiten angegeben. In diesen Fällen ist der experimentelle Wirkungsquerschnitt auf den entsprechenden Wirkungsquerschnitt der FBA-Y-Rechnung normiert.

## 4.2 Einfachdifferenzielle Wirkungsquerschnitte

### 4.2.1 Longitudinale Impulsverteilung der Elektronen

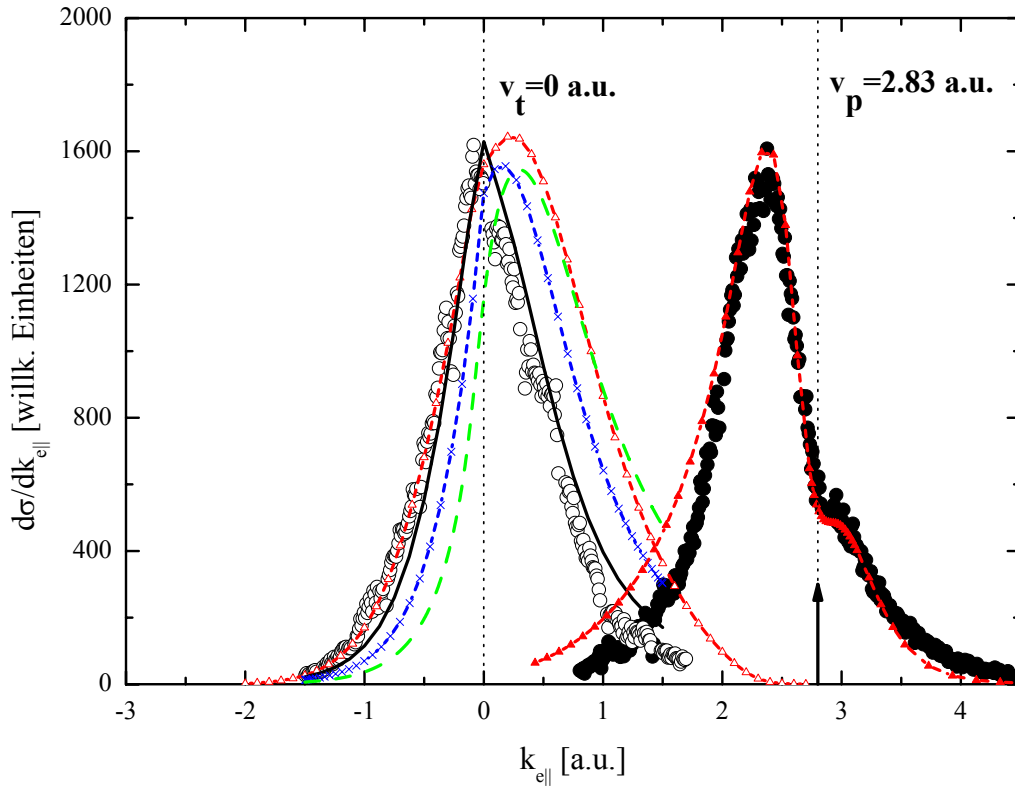
Um den  $H^-$ -He Stoß mit der simultanen Emission beider Elektronen zu beschreiben wurden Rechnungen in Erster Bornscher Näherung von B. Najjari und A. Voitkiv durchgeführt. Sowohl für das Projektil als auch für das Target wurde angenommen, dass beide nur ein aktives Elektron besitzen. Der Anfangs- und Endzustand des Heliumelektrons konnte durch eine Lösung der Schrödingergleichung mit sphärischem Hartree-Fock Potential berechnet werden. Für den Anfangs- und Endzustand des  $H^-$ -Elektrons wurde die Schrödingergleichung für ein Yukawa-Potential gelöst, welches die kurzreichweitige Kraft auf das aktive Elektron im  $H^-$  beschreibt [CF86].

Um den Einfluss des Projektilpotentials auf den Stoßprozess zu untersuchen wurden die Impulsverteilungen des Targetelektrons mit Theorien für eine reine Ionisation des Targets durch ein punktförmiges Projektil verglichen. Dadurch konnten bessere Theorien verwendet werden, die eine Aussage über eine eventuell vorhandene PCI (siehe Kapitel 1.2.1) ermöglichen. Dazu wurde ein Proton-ähnliches, sowie ein punktförmiges  $H^-$ -Ion modelliert. Bei beiden wurde ein Coulomb-Potential und eine effektiven Kernladung von  $Z_p = 0,235$  bzw.  $Z_p = -0,235$  angenommen. Für die Geschwindigkeit der Proton-ähnlichen Ionen und des punktförmiges  $H^-$ -Ion wurde in den Rechnungen die gleiche Geschwindigkeit (2,83 a.u.) wie beim  $H^-$ -Projektil verwendet.

In Abbildung 4.1 sind die Ergebnisse der Messung, als auch die verschiedenen theoretischen Berechnung dargestellt. Die Messwerte sind durch offene Kreise (Targetelektron) bzw. volle Kreise (Projektilelektron) dargestellt. Die Impulsverteilung der Targetelektronen hat die gleiche Form wie bei einer reinen Targetionisation im Stoß mit einem strukturlosen Ion. Das Maximum liegt bei  $k_{ez} = 0$ , außerdem ist eine leichte vorwärts-rückwärts Asymmetrie zu erkennen. Bei der Einfachionisation im Stoß mit positiv geladenen Ionen wird diese Form durch eine attraktive PCI beschrieben. Da in unserem Fall das auslaufende Projektil neutral ist, kann diese Wechselwirkung nicht der Grund für die beobachtete Asymmetrie sein. Mit Hilfe der oben erwähnten Theorien und der daraus berechneten Spektren wird eine andere Deutung der Daten erzielt, welche im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

Das Ergebnis der Ersten Bornschen Näherung für simultane Ionisation ist ebenfalls in Abbildung 4.1 dargestellt (durchgezogene rote Linie mit Dreiecken). Das  $H^-$ -Ion wurde dabei durch ein Yukawa-Potential beschrieben. Die theoretischen Wirkungsquerschnitte wurden so normiert, dass die Maxima übereinstimmen.

Für die Impulsverteilung der Targetelektronen ergeben sich große Unterschiede zwischen Theorie und Experiment. Im Vergleich zu den Daten ist das Maximum der theoretischen Verteilung (rote Linie mit offenen Dreiecken) in Vorwärtsrichtung zu



**Abbildung 4.1:** Longitudinalimpulsverteilung  $d\sigma/dk_{e||}$  der Elektronen. Offene Kreise: Daten Targetelektron; Volle Kreise: Daten Projektilelektron; rote Linie mit Dreiecken: Erste Bornsche Näherung für simultane Ionisation mit Yukawa-Potential für  $H^-$ ; grüne gestrichelte Linie: Erste Bornsche Näherung für reine Targetionisation durch ein Proton-ähnliches Projektil; durchgezogene Linie: CDW-EIS für reine Targetionisation durch ein punktförmiges  $H^-$ -Projektil; blaue gestrichelte Linie: CDW-EIS für reine Targetionisation durch ein Proton-ähnliches Projektil

größeren Impulsen verschoben, außerdem ist die berechnete Verteilung wesentlich breiter als die gemessene. Da in der Ersten Bornschen Näherung nur die Wechselwirkung zwischen den Elektronen enthalten ist, kann die Verschiebung des Maximums nicht durch eine PCI mit dem Projektil erklärt werden. Vielmehr resultiert die Verschiebung aus der relativ großen parallelen Komponente des Impulsübertrags  $q_{||}$  (siehe Kapitel 1.1). In diesem Fall gilt:

$$q_{||} \approx \frac{\Delta E_p}{v_p} = 0,33 \text{ a.u.}, \quad (4.1)$$

wobei  $\Delta E_p$  der Energieverlust und  $v_p$  die Geschwindigkeit des Projektils ist. Die Elektronen folgen dem Impulsübertrag, was zur beobachteten Verschiebung führt. Bei einer Beschreibung der Targetionisation alleine mit der CDW-EIS Berechnung (durchgezogene Linie in Abb. 4.1) stimmt sowohl das Maximum, die spitze Form der Verteilung als auch die vorwärts-rückwärts Asymmetrie sehr gut mit den Da-



ten überein. Hierbei wurde als Projektil ein punktförmiges  $H^-$ -Ion verwendet. Dem zufolge kann die Asymmetrie nicht mit einer attraktiven PCI erklärt werden. Vielmehr handelt es sich um ein Kombination aus der oben beschriebenen Verschiebung in Vorwärtsrichtung durch den großen Impulsübertrag und eine Verschiebung in Rückwärtsrichtung durch eine abstoßende PCI zwischen dem Targetelektron und dem Projektil. Um den Einfluss dieser beiden Aspekte voneinander getrennt zu untersuchen wurden zwei weitere Rechnungen durchgeführt. Zum einen wurde in einer Ersten Bornschen Näherung die Ionisation des Targets durch ein Proton berechnet (blaue gestrichelte Linie mit Kreuzen in Abb. 4.1), um die Verschiebung aufgrund des Impulsübertrages zu untersuchen. Zum anderen wurde eine CDW-EIS Rechnung durchgeführt (gestrichelte grüne Linie in Abb. 4.1), ebenfalls mit einem Proton als Projektil, wobei sich bei letzterem die beiden Einflüsse addieren.

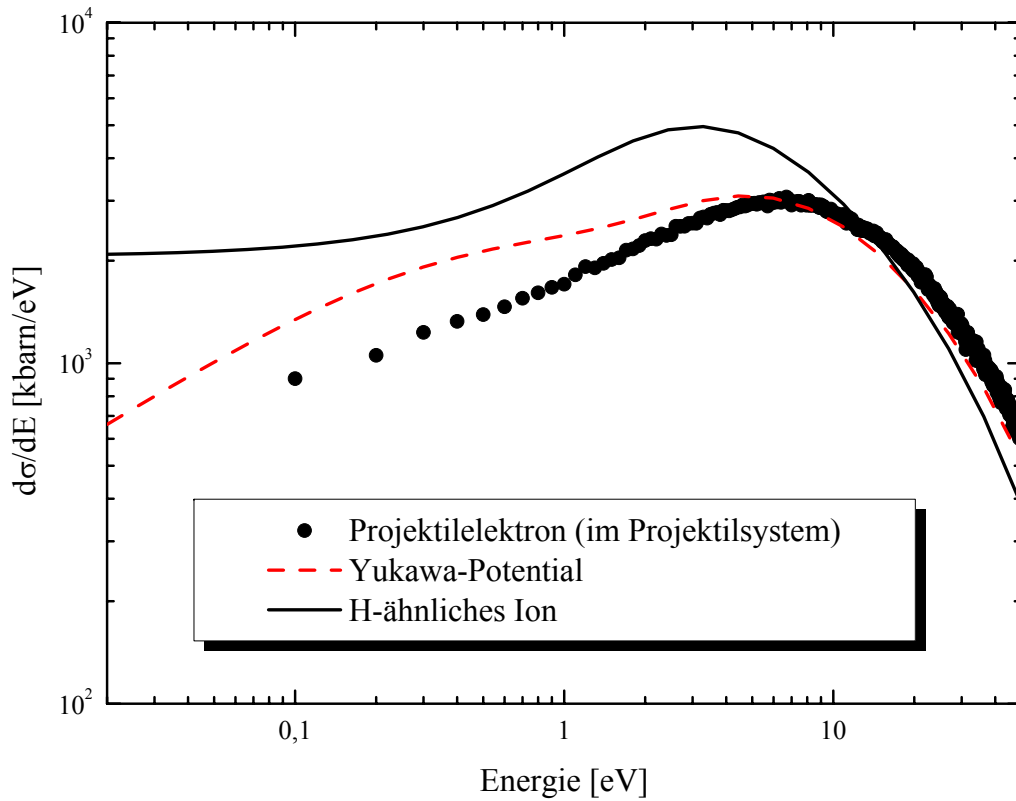
Die beiden Rechnung mit der Ersten Bornschen Näherung, die eine für Protonenstoß, die anderen für die simultane Ionisation beim  $H^-$ -Stoß, gleichen sich bis auf eine etwas geringere Verschiebung in Vorwärtsrichtung beim Protonenstoß. Im Gegensatz dazu ist die CDW-EIS Rechnung im Falle des Protonenstoßes durch die attraktive PCI mit dem positiven Projektil noch weiter in Vorwärtsrichtung verschoben.

Zusammen fassend lässt sich sagen, dass für eine korrekte Beschreibung der Targetionisation die PCI mit dem auslaufenden negativen Projektil wichtig ist. Dies äußert sich in einer exzellenten Übereinstimmung mit der CDW-EIS Rechnung für ein punktförmiges  $H^-$  als Projektil.

Die longitudinale Impulsverteilung des Projektilelektrons ist im Vergleich zum Targetelektron deutlich strukturiert. Neben dem Hauptmaximum bei 2,3 a.u. zeigt sich ein schwaches Minimum in etwa bei der Projektilgeschwindigkeit von  $v_p=2,83$  a.u. (in Abb. 4.1 durch einen Pfeil angedeutet). Falls die simultane Ionisation überwiegend durch eine Elektron-Elektron Wechselwirkung geschieht, muss die gesamte Bindungsenergie von 25,3 eV zur Ionisation beider Elektronen durch das Projektilelektron aufgebracht werden. Dies führt zu einer Verschiebung des Impulsmaximums vom Projektilelektron von 2,83 a.u. auf 2,5 a.u., in Übereinstimmung mit dem Experiment.

Auch das Minimum bei  $k_{e\parallel} = v_p$  wird sehr gut mit einer Ersten Bornschen Näherung, bei der das Projektilektron in einem Yukawa-Potential gebunden ist, wiedergegeben (Abb. 4.1, rote gestrichelte Linie mit vollen Dreiecken). Bis auf eine Überschätzung der Flanke bei kleinen Impulsen stimmt das berechnete Spektrum mit dem gemessenen fast exakt überein. Da in der Rechnung nur eine Ionisation durch eine Elektron-Elektron Wechselwirkung berücksichtigt wurde, kann die beobachtete Struktur nicht auf Beiträge höherer Ordnung zurückgeführt werden.

Für ein besseres Verständnis dieser Struktur wurde der Einfluss des Yukawa-Potentials auf das Energiespektrum des Projektilelektrons untersucht. In Abbildung 4.2



**Abbildung 4.2:** Energiespektrum  $d\sigma/dE_{ep}$  der emittierten Projektilelektronen im Ruhesystem des Projektils. Rote gestrichelte Kurve: Rechnung in Erster Bornscher Näherung mit einer Beschreibung des  $H^-$  durch eine Yukawa-Potential; schwarze durchgehende Kurve: Rechnung in Erster Bornscher Näherung für den Stoß mit einem H-ähnliches Ion; schwarze Punkte: Daten für das Projektilelektron

ist das Energiespektrum des Projektilelektrons im Projektilsystem aufgetragen. Die durchgezogene Linie ist eine Rechnung in Erster Bornscher Näherung für ein H-ähnliches Projektil, die gestrichelte Linie ist die gleiche Rechnung für das oben verwendete Yukawa-Potential (FBA-Y). Das gemessene Energiespektrum des Projektilelektrons ist ebenfalls in Abb. 4.2 dargestellt. Beide Rechnungen zeigen ein Minimum bei einer Elektronenenergie von  $E_e = 0$  eV, wobei das Minimum für das Yukawa-Potential sehr viel stärker ausgeprägt ist.

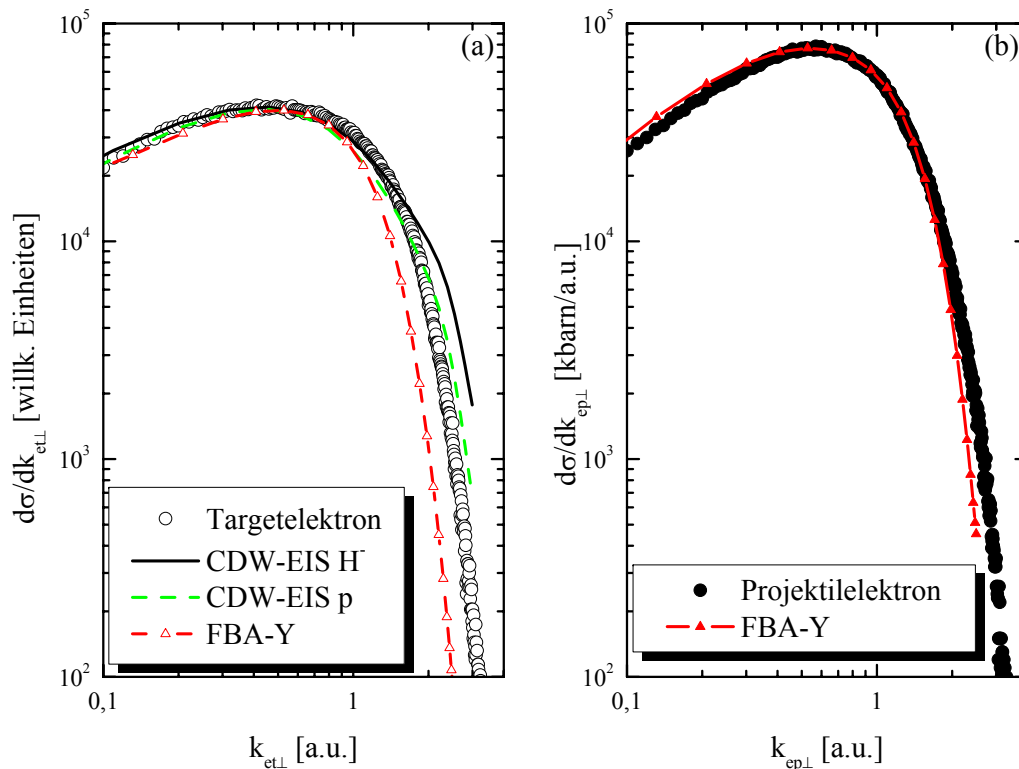
Für das beobachtet Minimum sind zwei Faktoren verantwortlich. Erstens muss das Projektilelektron, wie bereits erwähnt, einen minimalen Impulsübertrag aufbringen, um das Ionisationspotential beider Elektronen zu überwinden. Im Projektilsystem bedeutet dies, dass das Projektilelektron aus der Ruhe zu einer minimalen Geschwindigkeit beschleunigt wird, was zu einer Unterdrückung der Energien um  $E_e = 0$  eV führt. Der zweite Punkt ist, dass bei der FBA-Y durch die kurze Reichweite des Potentials eine zusätzliche Unterdrückung für niedrige Energien  $E_e \approx 0$  eV auf-

## 4.2. Einfachdifferentielle Wirkungsquerschnitte

tritt (s. Abb. 4.2). Im Gegensatz dazu ist bei einem durch die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung gebundenen System  $d\sigma/dE$  für kleine Energien konstant (Abb. 4.2). Da die Energie des Projektilektrons von  $E_e = 0$  eV im Laborsystem der Projektilgeschwindigkeit  $v_p$  entspricht, stammt die Schulter bei  $v_p$  aufgrund der Übereinstimmung mit der FBA-Y Rechnung daher von einer Unterdrückung des Wirkungsquerschnittes bei  $k_{e\parallel} = v_p$ .

Im Gegensatz zum Targetelektron hat sich für das Projektilektron gezeigt, dass zur Beschreibung des longitudinalen Impulsspektrums die Berücksichtigung einer PCI nicht erforderlich ist. Eine befriedigende Erklärung für dieses unterschiedliche Verhalten zwischen Target- und Projektilektron kann bisher leider nicht gegeben werden. Hierfür sind weitergehende theoretische Berechnungen nötig, die sowohl die Wechselwirkung der Elektronen untereinander, als auch die Wechselwirkung der Elektronen mit den Kernen beinhalten.

### 4.2.2 Transversale Impulsverteilung der Elektronen



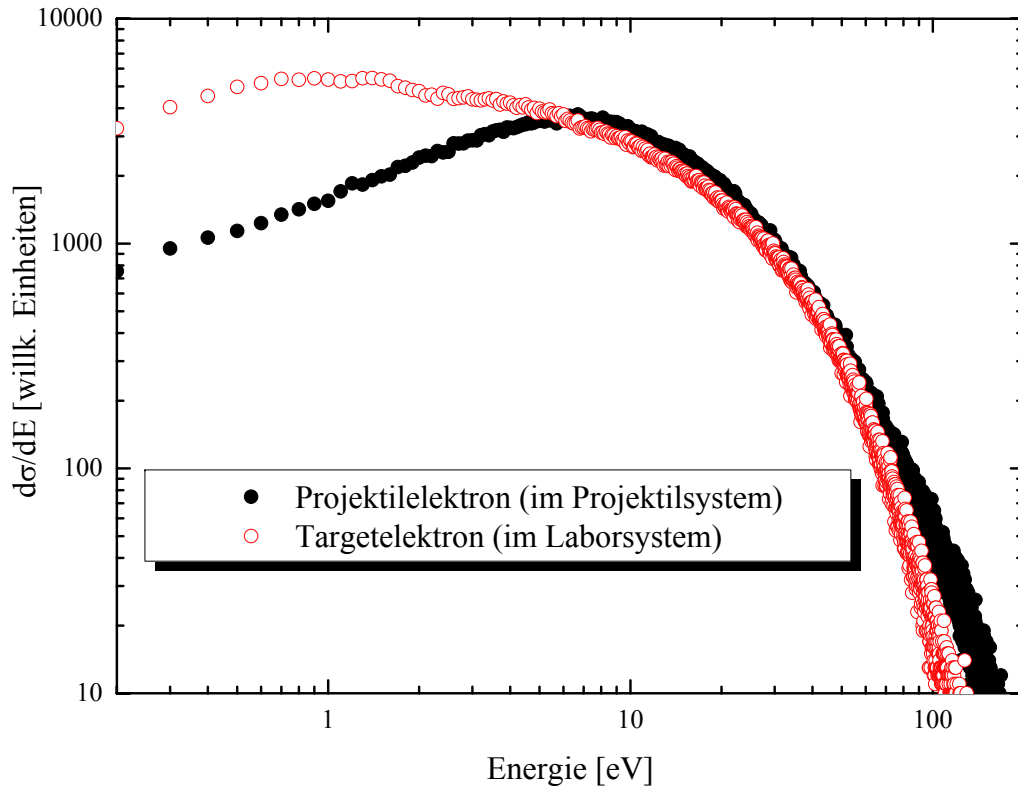
**Abbildung 4.3:** Transversalimpulsverteilung  $d\sigma/dk_{e\perp}$  der Elektronen. (a): Einfachdifferentieller Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dk_{et\perp}$  für das Targetelektron; (b):  $d\sigma/dk_{ep\perp}$  für das Projektilektron

In der transversalen Impulsverteilung des Targetelektrons (Abbildung 4.3 (a)) ist

ebenfalls, wenn auch deutlich schwächer, der Einfluss der PCI sichtbar. Zur besseren Übersicht wurden die Spektren so normiert, dass die Maxima in etwa übereinstimmen. Für große Transversalimpulse ( $k_{et\perp}$ ) wird der differentielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dk_{et\perp}$  durch die Erste Bornsche Näherung (FBA-Y, rote gestrichelte Linie mit offenen Dreiecken) unterschätzt. Ein Vergleich mit CDW-EIS Rechnungen (s. Kapitel 2.4.1) liefert eine bessere Übereinstimmung. Wie in Kapitel 4.2.1 bereits beschrieben kann in diesem Fall nur die Ionisation des He-Targets durch ein strukturloses Projektil beschrieben werden. Sowohl die Ionisation durch ein Proton-ähnliches Projektil (CDW-EIS p, grün gestrichelt) als auch die Ionisation durch ein strukturloses  $H^-$  (CDW-EIS  $H^-$ , durchgehend) liefert eine Erhöhung von  $d\sigma/dk_{et\perp}$  gegenüber der FBA-Y-Rechnung.

Die transversale Impulsverteilung des Projektilelektrons (Abbildung 4.3 (b)) wird wieder sehr gut durch die Berechnung der simultanen Ionisation mit der Ersten Bornschen Näherung beschrieben. Es ist kein Einfluss einer PCI erkennbar.

### 4.2.3 Energieverteilung der Elektronen



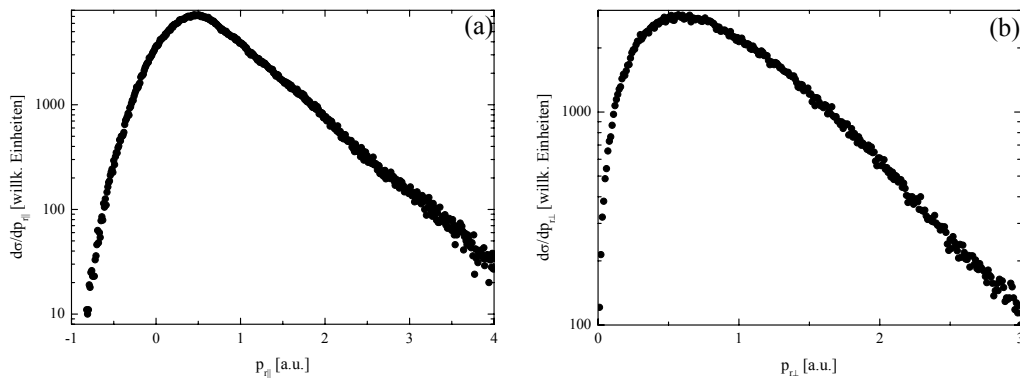
**Abbildung 4.4:** Energieverteilung  $d\sigma/dE_e$  der Elektronen. schwarze Punkte:  $d\sigma/dE_{ep}$  Projektilektron (im Projektilsystem); rote offene Kreise:  $d\sigma/dE_{et}$  Targetelektron

### 4.3. Höher differentielle Wirkungsquerschnitte

Die unterschiedlichen Potentiale in denen das Target- bzw Projektilektron gebunden sind werden im Energiespektrum (Abb. 4.4) deutlich. Für das Projektilektron (schwarze Punkte) ist die oben beschriebene Abnahme von  $d\sigma/dE$  aufgrund des kurzreichweitigen Yukawa-Potentials sichtbar. Beim Targetelektron hingegen ist  $d\sigma/dE$  für kleine Energien konstant, der Abfall von  $d\sigma/dE$  für  $E < 1$  eV ist auf den nicht zu vernachlässigenden minimalen Impulsübertrag auf das Elektron zurückzuführen. Dieses Plateau für  $d\sigma/dE$  bei niedrigen Energien ist typisch für die Einfachionisation eines Elektrons im Coulombpotential.

#### 4.2.4 Impulsverteilung der Rückstoßionen

Die Impulsverteilung der Rückstoßionen ist in Abbildung 4.5 in Richtung des Projektilstrahls (longitudinale Richtung, Abb. (a)) und senkrecht dazu (Abb. (b)) zu sehen. Das Maximum der Longitudinalimpulsverteilung ist zu  $p_{r\parallel} = 0,5$  a.u. verschoben.



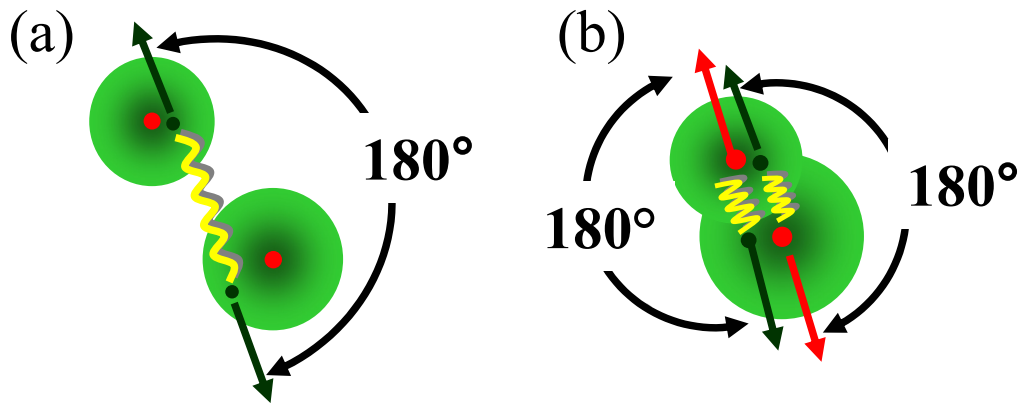
**Abbildung 4.5:** Verteilung des Longitudinalimpulses  $d\sigma/dp_{r\parallel}$  (Abb. (a)) und Transversalimpulses  $d\sigma/dp_{r\perp}$  (Abb. (b)) für das  $\text{He}^+$ -Rückstoßion.

Die Impulse der Rückstoßionen sind damit vergleichbar mit den Transversalimpulsen der Targetelektronen. Dies deutet an, dass eine direkte Wechselwirkung des Targetkerns mit dem Projektilkern eine untergeordnete Rolle spielt, da der zu erwartende Impulsübertrag in einem Kern-Kern Stoß deutlich größer als 0,5 a.u. ist.

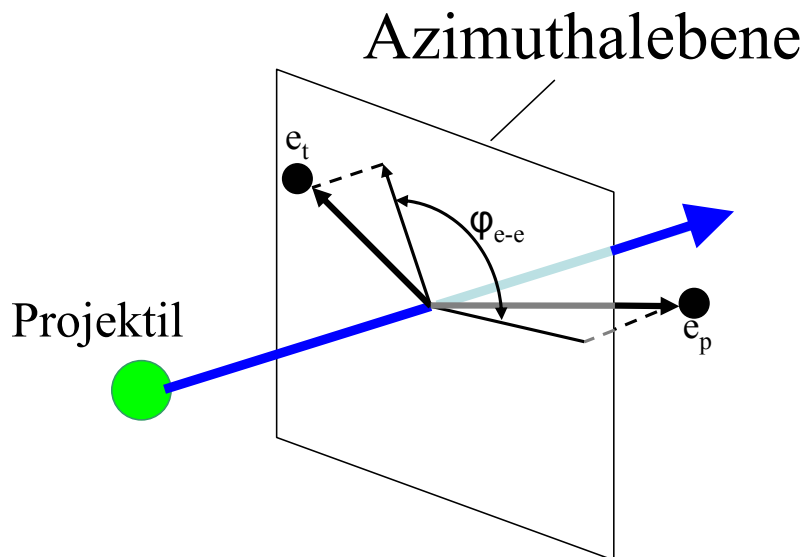
### 4.3 Höher differentielle Wirkungsquerschnitte

#### 4.3.1 Winkelverteilungen in der Azimuthalebene

Um die Dynamik des Stoßprozesses genauer zu untersuchen werden im Folgenden die Emissionswinkel der Teilchen in der Ebene senkrecht zur Projektillachse (Azimuthalebene) diskutiert. In Abbildung 4.6 sind die möglichen Wechselwirkungen



**Abbildung 4.6:** (a): Darstellung der simultanen Ionisation von Target- und Projektilektron durch eine (e,2e) Wechselwirkung; (b): Ionisation der Elektronen durch eine Wechselwirkung mit dem Kern des Stoßpartners.



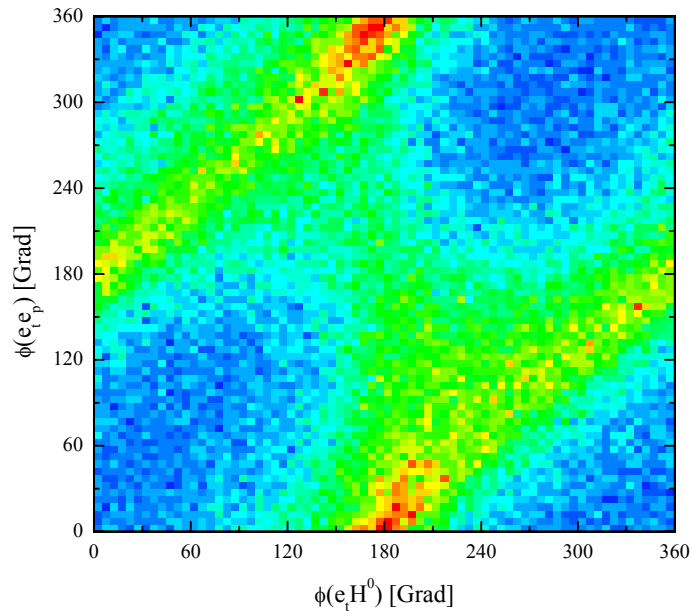
**Abbildung 4.7:** Skizzierung der Differenzwinkel in der Azimuthalebene anhand der (e,2e)-Wechselwirkung.

der Stoßpartner und die damit verbundenen charakteristischen Winkel dargestellt. Skizze 4.6 (a) zeigt die Elektron-Elektron Wechselwirkung wie sie in der Ersten Bornschen Näherung betrachtet wird. Das Target- als auch das Projektilektron werden beim Stoß gleichzeitig ionisiert. Da ein Impuls im Wesentlichen nur zwischen diesen beiden Elektronen ausgetauscht wird, sollten sie aufgrund der Impulserhaltung bevorzugt unter einem Winkel von  $180^\circ$  emittiert werden. Abb. 4.6 (b) zeigt den Fall, dass die Elektronen jeweils vom Kern des Stoßpartners ionisiert werden. Daher ist ein bevorzugter Azimuthalwinkel zwischen dem Elektron und dem entsprechenden

### 4.3. Höher differentielle Wirkungsquerschnitte

Kern von etwa  $180^\circ$  zu erwarten. Bei diesem Stoß sind zwei Wechselwirkungen notwendig, es handelt sich also um einen Beitrag der nicht in der Ersten Bornschen Näherung enthalten ist.

In Abbildung 4.7 ist der oben erwähnte Differenzwinkel am Beispiel des Elektron-Elektron Stoßes im Impulsraum skizziert. Der Impulsvektor der Elektronen im Endzustand wird auf die Azimuthalebene projiziert. Anschließend wird der Winkel  $\varphi$  zwischen den Impulsvektoren in dieser Ebene bestimmt. Der Differenzwinkel  $\varphi(e_t) - \varphi(e_p)$  wird im Folgenden als  $\varphi(e_t e_p)$  bezeichnet, die Differenzwinkel der anderen Stoßfragmente analog.



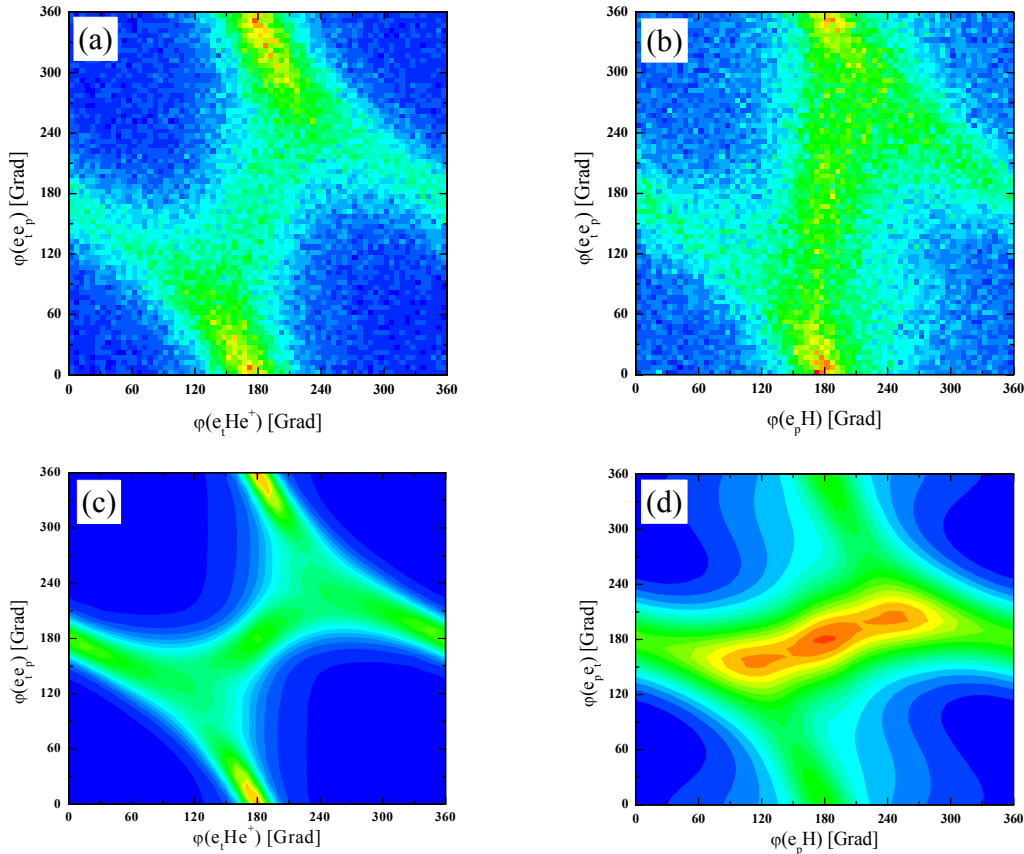
**Abbildung 4.8:** Winkel zwischen den beiden emittierten Elektronen  $\varphi(e_t e_p)$  aufgetragen gegen den Winkel zwischen Targetelektron und dem  $H^0$ -Kern des Projektils  $\varphi(e_t H^0)$ . Die Winkel beziehen sich auf die Projektion der Impulse auf die Azimuthalebene.

In Abb. 4.8 ist  $\varphi(e_t e_p)$  gegen den Differenzwinkel des Targetelektrons  $e_t$  und dem Projektilkern  $\varphi(e_t H^0)$  aufgetragen. Für einen Stoß mit einem  $3,6 \text{ MeV/amu } C^{2+}$ -Ion wurde in [KMO02] gezeigt, dass die Elektron-Elektron Wechselwirkung zu einem Maximum bei  $\varphi(e_t e_p)=180^\circ$  führt, nahezu unabhängig vom Winkel  $\varphi(e_t H^0)$ . In Abb. 4.8 würde dies zu einer horizontalen Linie bei  $\varphi(e_t e_p)=180^\circ$  führen. Entsprechend resultiert ein Stoß zwischen einem Elektron und dem Kern des Stoßpartners, wie in Abb. 4.6 (b) beschrieben, zu einer vertikalen Linie bei  $\varphi(e_t H^0)=180^\circ$ .

Im Spektrum kann allerdings keiner dieser beiden Fälle identifiziert werden. Stattdessen ist die meiste Intensität entlang der Linien zu finden, die einen Winkel von  $45^\circ$  relativ zu den Achsen haben, für die  $\varphi(e_t e_p) - \varphi(e_t H^0)=180^\circ$  ist. Ein ähnliches Verhalten wird für den Winkel  $\varphi(e_p He^+)$  zwischen Projektilektron und Rück-

stoßion beobachtet. Aus der Definition der Differenzwinkel wird ersichtlich, dass  $\varphi(e_t e_p) - \varphi(e_t H^0) = 180^\circ$  identisch mit  $\varphi(e_p H^0) = 180^\circ$  ist, wobei  $\varphi(e_p H^0)$  der Winkel zwischen dem Projektilelektron und dem H-Kern ist. Dem entsprechend ist  $\varphi(e_t e_p) - \varphi(e_p He^+) = 180^\circ$  identisch mit  $\varphi(e_t He^+) = 180^\circ$ .

Trägt man  $\varphi(e_t e_p)$  gegen  $\varphi(e_t He^+)$  (Abb. 4.9 (a)) bzw.  $\varphi(e_p H^0)$  (Abb. 4.9 (b)) auf, sind starke Maxima bei  $\varphi(e_t He^+) = 180^\circ$  und besonders bei  $\varphi(e_p H^0) = 180^\circ$  sichtbar. Dies zeigt, dass die interne Korrelation zwischen dem Elektron und dem eigenen Kern stärker ist als die Korrelation zwischen den Elektronen oder den Elektronen mit dem Kern des Stoßpartners. Im Gegensatz zu [KMO 02] ist hier auf den ersten Blick nicht erkennbar, ob die simultane Ionisation durch eine Elektron-Elektron-Wechselwirkung dominiert wird, wie aus der Analyse der longitudinalen Impulsverteilungen der Elektronen zunächst gefolgert wurde.



**Abbildung 4.9:** Differenzwinkel der emittierten Elektronen  $\varphi(e_t e_p)$  aufgetragen gegen den Winkel zwischen Targetelektron und Rückstoßion  $\varphi(e_t He^+)$  (Abb. (a)) bzw. gegen den Winkel zwischen Projektilektron und Projektilkern  $\varphi(e_p e_{He}^+)$  in der Azimuthalebene. Abb. (c) und (d) zeigen die entsprechenden Spektren zu (a) und (b), die mit einer Rechnung in Erster Bornschen Näherung erstellt wurden, bei der für das Projektil ein Yukawa-Potential angenommen wurde.

Um den Einfluss der Elektron-Elektron Wechselwirkung herauszuarbeiten sind in



### 4.3. Höher differentielle Wirkungsquerschnitte

---

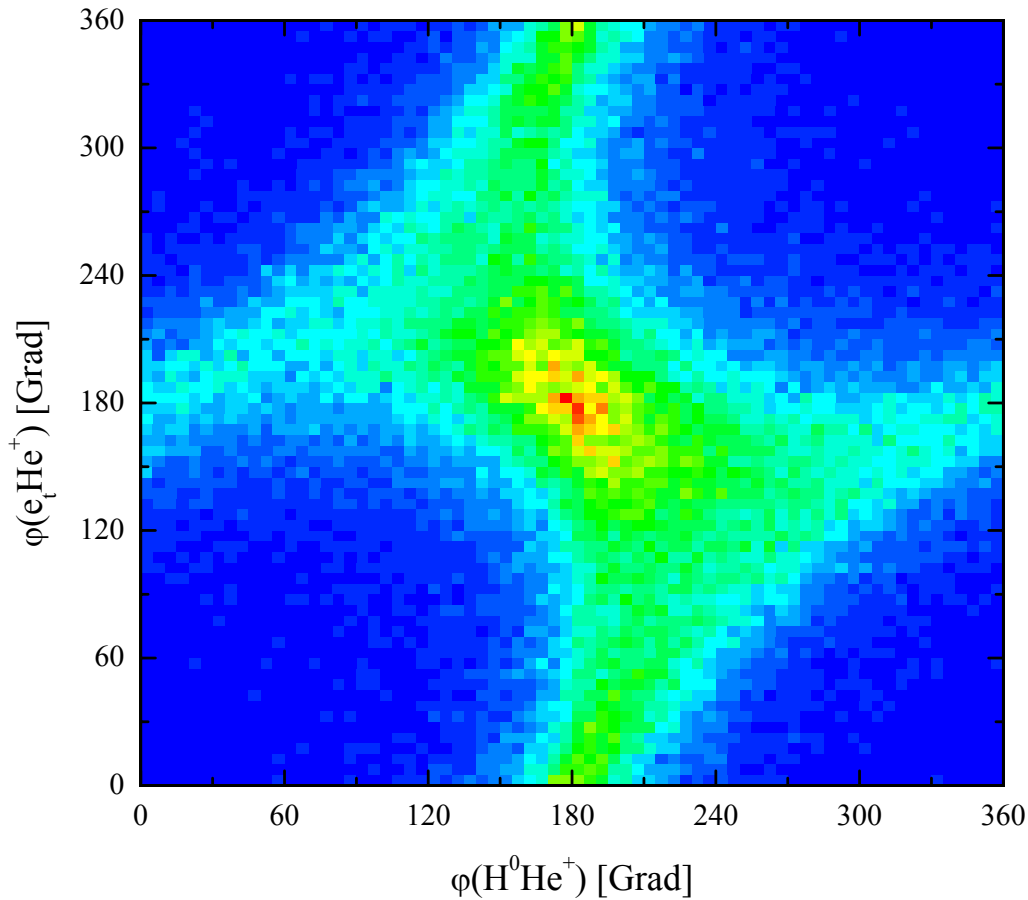
Abb. 4.9 (c) und (d) die theoretischen Rechnungen zu den experimentellen Daten dargestellt. Abb. 4.9 (c) entspricht den experimentellen Daten in Abb. 4.9 (a), Abb. 4.9 (d) entsprechend den Daten aus Abb. 4.9 (b). Die Berechnungen wurden in der Ersten Bornschen Näherung durchgeführt, wobei für das  $H^-$ - Projektil wieder ein Yukawa-Potential angenommen wurde. Im Falle des Targetelektrons (Abb. 4.9 (a) und Abb. 4.9 (c)) ist die Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung erstaunlich gut, obwohl zur Beschreibung des Longitudinalimpulses des Targetelektrons die Berücksichtigung von Effekten höherer Ordnung notwendig war. Lediglich für  $\varphi(e_t e_p)=180^\circ$  und  $\varphi(e_t He^+)=180^\circ$  weicht die theoretische Verteilung etwas von den Daten ab. Dennoch zeigt diese Übereinstimmung, trotz der fehlenden horizontalen Linie in Abbildung 4.8, dass die simultane Ionisation durch die Elektron-Elektron Wechselwirkung dominiert wird.

Die Intensitätsverteilung in Abb. 4.9 (a) kann im Wesentlichen auf eine Drei-Körper-Korrelation zwischen den beiden Elektronen und dem  $He^+$ -Ion reduziert werden. Für das Targetelektron und den Targetkern besteht diese Korrelation schon im Anfangszustand des He-Atoms. Da sich das gesamte Atom ursprünglich in Ruhe befindet, muss zu jedem Zeitpunkt der Impuls des Targetelektrons durch den Targetkern kompensiert werden, sie bewegen sich also immer in entgegengesetzte Richtung. Die Korrelation zwischen den beiden Elektronen kommt durch die Wechselwirkung miteinander beim Stoß zustande, denn bei der gegenseitigen Ionisation wird ein Impuls  $q_e$  zwischen den Elektronen ausgetauscht. Ist dieser Impuls groß gegenüber dem Anfangsimpuls der Elektronen  $p_{e0}$  im gebundenen Zustand, was vor allem für das schwach gebundene Projektilektron zutrifft, bewegen sich die Elektronen unter einem Winkel von  $\varphi(e_t e_p)=180^\circ$  auseinander. Falls der Impuls  $q_e \ll p_{e0}$ , dominiert die Korrelation des Targetelektrons mit dem Targetkern aus dem Anfangszustand, was zu einem Winkel  $\varphi(e_t He^+)=180^\circ$  führt.

Für die Winkelkorrelation des Projektilelektrons ist die Übereinstimmung zwischen Daten von Abbildung 4.9 (b) mit der Theorie (Abb. 4.9 (d)) sehr viel schlechter. Bei den Daten fällt auf, dass die Intensitätsverteilung auf der vertikalen Linie entlang  $\varphi(e_p H^0)=180^\circ$  ihr Maximum besitzt. In der Rechnung ist die Intensität überwiegend entlang der horizontalen Linie  $\varphi(e_t e_p)=180^\circ$  verteilt.

Ein Grund für diese Diskrepanz könnte sein, dass die Impulsverteilung bzw. das Comptonprofil des gebundenen Elektrons im  $H^-$  deutlich breiter ist als in der Rechnung mit einem aktiven Elektron in einem Yukawa-Potential. Da die beiden Elektronen des  $H^-$  im Grundzustand nicht voneinander unterschieden werden können, führt eine Näherung des effektiven Potentials durch ein Yukawa-Potential möglicherweise zu einem zu schmalen Comptonprofil. Ein breiteres Comptonprofil des  $H^-$  kann zu größeren Impulsen  $p_{e0}$  des im  $H^-$  gebundenen Elektrons führen. Dadurch wird die Bedingung  $q_e \ll p_{e0}$  leichter erfüllt. Dies äußert sich durch die bevorzugte Emission

unter dem Winkel  $\varphi(e_p H^0) = 180^\circ$ , was auch im Experiment beobachtet wird. Ein weiterer Grund für die Unterschiede in Experiment und Theorie kann der Einfluss von Effekten höherer Ordnung sein, die bei den Berechnungen mit der Ersten Bornschen Näherung nicht berücksichtigt wurden. Wie in Kapitel 4.2.1 erläutert, ist für die Beschreibung des Longitudinalimpulses des Targetelektrons die PCI mit dem Projektilelektron notwendig. Für das Projektilektron wurde die PCI mit dem Targetelektron durch eine PCI mit dem  $He^+$ -Ion kompensiert.



**Abbildung 4.10:** Winkel zwischen dem Targetelektron und dem Rückstoßion  $\varphi(e_t He^+)$  aufgetragen gegen den Winkel zwischen dem Kern des Projektils und dem Rückstoßion  $\varphi(H He^+)$  in der Azimuthalebene.

Ein weiterer Beitrag höherer Ordnung, der bis jetzt noch nicht berücksichtigt wurde und einen wichtigen Einfluss auf die Dynamik des Stoßes haben kann, ist eine direkte Wechselwirkung zwischen dem Targetkern und dem Projektilkern. In Abb. 4.10 ist der Winkel  $\varphi(e_t He^+)$  zwischen dem Targetelektron und dem  $He^+$ -Ion gegen den Winkel  $\varphi(H He^+)$  zwischen den beiden Kernen aufgetragen. Abb. 4.10 zeigt, dass zwischen den beiden Kernen eine Korrelation besteht. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass im Stoß ein gewisser Impuls zwischen den Kernen ausgetauscht wird.

## 4.4 Untersuchung der Mehr – Teilchen – Wechselwirkung

Die Winkelverteilungen in der Azimuthalebene (Kapitel 4.3.1) geben einen ersten Einblick welche Teilchen miteinander wechselwirken und in welche Richtungen die Impulse der Teilchen zeigen. Diese Spektren enthalten aber keine Information über die Größe der einzelnen Impulse. Außerdem kann damit nur eine Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen identifiziert werden. Eine Wechselwirkung zwischen drei oder sogar allen vier Teilchen im Endzustand kann nur schwer identifiziert werden.

Mit Hilfe der so genannten Dalitz-Spektren wurden in den letzten Jahren die Beiträge von Drei-Teilchen-Wechselwirkungen bei der Einfachionisation [SMF 04] und in der Mehrfachionisation [SMS 00] eines Atoms im Ionenstoß untersucht. Im folgenden Kapitel wird mit diesen Dalitz-Spektren die Mehr-Teilchen-Wechselwirkung in der simultanen Ionisation untersucht.

### 4.4.1 Dalitz-Spektren

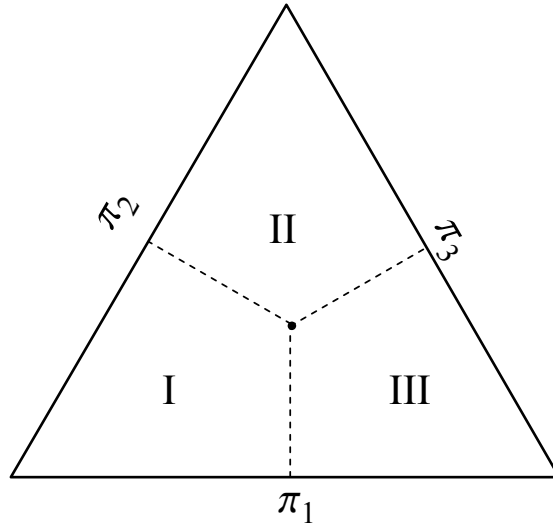
Ursprünglich wurden die Dalitz-Spektren in der Teilchenphysik für den Zerfall von  $\tau$ -Mesonen in drei Pionen [Dal53] verwendet. Dort wurde die Energie jedes Fragments auf die Gesamtenergie normiert und in ein gleichschenkliges Dreieck eingetragen, in dem jede Seite ein Fragment repräsentiert (siehe Abbildung 4.11). Jeder Datenpunkt in diesem Diagramm steht für eine andere Kombination der Teilchenenergien. Der senkrechte Abstand von diesem Datenpunkt zu dem entsprechenden Dreieckschenkel entspricht der relativen Energie, die dieses Fragment zur Reaktion beiträgt. Falls beispielsweise die Energie gleich unter den Fragmenten aufgeteilt wird, liegt der Datenpunkt genau im Schwerpunkt des Dreiecks.

Da in unserem Fall die Fragmente sehr unterschiedliche Massen haben, wird nicht die Energie der Fragmente betrachtet, sondern deren relativer quadratischer Impuls  $\pi_i$ . Dabei ist  $\pi_i$  definiert über

$$\pi_i = \frac{p_i^2}{\sum_j p_j^2}, \quad (4.2)$$

wobei  $j$  die Anzahl aller Fragmente ist.

Im Falle der Einfachionisation kann der Impuls der drei Stoßfragmente in ein Spektrum eingezeichnet werden [SMF 04]. Bei der simultanen Ionisation existieren nach dem Stoß allerdings vier Fragmente, die nicht gleichzeitig in dieses Diagramm eingetragen werden können. Aus diesem Grund wird die Ionisation des He-Targets durch das  $H^-$ -Projektil getrennt untersucht von der Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch ein He-Atom. Im ersten Fall wird das Projektilsystem, bestehend aus  $H^0$ -Kern und Projektilelektron, als ein Teilchen betrachtet, im zweiten Fall das Targetsystem, be-



**Abbildung 4.11:** Darstellung einer Drei-Teilchen-Wechselwirkung im Dalitz-Spektrum.

stehend aus  $He^+$ -Ion und Targetelektron, ebenfalls als ein Teilchen. Dazu wird im Falle der Ionisation des He-Targets der Projektilimpuls aus der Summe der Impulse von  $H^0$  und Projektilektron gebildet, für die Ionisation des  $H^-$ -Projektils die Summe der Impulse des  $He^+$ -Ions und dem Targetelektron. Der Impuls des betrachteten Projektils wird von der unteren Dreiecksseite ausgehend aufgetragen, der Impuls des emittierten Targetelektrons von der linken und der Impuls des Target-Rumpfes von der rechten Dreiecksseite.

Die in Abbildung 4.11 eingezeichneten Regionen (I, II, III) stehen für kinematisch unterschiedliche Fälle. Aufgrund der Impulserhaltung gilt:

$$q(H^-) = p_{He^+} + p_{e_t} \quad \text{und} \quad (4.3a)$$

$$q(He^0) = p_{H^0}^{(PS)} + p_{e_p}^{(PS)} = -q(H^-) . \quad (4.3b)$$

$q(H^-)$  ist der Impulsübertrag vom Projektil auf das Target und  $q(He^0)$  entsprechend der Impulsübertrag vom Target auf das Projektil. Für die Fragmente des Projektils wird der Impuls im Projektilsystem (PS) verwendet.

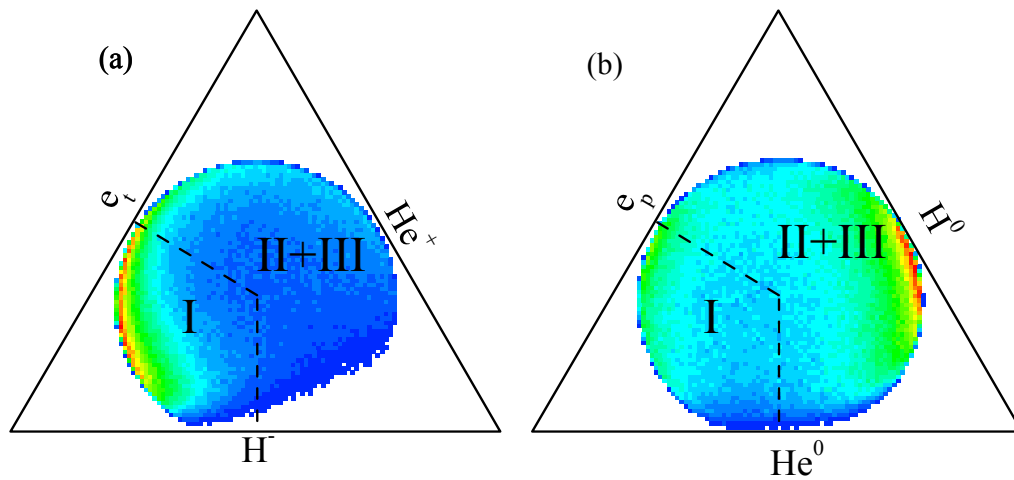
Im Falle der Targetionisation enthält Region I nur Ereignisse, bei denen der Impuls des Targetelektrons  $p_{e_t}$  entgegengesetzt gerichtet ist zum Impulsübertrag  $q(H^-)$ . Diese Ereignisse entsprechen damit dem so genannten Recoil-Peak, bei dem die emittierten Elektronen an ihrem eigenen Kern um  $180^\circ$  zurückgestreut werden. In Region II zeigt sowohl der Impuls des Targetelektrons als auch der Impuls des  $He^+$ -Recoilions in die Richtung des Impulsübertrages. In Region III zeigen Impulsübertrag und der Impuls des Targetelektrons in die gleiche Richtung, der Impuls des Recoilions hingegen zeigt in entgegengesetzte Richtung.

#### 4.4. Untersuchung der Mehr-Teilchen-Wechselwirkung

Region II zusammen mit Region III bilden den Bereich, in dem das Targetelektron in einem binären Stoß emittiert wird, also direkt durch eine Wechselwirkung mit dem  $H^-$ -Projektil.

Bei der Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch das He-Target ändert sich entsprechend Gleichung (4.3b) die Bedeutung der Regionen nicht. Die Ereignisse in Region I führen zum Recoil-Peak, die Ereignisse in Region II und III sind durch einen binären Stoß entstanden.

In Abbildung 4.12 sind die Dalitz-Spektren für die Ionisation des He-Targets (a) und für die Ionisation des  $H^-$ -Projektils (b) zu sehen. Es können aufgrund der Impul-

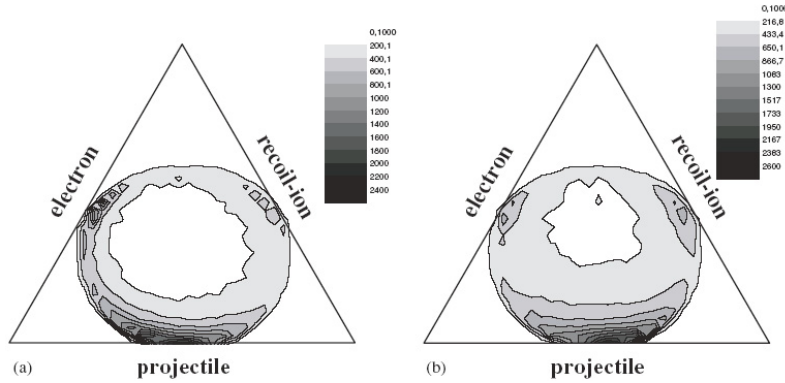


**Abbildung 4.12:** Dalitz-Spektrum für die Ionisation von He durch das  $H^-$ -Projektil (Abb. (a)) und für die Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch das He-Target (Abb. (b)).

serhaltung nur Ereignisse im Inneren des Ringes auftreten, dessen Radius alle drei Dreiecksseiten berührt. Bei Ereignissen außerhalb des Ringes wäre die Impulserhaltung verletzt.

Diese Dalitz-Spektren für die simultane Ionisation von Target und Projektil unterscheiden sich qualitativ sehr von Spektren für eine reine Einfachionisation des Targets im Ion-Atom-Stoß (Abbildung 4.13). Bei der Einfachionisation ist die dominante Struktur das Maximum nahe der Dreiecksseite, durch die das Projektil repräsentiert wird. Es treten also meist Ereignisse auf, bei denen der Impulsübertrag klein ist im Vergleich zu den Impulsen von Elektron und Rückstoßion.

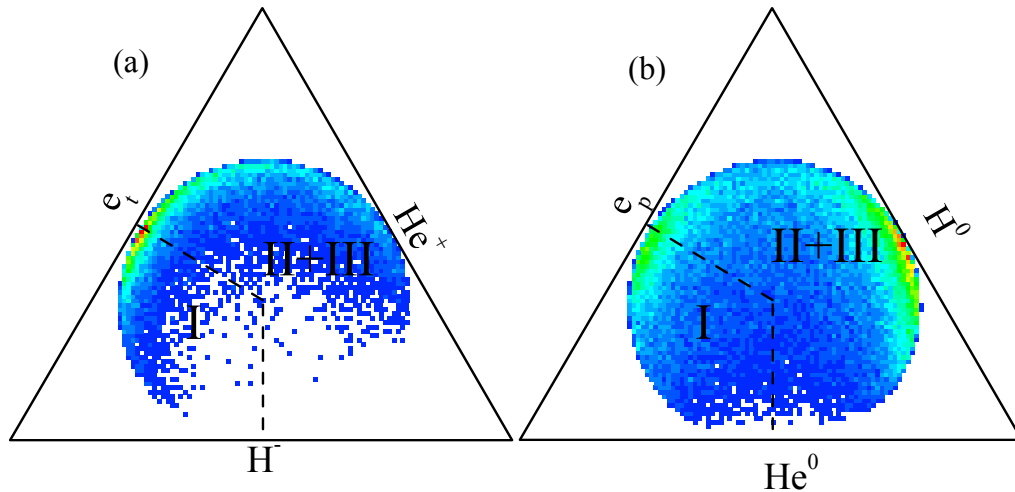
Bei den in dieser Arbeit gemessenen Daten zur simultanen Ionisation hingegen ist im Falle der Targetionisation (Abb. 4.12 (a)) ein Maximum an der linken Seite des Dreiecks deutlich sichtbar. Dies bedeutet, dass die Impulsänderung des Targetelektrons nur sehr gering ist. Der größte Impuls wird also auf das Recoilion übertragen, was häufig bei einer Ionisation im Elektronenstoß bei niedrigen Projektilenergien beobachtet wird.



**Abbildung 4.13:** Dalitz-Spektren für die Einfachionisation von He in Stößen mit 100 MeV/u  $C^{6+}$  (a) und 3,6 MeV/u  $Au^{24+}$  (b) [SMF 04].

Die Ionisation des Projektils (Abb. 4.12 (b)) hingegen wird von einem Maximum an der rechten Dreiecksseite dominiert, was auf einen binären Stoß zwischen dem He-Atom und dem Projektilelektron hindeutet. Der  $H^0$ -Rumpf spielt lediglich die Rolle eines Zuschauers. Außerdem ist ein schwächeres Maximum an der linken Dreiecksseite sichtbar. In diesem Fall agiert das Projektilektron als Zuschauer und es kommt zu einem Stoß zwischen den beiden Kernen  $H^0$  und  $He^0$ .

Im Folgenden wird untersucht, ob das Projektilektron durch eine Wechselwirkung mit dem He-Elektron oder mit dem He-Kern herausgeschlagen wird.



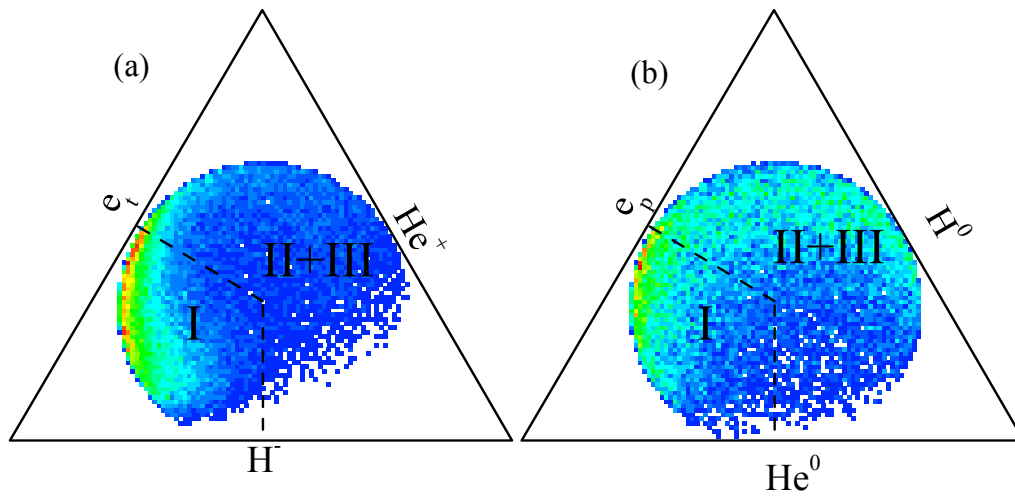
**Abbildung 4.14:** Dalitz-Spektren bei denen das Elektron des ionisierenden Teilchens als Zuschauer agiert. Ionisation von He durch das  $H^-$ -Projektil für  $p_{H^0} > 3p_{e_p}$  (Abb. (a)). Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch das He-Target für  $p_{He^+} > 3p_{e_i}$  (Abb. (b)).

Für den Fall, dass der Impulsübertrag auf den Kern des Stoßpartners viel größer ist als auf das aktive Elektron wurden die Spektren in Abbildung 4.14 erzeugt.

#### 4.4. Untersuchung der Mehr-Teilchen-Wechselwirkung

In Abbildung 4.14 (a) ist  $p(\text{H}^0) > 3p(e_p)$ , in Abbildung 4.14 (b) entsprechend  $p(\text{He}^+) > 3p(e_t)$ . Unter dieser Bedingung verschwindet in Abbildung 4.14 (a) der Anteil in Region I fast völlig. Ein Maximum erscheint bei kleinen Elektronenimpulsen  $p(e_t)$ .

Das Spektrum für die Ionisation des  $\text{H}^-$ -Projektils für  $p(\text{He}^+) > 3p(e_t)$  in Abbildung 4.14 (b) unterscheiden sich qualitativ nicht sehr von dem Spektrum ohne Bedingung (Abb. 4.12). Dies bedeutet, dass bei der Ionisation des  $\text{H}^-$ -Projektils ein bedeutender Impuls vom  $\text{He}^+$  auf den  $\text{H}^0$ -Kern übertragen wird.



**Abbildung 4.15:** Dalitz-Spektren bei denen der Kern des ionisierenden Teilchens als Zuschauer agiert. Ionisation von He durch das  $\text{H}^-$ -Projektil für  $p_{e_p} > 3p_{\text{H}^0}$  (Abb. (a)). Ionisation des  $\text{H}^-$ -Projektils durch das He-Target für  $p_{e_t} > 3p_{\text{He}^+}$  (Abb. (b)).

In Abbildung 4.15 sind die Dalitz-Spektren zu sehen für den Fall, dass der Impuls des aktiven Elektrons des Stoßpartners viel größer ist als der des Kerns. Der Kern ist also nur als Zuschauer beteiligt. Im Vergleich zu den Spektren ohne Bedingung (Abb. 4.12 (a)) ergibt sich für die Ionisation des He-Targets keine Änderung. Daher scheint das He-Targets überwiegend durch das aktive Elektron des Projektils ionisiert zu werden. Während in Abbildung 4.14 (a) das Targetelektron als Zuschauer agierte ( $\pi(e_t) = 0$ ), ist die Lage des Maximums in Abbildung 4.15 (a) in Richtung der unteren Dreiecksseite verschoben.

Bei der Ionisation des Projektils (Abb. 4.15 (b)) ist der Unterschied bei diesen Bedingungen noch deutlicher. Das Maximum des binären Stoßes bei kleinen  $\pi(\text{H}^0)$  verschwindet fast vollständig, und im Bereich  $\pi(e_p) = 0$  erscheint ein Maximum. Generell ergibt die Analyse mit Hilfe der Dalitz-Spektren, dass das He-Target durch das aktive Elektron des  $\text{H}^-$  ionisiert wird, während bei der Ionisation des Projektils die Wechselwirkung mit dem  $\text{He}^+$ -Kern des Targets eine entscheidende Rolle spielt.

## 4.5 Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

Einen noch detaillierteren Einblick in die Ionisationsdynamik bei der simultanen Ionisation erhält man durch die Betrachtung der Polar- und Azimutwinkel  $\theta$  bzw.  $\varphi$  der emittierten Elektronen des Targets oder des Projektils. Die Analyse der Dalitz-Spektren ergab, dass das He-Target überwiegend durch die Wechselwirkung mit dem aktiven Elektron des Projektils ionisiert wird. Im folgenden Kapitel wird diese Targetionisation genauer untersucht und mit verschiedenen Theorien verglichen.

### 4.5.1 Ionisation von He durch $H^-$

Zur Beschreibung der Ionisation des Helium-Targets werden drei verschiedene Theorien verwendet. Mit einer Rechnung in der Ersten-Bornschen-Näherung (FBA-Y), in der das Potential des Projektilkerns durch ein Yukawa-Potential simuliert wurde, ist es möglich die simultane Ionisation von Target und Elektron zu beschreiben. Diese Rechnung wurde in Kapitel 2.7 schon detailliert diskutiert.

Mit einer 3C-Rechnung (Kapitel 2.3) wird der Einfluss des Projektilelektrons untersucht, der in Kapitel 4.4 deutlich wurde. Da das Projektilektron mit nur 0,75 eV gebunden ist, kann es als freies Elektron einer Geschwindigkeit von 2,83 a.u. betrachtet werden. Die Energie des Projektilelektrons beträgt also 109 eV. Die 3C-Rechnung beschreibt damit einen reinen (e,2e)-Stoß.

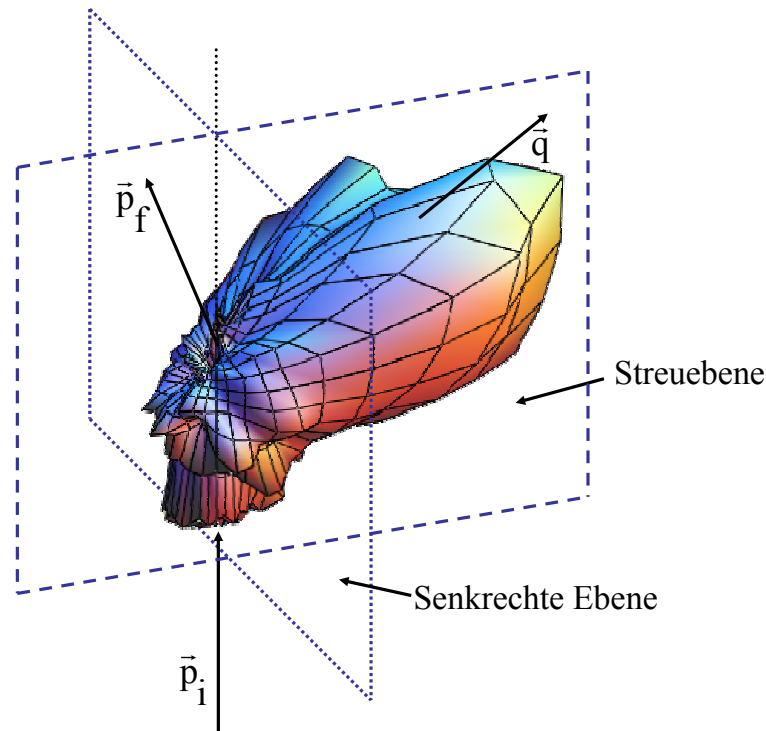
Weiterhin kann die Möglichkeit nicht außer acht gelassen werden, dass das  $H^-$ -Projektil als Ganzes an der Ionisation des He-Targets beteiligt ist. Mit dieser Annahme konnte die longitudinale Impulsverteilung der Targetelektronen (Kapitel 4.2.1) beschrieben werden. Dieser Fall wird modelliert, indem in einer CDW-EIS-Rechnung (Kapitel 2.4.1) die Ionisation des Targets durch ein strukturloses  $H^-$ -Ion berechnet wird.

Für die Beschreibung der Ionisation des Targets wird der fünffach-differentielle Wirkungsquerschnitt FDCS (*fivefold differential cross section*)  $\sigma^{(5)}$  verwendet:

$$\text{FDCS} = \sigma^{(5)} = \frac{d^5\sigma}{dE_t d^2\Omega_t d^2q_\perp} . \quad (4.4)$$

Hierbei steht  $E_t$  für die Energie und  $\Omega_t$  für den Raumwinkel des emittierten Targetelektrons.  $q_\perp$  ist die Komponente des Impulsübertrags, die senkrecht zur Richtung des einlaufenden Projektils ist. Für den Fall einer reinen Elektronenstoßionisation ist der Wirkungsquerschnitt  $\sigma^{(5)}$  identisch mit dem vollständig differentiiellen Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation des Targets. Da bei der simultanen Ionisation neben dem Targetelektron auch das Projektilektron emittiert wird, ist  $\sigma^{(5)}$  allerdings nicht vollständig bezüglich der simultanen Ionisation.

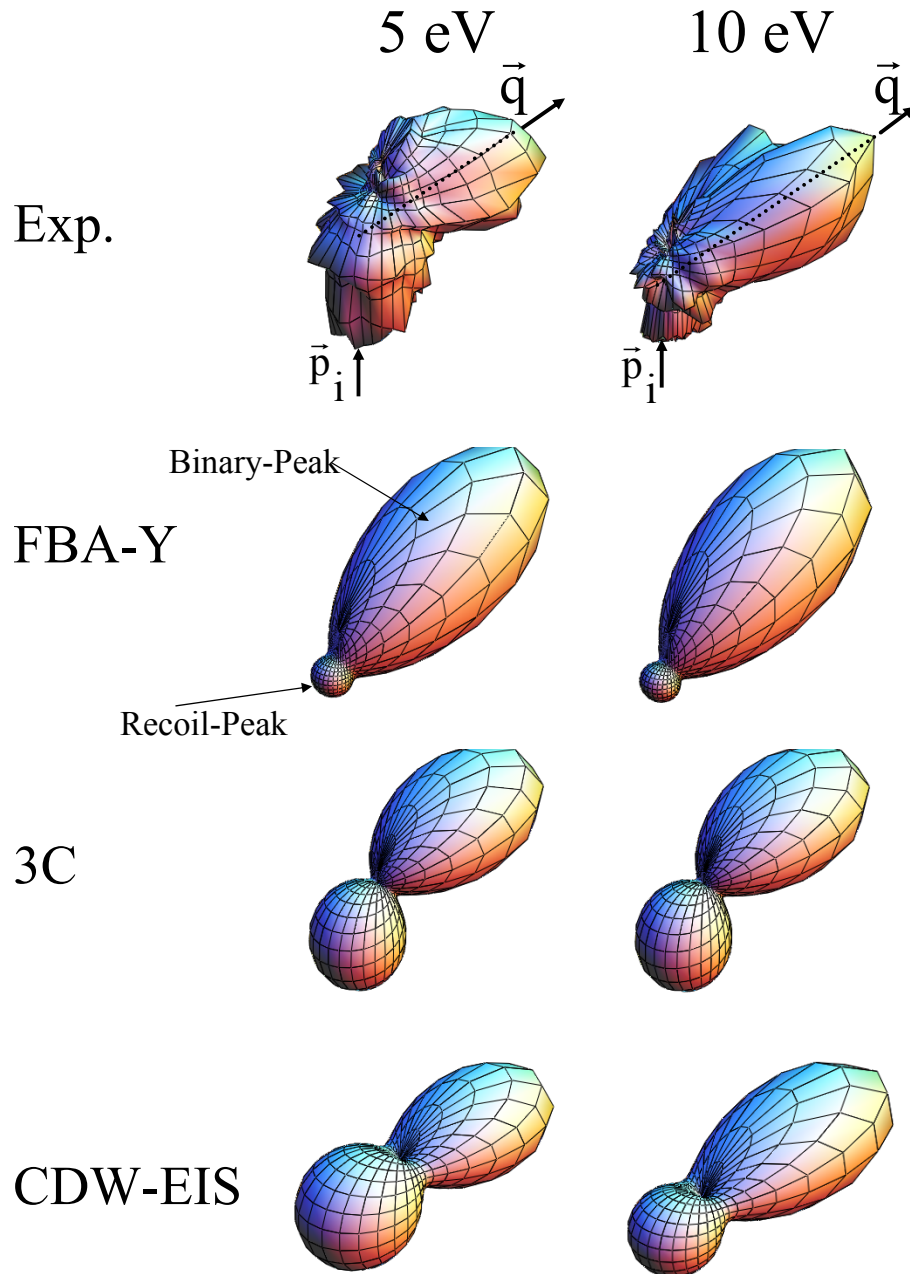




**Abbildung 4.16:**  $\sigma^{(5)}$  für eine Emissionsenergie von 10 eV bei  $q_t = 0.9$  a.u..

In Abbildung 4.16 ist der für den  $\text{H}^-$ -He-Stoß gemessene FDCS für eine Emissionsenergie des Targetelektrons von 10 eV bei einem transversalen Impulsübertrag  $q_{\perp} = 0,9$  a.u. dargestellt. Über die Energie und die Winkel des emittierten Projektilelektrons  $e_p$  wurde integriert. Zusätzlich ist die Richtung des ankommenden Projektils  $\mathbf{p}_i$ , des gestreuten Projektils  $\mathbf{p}_f$  und der Impulsübertrag  $\mathbf{q}$  eingezeichnet. Die Streuebene wird aufgespannt durch  $\mathbf{p}_i$ ,  $\mathbf{p}_f$  und  $\mathbf{q}$ , die Senkrechte Ebene steht senkrecht auf der Streuebene.

Ein Vergleich mit den oben erwähnten Theorien ist in Abbildung 4.17 für Emissionsenergien von 5 eV und 10 eV zu sehen. Beim experimentellen Wirkungsquerschnitt für 5 eV ist das Maximum entgegen der Richtung des auslaufenden Projektils wesentlich ausgeprägter als für 10 eV. Bei der Ersten Bornschen Näherung (FBA-Y) für die simultane Ionisation von Target und Projektil ist für beide Energien deutlich ein Binary- und Recoil-Peak erkennbar. Das Verhältnis von Binary- zu Recoil-Peak ist bei beiden Energien ähnlich. Die 3C-Rechnungen zeigen als einzige der hier aufgeführten Theorien eine deutliche Verkipfung des Recoil-Peaks in Richtung des einlaufenden Projektils. Das Verhältnis von Binary- zu Recoil-Peak bei diesen Energien ändert sich kaum. Bei der CDW-EIS-Rechnung ändert sich zwar ähnlich wie in den experimentellen Daten das Verhältnis von Binary- zu Recoil-Peak, allerdings ist der Recoil-Peak nicht verkippt.



**Abbildung 4.17:**  $\sigma^{(5)}$  für  $q_{\perp} = 0,9$  a.u. bei einer Emissionsenergie von 5 eV und 10 eV im Vergleich mit verschiedenen theoretischen Rechnungen. FBA-Y: simultane Ionisation von Target und Projektil; 3C: Ionisation durch ein 109 eV Elektron; CDW-EIS: Ionisation durch ein strukturloses  $H^-$

### Winkelverteilungen in der Streuebene

In Abbildung 4.18 ist der Wirkungsquerschnitt  $\sigma^{(5)}$  für verschiedene  $q_{\perp}$  in der Streuebene in Abhängigkeit vom Emissionswinkel  $\theta$  abgebildet. Die Streuebene ist in Abbildung 4.16 definiert. Das Projektil läuft aus der Richtung von  $180^{\circ}$  ein und wird durch den Stoß in einen Winkel zwischen  $0^{\circ}$  und  $360^{\circ}$  gestreut. In der linken Reihe sind Wirkungsquerschnitte für eine Emissionsenergie von 5 eV bei verschiedenen  $q_{\perp}$  abgebildet, in der rechten Reihe beträgt die Emissionsenergie 10 eV.

Die FBA-Y-Rechnung (rote durchgezogene Linie) ist symmetrisch bezüglich des Impulsübertrags  $q$ . Im Vergleich zum Experiment (schwarze Punkte) wird der Recoil-Peak bei allen Impulsüberträgen unterschätzt. Die experimentellen Daten zeigen bei beiden Energien und allen Impulsüberträgen eine Verkippung der Maxima bezüglich  $q$  entgegen der Richtung des auslaufenden Projektils. Dies bedeutet, dass die emittierten Elektronen durch das auslaufende negative Projektil abgestoßen werden.

Erstaunlich gut stimmt die 3C-Rechnung (blaue gestrichelte Linie) mit den experimentellen Daten überein. Sowohl bei 5 eV besonders aber bei 10 eV ist die Übereinstimmung bei mittleren  $q_{\perp}$  (mittlere Reihen in Abb. 4.18) nahezu perfekt. Der Winkel der emittierten Elektronen bezüglich dem auslaufenden Projektil wird korrekt wiedergegeben, ebenso die Intensität entlang der Maxima.

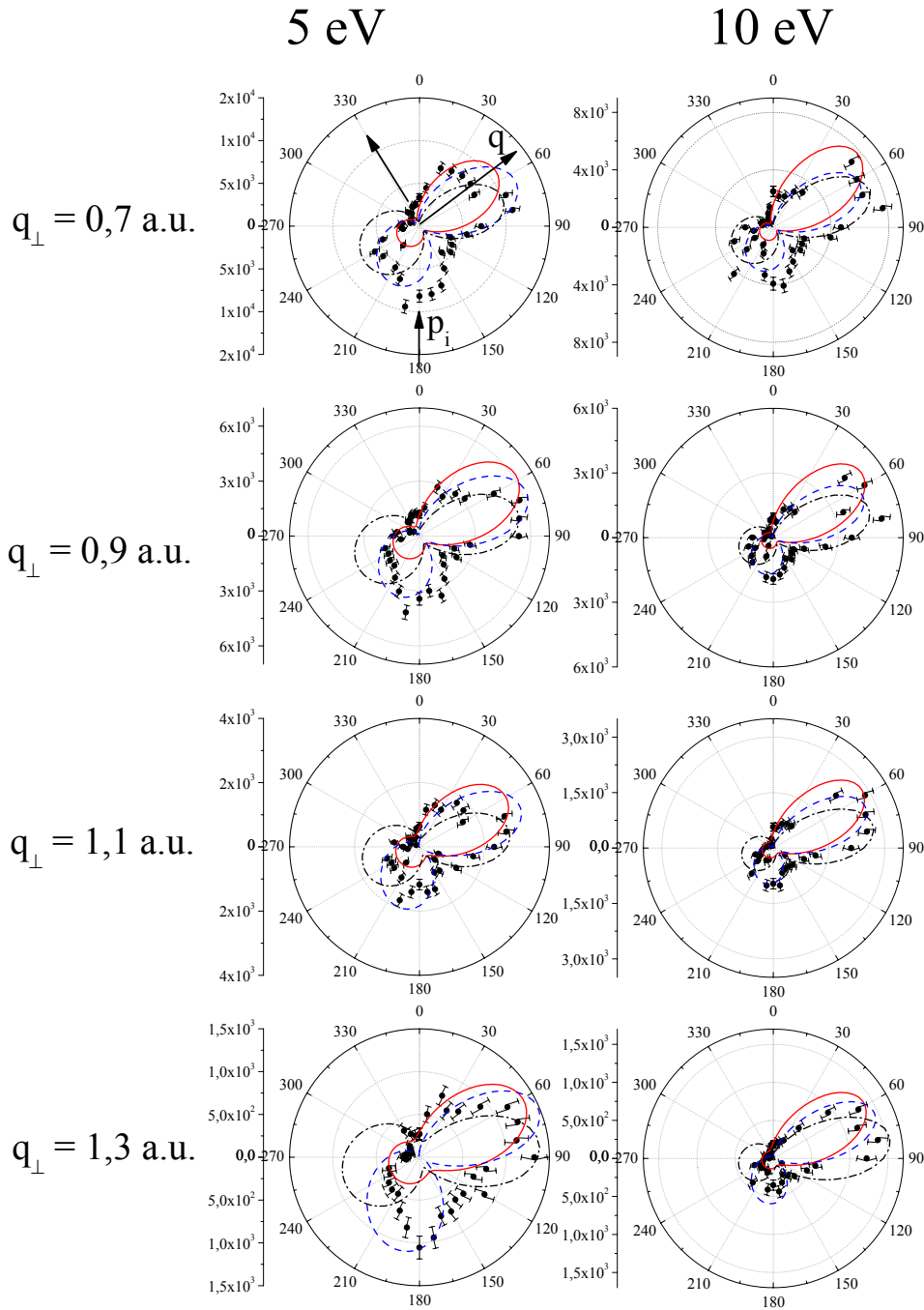
Bei der CDW-EIS-Rechnung (schwarze strich-punktierte Linie) ist zwar die Intensität entlang der Maxima korrekt wiedergegeben, die abstoßende Wirkung des auslaufenden Projektils hingegen wird unterschätzt. Dieses Verhalten ist für eine Emissionsenergie von 10 eV und  $q_{\perp} = 0,9$  a.u. in Abbildung 4.19 verdeutlicht.

Auffällig ist, dass die Lage des Binary-Peaks ( $\theta \sim 60^{\circ}$ ) bei der CDW-EIS-Rechnung zu einem höheren Emissionswinkel  $\theta$  verschoben ist als bei der 3C-Rechnung. Diese Verschiebung beruht nicht auf einer größeren PCI zwischen dem  $H^{-}$  und dem emittierten Elektron. Im Gegenteil, die PCI ist beim (e,2e)-Stoß (3C-Rechnung) größer, da hier das Projektilelektron nach dem Stoß wesentlich langsamer ist, als vor dem Stoß.

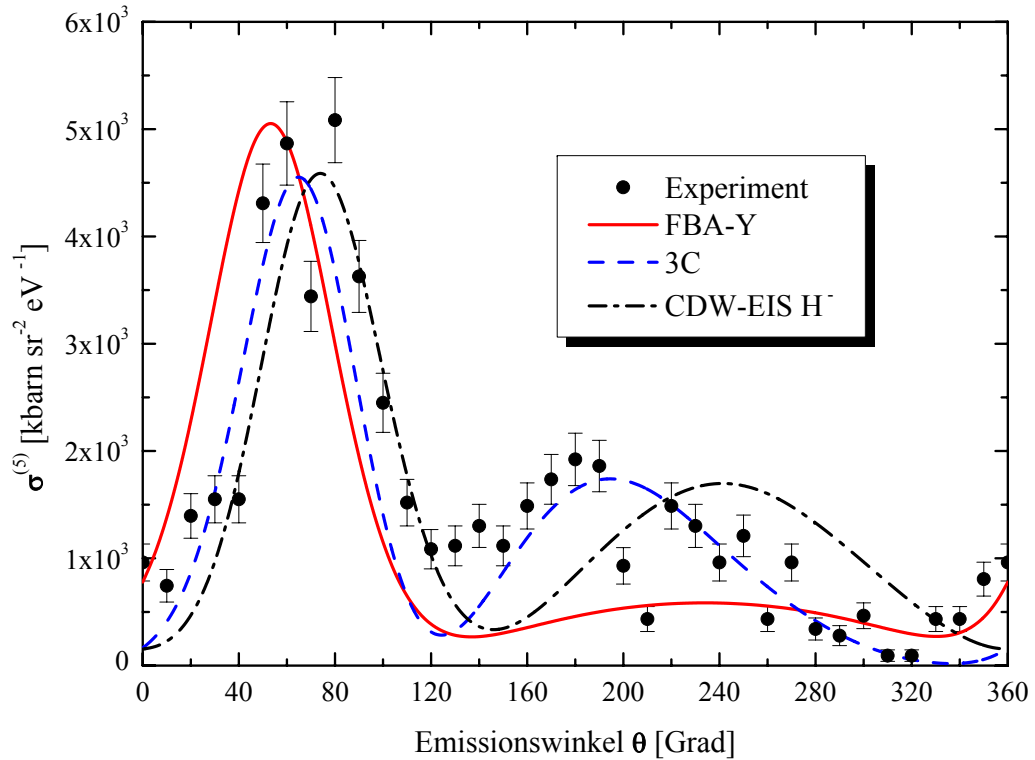
### Winkelverteilung in der Senkrechten Ebene

Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie ist bei der Ionisation von He im Ionenstoß in der Senkrechten Ebene meist sehr schlecht [SMF 03] (siehe auch Abb. 1.2). Es besteht zwar die Vermutung, dass die Projektilkern-Targetkern-Wechselwirkung einen großen Einfluss auf die Emission des Elektrons hat, allerdings konnte dies bis jetzt nicht theoretisch nachgewiesen werden. Zur Zeit existiert keine Theorie welche die Winkelverteilung der Elektronen in der Senkrechten Ebene beim Ionenstoß korrekt wiedergeben kann.

Beim Elektronenstoß hingegen ist die Übereinstimmung zwischen Experiment und



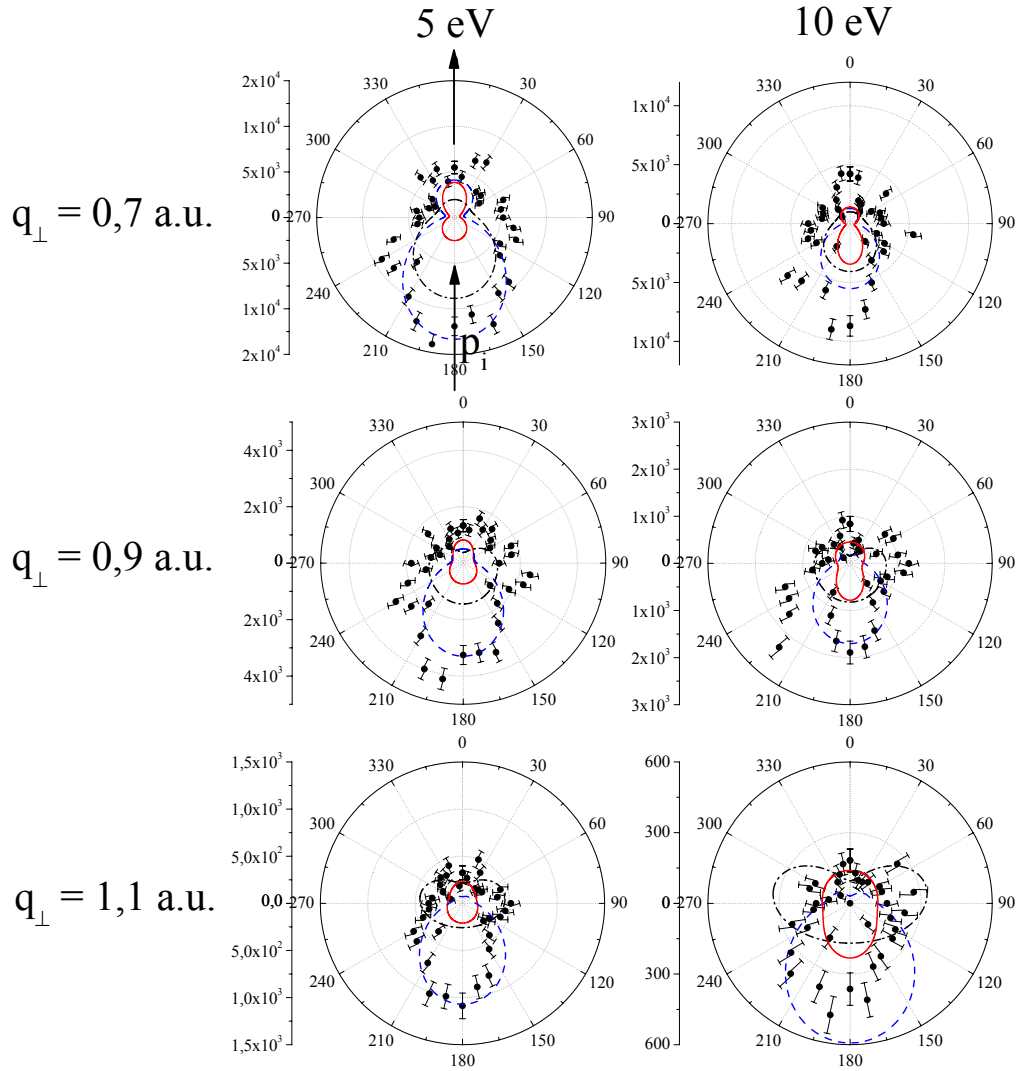
**Abbildung 4.18:**  $\sigma^{(5)}$  (in  $\text{k barn sr}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ ) des Targetelektrons in der Streuebene in Abhängigkeit vom Emissionswinkel  $\theta$  bei einer Emissionsenergie von 5 eV und 10 eV für verschiedene  $q_{\perp}$ . Die Daten (Punkte) wurden auf die Erste-Bornsche-Näherung (FBA-Y, rote durchgehende Linie) normiert. Die 3C-Rechnung für einen (e,2e)-Stoß bei 109 eV Projektilenergie (blaue gestrichelte Linie) wurde mit einem Faktor 1/4 (bzw. 1/6 für 10 eV) multipliziert. Die CDW-EIS-Rechnung für die Ionisation durch ein strukturloses  $H^-$  (schwarze strich-punktierte Linie) wurde mit einem Faktor 4 (bzw. 3 für 10 eV) multipliziert.



**Abbildung 4.19:**  $\sigma^{(5)}$  in der Streuebene in Abhängigkeit vom Emissionswinkel  $\theta$ . Die Emissionsenergie des Targetelektrons beträgt 10 eV und  $q_{\perp} = 0,9$  a.u..

Theorie deutlich besser. Der Vergleich eines kürzlich durchgeführten Experiments zur Einfachionisation von He im Elektronenstoß [DDN 06] mit mehreren Theorien zeigt, dass sogar die Übereinstimmung in der Senkrechten Ebene sehr gut ist. Da bei der Ionisation des He-Targets durch das  $H^{-}$ -Projektil die Emission der Elektronen in der Streuebene durch einen Elektronenstoß mit dem Projektilelektron beschrieben werden kann, besteht die Vermutung, dass auch die Emission in der Senkrechten Ebene dadurch beschrieben werden kann. Im Folgenden wird diese Vermutung überprüft durch den Vergleich der experimentellen Daten mit verschiedenen Theorien. In Abbildung 4.20 ist  $\sigma^{(5)}$  für verschiedene Impulsüberträge  $q_{\perp}$  und verschiedene Energien in der Senkrechten Ebene in Abhängigkeit vom Azimutalwinkel  $\varphi$  aufgetragen. Die linke Reihe entspricht einer Emissionsenergie von 5 eV, die rechte einer Emissionsenergie von 10 eV. Der experimentelle Wirkungsquerschnitt wurde für die Senkrechte Ebene nicht erneut normiert, die Normierung auf die Wirkungsquerschnitte der FBA-Y-Rechnung für die Streuebene wurde übernommen. Für kleine und mittlere  $q_{\perp}$  weist  $\sigma^{(5)}$  ein ausgeprägtes Maximum in Rückwärtsrichtung ( $\varphi = 180^{\circ}$ ) auf und ein kleineres in Richtung  $\varphi = 0^{\circ}$  des auslaufenden Projektils.

Generell wird ein Maximum bei  $\varphi = 180^{\circ}$  von allen Theorien vorhergesagt. Die FBA-



**Abbildung 4.20:**  $\sigma^{(5)}$  (in  $\text{kbarn sr}^{-2} \text{eV}^{-1}$ ) des Targetelektrons in der Senkrechten Ebene in Abhängigkeit vom Azimutalwinkel  $\varphi$  bei einer Emissionsenergie von 5 eV und 10 eV für verschiedene  $q_{\perp}$ . Der Impulsübertrag  $\mathbf{q}_{\perp}$  steht senkrecht auf der Papierebene. FBA-Y: rote durchgehende Linie; 3C: blaue gestrichelte Linie; CDW-EIS: schwarze strichpunktiierte Linie

Y-Rechnung weist ebenfalls ein Maximum in Vorwärtsrichtung auf, allerdings wird es systematisch im Verhältnis zum Maximum in Rückwärtsrichtung überschätzt. Die 3C-Rechnung zeigt für 5 eV und  $q_{\perp} = 0,5$  a.u. eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. In allen anderen Fällen wird allerdings das Maximum in Vorwärtsrichtung unterschätzt, bzw. tritt stattdessen ein Minimum auf (Abb. (e)). Auch kann mit der 3C-Rechnung die Emission der Elektronen senkrecht zur Projektilrichtung nicht erklärt werden.

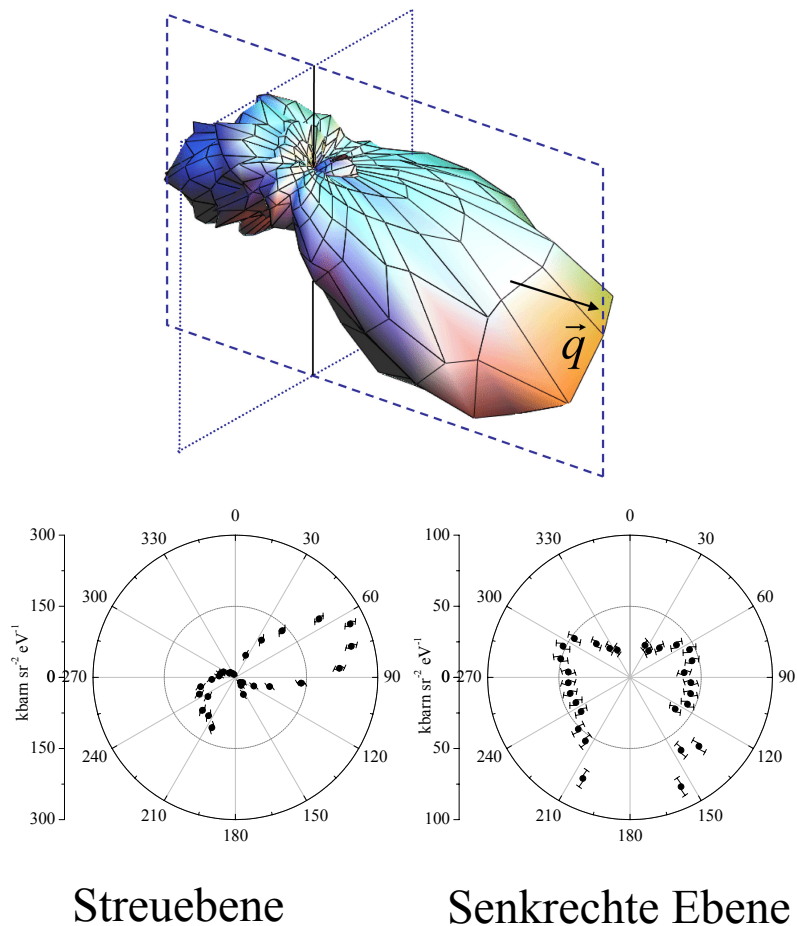
#### 4.5. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte

Bei der CDW-EIS-Rechnung wird für größere Impulsüberträge verstärkt eine Emission der Elektronen senkrecht zur Projektilrichtung vorhergesagt. Die Maxima in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung hingegen werden stark unterschätzt.

##### 4.5.2 Vergleich zur Einfachionisation von He im Elektronenstoß

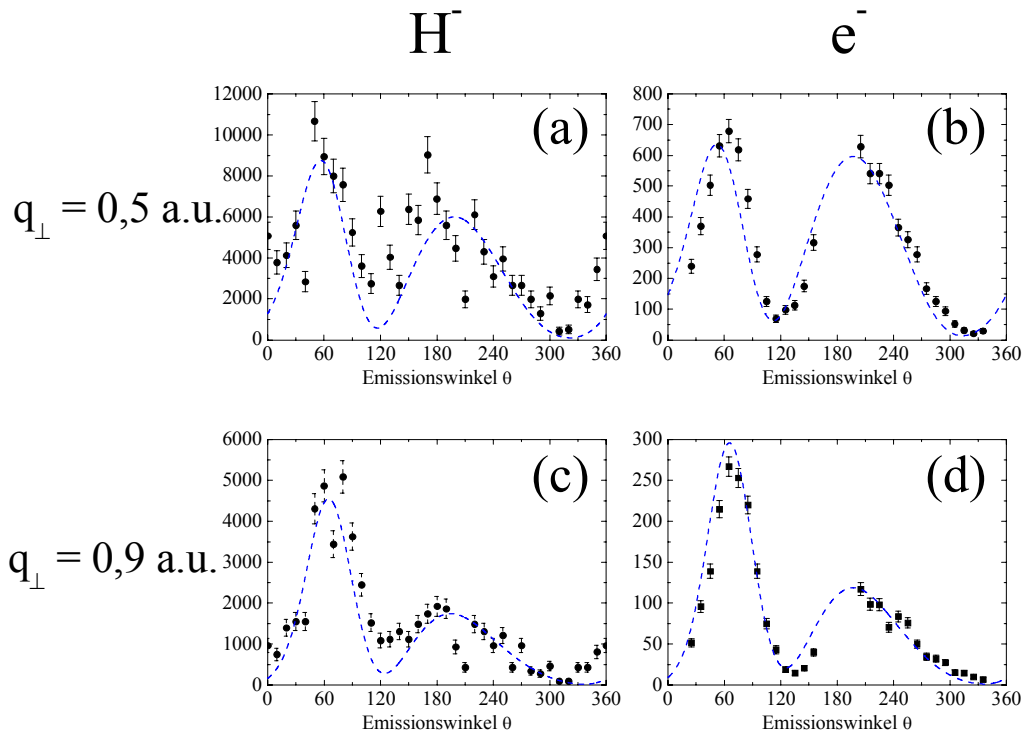
Kürzlich wurde zum ersten Mal der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt in allen drei Raumrichtungen für die Einfachionisation von Helium durch Elektronenstoß bei einer Projektilenergie von 102 eV gemessen [Dür06]. Die Projektilenergie dieses Experiments ist nahezu identisch mit der entsprechenden Energie (109 eV) des aktiven Elektrons des  $H^-$ -Projektils.

In Abbildung 4.21 ist der vollständig differentielle Wirkungsquerschnitt (FDCS) des



**Abbildung 4.21:** FDCS der Einfachionisation von Helium in einem  $(e,2e)$ -Stoß. Die Projektilenergie beträgt 102 eV, der Emissionsenergie ist 10 eV und der Streuwinkel des auslaufenden Projektils ist  $20^\circ$  [Dür06].

oben erwähnten Experiments für eine Emissionsenergie von 10 eV und einem Streuwinkel des auslaufenden Projektils von  $20^\circ$  abgebildet. Dieser Streuwinkel entspricht einem  $q_\perp = 0,9$  a.u.. Zusätzlich ist der FDCS in der Streu- und Senkrechten Ebene dargestellt. Der FDCS (obere Abbildung) ähnelt sehr dem Wirkungsquerschnitt  $\sigma^{(5)}$  der simultanen Ionisation aus Abbildung 4.16. In der Streuebene ist der FDCS nahezu identisch mit dem entsprechenden für die simultane Ionisation im  $H^-$ -He-Stoß (Abb. 4.18).

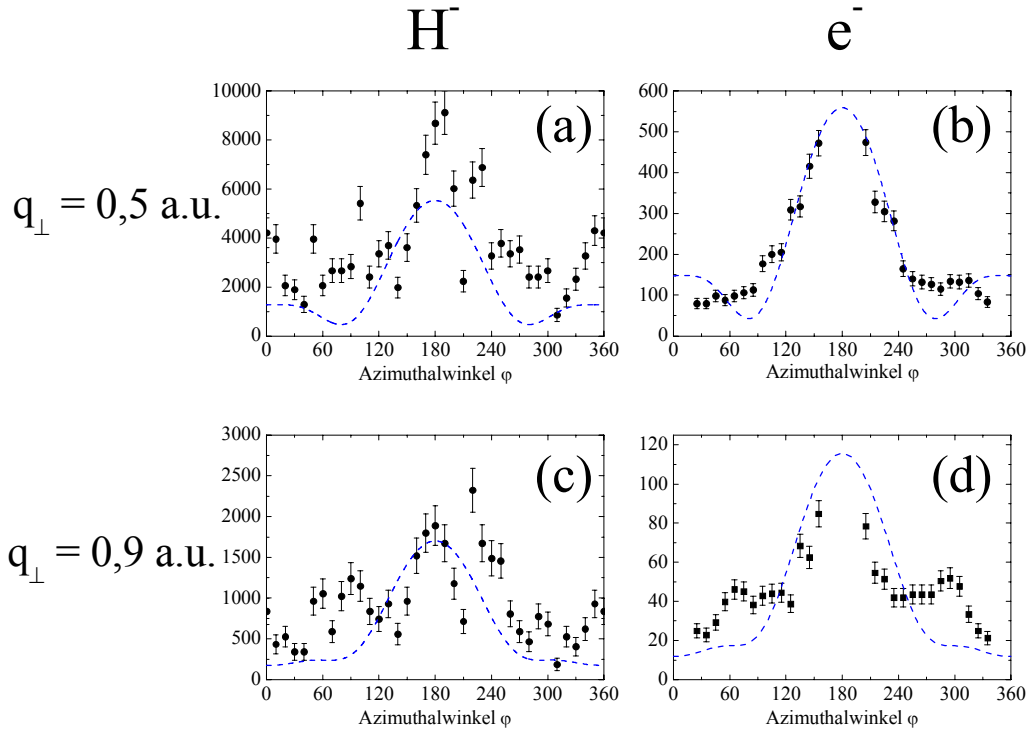


**Abbildung 4.22:**  $\sigma^{(5)}$  bzw. FDCS (in  $\text{k barn sr}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ ) in der Streuebene für  $q_\perp = 0,5$  a.u. und für  $q_\perp = 0,9$  a.u. bei einer Energie des emittierten Targetelektrons von 10 eV. Die linke Spalte sind Ergebnisse für das  $H^-$ -Projekttil, die rechte Spalte für einen Elektronenstoß [Dür06]. Die blaue gestrichelte Linie ist die entsprechende 3C-Rechnung.

Ein Vergleich des vollständig differentiellen Wirkungsquerschnittes für den Ionenstoß und den Elektronenstoß in der Streuebene (Abb. 4.22) und in der Senkrechten Ebene (Abb. 4.23) zeigt, dass bei allen Energien und Impulsüberträgen ein eindeutiger Zusammenhang zwischen diesen beiden Experimenten existiert. Besonders in der Streuebene bei  $q_\perp = 0,9$  a.u. stimmen die Ergebnisse beim Ionenstoß (Abb. 4.22 (c)) mit den Elektronenstoßdaten (Abb. 4.22 (d)) sehr gut überein. In der Senkrechten Ebene ist die Übereinstimmung für kleinere  $q_\perp$  besser.

Der Vergleich mit den experimentellen (e,2e)-Daten zeigt, dass die Ionisation des Targets alleine durch einen Stoß des quasi-freien  $H^-$ -Elektrons beschrieben werden kann.



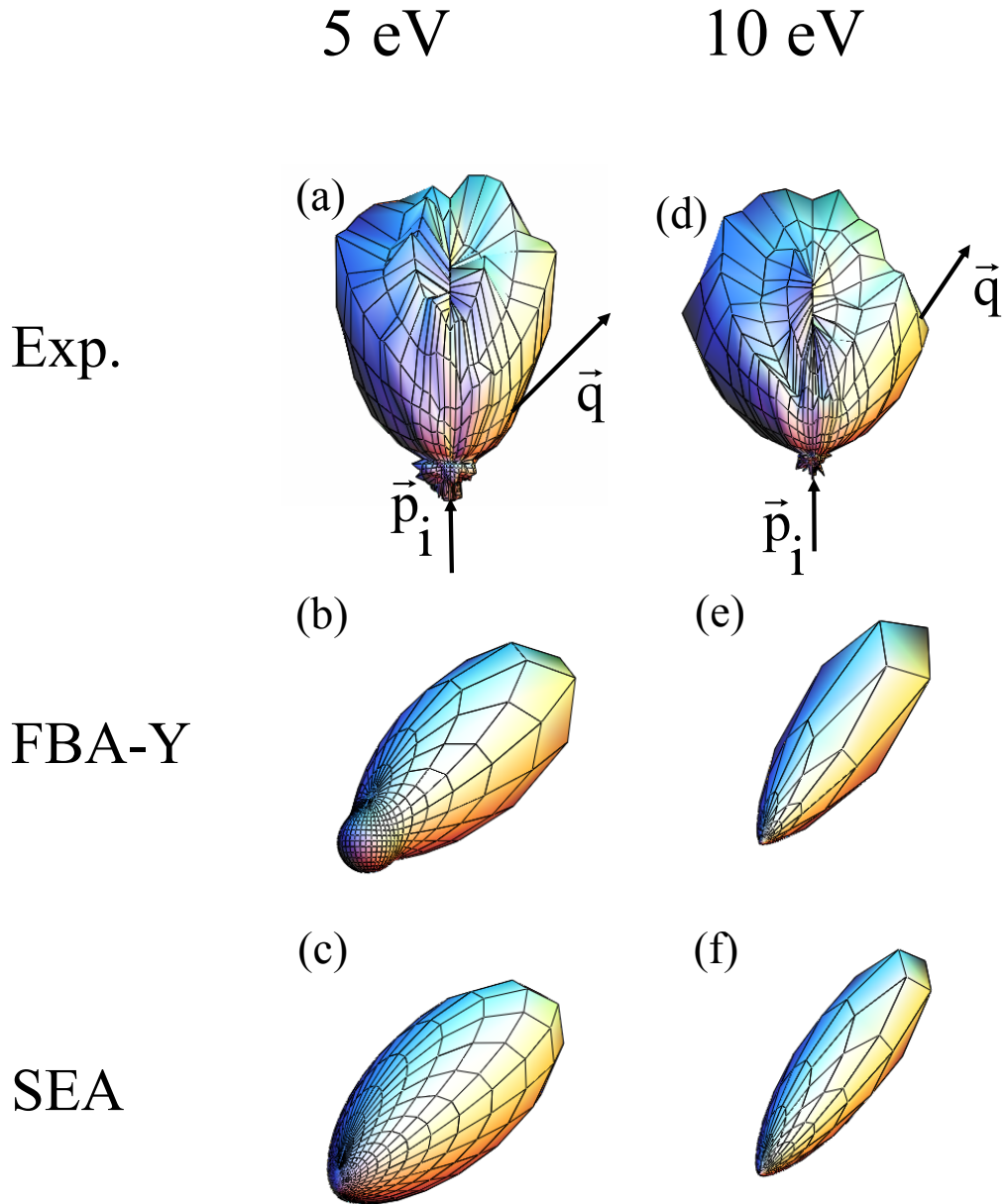


**Abbildung 4.23:**  $\sigma^{(5)}$  bzw. FDCS (in  $\text{kbarn sr}^{-2} \text{eV}^{-1}$ ) in der Senkrechten Ebene für  $q_{\perp} = 0,5 \text{ a.u.}$  und für  $q_{\perp} = 0,9 \text{ a.u.}$  bei einer Energie des emittierten Targetelektrons von  $10 \text{ eV}$ . Die linke Spalte sind Ergebnisse für das  $H^-$ -Projektil, die rechte Spalte für einen Elektronenstoß [Dür06]. Die blaue gestrichelte Linie ist die entsprechende 3C-Rechnung.

### 4.5.3 Ionisation von $H^-$ durch das He-Atom

In diesem Kapitel wird die Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch das He-Target untersucht. Falls der  $He^+$ -Rumpf des Targets bei diesem Stoß größtenteils als Zuschauer agiert, ist dieser Stoß identisch mit einer Ionisation des Projektils durch ein Elektron. Die Untersuchung der Mehr-Teilchen-Wechselwirkung in Kapitel 4.4 hat allerdings ergeben, dass dies für die Projektilionisation nur bedingt zutrifft, und dass signifikante Beiträge von einer Kern-Kern-Wechselwirkung auftreten. Eine genauere Untersuchung der Projektilionisation wird im Folgenden durchgeführt.

Eine Beschreibung der Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch das He-Target ist nur möglich, wenn gleichzeitig die Ionisation des Targets mitberücksichtigt wird. Da sowohl die Bindungsenergie des Projektils als auch des Targets in den longitudinalen Impulsübertrag  $q_{\parallel}$  (Gleichung (1.8)) eingehen, ändert sich  $q_{\parallel}$  sehr stark, wenn die Bindungsenergie des He-Targets entfällt. Genau dies geschieht, wenn das Target als punktförmiges Teilchen angenommen wird. Die gesamte Bindungsenergie ändert sich dann von etwa  $25,4 \text{ eV}$  auf  $0,7 \text{ eV}$ . Im Vergleich zu typischen Emissionsenergien von etwa  $10 \text{ eV}$  ist diese Änderung dramatisch. Im Falle der Ionisation des He-Targets



**Abbildung 4.24:**  $\sigma^{(5)}$  bei einem Impulsübertrag  $q_{\perp} = 0,9$  a.u. für eine Energie des emittierten Projektilelektrons von 5 eV und 10 eV im Projektilsystem. Die Abbildung (b) und (e) sind FBA-Y-Rechnungen, Abbildung (c) und (f) SEA-Rechnungen.

durch das  $H^-$ -Projektil im vorhergehenden Kapitel hingegen ändert sich  $q_{\parallel}$  nur unmerklich, wenn die Struktur des  $H^-$  vernachlässigt wird. Aus diesem Grund wird der fünffach-differentielle Wirkungsquerschnitt  $\sigma^{(5)}$  für die Ionisation des  $H^-$  nur mit Theorien verglichen, die die simultane Ionisation von Target und Projektil beschreiben.  $\sigma^{(5)}$  ist für die Ionisation des  $H^-$  analog zu Gleichung (4.4) definiert, wobei Energie und Raumwinkel des emittierten Elektrons im Projektilsystem betrachtet

werden.

In Abbildung 4.24 ist  $\sigma^{(5)}$  für eine Energie des emittierten Projektilelektrons im Ruhesystem des Projektils von 5 eV (linke Reihe) und 10 eV (rechte Reihe) bei  $q_{\perp} = 0,9$  a.u. abgebildet. Die experimentellen Daten (Abb. (a) und (d)) zeigen, dass das Elektron des  $H^{-}$  ausschließlich in Richtung des auslaufenden He-Atoms, also nach vorne, emittiert wird. Das Maximum in der Winkelverteilung ist also bezüglich  $q$  stark in Vorwärtsrichtung verschoben.

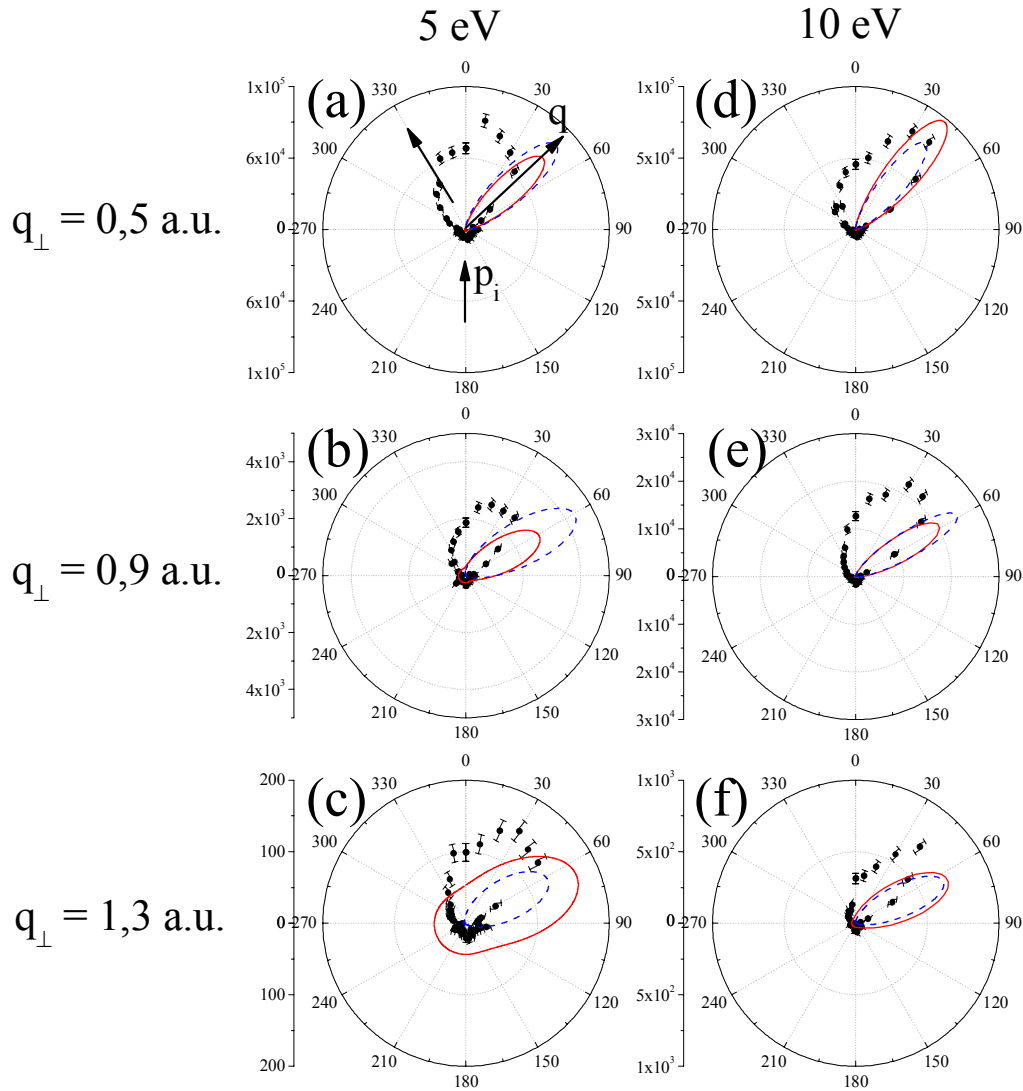
Ebenfalls sind in Abbildung 4.24 (b) und (e) die Ergebnisse der FBA-Y-Rechnung zu sehen. Bei einer niedrigeren Energie des emittierten Elektrons von 5 eV (Abb. (b)) ist die zigarrenförmige Verteilung etwas breiter als bei 10 eV (Abb. (e)). Lediglich für 5 eV ist ein minimaler Recoil-Peak erkennbar, ansonsten wird das Elektron nur in Richtung von  $q$  emittiert.

Die SEA-Rechnung (Abb. (c) und (f)) berücksichtigt wie die FBA-Y-Rechnung die Wechselwirkung zwischen Targetelektron und Projektilelektron. Zusätzlich wird noch die Wechselwirkung zwischen Targetkern und Projektilelektron vor und nach dem Stoß berücksichtigt (Kapitel 2.7). Qualitativ ist allerdings kein Unterschied zur FBA-Y-Rechnung erkennbar. Das Maximum zeigt ebenfalls bei beiden Energien in die Richtung von  $q$ . Die Verteilung ist ebenso bei geringerer Emissionsenergie (Abb. (c)) breiter als bei größerer (Abb. (f)).

Ein Blick auf die Streuebene (Abb. 4.25) zeigt für den experimentellen Wirkungsquerschnitt eine interessante Verteilung. Bei einer niedrigen Emissionsenergie wird das Elektron bei kleinem  $q_{\perp}$  (Abb. 4.25 (a)) ausschließlich in Vorwärtsrichtung emittiert. Bei mittlerem und großem  $q_{\perp}$  (Abb. 4.25 (b) und (c)) wandert das Maximum in Richtung des Impulsübertrages, ein signifikanter Anteil wird aber weiterhin in Richtung  $\theta = 0^{\circ}$  emittiert. Für eine Emissionsenergie von 10 eV wird das Elektron des  $H^{-}$  bei kleinem  $q_{\perp}$  (Abb. 4.25 (d)) überwiegend in Richtung von  $q$  emittiert. Allerdings tritt ebenfalls für  $\theta = 0^{\circ}$  eine Erhöhung in der Verteilung auf. Bei mittlerem und großem  $q_{\perp}$  (Abb. (e) und (f)) ist das Maximum vom Impulsübertrag weg in Vorwärtsrichtung verschoben.

Die FBA-Y (rote durchgehende Linie) und die SEA-Rechnung (blaue gestrichelte Linie) erzielen auch innerhalb der Streuebene qualitativ das gleiche Ergebnis. Die Form der Verteilung ist bei fast allen  $q_{\perp}$  und bei beiden Energien ähnlich. Lediglich bei 5 eV und  $q_{\perp} = 1,3$  eV wird die Breite der Verteilung von der FBA-Y-Rechnung überschätzt. Sowohl die Verteilungen der FBA-Y als auch der SEA-Rechnung sind symmetrisch zum Impulsübertrag  $q$ .

Das Maximum der experimentellen Verteilung ist im Vergleich zu diesen beiden Theorien wesentlich in Vorwärtsrichtung verschoben. Ein möglicher Grund für diese Diskrepanz ist, dass die Wechselwirkung des vom  $H^{-}$  emittierten Elektrons mit dem  $He^{+}$ -Kern des Targets unterschätzt wird. Dies führt zu einer verringerten anziehen-

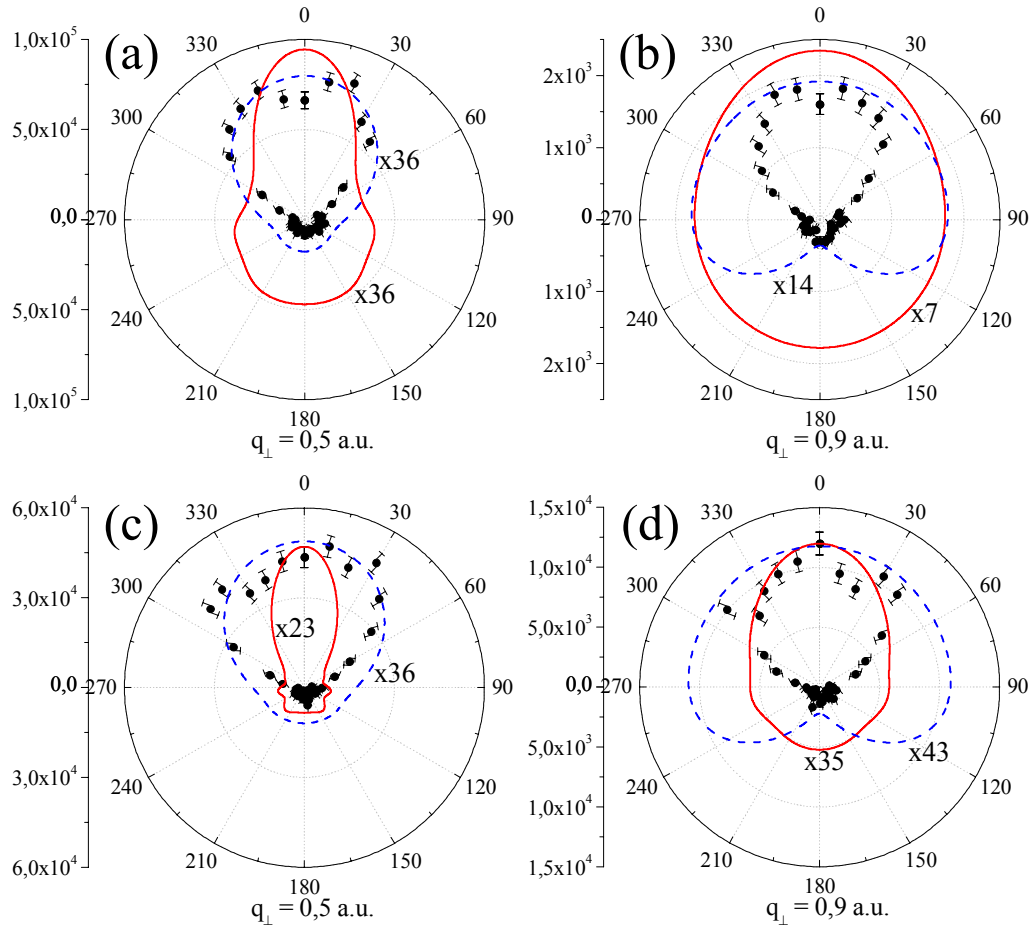


**Abbildung 4.25:**  $\sigma^{(5)}$  (in  $\text{kbar sr}^{-2} \text{eV}^{-1}$ ) des Targetelektrons in der Streuebene in Abhängigkeit vom Streuwinkel  $\theta$  bei einer Emissionsenergie des Projektilelektrons von 5 eV (obere Reihe) und 10 eV (untere Reihe) für verschiedene  $q_{\perp}$ . Die Daten (Punkte) wurden auf die Erste-Bornsche-Näherung (FBA-Y, rote durchgehende Linie) normiert. Die SEA-Rechnung ist die blaue gestrichelte Linie.

den PCI und damit auch zu einem größeren Emissionswinkel des Elektrons bezüglich der Vorwärtsrichtung.

Die Betrachtung der Senkrechten Ebene in Abbildung 4.26 zeigt noch deutlicher die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment. Sowohl die FBA-Y-Rechnung als auch die SEA-Rechnung unterschätzen den Wirkungsquerschnitt in der Senkrechten Ebene drastisch. Die theoretischen Verteilungen wurden zum besseren Überblick mit den in der Abbildung angegebenen Faktoren multipliziert. In der Senkrechten Ebene

#### 4.5. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte



**Abbildung 4.26:**  $\sigma^{(5)}$  (in barn  $\text{sr}^{-2} \text{eV}^{-1}$ ) des Targetelektrons in der Senkrechten Ebene in Abhängigkeit vom Azimutalwinkel  $\varphi$  bei einer Emissionsenergie des Projektilelektrons von 5 eV (obere Reihe) und 10 eV (untere Reihe) für verschiedene  $q_{\perp}$ . Beschreibung der Kurven wie in Abbildung 4.25. Die theoretischen Wirkungsquerschnitte wurden mit einem Faktor multipliziert, der neben der Verteilung angegeben ist.

wird der Unterschied zwischen der FBA-Y und der SEA-Rechnung deutlicher als in der Streuebene. Bei der FBA-Y-Rechnung wird das Projektil zu einem signifikanten Anteil entgegen der Richtung des He-Atoms emittiert. Die Verteilung der SEA-Rechnung gleicht der experimentellen Verteilung bei niedrigem  $q_{\perp}$  (Abb. 4.26 (a) und (c)). Bei mittlerem  $q_{\perp}$  (Abb. 4.26 (b) und (d)) ist die Form der Verteilung vollkommen verschieden vom Experiment.

Anscheinend sind die Eigenschaften dieses Vier-Körper-Systems der simultanen Ionisation von Projektil und Target zu komplex, um mit den hier verwendeten Theorien die Ionisation des Projektils zu beschreiben. Sowohl in der Streuebene besonders aber in der Senkrechten Ebene treten signifikante Unterschiede zum Experiment auf.



# Kapitel 5

## Das Wasserstofftarget

Wie bereits in Kapitel 1.3.3 und 1.4.1 kurz erwähnt, bestanden und bestehen noch immer enorme Schwierigkeiten bei der theoretischen Beschreibung der Ionisation eines Atoms durch Beschuss mit hochenergetischen Ionen. Selbst die besten zur Verfügung stehenden Theorien zeigen signifikante Abweichungen zu allen bisher durchgeführten kinematisch vollständigen Experimenten. Auch das einfachste untersuchte System, die Ionisation eines Elektrons in Stößen von sehr schnellen  $C^{6+}$ -Ionen mit Helium, stellt hier keine Ausnahme dar. Als ein möglicher Grund für das Versagen der Rechnungen wurde die Elektron-Elektron Korrelation im He-Grundzustand angeführt, die in den theoretischen Modellen nur näherungsweise oder gar nicht berücksichtigt wird. Insofern ist der Einfluss der elektronischen Korrelation auf die Dynamik der Einfachionisation im Ionenstoß weitgehend unverstanden. Damit ist allerdings nicht auszuschließen, dass neben der genannten Schwierigkeit ein generelles und damit grundlegendes Problem bei der theoretischen Behandlung der Ionenstoß-induzierten Ionisation besteht. Um dies zu testen sind Experimente zum einfachsten System, der Ionisation von H-Atomen in Stößen mit schnellen Protonen, unumgänglich. Nur für diesen Fall ist der elektronische Anfangszustand analytisch zugänglich und nur dann handelt es sich um ein rein quantenmechanisches Drei-Körper Coulomb-Problem. Der Vergleich mit theoretischen Vorhersagen wird klären, ob einzig die korrelierte Bewegung der Elektronen im Targetatom für die beobachtete Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie verantwortlich ist, oder ob tatsächlich grundlegende Fragen zur Ionisationsdynamik bestehen.

Mit dem Ziel solche Messungen durchzuführen wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Target für atomaren Wasserstoff aufgebaut und getestet. Aus experimentellen Gründen werden zwei wesentliche Forderungen an dieses Target gestellt. Zum einen muss die Geschwindigkeitsverteilung der erzeugten H-Atome möglichst schmal sein, d.h. die Atome sollen kalt sein, und zum anderen muss ein geometrisch enger und wohl begrenzter Strahl mit ausreichend hoher Dichte geformt werden. Im Folgenden

wird dargestellt wie dies erreicht wurde und wie atomarer Wasserstoff generiert wurde.

## 5.1 Erzeugung eines kalten atomaren Wasserstoff-targets

### 5.1.1 Atomstrahlquellen für atomaren Wasserstoff

Die Herstellung eines wohldefinierten und kalten Gastargets aus atomarem Wasserstoff ist im Vergleich zu einem Edelgastarget schwierig, da Wasserstoff nicht in seiner atomaren Form vorliegt, sondern erst durch Dissoziation von Wasserstoffmolekülen erzeugt werden muss. Dies kann durch verschiedene Dissoziatoren geschehen, von denen eine Auswahl im Folgenden beschrieben wird.

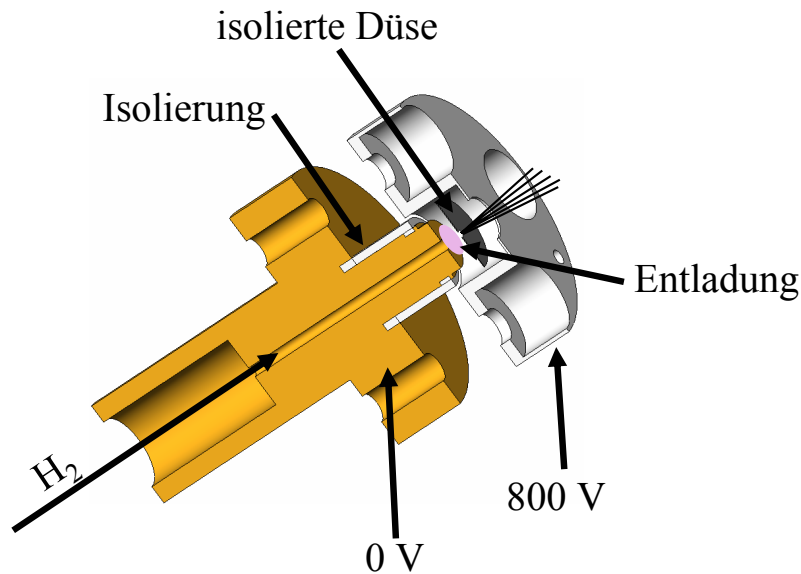
#### Thermischer Dissoziator

Die meist verwendete Methode zur Erzeugung von atomarem Wasserstoff beruht auf einer thermischen Dissoziation der Moleküle. Dabei wird beispielsweise das  $H_2$  durch eine heiße Wolframkapillare geleitet. Die Temperatur dieser Kapillare wird durch Elektronenbombardement (z.B. [BB93, TB98]) auf 1800 - 2000 K gebracht. Durch Stöße mit der heißen Oberfläche gewinnen die Gasmoleküle so viel innere Energie, dass sie dissoziieren können. Diese Quellen arbeiten sehr zuverlässig mit einer hohen Langzeitstabilität, der Nachteil dieser Methode ist allerdings, dass die Temperatur des Gases nach der Dissoziation sehr hoch ist und nur schwer ein kaltes atomares Target erzeugt werden kann.

#### Hochfrequenz-Gasentladungen

Bei Hochfrequenz-Gasentladungsquellen werden die Gasmoleküle durch Elektronenstoß dissoziiert. Entlang einer Glaskapillare wird mit Hilfe eines Hochfrequenzfeldes (Radio- [SS81] oder Mikrowellenfrequenz [MGD 93b]) ein elektrisches Wechselfeld erzeugt. In diesem Feld werden freie Elektronen hin- und her getrieben und stoßen dabei mit Gasmolekülen. Die Moleküle dissoziieren direkt oder werden ionisiert und bilden mit den Elektronen ein Plasma mit dem dann weitere Gasmoleküle wechselwirken. Der Vorteil dieser Quelle ist, dass das Gas durch die Elektronenstöße nur wenig aufgeheizt wird und deswegen eine niedrigere Temperatur besitzt. Da diese Methode in dieser Arbeit zur Erzeugung von atomarem Wasserstoff verwendet wurde, wird in Kapitel 5.2.1 detailliert auf die Eigenschaften dieser Dissoziatoren eingegangen.





**Abbildung 5.1:** Explosionsansicht der Gleichstrom-Glimmentladung. Der Durchmesser der Düsenöffnung (30 - 100  $\mu\text{m}$ ) ist nicht maßstabsgetreu eingezeichnet.

### Gleichstrom-Glimmentladung

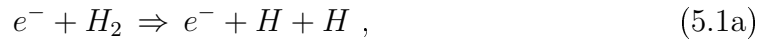
Eine Gleichstrom-Glimmentladung wird im Allgemeinen zur Produktion von angeregten Edelgasen verwendet [DDE 04, Jah02]. Er eignet sich möglicherweise aber auch zur Produktion von atomarem Wasserstoff [Lan02, Dür03], eine ausreichende Effizienz konnte bislang jedoch noch nicht erreicht werden. In Abbildung 5.1 ist ein Aufbau zum Betrieb einer solchen Glimmentladung skizziert, wie er im Rahmen dieser Arbeit realisiert und erprobt wurde. Im Unterschied zu den beiden vorher vorgestellten Methoden expandiert das Gas bei dieser Methode von einem Reservoir mit einem Druck von mehreren bar durch eine Düse in einen Bereich mit niedrigem Druck, ähnlich wie in einem konventionellen Gasjet. Dabei wird das Gas durch eine Überschallexpansion bis auf 10 K abgekühlt. Eine Seite der Düse ist mit einer isolierenden Schicht bedampft, die etwa die Dicke der freien Weglänge der Moleküle hat. Entlang der Düse liegt ein elektrisches Potential von etwa 800 V an, so dass in der Düse durch Entladung ein Plasma erzeugt wird, in dem die Gasmoleküle dissoziieren. Die Dicke der isolierenden Schicht ist so gewählt, dass die Moleküle nach der Dissoziation keine Zeit mehr zur Rekombination haben, sondern als freie Atome expandieren. Durch die Expansion wird die Gasdichte verringert, so dass Rekombination durch Dreikörperstöße im Gas sehr unwahrscheinlich ist (siehe Kapitel 5.1.3). Ein Vorteil dieser Quelle ist ihre kompakte Größe von nur wenigen cm (etwa 5 cm Länge bei einem Durchmesser von 3 cm). Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass durch den hohen Gasdruck eine hohe Targetdichte erreicht werden kann und das

Gas durch eine Überschallexpansion gekühlt wird. Ein dauerhafter Betrieb ist allerdings nicht möglich, da durch Sputtereffekte die Elektroden und die Isolierung nach einigen Stunden zerstört werden und das elektrische Feld zusammenbricht.

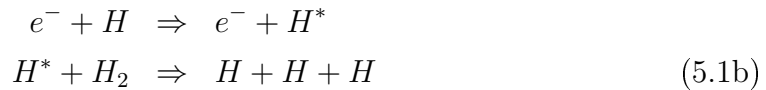
### 5.1.2 Dissoziationsmechanismen von $H_2$

In dieser Arbeit wurde zur Dissoziation der Wasserstoffmoleküle eine Hochfrequenz-Gasentladung verwendet. Dabei werden die Moleküle in einem Plasma im Wesentlichen über zwei verschiedene Wege dissoziiert.

Der einfachste Prozess zur Dissoziation von Wasserstoffmolekülen sind Stöße mit Elektronen:



bei denen die notwendige Energie zum Überwinden der Dissoziationsenergie des  $H_2$  übertragen wird. Beim zweiten Prozess



stößt ein freies Elektron mit einem bereits vorhandenen Wasserstoffatom und regt dieses in einen höheren elektronischen Zustand an. Das angeregte Atom kann diese Energie in einem Stoß auf ein  $H_2$ -Molekül übertragen, welches dadurch dissoziiert. Die Produktionsrate  $R_{p1}$  von atomarem Wasserstoff pro Volumenelement und Sekunde für Prozess (5.1a) ist

$$R_{p1}[cm^{-3}s^{-1}] = 2n_e R_D n_m . \quad (5.2)$$

$n_e$  ist die Elektronendichte (in  $cm^{-3}$ ),  $n_m$  die Dichte der Moleküle im Plasma und  $R_D$  die stoßinduzierte Dissoziationsrate (in  $cm^3s^{-1}$ , [GMD 93]). Der Faktor 2 in Gleichung (5.2) berücksichtigt, dass bei jeder Dissoziation zwei Atome entstehen. Mit Hilfe der idealen Gasgleichung ( $p = n k_B T$ ) ergibt sich für die Atom- bzw. Moleküldichte im Plasma bei Raumtemperatur und konstantem Massenfluß

$$n_a = 4,4 \cdot 10^{16} \sqrt{2} D p \quad (5.3a)$$

$$n_m = 4,4 \cdot 10^{16} (1 - D) p. \quad (5.3b)$$

$D$  ist der Anteil der H-Atome im Gas und  $p$  der Druck des Gases im Dissoziator in mbar. Der Faktor  $\sqrt{2}$  in Gleichung (5.3a) stammt daher, dass die Geschwindigkeit der Atome um diesen Faktor größer ist als die Geschwindigkeit der Moleküle.

Damit lässt sich Gleichung (5.2) auch schreiben als:

$$R_{p1}[cm^{-3}s^{-1}] = 2n_e R_D n_m = 8,8 \cdot 10^{16} n_e R_D (1 - D) p. \quad (5.4)$$

Für Prozess (5.1b) besteht für die Produktionsrate  $R_{p2}$  folgende Abhängigkeit:

$$R_{p2} [cm^{-3}s^{-1}] \propto \frac{2n_e n_a n_m R_{ie} R^*}{\tau^{-1} + n_m R^*}, \quad (5.5)$$

wobei  $R_{ie}$  (in  $cm^3s^{-1}$ ) die Rate zur Erzeugung von  $H^*$ ,  $R^*$  die Rate für die Transferreaktion  $H^* + H_2 \Rightarrow H + H + H$  und  $\tau$  die Lebenszeit des angeregten Zustandes ist. Bei typischen Arbeitsbedingungen von etwa 0,4 mbar sind die Ratenkonstanten  $R_{p1}$  und  $R_{ie}$  identisch [GMD 93]. Da bei Prozess (5.1b) noch die Rate  $R^*$  berücksichtigt werden muss ist der Prozess (5.1a) also der dominante Mechanismus zur Dissoziation von  $H_2$  im betrachteten Druckbereich.

### 5.1.3 Rekombinationsmechanismen von H

Ein Problem bei der Herstellung eines atomaren Wasserstofftargets besteht darin, dass die Wasserstoffatome leicht rekombinieren wenn sie miteinander (Volumenrekombination) oder mit einer Wand (Wandrekombination) stoßen. Bei niedrigen Gasdrücken ( $p \sim 0,1 - 1$  mbar) wird die Verlustrate des atomaren Wasserstoffs durch die Wandrekombination dominiert. Die Wandrekombinationsrate  $R_W$  (pro Zeit und Wandfläche) von Wasserstoffatomen bei Raumtemperatur steigt linear mit dem Gasvordruck  $p$ , und ergibt sich aus

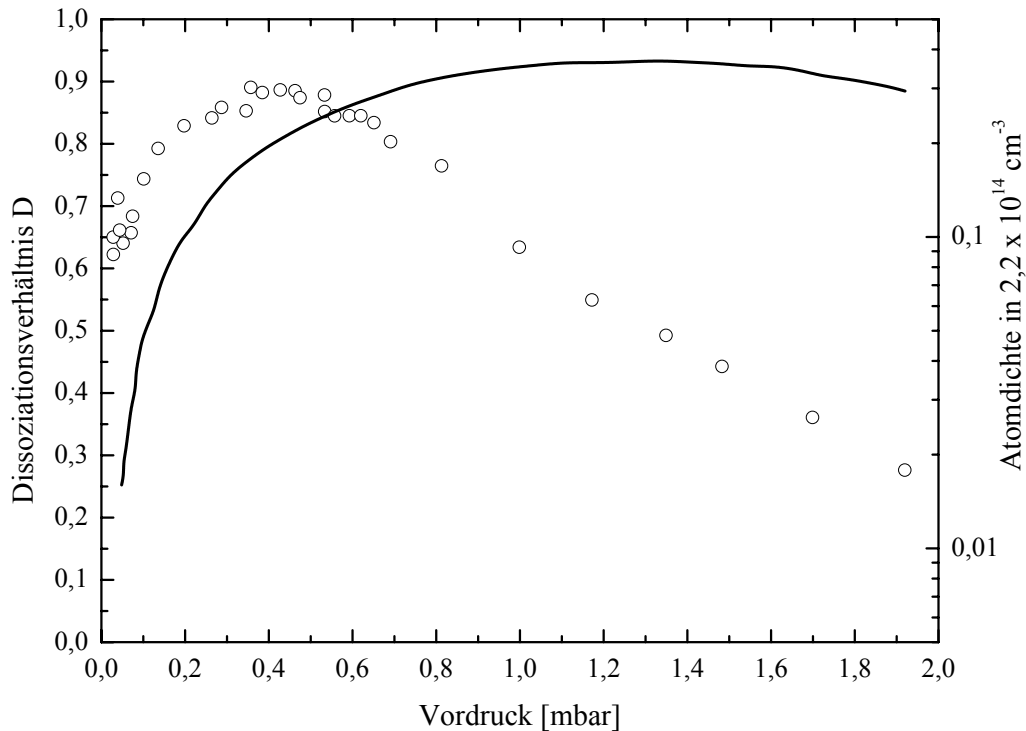
$$R_W [cm^{-2} s^{-1}] = \frac{1}{4} n_a v \gamma \cong 3,9 \cdot 10^{21} \gamma D p, \quad (5.6)$$

wobei  $n_a$  die Atomdichte,  $v = \sqrt{2k_B T/m}$  die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Atome bei einer Maxwell-Verteilung (siehe z.B. [Dem94]),  $m$  die Masse des Wasserstoffatoms und  $\gamma$  die Rekombinationswahrscheinlichkeit pro Wandkollision ist. Die Volumenrekombination  $R_V$  (pro Zeit und Volumen) steigt hingegen mit  $p^3$  an

$$R_V [cm^{-3} s^{-1}] = 1.92 \cdot 10^{50} k_m (D^2 + 1.83 D^3) p^3, \quad (5.7)$$

mit  $k_m = 8.3 \cdot 10^{-33} cm^6 s^{-1}$  [GMD 93]. Bei höheren Drücken ( $p > 1$  mbar) wird die Rekombinationsrate durch die vermehrten Dreikörperstöße dominiert. Beide Rekombinationsmechanismen sind entscheidend bei der Konstruktion eines atomaren Wasserstofftargets, wobei der Verlust von Wasserstoffatomen durch Dreikörperstöße nur durch einen niedrigen Gasvordruck beschränkt werden kann.

Die Angaben für den Rekombinationskoeffizient  $\gamma$  von Glas bei Zimmertemperatur liegen zwischen  $9 \cdot 10^{-4}$  [GMD 93] und  $6 \cdot 10^{-3}$  [WW67], außerdem erhöht sich die Rekombinationswahrscheinlichkeit bei nicht gereinigten Oberflächen. Aus den Gleichungen (5.6) und (5.7) geht hervor, dass bei  $\gamma = 9 \cdot 10^{-4}$  und einem Dissoziationsgrad  $D = 1$  ab einem Druck von 1,3 mbar die Volumenrekombination dominiert.



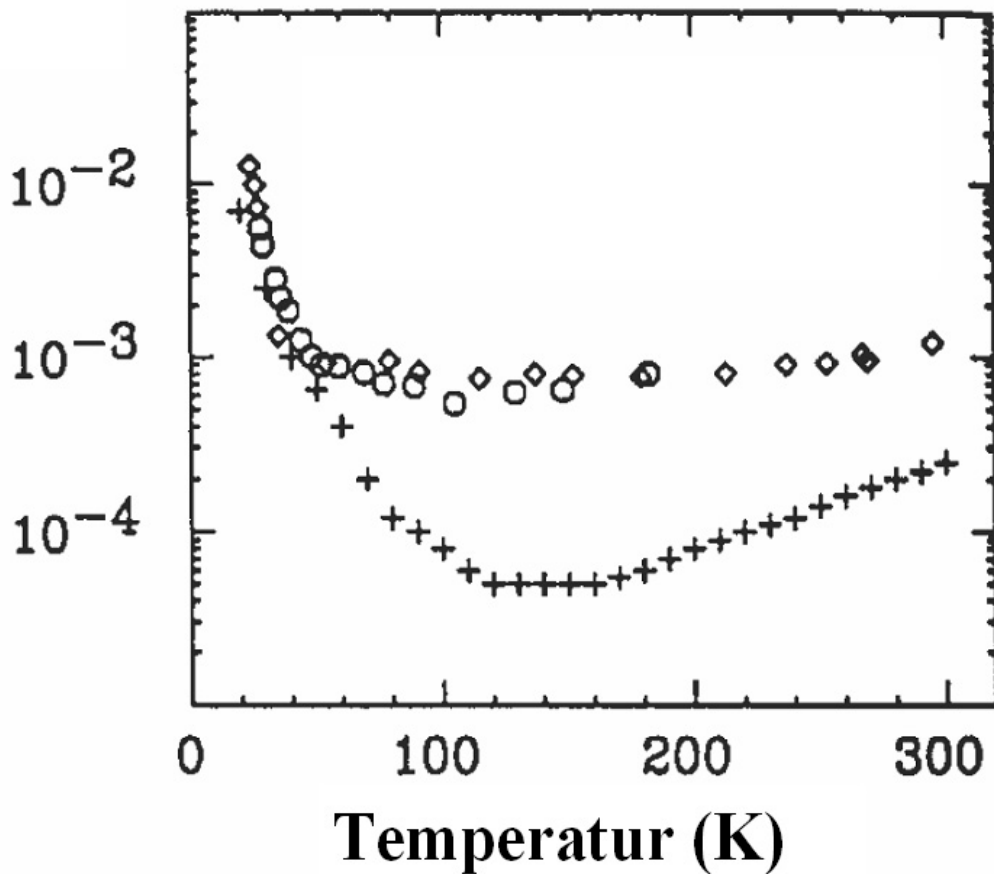
**Abbildung 5.2:** Abhängigkeit des Dissoziationsverhältnisses vom Wasserstoffdruck im Dissoziator bei einem Düsendurchmesser von 1 mm [MGD 93a] (offene Kreise mit linker Achse). Das Dissoziationsverhältnis ist definiert als  $D = (S_1 - S_2)/S_1$ , wobei  $S_1$  das molekulare Signal vor der Dissoziation und  $S_2$  das molekulare Signal nach der Dissoziation ist. Die durchgehende Linie mit der rechten Achse gibt die erwartete Atomdichte am Düsenausgang an.

Im Vergleich dazu dominiert bei  $\gamma = 6 \cdot 10^{-3}$  die Volumenrekombination erst ab 3,4 mbar. Für diese Rechnung wurde ein Volumen des Dissoziators von  $40 \text{ cm}^3$  und eine Oberfläche von  $80 \text{ cm}^2$  angenommen.

In [MGD 93a] wurde die Abhängigkeit des Dissoziationsverhältnisses vom Vordruck des in den Dissoziator einströmenden Wasserstoffgases untersucht. Der dort eingesetzte Dissoziator ist identisch mit dem in dieser Arbeit verwendeten. Das Dissoziationsverhältnis wurde direkt nach dem Dissoziator mit Hilfe eines Massenspektrometers bestimmt, der Verlust durch Wandrekombination ist aufgrund des kurzen Weges vom Dissoziationsort zur Düse vernachlässigbar. In Abbildung 5.2 ist die Dissoziationsrate  $D$  in Abhängigkeit vom Vordruck  $p$  aufgetragen. Mit steigendem Vordruck steigt auch das Dissoziationsverhältnis, bis bei etwa 0,4 mbar ein Maximum erreicht wird, bei diesem Vordruck werden etwa 90% aller Moleküle dissoziiert. Wird der Dissoziator mit einem höheren Vordruck betrieben, fällt das Dissoziationsverhältnis wieder. Demnach ist die erreichbare Targetdichte limitiert durch den gewünschten Dissoziationsgrad.

### 5.1.4 Temperaturabhängigkeit der Wandrekombination

In unserem Fall kann der Dissoziator nicht nahe genug an die Düse gebracht werden, so dass er außerhalb der Expansionskammer befestigt werden muss. Der dissoziierte Wasserstoff muss also mit einer möglichst geringen Rekombination zur Düse transportiert werden. Für eine möglichst gute Impulsauflösung ist eine geringe Targettemperatur notwendig, die nur über eine Kühlung des Gases erreichbar ist (Kapitel 5.1.5). Es ist deshalb darauf zu achten, dass der Rekombinationskoeffizient bei der vorgegebenen Temperatur möglichst klein ist.



**Abbildung 5.3:** Rekombinationskoeffizient  $\gamma$  für Teflon und Aluminium in Abhängigkeit von der Temperatur [SH03]. Die obere Messreihe gibt die Temperaturabhängigkeit von Aluminium wieder bei durchschnittlich 95 ( $\diamond$ ), bzw. 350 ( $\circ$ ) Stößen mit der Wand. Die Werte für Teflon sind mit + bezeichnet.

Als bestes Material für die Leitung des atomaren Wasserstoffs vom Dissoziator zur Düse hat sich PTFE (Polytetrafluorethylen) erwiesen. Es ist unter dem Handelsnamen Teflon als Feststoff oder Flüssigkeit käuflich zu erwerben und kommt bei den unterschiedlichsten Experimenten zum Einsatz (siehe z.B. [PK98, SH03]). In

Abbildung 5.3 ist der Rekombinationskoeffizient von Teflon ( $\gamma_{\text{PTFE}}$ ) und Aluminium ( $\gamma_{\text{Alu}}$ ) als Funktion der Temperatur dargestellt. Bei einer Temperatur von etwa 140K ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Wasserstoffatom mit einem an der Wand adsorbierten Wasserstoffatom rekombiniert mit  $5 \cdot 10^{-5}$  am geringsten. Auffällig ist auch, dass der Anstieg der Rekombinationswahrscheinlichkeit zu höheren Temperaturen weniger steil ansteigt, als in Richtung niedrigerer Temperaturen. So ist  $\gamma_{\text{PTFE}}$  bei 300 K etwa  $2,8 \cdot 10^{-4}$  und bei 20 K mit  $1,5 \cdot 10^{-2}$  wesentlich höher.

Der Aspekt der steigenden Rekombinationswahrscheinlichkeit bei tiefen Temperaturen muss bei einer Kühlung des Wasserstoffgases beachtet werden, da ansonsten der Gewinn an Atomteilchendichte (Kapitel 3.2.2) aufgrund der niedrigeren Temperatur durch eine erhöhte Rekombination an den Wänden wieder kompensiert wird. Über den gesamten Temperaturbereich ist der Rekombinationskoeffizient von Aluminium größer als der von Teflon. Im Bereich von 40 K bis 300 K ist  $\gamma_{\text{Alu}}$  nahezu konstant mit ungefähr  $10^{-3}$ , bei kleineren Temperaturen verhält er sich ähnlich wie Teflon. Für sehr niedrige Temperaturen kann Aluminium daher zur Kühlung der Wasserstoffatome eine interessante Alternative sein, zumal die thermische Leitfähigkeit von Aluminium ( $3 \text{ Watt cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ) wesentlich höher ist als die von Teflon ( $10^{-3} \text{ Watt cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ).

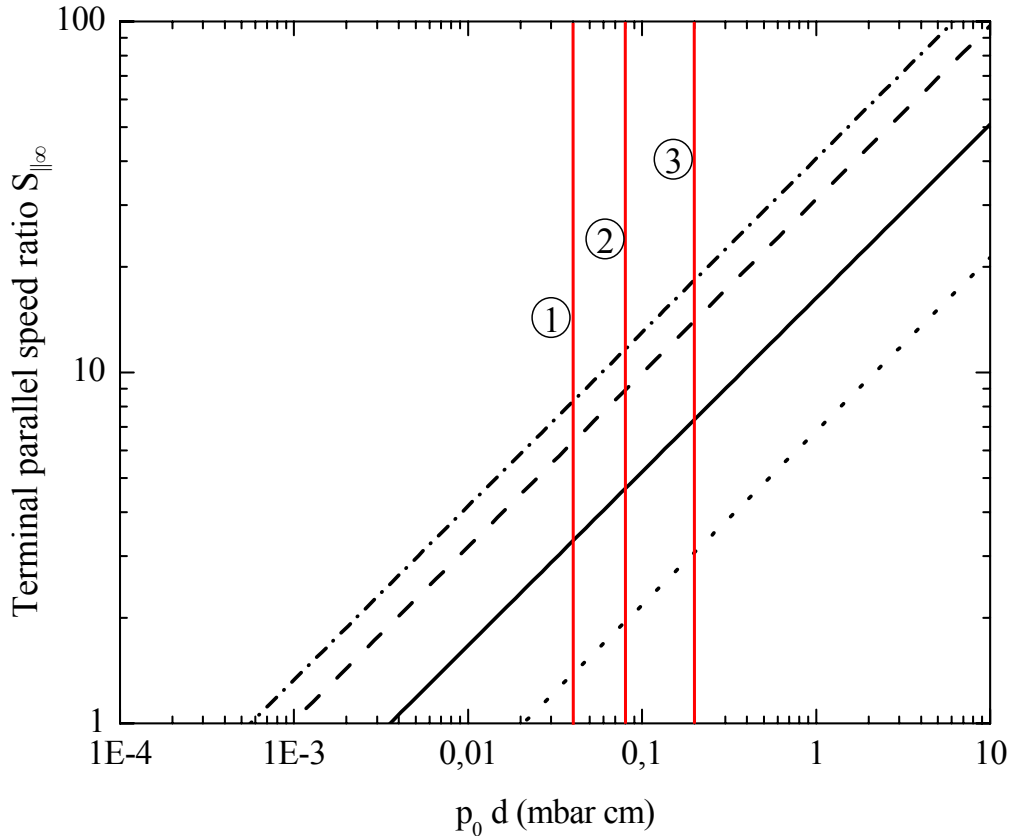
### 5.1.5 Überschallexpansion mit atomarem Wasserstoff

Neben dem in Kapitel 5.1.3 besprochenen Dissoziationsverhältnis ist sowohl die Dichte des Targets als auch die Targettemperatur und damit verbunden die mögliche Impulsauflösung von großer Bedeutung. Bei einer zu geringen Targetdichte ist im Experiment das Verhältnis zwischen Signal und Untergrund zu schlecht. Da die Targettemperatur direkt in das Auflösungsvermögen des Recoilions  $\Delta p_r$  eingeht (Kapitel 3.4.2), muss die Temperatur möglichst klein sein.

$\Delta p_r$  ist über Gleichung (3.7) mit der Anfangstemperatur des Gases und dem Speedratio  $S_{||\infty}$  verknüpft. In Abbildung 5.4 ist  $S_{||\infty}$  als Funktion des Produktes von Gasvordruck  $p_0$  und Düsendurchmesser  $d$  für verschiedene Gastemperaturen  $T$  aufgetragen (mit  $A = 0,783$ ,  $B = 0,495$  und  $C_6/k_B = 0,7 \cdot 10^{-43} \text{ K cm}^{-6}$ , siehe Gleichung (3.6)). Anhand dieser Abbildung wird das erreichbare Auflösungsvermögen bei verschiedenen Kombinationen von  $p_0$ ,  $d$  und  $T$  diskutiert.

Für eine Düsenöffnung von  $30 \mu\text{m}$ , wie sie bei dem Heliumjet in dieser Arbeit verwendet wurde, und dem für die Dissoziation oben ermittelten optimalen Vordruck  $p_0$  von 0,4 mbar ist das Speedratio so gering, dass keine Kühlung des Gases mehr stattfindet. Außerdem ist die mittlere freie Weglänge der Wasserstoffatome mit etwa  $440 \mu\text{m}$  größer als die Düsenöffnung, so dass das entscheidende Kriterium für eine adiabatische Expansion nicht gegeben ist. Die Gasatome stoßen nicht mehr un-

tereinander sondern im Wesentlichen mit der Wand und haben dadurch nicht die Möglichkeit ihre Geschwindigkeit anzugleichen.



**Abbildung 5.4:** Terminal parallel speedratio  $S_{\parallel\infty}$  als Funktion des Produktes von Gasvordruck und Düsenöffnung. Die strichpunktierte Linie steht für eine Temperatur von 20 K, gestrichelt für 30 K, durchgehend für 80 K und die punktierte Linie für 300 K. Die senkrechten Linien markieren verschiedene im Text diskutierte Kombinationen von Düsendurchmesser und Vordruck.

Da im Vergleich zu einem konventionellen Jet die Gaslast bei diesem niedrigen Vordruck wesentlich geringer ist, kann die Düsenöffnung vergrößert werden. Eine Düsenöffnung von 1 mm bis 2 mm ist möglich, ohne das Vakuum in der Expansionskammer soweit zu verschlechtern, dass die *Zone-of-Silence* zerstört wird (siehe Kapitel 3.2.2). Mit einer Düsenöffnung von 2 mm und einem Vordruck von 0,4 mbar bei 300 K ist  $S_{\parallel\infty} = 2$  und die Impulsbreite  $\Delta p \approx 2.1 \text{ a.u.}$ . Diese Auflösung ist für die geplanten Experimente, die ein  $\Delta p \ll 1 \text{ a.u.}$  erfordern, immer noch zu schlecht. Die einzig verbleibende Möglichkeit zur Verbesserung der Auflösung ist ein Vorkühlen des Gases. In Abbildung 5.4 wird der Effekt des Kühlens deutlich. Mit einem einstufigen Kühlkopf oder Stickstoffkühlung können 80 K (durchgehende Linie) erreicht werden. Mit dem vorhandenen zweistufigen Kühlkopf sind 30 K (gestrichelte Linie) erreichbar und bis etwa 20 K (strichpunktiert) kann der Dissoziator betrieben werden, ohne

dass es zu einem Einfrieren der Düse kommt.

Die senkrechte Linie ② markiert den oben besprochenen Fall für  $d = 2 \text{ mm}$  und  $p_0 = 0,4 \text{ mbar}$ . Kann das Experiment auch bei einem niedrigeren Dissoziationsgrad durchgeführt werden ist ein  $p_0$  von  $1 \text{ mbar}$  und damit ein  $p_0 d = 0,04 \text{ mbar cm}$  möglich (Linie ③). Falls die Gaslast verringert werden und eine kleinere Düsenöffnung verwendet werden muss, würde  $p_0 d = 0,2 \text{ mbar cm}$  zutreffen (Linie ①). Ein experimentell realisierbares oberes Maximum ist Fall ③ bei einer Gastemperatur von  $30 \text{ K}$ . Erreichbar ist damit ein  $S_{||\infty}$  von  $14$ , d.h. eine Impulsbreite von  $\Delta p \approx 0,09 \text{ a.u.}$ . Der Dissoziationsgrad beträgt in diesem Fall allerdings nur  $60\%$ .

Aus früheren Experimenten mit einer Düsenöffnung von  $2 \text{ mm}$  ist bekannt, dass in einem Abstand von etwa  $5 \text{ cm}$  von der Düse eine Atomdichte von  $10^{10} \text{ Atomen/cm}^3$  bis  $10^{11} \text{ Atomen/cm}^3$ , je nach Vordruck und Dissoziationsgrad, möglich ist [MI05]. Dies stimmt sehr gut überein mit einer Abschätzung der Dichte nach Gleichung (3.16).

## 5.2 Experimentelle Umsetzung und Test des Wasserstofftargets

### 5.2.1 Hochfrequenz-Dissoziator

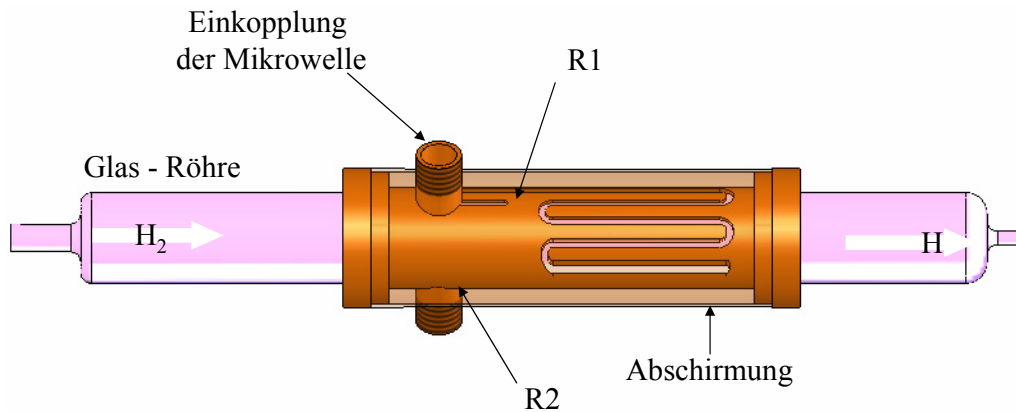


Abbildung 5.5: Schematische Darstellung des Mikrowellendissoziators.

Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Dissoziator handelt es sich um eine Weiterentwicklung des von Lisitano [LRAEH 68] beschriebenen  $\lambda/4$ -Mikrowellendissoziators (auch *slotted line dissoziator* genannt) von McCullough [MGD 93a, MGD 93b]. Er besteht aus zwei Radiatoren R1 und R2 (siehe Abb. 5.5), die um ein Pyrexglasrohr montiert sind. Die Radiatoren bestehen aus je einem Kupferhalbzylinder mit einer Wandstärke von  $1,5 \text{ mm}$ . In diese Radiatoren ist eine mäandrische Resonatornut mit einer Breite von  $2 \text{ mm}$  gefräst. Die Länge  $l$  dieser Nut ist so gewählt,



## 5.2. Experimentelle Umsetzung und Test des Wasserstofftargets

dass  $l = (2n + 1)\lambda/4$  gilt, wobei  $\lambda$  die Wellenlänge der Mikrowelle ist und  $n \in \mathbb{N}$ . Im Resonator wird dadurch eine stehende Welle gebildet, die bei  $(2n + 1)\lambda/4$  einen Knoten und bei  $2n\lambda/4$  ein Maximum hat.

Über zwei Koaxialanschlüsse wird Mikrowellenstrahlung mit einer Leistung von etwa 150 Watt bei einer Frequenz von 2,45 GHz ( $\lambda=12$  cm) mit gleicher Phasenlage auf die Radiatoren geführt. Damit ist die Breite der Schlitze kleiner als die Wellenlänge  $\lambda$  der eingespeisten Strahlung, wodurch ein hohes elektrisches Feld gewährleistet wird. Da sich das Ende des Schlitzes in einem Abstand von  $\lambda/4$  vom angrenzenden Mittelpunkt befindet, entsteht am Einkopplungspunkt der Mikrowelle (siehe Abb. 5.5) ein Maximum des elektrischen Feldes. Dies führt zu einer höheren Güte des Resonators, da die Einkopplung der Mikrowellenstrahlung effektiver ist. Bei laufendem Plasma wird typischerweise 15% - 20% der eingekoppelten Leistung reflektiert.

Zum Starten der Entladung werden freie Elektronen mit Hilfe eines Hochspannungspulses durch eine Teslaspule erzeugt. Durch das sich schnell ändernde elektrische Feld werden die freien Elektronen zu Oszillationen entlang des Feldes gezwungen, was zu Stößen mit Wasserstoffmolekülen und deren Dissoziation führt.

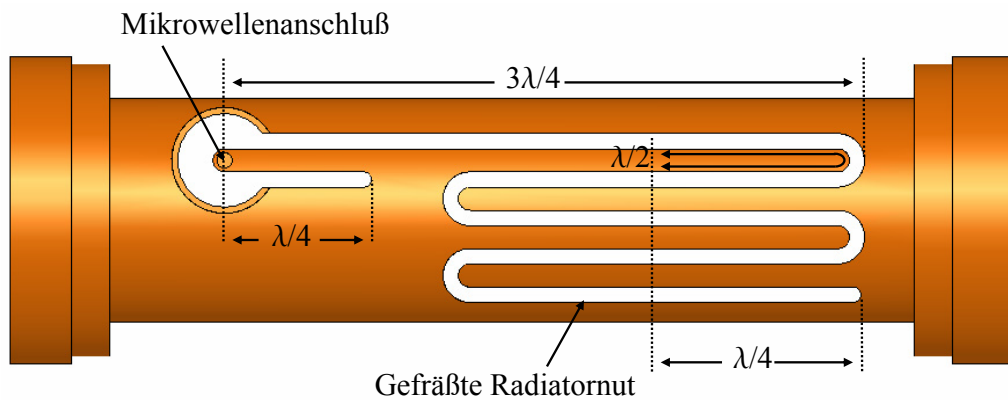
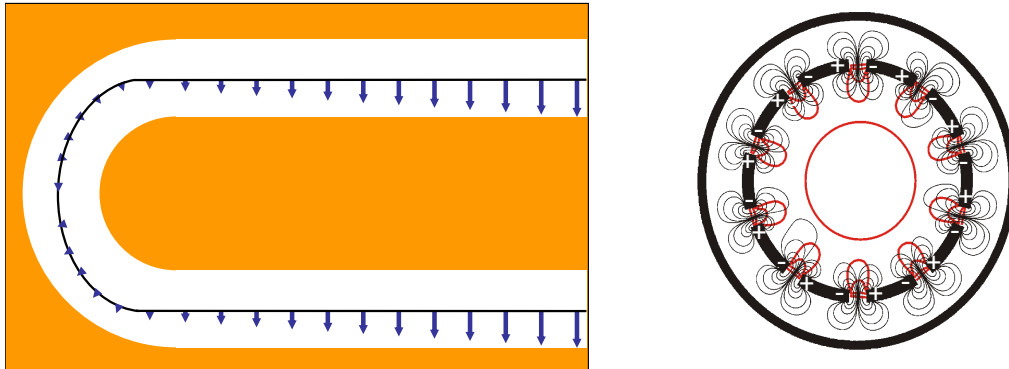


Abbildung 5.6: Radiatorfräsung

Die Länge und Anordnung der Schlitze ist so gewählt, dass zwei Punkte die um  $\lambda/2$  auseinander liegen, sich auf nebeneinander liegenden Schlitzen befinden (siehe Abb. 5.6). Durch die mäandrische Anordnung der Schlitze addieren sich die Beiträge zum elektrischen Feld von angrenzenden Schlitzen (Abb. 5.7 links).

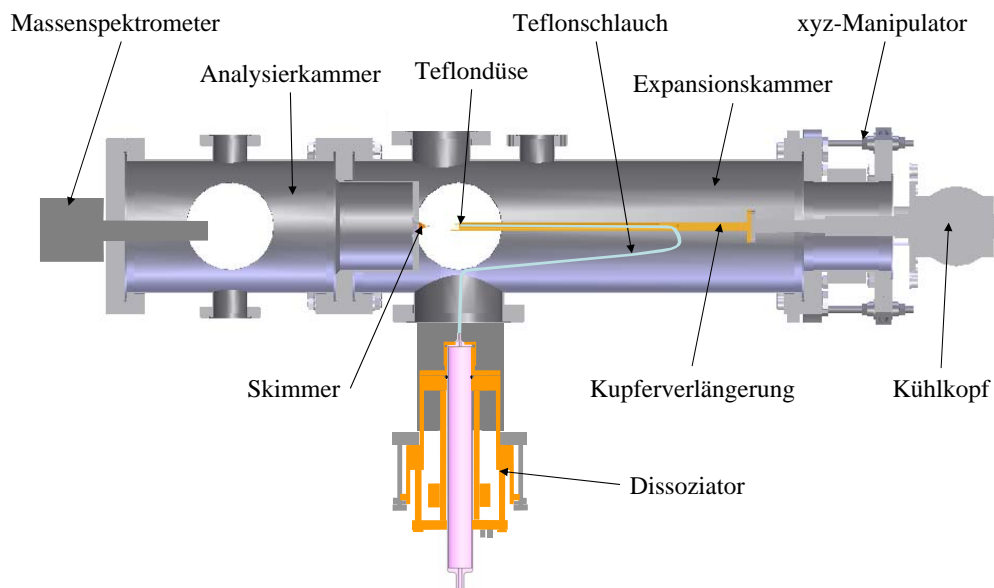
Die Radiatoren werden mit gleicher Phasenlage betrieben, da dadurch in der Glaskapillare ein gleichförmigeres elektrisches Feld erzeugt wird, als in einem Dissoziator bei dem sich die Radiatoren in entgegengesetzter Phase befinden [MGD 93a]. In Abbildung 5.7 (rechts) ist das elektrische Feld für diese Radiatoranordnung skizziert.



**Abbildung 5.7:** Darstellung des elektrischen Feldes entlang der Radiatorschlitze (links). In der rechten Abbildung ist das Feld und die Äquipotentiallinien des Dissoziators in der Glaskapillare dargestellt. Das elektrische Feld ist in der rechten Skizze rot dargestellt, die Äquipotentiallinien schwarz. Rechte Abb. von R. W. McCullough.

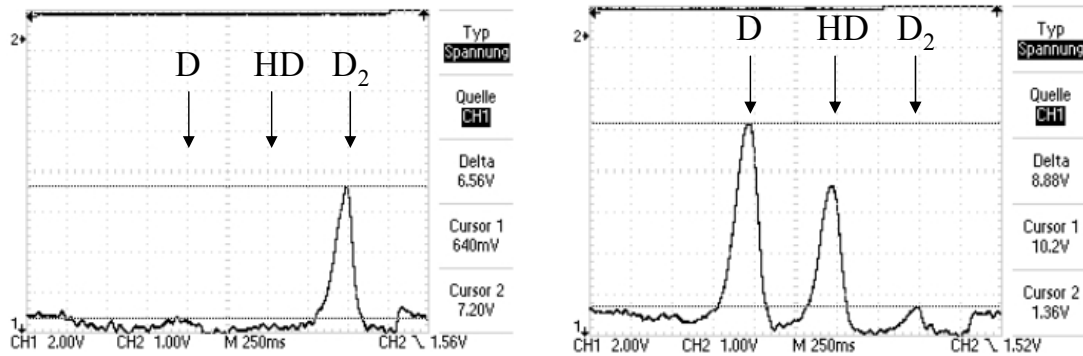
### 5.2.2 Aufbau und Test des Gasjets

Zum Testen des Dissoziators bei verschiedenen Vordrücken und Temperaturen, sowie zur Untersuchung des Einflusses der Wandrekombination wurde ein Teststand aufgebaut. Das Ziel der Messungen mit diesem Testaufbau war die Bestimmung der Dichte des Gasjets mit Hilfe eines Massenspektrometers. Die Temperatur des Targets kann nur direkt im Reaktionsmikroskop am endgültigen Aufbau bestimmt werden.

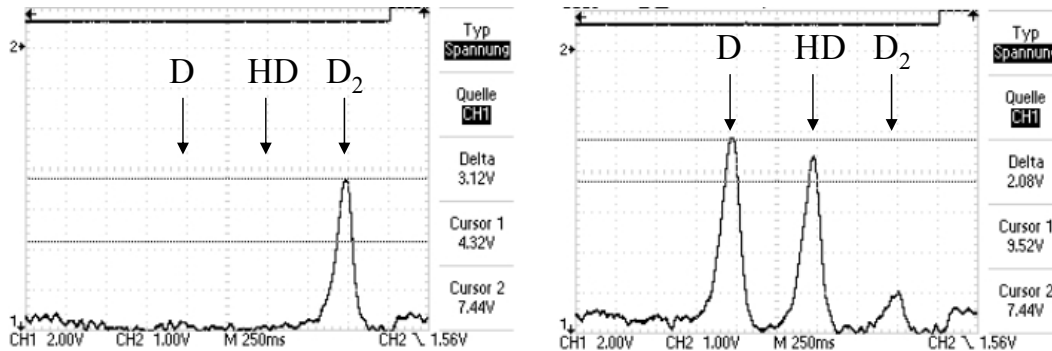


**Abbildung 5.8:** Aufbau des Teststandes zum Test des Dissoziators.

## 5.2. Experimentelle Umsetzung und Test des Wasserstofftargets



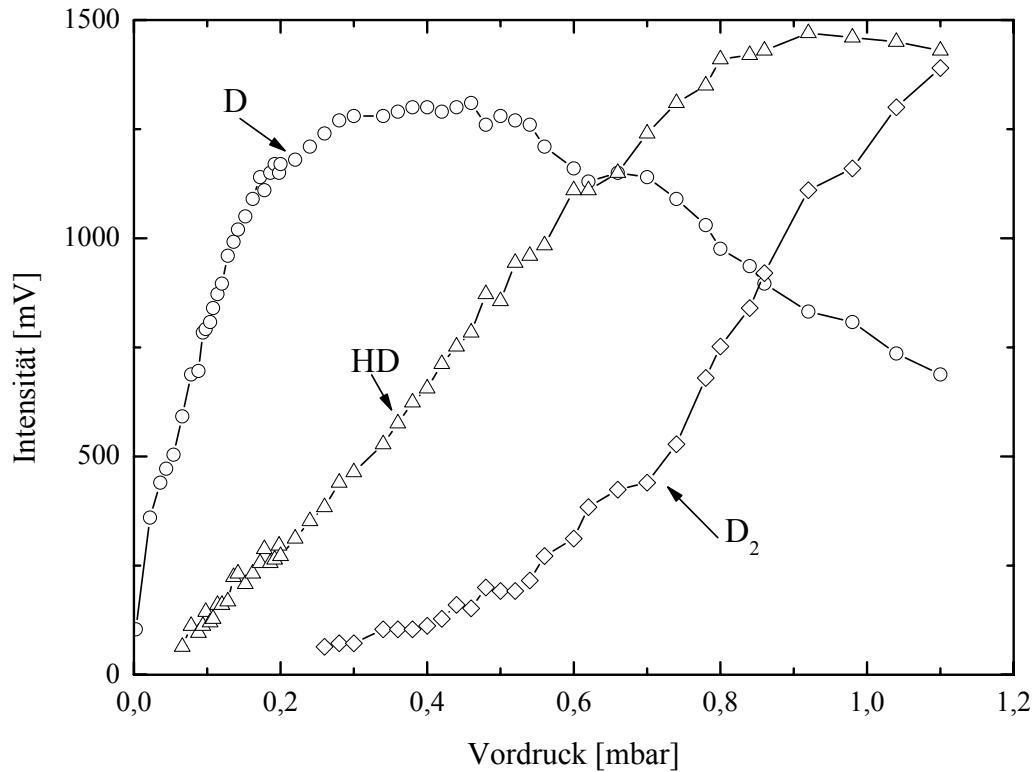
**Abbildung 5.9:** Massenspektren von Deuterium bei 0,3 mbar und einem Düsendurchmesser von 1 mm. Das rechte Spektrum wurde bei eingeschaltetem Dissoziator aufgenommen. Der Partialdruck der Masse 2 im rechten Bild ist  $p(D) = 1,0 \cdot 10^{-8}$  mbar.



**Abbildung 5.10:** Massenspektrum von Deuterium bei 0,4 mbar, einer Gastemperatur von 35 K und einem Düsendurchmesser von 1 mm. Die linke Abbildung zeigt ein Spektrum ohne Dissoziator, die rechte ein Massenspektrum nach Einschalten des Dissoziators. Der Partialdruck der Masse 2 amu im rechten Bild ist  $p(D) = 9,5 \cdot 10^{-9}$  mbar.

In Abbildung 5.8 ist der Aufbau des Teststandes skizziert. Er besteht aus zwei Kammern (Expansions- und Analysierkammer), die durch einen Skimmer mit einer Öffnung von  $260 \mu\text{m}$  getrennt sind. Die Wasserstoffatome werden mit einem Teflonschlauch von 6 mm Innendurchmesser und 8 mm Außendurchmesser über die Kühkopfverlängerung bis zur Düse transportiert und können dabei auf bis zu 30 K abgekühlt werden. Für eine optimale Wärmeleitung ist die Kühkopfverlängerung aus Kupfer gefertigt. Von der Düse aus strömen die Atome in die Expansionskammer, wobei sich ein Gasjet ausbildet, der durch den Skimmer in die Analysierkammer gelangt. Der xyz-Manipulator dient zur Positionierung der Düse und zum Variieren des Düse-Skimmer Abstandes. Aufgrund der erhöhten Rekombination von atomarem Wasserstoff an Metall besteht die Düse ebenfalls aus Teflon, vom Dissoziator bis zur Düse kommen die Wasserstoffatome damit nur mit Teflon in Kontakt. Das Quadrupolmassenspektrometer (QMS) hat einen Abstand von 25 cm zum Skimmer und sitzt auf der Kammerachse. In der Analysierkammer besteht ein Druck von etwa

$2 \cdot 10^{-9}$  mbar ohne Jet und etwa  $3 \cdot 10^{-8}$  mbar bei laufendem Jet, in der Expansionskammer steigt der Druck von  $1 \cdot 10^{-7}$  mbar auf etwa  $10^{-4}$  mbar.



**Abbildung 5.11:** Intensität der Dissoziationsprodukte in Abhängigkeit vom Vordruck bei einer Düsenöffnung von 0,5 mm. Offene Kreise stehen für Masse 2 (D), offene Dreiecke für Masse 3 (HD) und offene Rauten für Masse 4 (D<sub>2</sub>). Die Intensität der Masse 1 ist konstant bei allen Vordrücken und wurde zur besseren Übersicht nicht eingezeichnet.

Bei dem zur Charakterisierung der Quelle verwendeten Massenspektrometer war eine Auflösung der Masse 1 amu (atomares Wasserstoff) nicht möglich, daher wurde nicht Wasserstoff (H<sub>2</sub>) sondern das doppelt so schwere Deuterium (D<sub>2</sub>) verwendet. Trotz der unterschiedlichen Massen sind die Rekombinationskoeffizienten für beide Moleküle gleich [KS99].

Da Deuteriumatome nicht nur untereinander rekombinieren können, sondern auch mit einem Wasserstoffatom aus dem Restgas oder aus der Teflonoberfläche, taucht im Massenspektrum ein weiterer Peak bei der Masse 3 amu auf. Typische Massenspektren sind in Abbildungen 5.9 und 5.10 abgebildet. Durch den guten Druck in der Analysierkammer ist kaum H<sub>2</sub>-Untergrund zu sehen (Abb. 5.9, 5.10 (links)). Dies ist von Vorteil, da H<sub>2</sub> und D im Massenspektrum nicht unterschieden werden können, was bei einem zu hohen H<sub>2</sub>-Hintergrund zu einer Verfälschung der Messung des Dissoziationsverhältnisses führen würde.

Zum Abschluss des Dissoziortests wurde sowohl der Teflonschlauch als auch die

Teflondüse zum Transport der dissoziierten Atome auf einer Länge von 40 cm bis auf 35 K gekühlt, um den Einfluss der tiefen Temperatur auf die Wandrekombination zu überprüfen. Abbildung 5.10 zeigt, dass der Anteil der Masse 3 im Massenspektrum höher ist, als im Vergleich zu Abbildung 5.9. Dieser Effekt beruht auf den Temperaturabhängigkeit des Rekombinationskoeffizienten von Teflon (siehe Abb. 5.3). Da die Verluste durch Wandrekombination so gering wie möglich gehalten werden sollen, muss die Strecke, auf der die Atome gekühlt werden so kurz wie möglich gehalten werden. Die Umsetzung der Kühlung wird in Kapitel 5.3.1 detailliert beschrieben. Abbildung 5.11 zeigt die Intensität der Dissoziationsprodukte von  $D_2$  in Abhängigkeit vom Vordruck bei einer Düsenöffnung von 0,5 mm. Die Intensität von atomarem Deuterium steigt bis zu einem Druck von etwa 0,3 mbar an und bleibt bis 0,5 mbar konstant. In diesem Bereich dominiert der atomare Anteil über den molekularen. Bei höherem Druck steigt der durch Wandstöße erzeugte molekulare Anteil (HD) und übertrifft ab einem Vordruck von 0,6 mbar den atomaren Anteil. Die Intensität des  $D_2$  übersteigt bei einem Vordruck von 0,8 mbar die Intensität des atomaren Anteils. Bei einem Druck von 0,4 mbar entspricht die Intensität von D etwa 62% der Gesamtintensität. Für höhere Drücke fällt dieser Anteil ab, bei einem Druck von 1 mbar ist immer noch ein signifikanter Anteil von 20% an atomarem D enthalten.

### 5.2.3 Erreichbare Targetdichte und Impulsauflösung

Die mit dem Massenspektrometer gemessene Intensität des atomaren Anteils im Gasstrahl entspricht einem Partialdruck von  $p_u = 1,0 \cdot 10^{-8}$  mbar für den ungekühlten Strahl ( $T_u = 300$  K) (siehe Abb. 5.9), bzw.  $p_g = 9,5 \cdot 10^{-9}$  mbar für den gekühlten Strahl ( $T_g = 35$  K) (Abb. 5.10). Damit ist die Atomdichte  $n$  für den ungekühlten, bzw. gekühlten Strahl am Ort des Massenspektrometers gemäß dem idealem Gasgesetz

$$\begin{aligned} n(T_u) &= \frac{p_u}{k_B T_u} = 2,5 \cdot 10^8 \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} \\ n(T_g) &= \frac{p_g}{k_B T_g} = 2,0 \cdot 10^9 \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}. \end{aligned}$$

Der Abstand zwischen Düse und Massenspektrometer ist 25 cm, der Abstand zwischen Düse und Wechselwirkungsbereich wird im Experiment nur 7 cm betragen. Die Atomdichte am Wechselwirkungsort steigt dadurch auf

$$n_{exp} = \left(\frac{25}{7}\right)^2 \cdot 2,0 \cdot 10^9 \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3} = 2,6 \cdot 10^{10} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}$$

bei einer Temperatur von 35 K. Sie ist aber im Vergleich zu dem bis jetzt verwendeten Helium-Gasjet mit einer Dichte von  $10^{11}$  Atomen/ $\text{cm}^3$  um etwa eine Größenordnung

geringer.

Nach Gleichung (3.6) ist für atomares Deuterium bei 35 K das Speedratio  $S_{||\infty} = 6$ . Damit ist eine Breite der Impulsverteilung des Targets von  $\Delta p = 0,24$  a.u. erreichbar.

### 5.3 Das Wasserstofftarget am Reaktionsmikroskop

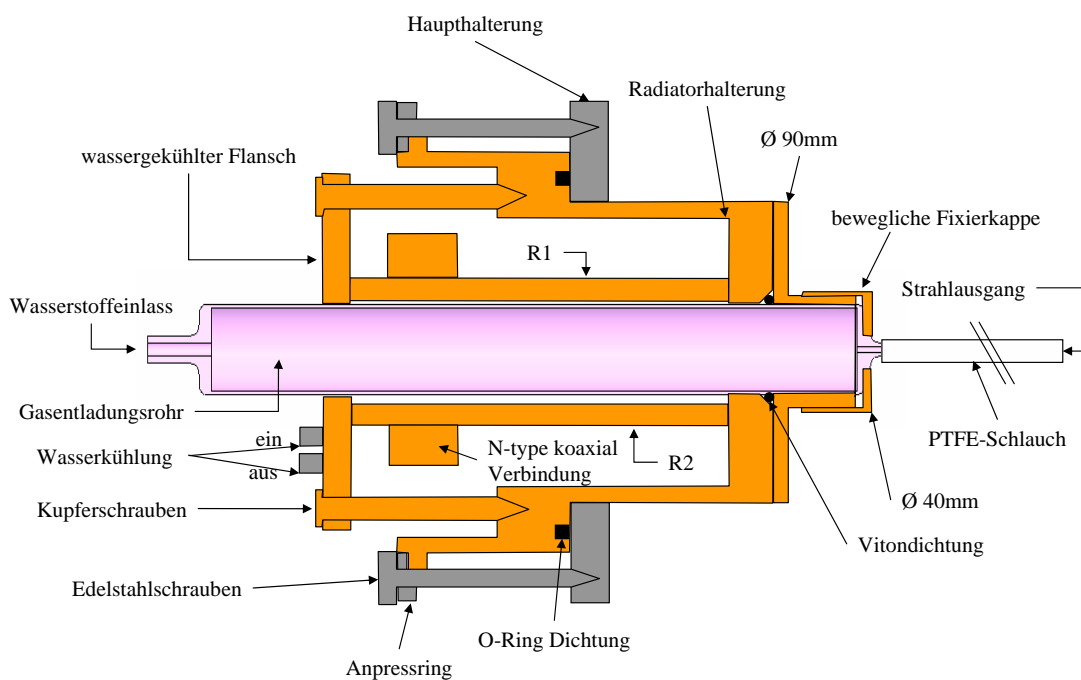


Abbildung 5.12: Aufbau und Halterung des Dissoziators.

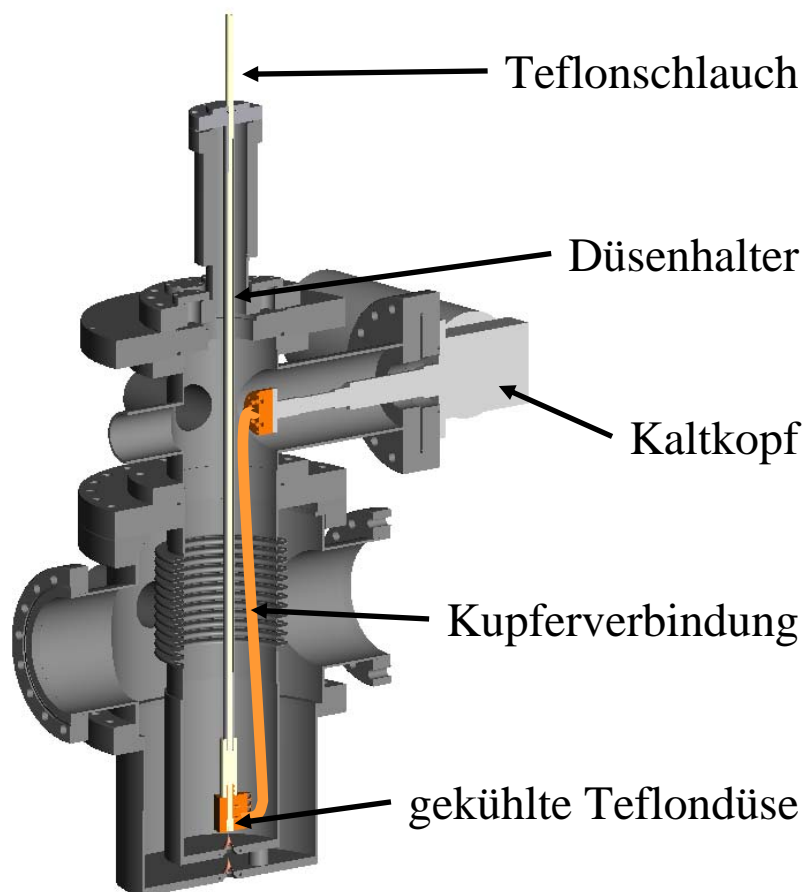
Der Gesamtaufbau des Dissoziators ist in Abbildung 5.12 skizziert. Die beiden in Kapitel 5.2.1 beschriebenen Radiatoren R1 und R2 werden um das Gasentladungsrohr montiert. Das Gasentladungsrohr ist auf der Vakuumseite durch eine bewegliche Kappe fixiert, so dass (falls nötig) über ein Gewinde die Position des Rohres geändert und damit der Abstand zum Wechselwirkungsort verringert werden kann. Die Fixierung auf der dem Vakuum abgewandten Seite geschieht über einen Flansch, der über Kupferschrauben wiederum mit der Radiatorhalterung verschraubt wird. Um die Wärme, die durch die reflektierten Mikrowellen entsteht, möglichst gut abzuführen, wurde die gesamte Radiatorhalterung aus Kupfer gefertigt. Durch die Wasserkühlung des hinteren Flansches wird eine Betriebstemperatur des Dissoziators und des Gasentladungsrohres von etwa 40°C erreicht. Die gesamte Radiatorhalterung ist

### 5.3. Das Wasserstofftarget am Reaktionsmikroskop

---

an eine Haupthalterung montiert, mit der der Dissoziator an einen CF-100 Flansch angebracht werden kann. Der gesamte Dissoziatoraufbau ist zu groß, um ihn nahe der Düse in der Expansionskammer zu platzieren (siehe Abb. 3.4). Zum Transport der Wasserstoffatome zur Düse muss damit eine Strecke von etwa 70 cm überbrückt werden.

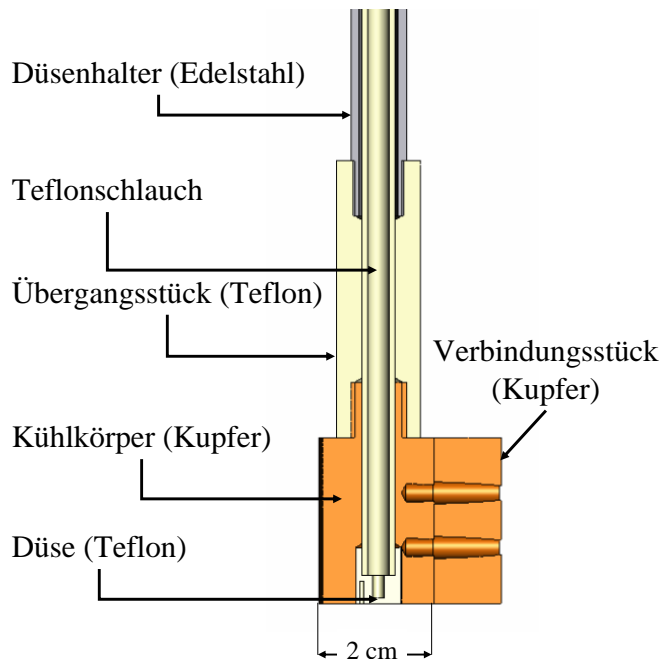
#### 5.3.1 Einbau der Atomstrahlquelle in das Reaktionsmikroskop



**Abbildung 5.13:** Skizze der Düsenkühlung in der Expansionskammer des Reaktionsmikroskop. Die Änderungen zum Aufbau des Heliumjets (Abb. 3.4) werden im Text erläutert.

Der Aufbau des atomaren Wasserstoff-Gasjets am Reaktionsmikroskop ist in Abbildung 5.13 dargestellt. Im Wesentlichen wurde die Düsenhalterung im Vergleich zum He-Target neu konzipiert und der Kaltkopf zur Kühlung der Düse eingebaut.

Der Kaltkopf ist seitlich an der Expansionskammer eingebaut und über eine flexible Kupferverbindung mit der Düse verbunden. Die Kupferverbindung besteht aus 10 Kupferlitzen mit einem Durchmesser von je 3 mm und einer Länge von 50 cm. Für einen guten Wärmeübergang wurden beide Enden dieses Strangs per Elektronenstrahlschweißen an eine Kupferplatte geschweißt, die mit dem Kaltkopf bzw. der Düse verschraubt werden kann.



**Abbildung 5.14:** Vergrößerung der Düse mit Kühlung und Verbindung zum Kaltkopf. Die Funktion der einzelnen Elemente werden im Text erklärt.

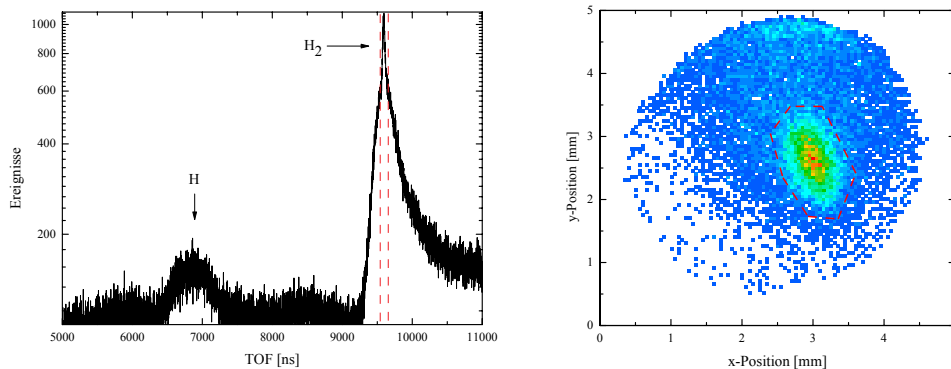
Die Teflondüse ist von einem Kühlkörper (Länge 3 cm) aus Kupfer umgeben (Abb. 5.14), an den die Verbindung zum Kaltkopf angeschraubt ist. Damit nur die Düse gekühlt wird und nicht die gesamte Düsenhalterung ist als thermische Isolation ein Teflonzwischenstück (Länge 5 cm) zwischen Düsenhalterung und Kühlkörper eingebaut. Der Teflonschlauch wird vom Dissoziator bis zur Düse geführt und dort verschraubt. Die Länge des Schlauches vom Dissoziator bis zur Düse beträgt wie beim Testaufbau 70 cm. Das Gas wird nur auf der Länge des Kühlkörpers gekühlt, wodurch im Vergleich zum Testaufbau der Verlust durch Wandrekombination weiter verringert werden soll. Zur Abschirmung der Wärmestrahlung von der warmen Kammerwand ist der Kaltkopf, die Kupferverbindung und der Kühlkörper mit mehreren Lagen aluminisierter Mylar-Folie (Superisolierung) umwickelt. Zur Temperaturbestimmung am Kaltkopf, sowie am Kühlkörper der Düse wurden dort je ein Platin-Meßwiderstand (pt1000) angebracht. Diese Widerstände ermöglichen eine Messung der Absoluttemperatur ab 40 K [GEK05].



## 5.4 Erste Testmessung: Einfachionisation von $H_2/D_2$ durch $C^{4+}$

Das Hauptziel der ersten Messung war, die prinzipielle Funktion des Aufbaus mit laufendem Dissoziator und Kühlung des Gases durch einen Kaltkopf zu überprüfen. Daher wurde ein Projektil ausgewählt, dass vom Beschleuniger mit hoher Intensität produziert werden kann und für die Ionisation von Wasserstoff einen hohen Wirkungsquerschnitt aufweist. Die Wahl fiel dabei auf  $C^{4+}$  bei einer Energie von 1 MeV/amu. Eine analytische Formel zur Berechnung des totalen Wirkungsquerschnittes  $\sigma$  wird in [VK98] hergeleitet und beträgt für dieses Stoßsystem etwa  $\sigma = 3 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ . Für diese Messung wurde der Tandembeschleuniger im gepulsten Modus betrieben mit einer Pulslänge von 1 ns und einer Repetitionsrate von 100 kHz. Dadurch konnte ein Triggersignal der Pulsung verwendet werden, um die Flugzeitmessung der emittierten Elektronen und des Rückstoßions zu starten.

Der Hintergrunddruck von  $2 \cdot 10^{-9} \text{ mbar}$  in der Reaktionskammer konnte nach dem Öffnen der Ventile zum Strahlrohr nicht aufrecht gehalten werden. So betrug der Hintergrunddruck bei laufendem Jet etwa  $8 \cdot 10^{-8} \text{ mbar}$ . Dadurch war der Partialdruck von H und  $H_2$  des Hintergrundes zu hoch, um eine Messung mit atomarem Wasserstoff durchzuführen. Die Dichte des Targets ist bei einem geeigneten Vordruck von etwa  $p_0 = 0,1 - 1 \text{ mbar}$  zu gering, um die bei der Dissoziation entstandenen H-Atome vom Untergrund zu separieren. Für einen höheren Vordruck von 4,4 mbar



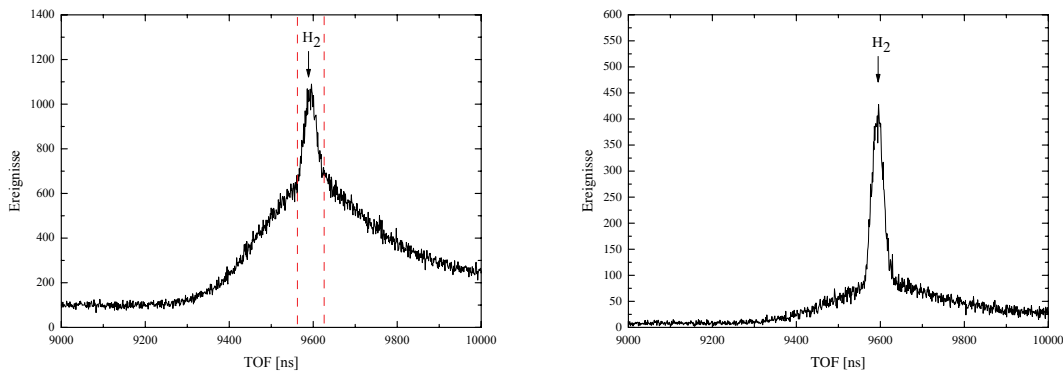
**Abbildung 5.15:** Flugzeitspektrum (links) und Ortsspektrum (rechts) von  $H_2$  bei einer Temperatur von 44 K und einem Vordruck von 4,4 mbar. Beim Ortsspektrum wurde eine Zeitbedingung auf die Flugzeit der  $H_2$ -Ionen gesetzt (rote gestrichelte Linien in der linken Abbildung). Die Ortsbedingung auf die  $H_2$ -Moleküle ist in der rechten Abbildung durch die rot gestrichelte Umrandung gekennzeichnet.

bei einer Gastemperatur von 44 K wurde getestet, ob es prinzipiell möglich ist bei einem ähnlich niedrigen Vordruck einen Überschall-Gasjet zu erzeugen. Bei diesem gewählten Vordruck ist die Targetdichte und damit das Verhältnis von Signal zu

Hintergrund groß genug, um zwischen den Molekülen des Jets und des Hintergrundes zu unterscheiden (Abb. 5.15 links).

Im Ausschnitt des Massenspektrums (Abb. 5.16 links) ist deutlich der schmale Flugzeitpeak der kalten Molekülonen auf dem breiten Peak des Hintergrundes zu sehen. Außerdem ist im Ortsbild der detektierten Rückstoßionen (Abb. 5.15 rechts) deutlich die typische runde Form einer Überschallexpansion zu sehen. Diese Form stammt von der schmalen Geschwindigkeitsverteilung der Targetmoleküle. Für eine breite Geschwindigkeitsverteilung ist diese Form in y-Richtung (Expansionsrichtung des Targets) im Vergleich zur x-Richtung wesentlich aufgeweitet.

Mit einer Bedingung auf den Ort der Molekülonen (siehe Abb. 5.16) kann das Verhältnis von Signal zu Hintergrund im Flugzeitspektrum weiter verbessert werden. Dies bedeutet, dass nur die Flugzeit der Moleküle dargestellt wird, deren Ort im gekennzeichnete Polygon liegt.

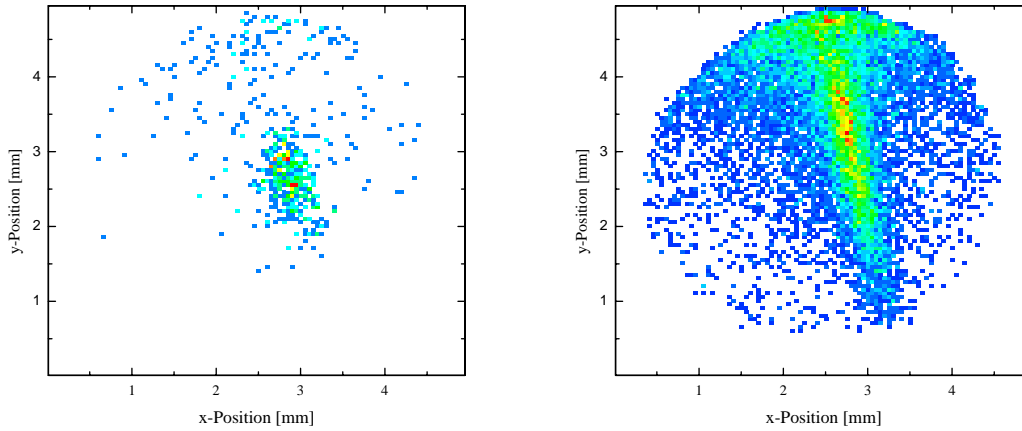


**Abbildung 5.16:** Ausschnitt aus dem Flugzeitspektrum von  $H_2$  (Abb. 5.15). Deutlich zu sehen ist der schmale Flugzeitpeak des Jets auf dem breiten Restgaspeak (links) (Rote Linien deuten die Flugzeitbedingung an). Mit einer Bedingung auf den Ort der Moleküle kann das Signal weiter verbessert werden (rechts).

Im Folgenden wurde als Target Deuterium verwendet, da die Masse des molekularem Deuteriums in einem Bereich des Massenspektrums liegt, bei dem weniger Untergrund vorhanden ist. Dadurch kann der Dissoziator mit einem niedrigeren Gasdruck betrieben werden. Damit ist es möglich eine Änderung des molekularen Anteils im Target bei ein- und ausgeschaltetem Dissoziator zu untersuchen.

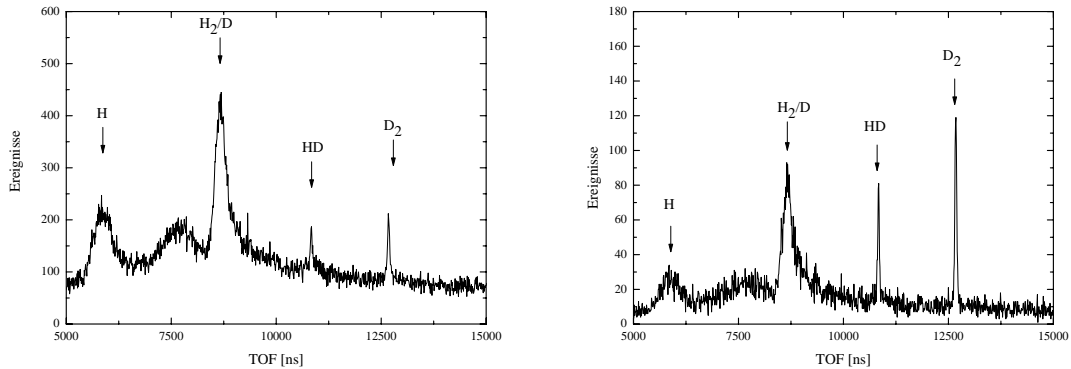
In Abbildung 5.17 ist das Ortsbild der detektierten Rückstoßionen bei eingeschalteter Gaskühlung (Abb. 5.17 links) und ausgeschalteter Kühlung (Abb. 5.17 rechts) zu sehen. Wie oben bereits erwähnt ist für einen Überschall-Gasjet mit größerer Geschwindigkeitsverteilung das Ortsbild in y-Richtung wesentlich ausgedehnter, was in diesem Fall (rechte Abb.) auch sehr deutlich sichtbar ist. Die Vorkühlung des Gases führt also zu dem gewünschten Effekt, dass die Geschwindigkeitsverteilung wesentlich schmaler wird.

#### 5.4. Erste Testmessung: Einfachionisation von $H_2/D_2$ durch $C^{4+}$



**Abbildung 5.17:** Ortsbild der Deuteriummolekülonen bei 2 mbar mit eingeschalteter Kühlung (links) und ohne Kühlung bei 3,4 mbar (rechts).

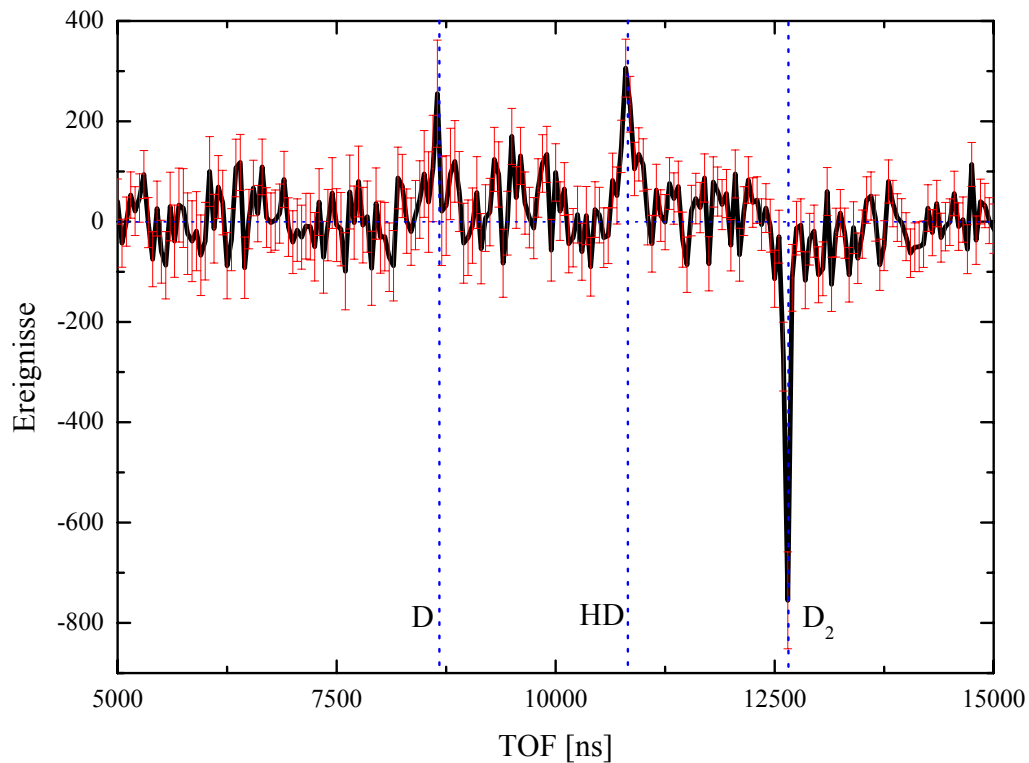
Auch wenn im Flugzeitspektrum bei der Masse von  $D_2$  der Untergrund sehr niedrig ist, fällt die Flugzeit des atomaren D mit der Flugzeit des  $H_2$  des Hintergrundes zusammen. Damit besteht für atomares Deuterium weiterhin das Problem, dass dieser Anteil im Untergrund verschwindet. Durch eine Betrachtung der Intensität des  $D_2$ -Peaks oder einer Differenz der Massenspektren vor und nach dem Einschalten des Dissoziators können aber Rückschlüsse auf das Dissoziationsverhältnis gezogen werden.



**Abbildung 5.18:** Flugzeitspektrum bei eingeschaltetem Dissoziator und einem Vordruck von 2 mbar ohne Ortsbedingung (links) und mit Bedingung auf den Ort des Jets (rechts).

Im linken Teil der Abbildung 5.18 ist ein Massenspektrum der Dissoziation von Deuterium bei einer Temperatur von 44 K abgebildet. Deutlich zu sehen sind die scharfen Flugzeitpeaks von  $D_2$  und HD, sowie die breiten Flugzeitverteilungen von H und  $H_2$  aus dem Hintergrundgas. Der Anteil des dissoziierten Deuteriums verschwindet im Untergrund. Durch eine zusätzliche Bedingung auf die Ortsverteilung der Rückstoßionen wird der Untergrund weiter unterdrückt (Abb. 5.18 rechts), der

atomare Anteil ist aber auch dort nicht vom Untergrund unterscheidbar. Erst die Differenz der Massenspektren ohne und mit Dissoziator (Abb. 5.19) zeigt, dass auch bei diesem hohen Vordruck atomarer Wasserstoff im Target vorhanden ist. Dazu wurde ein Massenspektrum mit Dissoziator und ein Massenspektrum ohne Dissoziator aufgenommen und voneinander subtrahiert. Die Intensität des Massenspektrums ohne Dissoziator wurde so skaliert, dass die Zählrate an den Stellen ohne Massenpeak mit der Zählrate bei eingeschaltetem Dissoziator übereinstimmt. Wie



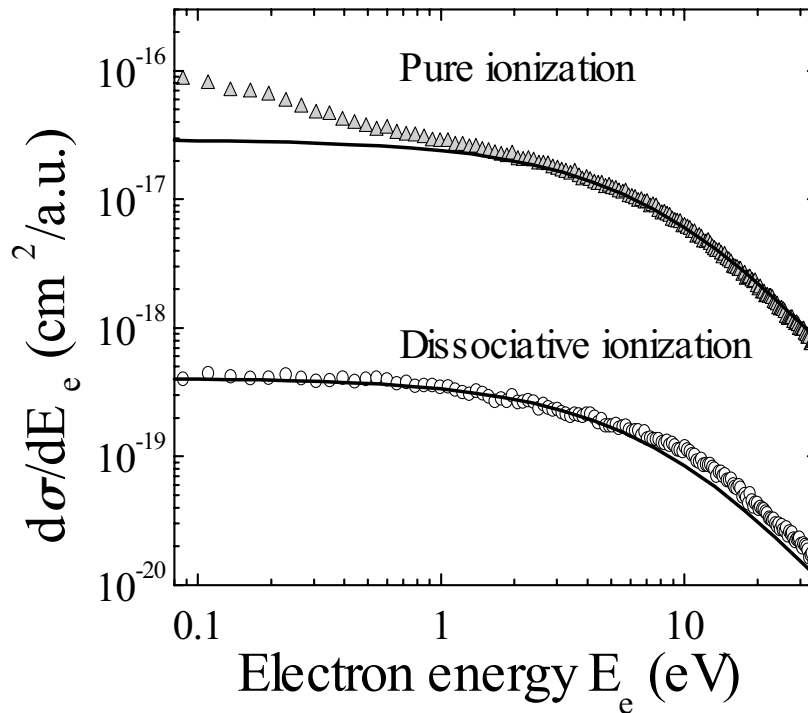
**Abbildung 5.19:** Differenz des Massenspektrums von Deuterium mit eingeschaltetem Dissoziator zum Massenspektrum ohne Dissoziator bei 2 mbar Vordruck.

erwartet erscheint bei der Flugzeit des D<sub>2</sub> ein Minimum in Abbildung 5.19. Außerdem sind bei der Flugzeit des molekularen HD und des atomaren D Maxima deutlich. Aufgrund der niedrigen Statistik insbesondere beim atomaren D ist keine endgültige Aussage über den Dissoziationsgrad möglich.

#### 5.4.1 Der Einfluss der dissoziativen Ionisation

Da ein Teil der Atome auf dem Weg vom Dissoziator zur Düse wieder rekombiniert und sich daher ein gewisser Anteil an molekularem Wasserstoff im expandierenden Gas befindet, muss berücksichtigt werden, dass durch dissoziative Ionisation der Moleküle ein weiterer Kanal zur Produktion von atomarem Wasserstoff vorhanden ist.

Dabei dissoziiert das Wasserstoffmolekül beim Stoß in ein  $H^+$ , ein Elektron und ein neutrales H-Atom. Das entstandene  $H^+$ -Ion hat die gleiche Flugzeit wie ein ionisiertes atomares Target. Alleine durch die Flugzeit können diese beiden Mechanismen daher nicht separiert werden. Der Wirkungsquerschnitt für die dissoziative Ionisation ist allerdings um etwa zwei Größenordnungen kleiner als für die reine Ionisation (s. Abb. 5.20 für  $H_2$ ) was zu einer Unterdrückung dieser Fehlerquelle führt.



**Abbildung 5.20:** Energieverteilung der emittierten Elektronen bei der Einfachionisation von  $H_2$  im Protonenstoß bei 6 MeV. Dreiecke: experimentelle Ergebnisse für reine Ionisation; Kreise: experimentelle Ergebnisse für dissoziative Ionisation [DMF 04].

Selbst bei einem Anteil von 10% an atomarem Wasserstoff im Target als untere Grenze ist der Anteil der dissoziativen Ionisation immer noch um eine Größenordnung geringer. Aufgrund des kleineren Wirkungsquerschnittes ist der Einfluss der dissoziativen Ionisation von  $H_2$  (bzw.  $D_2$ ) bei der Messung der Einfachionisation von Wasserstoff daher vernachlässigbar.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass aufgrund der Messungen am Teststand ein signifikanter Anteil an atomarem Wasserstoff im Target zu erwarten ist (60% bei einem Druck von 0,4 mbar). Außerdem zeigen die Ergebnisse der ersten Testmessung, dass eine Überschallexpansion bei sehr niedrigen Drücken mit einer Kühlung des Gases

durch einen Kalkopf möglich ist. Ein Nachweis von kaltem atomarem Wasserstoff war aufgrund des schlechten Vakuums in der Experimentierkammer nicht möglich, auch wenn es erste Anzeichen (Abb. 5.19) dafür gibt.

# Zusammenfassung und Ausblick

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde in einem kinematisch vollständigen Experiment die Mehr-Teilchen Dynamik in Stößen von  $H^-$ -Ionen mit He-Atomen bei einer Einschussenergie von 200 keV detailliert vermessen, wobei nur solche Reaktionen berücksichtigt wurden, die zu einer gleichzeitigen Ionisation von beiden Stoßpartnern, also Projektil und Target, führten. Ziel der Untersuchung war es, mögliche Reaktionsmechanismen zu identifizieren und die Frage zu beantworten, ob eine hinreichend genaue Beschreibung der komplexen Stoßdynamik, bei der insgesamt sechs Teilchen involviert sind, durch eine Reduktion auf einige wenige Zweikörper-Wechselwirkungen möglich ist. Anhand von Vergleichen mit experimentellen Daten zur einfachen Targetionisation sowie mit vorhandenen Theorien ist dies zum Teil gelungen. Das Experiment wurde am neuen Hochenergie-Strahlplatz des Max-Planck-Instituts für Kernphysik in Heidelberg mit Hilfe eines Reaktionsmikroskopes durchgeführt. Dabei wurden die Impulsvektoren sowohl der  $He^+$ -Rückstoßionen als auch der beiden im Stoß emittierten Elektronen von Projektil und Target koinzident und nahezu über den gesamten Raumwinkel vermessen. Mit der erreichten Auflösung und der erzielten Statistik stellt das durchgeführte Experiment damit die bisher umfassendste Messung von vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten für die simultane Ionisation von Projektil und Target im Ion-Atom Stoß dar.

Der einfachste Mechanismus, der zur einer gleichzeitigen Ionisation von Projektil und Target führen kann, ist eine Wechselwirkung eines Targetelektrons mit einem am Projektil gebundenen Elektron ((e,e) - Mechanismus). Ist der dabei auftretende Impulsübertrag ausreichend groß können beide ionisiert werden. Ein weiterer möglicher Reaktionskanal ist eine Wechselwirkung zwischen dem zu ionisierenden Elektron des einen Stoßpartners mit dem Ionenrumpf, oder Kern, des anderen ((n,e) - Mechanismus). Während allerdings beim (e,e)-Mechanismus nur eine Wechselwirkung nötig ist, sind beim (n,e)-Mechanismus mindestens zwei erforderlich, um sowohl das Target als auch das Projektil zu ionisieren. Bereits in früheren Experimenten [MMM 92, DMA 94, WWA 94] konnten diese beiden Mechanismen, die eine unterschiedliche Abhängigkeit von der Projektilenergie aufweisen, anhand von totalen oder niedrig differentiellen Wirkungsquerschnitten separiert werden. In dem einzi-

gen bisher durchgeführten kinematisch vollständigen Experiment von Kollmus *et al.* [KMO 02] gelang es erstmals sogar für jeden einzelnen Stoß den Beitrag der beiden Mechanismen anzugeben.

Bisher beschränkten sich diese Untersuchungen allerdings auf Stoßsysteme bei denen die elektronischen Bindungsenergien in Projektil und Target nicht allzu verschieden waren. Bei der hier durchgeführten Messung ist dies nicht der Fall. Das Ionisationspotential der  $H^-$ -Projektile von 0,7 eV ist ca. 35 mal kleiner als die Bindungsenergie des aktiven Elektrons im He-Target. Demnach kann das Projektilelektron als ein quasi-freies Elektron betrachtet werden und es stellt sich die Frage, inwieweit die Ionisation des He-Targets durch einen Stoß mit diesem freien Elektron, also eine Elektronenstoßionisation, angenähert werden kann. Durch Vergleiche der experimentellen Ergebnisse mit verschiedenen Theorien wurde dieser Frage nachgegangen und geprüft, ob der Kern des  $H^-$ -Projektils einen signifikanten Einfluss auf die Targetionisation hat, den es zu berücksichtigen gilt.

Dabei stellte sich heraus, dass sowohl die einfach als auch die höher differentiellen Wirkungsquerschnitte für die Ionisation des Targets deutliche Anzeichen einer reinen (e,e)-Wechselwirkung aufweisen. Der direkte Nachweis einer reinen (e,e)-Wechselwirkung war allerdings erst durch die Betrachtung des vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitts möglich. Die experimentellen Daten sind sowohl in der Streuebene als auch in der dazu senkrechten Ebene in hervorragender Übereinstimmung mit den Ergebnissen einer 3C-Rechnung, bei der als Projektile Elektronen mit einer Energie von 109 eV verwendet wurden. Durch einen Vergleich mit experimentellen Daten der Einfachionisation von Helium im Elektronenstoß bei einer Energie von 102 eV [Dür06] konnte ebenfalls bestätigt werden, dass die Ionisation des He-Targets durch das  $H^-$ -Projektil eindeutig auf eine reine (e-e)-Wechselwirkung zwischen Targetelektron und Projektilelektron zurückgeführt werden kann.

Damit eröffnen sich alternative Möglichkeiten für zukünftige Untersuchungen der Elektronenstoß induzierten Ionisation von leichten Ionen und Atomen, wie z.B. Experimente zur einfachen oder auch mehrfachen Ionisation bei sehr kleinen Einschussenergien nahe der Ionisationsschwelle.

Eine ähnliche Analyse zur Identifikation des Reaktionsmechanismus, der zur Ionisation des  $H^-$ -Projektils durch das He-Target führt, ergab hingegen ein wesentlich komplexeres Bild. Die Projektilionisation konnte nicht eindeutig auf eine einzige Wechselwirkung zwischen den beiden aktiven Elektronen zurückgeführt werden. Während für eine korrekte theoretische Beschreibung der Longitudinal- und Transversalimpulse des Projektilelektrons einzig die Berücksichtigung der (e,e)-Wechselwirkung ausreichte, zeigten die höher differentiellen Wirkungsquerschnitte deutliche Einflüsse einer Wechselwirkung auch mit dem  $He^+$ -Rumpf. Dies äußerte sich in gravierenden Unterschieden zwischen Experiment und den zur Verfügung stehen-



den Theorien für die Projektilionisation. Zwar zeigten die Theorien in Übereinstimmung mit dem Experiment, dass die Projektilelektronen durch binäre Stöße mit dem He-Target emittiert werden, deren Vorhersagen für die Richtungen der emittierten Projektilelektronen stimmte allerdings nicht mit der experimentellen Beobachtung überein. Unter bestimmten kinematischen Bedingungen versagten die verwendeten Theorien sogar vollständig. Im Hinblick auf die exzellente Übereinstimmung mit  $(e,2e)$ -Daten und Rechnungen bei der Ionisation des He-Targets ist dieses Verhalten überraschend und abschließend nicht verstanden. Offensichtlich ist die Mehr-Teilchen Dynamik bei der simultanen Ionisation von Projektil und Target zu komplex, um sämtliche Aspekte mit den hier verwendeten Theorien zu beschreiben.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Konstruktion eines Targets für atomaren Wasserstoff mit dem Ziel, dieses Target in ein existierendes Reaktionsmikroskop zu implementieren, um die Ionisation von H-Atomen in Stößen mit Ionen kinematisch vollständig zu vermessen. In einer Reihe von vor kurzem durchgeführten Experimenten zur Ionenstoß induzierten Einfachionisation von He traten signifikante Abweichungen zwischen Experiment und Theorie auf, deren Ursachen bis heute nicht geklärt werden konnten [SMF 03]. Als eine mögliche Ursache für diese Diskrepanzen wird die Verwendung von effektiven Ein-Elektron Wellenfunktionen zur Beschreibung des He-Targets in den Theorien diskutiert [VNU03]. Denkbare Einflüsse des zweiten passiven Elektrons im He können theoretisch nur rudimentär berücksichtigt werden. Experimentell können solche Vier-Teilchen Effekte nur dann ausgeschaltet werden, wenn atomarer Wasserstoff als Target benutzt wird.

Die Schwierigkeiten bei der Herstellung eines atomaren H-Targets liegen darin gleichzeitig sowohl eine hohe Targetdichte, als auch eine möglichst schmale Geschwindigkeitsverteilung (bzw. niedrige Targettemperatur) zu erreichen. Schnell stellte sich heraus, dass beide Bedingungen nur dann zu erfüllen sind, wenn das erzeugte H-Gas extern vorgekühlt wird und anschließend durch eine Überschallexpansion die Temperatur nochmals reduziert wird. Bei dem verwendeten Hochfrequenz-Gasentladungs-Dissoziator zur Dissoziation des molekularen Wasserstoffs bestand zusätzlich das Problem, dass er aufgrund seiner Größe außerhalb des Reaktionsmikroskopes angebracht werden musste. Da atomarer Wasserstoff durch Kontakt mit anderen Materialien wieder rekombiniert, musste außerdem ein Weg gefunden werden, die Wasserstoffatome mit möglichst geringem Verlust zum Reaktionsvolumen zu bringen. Mit Hilfe einer eigens aufgebauten Testkammer wurden verschiedene Parameter getestet wie z.B. der Druck des Gases im Dissoziator oder der Durchmesser der Düse zur Überschallexpansion. Außerdem wurde der Einfluss der Vorkühlung auf die Dissoziation untersucht. Die Tests ergaben, dass eine ausreichende Targetdichte von  $2,6 \cdot 10^{10}$  Atome/cm<sup>3</sup> am Wechselwirkungsort bei einer Impulsbreite von

$\Delta p = 0,24$  a.u. erreichbar ist. Damit ist die Impulsbreite vergleichbar mit den bisher verwendeten He-Targets. Nach der Optimierung der eingesetzten Materialien wurde ein Anteil von atomarem Wasserstoff an der Gesamtintensität von etwa 60% erreicht.

Nach Einbau des Wasserstofftargets in das vorhandene Reaktionsmikroskop wurde eine erste Testmessung durchgeführt. Leider war das Vakuum im Reaktionsmikroskop nicht ausreichend gut, um den atomaren Wasserstoff vom Untergrund zu separieren. Es konnte allerdings nachgewiesen werden, dass ein signifikanter Anteil von atomarem Wasserstoff im Target vorhanden war. Außerdem konnte gezeigt werden, dass sich bei einer Vorkühlung des Gases ein Überschall-Gasjet ausbildet mit dem die geforderte Targettemperatur erreicht werden kann. Derzeit wird ein Experiment mit verbesserten Vakuumbedingungen vorbereitet, um erste kinematisch vollständige Messungen zur Ionisation von Wasserstoff in Stößen mit hochenergetischen Protonen durchzuführen. Ein Vergleich mit der Theorie wird zeigen, inwieweit dieses anscheinend einfache quantenmechanische Drei-Teilchen Problem verstanden ist.

# Anhang A

## Anhang

### A.1 Jetparameter

Die maximale erreichbare Geschwindigkeit eines Atoms nach einer adiabatischen Expansion ist

$$v_{\infty} = \sqrt{\frac{\gamma}{\gamma - 1} \cdot \frac{2k_B T}{m}}. \quad (\text{A.1})$$

Dabei ist  $\gamma$  der Adiabatenexponent,  $T$  die Temperatur (in K) des Gases vor der Expansion und  $m$  die Masse des Atoms (in kg).

$\gamma$	$\kappa$	$A$	$B$
5/3	1,98 (2,0)	0,527 (0,778)	0,545 (0,495)
7/5	1,38 (1,47)	0,783	0,353
9/7	1,11 (1,18)	1,022	0,216

**Tabelle A.1:** Experimentell bestimmte Intensitätsparameter  $\kappa$  zur Bestimmung der Intensität entlang der Mittelachse eines Überschall-Gasjets, sowie *Terminal Speed Ratio*-Korrelationen (Formel (3.6)) bei verschiedenen Adiabatenexponenten  $\gamma$  [BV81, Mil88].

### A.2 Atomare Einheiten

In der Atomphysik werden häufig die *atomaren Einheiten* (a.u.) 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:

Gas	$C/k_B$
He	0,154
Ne	0,758
Ar	7,88
H <sub>2</sub>	0,7
D <sub>2</sub>	0,93

**Tabelle A.2:** Verschiedene Parameter  $C$  zur Berechnung des *Terminal Parallel Speed Ratio* (Formel (3.6))[Mil88].

### 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	$v [\text{m/s}] = 2,1877 \cdot 10^6 \cdot v [\text{au}]$

## A.3 Weitere verwendete Konstanten

$k_B = 1,3806503 \cdot 10^{-23} \text{ Joule/Kelvin}$  : Boltzmann-Konstante

$m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$  : Ruhemasse des Protons

# Literaturverzeichnis

- [BB93] Bischler, U. ; Bertel, E.: Simple source of atomic hydrogen for ultrahigh vacuum applications. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* **11** (1993), March, Nr. 2, S. 458 – 460
- [BB94] Berakdar, J. ; Briggs, J. S.: Three-body Coulomb continuum problem. In: *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994), June, Nr. 24, S. 3799–3802
- [BBK89] Brauner, M. ; Briggs, J. S. ; Klar, H.: Triply-differential cross sections for ionisation of hydrogen atoms by electrons and positrons. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **22** (1989), Nr. 14, S. 2265–2287
- [BBK91] Brauner, B. ; Briggs, J. S. ; Klar, H. ; Broad, J. T. ; Rosel, T. ; Jung, K. ; Ehrhardt, H.: Triply differential cross sections for ionization of hydrogen atoms by electrons: the intermediate and threshold energy regions. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **24** (1991), Nr. 3, S. 657–673
- [BCH00] Boudaiffa, B. ; Cloutier, P. ; Hunting, D. ; Huels, M. A. ; Sanche, L.: Resonant formation of DNA strand breaks by low-energy (3 to 20 eV) electrons. In: *Science* **287** (2000), March, Nr. 5458, S. 1658–1660
- [BDM05] Becker, A ; Dörner, R ; Moshhammer, R: Multiple fragmentation of atoms in femtosecond laser pulses. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **38** (2005), Nr. 9, S. S753–S772
- [Bel78] Belkic, Dz: A quantum theory of ionisation in fast collisions between ions and atomic systems. In: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **11** (1978), Nr. 20, S. 3529–3552
- [Bet30] Bethe, H.: Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. In: *Annalen der Physik* **397** (1930), Nr. 3, S. 325–400

- [BF96] Bray, I. ; Fursa, D. V.: Calculation of ionization within the close-coupling formalism. In: *Phys. Rev. A* **54** (1996), May, Nr. 4, 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: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **35** (2002), Nr. 15, S. R117–R146
- [BG53] Bates, D. R. ; Griffing, G.: Inelastic Collisions between Heavy Particles .1. Excitation and Ionization of Hydrogen Atoms in Fast Encounters with Protons and with Other Hydrogen Atoms. In: *Proceedings of the Physical Society of London Section A* **66** (1953), Nr. 407, S. 961–971
- [BG55] Bates, D R. ; Griffing, G W.: Inelastic Collisions between Heavy Particles IV: Contribution of Double Transitions to certain Cross Sections including that associated with the Ionization of Hydrogen Atoms in Fast Encounters with other Hydrogen Atoms. In: *Proceedings of the Physical Society. Section A* **68** (1955), Nr. 2, S. 90–96
- [BS89] Bronstein, I. N. ; Semendjajew, K. A.: *Taschenbuch der Mathematik*. 24. Auflage. Verlag Harri Teutsch, Thun, 1989
- [BS92] Bray, I. ; Stelbovics, A. T.: Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering. In: *Phys. Rev. A* **46** (1992), December, Nr. 11, S. 6995–7011
- [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), Nr. 6. – 062715
- [BV81] Beijerinck, H. C. W. ; Verster, N. F.: Absolute intensities and perpendicular temperatures of supersonic beams of polyatomic gases. In: *Physica B&C* **111** (1981), November/Dezember, Nr. 2&3, S. 327 – 352
- [BZG 04] Benis, E. P. ; Zouros, T. J. M. ; Gorczyca, T. W. ; Gonzalez, A. D. ; Richard, P.: Elastic resonant and nonresonant differential scattering of quasifree electrons from B4+(1s) and B3+(1s(2)) ions. In: *Phys. Rev. A* **69** (2004), Nr. 5. – 052718

- [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), Nr. 2, S. 775–783
- [CF86] Cohen, J. S. ; Fiorentini, G.: Stripping of H<sup>-</sup> in low-energy collisions with antiprotons: Classical-trajectory Monte Carlo calculation. In: *Phys. Rev. A* **33** ((1986)), March, Nr. 3, S. 1590–1594
- [CM83] Crothers, D. S. F. ; McCann, J F.: Ionisation of atoms by ion impact. In: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **16** (1983), Nr. 17, 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
- [Cro82] Crothers, D. S. F.: Refined orthogonal variational treatment of continuum distorted waves. In: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **15** (1982), Nr. 13, S. 2061–2074
- [Dal53] Dalitz, R. H.: Analysis of  $\tau$ -meson data and the nature of the  $\tau$  meson. In: *Phil. Mag.* **44** (1953), S. 1068–80
- [DDE 04] DeKieviet, M. ; Dürr, M. ; Epp, S. ; Lang, F. ; Theis, M.: Source for atomic beams of metastable gases: Design and performance. In: *Review of Scientific Instruments* **75** (2004), February, Nr. 2
- [DDN 06] Dürr, M. ; Dimopoulou, C. ; Najjari, B. ; Dorn, A. ; Ullrich, J.: Three-Dimensional Images for Electron-Impact Single Ionization of He: Complete and Comprehensive (*e,2e*) Benchmark Data. In: *submitted to PRL* (2006)
- [Dem94] Demtröder, Wolfgang ; Heidelberg, Springer-Verlag B. (Hrsg.): *Experimentalphysik 1: Mechanik und Wärme*. Bd. 1. 1. 1994
- [DKS01] 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), Apr, Nr. 17, S. 3755–3758
- [DMA 94] Dörner, R. ; Mergel, V. ; Ali, R. ; Buck, U. ; Cocke, C. L. ; Froschauer, K. ; Jagutzki, O. ; Lencinas, S. ; Meyerhof, W. E. ; Nüttgens, S. ; Olson, R. E. ; Schmidt-Böcking, H. ; Spielberger, L. ; Tökesi, K. ; Ullrich, J. ; Unverzagt, M. ; Wu, W.: Electron-electron interaction in

- projectile ionization investigated by high resolution recoil ion momentum spectroscopy. In: *Physical Review Letters* **72** (1994), May, Nr. 20, S. 3166
- [DMF 04] Dimopoulou, C. ; Moshhammer, R. ; Fischer, D. ; Hohr, C. ; Dorn, A. ; Fainstein, P. D. ; Urrutia, J. R. Crespo L. ; Schroter, C. D. ; Kollmus, H. ; Mann, R. ; Hagmann, S. ; Ullrich, J.: Breakup of H<sub>2</sub> in Singly Ionizing Collisions with Fast Protons: Channel-Selective Low-Energy Electron Spectra. In: *Physical Review Letters* **93** (2004), Nr. 12, S. 123203
- [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
- [Dür03] Dürr, M.: *Eine Atomstrahlquelle für metastabile Edelgase und konzeptionelle Studien zum optischen Polarisieren von <sup>3</sup>He*, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diplomarbeit, Juni 2003
- [Dür06] Dürr, Martin: *Electron induced Break-up of Helium: Benchmark Experiments on a Dynamical Four-Body Coulomb System*, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Doktorarbeit, Juni 2006
- [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
- [Fis03] Fischer, Daniel: *Mehr-Teilchen-Dynamik in der Einfach- und Doppelionisation von Helium durch geladene Projektile*, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Doktorarbeit, Dezember 2003
- [FPR91] Fainstein, P. D. ; Ponce, V. H. ; Rivarola, R. D.: Two-centre effects in ionization by ion impact. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **24** (1991), Nr. 14, S. 3091–3119
- [FS83] Fischer, Charlotte F. ; Saha, H. P.: Multiconfiguration Hartree-Fock results with Breit-Pauli corrections for forbidden transitions in the 2p<sup>4</sup> configuration. In: *Phys. Rev. A* **28** (1983), Dec, Nr. 6, S. 3169–3178



- [GEK05] GEKON: GEKON Trading GmbH John-F.-Kennedystrasse 88 63457 Hanau, 2005
- [GMD93] Geddes, J. ; McCullough, R. W. ; Donnelly, A. ; Gilbody, H. B.: Dissociation of hydrogen in highfrequency discharges. In: *Plasma Sources Sci. Technol.* **2** (1993), S. 93–99
- [HMR05] Horner, D. A. ; McCurdy, C. W. ; Rescigno, T. N.: Electron-helium scattering in the S-wave model using exterior complex scaling. In: *Phys. Rev. A* **71** (2005), January, Nr. 1, S. 012701
- [HS63] Herman, F. ; Skillman, S.: *Atomic Structure Calculations*. New Jersey : Prentice-Hall, 1963
- [Ino71] Inokuti, M.: Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules - Bethe Theory Revisited. In: *Reviews of Modern Physics* **43** (1971), Nr. 3, S. 297–347
- [Jah02] Jahnke, T: *Entwicklung und Aufbau eines Gastargets aus metastabilem, spinpolarisierten He\**, Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt, Diplomarbeit, 2002
- [JKB05] Jentschura, Ulrich D. ; Kotochigova, Svetlana ; Bigot, Eric-Olivier L. ; Mohr, Peter J. ; Taylor, Barry N.: Precise Calculation of Transition Frequencies of Hydrogen and Deuterium Based on a Least-Squares Analysis. In: *Physical Review Letters* **95** (2005), Nr. 16, S. 163003
- [KMO02] Kollmus, H. ; Moshhammer, R. ; Olson, R. E. ; Hagmann, S. ; Schulz, M. ; Ullrich, J.: Simultaneous Projectile-Target Ionization: A Novel Approach to  $(e, 2e)$  Experiments on Ions. In: *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), March, Nr. 10, S. 103202
- [KS99] Koch, N. ; Steffens, E.: High intensity source for cold atomic hydrogen and deuterium beams. In: *Review of Scientific Instruments* **70** (1999), March, Nr. 3
- [Lah91] Lahmam-Bennani, A.: Recent Developments and Trends in  $(e, 2e)$  and  $(e, 3e)$  Studies. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **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

- [Lan02] Lang, F. M.: *Transversales Spinecho an einem atomaren Wasserstoffstrahl und spezielle Quellen für Atom- und Molekülstrahlen*, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Doktorarbeit, November 2002
- [LRAEH 68] Lisitano, G. ; R. A. Ellis, Jr. ; Hooke, W. M. ; Stix, T. H.: Production of Quiescent Discharge with High Electron Temperatures. In: *Review of Scientific Instruments* **39** (1968), Nr. 3, S. 295–297
- [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) band related processes. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **455** (1999), January, Nr. 1981, S. 349–383
- [MBR04] McCurdy, C W. ; Baertschy, M ; Rescigno, T N.: Solving the three-body Coulomb breakup problem using exterior complex scaling. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37** (2004), Nr. 17, S. R137–R187
- [MC70] McDowell, M. R. C. ; Coleman, J. P.: *Introduction to the Theory of Ion-Atom Collision*. North-Holland Publishing Co. - Amsterdam, 1970
- [McG97] McGuire, J. H.: *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions*. 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
- [MGD 93a] McCullough, R. W. ; Geddes, J. ; Donnelly, A. ; Liehr, M. ; Hughes, M. P. ; Gilbody, H. B.: A new microwave discharge source for reactive atom beams. In: *Meas. Sci. Technol.* **4** (1993), S. 79–82
- [MGD 93b] McCullough, R.W. ; Geddes, J. ; Donnelly, A. ; Liehr, M. ; Gilbody, H.B.: A new reactive atom beam source for accelerator target studies. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **79** (1993), S. 708–710
- [MHR02] McCurdy, C. W. ; Horner, D. A. ; Rescigno, T. N.: Time-dependent approach to collisional ionization using exterior complex scaling. In: *Phys. Rev. A* **65** (2002), April, Nr. 4, S. 042714
- [MI05] McCullough, R.W. ; Ichioka, T.: *Private Mitteilungen*. 2005. – Während der Vorbereitungsphase eines Experimentes wurde das Verhältnis  $H_2/H$  durch Ionisation mit einem Elektronenstrahl gemessen. Mit

Hilfe der bekannten Wirkungsquerschnitte für Einfachionisation von  $H$  und  $H_2$  und der bekannten Elektronenstrahlparameter konnte über  $N_i = N_e n \sigma \epsilon$  die Targetdichte bestimmt werden.  $N_i$ : Anzahl der Ionen,  $N_e$ : Anzahl der Elektronen,  $n$ : Targetdichte,  $\sigma$ : Wirkungsquerschnitt,  $\epsilon$ : Detektoreffizienz.

- [Mil88] Miller, D R.: Free Jet Sources. In: Scholes, G. (Hrsg.): *Atomic and Molecular Beam Methods* Bd. 1. Oxford University Press, 1988, S. 14 – 53
- [MMM92] Montenegro, E. C. ; Melo, W. S. ; Meyerhof, W. E. ; Depinho, A. G.: Separation of the Screening and Antiscreening Effects in the Electron Loss of He<sup>+</sup> on H<sub>2</sub> and He. In: *Physical Review Letters* **69** (1992), Nr. 21, S. 3033–3036
- [MMM94] Montenegro, E. C. ; Meyerhof, W. E. ; McGuire, J. H.: Role of two-center electron-electron interaction in projectile electron excitation and loss. In: *Advances in atomic, molecular, and optical physics* **34** (1994), S. 249
- [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<sup>92+</sup> Projectiles. In: *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997), S. 3621–3624
- [Mue96] Mueller, A.: Fundamentals of electron-ion interaction. In: *Hyperfine Interactions* **99** (1996), Feb., Nr. 1-3
- [MUS96] Moshhammer, R. ; Unverzagt, M. ; Schmitt, W. ; Ullrich, J. ; Schmidt-Böcking, H.: A 4 $\pi$  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
- [MW88] M Wutz, W W.: *Theorie und Praxis der Vakkumtechnik*. 4. Ausgabe. Friedr. Vieweg & Sohn, 1988
- [NHR00] Niering, M. ; Holzwarth, R. ; Reichert, J. ; Pokasov, P. ; Udem, Th. ; Weitz, M. ; Hänsch, T. W. ; Lemonde, P. ; Santarelli, G. ; Abgrall, M. ; Laurent, P. ; Salomon, C. ; Clairon, A.: Measurement of the Hydrogen 1S- 2S Transition Frequency by Phase Coherent Comparison with a

- Microwave Cesium Fountain Clock. In: *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000), Jun, Nr. 24, S. 5496–5499
- [OUSB89] Olson, R. E. ; Ullrich, J. ; Schmidt-Böcking, H.: Multiple-Ionization Collision Dynamics. In: *Phys. Rev. A* **39** (1989), Nr. 11, S. 5572–5583
- [PK98] Paolini, B. P. ; Khakoo, M. A.: An intense atomic hydrogen source with a movable nozzle output. In: *Review of Scientific Instruments* **69** (1998), September, Nr. 9
- [RBI99] Rescigno, T. N. ; Baertschy, M. ; Isaacs, W. A. ; McCurdy, C. W.: Collisional Breakup in a Quantum System of Three Charged Particles. In: *Science* **286** (1999), Nr. 5449, S. 2474–2479
- [RKM92] 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
- [Rut11] Rutherford, E.: The Scattering of  $\alpha$  and  $\beta$  Particles by Matter and the Structure of the Atom. In: *Phil. Mag.* **21** (1911), S. 669–688
- [Sch94] Schmitt, Wolfgang: *Entwicklung und Test eines Rückstoß ionen-Spektrometers für das interne Gastarget des ESR*, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt, Diplomarbeit, 1994
- [SDR97] Stolterfoht, N. ; DuBois, R. D. ; Rivarola, R. D.: *Electron Emission in Heavy ion-Atom Collisions*. Springer-Verlag Heidelberg, 1997
- [SH03] Steffens, Erhard ; Haeberli, Willy: Polarized gas targets. In: *Reports on Progress in Physics* **66** (2003), Nr. 11, S. 1887–1935
- [SMF03] 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), Nr. 6927, S. 48–50
- [SMF04] Schulz, M ; Moshhammer, R ; Fischer, D ; Ullrich, J: Two-particle versus three-particle interactions in single ionization of helium by ion impact. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37** (2004), Nr. 20, S. 4055–4067
- [SMM01] 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: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **34** (2001), S. L305–L311
- [SMS00] Schulz, M. ; Moshhammer, R. ; Schmitt, W. ; Kollmus, H. ; Mann, R. ; Hagmann, S. ; Olson, R. E. ; Ullrich, J.: Correlated three-electron continuum states in triple ionization by fast heavy-ion impact. In: *Phys. Rev. A* **6102** (2000), Nr. 2. – 022703
- [SS81] Slevin, J. ; Stirling, W.: Radio frequency atomic hydrogen beam source. In: *Review of Scientific Instruments* **52** (1981), November, Nr. 11, S. 1780–1782
- [TB98] Tschersich, K. G. ; von Bonin, V.: Formation of an atomic hydrogen beam by a hot capillary. In: *Journal of Applied Physics* **84** (1998), Nr. 8, S. 4065–4070
- [THM00] T., Weber ; H., Giessen ; M., Weckenbrock ; G., Urbasch ; A., Staudte ; L., Spielberger ; O., Jagutzki ; V., Mergel ; M., Vollmar ; R., Dörner: Correlated electron emission in multiphoton double ionization. In: *Nature* **405** (2000), June, S. 658–661
- [UMD97] Ullrich, J ; Moshhammer, R ; Dörner, R ; Jagutzki, O ; Mergel, V ; Schmidt-Böcking, H ; Spielberger, L: Recoil-ion momentum spectroscopy. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **30** (1997), Nr. 13, S. 2917–2974
- [UMD03] 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
- [US03] Ullrich, J. ; Shevelko, V.P.: *Many-Particle Quantum Dynamics in Atomic and Molecular*. Springer, 2003
- [VK98] Voitkiv, A B. ; Koval, A V.: Cross sections for hydrogen and helium ionization by impacts of fast highly charged ions. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **31** (1998), Februar, Nr. 3, S. 499 – 513
- [VN04] Voitkiv, A B. ; Najjari, B: Ionization of helium by relativistic highly charged ions within the symmetric eikonal approximation. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **37** (2004), Nr. 24, S. 4831–4848

- [VNU03] Voitkiv, A. B. ; Najjari, B ; Ullrich, J: On the higher-order effects in target single ionization by bare ions in the perturbative regime. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **36** (2003), Nr. 12, S. 2591–2609
- [Voi05] Voitkiv, A. B.: Eikonal model for projectile-electron excitation and loss in relativistic collisions. In: *Phys. Rev. A* **72** (2005), Nr. 6. – 062705
- [Wei34] Weizsäcker, C.F.: Ausstrahlung bei Stößen sehr schneller Elektronen. In: *Z. Phys.* **88** (1934), S. 612–625
- [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
- [WS82] Walraven, J. T. M. ; Silvera, I. F.: Helium-temperature beam source of atomic hydrogen. In: *Rev. Sci. Instrum.* **53** (1982), August, Nr. 8
- [WW67] Wise, H. ; Wood, B. J.: Reactive Collisions between Gas and Surface Atoms. In: *Advances in Atomic and Molecular Physics* **3** (1967), S. 291
- [WW86] van Wyngaarden, W. L. ; Walters, H. R. J.: Elastic scattering and excitation of the 1s to 2s and 1s2p transitions in atomic hydrogen by electrons to medium to high energies. In: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **19** (1986), Nr. 6, S. 929–968
- [WWA 94] Wu, W ; Wong, K L. ; Ali, R ; Chen, C Y. ; Cocke, C L. ; Frohne, V ; Giese, J P. ; Raphaelian, M ; Walch, B ; Dörner, R ; Mergel, V ; Schmidt-Böcking, H ; Meyerhof, W E.: Experimental separation of electron-electron and electron-nuclear contributions to ionization of fast hydrogenlike ions colliding with He. In: *Physical Review Letters* **72** (1994), May, Nr. 20, S. 3170