

# Inaugural - Dissertation

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

vorgelegt von  
Dipl.-Phys. Renate Hubele  
aus Siegen

Tag der mündlichen Prüfung: 19.07.2013



**Kinematisch vollständige  
und zustands-selektive Untersuchung  
der stoßinduzierten Einfachionisation  
von Lithium**

**Gutachter: Dr. Daniel Fischer  
Priv. Doz. Dr. Wolfgang Quint**

---

„It would be a poor thing to be an atom in a universe without  
physicists. A physicist is an atom's way of knowing about atoms“  
George Wald, Nobel Laureate 1967

---

## Zusammenfassung

Die Untersuchung stoßinduzierter atomarer Fragmentationsprozesse ermöglicht Einblicke in die Dynamik korrelierter Mehr-Teilchen-Systeme, deren theoretische Beschreibung bis heute eine der fundamentalsten Herausforderungen der Physik darstellt. Den sensitivsten Test theoretischer Modelle erlauben kinematisch vollständige Experimente, bei denen die Impulsbilanz aller beteiligter Teilchen vermessen wird. Bei der stoßinduzierten Ionisation von Helium wurden dabei überraschende Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment gefunden. In Rahmen dieser Arbeit wurde zum ersten Mal eine neuartige experimentelle Technik, ein sogenanntes MOT-ReMi, bestehend aus einem Reaktionsmikroskop (ReMi) in Kombination mit einer magneto-optischen Falle (MOT) zur Präparation und Kühlung des Targets, verwendet und erlaubt eine Verbesserung der Rückstoßionen-Impulsauflösung verglichen mit früheren Experimenten um den Faktor 2-3. Als Target wurde Lithium aufgrund seiner interessanten elektronischen Struktur gewählt. In den in dieser Arbeit durchgeführten Experimenten am Test-Speicherring TSR wurde die Einfachionisation von Lithium im Stoß mit 6 MeV Protonen sowie mit 24 MeV  $O^{8+}$ -Ionen studiert, was im Rahmen einer perturbativen Beschreibung einer sehr kleinen bzw. mittleren Störung entspricht. Dabei gelang es erstmals, vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte für ein Target anders als Helium zu vermessen, und darüber hinaus die Ionisation eines zustands-präparierten und polarisierten Targets zu untersuchen. Es wurden Charakteristika in den vollständig differentiellen Daten gefunden, die auf Eigenschaften der Anfangszustandswellenfunktionen des Targets zurückgeführt werden.

## Abstract

Studies of collision-induced atomic fragmentation processes provide an insight into the dynamics of correlated many-body-systems, which theoretical description still represents one of the most fundamental challenges in physics. Kinematically complete experiments, where the momentum balance of all involved particles is measured, provide the most stringent test of theoretical models. In such experiments, surprising discrepancies between theory and experiment were found in the collision-induced ionisation of helium. In this work, a novel experimental technique, a so-called MOTReMi, consisting of a reaction microscope (ReMi) in combination with a magneto-optical trap (MOT), was assembled and could improve the recoil-ion momentum resolution compared of previous experiments by a factor of 2-3. Lithium was chosen as a target due to its interesting electronic structure. The experiments described here were carried out at the test storage ring TSR, and the single ionisation of lithium by 6 MeV protons as well as 24 MeV  $O^{8+}$ -ion impact was studied, corresponding to a very small and medium perturbation of the system. For the first time, fully differential cross sections for the ionisation of a target other than helium became accessible. Moreover, studies of the ionisation of a state-prepared and pola-

---

rised target were possible. Characteristic structures are found in the fully differential data that can be traced back to properties of the wave functions of the initial state of the target.

# Inhaltsverzeichnis

<b>I. Einleitung</b>	<b>3</b>
1. Das atomare Drei-Körper-Problem	5
<b>II. Experimenteller Aufbau</b>	<b>13</b>
<b>2. Ionenspeicherring TSR</b>	<b>15</b>
2.1. Aufbau des TSR . . . . .	15
2.2. Dynamik der Ionen im Speicherring . . . . .	17
2.3. Erzeugung und Injektion der hochgeladenen Ionen . . . . .	19
2.4. Elektronenkühlung . . . . .	20
2.5. Erzeugung gepulster Ionenpakete . . . . .	20
2.6. Diagnostische Methoden am TSR . . . . .	21
<b>3. Reaktionsmikroskop</b>	<b>23</b>
3.1. Das Vakuumsystem . . . . .	24
3.2. Das Spektrometer . . . . .	27
3.3. Detektorsystem . . . . .	31
3.4. Impulsrekonstruktion . . . . .	34
<b>4. Präparation eines Targets</b>	<b>41</b>
4.1. Theoretische Grundlagen . . . . .	43
4.2. Eigenschaften von Lithium . . . . .	53
4.3. Das Lasersystem . . . . .	56
4.4. Eine 2D MOT als Atomstrahlquelle . . . . .	63
4.5. Die 3D MOT im Reaktionsmikroskop . . . . .	69
4.6. Charakterisierung des MOT-Targets . . . . .	79
<b>III. Photoionisation eines Lithium-Targets</b>	<b>95</b>
<b>5. UV-Photoionisation von Lithium</b>	<b>97</b>

<b>IV. Grundlegende Betrachtungen zu Ion-Atom-Stößen</b>	<b>107</b>
<b>6. Einführung in Ion-Atom-Stöße</b>	<b>109</b>
6.1. Stoßkinematik . . . . .	110
6.2. Dynamik der Stoßionisation . . . . .	114
6.3. Wirkungsquerschnitte der Stoßionisation . . . . .	119
6.4. Stoßinduzierte Einfachionisation am Beispiel eines Helium-Targets . .	121
<b>7. Theoretische Grundlagen</b>	<b>123</b>
7.1. Classical Trajectory Monte Carlo Simulation (CTMC) . . . . .	124
7.2. Störungstheoretische Rechnungen . . . . .	124
7.3. Nicht-perturbative Methoden . . . . .	132
<b>V. Einfachionisation von Lithium durch geladene Projektile</b>	<b>135</b>
<b>8. Reaktionskanäle der Einfachionisation von Lithium</b>	<b>139</b>
<b>9. Stoßdynamik der 1s, 2s und 2p-Ionisation</b>	<b>145</b>
<b>10.FDCS: Ein detailliertes Bild der Anfangszustandsabhängigkeit</b>	<b>153</b>
<b>VI. Zusammenfassung</b>	<b>161</b>
<b>11.Stoßinduzierte Einfachionisation von Lithium</b>	<b>163</b>
<b>VII.Anhang</b>	<b>169</b>
<b>A. Zeeman-Aufspaltung realer Atome</b>	<b>171</b>
<b>B. Relative Übergangswahrscheinlichkeiten für Lithium</b>	<b>177</b>
<b>C. Atomare Einheiten</b>	<b>179</b>



# **Teil I.**

## **Einleitung**



# 1. Das atomare Drei-Körper-Problem

Eine der fundamentalsten Herausforderungen der Physik ist die theoretische Beschreibung der Bewegung mehrerer, miteinander wechselwirkender Teilchen. Ist die Kraft zwischen den Teilchen bekannt, kann die Bewegungsgleichung eines solchen Systems zwar in aller Regel problemlos aufgestellt werden, doch bereits in der klassischen Mechanik existiert keine analytische Lösung für drei oder mehr beteiligte Teilchen. Dies ist als das Drei- (bzw. Mehr-) Körper-Problem bekannt, dessen Beschreibung auf das Jahr 1687 zurückgeht, als Isaak Newton in seiner „Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica“ [1] dieses Problem erstmals theoretisch untersuchte. Auch in der Quantenmechanik, in der die nicht-relativistische zeitliche und räumliche Entwicklung eines Systems durch die Schrödingergleichung gegeben ist, existiert keine analytische Lösung des Drei-Körper-Problems.

Zur Untersuchung der quantenmechanischen Mehr-Teilchen-Dynamik eignen sich atomare Streuprozesse, wie beispielsweise die Ionisation eines atomaren Targets durch den Beschuss mit einem geladenen Projektil, aus zwei Gründen hervorragend: Erstens kann die Anzahl und der Anfangszustand der beteiligten Teilchen sehr genau durch die Wahl und die Präparation von Projektil und Target kontrolliert werden. Zweitens wird die Dynamik solcher Systeme nahezu ausschließlich durch die Coulombwechselwirkung bestimmt, deren Potential sehr genau bekannt ist. Die Herausforderung liegt also allein darin, die Bewegungsgleichung, die das System im Rahmen der verwendeten Theorie exakt beschreibt, numerisch genau oder zumindest näherungsweise zu lösen.

Die erste quantenmechanische Behandlung der stoßinduzierten Ionisation stellte Hans Bethe bereits 1930 [2] vor, wobei er die von Max Born entwickelte störungstheoretische Methode [3] auf atomare Streuprozesse anwandte. Hierbei wird die Wechselwirkung zwischen Projektil und Targetatom als Störung behandelt, die quantitativ durch den Entwicklungsparameter der Störungsreihe,  $\eta = Z_P/v_P$ , bestimmt ist (dieser Entwicklungsparameter ist naturgemäß einheitenlos; in der in dieser Arbeit verwendeten Darstellung müssen aber atomare Einheiten für die Projektilladung  $Z_P$  und die Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  verwendet werden, um den richtigen Zahlenwert zu erhalten). Die von Bethe entwickelte Methode liefert in der Tat für kleine Störparameter  $\eta \ll 1$  in vielen Fällen hinreichend präzise Aussagen über die Wirkungsquerschnitte von Stoßionisationsprozessen. Bis heute wurden etliche andere perturbative und nicht-perturbative Rechnungen entwickelt, von denen die meisten auf Näherungen zur Beschreibung der Stoßprozesse beruhen.

Ein entscheidender Durchbruch gelang jedoch erst im Jahr 1999, als erstmals eine

numerisch exakte ab-initio Methode zur Lösung des Drei-Körper-Problems vorgestellt wurde. Mit dieser „exterior complex scaling“ (ECS)-Technik, die ohne Näherungen zu verwenden gegen das mathematisch exakte Ergebnis konvergiert, konnte eines der einfachsten Systeme, nämlich die Einfachionisation von Wasserstoff im Elektronenstoß, berechnet werden [4]. In der Folge wurden weitere exakte Methoden entwickelt, mit denen etwa die Photo-Doppelionisation von Helium behandelt werden konnte [5–7]. Eine Übertragung dieser Methoden auf Systeme mit ionischen Projektilen ist allerdings nicht ohne Weiteres möglich, da hierbei aufgrund der hohen Projektilmasse die Konvergenzkriterien nicht mehr erfüllt werden.

Von experimenteller Seite stellen vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte den sensitivsten Test für Rechnungen dar. Bei diesen Querschnitten wird der Endzustand in Abhängigkeit aller (voneinander unabhängigen) kinematischen Parameter dargestellt, also beispielsweise als Funktion des Energie- und Impulsübertrags vom Projektil und des Emissionsraumwinkels des Elektrons. Solche vollständig differentiellen Daten wurden erstmals 1969 von Ehrhardt et al. [8] veröffentlicht, wobei die Einfachionisation von Helium durch Elektronenstoß in einem sogenannten (e,2e)-Experiment untersucht wurde. Die dabei verwendete experimentelle Technik beruht auf der koinzidenten und energieaufgelösten Detektion des Projektils und des Targetelektrons, die jeweils in einem sehr kleinen Raumwinkelelement nachgewiesen werden. Um ein umfassendes Bild der Emissionscharakteristik der Elektronen zu erhalten, muss daher die mechanische Position der Detektoren schrittweise geändert werden. Diese Methode ist wiederum nicht auf den Ionenstoß anwendbar. Grund hierfür ist die durch die Streuung bedingte extrem kleine Änderung der Flugbahn für schwere Projektilen, die sich nur mit großem Aufwand und mit geringer Auflösung direkt messen lässt (siehe beispielsweise [9–11]).

Erst mit der Entwicklung des Reaktionsmikroskops durch Moshhammer und Ullrich [12] war es möglich, kinematisch vollständige Untersuchungen der Ionisation eines atomaren Targets durch Ionenstoß durchzuführen. Bei dieser Technik wird die Änderung der Projektilflugbahn nicht direkt vermessen, sondern über die Bestimmung der Impulse des ionisierten Elektrons und des Targettrumpfes mit Hilfe der Impulserhaltung rekonstruiert. Darüber hinaus bieten Reaktionsmikroskope gegenüber konventioneller Elektronenspektroskopie den Vorteil, dass die Impulse der Targetfragmente simultan über den vollen Raumwinkel gemessen werden können, was eine Erhöhung der Koinzidenzrate um etliche Größenordnungen zu Folge hat.

Die erste kinematisch vollständige Untersuchung der durch Ionenstoß induzierten Einfach- und Doppelionisation wurde 1996 vorgestellt [14], wobei hier die Wirkungsquerschnitte noch bezüglich der Impulskomponenten senkrecht zur Strahlrichtung integriert waren. Seither wurde diese Technik in etlichen Experimenten zur Einfach- [13, 15, 16], Doppel- [17, 18] und Dreifachionisation [19], zum Elektroneneinfang [20, 21], zur simultanen Projektil- und Targetionisation [22, 23] und zur Transfer-

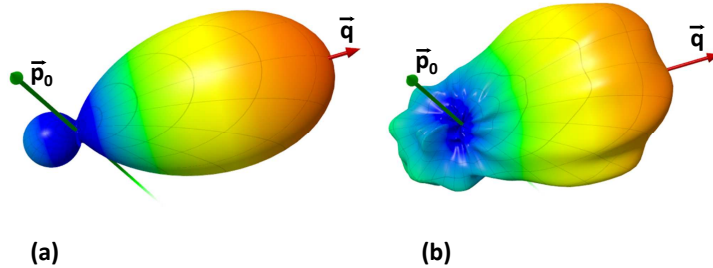


Abbildung 1.1.: (a) theoretisch und (b) experimentell ermittelter vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt der Stoßionisation eines Helium-Targets durch  $C^{6+}$ -Ionen ( $\eta = 0.1$ ). Gezeigt ist die Winkelverteilung der emittierten Elektronen bei einer Elektronenenergie von  $E_e = 6.5$  eV und einem Impulsübertrag von  $q = 0.75$  a.u.. Abbildung nach [13].

Ionisation [24, 25] eingesetzt.

Die Untersuchung vollständig differentieller Wirkungsquerschnitte zur Einfachionisation [15, 26] brachte dabei einige Überraschungen: Bereits bei kleinen Störungen, bei denen erwartet worden war, dass schon die Bornsche Näherung eine zufriedenstellende Beschreibung der Stoßdynamik darstellen sollte, traten unter bestimmten Emissionswinkeln des Elektrons erhebliche Diskrepanzen zwischen der Theorie und den experimentellen Daten auf (Abbildung 1.1). Bei höheren Störungen zeigten sich noch deutlich größere Unterschiede sowohl in der Form als auch in der Größe der vollständig differentiellen Spektren [15]. Diese waren insbesondere deshalb nicht erwartet worden, da für die Wirkungsquerschnitte, die lediglich differentiell bezüglich der Elektronenimpulse waren, bereits eine hervorragende Übereinstimmung mit perturbativen Rechnungen der CDW-EIS-Methode (aus dem Englischen, continuum distorted wave-eikonal initial state, siehe Kapitel 7.2 dieser Arbeit) berichtet worden war [27, 28]. Sobald jedoch die Impulsbilanz zwischen allen drei Stoßpartnern betrachtet wird, treten substantielle Unterschiede zwischen Rechnungen und experimentellen Daten auf. Diese bestehenden Diskrepanzen zwischen experimentellen Daten sowie den verschiedensten theoretischen Betrachtungen dieser Stoßsysteme wurden in einer ganzen Reihe von Veröffentlichungen diskutiert (siehe unter anderem [15, 26, 29–79]), wobei unterschiedliche Erklärungsansätze in Betracht gezogen wurden.

Schulz et al. schlugen vor [13], dass die Streuung des Projektils am Targetkern die Emissionscharakteristik, insbesondere bei kleiner Störung, signifikant beeinflusst.

sen kann. In der Tat konnten die experimentellen Daten gut reproduziert werden, wenn die in der ersten Bornschen Näherung berechneten Ionisationsquerschnitte mit dem klassischen Rutherford-Querschnitt für die Kern-Kern-Streuung gefaltet wurden [67]. Allerdings stellt dieser Ansatz keine korrekte quantenmechanische Behandlung des Drei-Körper-Problems dar, da bei dieser Faltung Interferenzen zwischen verschiedenen Amplituden, die zur Streuung beitragen, vernachlässigt werden. In der Folge wurde aber die Kern-Kern-Wechselwirkung in unterschiedlichsten Modellen quantenmechanisch berücksichtigt. Allerdings war der beobachtete Einfluss auf die Wirkungsquerschnitte (siehe beispielsweise [45, 68, 74]) erheblich kleiner, als dies im Vergleich mit den experimentellen Daten zu erwarten gewesen wäre. Nur in einem Fall, im Rahmen einer zeitabhängigen Rechnung mit gekoppelten Kanälen (TDCC), konnte die experimentell beobachtete Form der Wirkungsquerschnitte zumindest qualitativ reproduziert werden [70].

Des Weiteren wurde untersucht, inwieweit die Auflösung einen Einfluss auf die experimentellen Daten hat. Fiol et al. [45] erreichten eine gute Übereinstimmung für die Daten der kleinen Störung durch eine Faltung, die durch die thermische Impulsbreite der Targetatome begründet wurde. Um dieses Ergebnis zu erhalten, wurde jedoch eine Target-Temperatur von 16 K angenommen, die nicht mit der experimentell beobachteten Temperatur von weniger als 2 K konsistent war [71]. Eine genauere Berücksichtigung der experimentellen Effekte mit Hilfe einer aufwändigen Monte-Carlo-Methode [54] zeigte, dass die Auflösung zwar einen deutlichen Einfluss auf die differentiellen Wirkungsquerschnitte hat und somit beim Vergleich zwischen Theorie und Experiment berücksichtigt werden muss, die Diskrepanzen konnten damit aber nicht erklärt werden.

Ein weiterer Faktor, der seit kurzem als Erklärung der auftretenden Unterschiede diskutiert wird, ist die endliche Kohärenzlänge der Projektil-Materiewelle (siehe hierzu auch [80]). Die Kohärenzlänge gibt dabei den maximalen Abstand zweier Punkte im Raum an, zwischen denen die Phasendifferenz der Projektilwelle im Laufe der Zeit weniger als  $\pi/2$  fluktuiert. Dies entspricht dem maximalen Spaltabstand eines Doppelschlitzes, bei dem noch eine Interferenz der Welle beobachtet werden kann. Da die (transversale) Kohärenzlänge proportional zum (lokalen) Divergenzwinkel und der deBroglie-Wellenlänge ist (die bei Ionenenergien von MeV/u typischerweise deutlich kleiner als  $10^{-3}$  a.u. ist), ergibt sich für Projektil-Ionen eine Kohärenzlänge, die häufig nur einem Bruchteil der Größe des Targetatoms entspricht. Im Falle des in [13] vorgestellten Experimentes betrug die Kohärenzlänge etwa  $10^{-3}$  a.u.. Im Gegensatz dazu wird in allen quantenmechanischen Beschreibungen das Projektil jedoch als eine vollständig kohärente Welle angenommen.

Hinweise darauf, dass die Kohärenzeigenschaften des Projektils tatsächlich einen Einfluss auf Streuquerschnitte haben könnten, ergaben sich zunächst bei der Untersuchung der Ionisation im  $p + H_2$  -Stoß [81]. In diesem Experiment wurde die Projektil-Kohärenzlänge durch einen Kollimator, der die Stahldivergenz beeinflusst, modifiziert, ähnlich wie es Young bereits 1802 in seinem optischen Doppelspaltex-

---

periment durchführte [82]. Je nachdem, ob die Kohärenzlänge kleiner oder größer war als der Abstand der Atome im  $H_2$ -Targetmolekül, konnte der Streuquerschnitt besser durch eine Rechnung für ein atomares Target oder für ein molekulares Target, bei dem Zwei-Zentren-Interferenz auftritt, wiedergegeben werden. Auch für atomare Targets wurde der Einfluss der Projektilkohärenz untersucht. Bei der Ionisation eines Helium-Targets durch 3 MeV Protonen [75], deren Kohärenzlänge mit mehr als 4 a.u. deutlich größer war als in dem früheren Experiment [13], zeigte es sich, dass die ermittelten Wirkungsquerschnitte wesentlich besser durch eine vollständig quantenmechanische Berechnung wiedergegeben werden können.

In einem weiteren Experiment wurde nicht die Kohärenzlänge geändert, sondern der beitragende Stoßparameterbereich durch die Wahl unterschiedlicher Prozesse variiert [83]. Bei der Elektronenemission in der Transferionisation im Stoß von 16 MeV/u  $O^{7+}$  mit He wurde die Signatur von Interferenzen beobachtet, die bei der Einfachionisation im gleichen System nicht vorhanden waren. Dies wurde damit begründet, dass die Stoßparameter bei der Transferionisation kleiner als die Projektil-Kohärenzlänge waren, wohingegen bei der Einfachionisation, bei der im Allgemeinen die Stoßparameter deutlich größer sind als bei der Transferionisation, diese Bedingung nicht erfüllt war.

Trotz der inzwischen zahlreichen Hinweise, dass die Kohärenzlänge des Projektils einen Einfluss auf die Stoßdynamik haben könnte, ist zum jetzigen Zeitpunkt keineswegs geklärt, inwieweit diese endliche Kohärenzlänge für die beobachteten Diskrepanzen zwischen Experimenten und Rechnung verantwortlich ist. Hierzu ist es insbesondere notwendig, dass die Projektilkohärenz in den Rechenmodellen berücksichtigt wird, was bis heute bei keiner einzigen Rechnung der Fall ist.

Ein zusätzliches Defizit bei der theoretischen Beschreibung der oben diskutierten Ion-Helium-Stöße ergibt sich durch die Verwendung vereinfachter Target-Anfangszustände. Einerseits kann der Zwei-Elektronen-Grundzustand des Heliums generell nur angenähert werden, und andererseits erhöht die Benutzung eines korrelierten Zustands den Rechenaufwand erheblich. Deshalb ist die Elektronenkorrelation bis auf wenige Ausnahmen (beispielsweise [62]) in den Rechnungen meist nicht explizit berücksichtigt, sondern das Target wird etwa durch Hartree-Fock-Zustände beschrieben. Um dieses Problem zu umgehen, wäre es wünschenswert, auch experimentell ein reines Drei-Körper-System zu untersuchen, also die Stoßionisation von atomarem Wasserstoff. Allerdings ist es bisher trotz erheblicher Anstrengungen [84, 85] nicht gelungen, vollständig differentielle Daten für ein atomares Wasserstoff-Target zu messen.

Ziel der vorliegenden Doktorarbeit war es, die Stoßionisation von Lithium kinematisch vollständig zu untersuchen, und so zum ersten Mal hochaufgelöste, experimentelle, vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für ein Target anders als Helium zu gewinnen. Lithium bietet sich aus mehreren Gründen hierfür an: Erstens hat Lithium mit seinen drei Elektronen eine verhältnismäßig einfache Struktur. Außerdem

kann angenommen werden, dass bei vielen Prozessen die elektronische Korrelation für das einzelne Valenzelektron ganz vernachlässigt werden kann. In dieser Hinsicht ist das Target also „Wasserstoff-ähnlich“. Zweitens kann Lithium lasergekühlt und in einer magneto-optischen Falle (MOT, aus dem Englischen, magneto-optical trap) gespeichert werden. Da die erreichbare Target-Temperatur in einer Lithium-MOT um etwa zwei Größenordnungen niedriger als in konventionell verwendeten Gasjets ist, kann idealerweise die Impulsauflösung, sofern sie bisher durch die Temperatur begrenzt war, um bis zu einer Größenordnung verbessert werden. Drittens kann das Target leicht mit Lasern angeregt werden, da die elektronischen Anregungsenergien von Lithium im optischen Bereich liegen, was erstmals die Gewinnung von zustandsselektiven differentiellen Wirkungsquerschnitten erlaubt.

Hierzu wurde ein neuartiger experimenteller Aufbau verwendet, das sogenannte PRIOC-Experiment, „PRrecision studies on IOn-atom Collisions“, der erstmals drei etablierte anspruchsvolle Techniken in einem Aufbau vereint: Ein Reaktionsmikroskop zur Bestimmung der Impulse der ionisierten Elektronen und des Rückstoßions; eine magneto-optische Falle zur Präparation des kalten Lithium-Targets; und ein Ionenspeicherung mit dem der Projektil-Ionenstrahl bereitgestellt wird. Neben den bereits oben erwähnten hervorragenden Eigenschaften der ersten beiden Techniken, bietet der Speicherring wesentliche Vorteile gegenüber „single-pass“ Experimenten: Einerseits sind extrem hohe Strahlströme erreichbar (je nach Ionensorte mehr als 1 mA), und andererseits können extrem geringe Strahl-Emittanzen durch die im Speicherring verwendeten Kühltechniken realisiert werden. Diese geringen Emittanzen resultieren wiederum in verhältnismäßig hohen Kohärenzlängen der quantenmechanischen Projektilwellen.

Die Kombination dieser drei Techniken stellt experimentell eine enorme Herausforderung dar. In der Vergangenheit wurde bereits eine MOT in einem Speicherring betrieben [86]. Auch wurde schon ein Reaktionsmikroskop mit einem Speicherring kombiniert [18, 23, 83, 87]. Vor dieser Arbeit wurde aber kein MOTReMi, also die Kombination eines Reaktionsmikroskops mit einem MOT-Target, erfolgreich eingesetzt. Zwar ist es schon vor mehr als zehn Jahren gelungen, Ionisationsprozesse von in MOTs gespeicherten Atomen mit Rückstoßionen-Impulsspektroskopie in sog. MOTRims-Appaturen durchzuführen [88–93], die koinzidente Detektion von Elektronen war aber aufgrund der für die Elektronenspektroskopie inkompatiblen MOT-Magnetfelder nicht möglich. Diese Schwierigkeit konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeit erstmals überwunden werden.

Der Aufbau dieser Arbeit ist wie folgt: In Teil II wird eine ausführliche Beschreibung des experimentellen Aufbaus, bestehend aus dem Ionenspeicherring, dem Reaktionsmikroskop und der magneto-optische Falle, gegeben. Anschließend wird in Teil III eine Messung zur Kalibrierung des Aufbaus durch Photoionisation eines angeregten Lithium-Targets vorgestellt. Im folgenden Teil IV wird ein kurzer Überblick über die Dynamik von Stoßreaktionen und die zum Vergleich der experimentellen



---

Daten verwendeten theoretischen Modelle gegeben, bevor im Anschluss in Teil V Ergebnisse der Stoßionisation von Lithium durch 6 MeV Protonen und 24 MeV  $O^{8+}$ -Ionen diskutiert wird. Diese Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung in Teil VI.



# **Teil II.**

## **Experimenteller Aufbau**



## 2. Ionenspeicherring TSR

Obwohl Streuexperimente geladener Projektile seit den ersten Experimenten von Rutherford 1911 [94] intensiv erforscht werden, sind kinematisch vollständige Experimente zur Ionisation neutraler Atome erst seit einigen Jahren möglich [95]. Während die Mehrzahl dieser Experimente in „single-pass“-Konfigurationen durchgeführt wurden, gibt es Experimente an Ionenspeicherringen erst seit Kurzem. Die Verwendung eines gespeicherten Ionenstrahles bietet hierbei einige Vorteile: Durch eine Mehrfachinjektion lassen sich einerseits höhere Ionenströme als durch einen Beschleuniger alleine realisieren und damit bieten sich hervorragende Bedingungen für Reaktionen mit kleinen Wirkungsquerschnitten. Zudem ist die Impulsunschärfe  $\Delta p/p$ , Emittanz und Strahlgröße eines Ionenstrahles im Speicherring deutlich kleiner und erlaubt daher eine verbesserte Auflösung der untersuchten Reaktionen.

Im Folgenden soll eine kurze Einführung über den verwendeten Ionenspeicherring sowie wichtige Parameter der Speicherringphysik gegeben werden, für eine detaillierte Beschreibung sei der Leser etwa auf [96] verwiesen.

### 2.1. Aufbau des TSR

Der Testspeicherring TSR am Max-Planck-Institut für Kernphysik wurde 1988 in Betrieb genommen und lieferte seitdem bis zu seinem Abschalten Ende 2012 gespeicherte Ionen für eine Vielzahl von Experimenten (siehe unter anderem [23, 97, 98]). Ein schematischer Aufbau sowie eine Photographie des Speicherringes sind in Abbildung 2.1 und 2.2 zu finden.

Der Umfang des TSR beträgt  $s = 55.4$  m, der sich in vier lineare Strecken von jeweils 9.5 m sowie vier Ekelemente unterteilen lässt. Zwei Dipolmagnete in jedem Eckstück sorgen für eine Ablenkung des Ionenstrahles um jeweils  $45^\circ$ , wobei ein maximales Magnetfeld von 1.3 T einen Krümmungsradius von  $\rho = 1.15$  m bewirkt. Zur horizontalen und vertikalen Fokussierung der Ionen werden insgesamt 20 Quadrupolmagnete verwendet, von denen im Standardbetrieb des TSR immer vier Magnete von einem Netzteil versorgt und als Quadrupolfamilie bezeichnet werden. Diese sind so angeordnet, dass sich vier Fokussierungsperioden definieren lassen, die sich aus einem Ekelement und jeweils einem halben geraden Stück vor und nach den Dipolen zusammensetzen. Angrenzende Fokussierungsperioden sind antisymmetrisch. Dies führt zu einer Superperiodizität des Ringes von 2 (das heißt, die sich über den Ring verändernden Strahlparameter wiederholen sich nach einem halben Umlauf).

## 2. Ionenspeicherring TSR

---

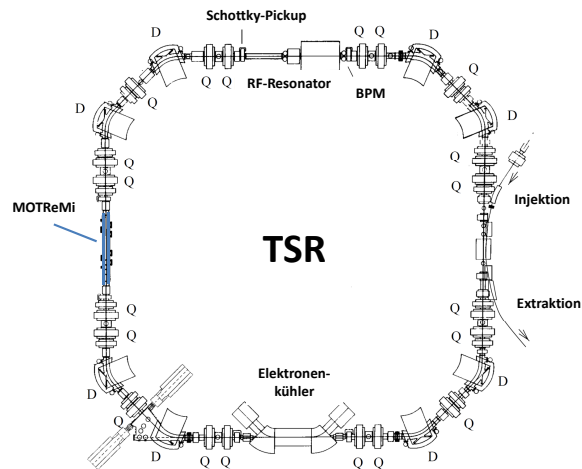


Abbildung 2.1.: Schematischer Überblick des TSR mit den Dipolmagneten (D), Quadrupolmagneten (Q), sowie einigen Komponenten der Diagnostik und Elektronenkühlung. Die Position des PRIOC MOTReMi-Experimentes befindet sich hier auf der linken Seite. Abbildung nach [96].

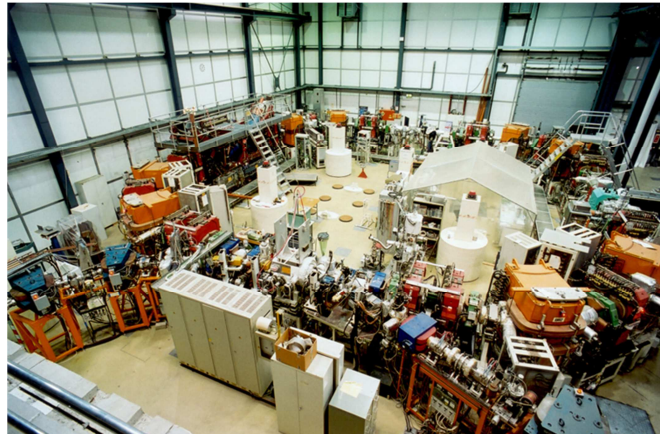


Abbildung 2.2.: Photographie des TSR Speicherringes. Das Injektionsstrahlrohr befindet sich vorne rechts. Links im Bild ist der Elektronenkühler, während die Position des PRIOC-Experimentes (nicht im Bild) an der Hallenrückseite ist. Abbildung aus [96].

Die linearen Abschnitte des TSR sind nach ihrer jeweiligen Funktion gegliedert. Während im ersten Areal die Strahlrohre zur Injektion sowie Extraktion der Ionen aufgebaut sind, befindet sich im zweiten Teilstück der Elektronenkühler. Im anschließenden Abschnitt ist der Einbau experimenteller Kammern vorgesehen, unter anderem das in dieser Arbeit vorgestellte PRIOC-Experiment. Im letzten Areal des TSR kommen verschiedene diagnostische Verfahren zur Anwendung, die eine Überwachung des Strahlprofils ermöglichen.

Im Testspeicherring lassen sich Ionen bis zu einem Ladungszustand von  $\text{Au}^{50+}$  speichern, wobei typische Werte des Ladungs- zu Massenverhältnis  $Z/A = 1/2$  sind, die bis zu Energien von  $30 \text{ MeV u}^{-1}$  gespeichert werden können. Ein wichtiger Parameter ist hierbei die Steifigkeit, die sich aus dem Quotienten des Ionenimpulses  $p_P$  über der Ladung  $Q$  definiert,  $B_\rho = p_P/Q$ . Die maximale Steifigkeit, bis zu der Ionen in den Ring eingespeist werden können, ist dabei durch die maximale Magnetfeldstärke der Dipolmagnete gegeben und beträgt  $B_{\rho,max} = B_{max} \cdot \rho = 1.5 \text{ T m}$ .

Die Lebensdauer der gespeicherten Ionen hängt von den Wahrscheinlichkeiten der verschiedenen Verlustmechanismen ab, bei denen die Ionen mit Teilchen im Restgas des Speicherrings und dem Elektronenkühler wechselwirken. Die drei wesentlichen Verlustprozesse sind dabei Coulomb-Streuung sowie Elektroneneinfang und -stripping. Je nach Ionensorte und Energie haben diese Prozesse ganz unterschiedliche Wirkungsquerschnitte. Bei einem Restgasdruck im unteren  $10^{-11}$  mbar-Bereich ergeben sich Lebensdauern zwischen wenigen Sekunden bis hin zu mehreren Tagen. In Tabelle 2.1 findet sich eine Zusammenstellung einiger Ionensorten sowie deren maximaler Energien, Lebensdauern und Intensitäten.

## 2.2. Dynamik der Ionen im Speicherring

Die Bewegung der Ionen im Speicherring wird in den Koordinaten  $(x, y, s)$  angegeben, wobei  $x, y$  die transversale Abweichung im Bezug auf eine ideale Sollbahn angeben und  $s$  die longitudinale Position im Ring festlegt. Die Koordinate  $s$  wird als Distanz zur Mitte des vierten TSR-Abschnittes angegeben, so dass sich die Position des Reaktionsmikroskops im dritten Teilstück bei etwa  $s = 42 \text{ m}$  befindet.

Eine transversale Impulskomponente der Ionen bewirkt eine Bewegung aus der Sollbahn hinaus und ohne die Fokussierung der Quadrupolmagnete würde dies zu einem Verlust des geladenen Teilchens führen. Die Kraft, die ein Quadrupolmagnet auf ein Ion ausübt, ist proportional zu dessen Auslenkung und ruft somit eine Schwingung des Teilchens um die Sollbahn hervor, die sogenannte Betatron-Schwingung. Amplitude und Phase dieser Schwingung hängen dabei aufgrund der Anordnung der fokussierenden Elemente vom Ort im Speicherring ab.

Zur Beschreibung der Dynamik des Ionenstrahles werden die Phasenraum-Koordinaten  $x$  und  $x'$  benutzt. Die Auslenkung der Betatron-Schwingung definiert hierbei die Koordinate  $x' = \frac{dx(s)}{ds} = \frac{p_x}{p_{||}}$ , wobei  $p_{||}$  der longitudinale und  $p_x$  der Ionenimpuls in

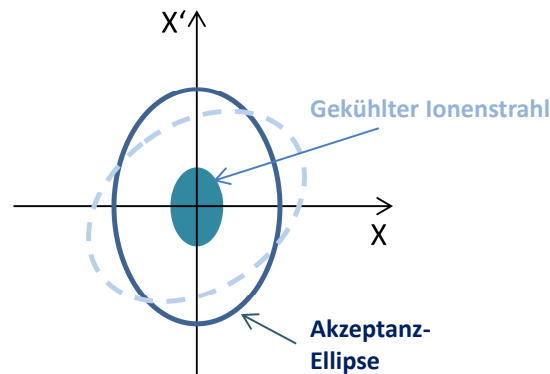


Abbildung 2.3.: Akzeptanzellipse der Ionenbewegung im Speicherring. Abbildung aus [87].

horizontaler Richtung ist. Die Bewegung eines Ions findet nun entlang einer Ellipse statt (siehe Abbildung 2.3), deren Form sich zwar in Abhängigkeit von  $s$  ändert, der Flächeninhalt  $A$ , sowie die darüber definierte Einteilchen-Emittanz  $\epsilon_{1x} = A/\pi$ , bleibt jedoch konstant für jedes Ion. Die größtmögliche Emittanz des Speicherringes nennt sich Akzeptanz und ist im TSR mit etwa 100 mm mrad gegeben.

Die Emittanz des gesamten Ionenstrahls ist definiert durch die Emittanz eines einzelnen Ions an Position  $x = \sigma_x$ , wobei  $\sigma_x$  der Standardabweichung der gaußförmigen Ortsbreite des Ionenstrahles entspricht (die sich über den Verlauf des Ringes ändert) und  $\sigma_x = \sqrt{\epsilon_x \beta_x}$  gilt. Die Beta-Funktionen  $\beta_{x,y}$  sind dabei durch die Stärke der Quadrupolmagnete gegeben und für jede Position des TSR bekannt. Aus der Messung der Strahlbreite lässt sich damit die Emittanz berechnen. Für einen gekühlten Ionenstrahl ist die Emittanz typischerweise etwa  $\epsilon = 0.05$  mm mrad.

Ionen im Speicherring bewegen sich um eine geschlossene Bahn, deren Nullpunkt nicht notwendigerweise mit der Sollbahn übereinstimmen muss. Die Flugbahn kann um einen Wert  $x_D$  zur Idealbahn versetzt sein, ohne dass die Ionen verlorengehen, wobei sich der Strahlversatz aus der Dispersion  $D$  des Speicherringes und der longitudinalen Impulsabweichung der Ionen zum Sollimpuls  $\Delta p_P/p_P$  ergibt,  $x_D = D \cdot \Delta p_P/p_P$ . Die Dispersion ist wie die Betafunktion ein Parameter des Ringes und kann für jeden Ort  $s$  im Strahlrohr angegeben werden.



Ionensorte	Energie [MeV]	Lebensdauer [s]	Intensität [ $\mu\text{A}$ ]
proton, $H^+$	21	220000	1000
$^{16}\text{O}^{8+}$	60	1800	1
$^{16}\text{O}^{8+}$	24	250	1
$^{12}\text{C}^{6+}$	73	1700	1000
$^{32}\text{S}^{16+}$	195	450	1500
$^{56}\text{Fe}^{23+}$	260	74	128
$^{58}\text{Ni}^{25+}$	342	60	600
$^{63}\text{Cu}^{26+}$	510	122	100
$^{74}\text{Ge}^{28+}$	365	45	110
$^{80}\text{Se}^{25+}$	480	204	100
$^{197}\text{Au}^{50+}$	695	3	3

Tabelle 2.1.: Lebensdauern und Intensitäten einiger Ionensorten im TSR. Tabelle aus [99].

## 2.3. Erzeugung und Injektion der hochgeladenen Ionen

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Experimente wurden die in einer Ionenquelle (einen Überblick über die verschiedenen Quellen am MPIK findet sich unter [100]) erzeugten, einfach negativ geladenen Ionen in einem Tandem-Van-de-Graaff-Beschleuniger mit bis zu  $U_a = 12$  MV beschleunigt [101]. Anschließend werden die schnellen Ionen durch eine dünne Folie oder eine Stickstoff-Gaszelle geschossen und verlieren durch die Wechselwirkung mit den jeweiligen Atomen Elektronen. Dadurch findet ein weiterer Energieübertrag von  $(1+q)U_a$  auf die Ionen statt. Durch die Verwendung mehrere Folientargets vor und hinter dem Nachbeschleuniger können Ladungszustände von bis zu  $^{197}\text{Au}^{51+}$  erzeugt werden.

Die Injektion der Ionen in den Speicherring erfolgt über mehrere Magnete sowie ein elektrostatisches Septum. Dazu muss die Sollbahn der Ionen im Ring kurzzeitig zur Bahn der injizierten Teilchen hin verschoben werden, um die Betatron-Oszillationen möglichst gering zu halten. Sobald sich der Ionenpuls in der Umlaufbahn des Speicherringes befindet, wird das Feld dieser sogenannten Bumpermagnete zügig heruntergefahren, so dass die Amplituden der Betatron-Oszillation der injizierten Teilchen während dieser Multiturn-Injektion vergrößert werden, bis der Phasenraum des Speicherringes gefüllt ist.

## 2.4. Elektronenkühlung

Der horizontale Durchmesser des gespeicherten Ionenstrahles beträgt typischerweise 40 mm und entspricht einer horizontalen Strahltemperatur von mehreren  $10^6$  K. Um diese Temperatur zu reduzieren, können mehrere Kühlverfahren angewendet werden, unter anderem Laserkühlung oder die hier verwendete Elektronenkühlung. Dabei wird ein kalter Elektronenstrahl unter Verwendung von ortsabhängigen Magnetfeldern mit dem Ionenstrahl überlagert und kühlt diesen über Coulomb-Wechselwirkungen ab, indem die Ionen kinetische Energie an die kalten Elektronen abgeben, bevor diese wieder zum Kollektor geführt werden. Die Kühlkraft hängt dabei von der relativen Geschwindigkeit beider Strahlen ab. Dem entgegen wirken Wechselwirkungen der Ionen im Strahl untereinander, so dass sich nach mehreren  $10^5$  Umläufen ein Gleichgewicht der Kühl- und Heizraten im Ionenstrahl einstellt.

Der gekühlte Ionenstrahl besitzt nun eine geringere Emittanz und nimmt damit im Phasenraum (siehe Abbildung 2.3) eine kleinere Fläche ein. Der freiwerdende Phasenraum kann nun mit einer erneuten Multiturn-Injektion aufgefüllt werden, wobei dieser Prozess viele Male wiederholt werden kann (ECOOL stacking). Mit dieser Methode lassen sich Ionenströme von bis zu 1.5 mA erreichen, wobei der limitierende Faktor der Stromstärke die Lebensdauer der jeweiligen Ionensorte darstellt (siehe hierzu auch Tabelle 2.1). Aus der Emittanz des gekühlten Ionenstrahles ergibt sich der Durchmesser des Strahles von etwa 1 mm.

Eine ausführliche Beschreibung der Elektronenkühlung ist in [102] zu finden.

## 2.5. Erzeugung gepulster Ionenpakete

Zur Untersuchung atomarer Ionisationsprozesse ist eine Information über den Reaktionszeitpunkt von Nöten, die durch einen kontinuierlichen Strahl für reine Target-Ionisationsprozesse nicht gegeben werden kann. Es ist jedoch möglich, die umlaufenden Ionen im Speicherring in kurze Pakete, sogenannte Bunche, zu bündeln, indem in einem Resonator eine Radiofrequenz von einigen MHz und einer Maximalspannung von  $U_{HF,max} = 5$  kV angelegt wird.

Je nach Position der Ionen im Bezug auf den Nulldurchgang der Radiofrequenz im Resonator werden die geladenen Teilchen beschleunigt oder abgebremst, während ein Ion, das zum Zeitpunkt des Nulldurchganges der Frequenz den Resonator passiert, unbeeinflusst bleibt. Beträgt die Frequenz des Resonators gerade ein Vielfaches der Umlauffrequenz der Ionen im Ring,  $\nu_{HF} = h \cdot \nu_0$ , ergeben sich Ionenpakete entlang der Ionenflugbahn mit einer Dauer von wenigen ns, wobei  $h$  die Anzahl der Bunche pro Umlauf angibt.

Ändert sich die Geschwindigkeit der Ionen durch eine Erhöhung der HF-Frequenz, ergibt sich ein geänderter Strahlversatz des Ionenstrahles im Ring. Um diesen zu verhindern, muss die Magnetfeldstärke der Dipolmagnete angepasst werden. Auf

diese Weise kann der Ionenstrahl beschleunigt oder, im Falle abnehmender HF-Frequenzen, abgebremst werden (siehe hierzu [99]).

## 2.6. Diagnostische Methoden am TSR

Neben dem Resonator zur Bunch-Erzeugung sind im vierten Abschnitt des TSR verschiedene Systeme zur Strahldiagnostik untergebracht, die eine Kontrolle der verschiedenen Parameter des Ionenstrahles in-situ ermöglichen.

Zur Positionsbestimmung werden mehrere „Pick-Up“-Monitore verwendet, die im Wesentlichen aus zwei Leiterplatten bestehen, in denen der Ionenstrahl proportional zum Abstand eine Spannung induziert.

Das Profil des Ionenstrahles kann mit dem Restgas-Strahlprofil-Monitor (BPM, aus dem Englischen, beam profile monitor) gemessen werden, der aus zwei Leiterplatten besteht und an denen eine Hochspannung angelegt wird. Durch den Strahl ionisiertes Restgas wird durch das angelegte Feld zu den geladenen Platten gezogen und detektiert, wobei die Anzahl der ionisierten Teilchen proportional zur Dichteverteilung des Ionenstrahles ist und so einen Rückschluss auf das Dichteprofil des Ionenstrahles ermöglicht.

Weitere Messmethoden zur Strahldiagnose umfassen einen Stromwandler zur Messung des Ionenstromes, sowie ein Schottky-Pickup zur Kontrolle der Umlauffrequenz und der Impulsverbreiterung [96]. Zusätzlich können Ionen nach einer Ladungsänderung durch Target- oder Restgasstöße nach dem ersten Dipolmagnet hinter der experimentellen Sektion mit Szintillationszählern detektiert werden.



### 3. Reaktionsmikroskop

Die kinematische Untersuchung atomarer Stoßprozesse wurde lange Zeit von der limitierten Akzeptanz der Experimente zur Messung der Impulskomponenten aller beteiligten Reaktionsprodukte begrenzt. Während Elektronenspektroskopie energie- und winkelaufgelöst (allerdings mit einer geringen Raumwinkelakzeptanz von typischerweise  $10^{-4}$ ) seit 1969 durchgeführt wird [8], war die impuls aufgelöste Messung von Rückstoßionen (COLTRIMS-Technik) erst seit den 80er Jahren des letzten Jahrhunderts möglich, da hierfür das Target auf Temperaturen von wenigen Kelvin abgekühlt werden muss. Hierbei werden die durch eine Ionisation erzeugten geladenen Target-Ionen durch elektrische Felder auf einen Detektor gelenkt und aus den Zeit- und Ortsinformationen die ursprünglichen Impulse rekonstruiert. Diese Methode ist für die schweren Rückstoßionen einer Reaktion selbst für relativ schwache Feldstärken von wenigen V/cm ausreichend, um eine Rekonstruktion der Ionenimpulse über einen weiten Winkelbereich zu ermöglichen. Aufgrund der relativ hohen kinetischen Energie ist der Raumwinkel der Detektion der ionisierten Elektronen, den eine Messung abdecken konnte, allerdings stark begrenzt. Die Erfindung des Reaktionsmikroskops im Jahre 1993 durch Moshhammer und Ullrich [12, 103] änderte dies grundlegend und ermöglichte eine koinzidente Elektronen- und Rückstoßionen-Impuls-Spektroskopie: Durch Anlegen eines zusätzlichen homogenen Magnetfeldes von einigen Gauss werden die Elektronen durch die Lorentz-Kraft auf eine Schraubenbahn gelenkt, deren Radius von der Stärke des Feldes und dem Impuls der Elektronen abhängt. Durch eine geeignete Wahl der Feldstärke in Kombination mit orts- und zeitauflösenden Detektoren lassen sich nun alle Elektronen auf den Detektor projizieren und eine Rekonstruktion der beteiligten Impulskomponenten über nahezu den vollen Raumwinkel ist möglich.

Der Aufbau eines Reaktionsmikroskops ist in Abbildung 3.1 dargestellt. In der Mitte liegt das Reaktionsvolumen, in dem das Target, alternativ durch einen kalten Teilchenstrahl oder eine Atomfalle realisiert, und ein Projektil aufeinandertreffen. Die geladenen Fragmente werden nun durch das angelegte elektrische und magnetische Feld zu den jeweiligen orts- und zeitauflösenden Detektoren gezogen, wobei sie zugunsten einer besseren Auflösung erst beschleunigt werden, um anschließend in einem feldfreien Raum, der Driftstrecke, mit konstanter Geschwindigkeit auf die Detektoren zuzufiegen. Aufgrund des durch die beiden Spulen angelegten Magnetfeldes werden die leichten Elektronen auf eine Kreisbahn gezwungen.

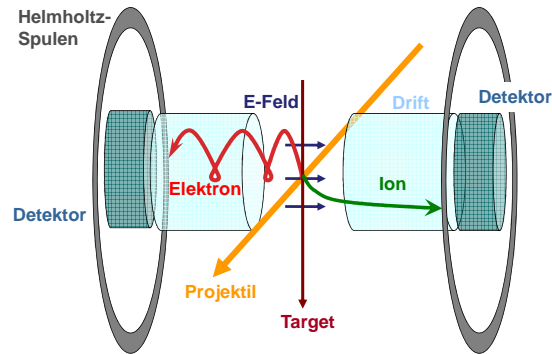


Abbildung 3.1.: Aufbau eines Standard-Reaktionsmikroskops.

## 3.1. Das Vakuumsystem

Eine der grundlegenden Anforderungen an den verwendeten Aufbau ist die Qualität des Vakuums. Die Untersuchung atomarer Prozesse erfordert eine mittlere freie Weglänge der beteiligten Stoßpartner, die groß genug ist, um jegliche Beeinflussung der Reaktion durch andere Teilchen auszuschließen. Des Weiteren führen Wechselwirkungen vorhandener Restgasatome mit den Projektilen zu Ionisationsprozessen, deren Produkte ebenfalls detektiert werden und so das Signal-zu-Rausch-Verhältnis des Experimentes verschlechtern.

Die Verwendung einer Atomfalle erhöht die Anforderungen an den Gasdruck im Versuchsaufbau zusätzlich, da die Speicherzeit der Atome in der Falle empfindlich vom Druck in der Vakuumkammer abhängt. Die kinetische Energie der Restgasteilchen übersteigt bei Raumtemperatur deutlich das Fallenpotential und reduziert durch Kollisionen die Anzahl der gefangenen Atome.

Auch die Speicherung der Ionen in einem Speicherring erfolgt unter Ultrahochvakuumbedingungen. Da der hier vorgestellte Aufbau direkt in das Vakuumsystem des TSR eingebaut wird, muss ein ausreichend niedriger Gasdruck sichergestellt werden um den Betrieb des Speicherringes nicht zu beeinträchtigen.

Der Aufbau der Vakuumkammer ist in Abbildung 3.2 schematisch dargestellt; eine Photographie des Experiments nach dem Einbau in den Ionenspeicherring findet sich in Abbildung 3.3. Sie besteht im Wesentlichen aus einer kugelförmigen Kammer im Zentrum mit einem Durchmesser von 480 mm, die mit zwei zylinderförmigen Kammern mit Durchmessern von 256 mm und Längen von 300 mm in Richtung des Ionenstrahles verbunden ist. Die Vakuumkammer besteht aus rostfreiem Stahl der Qualität 1.4429 ESU, welcher eine Permeabilität von  $1.01 \text{ H m}^{-1}$  aufweist, und ist

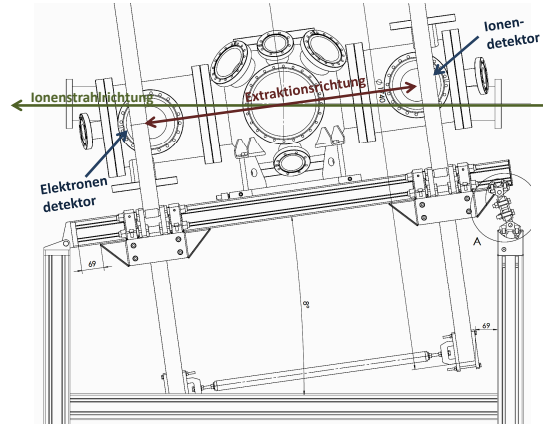


Abbildung 3.2.: Schematischer Aufbau der Kammer mit Spektrometer und Helmholtz-Magnetspulen, welche um einen Winkel von  $8^\circ$  gegenüber des TSR-Strahlrohrs gedreht sind.

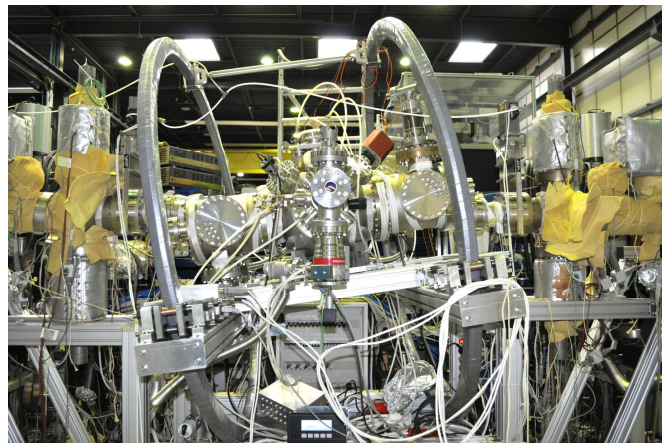


Abbildung 3.3.: Der verwendete Vakuumaufbau des PRIOC-Experimentes. Der Ionenstrahl des Speicherringes führt von rechts nach links durch den Aufbau.

mit einem nicht-evaporativen Getter-Material (NEG, siehe [104]) beschichtet, um den Gasdruck der Kammer weiter zu verbessern.

Da das Reaktionsmikroskop in den Speicherring eingebaut wurde, muss die Flugbahn der Projektil-Ionen im Aufbau berücksichtigt werden. In Ion-Atom-Stößen produzierte Elektronen haben im Allgemeinen eine relativ hohe kinetische Energie und sollten daher vorzugsweise in der Richtung der Projektilpropagation detektiert werden, um eine ausreichende Abdeckung des Raumwinkels mit moderaten Feldstärken zu gewährleisten. Eine Möglichkeit wäre hierbei die Verwendung von Detektoren, die eine Lochstruktur in der Mitte aufweisen, durch die der Projektilstrahl hindurch fliegen kann. Dies ist allerdings keine akzeptable Lösung bei der Verwendung eines Ionenstrahles im Speicherring, da der Durchmesser des ungekühlten Ionenstrahles mehrere cm beträgt und damit die Detektion nahezu aller Fragmente verhindern würde. Um dieses Problem zu umgehen, wurde das Spektrometer im Bezug auf die Ionenflugbahn um  $8^\circ$  gedreht, wie aus Abbildung 3.2 ersichtlich wird.

Der optische Zugang der Laserstrahlen, die zur Erzeugung der Atomfallen sowie der in Teil III beschriebenen Photoionisation benötigt werden, ist durch mehrere Fenstergläser verschiedener Größen an der Kammer gewährleistet. Es handelt sich dabei um spezielle Quarz-Glasfenster, die neben einer hohen Temperaturbeständigkeit aufgrund ihrer besonderen Herstellungsweise eine extrem geringe Permeabilität aufweisen, um die Funktion der verwendeten Magnetfelder nicht zu beeinflussen. Quarzglas weist außerdem im Gegensatz zu dem traditionell verwendeten Borosilikat eine Transmission bis hinunter zu etwa 180 nm auf, die für Ionisationsexperimente mit einem UV-Laser notwendig ist.

Die Implementation eines kalten Lithium-Atomstrahles, die für die Funktion der Atomfalle von Nöten ist, erfolgt aus einer 2D MOT (siehe Kapitel 4.4), die an der vorderen Seite der Kammer innerhalb einer weiteren kleinen Vakuumkammer untergebracht ist. Das Vakuum der beiden Kammern lässt sich durch ein Ventil voneinander trennen und ermöglicht beispielsweise die Füllung des Lithium-Ofens, ohne das Vakuum in der Hauptkammer zu brechen. Zwischen beiden Kammern ist eine differentielle Druckstufe angebracht, da das Vakuum in der kleineren 2D MOT Kammer aufgrund des geheizten Ofens etwa ein bis zwei Größenordnungen schlechter als in der Hauptkammer ist. Die differentielle Druckstufe besteht aus einem Röhrchen mit einem Innendurchmesser von 5 mm, das den Durchgang des gekühlten Atomstrahles problemlos ermöglicht.

An der Hauptkammer sind zwei Turbomolekularpumpen mit einer Pumpleistung von etwa 250 l/s angebracht, die nach dem Ausheizen der Kammer einen Druck von  $10^{-10}$  mbar ermöglichen. Die 2D MOT-Kammer wird von einer kleineren (70 l/s) Turbopumpe gepumpt und erreicht damit bei Raumtemperatur einen Druck von  $10^{-9}$  mbar.

Der Anschluss des Aufbaus an den TSR erfolgt über zwei Schleusen-Kammern, die mit jeweils zwei Ventilen verschlossen werden können, so dass bei einem Wechsel der



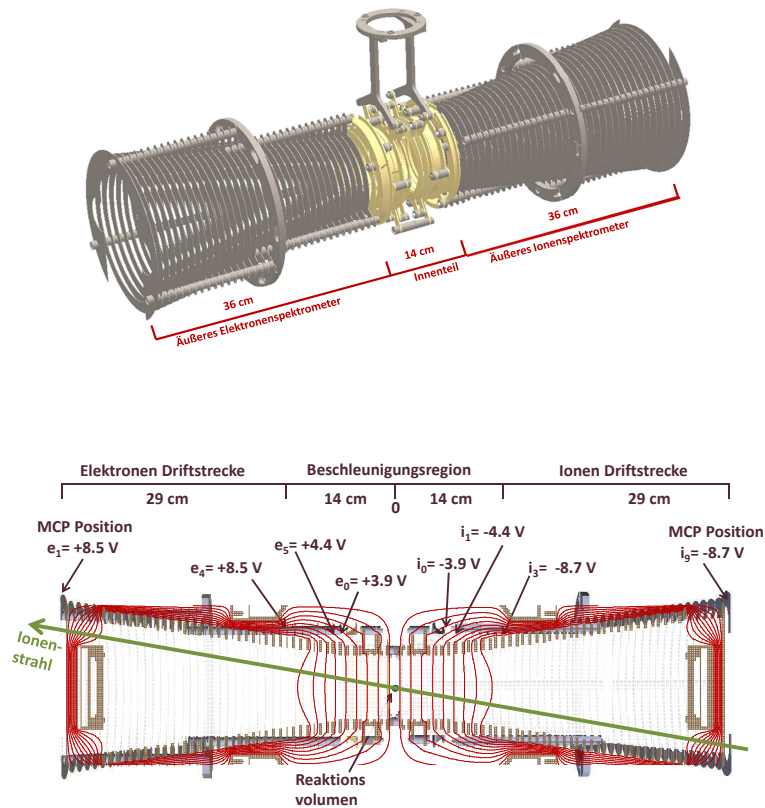


Abbildung 3.4.: Aufbau und elektrischer Anschluss des verwendeten Spektrometers. In der unteren Graphik ist zusätzlich der Verlauf der Magnetfeldlinien eingezeichnet.

Experimente nur diese Seitenkammern ausgeheizt werden müssen und das Vakuum im TSR sowie in der Experimentierkammer bestehen bleibt.

## 3.2. Das Spektrometer

### Aufbau des Spektrometers

Der schematische Aufbau des Spektrometers ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Es besteht aus 84 Ringelektroden mit einem Abstand von 10 mm zueinander, die zur Erzeugung des elektrischen Extraktionsfeldes für die Targetfragmente verwendet werden. Wie bereits im letzten Abschnitt erläutert, wurde eine nahezu longitudinale

Extraktion gewählt. Diese Geometrie bietet insbesondere den Vorteil, dass einige physikalische Ionisationsmechanismen, die sich durch die Emission von hochenergetischen Elektronen in Vorwärtsrichtung auszeichnen [22, 105], schon mit geringer Extraktionsfeldstärke untersucht werden können.

Die Anforderungen, die einerseits durch den Betrieb im Speicherring und andererseits durch ein schnelles Schalten des MOT-Magnetfeldes an das Spektrometer gestellt werden, erforderten die Entwicklung eines komplett neuen Spektrometer-Designs im Rahmen des hier vorgestellten experimentellen Aufbaus: Die Vorgabe für den Einbau des Experimentes in den TSR ist eine offene Apertur für den Ionenstrahl von  $100\text{ mm} \times 70\text{ mm}$  (horizontal und vertikal), um die Akzeptanz des Speicherrings nicht zu beeinträchtigen. Die Voraussetzung für ein schnelles Schalten des Magnetfeldes hingegen ist eine möglichst geringe räumliche Ausdehnung des Feldes und der erzeugenden Spulen.

Um dies zu ermöglichen, verjüngt sich der Durchmesser der Spulenringe von einem Innendurchmesser von etwa  $194\text{ mm}$  an den Seiten des Spektrometers bis zu  $100\text{ mm}$  im inneren Bereich. Mit einer Gesamtlänge von  $840\text{ mm}$ , einer Neigung von  $8^\circ$  und einem Bereich von  $160\text{ mm}$ , in dem der Innendurchmesser der Ringe konstant  $100\text{ mm}$  beträgt (siehe Abbildung 3.4, ergibt sich eine annähernd ellipsenförmige Apertur, deren horizontale und vertikale Achsenlängen den Anforderungen für den Einbau in den TSR genügen. Prinzipiell beschränken auch die Teilchendetektoren die Öffnung für den Ionenstrahl. Diese sind jedoch auf Manipulatoren angebracht und können daher um bis zu  $50\text{ mm}$  von der Strahlachse wegbewegt werden.

Mechanisch besteht das Spektrometer aus drei voneinander unabhängig aufgebauten Teilgruppen (siehe Abbildung 3.4 oben). Die beiden äußeren Gruppen sind identisch und bestehen aus jeweils 35 Ringelektroden aus Edelstahl mit einer Dicke von  $1\text{ mm}$ , während die Differenz zwischen den inneren und äußeren Durchmessern der Ringe jeweils  $15\text{ mm}$  beträgt, die durch keramische Abstandshalter elektrisch voneinander isoliert sind. Um einen Spannungsabfall über das Spektrometer zu erreichen, sind die einzelnen Elektroden über  $100\text{ k}\Omega$  Widerstände miteinander verbunden und können an mehreren Stellen an eine Spannungsquelle angeschlossen werden. Sämtliche Widerstände wurden dabei in einer Vakuumkammer ausgeheizt und vor dem Einbau getestet, um eine Toleranz von  $\Delta R \leq \pm 0.1\%$  zu gewährleisten.

Das durch diese Konstruktion erzeugte elektrische Feld wurde mit dem Programm SIMION simuliert und auf seine Homogenität hin untersucht. Wie aus Abbildung 3.4 unten ersichtlich, ist der Feldverlauf in longitudinaler Richtung sehr homogen, wenn es auch kleinere Abweichungen in axialer Richtung gibt. Diese können jedoch bei der Impulsrekonstruktion berücksichtigt werden.

Die innere Baugruppe des Spektrometers (siehe Abbildung 3.5 sowie eine Photographie in Abbildung 4.25) besteht aus 14 Ringen, die alle einen freien Durchmesser von  $100\text{ mm}$  aufweisen und jeweils geschlitzt sind, um das Entstehen von Wirbelströmen beim Schalten des Magnetfeldes zu vermeiden. Zusätzlich wurden die innersten 10 Ringe aus Aluminium gefertigt und mit Gold beschichtet, um ein elektrostati-

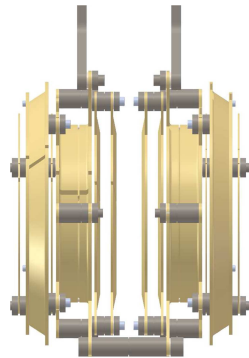


Abbildung 3.5.: Schematischer Aufbau des inneren Spektrometer-Bauteiles. Im Inneren befinden sich jeweils zwei konisch geformte innere Spektrometerringe. Die anschließende dickere Form sind die Halter der MOT-Spulen, an denen die Träger der Kompensationsspulen, leicht schräg nach außen abfallend, angegliedert sind. Für mechanische Stabilität sorgen die Verbindungsstücke oben und unten im Bild, die elektrisch isoliert sind. Nach oben führt der Spulenhalter zu einer Ringstruktur, die am Flansch der Vakuumkammer befestigt werden kann.

sches Aufladen der Platten zu vermeiden. Im Zentrum des Spektrometers befindet sich eine Lücke von 19 mm, um den optischen Zugang durch die Laserstrahlen der Atomfalle zu gewährleisten. Darüber hinaus haben die innersten Ringe eine spezielle Form (vergleiche hierzu auch Abbildung 3.5): Die innersten vier Ringe sind konisch (in Form eines „Kegelstumpfmantels“) geformt, um den zugänglichen Raumwinkel, z.B. zur Detektion von stoßinduzierter Photonenemission zu vergrößern [106].

Weitere vier Ringe werden gleichzeitig als Halterung für das Magnetspulenpaar der MOT verwendet, wodurch die Größe dieser Spulen möglichst klein gehalten werden konnte. Ebenfalls in den Aufbau integriert ist eine weitere größere Halterung für ein zusätzliches Anti-Helmholtz-Spulenpaar, dessen Funktion in Kapitel 4.5 im Detail erläutert wird. Die gesamte Baugruppe ist auf einen CF200-Flansch montiert, wodurch der Ein- und Ausbau in das Vakuumsystem erleichtert wird. Die folgenden zwei Spektrometer-Platten auf beiden Seiten sind in die Halterung der Magnetfeldspulen integriert. Alle 14 Platten sind über Widerstände von jeweils 17 k $\Omega$  verbunden.

## Zeit- und Ortsfokussierung

Die in einem Reaktionsmikroskop erreichbare Impulsauflösung hängt unter anderem von der Ausdehnung des Reaktionsvolumens ab. Dabei durchlaufen geladene Teil-

chen, die an unterschiedlichen Positionen entlang der Spektrometerachse produziert werden, unterschiedlich lange Beschleunigungsstrecken  $a + \Delta a$  im elektrischen Feld  $F_{el}$  und erfahren damit unterschiedliche Potentialdifferenzen

$$U = F_{el} \cdot (a + \Delta a). \quad (3.1)$$

Dieser Effekt führt zu einer Verschlechterung der erreichbaren Auflösung. Da ein ideales punktförmiges Target physikalisch nicht realisierbar ist, müssen andere Möglichkeiten zur Unterdrückung dieser Störung gefunden werden, ohne die Auflösung in transversaler Richtung zu beeinflussen. In erster Ordnung kann dieser Effekt durch eine sogenannte Wiley-McLaren-Konfiguration [107] minimiert werden. Zur Rekonstruktion der Impulse werden die erzeugten Fragmente zuerst in einem elektrischen Feld der Länge  $a$  beschleunigt, bevor sie in einer sogenannten Driftstrecke  $d$  mit konstanter Geschwindigkeit in Richtung der Detektoren fliegen. Hat die Driftregion gerade die doppelte Länge der Beschleunigungsstrecke,  $d = 2a$ , wird der Unterschied in den unterschiedlichen Flugstrecken durch die größere Geschwindigkeit der Atome, die in einem größeren Abstand vom Detektor erzeugt wurden und damit ein stärkeres Potential durchlaufen, ausgeglichen. Diese Konfiguration wird auch Zeitfokussierung genannt.

Um eine bessere Auflösung der transversalen Impulsbestandteile zu erreichen, kann eine zusätzliche Ortsfokussierung in das Spektrometer implementiert werden (siehe hierzu [108]), indem eine schwache elektrostatische Linse in den Aufbau eingebaut wird. Eine einzelne Elektrode nahe des Reaktionszentrums wird auf ein höheres Potential als die Umgebenden gelegt. Dies führt zu einer Fokussierung der Flugbahnen, die von der Brennweite dieser elektrostatischen Linse abhängt. Fragmente mit gleichen longitudinalen Impulsen aber unterschiedlichen Startpositionen senkrecht zur Extraktionsrichtung können so auf dem Detektor auf einem einzelnen Punkt abgebildet werden, dessen Position proportional zu ihrem Transversalimpuls ist.

Die während einer typischen experimentellen Messzeit an das Spektrometer angelegten Spannungen sind in Abbildung 3.4 unten eingetragen. Während das Verhältnis der Drift- und Beschleunigungsstrecken in Bezug auf die Bedingungen der Zeitfokussierung relativ gut erfüllt ist, wurde die Spannung an der achten Elektrode (in Abbildung 3.4 durch  $e_5$  und  $i_1$  bezeichnet) variiert, um die Impulsauflösung experimentell zu verbessern. Da der Wert von  $U_8 = 4.4 \text{ V}$  etwas höher liegt als ein homogener Feldverlauf erwarten lassen würde, kann man hier von einer leichten Ortsfokussierung sprechen.

Die an Elektrode 14 angelegte Spannung, die das Ende der Beschleunigungsstrecke definiert, war  $8.7 \text{ V}$  auf der Ionenseite, sowie  $8.5 \text{ V}$  auf der Elektronenseite. Dies bedeutet eine Stärke des Extraktionsfeldes von  $0.62 \text{ V cm}^{-1}$  bzw.  $0.61 \text{ V cm}^{-1}$  für Ionen und Elektronen gleichermaßen. Die leichten Unterschiede der beiden Feldstärken

stellten sich experimentell als vorteilhaft für die erreichbare Auflösung der Impulse heraus.

## Magnetfeld

Die in einer Ionisationsreaktion erzeugten Ionen haben kinetische Energien von einigen meV und können daher problemlos durch das angelegte elektrische Feld auf den Detektor projiziert werden. Elektronen, die im Allgemeinen wesentlich höhere kinetische Energien besitzen, haben damit auch eine höhere transversale Geschwindigkeit und verlassen zumeist den Akzeptanzbereich des Spektrometers, bevor sie auf den Detektor treffen. Um die Akzeptanz der Elektronen zu erhöhen, wird ein homogenes Magnetfeld überlagert. Geladene Teilchen werden in einem Magnetfeld durch die Lorentzkraft auf eine kreisförmige Bahn gelenkt, deren Radius durch die Stärke des Feldes bedingt wird.

Zur Erzeugung des magnetischen Feldes wird ein Paar paralleler Helmholtzspulen verwendet, deren Abstand  $D = 90$  cm zueinander etwa dem Radius  $r = 85$  cm der Spulen entspricht. Die beiden Spulen befinden sich außerhalb der Vakuumkammer und erzeugen ein nahezu homogenes Magnetfeld im gesamten Spektrometerbereich. Bei einer Windungszahl von 24 ergibt sich bei typischen Stromstärken von 25 A ein Magnetfeld von etwa 7.7 G.

## 3.3. Detektorsystem

Die Rekonstruktion der beteiligten Impulskomponenten einer Ionisationsreaktion ist limitiert durch die Auflösung der gemessenen Orts- und Zeitkomponenten. Um diese so genau wie möglich zu bestimmen, sind einige Anforderungen an die verwendeten Detektoren, sowie die elektronische Datenaufnahme und -steuerung zu stellen. Im Folgenden sollen diese Komponenten kurz erläutert werden, für eine detaillierte Beschreibung der Funktion und des Aufbaus der hier verwendeten Detektoren siehe [109].

### Detektoren

Die Detektoren sind aus einem Microchannel Plate und einer Delay-Line Anode zusammengesetzt und ermöglichen so eine gute Orts- und Zeitauflösung der auftretenden Teilchen.

#### Microchannel Plate

Ein Microchannel Plate (MCP) wie in Abbildung 3.6 dargestellt, besteht aus einer wenige mm dicken Glasplatte, die auf beiden Seiten mit einer leitenden Oberfläche

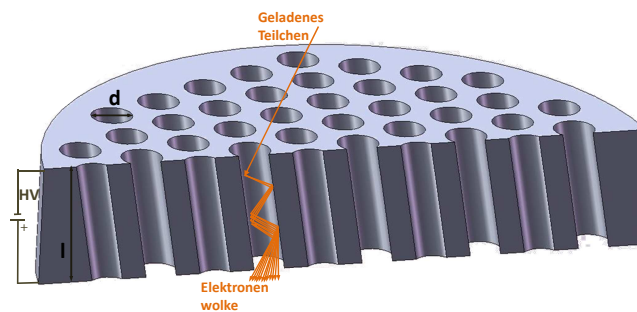


Abbildung 3.6.: Aufbau eines Microchannel Plates.

beschichtet ist. Durch die Glasplatte verlaufen viele kleine Kanäle mit wenigen zehn  $\mu\text{m}$  Durchmesser in einem kleinen Winkel zur Flächennormalen. Zwischen Vorder- und Rückseite des MCPs wird eine Spannungsdifferenz von etwa 1 kV angelegt. Treffen nun Partikel auf die Oberfläche, lösen sie Elektronen aus, die entlang eines Kanals beschleunigt werden und dabei weitere Elektronen aus den Wänden herauslösen. Am anderen Ende der Glasplatte ergibt sich somit ein Verstärkungsfaktor von etwa  $10^4$ , wobei die Ortsinformation des Primärteilchens erhalten bleibt. Die Totzeit der Platte beträgt hierbei etwa  $10^{-8}$  s und ist damit auch für die Detektion mehrerer Elektronen aus einem Ionisationsereignis geeignet (Multihit-Fähigkeit).

Um die Verstärkung zu erhöhen und Reflektionen der geladenen Teilchen zu vermeiden, werden häufig mehrere Microchannel Plates hintereinander gesetzt, wobei die Winkel der Kanäle in den verschiedenen Platten so zueinander versetzt werden, dass eine v- („Chevron“)- oder z- („z-stack“) förmige Anordnung entsteht.

#### Delay-Line Anode

Um eine gute Ortsauflösung der Detektoren zu erreichen, wird hinter dem MCP eine ortssensitive Anode verwendet. Die Funktion dieser Delay-Line Anode (DLA) ist dabei wie folgt:

Ein am Ende des MCP angebrachtes elektrisches Feld beschleunigt die erzeugte Elektronenwolke auf die dahinter liegende Anode, die aus vier voneinander isoliert angebrachten Drähten, wie in Abbildung 3.7 links dargestellt, besteht. Dabei sind jeweils zwei Drähte parallel nebeneinander um keramische Halterungen gewickelt, wobei die Wicklungsrichtung der beiden Lagen um 90 Grad gedreht ist. An allen Drähten liegt eine geringe positive Spannung an, wobei jeweils an einer der beiden parallel liegenden Drähte eine leicht höhere Spannung anliegt. Die im MCP ausgelösten Elektronen treffen die Anode an einen zum Auftreffort des Ions identischen Punkt (zum Zeitpunkt  $t_0$ ) und werden mit einer bestimmten Geschwindigkeit  $v$  in beide Richtungen des Drahtes zu den jeweiligen Drahtenden transportiert. Dabei

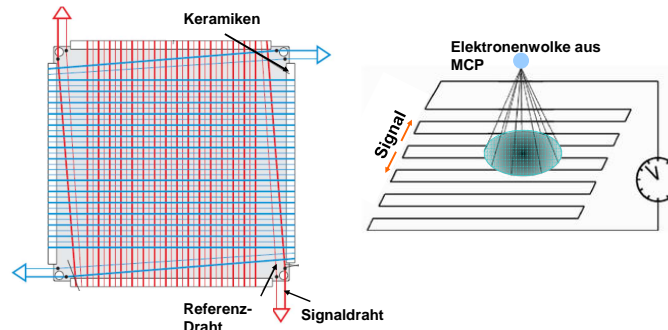


Abbildung 3.7.: Aufbau und Funktion einer Delay-Line Anode. Abb. nach [110,111].

ist das Zeitintervall, welches das Signal zu beiden Leiterenden benötigt, aufgrund der durch den Auftreffort gegebenen verschiedenen Weglängen unterschiedlich, und die Zeitdifferenz kann so zur Bestimmung des Ortes (in einer Dimension) verwendet werden:

$$x = v_{\perp}((t_1 - t_0) - (t_2 - t_0)) = v_{\perp}(t_1 - t_2) \quad (3.2)$$

Die Benutzung zweier paralleler Drähte dient dabei der Verbesserung des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses. Während Rauschen in beiden Drähten gleichmäßig auftritt, werden die Elektronen mehr auf den positiveren der beiden Leiter gezogen. Zur Datenauswertung wird deshalb das Differenzsignal der beiden Drähte verwendet.

Beide Bauteile wurden in einem mechanischen Aufbau kombiniert, der an der Vakuumkammer befestigt werden und mit Hilfe von Manipulatoren aus der Strahlebene hinaus bewegt werden kann, um eine ungehinderte Transmission des ungekühlten Ionenstrahles des TSR zu ermöglichen. Hierbei sei auf die Arbeit von M. Sell [109] verwiesen, der den mechanischen Aufbau und Test der hier verwendeten Detektoren ausführlich beschreibt.

## Elektronische Datenaufnahme

Die aus der Anode und dem Microchannel Plate ausgekoppelten Signale durchlaufen eine Reihe elektronischer Bauteile, bevor sie mit einer Analyse-Software ausgewertet werden können.

Der erste Schritt der Datenverarbeitung ist eine Verstärkung der Signale durch einen Fast Amplifier sowie im Falle der MCP-Zeitinformation eine Invertierung

des Signales. Ein Constant-Fraction-Diskriminator (CFD) wandelt anschließend das analoge Signal in ein von der Höhe des Pulses unabhängiges NIM-Signal (aus dem Englischen, Nuclear Instrumentation Module) um, sobald ein Schwellenwert überschritten wurde. Dabei hängt das Ausgangssignal des CFD nicht von dem Zeitpunkt des Erreichens des Schwellenwertes ab, sondern der Zeitabstand zwischen dem Maximum des Eingangssignals und der Signalausgabe bleibt konstant.

Im Anschluss werden die Signale durch einen Time-to-Digital-Converter (TDC) digitalisiert und für die weitere Verarbeitung durch einen Computer vorbereitet. Hierzu wird eine Koinzidenzschaltung angewandt, die nur dann die Weitergabe von Daten erlaubt, sofern bestimmte Koinzidenzen eintreten, beispielsweise wenn ein Impuls auf dem Ionendetektor innerhalb eines festgelegten Zeitfensters nach dem Auftreten eines Elektronenevents stattfindet. Durch diese Schaltung werden falsche Ereignisse unterdrückt und die Datenrate klein gehalten.

Die digitalisierten Daten werden an einen weiteren Rechner geschickt, der eine direkte Analyse der Daten über das Software-Programm Go4 (entwickelt an der GSI Darmstadt [112] und basierend auf der Programmiersprache ROOT, siehe hierzu [113]) erlaubt, sowie die Daten für eine spätere Auswertung speichert.

## 3.4. Impulsrekonstruktion

In einem Reaktionsmikroskop werden die durch eine Ionisationsreaktion erzeugten geladenen Fragmente über ein elektrisches Feld auf den Detektoren abgebildet. Die dadurch messbaren Größen dieser Reaktion sind die Auftreff-Position des Teilchens auf dem Detektor  $\vec{r} = \sqrt{\vec{x}^2 + \vec{y}^2}$ , sowie die Flugzeit  $t$ , welche es zum Zurücklegen der Strecke zwischen Reaktionsvolumen und Detektor benötigt. Aus diesen beiden Parametern lassen sich die dreidimensionalen Ausgangsimpulse der  $N + 1$  beteiligten Stoßpartner berechnen, sofern  $N$  die Anzahl der detektierten Teilchen ist. Aufgrund der Zylindersymmetrie des Spektrometers entlang der Extraktionsrichtung  $z$  bietet es sich an, zur Impulsrekonstruktion Zylinderkoordinaten  $z, r, \varphi$  zu verwenden, wobei der Impuls sich in einen longitudinalen Anteil  $p_{||}$  und einen transversalen Anteil  $p_{\perp} = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$  aufteilt, ebenso wie die Energie.

### Ionenimpulse

#### Longitudinaler Impuls

Für die Impulsrekonstruktion entlang der Spektrometerachse ist nur die Information der Flugzeit von Nöten. Dabei muss beachtet werden, dass diese nur in Bezug auf einen Referenzwert angegeben werden kann und eine korrekte Berechnung des Impulses von der richtigen Wahl der Referenz abhängt. In den hier betrachteten Ionenstoß-Experimenten wurde dieser ( $t = 0$ )-Wert durch die rf-Frequenz des Io-



nenspeicherringes vorgegeben. Da der Ionenstrahl gepulst ist und der Abstand der einzelnen Ionenpulse der Frequenz des rf-Generators entspricht, lässt sich der Startzeitpunkt aus der Radiofrequenz ableiten, wobei die Unschärfe in etwa der Breite des Ionenpaketes von wenigen ns entspricht.

In einer Ionisationsreaktion erfährt das Ion mit Masse  $m_a$  und Ladung  $q$  einen Rückstoßimpuls  $p_{||} = \sqrt{2E_{||}m_a}$  und wird in der anschließenden Beschleunigungsstrecke  $a$  durch die Kraft  $F_{el} = U/a$  beschleunigt, bevor es durch die Driftstrecke  $d$  mit konstanter Geschwindigkeit auf den Detektor zufliegt. Die Flugzeit (oder TOF, aus dem Englischen, time-of-flight) kann aus der Lösung der Bewegungsgleichung zu

$$t_{\pm} = f_{E,||} \cdot \sqrt{m_a} \left( \frac{2a}{\sqrt{E_{||} + qU} \pm \sqrt{E_{||}}} + \frac{d}{\sqrt{E_{||} + qU}} \right) \quad (3.3)$$

ermittelt werden. Das  $\pm$ -Zeichen legt dabei einem Startimpuls in Vorwärts- oder Rückwärtsrichtung in Bezug auf den Ionendetektor fest. Der Vorfaktor  $f_{E,||}$  beinhaltet dabei die Umrechnung aus SI-Einheiten in atomare Einheiten (siehe hierzu Anhang C), er beträgt für eine Angabe der Flugzeit in ns

$$f_{E,||} = 719.9 \frac{eV}{cm} \sqrt{\frac{eV}{u}}, \quad (3.4)$$

sofern die beteiligten Größen in der jeweiligen Einheit angegeben werden.

Zur Berechnung der Ionenimpulse aus der Flugzeit ist die Umkehrfunktion von Gleichung 3.3 notwendig, für die es keine einfache analytische Lösung gibt. Im Fall der Rückstoßionen übersteigt die durch die Beschleunigung im elektrischen Feld aufgenommene Energie die durch den Rückstoß der Ionisation gewonnene Energie um einige Größenordnungen. Es ist daher möglich, Gleichung 3.3 durch eine Taylor-Entwicklung um  $t_0 = t_{\pm}(E_{||} = 0)$  anzunähern. Das Ergebnis ist eine Zeitdifferenz  $\Delta t$  zwischen einem Ion mit einer Startenergie von  $E_{||}$  und einem ursprünglich ruhenden Teilchen  $E_{||} = 0$

$$\Delta t = t(E_{||}) - t(E_{||} = 0) \approx \left[ \frac{dt(E_{||})}{dE_{||}} \right]_{E_{||}=0} \cdot E_{||} \quad (3.5)$$

bzw.

$$\Delta t = t(E_{||}) - t(E_{||} = 0) \approx \left[ \frac{dt(E_{||})}{dE_{||}} \frac{dE_{||}}{dp_{||}} \right]_{p_{||}=0} \cdot \Delta p_{||}. \quad (3.6)$$

Damit ergibt sich der longitudinale Impuls der Rückstoßionen zu

$$p_{||} = f_{p,||} \cdot \frac{qU\Delta t}{a} = \left( 8.042 \cdot 10^{-3} \frac{cm}{eVns} \right) \cdot \frac{qU\Delta t}{a} \text{a.u.} \quad (3.7)$$

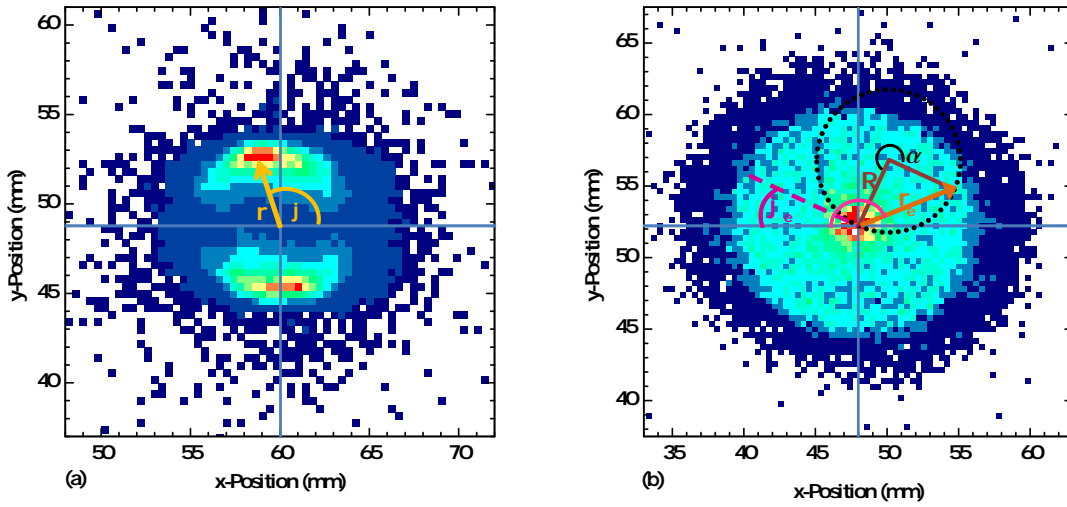


Abbildung 3.8.: Ortspektren des (a) Ionen- und (b) Elektronendetektors einer typischen Photo-Ionisationsmessung. Die zur Bestimmung der Transversalimpulse notwendigen Koordinaten (siehe Text) sind eingetragen.

### Transversaler Impuls

Der Transversalimpuls lässt sich aus dem Auftreffort des Ionisationsfragmentes auf dem Detektor bestimmen. Dabei wird der Abstand des Ortes in Bezug auf den Auftreffpunkt eines Ions  $(x_0, y_0)$  mit  $p_{\perp} = 0$  als

$$r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} \quad (3.8)$$

definiert. Der Emissionswinkel ist hierbei über

$$\varphi = \arctan(y/x) \quad (3.9)$$

gegeben. Eine typische Ionenverteilung einer Photo-Ionisation (vergleiche auch Teil III) ist in Abbildung 3.8 (a) abgebildet und verdeutlicht die hier definierten Parameter.

Der Transversalimpuls ergibt sich zu

$$p_{\perp} = f_{p,\perp} \cdot \frac{r \cdot \sqrt{qUm_a}}{2a + d} = \left( \frac{11.6}{\sqrt{u \cdot eV}} \right) \cdot \frac{r \cdot \sqrt{qUm_a}}{2a + d} \text{ a.u.} \quad (3.10)$$

Die Ionenflugbahn steht unter dem Einfluss des angelegten Helmholtzfeldes, der Auftreffort der Ionen ist daher um den Winkel  $\sin \theta = \frac{qBr}{p_{\perp}}$  gedreht. Dies muss bei der Auswertung berücksichtigt werden. In den hier betrachteten Experimenten ergab sich diese Drehung zu etwa  $\sin \theta = 32^{\circ}$ .

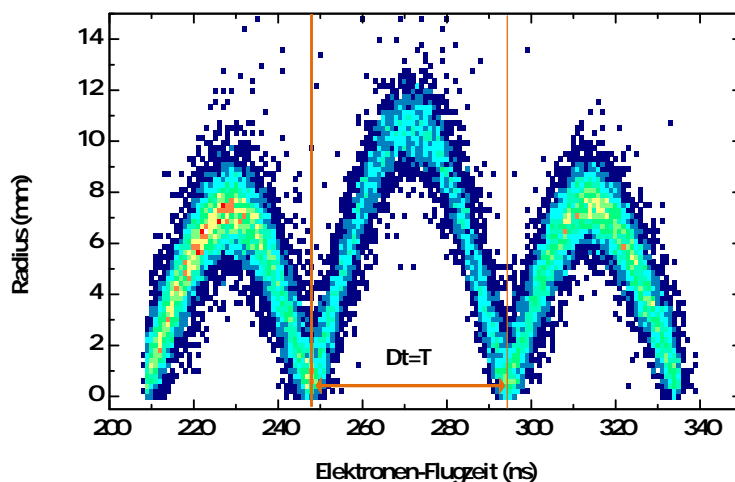


Abbildung 3.9.: Radius des Elektronenauffreffortes auf dem Detektor aufgetragen gegen die Flugzeit der Elektronen. Die charakteristische „Wiggle“-Struktur aufgrund der Zyklotronbewegung im Magnetfeld ist gut erkennbar.

## Elektronenimpulse

### Longitudinaler Impuls

Sofern die Länge der Streckenabschnitte  $a$  und  $d$ , sowie das angelegte elektrische Feld  $U$  auf der Elektronenseite identisch mit denen der Ionenseite sind, unterliegen die Bewegungsgleichungen der Elektronen denselben Gegebenheiten wie die der Ionen und die Flugzeit der Elektronen lässt sich über Gleichung 3.3 herleiten.

Aufgrund der relativ geringen Elektronenmasse ist die Anfangsenergie  $E_{||}$  nun vergleichbar mit der im elektrischen Feld gewonnenen Energie und eine Näherung wie in Gleichung 3.6 ist nicht mehr anwendbar. Die Lösung der Elektronenimpulse muss analytisch beispielsweise über das Newtonsche Näherungsverfahren gewonnen werden. Hierzu ist allerdings die genaue Kenntnis des Zeitnullpunktes von Nöten.

Da der absolute Zeitnullpunkt nicht aus der Radiofrequenz des gepulsten Projekttilstrahls bestimmbar ist, kann eine Betrachtung der Elektronenflugbahn zur Ermittlung von  $t = 0$  herangezogen werden:

Das angelegte Helmholtzfeld zwingt die Elektronen zu einer Zyklotronbewegung mit dem Radius

$$R = \frac{p_{\perp}}{eB}, \quad (3.11)$$

und einer Zyklotronfrequenz von

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{eB}{m_e}. \quad (3.12)$$

Elektronen durchlaufen auf dem Weg zum Detektor mehrere Rotationszyklen und treffen je nach Flugzeit an unterschiedlichen Positionen  $r_e$  auf dem Detektor auf. Es ergibt sich eine charakteristische „Wiggle“-Struktur wie in Abbildung 3.9 aufgezeigt. Elektronen, die eine theoretische Flugzeit von  $t_e = 0$  (und daher  $E_{||} = \infty$ ) besitzen, werden im Magnetfeld nicht abgelenkt und treffen an Position  $r_e = 0$  auf. Der Zeitnullpunkt liegt daher an einem Knotenpunkt der Verteilung und kann über eine relative Zeitinformation des Reaktionszeitpunktes (beispielsweise aus der hf-Frequenz des Speicherringes) bestimmt werden.

### Transversaler Impuls

In der Ebene senkrecht zur Extraktionsrichtung beschreibt das Elektron eine Kreisbahn und durchläuft dabei den Winkel  $\alpha = \omega t_e$ . Trigonometrische Überlegungen, die in Abbildung 3.8 (b) dargestellt sind, führen zu einer Bedingung für den Zyklotronradius von

$$R = \frac{r_e}{2|\sin(\alpha/2)|} = \frac{r_e}{2|\sin(\frac{\omega t_e}{2})|}. \quad (3.13)$$

Der Elektronen-Transversalimpuls ergibt sich demnach zu

$$p_{\perp} = \frac{eBr_e}{2|\sin(\frac{\omega t_e}{2})|} = \left( \frac{8.04}{mmG} \right) \frac{Br_e}{2|\sin(\frac{\omega t_e}{2})|} \text{ a.u.} \quad (3.14)$$

Der Azimuthalwinkel  $\varphi_e$  lässt sich aus dem im Ortsbild bestimmten Winkel  $\theta$  zu

$$\varphi_e = \theta - \omega t_e/2 \quad (3.15)$$

berechnen.

### Auflösung und Akzeptanz

Die Auflösung des Impuls-Spektrometers wird hauptsächlich durch die Unsicherheiten der Zeit- und Ortsbestimmung sowie der Targettemperatur und -Ausdehnung beeinflusst. Effekte, die auf die Größe des Targets zurückzuführen sind, können durch eine geeignete Wahl des Spektrometeraufbaus reduziert werden, wie bereits in Kapitel 3.2 beschrieben. Die Temperatur einer magneto-optischen Falle ist um einige Größenordnungen geringer als dies in einem traditionell verwendeten Gasjet der Fall ist, und trägt dementsprechend in diesem Experiment kaum zur Begrenzung der Auflösung bei.

Impulsauflösung	Transversal	Longitudinal
Ionen	0.1 a.u.	0.04 a.u.
Elektronen	0.1 a.u.	0.01 a.u.

Tabelle 3.1.: Impulsauflösung des Spektrometers bei den in dieser Arbeit vorgestellten Experimenten.

Die Berechnung der Auflösung ergibt sich durch Anwendung des Fehlerfortpflanzungsgesetzes auf die jeweilige Formel für die Berechnung der longitudinalen und transversalen Impulse (wie in 3.7 bis 3.14 angegeben) zu

$$\Delta p_{||,ion} = \left( \frac{qU}{a} \cdot \Delta t \right)^2 \quad (3.16)$$

$$\Delta p_{\perp,ion} = \left( \frac{\sqrt{qUm_a}}{2a + d} \cdot \Delta r \right)^2 \quad (3.17)$$

für die Auflösung des Ionenspektrometers, wobei  $\Delta t$  und  $\Delta r$  die Fehler der Zeit- und Ortsbestimmung der Detektoren angeben. Für die Elektronen ist das Vorgehen zur Analyse der Auflösung identisch, aufgrund der komplizierteren Bewegung der Elektronen im Magnetfeld aber erheblich komplexer [114].

Die Akzeptanz des Spektrometers ergibt sich in longitudinaler Richtung aus der angelegten Spannung  $U$ , wobei Reaktionsprodukte, deren Flugrichtung vom jeweiligen Detektor weg zeigt und deren kinetische Energie die elektrische Energie  $E = qU$  übersteigt, nicht mehr nachgewiesen werden. In transversaler Richtung ist die Akzeptanz des Detektors durch den Durchmesser der Detektoren begrenzt und lässt sich aus Gleichung 3.10 bzw. 3.14 durch Einsetzen des Detektorradius ermitteln.

In dem hier vorgestellten Aufbau konnte die Auflösung der Impulskomponenten anhand einer Photoionisationsmessung experimentell ermittelt werden und ist in Tabelle 3.1 dargestellt. Zur Erläuterung dieser Messung siehe Teil III. Diese Werte sind insbesondere in Bezug auf die Ionenauflösung hervorragend. Sie konnten in vergleichbarer Qualität bisher nur von einer weiteren Gruppe erzielt werden [115].



## 4. Präparation eines Targets

In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten soll die Impulsbilanz in einzelnen ionisierenden Stößen zwischen Ionen und Atomen mit einer Genauigkeit von zehntel bis hundertstel atomaren Einheiten gemessen werden. Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, werden dabei nur die Impulse des ionisierten Targets und der emittierten Elektronen im Endzustand direkt gemessen. Ihre Anfangsimpulse (genauer gesagt der Impuls des gesamten Targetatoms) müssen vorher mit hinreichender Genauigkeit festgelegt werden, d.h. das Target muss vor dem Stoß mit geringer Impulsbreite präpariert werden. Die Impulsänderung des Projektils ergibt sich dann indirekt aus der Impulserhaltung (siehe auch Kapitel 6.1)

Aus diesem Messprinzip ergeben sich folgende Anforderungen, die das Target erfüllen muss:

1. Die Temperatur des Targets muss so gering sein, dass der mittlere thermische Impuls der Teilchen  $\bar{p}$  die angestrebte Impulsauflösung nicht übersteigt. Die Impulsverteilung eines atomaren Ensembles entspricht im Gleichgewichtszustand einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung (siehe Abbildung 4.1), wobei sich der Zusammenhang zwischen mittlerem Impuls und Temperatur aus der Energiegleichung

$$\bar{E}_{kin} = \frac{\bar{p}^2}{2m} = \frac{3}{2}k_B T. \quad (4.1)$$

ergibt. Soll beispielsweise eine Impulsauflösung von 0.05 a.u. für die  $\text{Li}^+$ -Ionen erreicht werden, entspricht dies einer Auflösung der kinetischen Energie von nur 2.6  $\mu\text{eV}$  und einer Targettemperatur von etwa 20 mK. Das Target muss daher mindestens auf diese Temperatur abgekühlt werden.

2. Auch die Dichte des Targets muss bestimmten Anforderungen genügen. Aus zwei Gründen darf sie nicht zu hoch sein: Erstens soll ein einzelnes Projektil-Ion höchstens ein Atom aus der Targetwolke ionisieren, um eine eindeutige Zuordnung der detektierten Targetfragmente zu ein und demselben „Mutteratom“ zu erlauben. Zweitens sollte die Wechselwirkung der Targetatome untereinander vernachlässigbar gering sein. Bei hohen Dichten und niedrigen Temperaturen kann es zur Bildung von Molekülen, Clustern oder gar Tröpfchen [116] kommen, deren Struktur in aller Regel einen erheblichen Einfluss auf die Streudynamik hat [117].

Die Targetdichte darf aber andererseits nicht zu gering sein und muss die Dichte der Restgasatome um mehrere Größenordnungen übersteigen, da ansonsten das Signal-zu-Untergrund-Verhältnis die Qualität der Daten beeinträchtigt. Typische Werte für Gastargets liegen im Bereich zwischen  $10^8$  und  $10^{10}$  Teilchen/ $\text{cm}^3$ .

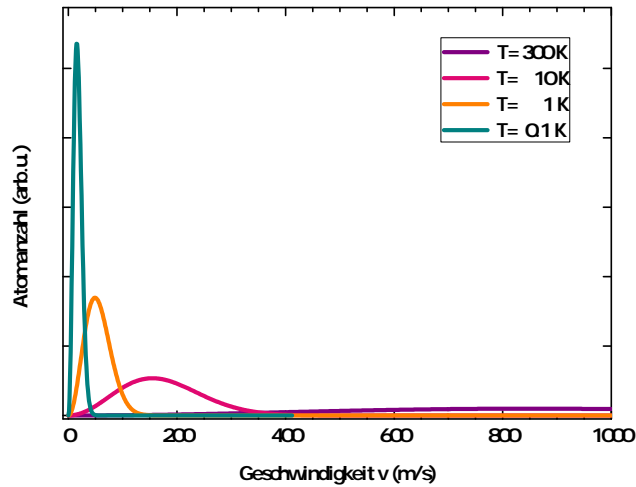


Abbildung 4.1.: Maxwell-Boltzmann-Verteilung der Geschwindigkeiten in einem atomaren Ensemble für verschiedene Temperaturen.

3. Die räumliche Ausdehnung des Targetgases sollte möglichst gering sein. Wie im vorherigen Kapitel erläutert, verschlechtert sich die Impulsauflösung mit zunehmender Größe des Reaktionsvolumens. Das Reaktionsvolumen entspricht dem Überlapp des Projektilstrahls mit dem Target. Entlang der Projektilrichtung ist es also nur durch die Ausdehnung der Targetwolke begrenzt. In den meisten Reaktionsmikroskopen beträgt der Targetdurchmesser (entlang des Projektilstrahls) wenige Millimeter.

In allen früheren Reaktionsmikroskopen wurden die Targets mit Überschall-Gasjets präpariert (siehe Abbildung 4.2). Hierbei wird ein Gas der Temperatur  $T_0$  und dem Druck  $p_0$  durch eine schmale Düse mit einer Kammer mit niedrigerem Druck  $p_1$  (wobei  $p_1/p_0 < 2$ ) verbunden, wodurch eine gerichtete adiabatische Ausdehnung mit Überschallgeschwindigkeit stattfindet. Dabei wird ein Großteil der freien Enthalpie (Summe der thermischen Energie und der durch den Druck gespeicherten mechanischen Arbeit) in gerichtete kinetische Energie umgewandelt. Durch sogenannte Skimmer, kegelförmige Blenden, wird der Strahl in seiner räumlichen Ausdehnung und transversalen Impulsbreite weiter reduziert. Je nach Aufbau und verwendetem atomarem Target kann mit dieser Technik eine Temperatur von mehreren hundert mK erreicht werden, was in etwa einer Impulsunschärfe von 0.1 a.u. entspricht. Eine ausführliche Beschreibung der Funktionsweise eines Überschall-Gasjets findet sich beispielsweise in [118].

Es eignen sich jedoch nur bestimmte Atomsorten zur Präparation in einem Jet. Die Teilchen müssen in aller Regel bei Raumtemperatur in der Gasphase vorliegen. Dies ist zwar bei vielen Molekülen der Fall, bei atomaren Targets allerdings ausschließlich für Edelgase erfüllt. Die Einbringung anderer Atomsorten ist mit einem



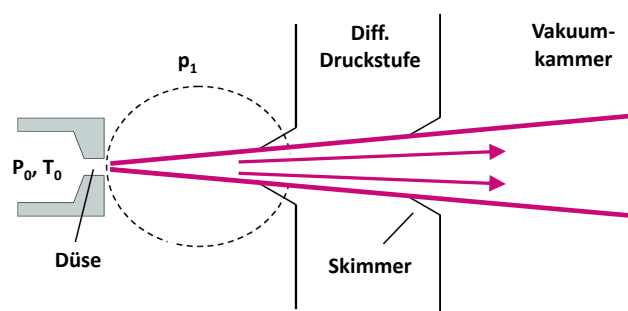


Abbildung 4.2.: Targetpräparation mit Hilfe eines Überschall-Gasjets. Abbildung nach [114].

Gasjet nur mit größerem technischen Aufwand, zum Beispiel mit einer zusätzlichen Dissoziationsstufe [84], oder mit „geseedeten“ Jets (siehe hierzu [119, 120]) möglich.

Eine alternative Möglichkeit der Präparation eines Targets ist die Implementierung einer magneto-optischen Falle (MOT). Hierbei werden Atome in der Gasphase durch resonante Photonen eines Laserfeldes abgebremst und aufgrund ihrer Wechselwirkung mit einem inhomogenen Magnetfeld gespeichert. Die hiermit erreichbaren Temperaturen liegen weit unter einem mK und sind somit mindestens um den Faktor  $10^3$  kälter als die eines Überschall-Gasjets, während die Targetdichte in etwa vergleichbar bleibt. Zudem ist in einer MOT die Kühlung in drei Raumdimensionen identisch, während beim Gasjet die Absenkung der Temperatur in Strahlrichtung meist nur bis zu wenigen Kelvin möglich ist. In bisherigen Experimenten wurden MOTs zur Targetpräparation nur in Rückstoßionenspektrometern eingesetzt. Eine koinzidente Detektion der Elektronen in einem Reaktionsmikroskop war bislang nicht möglich [121] und wurde im Rahmen dieser Arbeit erstmals realisiert.

In den folgenden Kapiteln wird erst auf die Theorie einer MOT eingegangen, bevor der Aufbau und die dazu notwendigen Komponenten der Atomfalle genauer beschrieben werden.

## 4.1. Theoretische Grundlagen

### Laserkühlung

Die Möglichkeit der Kühlung von Atomen mit Hilfe des gerichteten Lichtfeldes eines Lasers wurde bereits 1950 erstmals erwähnt [122], eine experimentelle Realisierung dieses Prinzips wurde allerdings erst in den 70er Jahren des letzten Jahrhunderts vor-

geschlagen (siehe [123,124]). Es dauerte weiterhin bis 1985 bis eine erste erfolgreiche Realisierung der Laserkühlung neutraler Atome durchgeführt werden konnte [125].

Das Kühlen beruht auf der sich wiederholenden Absorption und Re-Emission der Photonen des Lichtfeldes durch ein Atom. Prinzipiell kann die Re-Emission kohärent oder inkohärent mit dem einfallenden Laserstrahl erfolgen. Zum kohärenten Prozess, wie er beispielsweise in optischen Dipolfallen [126, 127] ausgenutzt wird, sind hohe Lichtintensitäten notwendig, wobei die Laserstreuung nicht resonant zu dem atomaren Übergang ist. Die Kraft die auf das Atom wirkt, beruht hierbei auf der Wechselwirkung zwischen dem (induzierten) elektrischen Dipolmoment  $\vec{p}$  des Atoms und dem elektrischen Feld  $\vec{E}$  des Lichtstrahles. Da die Dipolkraft relativ klein ist, kann sie zur Speicherung einer bereits vorgekühlten Atomwolke verwendet werden (siehe auch [128]), nicht jedoch zur Kühlung eines atomaren Gases auf Raumtemperatur.

Die inkohärente Re-Emission von Photonen wird in MOTs nutzbar gemacht. Hier wird auf die Atome in einem Lichtfeld durch resonante Absorption und anschließende spontane Emission von Photonen eine Kraft ausgeübt, welche auch als Spontan- oder Streukraft bezeichnet wird. Das zur Kühlung führende Prinzip wird im Folgenden erklärt:

Die Photonen eines Lichtfeldes haben eine Energie sowie einen Impuls,

$$E_{ph} = \hbar\omega \quad (4.2)$$

$$\vec{p}_{ph} = \hbar\vec{k}, \quad (4.3)$$

wobei  $\omega = 2\pi\nu$  die Kreisfrequenz des Lichtfeldes und  $k = 2\pi/\lambda$  die Wellenzahl darstellen. Bewegt sich nun ein Atom entgegen der Aussendungsrichtung eines kollimierten Laserstrahles, kann es Photonen absorbieren, sofern die Frequenz des Lichtes im Ruhesystem des Atoms einem Übergang zwischen den Elektronenniveaus des Atoms entspricht. Das Atom wird angeregt und befindet sich in einer energetisch höher liegenden Elektronen-Konfiguration.

Da die Bewegungsrichtung des Atoms dem der Photonen entgegen gerichtet ist, führt die Absorption des Photonenimpulses zu einer Abbremsung des Atoms. Bei der darauffolgenden Abregung des Atoms durch die spontane Emission eines Photons wird zwar wiederum ein Impuls auf das Atom übertragen, die spontane Emission und damit der Rückstoß sind jedoch ungerichtet und verschwinden bei der ständigen Wiederholung dieses Zyklus im Mittel über die Raumrichtungen, wohingegen die Absorption ein gerichteter Prozess ist und deshalb zur Kühlung der Atome führt. Auf diese Weise kann eine Reduktion der atomaren Geschwindigkeit auf sehr geringe Werte, theoretisch bis hin zur Größenordnung des Photonenimpulses, erreicht werden. Der Zyklus von Absorption und spontaner Emission findet mit der Rate  $\gamma$  statt, die der reziproken Lebensdauer des angeregten Zustandes  $\gamma = 1/\tau$  entspricht.

Eine detaillierte Herleitung der Wechselwirkung zwischen einem Atom und einem Lichtfeld beruht auf dem Formalismus der optischen Bloch-Gleichungen und wird beispielsweise in [129] ausführlich dargestellt.

Im Gleichgewichtszustand lässt sich die Streurrate, mit der das Atom Photonen emittiert, als das Produkt der Rate  $\gamma$  und der Besetzungswahrscheinlichkeit des angeregten Zustandes  $\rho_{ee}$  ausdrücken:

$$\Gamma_{SR} = \gamma \rho_{ee} \quad (4.4)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit  $\rho_{ee}$  hängt dabei von den atomaren Eigenschaften wie Lebensdauer  $\tau$  und Resonanzfrequenz  $\omega_0$ , sowie von Parametern des Lichtfeldes wie der Intensität  $I$  und der Verstimmung des Lasers von der eigentlichen Resonanzfrequenz  $\delta = \omega_0 - \omega_L$  ab. Durch die Lösung der stationären Bloch-Gleichungen (siehe [129]) ergibt sich

$$\rho_{ee} = \frac{s_0/2}{1 + s_0 + (2\delta/\gamma)^2}, \quad (4.5)$$

mit

$$s_0 = I/I_s, \quad (4.6)$$

wobei  $I_s$  die Sättigungsintensität darstellt und sich allein aus den atomaren Eigenschaften ableitet:

$$I_s \equiv \frac{\pi \hbar c}{3\lambda^3 \tau} \quad (4.7)$$

Die Streurrate am Beispiel von Lithium in Abhängigkeit von der Verstimmung ist in Abbildung 4.3 für verschiedene Sättigungsparameter  $s_0$  dargestellt. Die Streurrate steigt demnach nicht nur mit steigender Laserintensität an, für größere  $s_0$  verbreitert sich diese zusätzlich, ein Effekt der als Leistungsverbreiterung bekannt ist. Eine Steigerung der Intensität führt daher zu einer besseren Absorption des Lichtes auch bei größeren Verstimmungen.

Übersteigt die Laserintensität den Wert von  $I_s$  deutlich, befindet sich der Übergang in Sättigung und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des angeregten Zustandes erreicht einen Wert von 50%. Damit ergibt sich eine maximal mögliche Streurrate von  $\Gamma_{SR,max} = \gamma/2$ .

Die Kraft, die durch die Absorptionszyklen auf das Atom wirkt, ist gegeben durch das Produkt des Photonenimpulses und der Rate, mit der dieser Prozess stattfindet:

$$F_{SR} = \hbar k \Gamma_{SR} = \hbar k \frac{\gamma}{2} \frac{s_0}{1 + s_0 + (2\delta/\gamma)^2} \quad (4.8)$$

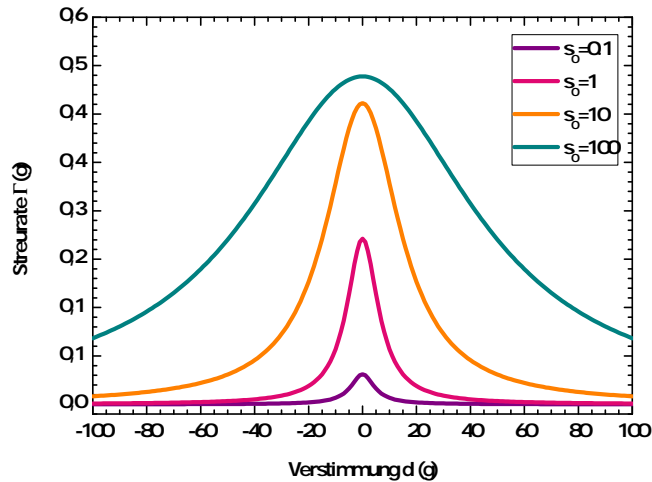


Abbildung 4.3.: Streureate für Lithium in Abhängigkeit von der Verstimmung für verschiedene Sättigungsparameter  $s_0$ .

Auf ein ruhendes Atom kann daher maximal eine Kraft von  $F_{SR,max} = \hbar k \frac{\gamma}{2}$  bei einer maximalen Streureate  $\Gamma_{SR,max}$  wirken.

Soll dieser Lichtdruck zum Kühlen von Atomen mit einer Anfangsgeschwindigkeit  $v$  verwendet werden, muss die durch die atomare Bewegung verursachte Dopplerverschiebung der Lichtfrequenz beachtet werden. Die Verstimmung ändert sich um den Doppler-Term  $\vec{k}\vec{v}$  zu

$$\delta \rightarrow \delta' \equiv \omega - \omega_0 - \vec{k}\vec{v}. \quad (4.9)$$

Das Atom „sieht“ das Laserlicht je nach Bewegungsrichtung zu höheren oder niedrigeren Frequenzen hin verschoben. Bewegt sich das Atom entgegen der Ausbreitungsrichtung des Lichtstrahles, wird die Frequenz des Lichtes zu höheren Werten verschoben, zeigen Ausbreitungsrichtung und atomare Geschwindigkeit in dieselbe Richtung, erscheint die Lichtfrequenz für das Atom geringer.

Wählt man nun Laserlicht, dessen Frequenz im Laborsystem rotverschoben und damit kleiner als die tatsächliche Resonanzfrequenz ist, bewirkt die Bewegung eines Atoms auf die Lichtquelle zu eine Verschiebung hin zur Resonanzfrequenz, wohingegen ein Lichtstrahl, der in Bewegungsrichtung des Atoms ausgesandt wird, weiter weg von der Resonanzfrequenz wahrgenommen wird.

Befindet sich ein Atom in einem Lichtfeld aus zwei anti-parallelen, bezüglich des atomaren Überganges rotverschobenen Lichtstrahlen gleicher Frequenz, wird der Strahl, dessen Bewegungsrichtung der des Atoms entgegengesetzt ist, immer näher

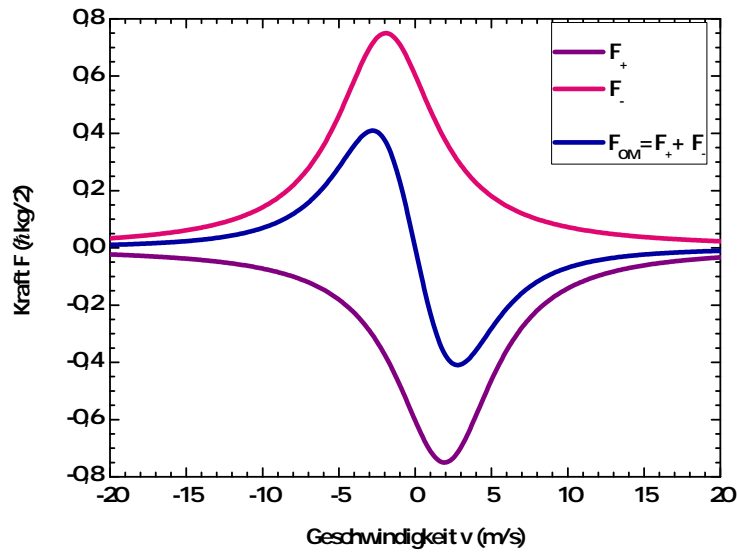


Abbildung 4.4.: Typischer Verlauf der geschwindigkeitsabhängigen Kräfte auf ein Atom in einer eindimensionalen optischen Molasse.

zur Resonanzfrequenz hin verschoben werden und bewirkt eine verstärkte Absorption.

Die Kraft, die auf ein Atom in solch einem eindimensionalen Lichtfeld wirkt, setzt sich aus der Spontankraft der beiden Laserstrahlen zusammen:

$$F_{OM} = F_+ + F_- \quad (4.10)$$

Dabei beschreiben

$$F_{\pm} = \hbar k \frac{\gamma}{2} \frac{s_0}{1 + s_0 + (2/\gamma)^2 (\delta \mp |kv|)^2} \quad (4.11)$$

die von beiden Laserstrahlen bewirkten Kräfte auf das Atom.

Die Summe kann nun durch

$$F_{OM} = \hbar k^2 \frac{8\delta s_0}{\gamma(1 + s_0 + (\frac{2\delta}{\gamma})^2)^2} v \equiv -\beta v \quad (4.12)$$

beschrieben werden, wobei Terme der Größenordnung  $(kv/\gamma)^4$  und höher vernachlässigt werden.

Dieser Ausdruck entspricht einer Dämpfung in der Bewegungsgleichung des Atoms, der zu einer Abnahme der Geschwindigkeit führt. Aufgrund dieses Dämpfungsterms, der mathematisch äquivalent zur Dämpfung der Bewegung eines makroskopischen

Teilchens in einer viskosen Flüssigkeit ist, wird dieses Phänomen auch optische Molasse genannt. Verwendet man in Gleichung 4.11 typische Werte für  $s_0$  und  $\delta$  für ein Lithium-Atom, ergeben sich die auf das Atom wirkenden Kräfte in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit wie in Abbildung 4.4 dargestellt. Für die Kombination der beiden gegenläufigen Laserstrahlen, hier durch die blaue Kurve symbolisiert, verschwindet die Kraft auf ein ruhendes Atom.

Eine Erweiterung dieses Prinzips auf drei Dimensionen ist problemlos möglich, wobei hier drei Paare gegenläufiger Laserstrahlen notwendig sind, um die Bewegung der Atome in allen Raumrichtungen zu verringern.

Ohne zusätzliche Einflüsse auf die atomare Bewegung würden alle Atome innerhalb kurzer Zeit auf die unphysikalische Geschwindigkeit  $v = 0$  abgebremst werden. Daher muss es einen Heizprozess durch das Lichtfeld geben, welcher der Kühlung entgegenwirkt (siehe hierfür auch [129, 130]). Dieser Aufheizprozess beruht auf der diskreten Größe der Impulsüberträge, die auf das Atom bei einem Absorptions- oder Emissionsprozess übertragen werden können. Da dieser Impulsübertrag  $\hbar k$  entspricht, ändert sich die kinetische Energie im Durchschnitt mindestens um die Rückstoßenergie

$$E_r = \frac{p^2}{2m_a} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_a} = \hbar\omega_r. \quad (4.13)$$

Die durch die Absorption aufgenommenen Energie  $\hbar\omega_{abs}$  setzt sich dabei zusammen aus der Energie des Lichtfeldes  $\hbar\omega_0$  und der Rückstoßenergie  $\hbar\omega_r$ . Die Frequenz des absorbierten Lichtes ist damit im Mittel mindestens  $\omega_{abs} = \omega_0 + \omega_r$ . Ebenso setzt sich die bei der Emission freiwerdende Energie  $\hbar\omega_0$  aus der Energie des ausgesandten Lichtes  $\hbar\omega_{emis}$  und der Rückstoßenergie des Atoms zusammen. Daher ist die mittlere Frequenz der Emission  $\omega_{emis} = \omega_0 - \omega_r$ .

Der Energieverlust des Lichtfeldes beträgt somit pro Streuprozess im Mittel

$$\Delta E_r = \hbar(\omega_{abs} - \omega_{emis}) = 2\hbar\omega_r = 2E_r \quad (4.14)$$

und wird durch die Rückstoßbewegung des Atoms in kinetische Energie umgewandelt.

Dieser Energieverlust des Lichtfeldes findet in einer eindimensionalen optischen Molasse mit zwei gegenläufigen Laserstrahlen mit einer Rate von  $2\Gamma_{SR}$  statt, und wird in kinetische Energie des Atoms umgewandelt. Aufgrund der zufälligen Richtung dieses Rückstoßes wird das Atom damit aufgeheizt.

Im Gleichgewichtszustand heben sich die hierdurch bedingte Heizrate

$$R_{heiz} = 2\Gamma_{SR}\Delta E_r = 4\hbar\omega_r\Gamma_{SR} \quad (4.15)$$

und die durch Gleichung 4.12 gegebene Kühlrate  $R_{cool} = F_{OM} \cdot v$  (die laut Gleichung 4.12 proportional zu  $v^2$  und damit der kinetischen Energie ist), auf. Dies führt zu einer Gleichgewichtsenergie von

$$E_{GG} = \frac{\hbar\gamma}{4} \left( \frac{2|\delta|}{\gamma} + \frac{\gamma}{2|\delta|} \right) = \frac{1}{2}k_B T. \quad (4.16)$$

Die kinetische Energie ist minimal für eine Verstimmung von  $\delta = -\gamma/2$  und führt zu einer Minimaltemperatur von

$$T_D = \frac{\hbar\gamma}{2k_B}, \quad (4.17)$$

dem sogenannten Doppler-Temperaturlimit.

Für viele Atomsorten lassen sich experimentell deutlich kältere Temperaturen realisieren, da die magnetische Substruktur der atomaren Übergänge zusammen mit dem überlagerten Lichtfeld der Laserstrahlen zu einem zusätzlichen Kühleffekt führt [131]. Dieses Prinzip ist auch als „Sisyphus-Kühlung“ bekannt. Die damit erreichbare Temperatur leitet sich nun allein aus der Rückstoßenergie der Photonenemission  $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m_a$  ab und definiert das Recoil-Limit der Temperatur

$$T_{rec} = \frac{\hbar^2 k^2}{k_B m_a} \quad (4.18)$$

und damit die minimale Temperatur, die durch Streuprozesse in Wechselwirkung mit einem Lichtfeld erreicht werden kann.

Für Lithium wird dieser Effekt allerdings nicht beobachtet, da die vergleichsweise große thermische Geschwindigkeit, die Lithium aufgrund seiner geringen Masse selbst bei niedrigen Temperaturen besitzt, diese Pump-Effekte im Gegensatz zu schwereren Alkaliatomen verhindert. Für Lithium kann daher eine erreichbare Minimaltemperatur von

$$T_{D,Li} = 140\mu\text{K} \quad (4.19)$$

angenommen werden.

Kältere Temperaturen bis in den nK-Bereich können beispielsweise durch Verdampfungskühlen erreicht werden, wie etwa zur Produktion eines Bose-Einstein-Kondensates verwendet. Seit kurzem wird eine Vorstufe dieser Technik auch in Ionenimpulsspektrometern eingesetzt [127]. Da eine weitere Abkühlung der Atome die erreichbare Impuls-Auflösung dieses experimentellen Aufbaus nicht signifikant verbessern würde und zudem mit einer Verringerung der Dichte einhergeht, werden diese experimentell aufwendigen Methoden in dieser Arbeit nicht angewandt. Einen Überblick über Techniken und Anwendungen des Sub-Doppler-Kühlens und der Speicherung von Atomen bei diesen kalten Temperaturen findet sich etwa in [126] und soll hier nicht weiter ausgeführt werden.

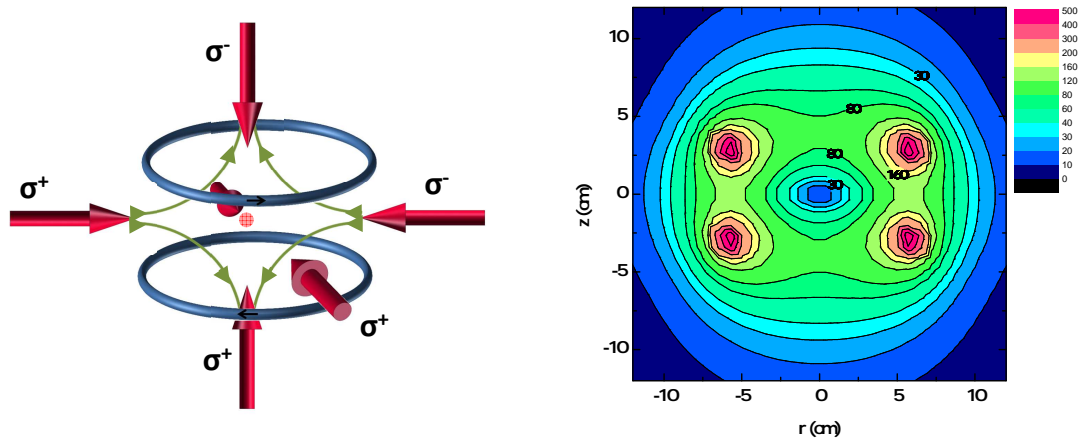


Abbildung 4.5.: Aufbau und Feldverlauf einer magneto-optischen Falle, bestehend aus einer optischen Molasse aus sechs orthogonalen Laserstrahlen (als rote Pfeile dargestellt) und einem inhomogenen Magnetfeld, welches durch zwei Spulen gegenläufiger Stromrichtung erzeugt wird (links durch grüne Pfeile angedeutet). Im rechten Bild ist ein typischer Feldverlauf des hierdurch erzeugten Quadrupolfeldes dargestellt.

## Die Magneto-Optische Falle

Die Bewegung von Atomen in einer optischen Molasse wird zwar durch die wirkenden Lichtdruckkräfte signifikant gekühlt, als Atomfalle kann dies aber nicht bezeichnet werden. Aufgrund des Rückstoßes der Photonenemission führt das Atom eine Zufallsbewegung durch die Molasse aus und kann diese somit auch verlassen, da keine rücktreibenden Kräfte auf das Atom wirken.

Die Kombination eines magnetischen Quadrupolfeldes (etwa erzeugt durch ein Spulenpaar, durch das Strom in entgegengesetzten Richtungen fließt, siehe auch Abbildung 4.5 links sowie [129]) zusammen mit einer optischen Molasse zu einer sogenannten magneto-optischen Falle, ist eine sehr effiziente Atomfalle, bei der das Prinzip des Laserkühlens durch das Magnetfeld um eine rücktreibende Kraft erweitert wird, um Atome speichern zu können. Dabei werden die Atome durch sechs Laserstrahlen im Impulsraum gespeichert, während das Quadrupolfeld zusammen mit der zirkularen Polarisation der Laserstrahlen eine Speicherung im Ortsraum bewirkt.

Die Funktionsweise einer magneto-optischen Falle lässt sich am Einfachsten durch ein eindimensionales Modell, wie in Abbildung 4.6 dargestellt, beschreiben [132]:

Das Lichtfeld der optischen Molasse bewirkt ein optisches Pumpen der Atome, die in erster Näherung als ein Zwei-Niveau-System mit einem Grundzustand  $|g\rangle$



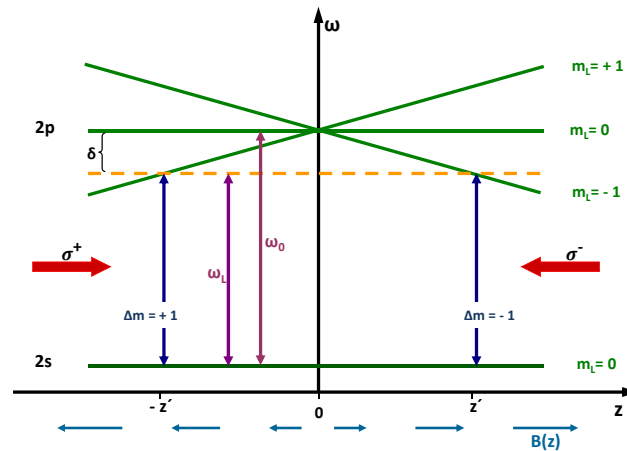


Abbildung 4.6.: Schema der Funktion einer eindimensionalen magneto-optischen Falle am Beispiel Lithium.

sowie einen angeregten Zustand  $|e\rangle$  beschrieben werden können, wobei die Frequenz eines Überganges zwischen diesen beiden Niveaus über die Resonanzfrequenz  $\omega_0$  (bei  $B = 0$ ), gegeben ist.

Das überlagerte Anti-Helmholtz-Feld bewirkt einen näherungsweise linearen Feldgradienten für kleine Abstände zur Fallenmitte, der mit  $B(z) = Ar$  (mit einer konstanten Größe  $A$ ) beschrieben werden kann. Ist der Anfangszustand ein s-Zustand und der angeregte Zustand ein p-Zustand, bewirkt das externe Feld eine Zeeman-Aufspaltung der drei magnetischen Unterniveaus des angeregten Zustandes ( $m_L = 0, \pm 1$ ), die von der Fallenmitte nach außen hin ansteigt, wie in Abbildung 4.6 angedeutet. Dabei wird für positive  $z$  die Zeemankomponente ( $m_L = -1$ ) zu niedrigeren Energien bzw. Anregungsfrequenzen verschoben, der Unterezustand ( $m_L = +1$ ) hingegen zu höheren Energien. Aufgrund der Auswahlregeln können je nach Polarisation des Lichtfeldes nur bestimmte Übergänge induziert werden, so bewirkt Licht der zirkularen Polarisation  $\sigma^-$  eine Änderung der Magnetquantenzahl um  $\Delta m = -1$  (von Grundzustand mit ( $m_L = 0$ ) zu dem angeregten Niveau ( $m_L = -1$ ), wohingegen  $\sigma^+$  zirkular polarisiertes Licht einen Übergang mit  $\Delta m = +1$  induziert.

Da das Licht der optischen Molasse (hier durch  $\omega_L$  beschrieben und deren Größe durch eine gelbe Linie angedeutet ist) zur Kompensation der Dopplerverschiebung um  $\delta$  rotverschoben ist, befindet sich der Übergang mit  $\Delta m = -1$  an Position  $z'$  in Resonanz mit der Laserfrequenz, während der Übergang zum ( $m_L = +1$ )-Niveau zu höheren Frequenzen verschoben ist.

Wählt man die Polarisation des von rechts kommenden Lichtes mit  $\sigma^-$ , wird ein Atom, das sich bei positiven  $z$ -Werten um  $z'$  aufhält, eine stärkere Absorption dieses entgegenkommenden Lichtes aufweisen als für Licht der gedrehten Polarisation. Dadurch wirkt eine rücktreibende Kraft in Richtung Fallenmitte auf die Atome. Die

Dopplerverschiebung der bewegten Atome vergrößert den Bereich der Resonanz um  $z'$  herum.

Die Kraft auf Atome in einer MOT lässt sich analog zu einer optischen Molasse durch Gleichung 4.10 beschreiben, wobei die Verstimmung um die Zeeman-Aufspaltung erweitert werden muss,

$$\delta'_\pm = \delta \mp kv \pm \Delta\mu B(z)/\hbar, \quad (4.20)$$

mit der Änderung des magnetischen Moments  $\Delta\mu$ . Sofern die Zeeman-Aufspaltung und Dopplerverschiebung klein gegenüber der Verstimmung  $\delta$  sind, kann die Kraft auf ein Atom in einer MOT nun durch

$$F = -\beta v - \kappa z \quad (4.21)$$

angenähert werden. Diese ist analog zur Kraft eines gedämpften harmonischen Oszillators mit der Frequenz  $\omega_{osz} = \sqrt{\kappa/m}$  und einem Dämpfungsterm  $\beta$  wie in Gleichung 4.12 definiert. Die Federkonstante  $\kappa$  ist hierbei über

$$\kappa = \frac{\Delta\mu A}{\hbar k} \beta \quad (4.22)$$

gegeben. Für typische Werte einer magneto-optischen Falle für Alkali-Atome ergibt sich hierbei eine überkritische Dämpfung der atomaren Bewegung durch die Falle hindurch.

Das hier vorgestellte Prinzip einer eindimensionalen Falle lässt sich auf drei Dimensionen erweitern, wobei zu beachten ist, dass die radialen und axialen Magnetfeldgradienten je nach Anordnung der Anti-Helmholtz Spulen im Allgemeinen nicht identisch sind. Dadurch ändert sich die Form der Atomwolke zu leicht elliptischen Ausdehnungen.

Die Umkehrpunkte  $z'$  und  $-z'$ , an denen ruhende Atome in Resonanz mit dem eingestrahltten Licht sind und deren Zeeman-Aufspaltung damit der Rotverschiebung des Lichtes entspricht, definieren den maximalen Einfangradius einer MOT:

$$R_c = \frac{\hbar\delta}{\Delta\mu A} \quad (4.23)$$

mit  $A = \frac{\delta B}{\delta z}$ . Im Allgemeinen ist der effektive Einfangradius einer MOT allerdings durch den kleineren Durchmesser der verwendeten Laserstrahlen von etwa 1 bis 2 cm gegeben.

Die größtmögliche Geschwindigkeit, bis zu der Atome eingefangen werden können, wird bestimmt durch die Strecke, auf der ein Atom vollständig abgebremst werden kann. Dies ist durch den doppelten Radius der MOT gegeben und kann über

$$v_c < \sqrt{2R_c \hbar k \gamma / m_a} \quad (4.24)$$

Parameter	Symbol	Größe	[Ref]
Ordnungszahl	$Z$	3	
Natürliches Vorkommen	$\eta$	92.4 %	[133]
Atomare Masse	$m$	7.016 004 u $1.165035 \cdot 10^{-26}$ kg	[134]
Kernspin	$I$	3/2	
Ionisationspotential $Li(2s)$	$IP_{Li(2s)}$	5.4 eV	[135]
Ionisationspotential $Li(2p)$	$IP_{Li(2p)}$	3.5 eV	[135]
Ionisationspotential $Li(1s)$	$IP_{Li(1s)}$	65 eV	[135]
Ionisationspotential $Li^+$	$IP_{Li^+}$	75.6 eV	[135]
Ionisationspotential $Li^{2+}$	$IP_{Li^{2+}}$	122.5 eV	[135]

Tabelle 4.1.: Atomare Eigenschaften von  ${}^7\text{Li}$ .

abgeschätzt werden.

Weitere Parameter einer magneto-optischen Falle wie Lebensdauer, Temperatur oder Verlustmechanismen werden in Kapitel 4.6 beschrieben und anhand einer Lithium-MOT experimentell untersucht.

## 4.2. Eigenschaften von Lithium

Als Target-Spezies wurde in den hier beschriebenen Experimenten Lithium gewählt. Dies hat mehrere Vorteile gegenüber konventionellen Targets (in den meisten früheren Experimenten wurde hierzu Helium verwendet). Zum Einen ist Lithium verhältnismäßig einfach in einer magneto-optischen Falle zu kühlen und zu speichern, und erlaubt damit eine signifikante Verbesserung der experimentellen Auflösung im Vergleich zu Untersuchungen an einem Gasjet-Target. Zum Anderen hat Lithium eine Elektronenkonfiguration, die es für Experimente dieser Art interessant macht.

Lithium ist das dritte Element im Periodensystem und das leichteste der Alkali-Metalle. Es kommt in zwei stabilen Isotopen vor, wobei das bosonische  ${}^7\text{Li}$  (mit einem Kernspin von  $I = 3/2$ ) mit 92.4% das Häufigste darstellt. Während das Ionisationspotential des äußeren Elektrons mit 5.4 eV im Vergleich zu Wasserstoff oder Helium relativ niedrig liegt, erfordert die Ionisation der weiteren Elektronen deutlich höhere Energien (siehe Tabelle 4.1).

Das Kühlen von Atomen erfordert zwei Energieniveaus mit einem dipol-erlaubten optischen Übergang. Für Lithium wird die sogenannte  $D2$ -Linie verwendet, die den Übergang vom ( $2^2S_{1/2}$ ) - zum ( $2^2P_{3/2}$ ) -Niveau beschreibt. Mit einer Wellenlänge von 671 nm ist dieser optische Übergang mit kommerziell erhältlichen Lasersystemen anzuregen. Die Lebensdauer des angeregten Zustandes beträgt  $\tau = 27$  ns und besitzt

#### 4. Präparation eines Targets

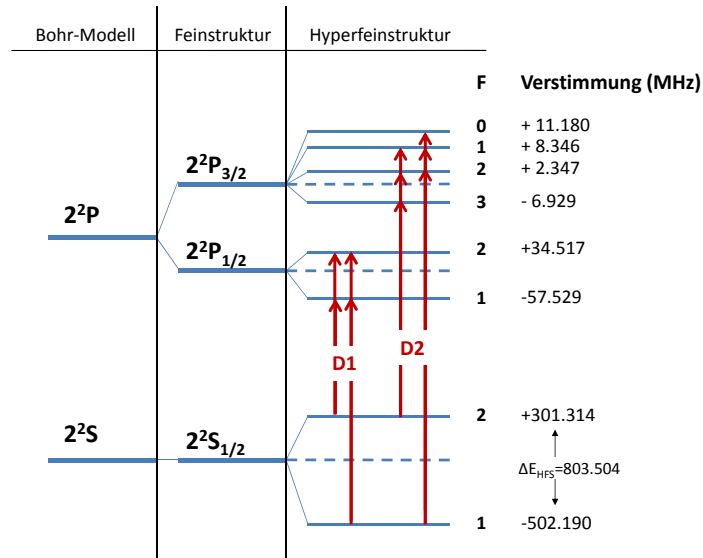


Abbildung 4.7.: Energieschema und Hyperfeinaufspaltung von Lithium.

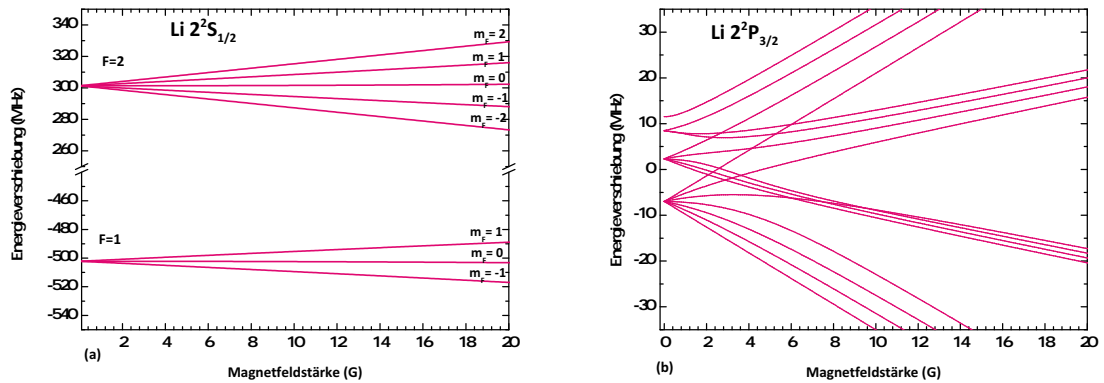


Abbildung 4.8.: Abhängigkeit der Energieniveaus unter Berücksichtigung der Hyperfeinstruktur im Magnetfeld für die Zeeman-Aufspaltung (a) des ( $2^2S_{1/2}$ ) -Grundzustands und (b) des ( $2^2P_{3/2}$ ) -angeregten Zustands für  ${}^7\text{Li}$ .

Parameter	Symbol	Größe	[Ref]
D1-Übergang ( $2^2S_{1/2}-2^2P_{3/2}$ ): (Wellenlänge im Vakuum)	$\lambda_{\text{vac},D1}$	670.9766 nm	[136]
D2-Übergang( $2^2S_{1/2}-2^2P_{1/2}$ ): (Wellenlänge im Vakuum)	$\lambda_{\text{vac},D2}$	670.9616 nm	[136]
Frequenz	$\nu_{D2}$	446.810184 GHz	[136]
Energiedifferenz	$E_{ph}$	1.848 eV	
Lebensdauer	$\tau$	27.10 ns	[137]
inverse Lebensdauer	$\gamma$	$36.90 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$	
Natürliche Linienbreite	$\gamma/2\pi$	5.873 MHz	
Sättigungsintensität	$I_s$	2.54 mW/cm <sup>2</sup>	[138]
Hyperfeinstrukturkonstante $2^2S_{1/2}$	$\alpha_{HFS}(2^2S_{1/2})$	401.76 MHz	[136]
Hyperfeinstrukturkonstante $2^2P_{3/2}$	$\alpha_{HFS}(2^2P_{3/2})$	-3.05 MHz	[136]
Hyperfeinaufspaltung $2^2S_{1/2}$ : Energiedifferenz	$\Delta E_{HFS}/h$	803.504 MHz <sup>2</sup>	[136]
Kühlfrequenz $D2, F = 2 \rightarrow 3$	$\nu_{cool}$	446.809875 GHz	
Pumpfrequenz $D2, F = 1 \rightarrow 2$	$\nu_{pump}$	446.810688 GHz	

Tabelle 4.2.: Spektroskopische Eigenschaften von  $^7\text{Li}$ .

damit eine natürliche Linienbreite von  $\gamma' = 1/2\pi\tau = 5.9 \text{ MHz}$ .

Die Energieniveaus werden durch die Hyperfeinstruktur aufgespalten, wobei der Grundzustand ( $2^2S_{1/2}$ ) in zwei Niveaus (mit  $F = 1, 2$ ) aufspaltet, die einen Energieabstand von  $E_{HFS}/h = 804 \text{ MHz}$  zueinander besitzen. Der angeregte ( $2^2P_{3/2}$ )-Zustand spaltet in vier Hyperfeinniveaus mit den Quantenzahlen  $F = 0, 1, 2, 3$  auf.  $F = J + I$  gibt dabei den Gesamtdrehimpuls des Atoms an, berechnet aus dem Kernspin  $I$  und dem Gesamtdrehimpuls der Elektronenhülle  $J$ . In Abbildung 4.7 ist eine schematische Darstellung des Levelschemas von  $^7\text{Li}$  dargestellt.

In einem externen Magnetfeld kommt es in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke zu einer weiteren Aufspaltung der Zeemankomponenten der Hyperfeinniveaus, wie in Abbildung 4.8 dargestellt. Aufgrund der sehr geringen Hyperfeinstrukturkonstante des angeregten Zustandes, bricht die  $\vec{I} - \vec{J}$ -Kopplung bereits bei sehr geringen Magnetfeldstärken auf, und die Energieniveaus verlaufen nicht mehr linear in einem ansteigenden Feld. Eine ausführlichere Beschreibung der Hyperfeinstruktur und der Wechselwirkung von Atomen in einem externen Magnetfeld findet sich in Anhang A, eine Zusammenfassung einiger spektroskopisch relevanter Parameter des benutzten Kühlüberganges in Lithium ist in Tabelle 4.2 zu finden.

Der eigentliche Kühlübergang liegt dabei zwischen den Zuständen ( $2^2S_{1/2}, F = 2$ ) und ( $2^2P_{3/2}, F = 3$ ). Dies ist ein geschlossener Übergang, das heißt, aufgrund der Auswahlregeln darf der angeregte Zustand nur zurück in den Grundzustand mit

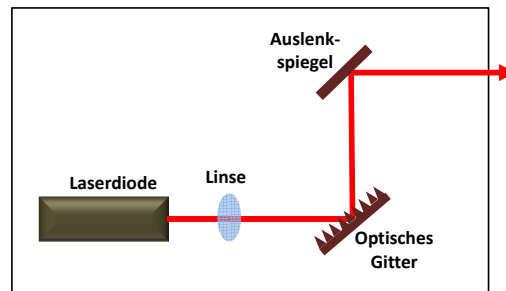


Abbildung 4.9.: Funktionsweise der Littrow-Konfiguration eines ECDL.

$F = 2$  zerfallen, nicht aber in den anderen Hyperfein-Grundzustand mit  $F = 1$ . Aufgrund der intrinsischen Frequenzverbreiterung des Anregungslasers können die dicht beieinander liegenden Hyperfein-Niveaus des angeregten Zustandes nicht aufgelöst werden. Deshalb findet auch eine Anregung in die  $(2P_{3/2})$ -Zustände mit  $F = 0, 1$  und  $2$  statt, die in den  $(2^2S_{1/2}, F = 1)$ -Zustand zerfallen können und damit für den Kühllaser aufgrund der großen Energiedifferenz der beiden Grundzustände nicht mehr anregbar sind. Innerhalb weniger Absorptionszyklen würden sich die Atome in diesem „Dunkelzustand“ ansammeln und an weiteren Kühlzyklen nicht mehr teilnehmen. Um dies zu vermeiden, wird ein Rückpump-Strahl eingesetzt, der den Übergang aus dem  $(2^2S_{1/2}, F = 1)$ -Niveau in den angeregten Zustand und somit eine effiziente Laserkühlung ermöglicht. Im Falle von Lithium entspricht die Übergangswahrscheinlichkeit aus den angeregten Niveaus in den  $(2^2S_{1/2}, F = 1)$ -Grundzustand etwa 63% der Übergangswahrscheinlichkeit in den  $(2^2S_{1/2}, F = 2)$ -Zustand. Zur optimalen Kühlung der Atome ist daher eine in etwa identische Laserintensität beider Frequenzen notwendig.

### 4.3. Das Lasersystem

#### Überblick über die verwendete Lasertechnik

Die natürliche Linienbreite des zur Anregung benutzten Überganges in Lithium beträgt  $\gamma/2\pi = 5.87$  MHz. Um eine gute Anregungseffizienz zu gewährleisten, sollte die Linienbreite des verwendeten Lasersystems unterhalb dieses Wertes liegen. Bei einer Resonanzwellenlänge von  $\lambda = 671$  nm setzt das eine relative Stabilität von  $10^{-8}$  voraus.

Eine Möglichkeit dies technisch zu realisieren sind sogenannte External-Cavity-Diode-Lasers (ECDL). Hierbei wird die Kavität eines Diodenlasers um ein optisches Gitter erweitert. In der sogenannten Littrow-Konfiguration (siehe [139]), die in Ab-

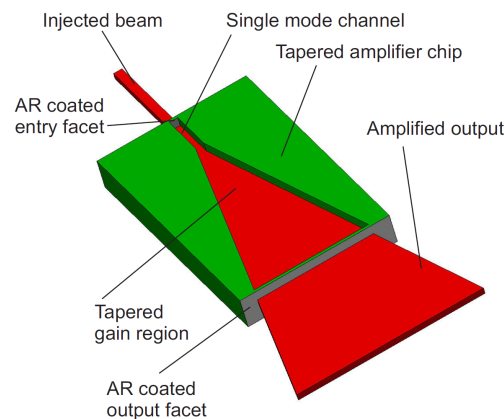


Abbildung 4.10.: Funktionsprinzip einer Tapered Amplifier Diode. Bild aus [140].

Abbildung 4.9 dargestellt wird, trifft der aus der Diode ausgekoppelte Laserstrahl durch eine Kollimatorlinse auf ein drehbares optisches Gitter. Aufgrund der Wellenlängen-Selektivität eines optischen Gitters, die durch  $\lambda = g \sin(\phi)/n$  mit der Gitterkonstante  $g$ , dem Ablenkwinkel  $\phi$  und der Beugungsordnung  $n$  gegeben ist, wird nur ein geringer Teil der anfangs breiten Spektralverteilung der Diode in die Kavität zurückreflektiert und damit verstärkt. Während für die Laserverstärkung die erste Beugungsordnung des reflektierten Strahles verwendet wird, bildet die nullte Ordnung den eigentlichen Output des Lasers. Damit kann eine selektive Verstärkung einer sehr geringen Bandbreite von unter 1 MHz erreicht werden. Durch Modifikation des Anstellwinkels des Gitters kann die Wellenlänge des Lasers variiert werden, wobei die geänderte Ausbreitungsrichtung des reflektierten Strahles durch einen weiteren Spiegel korrigiert werden muss.

Das aus ECDL-Dioden emittierte Laserlicht hat bei Wellenlängen im roten Bereich eine maximal erreichbare Leistung von etwa 30 mW, wohingegen der Betrieb des im Folgenden vorgestellten Laseraufbaus eine Gesamtleistung von mehreren hundert mW voraussetzt. Um diese Leistung zu erreichen, wird das ausgesandte Licht in einem Tapered Amplifier (TA) verstärkt. Tapered Amplifier sind Halbleiter-Laserdioden, deren Verstärkerregion konisch aufgeweitet ist (siehe Abbildung 4.10). Das Licht des Master-Oszillators wird durch einen Einmoden-Kanal in den Verstärker eingekoppelt um eine ausschließliche Verstärkung der Fundamentalmode des Master Lasers zu gewährleisten. Das so modenbereinigte Licht wird in dem anschließenden Verstärkermedium verstärkt, wobei die kegelförmige Form des Mediums einen höheren Verstärkungsfaktor garantiert. So können in roten Wellenlängenbereichen Lichtleistungen von bis zu einem halben Watt erreicht werden, was der benötigten Leistung für diesen Aufbau genügt. Eine genauere Beschreibung der Funktion einer Tapered Amplifier Diode findet sich beispielsweise in [140, 141].

#### 4. Präparation eines Targets

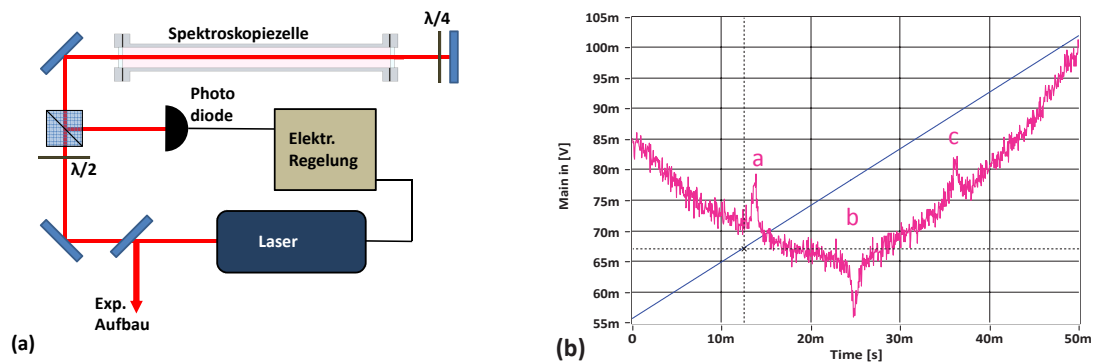


Abbildung 4.11.: (a) Experimentelle Realisierung der Frequenz-Modulations (FM)-Spektroskopie, (b) Absorptionssignal der FM-Spektroskopie einer Lithium Spektroskopiezelle. Dabei entsprechen auf der Abszisse 10 ms einem Frequenzunterschied von etwa 1 GHz. Details siehe Text.

Um die Frequenz des Lasers über einen langen Zeitraum stabil halten zu können, ist ein elektronischer Regelkreis notwendig, um kleinere Abweichungen der Wellenlänge, die beispielsweise durch Temperatur- oder Stromschwankungen in der Diode auftreten, korrigieren zu können. Die Ansteuerung des Regelkreises erfolgt in unserem Fall über Frequenz-Modulations (FM)-Spektroskopie, dessen Aufbau in Abbildung 4.11 (a) dargestellt ist.

Ein kleiner Teil des emittierten Laserlichtes wird durch eine Spektroskopiezelle, die mit etwa 330 °C heißem Lithium-Dampf gefüllt ist, gestrahlt. Wird die Frequenz des Lasers dabei periodisch moduliert, ergibt sich ein Absorptionsspektrum, welches aufgrund der Temperatur der Lithium-Atome stark dopplerverbreitert ist. Dieses dopplerverbreiterte Profil ist in Abbildung 4.11 (b) abgebildet und füllt den kompletten hier dargestellten Zeit- oder Frequenzbereich aus. Reflektiert man den Lichtstrahl auf sich selbst zurück durch die Spektroskopiezelle, kommt es zur Ausbildung sogenannter „Lamb-Dips“, die eine genaue Bestimmung der Resonanzwellenlänge ermöglichen. Dies beruht darauf, dass Atome einer bestimmten Geschwindigkeitsklasse  $v_i$  entlang der Strahlrichtung eine Dopplerverschiebung  $+\delta_i$  des entgegen ihrer Flugrichtung einfallenden Strahles und einer Verschiebung um  $-\delta_i$  des von hinten kommenden Lichts erfahren. Da die Atome durch das Licht einer Richtung bereits in den angeregten Zustand übergegangen sind, kann der gegenläufige Strahl nicht mehr so gut absorbiert werden und ein Minimum der Absorption tritt auf.

Ein typisches Spektroskopie-Signal einer Lithium-Dampfzelle ist in Abbildung 4.11 (b) gezeigt. Peak *a* und *c* stellen die Lamb-Peaks des Kühl- und Rückpumpüberganges der D2-Resonanz dar. Exakt zwischen diesen beiden Frequenzen liegt



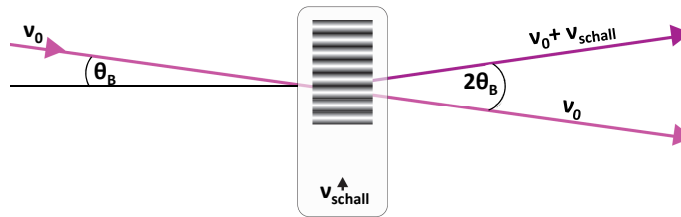


Abbildung 4.12.: Funktionsprinzip eines Akusto-Optischen Modulators.

ein weiteres Absorptionsmaximum, die Crossover-Resonanz  $b$ : Ist die Geschwindigkeit der Atome gerade so groß, dass die Dopplerverschiebung der halben Hyperfeinstrukturaufspaltung des Lithium Grundzustandes von 803.5 MHz entspricht, können die Atome bei der Crossover-Frequenz Licht beider Strahlen gleichzeitig in die jeweiligen Feinstruktur Übergänge ( $2^2S_{1/2}, F = 2$ ) und ( $2^2S_{1/2}, F = 1$ ) nach ( $2^2P_{3/2}, F = 0, 1, 2, 3$ ) absorbieren. Der angeregte Zustand kann wiederum in beide Grundzustände zerfallen, daher wird keiner der beiden Zustände komplett entleert und der rückreflektierte Strahl kann stärker absorbiert werden. Es kommt exakt in der Mitte zwischen den beiden Lamb-Dips bei Lithium zu einer verstärkten Absorptionslinie im Spektrum, der Crossover-Resonanz.

Das von einer Photodiode aufgenommene Absorptionsspektrum wird nun über die elektronische Steuerung zur Frequenzstabilisierung des Lasers verwendet, eine genauere Beschreibung des Regelkreises findet sich unter anderem in [127].

## Aufbau des Lasersystems

Wie in Kapitel 4.2 beschrieben, ist für den Aufbau einer Lithium MOT ein Zwei-Frequenz-System notwendig, wobei der Abstand beider Frequenzen etwa 800 MHz beträgt. Zudem sind alle Kühlfrequenzen in den roten Frequenzbereich verschoben, um ein effektives Kühlen und Speichern der Atome zu erreichen.

Die Funktion der MOT hängt bei einem festen Magnetfeldgradienten empfindlich von den jeweiligen Verstimmungen der Laser ab. Mit dem Aufbau sollte man daher in der Lage sein, im laufenden Betrieb ein Optimum zu ermitteln und einzustellen. Dies wird über die Verwendung von Akusto-Optischen Modulatoren (AOM) erreicht. Akusto-Optische Modulatoren ermöglichen die steuerbare Frequenzänderung eines Laserstrahles, indem der Laser durch ein optisches Gitter propagiert und hierdurch eine Frequenzerhöhung bzw. Frequenzerniedrigung erfährt.

Die Funktionsweise eines AOM ist dabei wie folgt: An einen optisch transparenten Kristall wird eine Radiofrequenz angelegt, welche eine periodische Ände-

#### 4. Präparation eines Targets

---

rung des Brechungsindizes des Mediums bewirkt. Dies führt zur Ausbildung eines optischen Gitters, dessen Gitterkonstante der Wellenlänge der akustischen Frequenz  $\lambda_{schall} = v_{schall}/\nu_{schall}$  entspricht. Trifft ein Laserstrahl unter dem Braggwinkel  $\theta_B = \lambda/2\lambda_{schall}$  auf den Kristall, erfährt er durch den Dopplereffekt eine Frequenzverschiebung um genau die angelegte Schallfrequenz (siehe auch Abbildung 4.12). Dabei wird der Strahl um den Winkel  $\theta = 2\theta_B$  abgelenkt. Diese Frequenzänderung ist nicht zu hundert Prozent effektiv, ein Teil des Lichtes wird unabgelenkt in der nullten Ordnung verbleiben, durch geeignete Auswahl des Mediums und der angelegten Frequenz kann aber eine Effizienz von bis zu 90 % in der ersten Ordnung erreicht werden. Die Ablenkung in höhere Beugungsordnungen ist durch einen geänderten Einfallswinkel  $\theta$  möglich, die Effizienz sinkt dabei aber deutlich. Der Frequenzunterschied zwischen den beiden Grundzuständen in Lithium kann mit Standard-AOMs in erster Ordnung erreicht werden, ohne einen zu großen Effizienzverlust in Kauf nehmen zu müssen.

Der Vorteil der Verwendung eines Modulators im Gegensatz zu einem Frequenzstabilisierten Laser liegt in der Tatsache, dass eine Frequenzänderung des Lasers hier durch eine einfache Änderung der angelegten Schallwelle erreicht werden kann, wohingegen ein Laser, der über einen Regelkreis Frequenz-stabilisiert wird, befindet, nur auf eine bestimmte Frequenz fest eingestellt werden kann und daher nicht durchstimmbar ist. Dies ist aber zur Optimierung der Atomfalle in dem hier vorgestellten Experiment notwendig.

In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten wurden mehrere Konfigurationen des Lasersystems verwendet. Exemplarisch wird hier nur ein Aufbau vorgestellt, siehe Abbildung 4.13. Der zur Frequenzstabilisierung verwendete Spektroskopie-Aufbau ist links oben im Bild dargestellt. Ein kleiner Teil des Laserlichtes (unter 1 mW) wird hinter einem Spiegel ausgekoppelt und durch die Spektroskopiezelle geleitet. In diesem Aufbau wird der Laser direkt auf die Crossover-Frequenz zwischen den beiden Kühlfrequenzen gelockt und erst im weiteren Verlauf des Strahlenganges durch einen eingebauten AOM um mehrere hundert MHz verschoben.

Das durch einen TA verstärkte und kollimierte Laserlicht wird nun in zwei Strahlengänge aufgespalten und jeweils durch einen AOM geführt. Dieser bewirkt eine Verschiebung der Frequenzen der ersten Beugungsordnung um etwa 200 MHz in eine Richtung. Wird dieser Strahl nun reflektiert und erneut durch denselben Modulator gesendet (in einer Doppelpass-Konfiguration), erfährt der Strahl einer weitere Verschiebung derselben Frequenz, so dass das Licht der ersten Ordnung um insgesamt  $2\nu_{AOM}$  verschoben wird. Die Frequenzen der beiden AOMs sind dabei so eingestellt, dass die resultierenden Strahlengänge nicht exakt den Resonanzfrequenzen der beiden Kühlübergänge entsprechen, sondern um einige MHz rotverschoben sind, um eine effektive Kühlung zu gewährleisten.

Der Kühlstrahl (der den Übergang aus dem  $(S_{1/2}, F = 2)$  -Grundzustand anregt)

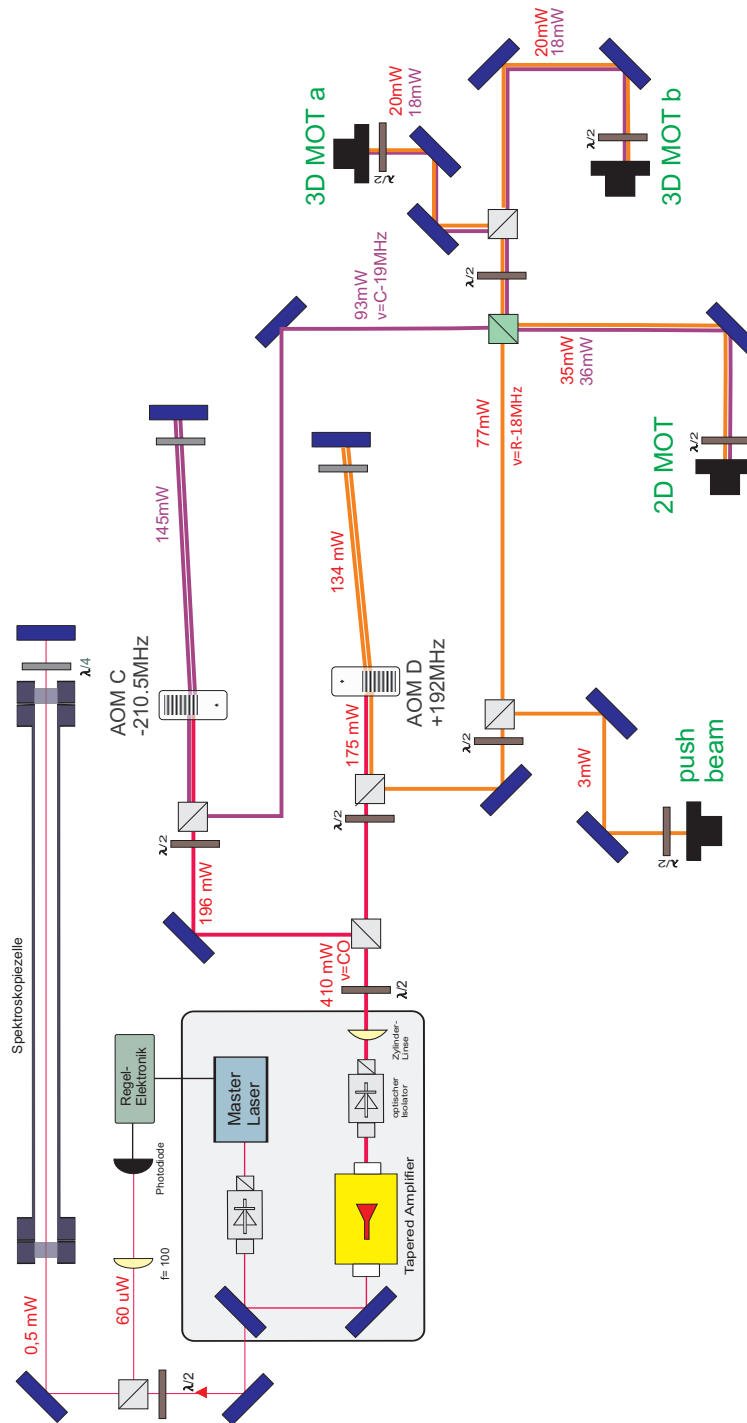


Abbildung 4.13.: Schematischer Laser-Aufbau, wie er zur Durchführung der in Teil V vorgestellten Experimente verwendet wurde. Zur Erklärung siehe Text.

#### 4. Präparation eines Targets

---

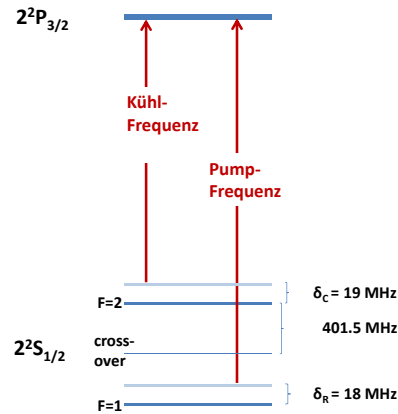


Abbildung 4.14.: Frequenzübergänge und Rotverschiebung der beiden Kühl- und Pumpfrequenzen einer Lithium MOT.

wird dabei durch AOM C erzeugt und wurde auf eine Verstimmung bezüglich der Crossover-Frequenz von insgesamt  $-421$  MHz eingestellt, was einer Rotverschiebung von  $19$  MHz oder  $3.3$  natürlichen Linienbreiten entspricht. Der verbliebene Anteil des Lichts wird durch einen weiteren AOM (in Abbildung 4.13 mit D bezeichnet) geleitet, der eine Frequenzänderung um  $+384$  MHz bewirkt und damit eine Rotverschiebung in Bezug auf die Rückpumpfrequenz von etwa drei natürlichen Linienbreiten aufweist. Die Effizienz der Modulatoren liegt dabei bei etwa  $55\%$ . Eine Übersicht über die hier verwendeten Verstimmungen bezüglich der Crossover-Frequenz ist in Abbildung 4.14 zu finden.

Die jeweiligen Kühl- und Pumpfrequenzen werden mit einem nicht-polarisierenden Strahlteilerwürfel überlagert und anschließend über Spiegelpaare in optische Einmodenfasern eingekoppelt, wobei die Intensitäten des Kühl- und Pumpstrahles in etwa denselben Betrag haben. Die Leistung der MOT Strahlen an der Kammer nach Auskopplung aus den optischen Fasern betrug etwa  $10$  mW pro Kühl- und Pumpstrahl, dementsprechend  $20$  mW Gesamtleistung pro Strahl der 3D MOT und ca.  $50$  mW Gesamtleistung in einem zusätzlichen Strahlengang der zum Betrieb einer 2D MOT benötigt wurde (siehe Kapitel 4.4).

Über  $15$  m lange Glasfaserkabel werden die Laserstrahlen vom Laseraufbau zur Vakuumkammer geführt. Dort wird das Licht durch Kollimatoren auf einen Durchmesser von etwa  $20$  mm aufgeweitet, durch Wellenplatten zirkular polarisiert und durch Quarzglasfenster in die Kammer geleitet. Zum Betrieb einer Standard-MOT sind sechs Laserstrahlen notwendig, in den meisten Aufbauten werden hierfür drei

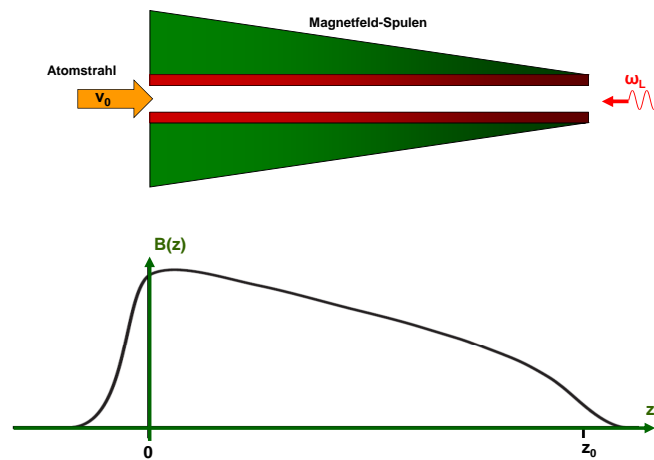


Abbildung 4.15.: Schematischer Aufbau und idealer Magnetfeldverlauf eines Zeeman-Slowers.

orthogonale Strahlen eingesetzt, die nach Durchqueren der Kammer zurückreflektiert werden. Um die dafür notwendige Laserleistung zu reduzieren, wurde in unserem Experiment der vertikale Strahl dreifach reflektiert, so dass zwei Achsen damit abgedeckt werden.

## 4.4. Eine 2D MOT als Atomstrahlquelle

Bei Raumtemperatur ist der Dampfdruck von Lithium äußerst gering und erst bei einigen hundert Grad Celsius ist der Fluss der Atome in die Gasphase zum Laden einer Falle ausreichend. Allerdings ist dann die entsprechende kinetische Energie der Atome deutlich höher als das Potential der Atomfalle und verhindert ein effektives Einfangen. Es ist daher von Nöten, die Atome in der Gasphase vorzukühlen um das Laden der Falle mit hoher Effizienz zu ermöglichen.

Eine Standardprozedur zum optischen Kühlen von Atomen ist das Abbremsen der Atome in einem sogenannter Zeeman-Slower (auch Zeeman-Kühler) [142], wie in Abb. 4.15 dargestellt. In einem heizbaren Reservoir wird Lithium auf 300–600 °C erhitzt, welches durch eine dünne Düse gerichtet ausströmen kann. Die Atome diffundieren nun entlang einer Röhre in Richtung der Vakuumkammer, wobei sie durch einen entgegenkommenden Laserstrahl optisch gekühlt werden. Die veränderliche Dopplerverschiebung, welche die Atome aufgrund ihrer Abbremsung erfahren, kann durch eine Zeeman-Verschiebung der Resonanzfrequenzen durch ein sich entlang der Flugrichtung änderndes Magnetfeld ausgeglichen werden (vergleiche hierzu die

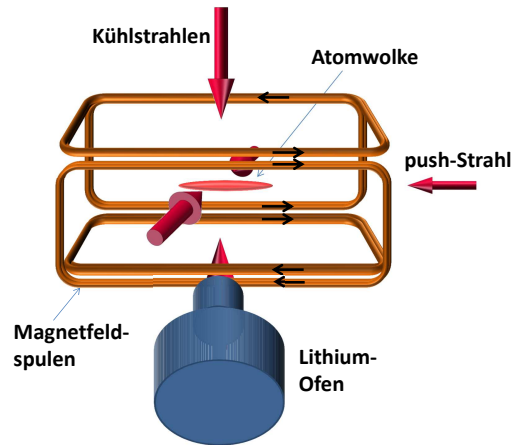


Abbildung 4.16.: Schematischer Aufbau einer 2D MOT.

theoretische Beschreibung des Laserkühlens in Kapitel 4.1). Ein typischer Aufbau ist beispielsweise in [92] beschrieben, in dem dort aufgeführten Experiment wird das Magnetfeld durch acht Spulen mit geringer werdender Wicklungszahl erzeugt, die einzeln angesteuert werden können, um ein möglichst gleichmäßig abfallendes Feld zu erzeugen.

Ein großer Nachteil von Zeeman-Slowern liegt darin, dass Kühlung hier nur in longitudinaler Richtung möglich ist, die transversalen Geschwindigkeitskomponenten werden nur durch die geometrische Anordnung beschnitten. Deshalb muss zum Erreichen hoher Laderaten der Zeeman-Slower möglichst nah an die MOT angeschlossen sein. In dem hier beschriebenen MOTReMi ist dies jedoch nicht ohne Weiteres möglich, da die magnetischen Streufelder des Zeeman-Slowers die impulsaufgelöste Detektion der Elektronen beeinträchtigen würden. Um diese Ineffizienz zu umgehen, wurde in diesem Aufbau ein anderes Konzept zum Laden der Atomfalle gewählt, eine 2D MOT.

Eine 2D MOT beruht auf denselben physikalischen Prinzipien wie eine Standard-MOT. Die Speicherung der Atome findet allerdings nur in zwei Raumrichtungen statt, auf der dazu senkrechten, d.h. longitudinalen Achse wirkt keine begrenzende Kraft. Die Lithium-Atome, die direkt aus dem heißen Reservoir in die Fallenmitte gelangen, werden dort in zwei Dimensionen effektiv gekühlt und in der dritten, unbegrenzten Richtung extrahiert (siehe Abbildung 4.16, sowie [143, 144] und Referenzen darin). Ein schwacher „push“-Strahl auf der longitudinalen Achse schiebt die kalten Atome in Richtung 3D MOT, wodurch sich ein Atomstrahl ergibt, der eine sehr geringe Divergenz aufweist (typischerweise einige cm pro m).

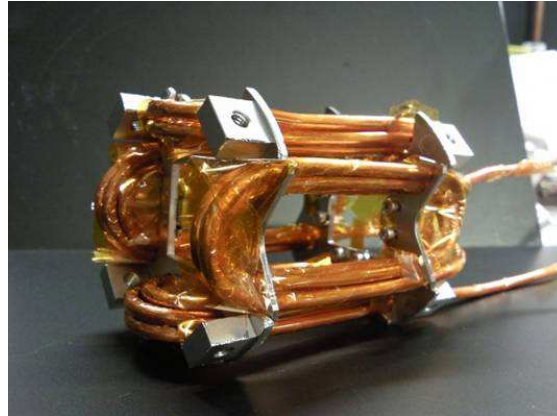


Abbildung 4.17.: Abbildung der eingebauten 2D MOT Spulen auf einer Halterung, die den Einbau in die Vakuummotte gewährleistet.

Das Magnetfeld wird mit vier länglichen Spulen erzeugt (Abb. 4.16), durch die ein Strom in Richtung der eingezeichneten Pfeile fließt. Das dadurch aufgebaute Magnetfeld ist im Inneren der Spule homogen in longitudinaler Richtung und nimmt transversal nach außen hin zu. Da die 2D MOT direkt aus dem heißen Lithium Reservoir gespeist wird, muss der Magnetfeldgradient im Vergleich zu einer Standard-3D MOT relativ hoch sein, um ein effektives Fangen der Atome zu ermöglichen. Es zeigt sich, dass ein Feldgradient von etwa  $60 \text{ G cm}^{-1}$  für eine optimale Funktion der Falle notwendig ist. Um die für das relativ starke Magnetfeld notwendige Stromstärke zu begrenzen, ist es allerdings von Vorteil, die Abmessungen der Spulen möglichst gering zu halten. In diesem Aufbau wurde die Länge der Rechtecke mit 5 cm und die Breite mit 3 cm gewählt, wobei dieser Abstand aufgrund der Vierfachwicklung der einzelnen Seiten effektiv kleiner ist.

Der optische Zugang zur 2D MOT für die transversalen Kühlaser erfolgt durch die Mitte der Spulen. Um eine ausreichende Kühlung der Spulen zu gewährleisten, sind diese aus Kupferrohr hergestellt und aus einem Stück gefertigt, durch das Kühlwasser geleitet werden kann. Zur elektrischen Isolation der Windungen untereinander wurde Kaptonfolie [145] verwendet. Die Spule wurde zur Stabilisierung auf einem Aluminiumhalter montiert, der zusätzlich den präzisen Einbau in der Vakuummotte ermöglicht. Ein Bild der Spule vor dem Einbau ist in Abbildung 4.17 zu sehen.

Die 2D MOT ist in eine separate Vakuummotte eingebaut. Der Ofen, der heiße Lithium-Atome in die Fallenmitte evaporiert, ist in einem Abstand von 16 cm unter der Spule angebracht. Er besteht aus einer kleinen Kammer von etwa  $10 \text{ cm}^3$ , in welcher einige Gramm Lithium eingebracht sind. Durch einen Heizdraht an der Außenseite des Ofens wird das Lithium auf etwa  $300 \text{ }^\circ\text{C}$  erhitzt und verdampft. Die Atome gelangen in den Fallenbereich und können dort gekühlt werden. Damit

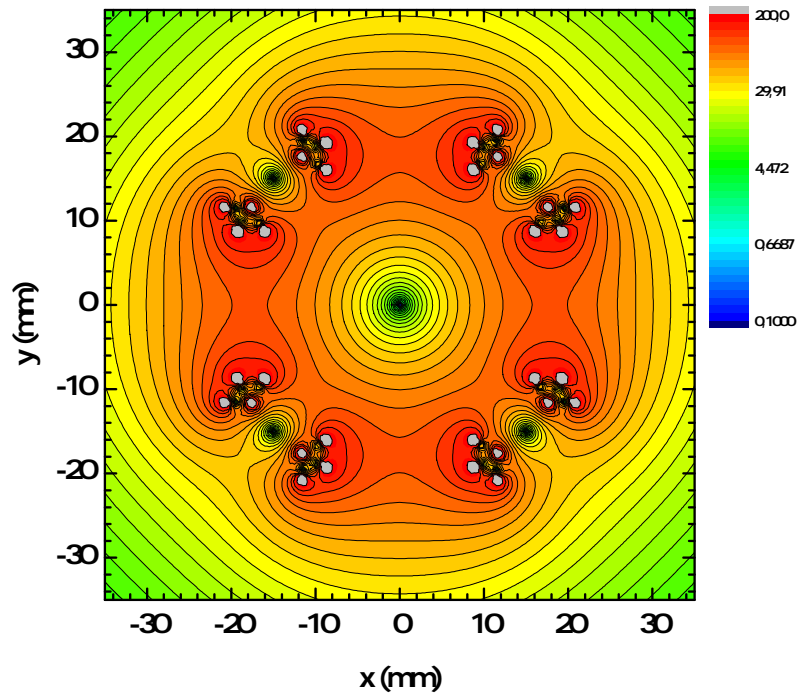


Abbildung 4.18.: Simulation des radialen Magnetfeldverlaufs, erzeugt durch den verwendeten Aufbau einer 2D MOT.

durch den Ofen das Vakuum in der eigentlichen Reaktionskammer nicht beeinträchtigt wird, ist die 2D MOT-Vakuumkammer über eine differentielle Pumpstufe an die Hauptkammer angeschlossen und wird separat gepumpt. Ein Ventil zwischen beiden Kammern ermöglicht eine vollständige Abtrennung beider Rezipienten. Der erreichte Druck in der 2D MOT Kammer beträgt dabei etwa  $10^{-9}$  mbar.

An die Spulen wird ein Strom von 50 A angelegt. Eine Simulation des Magnetfeldes, das sich aus dieser Konfiguration ergibt, ist in Abbildung 4.18 als Funktion der radialen Koordinaten dargestellt. In Abbildung 4.19 findet sich eine Messung des Feldverlaufs in radialer Richtung bei 5 A Spulenstrom sowie die zugehörige Simulation des Feldverlaufs. Ein Vergleich der beiden Kurven zeigt eine gute Übereinstimmung.

Der simulierte axiale Magnetfeldverlauf ist in Abbildung 4.20 zu sehen. Es ist leicht ersichtlich, dass der Feldverlauf in der Mitte der Spule nahezu unabhängig von der longitudinalen Position ist, und das Feld erst ab einem Abstand von 20 mm abfällt.

Die Effizienz der 2D MOT hängt auch hier von einem optimalen Zusammenspiel



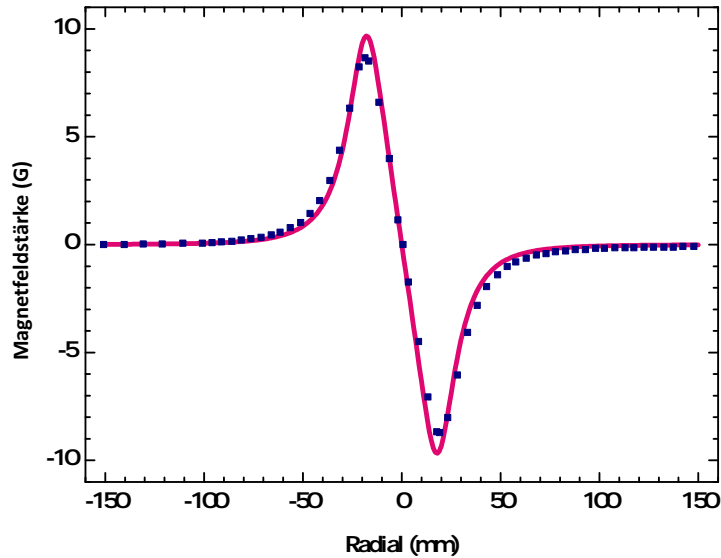


Abbildung 4.19.: Simulation (magenta) und experimentelle Daten (blau) des radialen Magnetfeldverlaufs der 2D MOT bei einem Spulenstrom von 5 A. Daten aus [146].

der atomaren Geschwindigkeiten, des Magnetfeldgradienten, der Laserleistung und -Verstimmung sowie von weiteren Parametern ab. Um die heißen Atome effektiv zu fangen, muss generell die Rotverschiebung des Kühlstrahles deutlich größer sein als dies bei der 3D MOT der Fall ist. In einer quantitativen Messung wurde die optimale Verstimmung in diesem Aufbau ermittelt, in dem die Fluoreszenz der Atomwolke, die von der Anzahl der gefangenen Atome abhängt, mit Hilfe einer CCD Kamera in Abhängigkeit der Verstimmungen der beiden Kühl- und Repump-Strahlen gemessen wurde. Es ergibt sich ein Optimum bei Verstimmungen von 30 MHz für den Kühlstrahl und 18 MHz für den Rückpumpstrahl.

Die technischen Gegebenheiten des Laseraufbaus zum Zeitpunkt der in Teil V vorgestellten Experimente erlaubte keine individuelle Einstellung der Verstimmungen für 2D MOT und 3D MOT Strahlen, sondern Kühl- und Pumpfrequenzen beider Atomfallen waren auf denselben Wert festgelegt. Eine Optimierung wurde dabei auf die Zahl der in der 3D MOT gespeicherten Atome durchgeführt. Dabei hatte die Verstimmung der Strahlen einen größeren Einfluss auf die Funktion der 3D MOT (deren Magnetfeld ständig geschaltet wurde, siehe Kapitel 4.5), während die 2D MOT (deren Feld zeitlich konstant blieb) robuster auf Änderungen reagierte. Die Verstimmungen wurden daher auf die in Tabelle 4.3 beschriebenen Werte festgesetzt und im Laufe der experimentellen Messungen um einige MHz variiert.

Der Durchmesser der Laserstrahlen entspricht in etwa dem freien Durchmesser

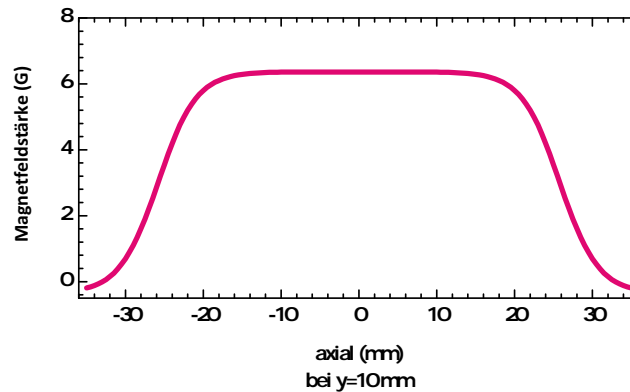


Abbildung 4.20.: Simulierter axialer Magnetfeldverlauf durch die 2D MOT Spule in einem radialen Abstand von 10mm vom Mittelpunkt.

der Magnetfeldspulen und beträgt 12 mm, die Leistung in den beiden Frequenzen durchschnittlich jeweils 23 mW.

Tiecke et al. stellen in [144] eine ausführliche Testreihe einer Lithium 2D MOT vor, in der die Funktion der Atomfalle in Abhängigkeit vieler Parameter untersucht wurde, wobei diese im Bezug auf die Wiedereinfangrate in der 3D MOT gemessen wurden. Im Wesentlichen sollten die dort erreichten Werte auch in diesem Aufbau reproduzierbar sein. Allerdings sind viele der in [144] untersuchten Parameter wie etwa Laserleistung oder Ofentemperatur aufgrund technischer Gegebenheiten in diesem Aufbau nicht ohne Weiteres veränderbar, und wurden nicht weiter untersucht.

Um die gekühlten Atome aus der 2D MOT in das Reaktionsvolumen der 3D MOT zu transferieren, wird ein schwacher (etwa 1.5 mW) push-Strahl auf die Atomwolke gerichtet. Da in diesem Strahl nur die Frequenz des Kühlstrahles eingespeist wird, werden die Atome „angestoßen“ und driften, sobald sie nicht mehr durch die Laserstrahlen der 2D MOT rückgepumpt werden, in Richtung Hauptkammer mit einer konstanten Geschwindigkeit von wenigen  $\text{m s}^{-1}$ . Der push-Strahl ist kontinuierlich, die Atome werden also ununterbrochen aus der 2D MOT in die 3D MOT transferiert. Es konnte nur eine geringe Abhängigkeit der Größe und Laderate der 3D MOT von der Intensität des push-Strahles festgestellt werden, ebenso hatte die Polarisation des Strahls nahezu keinen Einfluss. Variiert man die Verstimmung des push-Strahles, zeigte sich jedoch eine starke Abhängigkeit der Laderate um einen Faktor von 10. Aus praktischen Gründen wurde die Verstimmung bei den meisten Experimenten auf den Wert der Kühlfrequenz der 3D MOT festgesetzt, um weitere Leistungsverluste in frequenzmodulierenden Optiken zu vermeiden. Eine Photographie der 2D MOT findet sich in Abbildung 4.21. Weitere Details des hier verwendeten Aufbaus werden in [146] beschrieben.

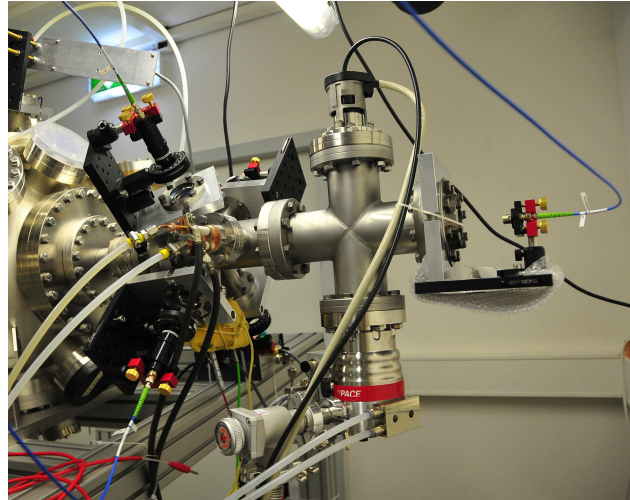


Abbildung 4.21.: Photographie der 2D MOT. Links im Bild sind die Positionen der Faserauskoppler und Spiegel der Kühlstrahlen zu erkennen, während auf der rechten Bildseite der push-Strahl abgebildet ist. Unterhalb des Vakuumaufbaus ist der Lithiumofen in gelb zu sehen.

Die Parameter bei denen die beiden Atomfallen betrieben wurden, sind in Tabelle 4.3 in Kapitel 4.6 zusammengefasst. Einen Überblick über gemessene Variation einiger Kenngrößen ist ebenfalls in Kapitel 4.6 zu finden.

## 4.5. Die 3D MOT im Reaktionsmikroskop

Sowohl zum Betrieb eines Reaktionsmikroskops als auch zum Speichern von Atomen in einer MOT werden magnetische Felder benötigt. Bei der Kombination dieser beiden Techniken besteht nun die Herausforderung darin, die magneto-optische Falle so zu konstruieren und zu betreiben, dass einerseits die Flugbahn der mit dem Reaktionsmikroskop zu messenden emittierten Elektronen nicht durch das Magnetfeld der MOT gestört wird, und andererseits die Lithium-Atome trotz des Reaktionsmikroskop-Feldes mit ausreichender Dichte im Reaktionsvolumen gespeichert werden können. Frühere Versuche ein MOTReMi zu entwickeln, sind an diesen beiden Schwierigkeiten gescheitert, siehe etwa [93, 121]. Im Folgenden wird diskutiert, wie diese Probleme mit dem gegenwärtigen Aufbau gelöst wurden.

### Erzeugung und Schalten des magnetischen Quadrupolfeldes

Um die Atome mit den Kühllasern im Reaktionsvolumen zu speichern, muss in diesem Bereich ein magnetisches Quadrupolfeld erzeugt werden. Wie in Kapitel 4.1 beschrieben, wird hierzu ein inhomogenes Anti-Helmholtz Feld verwendet, welches durch ein Spulenpaar mit anti-parallelem Stromfluss erzeugt wird. Da die Impulsrekonstruktion niederenergetischer Elektronen, die bei einem Ionisationsprozess in einem Stoß zwischen einem Projektil-Ion und einem Lithium-Atom emittiert werden, bei angeschaltetem MOT-Magnetfeld nicht möglich ist, muss dieses Feld vor der Messung ausgeschaltet werden.

Sobald das Feld ausgeschaltet ist, wird die Lithiumwolke zwar gekühlt, aber nicht mehr gespeichert und beginnt zu expandieren (bei einer Temperatur von 1 mK steigt der Durchmesser der Wolke mit einer Geschwindigkeit von etwa 1 mm/ms). Daraus folgt, dass bereits wenige ms nach Ausschalten des Quadrupolfeldes erstens die Dichte der Targetwolke stark reduziert ist, so dass eine Messung der Ionisationereignisse aufgrund der geringen Rate kaum möglich ist, und zweitens die Lithium-Atome sich so weit vom Fallenvolumen entfernt haben, dass sie beim erneuten Einschalten des Feldes nicht mehr in der MOT eingefangen werden können. In diesem Fall müsste also die „leere“ MOT aus der Atomstrahlquelle neu geladen werden, wobei die maximale Targetdichte erst nach etlichen Sekunden erreicht werden würde (siehe Kapitel 4.6), woraus eine relative Messzeit von weniger als einem Promill folgt.

Um beide Einschränkungen zu vermeiden, muss das Magnetfeld also so schnell ausgeschaltet werden, dass das MOT-Magnetfeld im Spektrometerbereich bereits wenige hundert  $\mu$ s nach dem Ausschalten des Spulenstroms so stark abgefallen ist (das Restfeld sollte den Betrag von einigen mG nicht überschreiten), dass eine ungestörte Messung der Elektronenimpulse möglich ist und das Feld bereits nach 1-2 ms wieder angeschaltet werden kann.

Die wesentliche Schwierigkeit, das Magnetfeld so schnell auszuschalten, besteht darin, dass induzierte Wirbelströme in umliegenden Metallteilen wie z.B. den Spektrometerringen oder der Wand der Vakuumkammer ihrerseits wieder Magnetfelder erzeugen, die deutlich langsamer zerfallen als der eigentliche Spulenstrom.

Um dies zu verhindern, wurden einerseits sämtliche Metallringe des Spektrometers und der Spulenhalter geschlitzt, um elektrisch geschlossene Schleifen zu reduzieren. Zusätzlich wurde die Ausdehnung der Spulen und somit des Feldes minimiert, so dass die Induktion an anderen Flächen, wie etwa auch der Kammerwand, reduziert wird. Eine Simulation der Magnetfeldstärke in der Kammer mit einem konventionellen Setup wie beispielsweise in [92] beschrieben, sowie eines Feldes, das durch wesentlich kleinere Spulen, wie sie in diesem Aufbau verwendet werden, erzeugt wird, ist in Abb. 4.22 (a) und (b) dargestellt.

Um eine weitere räumliche Einschränkung des Feldes zu erreichen, wurden zusätzlich Kompensationsspulen eingebaut, die ein schwächeres, dem Hauptfeld ent-

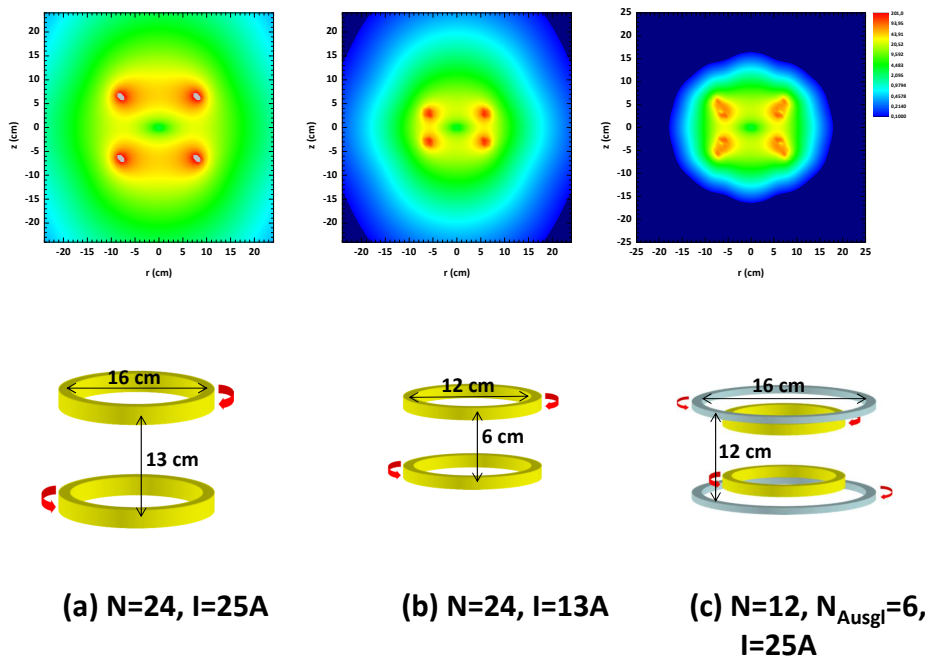


Abbildung 4.22.: Magnetischer Feldverlauf für drei unterschiedliche Spulenkonfigurationen mit der Wicklungszahl  $N$  und einer Stromstärke  $I$ .

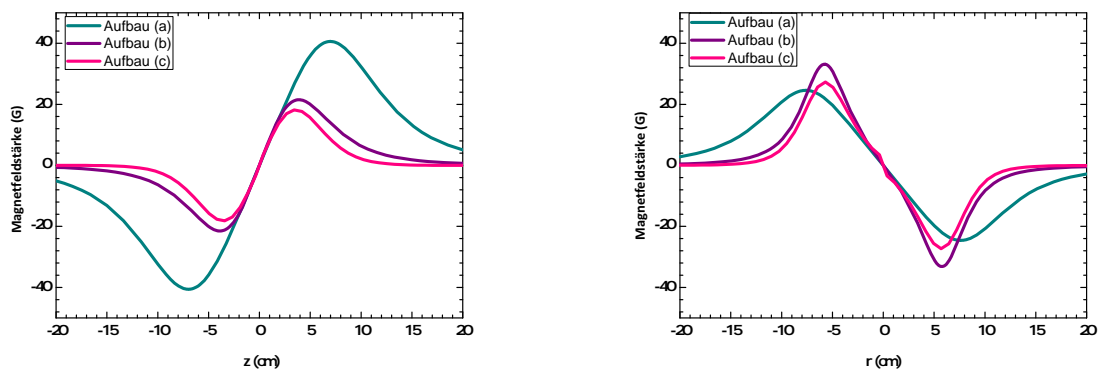


Abbildung 4.23.: Projektion des Magnetfeldverlaufes in axialer und radialer Richtung. Die Kurven beziehen sich dabei auf die in Abbildung 4.22 vorgestellten Spulenkonfigurationen.

#### 4. Präparation eines Targets

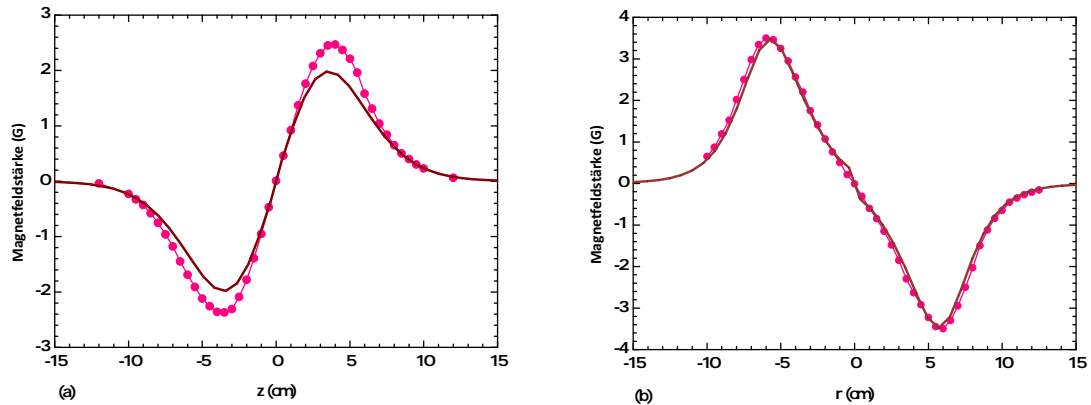


Abbildung 4.24.: Simulation (braun) und Messung (magenta) des (a) longitudinalen und (b) transversalen Feldverlaufes der verwendeten Magnetfeldspulen bei einer Stromstärke von 5 A.

gegengesetztes Magnetfeld erzeugen. Diese Ausgleichsspulen bestehen aus weniger Windungen als die Hauptspulen, werden aber von derselben Stromstärke in entgegengesetzter Richtung durchlaufen. Das hierdurch erzeugte Gesamt-Magnetfeld ist in Abb. 4.22 (c) abgebildet und entspricht der realen Konfiguration des hier verwendeten Aufbaus. Mit dieser Konfiguration kann die Magnetfeldstärke an der Wand der Vakuumkammer (bei etwa 20 cm) bei gleichem Magnetfeldgradienten im Zentrum um etwa den Faktor 100 bezüglich der konventionellen Spulen und immerhin um den Faktor 10 der verkleinerten Spulen reduziert werden (siehe Abbildung 4.23).

In diesem Aufbau wurden Spulen mit 12 Hauptwicklungen und 6 Ausgleichwicklungen mit einem Durchmesser von etwa 12 cm der Hauptspulen bzw. etwa 16 cm (Durchmesser der Ausgleichsspulen) verwendet, die typischerweise von einem Strom in der Größenordnung von 20–50 A (abhängig von anderen MOT-Parametern wie Verstimmung und Intensität der Laser sowie Stärke des anliegenden Helmholtzfeldes) durchflossen werden.

Das magnetische Feld, welches durch die Spulen erzeugt wird, wurde vor dem Einbau in die Vakuumkammer vermessen und mit der Simulation verglichen. Wie aus Abbildung 4.24 ersichtlich, entspricht die Messkurve bei einer Stromstärke von 5 V gut den theoretisch berechneten Werten.

Das Design der Spulen ist in Abbildung 4.25 abgebildet. Die Spulenträger sind so gestaltet, dass sie gleichzeitig als Ringelektroden zur Erzeugung des elektrischen Extraktionsfeldes im Reaktionsmikroskop genutzt werden können. Hierdurch konnte eine sehr kompakte Bauweise erreicht werden (Eine nähere Beschreibung befindet sich in Kapitel 3.2).

Die Spulen selbst wurden aus Kupferrohr hergestellt, welches einen Durchmes-

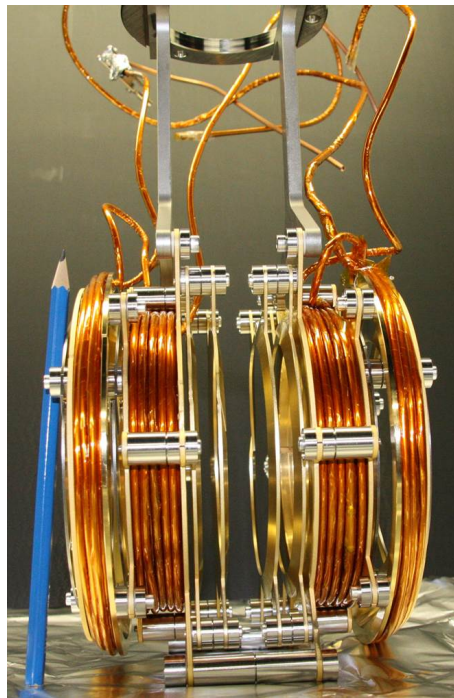


Abbildung 4.25.: Aufbau des Spulenhalters.

ser von 3 mm mit einer Wandstärke von 0.5 mm hat. Um eine elektrische Isolation der Windungen untereinander und vom Metallträger selbst zu gewährleisten, wurde das Rohr mit Kapton HN Folie (Spezifikationen hierzu finden sich im Datenblatt unter [145]) umwickelt. Das Rohr wurde anschließend an die Wasserversorgung angeschlossen, um eine ausreichende Kühlung des Systems zu gewährleisten.

Das Schalten des Spulenstroms wird über einen elektronischen Aufbau gesteuert, der eine sogenannte H-Brücke beinhaltet (siehe Abbildung 4.26). Dieser besteht aus vier Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistoren (MOSFETs), die es ermöglichen, über einen spannungsabhängigen Widerstand einen angelegten Strom innerhalb von Mikrosekunden zu schalten. In einer Testmessung wurde der Abfall des Feldes bei unterschiedlichen Stromstärken vermessen. Ein beispielhaftes Ergebnis ist in Abbildung 4.27 zu sehen. Hierzu wurde durch eine Stromzange der Spulenstrom direkt gemessen. Bei einer Stromstärke von 20 A lässt sich so eine Abschaltdauer von etwa 250  $\mu$ s ermitteln. Der Anschlagprozess scheint aufgrund von Überschwingungen deutlich länger (mehrere ms) zu benötigen, dies beeinträchtigt die Funktion der MOT allerdings nicht wesentlich. Durch den Aufbau der Brückenschaltung ist es möglich, direkt nach dem Abschalten des Magnetfeldes einen entgegengesetzten Strom durch die Spulen zu senden, dies sollte einen schnellen Abfall des Feldes begünstigen [147]. Dieser Effekt konnte in unserem Aufbau allerdings nicht bestätigt werden. Auf eine

## 4. Präparation eines Targets

---

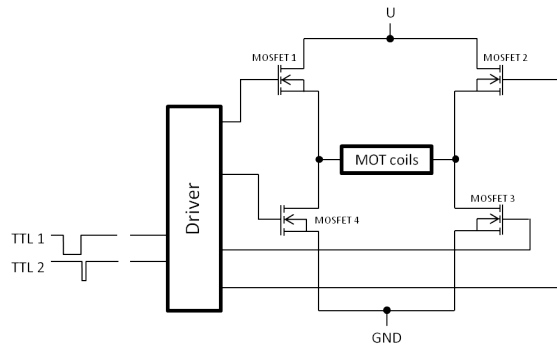


Abbildung 4.26.: Prinzip einer H-Brückenschaltung.

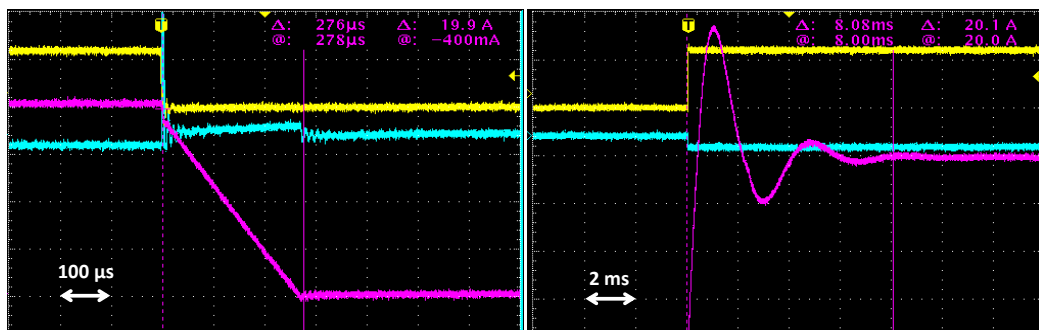


Abbildung 4.27.: Zeitlicher Verlauf der Ein- und Ausschaltvorgänge bei einem Spulenstrom von 20 A. In magenta ist der Abfall der Stromstärke innerhalb der Spulen dargestellt, in gelb ist das Signal zum An- bzw. Ausschalten des Stromes gegeben.



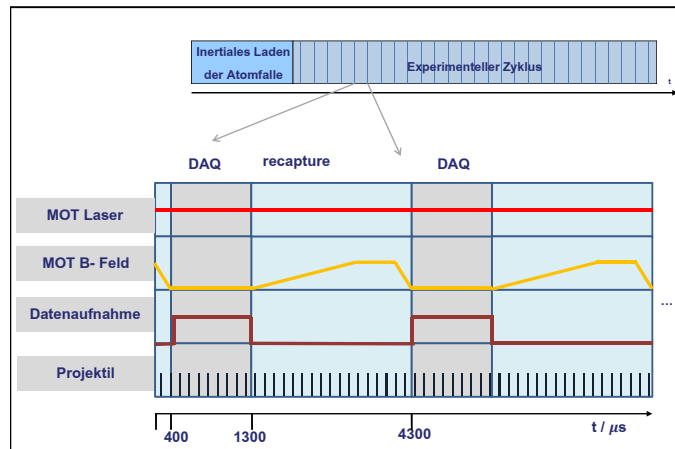


Abbildung 4.28.: Zyklus der Datenaufnahme einer Ionisationsmessung an einer magneto-optischen Falle.

Stromumkehr wurde deshalb bei dem Ausschaltvorgang verzichtet.

Ein typischer Arbeitszyklus ist in Abbildung 4.28 dargestellt. In dem gezeigten Fall wurde das Magnetfeld für eine Dauer von  $1300\ \mu\text{s}$  aus- und für  $3000\ \mu\text{s}$  wieder eingeschaltet. Die Datenaufnahme (symbolisiert durch DAQ in Abb. 4.28, aus dem Englischen, data acquisition cycle) wurde in diesem Schaltzyklus synchronisiert  $400\ \mu\text{s}$  nach Ausschalten des Stromes gestartet, so dass sich insgesamt eine relative Messzeit von etwa 21 % ergibt.

Der Einfluss des abfallenden Magnetfeldes auf die Teilchendetektion ist in Abbildung 4.29 erkennbar und macht sich in diesem Fall durch eine extrem schwankende Flugzeit in den ersten  $500\ \mu\text{s}$  bemerkbar. Der Grund hierfür sind neben einer Verlangsamung des Feldabfalls durch induzierte Wirbelströme in umgebenden Metallteilen wohl hauptsächlich mechanische Schwingungen, die durch das schnell abfallende MOT-Feld in den Spulen selbst (und damit in den Spektrometerringen) erzeugt werden, und eine deutlich längere Abklingzeit als das eigentliche Feld haben. Sobald das Extraktionsfeld einen konstanten Wert erreicht hat, lässt sich in Abbildung 4.29 eine Aufspaltung der Flugzeit erkennen, die dadurch bedingt ist, dass der zur Ionisation verwendete Laser bei dieser Messung in longitudinaler Richtung polarisiert war und es daher zu einer gleichverteilten Emission der Rückstoßionen in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung kommt (siehe Teil III).

Durch eine Optimierung der Stromstärke durch die Spulen, eine Verbesserung der elektronischen Regelung der Schaltung, sowie eine geeignete Wahl des Abschaltzeitpunktes vor Start der Datenaufnahme kann diese Störung noch verringert werden.

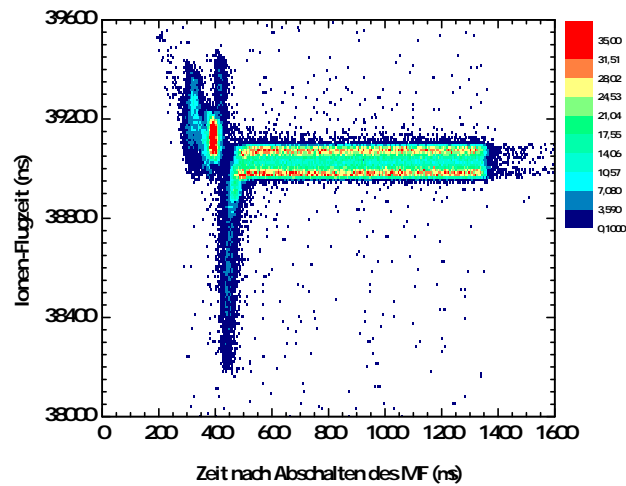


Abbildung 4.29.: Ionenflugzeit aufgetragen über der Zeit nach Abschalten des MOT-Magnetfeldes. Der zur Ionisation verwendete UV-Lasers ist in Flugzeitrichtung polarisiert.

### Der Betrieb der MOT im Reaktionsmikroskop

Die Inkompatibilität des MOT-Magnetfeldes mit der Detektion geladener Reaktionsprodukte erfordert ein Abschalten des Feldes vor jeder Datenaufnahme, was mit einem exponentiellen Abfall der Targetdichte einhergeht. Ein erneutes Laden der 3D MOT findet mit einer Zeitkonstante von mehreren Sekunden statt, deshalb muss ein Weg gefunden werden, einen Großteil der gefangenen Atome durch einen Wiedereinfang kontinuierlich zu speichern. Dieses Prinzip, welches im vorherigen Kapitel beschrieben ist, wird in verschiedenen MOTRims-Experimenten [88–93] erfolgreich angewandt, um eine unbeeinflusste Detektion der Ionenflugbahnen zu ermöglichen. Trotz intensiver Bemühungen konnte eine Rekonstruktion der Elektronenimpulse in keinem vorhergehenden Experiment erreicht werden, da hierzu ein zusätzliches homogenes Magnetfeld notwendig ist, das die Dynamik der Atomwolke beim Laserkühlen signifikant beeinflusst.

In diesem Aufbau wurde die Standard-Funktionsweise einer MOT variiert, um diesen Schaltzyklus zu optimieren. Diese Optimierung beruht auf einer Änderung der Polarisierungen der verwendeten Laserstrahlen und wurde von uns „2.5D MOT“ genannt. Um den Vorteil dieser Konfiguration zu verstehen, ist es sinnvoll, sich das Prinzip einer MOT anhand der wirkenden Kräfte zu verdeutlichen (siehe auch Kapitel 4.1):

Wird ein homogenes Magnetfeld, wie in einem Reaktionsmikroskop zur Elektronen-Extraktion verwendet, in Richtung der Achse der MOT-Spule mit dem MOT-Magnet-

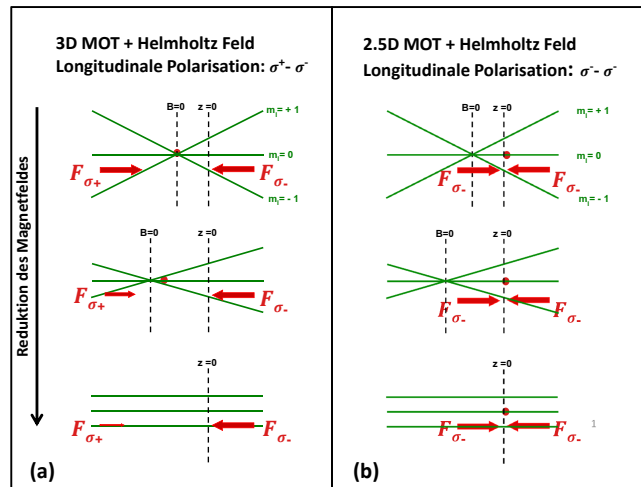


Abbildung 4.30.: Schematischer Vergleich einer 3D MOT mit einer 2.5D MOT.

feld überlagert, verschiebt sich der Nullpunkt des Feldes auf der Magnetfeldachse. Der Nulldurchgang des magnetischen Feldes fällt nun nicht mehr mit dem geometrischen Zentrum der MOT-Spulen bei  $z = 0$  überein, wie dies in der Standard-Konfiguration einer MOT, wie etwa in Abbildung 4.6 dargestellt, der Fall ist. Wird das inhomogene MOT-Feld nun ausgeschaltet und fällt ab, kommt es zu einem Ungleichgewicht der Kräfte, da aufgrund der abnehmenden Zeeman-Aufspaltung der Atome einer der beiden Laserstrahlen aus der Resonanz weggeschoben wird. Dieses Ungleichgewicht führt zu einer effektiven Kraft, wodurch die Atome aus der Fallenmitte hinausgedrückt werden. Dieses Prinzip ist in Abbildung 4.30 (a) verdeutlicht. Ein zusätzlicher Verlust der Fallendichte ergibt sich aus der Tatsache, dass diese Verschiebung der Atome hier etwa 4mm beträgt, was einen beträchtlichen Anteil des Atomstrahldurchmessers aus der 2D MOT ausmacht. Die Ladeeffizienz der MOT wird dadurch zusätzlich verringert.

Ändert man nun die Polarisation des auf der Achse des Helmholtzfeldes verlaufenden Laserstrahles, so dass die beiden rückreflektierten Strahlen dieselbe (zirkulare) Polarisation aufweisen, ändert sich dieses Bild. Aufgrund der Auswahlregeln kann die Absorption der Photonen nun nur noch in einem der beiden magnetischen Unterzustände stattfinden, wie in Bild 4.30 (b) eingezeichnet. Die auf die Atome wirkenden Kräfte sind nun an allen Positionen  $z$  symmetrisch und heben sich gegenseitig auf. Auf die Atomwolke wird somit keinerlei zusätzliche Kraft ausgeübt und der Verlust von Atomen während des Schaltvorgangs minimiert.

Diese Optimierung des Schaltzyklus geht auf Kosten der Gesamtzahl der gespeicherten Atome. Die Speicherung von Atomen in einer MOT beruht auf der rücktreibenden Kraft in Richtung Fallenmitte, dies ist hier jedoch in  $z$ -Richtung auf-

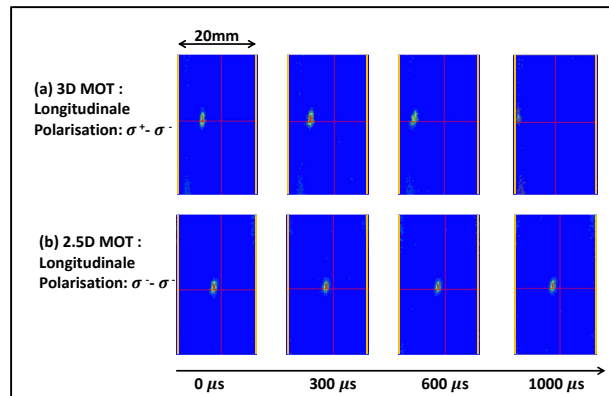


Abbildung 4.31.: Vergleich der Funktion einer 3D MOT mit einer 2.5D MOT anhand der Verschiebung der Atomwolke, aufgenommen mit einer CCD Kamera.

gehoben. Es wirken nur noch die dämpfenden Kräfte einer optischen Molasse. Die Lithium-Atome können dementsprechend aus der Falle hinaus diffundieren und gehen verloren. Das Funktionsprinzip einer MOT ist in diesem Fall auf eine 2D MOT in den beiden transversalen Richtungen sowie eine optische Molasse in longitudinaler Richtung reduziert.

Ein Vergleich beider Betriebsweisen, also 3D- und 2.5D MOT ist in Abbildung 4.31 dargestellt. Mit Hilfe einer CCD-Kamera wurden zu verschiedenen Zeitpunkten nach Abschalten des Magnetfeldes Bilder der Falle aufgenommen. Die Verschiebung der Atomwolke im Falle der 3D MOT ist deutlich sichtbar. Es sei angemerkt, dass die in beiden Konfigurationen maximal erreichbare Dichte (das heißt bei sehr langer Ladezeit) mit ansteigendem Reaktionsmikroskop-Feld sinkt (bei 7.7 G etwa um den Faktor 10).

Man kann in Abbildung 4.31 einen zusätzlichen Nachteil der Standard-Konfiguration erkennen, der sich mit der Verschiebung der Atomwolke ergibt. Der optische Zugang zwischen den beiden innersten Ringen beträgt nur etwa 9 mm vom Spulenmittelpunkt aus, Atome, die über diese Strecke hinaus diffundiert sind, können nicht mehr eingefangen werden. Wie man hier erkennen kann, ist dies nach etwa 1 ms erreicht, wohingegen die Atomwolke in der 2.5D MOT nach dieser Zeitspanne noch relativ kompakt ist und eine deutlich höhere Flugzeit vor dem Wiedereinfang möglich ist. Dies verbessert den Betriebszyklus einer Messung erheblich.

Die Effizienz der 2.5D MOT ist sehr empfindlich im Bezug auf die Anordnung der sechs Laserstrahlen. Die MOT wurde bei laufendem Schaltzyklus auf maximale

Atomzahl justiert, dabei zeigte sich, dass alle Strahlen leicht dejustiert werden mussten, um ein Optimum zu erreichen. Mit exakt rückläufigen Strahlen konnte keine Atomfalle realisiert werden.

Dieser Effekt wurde in optischen Molassen schon früher beobachtet und in der Gruppe von S. Chu „supermolasses“ genannt [148]. Chu beobachtete 1987 einen Anstieg der atomaren Speicherungszeit um bis zu zwei Größenordnungen, sobald vier der Laser etwas aus einer perfekten Überlagerung dejustiert wurden. Die Funktion der optischen Molasse war nahezu unabhängig von der Polarisierung der vier dejustierten Laserstrahlen, eine identische Polarisierung in den beiden noch überlagerten Strahlen führte allerdings zu einer Zerstörung der Molasse.

1994 schlugen Bagnato et al. ein Modell zur Beschreibung der Bewegung eines Zwei-Level-Atoms in einer optischen Molasse vor, wobei der Strahlengang in der x-y-Ebene in einer Art Rechteck dejustiert wurde [149]. Aufgrund dieser Symmetrieberechnung finden Bagnato et al. Kräfte, die ein geschwindigkeitsabhängiges effektives Potential in der x-y-Ebene bilden. Dieses Potential unterdrückt die diffuse Bewegung der Atome aus der Molasse hinaus und verlängert somit deren Lebensdauer. Dabei ist die räumliche Verteilung der Atome nicht mehr gaußförmig, sondern folgt einer Art Ringstruktur um das Fallenzentrum herum.

In dem Fall einer magneto-optischen Falle, insbesondere in Kombination mit einem homogenen Helmholtzfeld, ist die Situation deutlich komplizierter, und das Modell nicht ohne Weiteres übertragbar. Die im Zuge dieser Arbeit durchgeführten Experimente lassen vermuten, dass das Zusammenspiel der räumlich variierenden Polarisierung zusammen mit den zeit- und ortsabhängigen Magnetfeldern eine Art Vortexkraft erzeugen, die im Falle der vorgestellten Konfiguration ein Maximum an Effizienz darstellen. Ein theoretisches Modell hierfür ist bislang nicht entwickelt worden und übersteigt den Rahmen dieser Arbeit.

## 4.6. Charakterisierung des MOT-Targets

### Parameter der MOT

Gegenüber Gasjet-Targets bieten MOTs den Vorteil, dass viele Charakteristika direkt und in-situ aufgrund der emittierten Fluoreszenzstrahlung gemessen werden können. Dazu gehören beispielsweise die Targettemperatur, -ausdehnung und -dichte, die für Gasjets in aller Regel nur unter der Annahme der verwendeten geometrischen und thermodynamischen Parameter abgeschätzt werden.

Im Folgenden wird ein Überblick über einige spezifische Eigenschaften der hier verwendeten Atomfalle vorgestellt. In der Regel wurden diese Messungen mit den in Tabelle 4.3 zusammengefassten Parametern durchgeführt, die auch während der in Teil V vorgestellten Experimente anlagen.

#### 4. Präparation eines Targets

---

Parameter	3D MOT	2D MOT	pushstrahl
Verstimmung Kühlstrahl	19 MHz	19 MHz	19 MHz
Verstimmung Pumpstrahl	18 MHz	18 MHz	-
Gesamtintensität	20 mW	46 mW	1.5 mW
Strahldurchmesser	20 mm	12 mm	3 mm
Magnetfeldgradient	30 G cm <sup>-1</sup>	60 G cm <sup>-1</sup>	-
Helmholtzfeld	7.7 G	7.7 G	7.7 G

Tabelle 4.3.: Parameter, bei der die Atomfallen während der in diesem Kapitel und in den in Teil V vorgestellten Messungen betrieben wurden.

#### Fluoreszenz-Spektroskopie

Aufgrund des meist kleinen Wirkungsquerschnittes vieler Ionenstoß-Experimente ist man auf eine ausreichend hohe Datenrate angewiesen, um ausreichende Statistik über ein Ereignis zu sammeln. Erhöht man hierzu die Intensität des Projektil-Strahles, führt dies auch zu einer Erhöhung des Daten-Untergrundes und ist damit nur bedingt sinnvoll. Deshalb ist es unerlässlich, das Target auf eine möglichst hohe Dichte zu optimieren, um Experimente mit geringen Wirkungsquerschnitten durchzuführen.

Eine einfache Möglichkeit, Information über die Atomwolke abzufragen, ist die Fluoreszenz-Spektroskopie. Aus der Intensität des von den angeregten Atomen ausgesandten Lichtes lässt sich zum Beispiel auf die Anzahl der gefangenen Atome schließen. Diese Methode beeinflusst die Funktionalität der MOT in keiner Weise und wurde somit auch während der Experimente zur Kontrolle der Atomfalle eingesetzt.

Hierbei kam ein CCD (aus dem Englischen, charge-coupled device)-Sensor zum Einsatz. Dies ist ein elektronisches Bauteil, das aus vielen lichtempfindlichen Photodioden oder Pixeln besteht, die je nach Intensität und Expositionsdauer des Lichteinfalls unterschiedlich viele freie Elektronen erzeugen. Dabei lassen sich viele Pixel in einem Sensor zusammenfassen, die dann ein zweidimensionales Bild einer Lichtquelle darstellen können. Die hier verwendete Kamera ist eine Guppy-038 NIR B/C der Firma Allied Vision Tech, die einen Chip der Größe  $6.4 \times 4.8$  cm verwendet. Um den Einfluss statistischer Messschwankungen zu minimieren, wurde die Kamera im gebinnten Zustand verwendet und verfügt so über eine effektive Größe von  $384 \times 246$  pxl mit einzelnen Pixelgrößen von  $16.8 \times 19.6$   $\mu\text{m}$ . Die minimale Belichtungszeit beträgt 62  $\mu\text{s}$ . Es wurde ein Zoom-Objektiv mit einer Brennweite von  $f = 50$  mm und einem maximalen Blendendurchmesser von  $d = 25$  mm vor der Kamera montiert.

Für eine verlässliche Bestimmung der MOT-Parameter muss die Kamera für den vorgesehenen Einsatz kalibriert werden. Zur Auswertung dient hierfür ein LabView Programm, welches das aufgenommene Bild sowie ausgewählte Parameter wie etwa

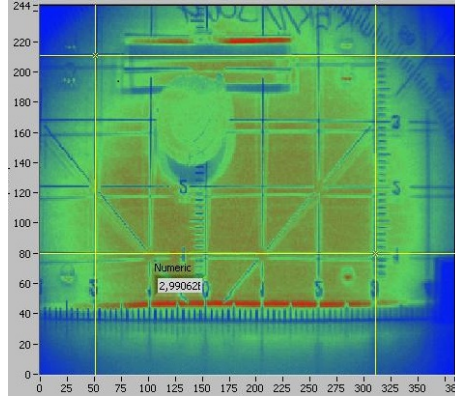


Abbildung 4.32.: Bild der Kalibrierung der CCD Kamera.

Gesamt- und Maximalintensität des Lichteinfalls darstellt.

Am Experiment beträgt der Abstand der Kamera zur Atomwolke  $425 \pm 3$  mm, zur Eichung wurde der CCD-Sensor deshalb in diesem Abstand vor einem Lineal aufgebaut und das Objektiv auf maximale Schärfe und größtmöglichen Zoom bei offener Blende gestellt. Diese Einstellungen wurden anschließend fixiert, um die Kalibrierung beizubehalten.

Aus dem Bild der Kalibrierung (siehe Abbildung 4.32) kann eine Umrechnung von pxl im mm vorgenommen werden. Bei dem gewählten Abstand entspricht sie in waagerechter Richtung  $5.2 \text{ pxl/mm}$ , in senkrechter Richtung  $4.4 \text{ pxl/mm}$ .

Zur Kalibrierung der übertragenen Energie wurde ein Laserstrahl mit bekannter Intensität verwendet. Dieser wurde auf die Kamera gerichtet und die gemessenen Ereignisse  $N_{count}$  pro Zeiteinheit notiert und untergrundbereinigt. Es muss dabei darauf geachtet werden, dass die einzelnen Pixel nicht übersättigt sind, um einen linearen Antwort der Kamera zu gewährleisten. Die Anzahl der ausgesandten Photonen  $N'_{ph}$  berechnet sich nun aus dem Quotienten der auftreffenden Energie des Lasers pro Belichtungszeit  $t_{exp}$  durch die Energie eines einzelnen Photons  $h\nu$ , womit sich der Kalibrierungsfaktor zu

$$\chi_{cal} = N'_{ph}/N_{counts} = \frac{1}{N_{count}} \frac{P_{Laser} t_{exp}}{h\nu} = 21 \pm 6 \frac{\text{Photonen}}{\text{counts}} \quad (4.25)$$

berechnet. Die hohe Unsicherheit der Messung ist durch die extrem geringe Laserleistung der Kalibrierung von  $50 \pm 15$  pW bedingt, die dadurch nicht direkt gemessen werden konnte und aus einer Abschätzung der verwendeten optische Filter bestimmt worden ist.

Zur Charakterisierung der MOT muss nun der Raumwinkel berücksichtigt werden, unter dem Photonen auf die Kamera auftreffen können. Dieser berechnet sich als

$$\Omega = \frac{A}{R^2} = \frac{\pi r^2}{4\pi d^2} = (2.15 \pm 0.5) \cdot 10^{-4}, \quad (4.26)$$

wobei  $r$  den Radius der Blende des Objektivs und  $d$  den Abstand desselben von der Atomwolke angibt.

Die Anzahl der ausgesandten Photonen berechnet sich nun über

$$N_{ph} = N_{counts} \cdot \chi_{cal} \cdot \frac{1}{\Omega}. \quad (4.27)$$

#### Atomzahl, Größe und Dichte der MOT

Ein Rückschluss aus der Zahl der ausgesandten Photonen auf die Anzahl der gespeicherten Atome ist nicht trivial. Mit zunehmender Dichte der Atomwolke nimmt deren Transparenz ab und eine Berechnung der Atomzahl wird ungenau. Wie im Folgenden erklärt, scheint dies in der hier benutzten Atomfalle jedoch kein limitierender Faktor zu sein.

Die Berechnung der Atomzahl unterliegt jedoch der Annahme, dass die Streurrate der Atome bekannt ist. Diese hängt jedoch von Verstimmung und Intensität des Laserlichts ab (siehe Kapitel 4.1).

Will man allein durch eine Fluoreszenz-Messung zuverlässige Aussagen über die Atomzahl machen, ist es notwendig, die Verstimmung nicht zu variieren. Darüber hinaus führt eine Änderung der Verstimmung der Laserfrequenzen im Allgemeinen auch zu einer Änderung der Laserintensitäten, da die Frequenzverschiebung mit AOMs erreicht wurde. Dies wirkt sich somit auch direkt auf die Fluoreszenzrate aus. Sofern im Folgenden verschiedene Messungen dargestellt werden, ist ein direkter Vergleich nur möglich, falls die Verstimmungen der Messungen auf demselben Wert gehalten wurden. Dies ist nicht zwangsläufig der Fall, wenn Messungen mit oder ohne Helmholtzfeld durchgeführt werden, da die Verstimmung der Laserstrahlen hier jedes Mal optimiert wurde. Die folgenden Angaben zur Atomanzahl sind daher nur als Abschätzung zu betrachten.

Die Besetzung des angeregten Zustandes kann beispielsweise durch die Ionisationsquerschnitte im Ionenstoß durch den Vergleich mit theoretischen Vorhersagen bestimmt werden (siehe hierzu Kapitel 9). Die Besetzungswahrscheinlichkeit des angeregten Zustandes wurde hier zu etwa 20% ermittelt. Auch ist eine theoretische Abschätzung der Besetzungswahrscheinlichkeit über Formel 4.5 möglich. Mit Formel 4.4 ergibt sich eine Streurrate von  $\Gamma_{SR} = 0.2\gamma$ . Die Atomzahl lässt sich nun über

$$N_{atom} = \frac{N_{ph}}{\Gamma_{SR} \cdot t_{exp}} \quad (4.28)$$

abschätzen und beträgt in unserem Aufbau etwa  $3 \times 10^5$  Atome.



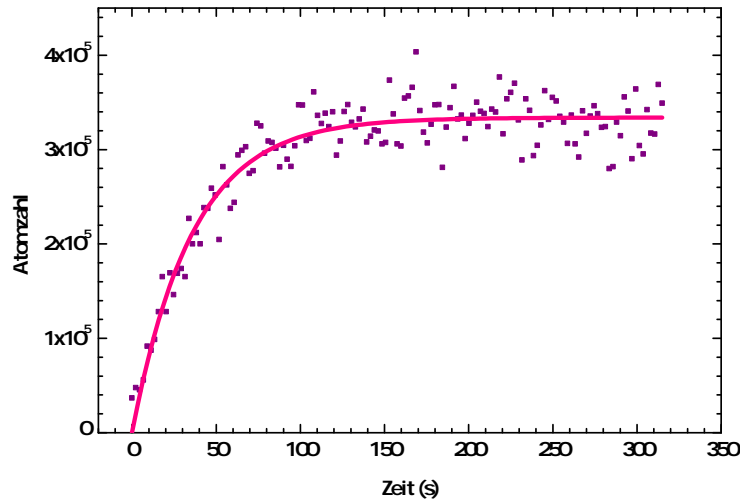


Abbildung 4.33.: Messung und Fit der Laderate der Atomfalle.

Der Durchmesser der Atomwolke beträgt typischerweise  $d_{MOT} = 2$  bis  $3$  mm. Es ist jedoch zu beachten, dass aufgrund des asymmetrischen Betriebs der MOT auch die Targetwolke nicht sphärisch symmetrisch ist.

Unter der Annahme, dass die Verteilung der Atome in der Falle näherungsweise gaußförmig ist, lässt sich die mittlere Dichte in der Mitte der Verteilung über

$$\rho = \frac{N_{atom}}{V_{MOT}} \quad (4.29)$$

mit dem Volumen  $V_{MOT} = \frac{4}{3}\pi r_{MOT}^3$  berechnen. Sie beträgt bei einer den oben genannten Parametern entsprechenden MOT etwa  $10^8$  Atome  $\text{cm}^{-3}$ .

### Laderate

Die Anzahl der Atome in einer magneto-optischen Falle ist bedingt durch ein Gleichgewicht der Lade- und Verlustraten und kann über

$$\frac{dN}{dt} = L - RN - \beta \cdot \int n(r)^2 d^3r \quad (4.30)$$

beschrieben werden. Dabei stellt  $L$  die Laderate,  $R$  die Verlustrate aufgrund von Ein-Teilchen-Kollisionen, bedingt durch Restgasatome, und  $\beta \cdot \int n(r)^2 d^3r$  die Verlustrate durch inelastische Stöße der Lithium-Atome untereinander dar (Zwei-Körper-Stöße). Diese Zwei-Körper-Kollisionen sind vor allem in dichten Atomfallen der Hauptfaktor der Verlustraten.

Bei Zwei-Körper-Stößen können prinzipiell zwei Mechanismen unterschieden werden: Die zustands-verändernden Kollisionen und die radiative Verlustrate (siehe [92]). Bei Ersterem geht ein Stoß zwischen zwei Reaktionspartnern mit einer Änderung des elektronischen Zustandes eines oder beider Atome einher, wobei die freiwerdende Bindungsenergie in kinetische Energie umgewandelt wird, die, sofern sie das Fallenpotential übersteigt, zu Verlusten führt. Während der Energietransfer bei Stößen zwischen Atomen im Grundzustand maximal der doppelten Hyperfeinstrukturaufspaltung  $2\Delta E_{HFS}$  entsprechen kann, können Stöße zwischen einem oder mehreren Atomen im angeregten Zustand zu Änderungen des Feinstrukturzustandes ( $2^2P_{3/2}$ ) zu ( $2^2P_{1/2}$ ) führen. Die Feinstrukturaufspaltung ist mit  $\Delta E_{FS}/h = 10$  GHz deutlich größer als  $\Delta E_{HFS}$  und trägt damit deutlich intensiver zu der Zwei-Körper-Verlustrate bei.

Radiative Verluste treten auf, wenn ein Atom im Grundzustand ein Photon absorbiert und es mit einem nahe benachbarten Atom einen Quasi-Molekülzustand bildet. Das ( $S_{3/2} + P_{3/2}$ ) -Molekülpotential hat eine attraktive Komponente, die mit  $R^{-3}$  abfällt. Auf kurze Distanzen wirkt dieses Potential anziehend und führt zu einer beschleunigten Bewegung der Atome aufeinander zu. Die Emission eines rotverschobenen Photons führt zu einem molekularen Endzustand mit beiden Atomen im Grundzustand und der zusätzlichen kinetischen Energie bedingt durch die beschleunigte Bewegung. Die so dem Lichtfeld entzogene Energie führt nun zu Verlusten der Atome aus der Fallenregion.

In einer MOT die eine vergleichsweise geringe Dichte aufweist, können Zwei-Körper-Stöße vernachlässigt werden und Gleichung 4.30 lässt sich zu

$$N(t) = \frac{L}{R}(1 - e^{-Rt}) \quad (4.31)$$

vereinfachen. Die maximale Atomzahl ist hierbei durch

$$N_{Atom,max} = \frac{L}{R} \quad (4.32)$$

gegeben.

Eine typische Laderate, die der Konfiguration der Atomfalle während der Strahlzeit nahekommt, wurde mit Hilfe der CCD-Kamera aufgenommen und ist in Abbildung 4.33 dargestellt. Die hierbei verwendeten Parameter der Laser sind in Tabelle 4.3 aufgelistet. Dazu wurde die Falle durch das Abschalten eines Laserstrahles vollständig geleert und die Messung gestartet. Die Fluoreszenz der gespeicherten Atome wird in festen Zeitintervallen dokumentiert, bis sie einen konstanten Wert erreicht, welcher der maximalen Atomzahl entspricht. Die Daten wurden gefittet, wobei Verluste aufgrund von Zwei-Körper-Stößen vernachlässigt wurden. Die Übereinstimmung zwischen dem Fit und den Daten ist ein Hinweis darauf, dass die Dichte der Atomwolke gering genug ist, so dass Stöße der Atome untereinander vernachlässigt werden können. Die maximale Atomzahl wird damit hauptsächlich durch Verluste

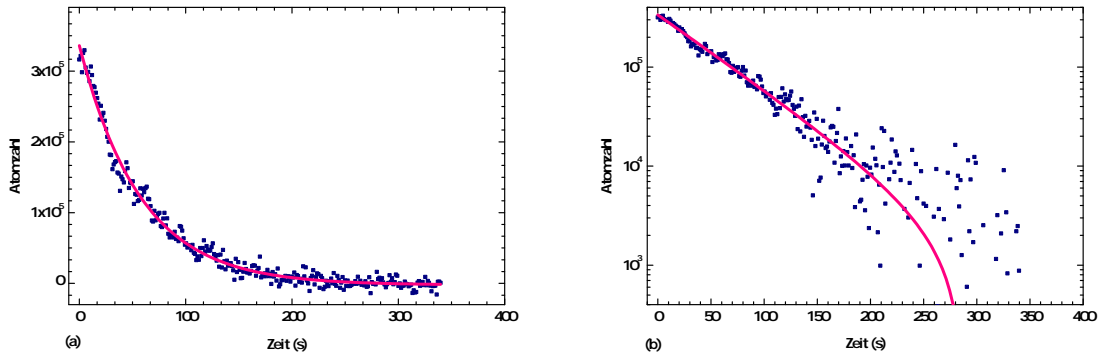


Abbildung 4.34.: Lebensdauerermessung in (a) linearer und (b) logarithmischer Skala der Atomfalle unter den in Tabelle 4.3 angegebenen Parameter.

der Atome mit freien Atomen begrenzt und hängt vom Druck in der Vakuumkammer ab.

In Abbildung 4.33 beträgt die maximal erreichbare Atomzahl etwa  $3 \times 10^5$  Atome, die Laderate beträgt etwa  $3.6 \times 10^4$  Atome  $s^{-1}$ . Dieser Wert liegt weit unterhalb der Raten, die in anderen Lithium-MOT Experimenten sowohl mit Zeeman-Slowern als auch mit 2D MOTs gemessen wurden (siehe [92, 144, 150]). Diese relativ niedrigen Werte lassen sich durch die Tatsache erklären, dass der Aufbau durch das zusätzliche Helmholtzfeld überlagert wird und die Funktion der MOT, wie in Kapitel 4.5 beschrieben, beeinflusst. In den in der Literatur beschriebenen Experimenten war zudem die Laserintensität zumeist deutlich höher und bewirkte ein effektiveres Fangen der Atome.

Eine deutliche Verbesserung der Laderaten ließ sich durch die Erhöhung der Ofentemperatur des Lithiumreservoirs erreichen, da dadurch der Dampfdruck und damit die Anzahl der verfügbaren Atome deutlich ansteigt. Aufgrund von technischen Gegebenheiten wurde während der in dieser Arbeit vorgestellten Messungen auf eine solche Optimierung verzichtet.

### Lebensdauer

Die Lebensdauer der Atome in der Falle ist nicht unendlich lang, da Stöße der Atome untereinander sowie mit Restgasatomen zu einem kinetischen Energieübertrag führen können, der das Fallenpotential übersteigt. Während die Ein-Körper-Stöße mit den Restgasatomen zu einem exponentiellen Abfall der Atomanzahl nach

$$N(t) = N_{Atom,max} \cdot e^{-Rt} \quad (4.33)$$

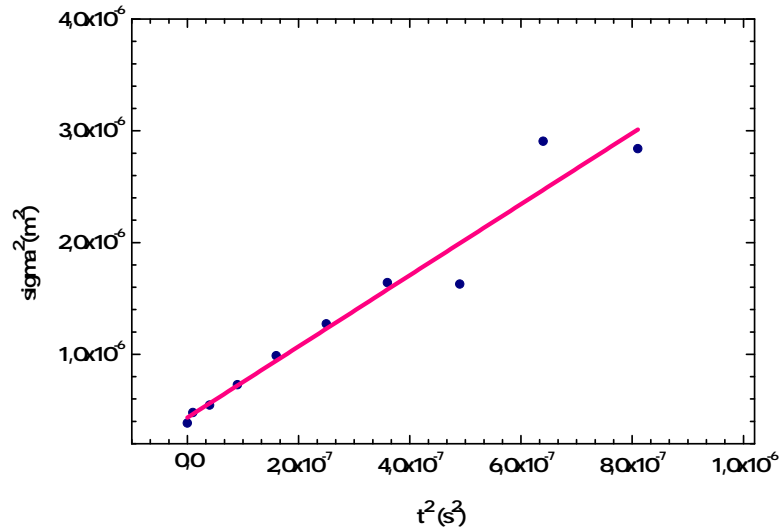


Abbildung 4.35.: Temperaturbestimmung aus der Steigung der Funktion  $\sigma^2$  über  $t^2$ .

führen, bringen Zwei-Körper-Stöße einen dichteabhängigen Term ein, der zu einem superexponentiellen Abfall am Anfang der Kurve führt.

Die Lebensdauer einer magneto-optischen Falle berechnet sich aus Gleichung 4.30 mit der Laderate  $L = 0$  zu

$$N(t) = N_{Atom,max} \frac{R e^{-Rt}}{R + N_{Atom,max} \beta' (1 - e^{-Rt})}, \quad (4.34)$$

und geht im Fall geringer Dichten in Gleichung 4.33 über.

Die Lebensdauer der Atomfalle ist in Abbildung 4.34 dargestellt. Es lässt sich leicht erkennen, dass der Abfall anfangs logarithmisch verläuft. Die Lebensdauer wurde daher nach Gleichung 4.33 gefittet und ist in Abbildung 4.34 durch eine magentafarbene Linie dargestellt.

Die Lebensdauer der Atomwolke wurde gemessen, indem nach vollständigem Laden der MOT der push-Strahl blockiert wurde, die Laserstrahlen und das Magnetfeld aber angeschaltet blieben. Ein Fit der exponentiellen Abnahme durch die gemessenen Daten ergibt eine  $1/e^2$ - Lebensdauer von 57s bei einem Druck von  $2 \times 10^{-10}$  mbar. Diese Lebensdauer ist verglichen mit anderen Lithium-MOTs lang [92, 150], dies ist wohl dem verhältnismäßig guten Druck in der Vakuumkammer sowie der geringen Dichte des Targets zu verdanken.

## Temperatur

Die Temperatur der Atome hängt im Wesentlichen von zwei Faktoren ab, der Verstimmung sowie der Intensität der Laserstrahlen. Die Berechnung der Temperatur

setzt ein Gleichgewicht der Kühl- und Heizraten in der optischen Molasse voraus und berechnet sich über (siehe Gleichung 4.16 sowie [129])

$$k_B T = \frac{\hbar\gamma}{4} \left( \frac{2|\delta|}{\gamma} \right) + \left( \frac{\gamma}{2|\delta|} \right). \quad (4.35)$$

Die minimal erreichbare Temperatur in einer optischen Molasse ist somit bei einer Verstimmung von  $\delta = -\gamma/2$  gegeben und entspricht dem Doppler-Limit  $T_D = \hbar\gamma/2k_B$ , bei Lithium beträgt dieser Wert etwa 140  $\mu\text{K}$ .

Die Heizrate der Atome wird durch die Laserintensität beeinflusst, eine Verringerung der Intensität führt daher zu einer kleineren Endtemperatur der Atomwolke.

Eine Änderung dieser Parameter wird in BEC-Experimenten durchgeführt, um eine möglichst geringe Endtemperatur der Atomwolke zu erreichen, da diese anschließend in eine relativ flache optische Falle übertragen wird. In dem dieser Arbeit zugrundeliegenden Experiment wäre eine so geringe Temperatur nur von Vorteil um die Effizienz des Wiedereinfangs zu erhöhen. Aufgrund des optischen Aufbaus wäre dies allerdings nur sehr aufwendig durchführbar, da sich Intensität und Verstimmungen der beiden Kühlfrequenzen nicht unabhängig voneinander verstellen lassen. Die MOT wurde daher im Rahmen der vorhandenen Freiheitsgrade auf eine möglichst gute Funktion während der Ionisationsexperimente und nicht allein auf eine minimale Temperatur optimiert.

Die Bestimmung der Temperatur erfolgt durch eine Flugzeitmessung, bei der die freie Expansion der Atomwolke in Abhängigkeit von der Flugzeit ermittelt wird. Werden die kühlenden Laserstrahlen sowie das Magnetfeld am Zeitpunkt  $t = 0$  ausgeschaltet, sind die Atome nicht mehr gefangen und breiten sich mit ihrer momentanen Geschwindigkeit aus. Aus der Verbreiterung der atomaren Dichteverteilung lässt sich die Temperatur abschätzen.

Die hier beschriebene Messung der Temperatur fand unter den in Tabelle 4.3 aufgeführten Bedingungen statt, wobei das Helmholtzfeld ausgeschaltet wurde, um eine unbeeinflusste Messung der atomaren Größe zu erhalten.

Zur Ermittlung der Temperatur wird die MOT vollständig geladen, bevor Magnetfeld und Laser ausgeschaltet werden und die Expansion der Wolke startet. Nach einer gewissen Flugzeit werden die Laserstrahlen wieder angeschaltet und ein zweidimensionales Bild der Wolke mit der CCD Kamera aufgenommen. Die Zeitspanne der Belichtung durch die Laserstrahlen sollte dabei möglichst gering gehalten werden, da die so erzeugte optische Molasse einen starken Kühleffekt auf die Atome ausübt und die Messung verfälscht. Aufgrund der minimalen Belichtungszeit der Kamera wurde diese auf 122  $\mu\text{s}$  eingestellt und gleichzeitig mit dem Anstellen der Laserstrahlen gestartet.

Diese Messung wird für unterschiedliche Flugzeiten zwischen 100  $\mu\text{s}$  und 1000  $\mu\text{s}$  wiederholt, wobei immer über jeweils 10 Messungen gemittelt wurde, um statistische Schwankungen auszugleichen.

Um das Signal-zu-Rausch-Verhältnis zu verbessern, wurden die Pixel in einer Dimension anschließend aufsummiert, was bei einer angenommenen gaußförmigen Verteilung die ermittelte Breite nicht verändert. Die Verbreiterung der Atomwolke kann durch eine Faltung der ursprünglichen Dichteverteilung

$$n(x, t = 0) = n_0 \cdot \exp\left(\frac{x_i^2}{2\sigma_i^2(t = 0)}\right), \quad (4.36)$$

sowie der zeitabhängigen Dichteverteilung einer punktförmigen Quelle

$$n = n_{v_i,0} \cdot \exp\left(-\frac{v_i^2}{2\sigma_{v_i}^2}\right), \quad (4.37)$$

mit  $\sigma_{v_i} = \frac{1}{2}k_B T$  beschrieben werden. Das Ergebnis der Faltung ist wiederum eine Gaußverteilung mit der Breite  $\sigma_i = \sqrt{\sigma_i(t = 0)^2 + \frac{k_B T}{m} t^2}$ .

Trägt man nun das Quadrat der Standardabweichung über dem Quadrat der Flugzeit auf, wie in Abbildung 4.35 dargestellt, ergibt sich aus der Steigung  $s$  der Geraden über

$$T = \frac{s \cdot m}{k_B} \quad (4.38)$$

die Temperatur der Atome. Diese wurde in diesem Experiment mit  $T_x = 2.6$  mK in x-Richtung ermittelt, wobei nur Werte mit Flugzeiten zwischen 0 und 900  $\mu$ s berücksichtigt wurden, da größere Flugzeiten aufgrund des schlechten Signal-zu-Rausch-Verhältnisses zu große Abweichungen ergaben.

Die Abweichung dieser Werte von dem minimal erreichbaren Limit liegt wohl hauptsächlich an der Verstimmung der Laserstrahlen, die mit etwa 18 MHz oder drei Linienbreiten deutlich über dem Idealwert von einer halben natürlichen Linienbreite liegen. Schönemann et al. geben in [151] Vergleichswerte von etwa 1 mK für Verstimmungen von 4-5 Linienbreiten, während Steinmann eine Temperatur von 2 mK bei einer Verstimmung von 4 Linienbreiten ermittelt. Die erreichbare Temperatur der Targetatome in einem Gasjet liegt zudem etwa drei Größenordnungen über den hier erzielten Werten.

Die ermittelte Temperatur von 2.6 mK entspricht in etwa einer Impulsverbreiterung von 0.009 a.u. und ist damit nicht in derselben Größenordnung wie die erreichbare longitudinale Auflösung.

### Bestimmung der Target-Polarisation

Der durch die MOT-Laserstrahlen induzierte Übergang der Atome zwischen dem ( $2^2S_{1/2}$ ) - und dem ( $2^2P_{3/2}$ ) -Zustand ermöglicht eine Polarisation des Targets. Atome im feldfreien Raum erfahren keine energetische Aufspaltung ihrer magnetischen

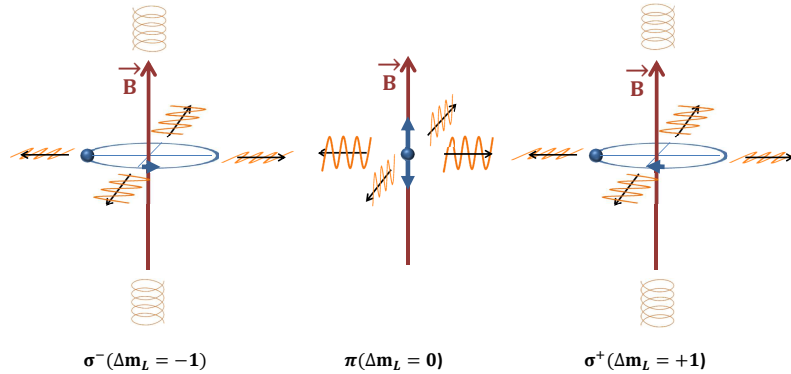


Abbildung 4.36.: Projektion der Polarisation des ausgesandten Lichtes bei Übergängen aus den verschiedenen Zeemankomponenten  $\Delta m_L = 0, \pm 1$ .

Unterstufen und bevölkern diese daher gleichmäßig. Die Atomwolke ist daher unpolarisiert, das durch spontane Emission ausgesandte Licht ebenfalls.

Wird nun das Helmholtzfeld des Reaktionsmikroskops überlagert, führt dies zu folgendem Effekt: Das magnetische Moment des Atoms wechselwirkt mit dem externen Feld und führt zu einer energetischen Aufspaltung der magnetischen Unterzustände. Aufgrund der Rotverschiebung der MOT-Laser wird vorzugsweise der Übergang in die energetisch tiefsten Niveaus des angeregten Zustandes induziert. Dies führt zu einer Asymmetrie der Besetzung der magnetischen Unterzustände und man bezeichnet die Atome als polarisiert. Der Grad der Polarisation hängt von der Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Zeemankomponenten ab.

Fallen die Elektronen aus dem angeregten Zustand zurück in den Grundzustand, wird Licht ausgesandt, dessen Polarisation von der Änderung der Magnetquantenzahl  $\Delta m_L$  abhängt. Es sei angemerkt, dass  $m_L$  im Lithium-System keine gute Quantenzahl ist (das heißt nicht zur Beschreibung der Zustände verwendet werden kann), dass aber die beiden beteiligten Eigenzustände, zwischen denen der Übergang stattfindet, als Überlagerung verschiedener  $m_L$ -Zustände in der Basis  $|L, m_L, S, m_S, I, m_I\rangle$  geschrieben werden können. Da das Dipolmoment für Übergänge mit  $\Delta m_S \neq 0$  oder  $\Delta m_I \neq 0$  verschwindet, entscheidet also nur  $\Delta m_L$  über die Art der Polarisation. Für einen Übergang aus dem ( $m_L = 0$ )-Unterzustand des angeregten Niveaus wird Licht mit linearer Polarisation ausgesandt ( $\pi$ -Polarisation), für Übergänge aus den ( $m_L = \pm 1$ )-Unterniveaus Licht mit einer zirkulären Polarisation ( $\sigma^\pm$ ).

Die Emission der drei Komponenten in die Raumrichtungen ist allerdings nicht

#### 4. Präparation eines Targets

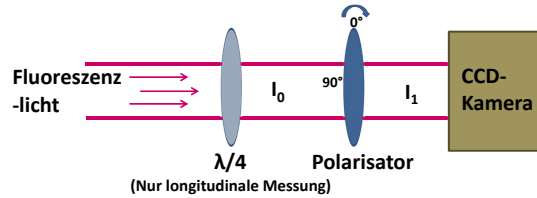


Abbildung 4.37.: Schematischer Aufbau der Polarisationsmessungen.

isotrop. In Abbildung 4.36 sind die Oszillationen des Elektron bei den drei möglichen Übergängen veranschaulicht. Betrachtet man die Emission von  $\sigma^-$ -Licht in Richtung der Quantisierungsachse, sieht man positiv zirkular polarisiertes Licht. Bei einer Betrachtung transversal zu dieser Richtung erscheint die Oszillation des Elektrons und damit die Polarisation des Lichts allerdings linear in einer Achse transversal zur Magnetfeldrichtung. Im Falle eines  $\sigma^+$ -Überganges ist die Polarisationsrichtung des zirkular polarisierten Lichtes in die positive Magnetfeldrichtung gerade andersherum, in die transversale Richtung ist allerdings keine Unterscheidung der beiden Zirkular-Komponenten möglich. Ein Übergang zwischen den beiden ( $m_L = 0$ ) -Niveaus entspricht einem schwingenden Dipol entlang der Magnetfeldachse, daher ist keine Lichtemission entlang diese Achse möglich.

Betrachtet man das System aus transversaler Richtung, tragen Photonen aus allen drei Übergängen bei und es lässt sich ausschließlich linear polarisiertes Licht beobachten. Dabei ist die Polarisationsachse parallel zur Magnetfeldrichtung für Übergänge aus dem ( $m_L = 0$ ) -Niveau, für Übergänge aus den ( $m_L = \pm 1$ ) -Niveaus ist das Licht transversal zur Magnetfeldachse polarisiert. Aus dem Verhältnis der beiden Polarisationsrichtungen lässt sich daher die relative Besetzungswahrscheinlichkeit des ( $m_L = 0$ ) -Niveaus im Vergleich zu den ( $m_L = \pm 1$ ) -Niveaus bestimmen (zur Erläuterung siehe auch Abbildung 4.36). Eine Aussage über die Unterschiede in den Besetzungen der Niveaus mit ( $m_L = \pm 1$ ) ist allerdings durch diese Messung nicht möglich.

Ein schematischer Aufbau der Messungen ist in Abbildung 4.37 dargestellt. Das aus der Atomwolke abgestrahlte Fluoreszenzlicht wird von einer CCD-Kamera aufgenommen, die in diesem Fall zur Messung der relativen Intensitäten verwendet wird. Vor der Kamera ist ein Linear-Polarisator aufgebaut, dessen Durchlassrichtung vorher bestimmt wurde. Die von der Kamera aufgenommene Intensität wurde in Abhängigkeit der Orientierung des Polarisationsfilters in Schritten von  $10^\circ$  gemessen und ist nach Untergrundbereinigung in Abbildung 4.38 abgebildet.

Die Messung wurde jeweils  $400 \mu\text{s}$  nach dem Abschalten des MOT Magnetfeldes



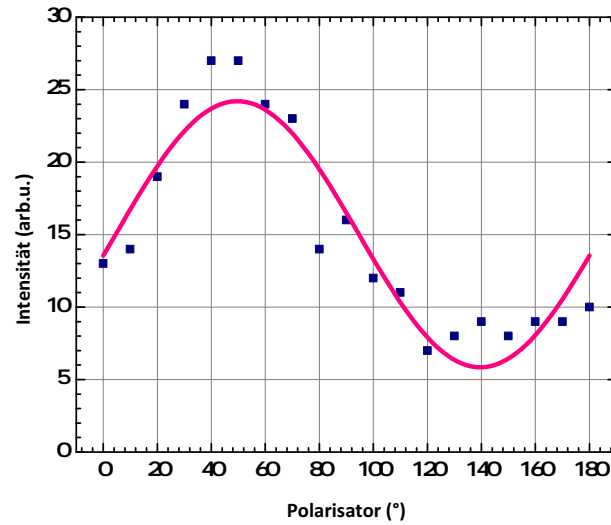


Abbildung 4.38.: Messung der Polarisation des Fluoreszenzlichtes in transversaler Richtung. Die magentafarbene Linie ist dabei ein Fit einer Sinusfunktion.

bei einer Helmholtzfeldstärke von 7.7 G durchgeführt. Aufgrund einer relativ starken Schwankung der Dichte der Atomwolke innerhalb der Zeitskala der Datenaufnahme sind diese Messungen mit einem relativ großen Fehler von etwa 20 % behaftet, stellen aber nichts desto Trotz eine gute Abschätzung der Polarisation des Targets dar.

Aus dem Verhältnis der gemessenen und untergrundbereinigten Intensitäten der beiden orthogonalen Polarisationen kann das Verhältnis der Übergangswahrscheinlichkeiten zueinander bestimmt werden und ergab in diesem Fall

$$\frac{\rho(m_L = 0)}{\rho(m_L = \pm 1)} = \frac{\pi_{\parallel}}{2 \cdot \pi_{\perp}} = \frac{I(140^{\circ})}{2 \cdot I(50^{\circ})} \approx 0.13. \quad (4.39)$$

Der Faktor 2 kommt dabei aus dem Verhältnis der Abstrahlcharakteristik der beiden Polarisationen zustande, die in Abbildung 4.39 dargestellt sind. Dabei gilt für die Winkelverteilung  $\theta$  der Abstrahlung der Polarisationskomponenten:

$$\begin{aligned} \sigma^{\pm} &: \propto (1 + \cos^2(\theta)) \\ \pi &: \propto \sin^2(\theta) \end{aligned} \quad (4.40)$$

Die Volumina der beiden Winkelverteilungen berechnen sich zu

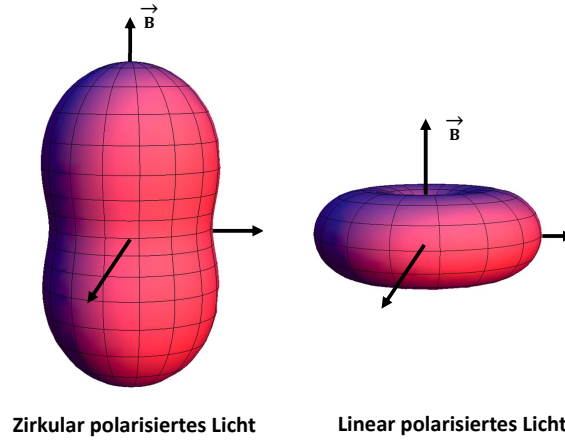


Abbildung 4.39.: Abstrahlcharakteristik von Licht der beiden unterschiedlichen Polarisierungen im Magnetfeld.

$$\begin{aligned}
 V_{\sigma^{\pm}} &= \frac{16}{9}\pi R^3 \\
 V_{\pi} &= \frac{8}{9}\pi R^3,
 \end{aligned}
 \tag{4.41}$$

womit sich die Anteile der Photonen unter einem Winkel von  $90^\circ$  (also in transversaler Richtung) zu

$$\begin{aligned}
 \sigma^{\pm} &: \propto \frac{1}{V_{\sigma^{\pm}}} \cdot (1 + \cos^2(\theta)) \propto \frac{9}{16} \\
 \pi &: \propto \frac{1}{V_{\pi}} \cdot \sin^2(\theta) \propto \frac{9}{8}
 \end{aligned}
 \tag{4.42}$$

ergeben. Die gemessene Intensität des zirkular polarisierten Lichtes muss also verdoppelt werden.

In longitudinaler Richtung wird ausschließlich zirkular polarisiertes Licht ausgesandt, dessen Drehrichtung vom Ausgangszustand des Überganges abhängt. Eine Messung des Verhältnisses der beiden Polarisierungen gibt daher Aufschluss über die relativen Besetzungen der ( $m_L = \pm 1$ ) -Zustände. Zur Messung wurde ein Viertel-Wellenplättchen ( $\lambda/4$  in Abb. 4.37) vor den Polarisator eingebaut, der aus dem zirkular polarisierten Licht wiederum linear polarisiertes erzeugt, dessen Achse von

der ursprünglichen Polarisation abhängt. Anschließend wurde eine Messkurve über verschiedene Winkeleinstellungen des Linearpolarisators aufgenommen und so das Verhältnis der beiden Komponenten bestimmt.

Das Besetzungsverhältnis der beiden Zeemankomponenten zueinander kann nun über

$$\frac{\rho(m_L = +1)}{\rho(m_L = -1)} = \frac{\pi_{\leftrightarrow}}{\pi_{\updownarrow}} \quad (4.43)$$

bestimmt werden, wobei  $\pi_{\leftrightarrow}$  das gemessene Licht mit linearer Polarisation in senkrechter Richtung darstellt,  $\pi_{\updownarrow}$  Licht mit linearer Polarisation in waagerechter Richtung. Aufgrund der instabilen experimentellen Gegebenheiten und der sehr großen Differenz der Besetzungswahrscheinlichkeit dieser Niveaus war es nicht möglich, eine aussagekräftige Messung der longitudinalen Polarisationskomponenten zu erstellen. Darüber hinaus war aufgrund der Geometrie des Experimentes eine Beobachtung direkt entlang der Magnetfeldachse nicht möglich.

Betrachtet man allerdings die  $\Delta m_L$ -Beiträge der vier energetisch niedrigsten Hyperfeinzustände bei einem gegebenen Magnetfeld von 7.7 G (die durch das rotverschobene Laserlicht mit der größten Wahrscheinlichkeit angeregt werden), ist das Verhältnis der  $(m_L = +1)/(m_L = -1)$ -Beiträge mit maximal 0.5% verschwindend gering (siehe auch Anhang A).

Damit ergibt sich eine Besetzung der drei Zeemankomponenten des angeregten  $\text{Li}(2^2P_{3/2})$ -Zustandes zu

$$\begin{aligned} \rho(m_L = +1) &= 0\% \\ \rho(m_L = 0) &= 13\% \\ \rho(m_L = -1) &= 87\% . \end{aligned} \quad (4.44)$$

Das Target weist damit einen Polarisationsgrad von fast 90% auf.



## **Teil III.**

# **Photoionisation eines Lithium-Targets**



# 5. UV-Photoionisation von Lithium

Zur Charakterisierung des experimentellen Aufbaus wurde neben einer Untersuchung der in Kapitel 4.6 aufgeführten Target-Eigenschaften eine Vermessung der Abbildungseigenschaften des Spektrometers durchgeführt. Dies dient neben der Bestimmung der maximal erreichbaren Auflösung vor allem der Kalibrierung der Daten der im Anschluss vorgestellten Messungen der Ion-Atom-Stoßsysteme. Dabei wird der Umstand ausgenutzt, dass durch Photoionisation entstandene freie Elektronen eine sehr geringe Energie- und Impulsbreite besitzen, die auf der Bandbreite des Lasers beruhen. Diese beträgt bei handelsüblichen Laser-Modellen etwa  $\Delta\nu/\nu \approx 10^{-8}$  und ist somit deutlich schärfer als die zu erwartende Energieauflösung im Reaktionsmikroskop. Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über die untersuchte Reaktion gegeben werden, bevor auf das charakteristische Emissionsspektrum eingegangen wird. Im Anschluss wird die experimentelle Bestimmung der Auflösung anhand der Photoionisationsmessung diskutiert.

## Grundlagen der Reaktion

In der hier verwendeten magneto-optischen Falle befinden sich zu jedem Zeitpunkt Lithium-Atome im ( $2^2S_{1/2}$ )-Grundzustand sowie im angeregten ( $2^2P_{3/2}$ )-Zustand, deren Verhältnis beispielsweise experimentell bestimmt werden kann (wie in Kapitel 4.6 dargestellt). Das Ionisationspotential von Lithium im Grundzustand beträgt  $I_p = 5.39$  eV, während der angeregte ( $P_{3/2}$ )-Zustand eine Energiedifferenz von  $\Delta E_{2s-2p} = 1.85$  eV in Bezug auf den Grundzustand aufweist.

Für die hier vorgestellten Photoionisationsexperimente wurden Photonen mit einer Wellenlänge von 266 nm und einer Energie von  $E_{ph} = 4.66$  eV verwendet. Daher können Atome im Grundzustand durch die Absorption eines Photons nicht ionisiert werden, wohingegen bei Atomen im angeregten ( $P_{3/2}$ )-Zustand eine Überschussenergie von  $E_e = E_{ph} - I_p = 1.12$  eV auf das ionisierte Elektron übertragen wird. Zur Veranschaulichung dieser Reaktion ist das Termschema in Abbildung 5.1 dargestellt.

Da der Energietransfer auf die ionisierten Elektronen festgelegt ist, lässt sich der Impulsbetrag der erzeugten Fragmente berechnen. Aufgrund der Erhaltungssätze muss der Impulsübertrag auf die Rückstoßionen  $p_r$  nahezu (abgesehen von dem sehr kleinen Photonenimpuls) dem Elektronenimpuls  $p_e$  entsprechen und ergibt sich über

$$p_r \approx p_e = \sqrt{2m_e E_e} = 0.287 \text{ a.u.} \quad (5.1)$$

## 5. UV-Photoionisation von Lithium

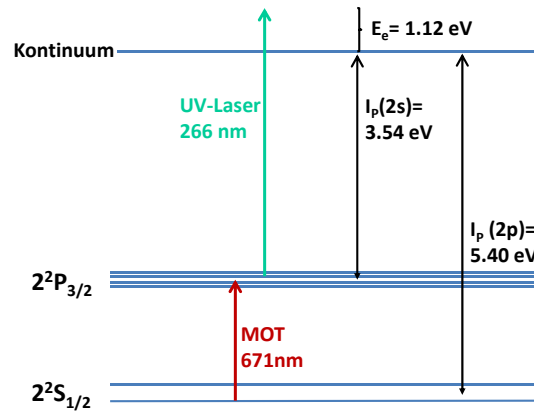


Abbildung 5.1.: Termschema der Photoionisation von Lithium mit Hilfe eines UV-Lasers der Wellenlänge 266 nm.

Die erlaubten Impulse liegen im Impulsraum also auf einer Kugelschale, deren Radius durch  $p_r$  gegeben ist. In Abbildung 5.2 ist die Impulsverteilung in einer dreidimensionalen Ansicht gezeigt, wobei die Größe und Farbe der Kugeln die Anzahl der Ereignisse widerspiegelt. Durch die Polarisation des Lasers wird eine Vorzugsrichtung in die Reaktion eingeführt, die ein für die Photoionisation charakteristisches Emissionsspektrum zur Folge hat. Während die Emission in Richtung der Polarisation maximal ist, befinden sich in der transversalen Richtung hierzu Minima der Emission.

Der totale Wirkungsquerschnitt der Photoionisation von  $\text{Li}(2p)$  ist im Vergleich zu Ionisationsexperimenten durch Ionenstoß relativ hoch und wurde in [152] mit

$$\sigma(\text{Li}(2p)) = 8.4 \pm 1.5 \text{ Mb} \quad (5.2)$$

angegeben.

Der zur Ionisation verwendete Laser ist ein passiv gütegeschalteter (oder auch Q-switched) Nd:YAG Festkörperlaser der Firma *TeemPhotonics*, mit dem sich nach einer Frequenzvervierfachung 400 ps-Pulse einer Wellenlänge von 266 nm mit einer Spitzenleistung von 1.4 kW und einer Repetitionsrate von 7 kHz erzeugen lassen. Neben der selektiven Ionisation des angeregten Zustandes von Lithium ergibt sich hierbei ein weiterer Vorteil, da die damit verbundene Photonenenergie nicht ausreicht, um Restgasatome zu ionisieren und der Untergrund der Messung damit deutlich reduziert wird.



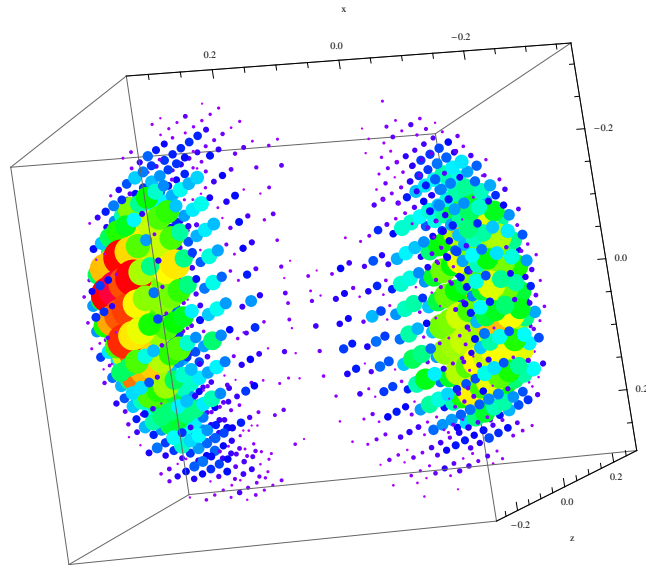


Abbildung 5.2.: Dreidimensionale Impulsverteilung der Rückstoßionen bei der Photoionisation des Li(2p)-Zustandes mit linear polarisiertem Licht der Wellenlänge 266 nm.

## Emissionscharakteristik der Photoionisation von angeregtem Lithium

Im Gegensatz zu Messungen des totalen Wirkungsquerschnittes lassen sich aus differentiellen Wirkungsquerschnitten Aussagen über die Amplitude und relativen Phasen der einzelnen Matrixelemente extrahieren. Hierzu liefern Messungen der Winkelverteilung der ionisierten Elektronen detaillierte Informationen über die Übergangsmatrixelemente. Yang [153] konnte bereits 1948 zeigen, dass die Winkelkorrelation zwischen einem linear polarisiertem Photon und einem beliebigen an der Reaktion beteiligten, unpolarisierten Teilchen in der Dipolnäherung (die anwendbar ist, sofern die Wellenlänge des Photons deutlich größer als die atomaren Ausdehnungen ist), immer der Form  $1 + \alpha \cos^2 \theta$  entspricht, wobei  $\theta$  den Emissionswinkel des Elektrons im Bezug auf die Polarisation des einfallenden Photons bezeichnet und  $\alpha$  eine Konstante ist. Weitere Beiträge tragen aufgrund der Dipol-Auswahlregeln nicht zur Verteilung bei.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt der Photoionisation hängt damit nur noch von zwei Parametern ab, dem totalen Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  und dem sogenannten Asymmetrie-Parameter  $\beta$ , welcher die Winkelverteilung der Photoelektronen beschreibt und nach [154] über

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} [1 + \beta P_2(\cos \theta)] \quad (5.3)$$

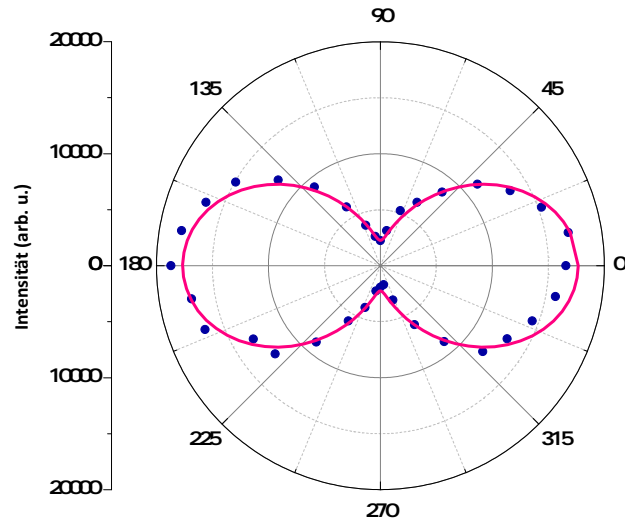


Abbildung 5.3.: Experimentell ermittelte Winkelverteilung der Photoelektronen in blau, sowie ein Fit der Daten, in magenta dargestellt.

in den Querschnitt eingeht. Dabei ist

$$P_2(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1) \quad (5.4)$$

das Legendre-Polynom. Es ist zu beachten, dass  $\beta$  und  $\sigma$  beide von der Energie des einfallenden Photons abhängen.

Wird ein Elektron aus dem  $\text{Li}(2^2P_{3/2})$ -Zustand durch ein Photon ionisiert, ergibt sich der Endzustand des nunmehr freien Elektrons aufgrund der Auswahlregeln als eine Kombination aus s- und d-Wellen.

In [155] geben Nahar und Manson einen Ausdruck für  $\beta$  für die Ionisation aus einem  $p$ -Zustand,

$$\beta = 2 \frac{R^2 - 2R \cos \delta}{1 + 2R^2}, \quad (5.5)$$

an, wobei  $R$  dem Verhältnis der  $p \rightarrow d$  und  $p \rightarrow s$  Übergangswahrscheinlichkeiten und  $\delta$  dem Phasendifferenz beider Matrixelemente entspricht.

Der Asymmetrieparameter  $\beta$  lässt sich prinzipiell über Formel 5.5 berechnen, in der hier vorgestellten Reaktion ist dies jedoch unter anderem aufgrund der Vielzahl der möglichen Übergänge nicht trivial.

Experimentell lässt sich der Asymmetrieparameter auch aus einem Fit der gemessenen Winkelverteilung ermitteln, wie in Abbildung 5.3 für die Streuebene darge-

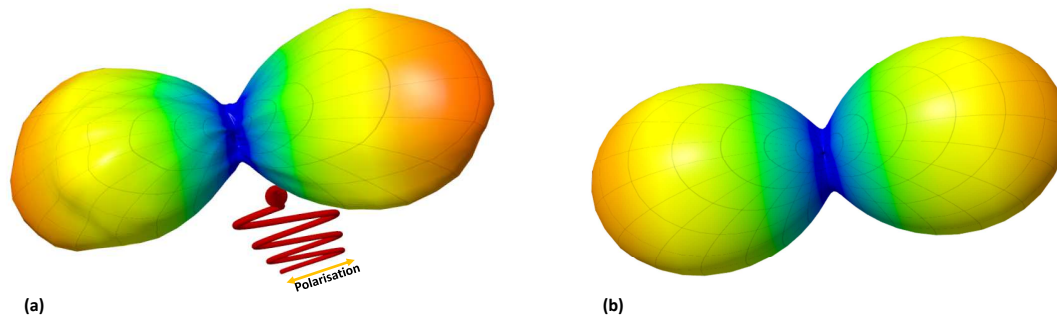


Abbildung 5.4.: (a) experimentell und (b) theoretisch ermittelte Winkelverteilung der Photoelektronen bei Ionisation von  $\text{Li}(2^2P_{3/2})$ .

stellt. Der Asymmetrieparameter ergibt sich hier zu

$$\beta = 1.39 \pm 0.04. \quad (5.6)$$

In Abbildung 5.4 (a) ist die experimentell ermittelte Winkelverteilung der Rückstöße der Photoionisation in einem dreidimensionalen Polarplot dargestellt, die aufgrund der Impulserhaltung der Verteilung der Photoelektronen entspricht. Abbildung 5.4 (b) zeigt die mit Gleichung 5.3 gefittete Winkelverteilung.

Die hier aufgeführte Betrachtung der differentiellen Wirkungsquerschnitte gilt nur für unpolarisierte Targets. Wie in Kapitel 4.6 erläutert, ist das Target in diesem Experiment aber insbesondere bei der Anwesenheit des Reaktionsmikroskop-Magnetfeldes polarisiert. Dies führt zu beobachtbaren Abweichungen der experimentell ermittelten Daten von der theoretisch erwarteten Verteilung.

## Kalibrierung der Impulse und Bestimmung der experimentellen Auflösung

Photoionisationsmessungen bieten eine gute Möglichkeit, die Funktion des MOTRE-Mis unabhängig von den Parametern des Ionenspeicherringes zu testen. Einerseits ist es aufgrund der relativ einfachen Durchführung dieser Experimente möglich, eine Optimierung des Systems sowie eine Kalibrierung der verwendeten Spektrometer-Einstellungen vorzunehmen. Zum Anderen lässt sich die experimentelle Auflösung des Spektrometers durch eine Photoionisationsmessung gut ermitteln.

Das elektrische Feld des Spektrometers wird hinsichtlich einer maximal erreichbaren Flugzeitauflösung optimiert (siehe auch Kapitel 3.2). Zur Verbesserung der Extraktion der Elektronen sind auch Neigung und Position der beiden Helmholtzspulen bezüglich der Spektrometerachse verstellbar. Hierbei ist das Ziel eine mög-

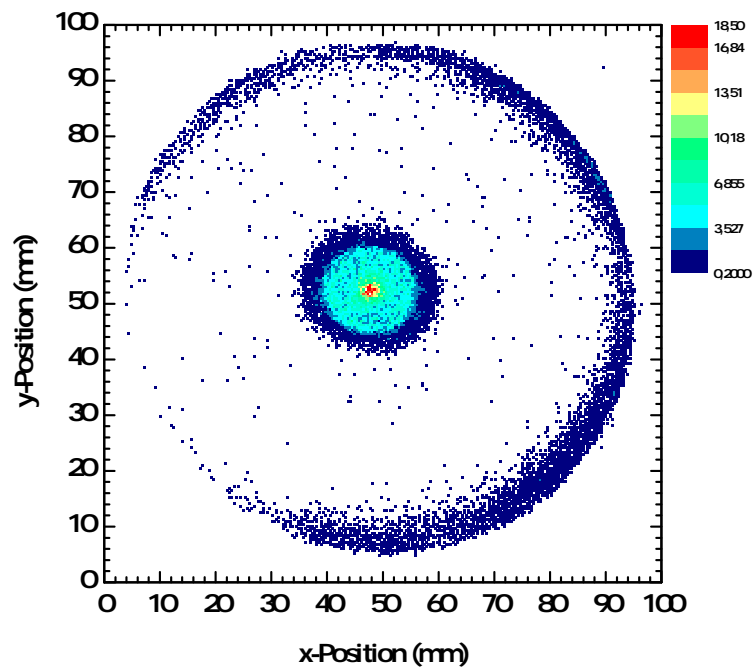


Abbildung 5.5.: Elektronen-Ortsspektrum. In der Mitte sind reale Events der Photoionisation zu sehen, während am Rand Ereignisse aus Untergrundionisationen abgebildet werden.

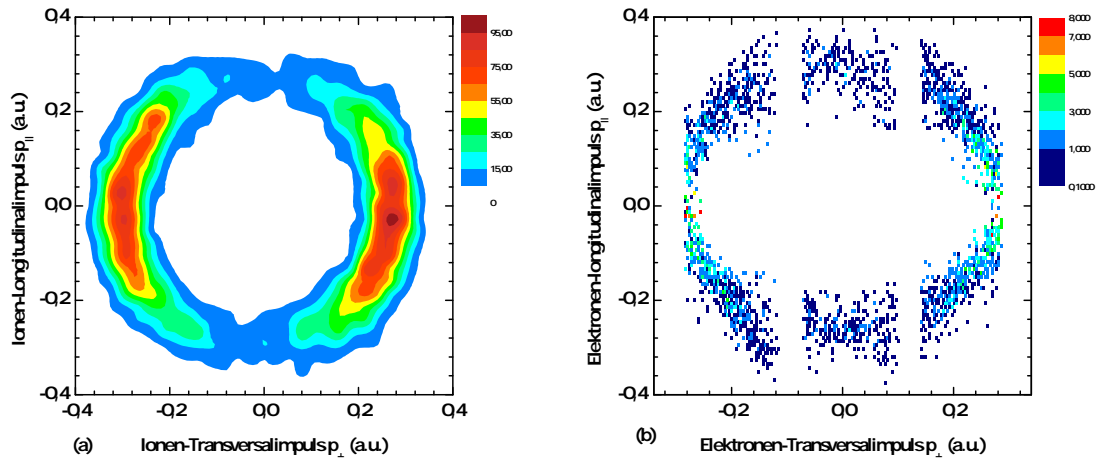


Abbildung 5.6.: Schnitt durch den dreidimensionalen Impulsraum für (a) Rückstoßionen und (b) Elektronen der Photoionisation. Die Polarisation des UV-Lasers ist in x-Richtung orientiert.

lichst gute Trennung zwischen Signal und Untergrund zu erreichen. In Abbildung 5.5 ist ein typisches Ortsspektrum des Elektronendetektors bei einer UV-Ionisation dargestellt. Während die Elektronen aus der Photoionisation des Targets aufgrund der geringen transversalen Energie in der Mitte des Detektors abgebildet werden, befinden sich die Untergrundelektronen, die beispielsweise durch Photoionisation aus den Spektrometerringen herausgelöst werden, am Rand des Detektors.

Zur korrekten Rekonstruktion der Impulsüberträge einer Reaktion ist im Prinzip eine genaue Kenntnis der Feldverläufe notwendig. In der Praxis ist es aber nicht möglich, die tatsächlich anliegenden Spannungen anzugeben. Da der Betrag des Endimpulses der Elektronen bei einer Photoionisation aber klar definiert ist, kann mit dieser Messung eine Kalibrierung der Daten durchgeführt werden.

Ein weiterer Vorteil der Impulsschärfe der Photoionisation ist die Möglichkeit eines Tests der experimentellen Auflösung, die sich hieraus ergibt. Wie schon aus Abbildung 5.2 ersichtlich, liegen die erlaubten Impulskomponenten auf einer Kugelschale, deren Dicke allein durch die experimentelle Auflösung gegeben ist.

In Abbildung 5.6 sind die gemessenen Flugzeiten und Auftrefforte der Rückstoßionen einer Photoionisationsmessung bereits in die Impulskomponenten umgerechnet und gegeneinander aufgetragen. Die Darstellung in der Abbildung entspricht einem Schnitt durch den dreidimensionalen Impulsraum bei  $p_{r,y} = 0$ . Die Polarisation des Lasers ist hier in Richtung der x-Achse und damit transversal zur Extraktionsrichtung (z-Richtung) orientiert. Die Impulsauflösung der Ionen ergibt sich prinzipiell aus der Breite des Ringes im Impulsraum. Hier wurde die Auflösung direkt extra-

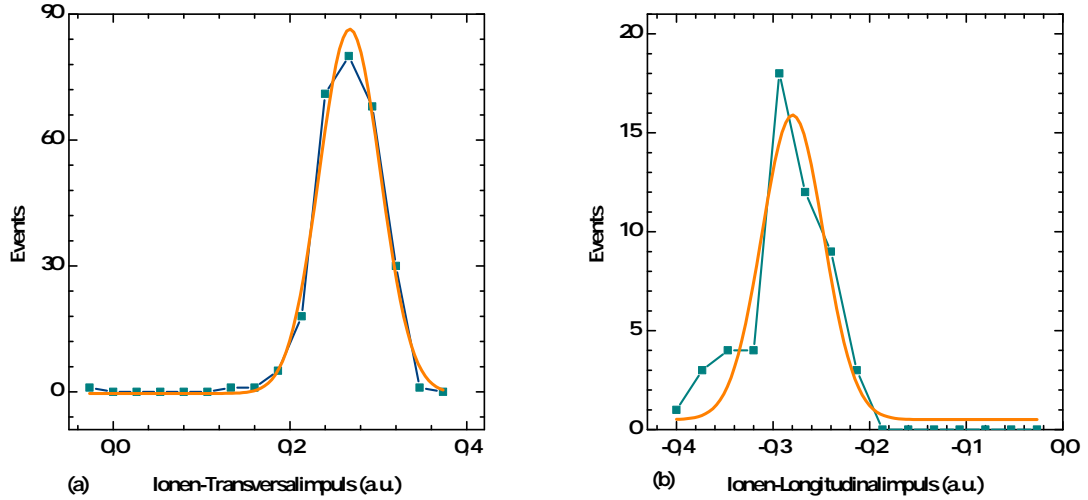


Abbildung 5.7.: Projektion des (a) Ionen-Transversalimpulses und (b) Ionen-Longitudinalimpulses aus 5.6 (a) bei  $p_{\parallel,r} = 0$  bzw.  $p_{\perp,r} = 0$ , sowie Fit einer Gaußverteilung zur Ermittlung der Auflösung. Die Polarisation des UV-Lasers ist in x-Richtung orientiert.

hiert, indem ein Schnitt durch die Achse  $p_{\parallel,r} = 0$  gelegt wurde (siehe Abbildung 5.7 (a)). Es ergibt sich eine Breite von  $\Delta p_{\perp,r}(FWHM) = 0.08$  a.u..

Die Ermittlung der longitudinalen Impulsauflösung ist auf dieselbe Weise möglich, indem ein Schnitt durch Abbildung 5.6 entlang der  $p_{\perp,r} = 0$ -Achse analysiert wird. Dies ist in Abbildung 5.7 (b) dargestellt. Da die Messung der hier gezeigten Daten auf eine möglichst gute Transversalauflösung optimiert wurde, ist in diesem Fall die longitudinale Auflösung etwas schlechter als prinzipiell möglich und beträgt in dem Fit von 5.7 (b) ebenfalls  $p_{\parallel,r}(FWHM) = 0.08$  a.u.. Im besten Fall konnten hier Impulsaufösungen von  $p_{\parallel,r}(FWHM) = 0.04$  a.u. erreicht werden.

Zur Bestimmung der transversalen und longitudinalen Impulsauflösung der Elektronen kann im Prinzip dasselbe Spektrum der beiden Impulskomponenten verwendet werden. Das entsprechende Impulsspektrum (aus einer anderen Messreihe als Abb. 5.6 (a)) ist in Abbildung 5.6 (b) zu sehen. Die Unterbrechung des Transversalimpulses kommt hierbei aufgrund der Wigggle-Struktur des Elektronenspektrums zustande (siehe Kapitel 3.4). Bei bestimmten Flugzeiten ist die transversale Impulsauflösung schlecht und wurde aus den Daten zur Erzeugung der Graphik bereits ausgeschnitten. Eine Projektion der beiden Impulskomponenten ergibt eine transversale Auflösung der Elektronen von etwa  $p_{\parallel,e}(FWHM) = 0.1$  a.u., sowie eine extrem kleine Longitudinal-Auflösung von  $p_{\parallel,e}(FWHM) = 0.01$  a.u..

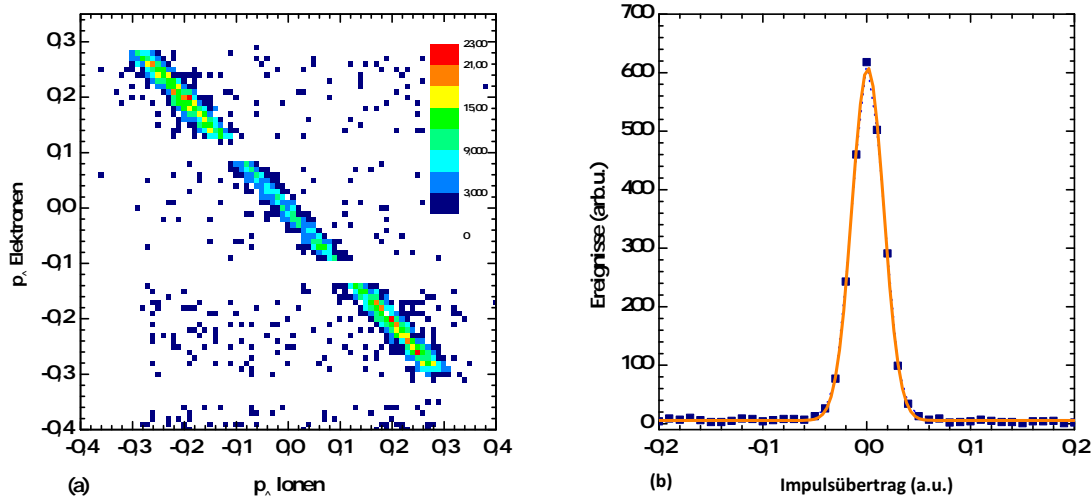


Abbildung 5.8.: (a) Longitudinaler Elektronenimpuls, aufgetragen über dem Longitudinalimpuls der Ionen zur Verdeutlichung der experimentellen Auflösung. Die Polarisation des UV-Lasers ist hierbei in Flugzeit-Richtung orientiert. (b) Projektion der links gezeigten Geraden, über die ein Fit zur Bestimmung der Auflösung gelegt wurde.

Die Impulsauflösung lässt sich auch durch die Korrelation zwischen Ionen- und Elektronenimpulsen bestimmen. In Abbildung 5.8 (a) ist die Zählrate als Funktion der Impulskomponenten in Extraktionsrichtung der Ionen und Elektronen dargestellt. Aufgrund der Impulserhaltung muss sich hierbei eine Gerade der Steigung 1 ergeben. Die Breite der Verteilung gibt dabei direkten Rückschluss auf die kombinierte Auflösung der Ionen- und Elektronenimpulse. Die Unterbrechungen der Geraden in Abbildung 5.8 (a) sind wiederum die Positionen der bereits erwähnten Wiggles. Die hieraus mit Hilfe eines Fits durch die Projektion der Geraden (in Abbildung 5.8 (b) dargestellt) ermittelte Breite beträgt  $FWHM = 0.035$  a.u..

Dabei ist zu beachten, dass diese Auflösung prinzipiell durch Korrelationen der Flugzeiten künstlich verbessert sein kann. Die Erzeugung koinzidenter Elektronen und Ionen findet immer am selben Ort statt, daher sind die jeweiligen Flugzeiten nicht unabhängig voneinander. Die Beziehung zwischen beiden Flugzeiten ist allerdings aufgrund der Flugzeitfokussierung des Spektrometers recht gering. Die Auflösung der Elektronen ist mit  $\Delta p_{||,e}(FWHM) = 0.01$  a.u. deutlich geringer als die kombinierte Auflösung, die aus Abbildung 5.8 (b) gewonnen wurde. Daher ist der oben ermittelte Wert auf die Ionenimpulsauflösung zurückzuführen, welche somit für diese Messung mit einem Maximalwert von  $\Delta p_{||,r}(FWHM) = 0.035$  a.u. angegeben werden kann.

Eine Zusammenfassung der erreichten Auflösungen ist in Tabelle 3.1 in Kapitel

## 5. *UV-Photoionisation von Lithium*

---

3.4 zu finden.



## **Teil IV.**

# **Grundlegende Betrachtungen zu Ion-Atom-Stößen**

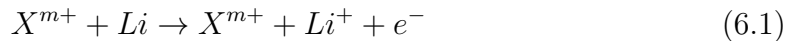


## 6. Einführung in Ion-Atom-Stöße

Im Folgenden sollen die Gesetzmäßigkeiten von Teilchenstößen zusammengefasst werden, die für die in dieser Arbeit untersuchten Reaktionen von Bedeutung sind. Eine umfassendere Darstellung kann beispielsweise in [114, 156] gefunden werden.

Stöße zwischen geladenen Ionen und neutralen Atomen können zu einer Reihe unterschiedlicher Prozesse führen. Je nach Geschwindigkeit und Ladung des ionischen Projektils können verschiedene Effekte wie Anregung und Ionisation sowohl des Projektils als auch des Targetatoms auftreten, sowie ein Ladungstransfer von Elektronen auf das Projektil stattfinden. Diese Prozesse können dabei auch gleichzeitig in einer Stoßreaktion auftreten, wie beispielsweise die gleichzeitige Ionisation des Targets und des Projektils (siehe beispielsweise [23]).

In der hier vorliegenden Arbeit wurde ausschließlich die Einfachionisation eines neutralen Lithium-Targets durch Ionenstoß untersucht, wobei 6 MeV  $H^+$  und 24 MeV  $O^{8+}$ -Ionen als Projektile verwendet wurden. Die Reaktionsgleichung dieser Ionisation lautet:



Hierbei gibt  $m$  den Ladungszustand des Projektils  $X$  an.

Ionisationsprozesse beruhen nahezu ausschließlich auf der Coulomb-Wechselwirkung zwischen Projektil und Target. Die Coulombkraft selbst ist sehr genau bekannt, daher eignen sich Ion-Atom-Stöße sehr gut zu einer Untersuchung der Dynamiken von Mehr-Teilchen-Systemen. Die Wechselwirkung der beiden Stoßpartner hängt damit über das Coulombpotential des Projektils,  $\Phi(r) \propto Z_P/r$ , von der Projektilladung  $Z_P$  und dem sich zeitlich ändernden Abstand  $r(t)$  ab, der klassisch durch die Projektilgeschwindigkeit  $v_P$  und den Stoßparameter  $b$  gegeben ist. Dabei bestimmt  $v_P$  die Zeitspanne der Wechselwirkung. In der störungstheoretischen Beschreibung der Projektil-Target-Wechselwirkung ergibt sich ein Störparameter

$$\eta = \frac{Z_P}{v_P}, \quad (6.2)$$

der die Stärke der Wechselwirkung angibt. Dabei führen höhere Projektilladungen aufgrund des höheren elektrischen Potentials zu einer stärkeren Störung, während die Zeitspanne der Interaktion und damit die Ionisationswahrscheinlichkeit zwischen Projektil und Target mit steigender Projektilgeschwindigkeit abnimmt.

Im Allgemeinen wird zwischen schnellen ( $v_P > v_{e^-,Bahn}$ ) und langsamen ( $v_P < v_{e^-,Bahn}$ ) Stößen unterschieden, wobei die Referenzgeschwindigkeit der klassischen

Bahngeschwindigkeit des Elektrons im Target,  $v_{e^-,Bahn}$ , entspricht. Im hier verwendeten Lithium-Atom liegt diese in der Größenordnung von weniger als einer atomaren Einheit.

Des Weiteren können Stoßprozesse bezüglich des Impuls- und Energieübertrags vom Projektil auf das Target zwischen harten und weichen Stößen unterschieden werden. Weiche Stöße führen zu einem relativ geringen Impulsübertrag  $q$  (bezogen auf den ursprünglichen Impuls des gebundenen Elektrons) und die Bewegung des Projektils bleibt nahezu unbeeinflusst, während bei harten Stößen deutlich höhere  $q$  auftreten. Dabei liegt einem höheren Impulsübertrag in aller Regel ein deutlich dichter Stoß und kleinere Stoßparameter (das heißt ein geringerer Minimalabstand zwischen Projektil und Target) als bei einem kleinerem Impulsübertrag zugrunde. Bei weichen Stößen liegt die Energie der emittierten Elektronen  $E_e$  in derselben Größenordnung wie das Ionisationspotential  $I_p$ .

In den hier untersuchten Reaktionen lagen die verwendeten Projektilgeschwindigkeiten bei 7.7 a.u. ( $O^{8+}$ ) und 15.5 a.u. ( $H^+$ ). Bei diesen Geschwindigkeiten sind relativistische Effekte noch weitgehend vernachlässigbar, da der Lorentzfaktor

$$\gamma = \left( \sqrt{1 - \frac{v_P^2}{c^2}} \right)^{-1} \quad (6.3)$$

etwa 1 ist und damit innerhalb nicht-relativistischer Grenzen bleibt.

In dieser Arbeit wurde die Elektronenemission hauptsächlich für kleine Elektronenenergien  $E_e < 20$  eV betrachtet, dementsprechend lassen sich die hier untersuchten Reaktionen als (relativ) schnelle und weiche Stöße klassifizieren.

Weitere Einflüsse auf die Dynamik der Ionisation haben auch die Projektilmasse  $m_P$  sowie spezifische Targeteigenschaften wie dessen elektronische Struktur oder die Bindungsenergie des ionisierten Elektrons  $E_{bind,e} = I_p$ . Der Einfluss dieser Effekte auf die Wirkungsquerschnitte der Ionisation werden im weiteren Verlauf dieses Kapitels betrachtet. Sofern im Einzelfall nicht anders ausgewiesen, werden im Folgenden atomare Einheiten, a.u., verwendet (siehe Anhang C).

## 6.1. Stoßkinematik

Bei der kinematischen Betrachtung einer Reaktion werden die Regeln der Bewegung der Stoßpartner aufgrund von Energie- und Impulserhaltung untersucht, ohne die zugrundeliegenden Kräfte, in diesem Fall die Coulombkraft, explizit zu berücksichtigen.

Bei schnellen Ion-Atom-Stößen sind die Impulse der Projektile im Allgemeinen relativ groß, wohingegen ihre relative Impulsänderung gering und deshalb nur schwer direkt zu messen ist. Im Gegensatz dazu ist die relative Impulsänderung der Tar-

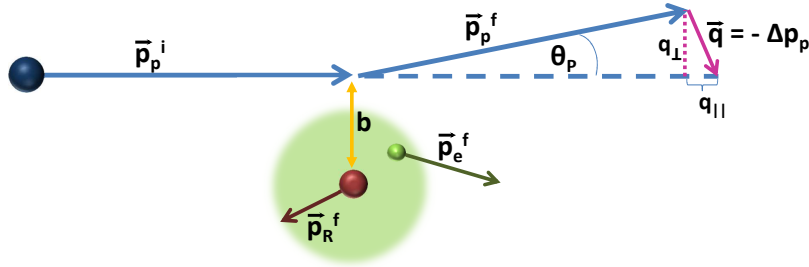


Abbildung 6.1.: Schematische Darstellung der Impulsbilanz bei Ionen-Atom-Stößen. Erklärung siehe Text.

getfragmente erheblich größer, da der Impuls vor dem Stoß im Laborsystem im Wesentlichen dem Comptonprofil des gebundenen Elektrons entspricht.

Im Endzustand sind bei der Einfachionisation mit dem Projektil, einem freien Elektron und dem Rückstoßion drei freie Teilchen vorhanden, die insgesamt neun Impulskomponenten aufweisen. Diese Anzahl wird aufgrund der Energie- und Impulserhaltung auf fünf voneinander unabhängige Freiheitsgrade eingeschränkt.

In Abbildung 6.1 ist die Impulsbilanz der Einfachionisation dargestellt. Bei der verwendeten Notation wird dabei zwischen den Anfangs- und Endzuständen der Reaktion durch das hochgestellte  $i$  (aus dem Englischen, initial) bzw.  $f$  (aus dem Englischen, final) unterschieden. Die beteiligten Stoßpartner werden durch die Indizes  $P$  (Projektil),  $T$  (Target, bestehend aus Atomkern und gebundenen Elektronen),  $R$  (Rückstoßion nach der Ionisation) sowie  $e$  (ionisiertes Elektron) unterschieden. Im Ruhesystem des Targetatoms bewegt sich das Projektil (mit der Ladung  $Z_P$ ) mit dem Impuls  $\vec{p}_P^i$  auf das Target ( $\vec{p}_T^i=0$ ) zu. Im Folgenden wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen, dass der Anfangsimpuls des Projektils in  $z$ -Richtung (oder auch in longitudinale Richtung) zeigt.

Während des Stoßprozesses kommt es zu einem Impulsübertrag von

$$\vec{q} = -\Delta\vec{p}_P = -(\vec{p}_P^f - \vec{p}_P^i) \quad (6.4)$$

vom Projektil auf das Target, der zu einer Ablenkung der Projektilbahn um den Winkel  $\theta_P$  führt. Dabei wird eine Streuebene definiert, die durch die beiden Vektoren  $\vec{p}_P^i$  und  $\vec{q}$  aufgespannt wird. Das ionisierte Elektron sowie das Rückstoßion erhalten durch den Stoß die Impulse  $\vec{p}_e^f$  bzw.  $\vec{p}_R^f$ . Der minimale Abstand zwischen Projektil und Target bei dem Streuprozess (der nur in der klassischen Beschreibung des Projektils relevant ist) ist durch den Stoßparameter  $b$  charakterisiert (Abbildung

6.1).

Aufgrund der Zylindersymmetrie der Reaktion bezüglich der Projektilstrahlrichtung bietet es sich an, die dreidimensionalen Impulsvektoren in einen longitudinalen Anteil  $p_{||}$  entlang der  $z$ -Achse, sowie eine transversale Komponente  $p_{\perp}$  orthogonal hierzu aufzuteilen.

## Impulserhaltung

Die Impulserhaltung wird im Falle der Ionisation eines einzelnen Elektrons durch folgende Gleichung ausgedrückt:

$$\vec{p}_P^i + \vec{p}_T^i = \vec{p}_P^f + \vec{p}_R^f + \vec{p}_e^f \quad (6.5)$$

Im Ruhesystem des Targets, welches im Rahmen der hier erreichbaren experimentellen Auflösung dem Laborsystem entspricht, ist  $\vec{p}_T^i = 0$ . Das einlaufende Projektil hat ebenfalls eine verschwindende transversale Impulskomponente,  $\vec{p}_P^i = (p_{P,||}^i, 0, 0)$ , weshalb die Impulsbilanz in transversaler Richtung als

$$0 = \vec{p}_{P,\perp}^f + \vec{p}_{R,\perp} + \vec{p}_{e,\perp} \quad (6.6)$$

geschrieben werden kann. Zur einfacheren Schreibweise wurden die oberen Indizes im Falle der Targetfragmente ignoriert, da diese eindeutig dem Endzustand zugeordnet werden können. Der Transversalimpuls der Rückstoßionen lässt sich nun mit Gleichung 6.4 als

$$\vec{p}_{R,\perp} = \vec{q}_{\perp} - \vec{p}_{e,\perp} \quad (6.7)$$

angeben. Entsprechend ergibt sich für die longitudinale Impulsbilanz

$$p_{R,||} = q_{||} - p_{e,||}. \quad (6.8)$$

Der Impulsübertrag des Projektils wird also vom Elektron und Rückstoßion aufgenommen.

## Energieerhaltung

Neben der Impulserhaltung reduziert das Postulat der Energieerhaltung die unabhängigen Freiheitsgrade der Reaktion. Die Energiebilanz der Ionisation ist durch

$$E_P^i + E_T^i + E_{Bind}^i = E_P^f + E_R^f + E_{Bind}^f + E_e^f \quad (6.9)$$

gegeben. Mit einer anfänglichen Targetenergie von  $E_T^i = 0$  und der Definition des  $Q$ -Wertes als der Differenz der Bindungsenergien im Targetatom mit

$$Q = E_{Bind}^f - E_{Bind}^i \quad (6.10)$$

lässt sich Gleichung 6.9 schreiben als

$$E_P^i = E_P^f + Q + E_R + E_e. \quad (6.11)$$

Im Falle der Einfachionisation entspricht der Q-Wert gerade dem Ionisationspotential  $I_P$  der Reaktion.

## Näherungen für weiche Stöße

In den hier betrachteten schnellen, weichen Stößen ist der Impulsübertrag zwischen Projektil und Target in der Regel deutlich geringer als der anfängliche Projektilimpuls und beträgt meist wenige a.u.. Liegen die Impulse des Rückstoßions und des Elektrons in derselben Größenordnung, ist die kinetische Energie des Targettrumpfes für Lithium um den Faktor  $m_{Li}/m_e \approx 10^4$  kleiner als die kinetische Energie des Elektrons und ist daher vernachlässigbar. Mit  $E_P = \vec{p}_P^2/2m_P$  lässt sich Gleichung 6.11 umformen zu

$$E_P^i - E_P^f = Q + E_e = \frac{(\vec{p}_P^i)^2 - (\vec{p}_P^f)^2}{2m_P}. \quad (6.12)$$

Falls die Impulsänderung des Projektils,  $\vec{q} = \vec{p}_P^i - \vec{p}_P^f$ , klein gegenüber seinem Gesamtimpuls  $\vec{p}_P^i$  ist, kann die rechte Seite dieser Gleichung angenähert werden durch

$$\frac{(\vec{p}_P^i)^2 - (\vec{p}_P^f)^2}{2m_P} \approx \frac{(2\vec{p}_P^i)(\Delta\vec{p}_P)}{2m_P} = \Delta\vec{p}_P \cdot \vec{v}_P. \quad (6.13)$$

Nur die longitudinale Komponente der Projektilgeschwindigkeit  $\vec{v}_P$  weicht von Null ab, deshalb kann das Skalarprodukt aus Gleichung 6.13 zu

$$\Delta\vec{p}_P \cdot \vec{v}_P = \Delta p_{P,\parallel} \cdot v_P = q_{\parallel} \cdot v_P$$

vereinfacht werden.

Die Impulsbilanz in longitudinaler Richtung ergibt sich aus Gleichung 6.12 und ist

$$p_{R,\parallel} = \frac{Q}{v_P} + \frac{E_e}{v_P} - p_{e,\parallel}, \quad (6.14)$$

die longitudinale Impulsänderung des Projektils (der Impulsübertrag) ist damit

$$q_{\parallel} = \frac{Q + E_e}{v_P}. \quad (6.15)$$

Der Streuwinkel des Projektils lässt sich mit Hilfe der Kleinwinkelnäherung als

$$\theta_P \approx \frac{q_{\perp}}{p_{P,\parallel}^f} = \frac{q_{\parallel}}{q} \quad (6.16)$$

schreiben.

Die Impulserhaltung in transversaler Richtung ist dabei

$$p_{R,\perp} = \Delta p_{P,\perp} - p_{e,\perp} = -q_{\perp} - p_{e,\perp} \approx m_P v_P \theta_P - p_{e,\perp}, \quad (6.17)$$

wobei  $p_{P,\perp}^f \approx p_{P,\parallel}^f \theta_P$  verwendet wurde.

Der Q-Wert, und damit das Ionisationspotential, trägt (in dieser Näherung) also ausschließlich zur longitudinalen Impulskomponente bei. Aus der transversalen Impulsbilanz lassen sich Rückschlüsse über die Dynamik der Reaktion, den Streuwinkel des Projektils beziehungsweise die Stoßparameter  $b$  ziehen.

## 6.2. Dynamik der Stoßionisation

Zur Beschreibung der Dynamik eines Stoßprozesses sind nicht nur Energie- und Impulserhaltung (also die kinematischen Größen) zu berücksichtigen, auch die zugrundeliegenden Kräfte sind zur Aufstellung der Bewegungsgleichung notwendig.

Zur theoretischen Beschreibung können nun verschiedene Ansätze verwendet werden, von denen sich etwa störungstheoretische Modelle wie die Bornsche Näherung oder Rechnungen mit gestörten Zuständen als sehr hilfreich erwiesen haben (siehe hierzu Kapitel 7.2). All diesen Modellen ist jedoch gemeinsam, dass sie prinzipiell eine möglichst vollständige Beschreibung aller (ungestörten) Anfangs- und Endzustände erfordern, zu denen Faktoren wie die Ladung, Masse und Geschwindigkeit des Projektils, wie auch spezifische elektronische Eigenschaften des Targetatoms beitragen. Die quantenmechanisch exakte Beschreibung der atomaren Zustände ist aber jenseits des Wasserstoffatoms nicht möglich. Es müssen daher Näherungen für die beteiligten Zustände gemacht werden, welche die Aussagekraft dieser theoretischen Modelle in verschiedenem Maße beeinflussen.

### Binärer Stoß

Im einfachsten Fall kann ein Ionisationsprozess als ein binärer Stoß zwischen einem schweren, geladenen Projektil und einem freien Elektron betrachtet werden. Der Einfluss des Targetkerns auf den Prozess wird dabei vollständig vernachlässigt.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt in Abhängigkeit von der kinetischen Energie des Elektrons kann dann über die Rutherford-Streuung angegeben werden (siehe beispielsweise [157]):



$$\frac{d\sigma}{dE_e} \propto \frac{2\pi}{m_e v_P^2} \left( \frac{Z_P}{W} \right)^2 \quad (6.18)$$

Für ein freies Elektron entspricht die Energie  $W$  direkt der kinetischen Energie. Die Bindung des Elektrons im Potential des Atomkerns kann allerdings durch das Ionisationspotential berücksichtigt werden, sofern  $E_e \gg I_p$  gilt. Der Energieübertrag ändert sich damit zu  $W = E_e + I_p$ .

Die maximale Energie, die ein freies Elektron dabei bei solch einem Stoß aufnehmen kann, ist in der klassischen Mechanik gerade die Energie, die ein zentraler Stoß zwischen Projektil und Elektron überträgt, wenn das Elektron in Richtung der einfallenden Projektilachse mit doppelter Projektilgeschwindigkeit emittiert wird.

$$E_{kin,e}^{max} = 2m_e v_P^2 \quad (6.19)$$

Für gebundene Elektronen muss auch hier das Ionisationspotential berücksichtigt werden. Dies wird etwa in der „binary encounter“ (BE) -Näherung angewandt [158, 159]. Dabei gilt die BE-Näherung nur für

$$v_P > \sqrt{\frac{I_P}{2m_e}}. \quad (6.20)$$

Für schnelle Stöße mit hohen Energieüberträgen kann dieses Modell als Grundlage zur Berechnung des Wirkungsquerschnittes dienen (siehe etwa [160, 161]), für weiche Stöße wird  $\frac{d\sigma}{dE_e}$  aber deutlich unterschätzt, da hier vor allem Dipolübergänge auftreten, die wesentlich zur quantenmechanischen Beschreibung des Targets beitragen, in der klassischen Rutherford-Streuung jedoch nicht berücksichtigt werden.

## **Einfluss der Targetstruktur**

Neben der bereits genannten Bindungsenergie werden in der Rutherfordstreuung weitere Targeteigenschaften ignoriert, die einen Einfluss auf die Wirkungsquerschnitte der Elektronen haben können. Im Folgenden soll auf diese Effekte kurz eingegangen werden.

## **Das Compton-Profil**

Im Bohr-Modell bewegen sich die Elektronen auf festgelegten Bahnen mit einer Geschwindigkeit  $v_{e-,Bahn}$ . In der Quantenmechanik ist dem Elektron eine Wahrscheinlichkeitsverteilung sowohl im Orts- als auch im Impulsraum zugeordnet. Diese Verteilung im Impulsraum, das sogenannte Compton-Profil, führt zur Verbreiterung

der Elektronenimpulse im Endzustand, insbesondere bei niedrigen Elektronenenergien [162]. In der quantenmechanischen Beschreibung des Systems ist dem Compton-Profil bereits intrinsisch Rechnung getragen, es kann aber auch in der oben erwähnten BE-Näherung oder in klassischen Rechnungen (beispielsweise CMTC, siehe Kapitel 7.1) berücksichtigt werden.

### **Effekte bei Mehr-Elektronensystemen**

Die einfachste Beschreibung des Targetsystems ist durch die Wasserstoff-Wellenfunktion gegeben, wobei nur ein einzelnes Elektron berücksichtigt wird. Werden allerdings Targetspezies mit höheren Ordnungszahlen verwendet, müssen Effekte aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen untereinander berücksichtigt werden.

Auf der einen Seite führt das Vorhandensein mehrerer Elektronen zu einer repulsiven Kraft zwischen den Elektronen. Dies kann durch einen Abschirmeffekt der nicht an der Ionisation beteiligten Elektronen auf die Kernladung berücksichtigt werden, der zu einer effektiven Kernladung  $Z_{eff}$  führt.  $Z_{eff}$  kann dabei so gewählt werden, dass das Ionisationspotential richtig wiedergegeben wird. Hierbei wird jedoch vernachlässigt, dass der Abschirmungseffekt eine Abhängigkeit vom Abstand des aktiven Elektrons zum Atomkern zeigt. Um dies zu berücksichtigen, können kompliziertere Targetpotentiale, wie etwa ein Hartree-Fock-Slater-Potential (siehe beispielsweise [37]) verwendet werden, um die jeweiligen Zustände zu berechnen.

Ein weiterer Effekt, der bei Mehrelektronensystemen auftritt, ist die Korrelation zwischen den einzelnen Elektronen, die über einen Abschirmungseffekt hinausgeht. Eine wichtige Rolle spielt die Korrelation etwa bei der Mehrfachionisation, bei welcher der Übergang zumindest eines der beiden Elektronen ins Kontinuum direkt durch die Wechselwirkung der beiden Elektronen untereinander bedingt sein kann.

Aber auch in der Einfachionisation wurde der Einfluss der Elektronen-Korrelationen auf die Wirkungsquerschnitte diskutiert. Eine Berücksichtigung dieser Effekte in theoretischen Modellen ist allerdings nur mit großem Aufwand möglich und wurde bislang nur sehr begrenzt durchgeführt. Es wurde aber diskutiert, dass Diskrepanzen zwischen theoretischen und experimentell ermittelten Streuquerschnitten der Ionisation von Helium, wie beispielsweise in [13] berichtet, teilweise auf Korrelationseffekte zurückgeführt werden könnten. Ein erster Hinweis darauf zeigte sich in [70], wo theoretische differentielle Wirkungsquerschnitte Unterschiede zeigten, je nachdem ob ein oder zwei Elektronen explizit berücksichtigt wurden. Ein umfassender Überblick über Korrelationseffekte bei Mehrelektronensystemen findet sich auch in [163].

Bei der Untersuchung von Ionenstoß-Experimenten an Lithium, wie sie in dieser Arbeit vorgestellt werden, bietet sich daher die Gelegenheit, Prozesse mit starker und schwacher Korrelation zu untersuchen, indem alternativ ein Elektron aus der ( $n = 2$ )-Valenzschale oder aus der vollbesetzten inneren ( $n = 1$ )-Schale ionisiert wird. Aufgrund der signifikant geringeren Wechselwirkung zwischen Elektronen in

unterschiedlichen Schalen, kann eine Ionisation des Valenzelektrons als weitgehend unbeeinflusst von den anderen Elektronen angesehen werden. Bei der Ionisation eines Elektrons aus der ( $n = 1$ ) -Schale hingegen werden Korrelationseffekte der beiden Elektronen ähnlich wie in Helium erwartet.

### **Einfluss des Targetkerns**

Der Atomkern des Targets hat einen großen Einfluss auf die Dynamik der Ionisation. Sein Coulomb-Potential ist nicht nur maßgebend für die Bewegung des Elektrons, sondern auch für die des Projektil-Ions, so dass aus dem Stoß ein effektives Drei-Körper-Problem wird.

Die Wechselwirkung des Elektrons mit dem Targetkern muss dabei vor und nach der Ionisation durch das Projektil berücksichtigt werden. Die Wechselwirkung zwischen Elektron und Targettrumpf im Endzustand ist vor allem bei weichen Stößen relevant, in denen die Elektronenenergie in derselben Größenordnung wie die Bindungsenergie des Elektrons liegt (siehe [164]). In den in Kapitel 7 vorgestellten quantenmechanischen theoretischen Modellen kann dieser Einfluss des Targetpotentials durch eine geeignete Wahl der Elektronenwellenfunktion im Endzustand berücksichtigt werden.

Die Wechselwirkung zwischen dem Targettrumpf und dem Projektil hingegen erfordert ein Modell, das eine mehrmalige Wechselwirkung berücksichtigt, nämlich die Wechselwirkung zwischen Elektron und Projektil, die zur Ionisation des Elektrons führt, und zusätzlich eine Wechselwirkung zwischen Targetkern und Projektil. Der Beitrag einer solchen Mehrfachstreuung ist umso größer, je höher die Störung  $\eta = Z_P/v_P$  durch das Projektil ist, bzw. je größer die Stoßzeit und die Kraft, die das Projektil auf den Kern ausübt, ist. Es zeigt sich allerdings, dass zumindest bei hoch-differentiellen Querschnitten bereits bei kleinen Störparametern, wie der in [13] vorgestellten Messung, Effekte auftreten, die unter anderem der Kern-Kern-Wechselwirkung zugeschrieben werden können.

### **Einfluss der Projektilparameter**

Die Eigenschaften des Projektil sind durch seine Masse, seine Ladung, seine Geschwindigkeit und gegebenenfalls durch seine innere Struktur (das heißt, sofern es gebundene Elektronen trägt) gegeben. Welchen Einfluss diese Parameter auf die Stoßdynamik haben, lässt sich zunächst durch die störungstheoretische Betrachtung des Streuprozesses verdeutlichen. In der ersten Bornschen Näherung, wie sie in Kap 7.2 hergeleitet ist, tritt die Projektilabhängigkeit nur durch die Proportionalität des Wirkungsquerschnitts zum Quadrat des Störparameters  $(Z_P/v_P)^2$  auf. In dieser Näherung ist also der Querschnitt unabhängig sowohl vom Vorzeichen der Projektilladung als auch von der Projektilmasse.

Werden Beiträge höherer Ordnung berücksichtigt, wie beispielsweise in der zweiten Bornschen Näherung (Kapitel 7.2), treten Terme im Querschnitt auf, die mit  $(Z_P/v_P)^3$  und höheren Potenzen des Störparameters skalieren, wodurch sich eine Abhängigkeit vom Vorzeichen der Projektilladung ergibt [165]. Dadurch können Effekte, wie die „post collision interaction“ (PCI) berücksichtigt werden. Bei der PCI wird das nach dem Stoß freie Elektron vom Projektil angezogen oder abgestoßen. Die longitudinale Impulsverteilung der Elektronen wird daher für positiv geladene Projektile in Richtung der Projektilflugbahn verschoben, für negativ geladene Projektile in entgegengesetzter Richtung. In [166] beispielsweise wurde der Einfluss der PCI-Effekte auf die Elektronenemission im Vergleich zwischen Stößen mit 1 MeV Protonen und Antiprotonen auf ein Helium-Target beobachtet.

Der Störparameter allein reicht jedoch nicht aus, um die Stoßdynamik zu beschreiben. Dies wird beispielsweise bei extremen Stoßsystemen deutlich, bei denen hoch geladene, relativistische Schwerionen als Projektile verwendet werden. Hier können (bei relativ moderaten Störparametern) durch die relativistische Lorentz-Kontraktion extrem intensive ( $> 10^{20} \text{ W cm}^{-2}$ ) und kurze ( $< 1 \text{ as}$ ) Felder durch das vorbeifliegende Projektil-Ion erzeugt werden. Die Elektronenemission kann in diesem Fall durch die Absorption von Photonen aus diesem Feld nach der Methode von Weizsäcker und Williams beschrieben werden [167–169].

Der Einfluss der Masse des Projektils auf die Stoßdynamik ist in gewisser Hinsicht subtiler, als die der Projektilladung und -geschwindigkeit. Für sehr leichte Projektile wie Elektronen treten zwar offensichtlich kinematische Effekte auf, so dass die in Kapitel 6.1 hergeleiteten Näherungen für weiche Stöße nicht mehr gültig sind. Für schnelle Ionenstöße hingegen sind Masseneffekte innerhalb der Theorie weitgehend vernachlässigbar bzw. können durch die leichte Anpassung der reduzierten Massen berücksichtigt werden.

Eine indirekte Abhängigkeit der Stoßdynamik von der Projektilmasse ergibt sich allerdings, wenn die Projektil-Kohärenzlänge berücksichtigt wird. Die Kohärenzlänge entspricht dabei der Breite des Projektil-Wellenpakets, auf der die relative Phase der Welle weniger als  $\pi/2$  fluktuiert. Diese Breite entspricht also dem maximalen Schlitzabstand im klassischen Doppelspaltexperiment von Young [82], bei dem noch Interferenz beobachtet werden kann. Wendet man dieses Konzept auf die Projektil-Materiewellen an, zeigt es sich, dass die typischen Kohärenzlängen von Projektil-Ionen kleiner als die Größe des Atoms sein können. Neueste Studien des Elektroneneinfangs und der Ionisation in Stößen zwischen Protonen und Wasserstoffmolekülen [81, 170] haben Hinweise erbracht, dass diese endliche Kohärenzlänge des Projektil-Ions einen deutlichen Einfluss auf die Querschnitte haben kann. Ähnliche Effekte wurden auch für Ion-Atom-Stöße beobachtet [75, 83]. Da die Kohärenzlänge (bei ansonsten gleicher Strahlgeometrie) proportional zur deBroglie-Wellenlänge ist, sind für schwerere Projektile die erreichbaren Kohärenzlängen in aller Regel geringer.

### 6.3. Wirkungsquerschnitte der Stoßionisation

Um die Stoßdynamik von Streuprozessen zu verstehen, müssen Messgrößen bzw. Spektren untersucht werden, die sowohl experimentell als auch theoretisch zugänglich sind. Dies sind im Allgemeinen die Wirkungsquerschnitte der Reaktion. Dabei entspricht die Ionisationswahrscheinlichkeit dem totalen Wirkungsquerschnitt, und die Impuls-, Energie- und/oder Winkelverteilungen den differentiellen Querschnitten. Im Folgenden werden einige für diese Arbeit relevante Beispiele zur Darstellung von Wirkungsquerschnitten gegeben.

#### Totale Ionisationsquerschnitte

Der totale Wirkungsquerschnitt kann in der Näherung für binäre Stöße zwischen dem Projektil und dem Elektron über

$$\sigma_{tot} = \frac{Z_P^2}{v_P^2} \frac{2\pi}{I_P} \left( \ln \frac{v_P^2}{I_P} \right)^{1/2} \quad (6.21)$$

abgeschätzt werden [156] (vergleiche auch Gleichung 6.18).

Eine genauere relativistische Abschätzung für die totalen Wirkungsquerschnitte für die Ionisation von wasserstoffähnlichen Targetatomen mit einer Kernladung  $Z_T$  geben Voitkiv und Koval in [171, 172] mit

$$\sigma_{tot} = 7.113 \frac{Z_P^2}{v_P^2 Z_T^2} \left[ \ln \left( \frac{5v_P^2}{Z_P Z_T} \gamma \right) - \frac{v_P^2}{2c^2} \right] \quad (6.22)$$

an. Im nicht-relativistischen Grenzfall  $\gamma \rightarrow 1$  vereinfacht sich dies zu

$$\sigma_{tot} = 7.113 \frac{Z_P^2}{v_P^2 Z_T^2} \left[ \ln \left( \frac{5v_P^2}{Z_P Z_T} \right) \right]. \quad (6.23)$$

Für das in dieser Arbeit relevante Lithium-Target stellen Shah et al. in [173] eine ausführliche Untersuchung der totalen Wirkungsquerschnitte der Ionisation durch  $H^+$  und  $He^{2+}$  für verschiedene Projektilenergien vor. Für die Einfachionisation von Lithium durch ein 1.4 MeV  $He^{2+}$ -Projektil finden sie einen Wert von  $1.31 \pm 0.07 \cdot 10^{16} \text{ cm}^2 = 4.68 \text{ a.u.}$ , ein Wert der etwa dem in [174] mit Hilfe einer CDW-EIS-Rechnung erhaltenem gut entspricht.

#### Differentielle Wirkungsquerschnitte

Zur Untersuchung der Dynamik einer Stoßreaktion bieten sich differentielle Wirkungsquerschnitte  $d\sigma/dx$  an, die Aussagen beispielsweise über den Energie- und Impulsübertrag oder die Emissionscharakteristik der emittierten Elektronen erlauben. So liefert beispielsweise der einfach differentielle Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dE_e$

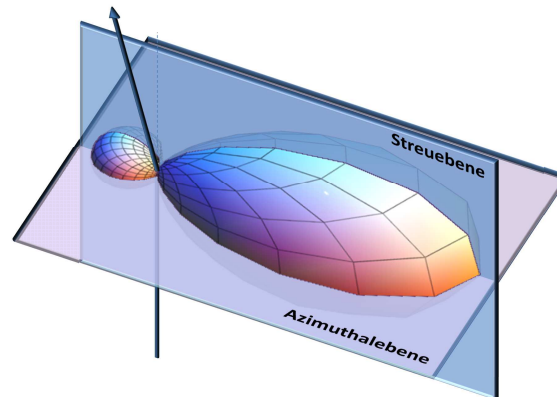


Abbildung 6.2.: Beispiel eines vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitts in einer dreidimensionalen Polardarstellung. Erklärung siehe Text.

eine Aufschlüsselung nach der Energieverteilung der emittierten Elektronen und man kann den relativen Beitrag der jeweiligen Elektronenenergien zum totalen Wirkungsquerschnitt betrachten.

Des Weiteren können mehrfach differentielle Wirkungsquerschnitte untersucht werden, in denen die gemessenen Ereignisse nach mehreren Parametern aufgeschlüsselt werden. So werden etwa in Kapitel 9 doppelt differentielle Wirkungsquerschnitte (DDCS) vorgestellt, bei denen der Streuquerschnitt differentiell sowohl bezüglich der Energie als auch des Impulsübertrags ist. Dies hat den Vorteil, dass bestimmte Charakteristiken spezifisch in ihrer Abhängigkeit von diesen Parametern untersucht werden können.

In der Stoßphysik werden häufig vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte, FDCS (aus dem Englischen, fully differential cross sections) untersucht. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte geben dabei die Wahrscheinlichkeit an, ein System nach der Reaktion in einem kinematisch vollständig bestimmten Endzustand zu finden. In atomaren Stoßexperimenten wird dabei nur der Spin vernachlässigt, da dieser in aller Regel experimentell nicht zugänglich ist. Im Falle der Einfachionisation entsprechen die FDCS gerade den dreifach differentiiellen Wirkungsquerschnitten, TDCS („triple differential cross sections“), und sind über

$$FDCS = \frac{d^3\sigma}{d\Omega dE_e dq} \quad (6.24)$$

definiert, wobei  $E_e$  die kinetische Energie des Elektrons,  $q$  der Impulsübertrag und  $\Omega$  den Raumwinkel des emittierten Elektrons darstellt.

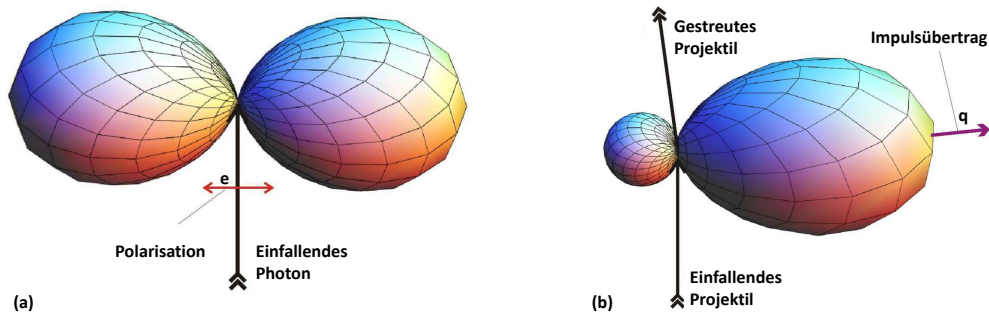


Abbildung 6.3.: Theoretisch bestimmte Winkelverteilung der ionisierten Elektronen bei (a) Photoionisation und (b) Stoßionisation von Helium. Abbildung aus [114].

Zur Visualisierung der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte hat sich eine dreidimensionale Darstellung bewährt, in der die Emissionscharakteristik der Elektronen in Abhängigkeit der azimuthalen ( $\varphi_e$ ) und polaren ( $\vartheta_e$ ) Winkel für jeweils feste Werte des Impulsübertrags  $q$  und der Elektronenenergie  $E_e$  aufgetragen werden. Ein Beispiel dieser Darstellungsweise ist in Abbildung 6.2 zu sehen. Dies ist also ein dreidimensionaler Polarplot, bei dem der Abstand der Fläche zum Ursprung der Intensität der Emission in das respektive Raumwinkelement entspricht. Vorzugsrichtungen sind dabei durch das ein- und auslaufende Projektil gegeben.

## 6.4. Stoßinduzierte Einfachionisation am Beispiel eines Helium-Targets

Das Emissionsspektrum der Photoionisation eines Helium-Targets ist in Abbildung 6.3 (a) dargestellt. Aufgrund der Dipol-Auswahlregeln ergibt sich hier ein charakteristisches Emissionsspektrum mit einer  $\cos^2$ -Verteilung, sofern das Elektron aus einem  $s$ -Grundzustand ionisiert wurde. (ein Überblick über Photoionisationsprozesse ist auch in Teil III dieser Arbeit zu finden). Vergleicht man das Emissionsspektrum der Photoionisation eines Helium-Targets aus Abbildung 6.3 (a) mit dem der Stoßionisation mit 100 MeV/u  $C^{6+}$  aus 6.3 (b), so lässt sich auch in der Stoßionisation eine Doppel-Keulenstruktur in Richtung des Impulsübertrags beobachten. Dies lässt sich so verstehen, dass auch hier große Dipol-Beiträge zum Übergangs-Matrixelement beitragen. Es fällt dabei auf, dass die Verteilung bei der Stoßionisation nun nicht mehr spiegelsymmetrisch entlang  $\vec{q}$  ist. Dies tritt aufgrund von Multipol-Beiträgen auf. Es kommt daher zu einer deutlichen Vorzugsrichtung der Emission in Richtung des Impulsübertrags,  $+\vec{q}$ , dem sogenannten Binary-Peak.

In entgegengesetzter Richtung kommt es zur Ausprägung eines kleineren Maxi-

mums, dem sogenannten Recoil-Peak. Hierbei werden Elektronen, die in Richtung des auslaufenden Projektils emittiert wurden, im Potential des Targetrumpfes gestreut und in die entgegengesetzte Richtung emittiert [175]. Je nach Impulsübertrag und Elektronenenergie ist die Ausprägung des Recoil-Peaks unterschiedlich stark und kann im Grenzfall des „binary limit“ für hohe  $\vec{q}$  ganz verschwinden. Auf der anderen Seite führt ein sehr kleiner Impulsübertrag zu einer nahezu symmetrischen Verteilung der beiden Keulen, was als "Photolimit“ bezeichnet wird.

Die charakteristische Doppelkeulenstruktur lässt sich dabei in einer ganzen Reihe von Experimenten mit unterschiedlichen Projektilen beobachten, wie etwa in [26, 167, 176, 177] berichtet.

Trotz vieler bereits in Kapitel 1 näher beleuchteten Diskrepanzen zwischen theoretischen Modellen und experimentellen Daten wird diese Doppelkeulenstruktur in nahezu allen theoretischen Modellen zumindest qualitativ wiedergeben.



## 7. Theoretische Grundlagen

1911 untersuchte Ernest Rutherford erstmals in [94] die Streuung eines geladenen Teilchens an Atomen und kam zu damals überraschenden Ergebnissen, welche die Modellvorstellung des atomaren Aufbaus grundlegend prägten. Das Ergebnis, dass die Ablenkung  $\theta$  eines Alphateilchens beim Durchdringen einer dünnen Goldfolie eine  $1/\sin^4(\theta/2)$ -Abhängigkeit zeigte, bestätigte die Annahme, dass der überwiegende Massenanteil der Atome in einem kleinen Kern konzentriert ist. Rutherford selbst beschrieb die Herleitung seiner Ergebnisse durch eine klassische Streutheorie, allerdings führt ein quantenmechanischer Ansatz dieser Streuung zu demselben Ergebnis [178]. Die quantenmechanische Betrachtung atomarer Streuprozesse nahm ihren Anfang im Jahre 1930 durch Hans Bethe, der in [2] eine umfassende Betrachtung inelastischer Stöße von geladenen Teilchen mit Materie vornahm. Seitdem wurde eine Vielzahl klassischer, halbklassischer und vollständig quantenmechanischer Ansätze entwickelt, um diese atomaren Prozesse zu beschreiben.

Ein fundamentales Modellsystem ist hierbei die Einfachionisation, an der Projektile (geladene Teilchen wie Elektronen, Protonen bzw. höher geladene, schwere Ionen oder Photonen aus einer hoch-energetischen Lichtquelle), und ein Targetsystem, bestehend aus dem zu ionisierenden Elektron und dem atomaren Rumpf, beteiligt sind.

Bereits in der vereinfachten Beschreibung dieser Systeme, in welcher der spezifische Aufbau des Projektils und des Targetrumpfes unberücksichtigt bleiben, können die zugrundeliegenden Bewegungsgleichungen nicht analytisch gelöst werden. Dieses sogenannte Drei-Körper-Problem wurde erst 1999 numerisch exakt für eines der einfachsten Stoßsysteme, nämlich  $e^- + H \rightarrow H^+ + e^- + e^-$ , gelöst [4]. Insbesondere für die Ionisation im Ionenstoß existieren bis heute jedoch nur Näherungsverfahren.

Von einer guten Theorie wird dabei erwartet, dass sie die experimentell zugänglichen Messgrößen möglichst genau wiedergeben kann. Hierzu wird oft ein Vergleich des charakteristischen Elektronen-Emissionsspektrums gewählt. In diesem Kapitel soll ein kurzer Überblick über die verschiedensten (quantenmechanischen) Ansätze zur Berechnung inelastischer atomarer Stöße gegeben werden, die teilweise im weiteren Verlauf dieser Arbeit zum Vergleich der experimentell ermittelten Wirkungsquerschnitte verwendet werden. Diese lassen sich dabei in klassische, quantenmechanische, perturbative und nicht-perturbative Verfahren unterteilen. Eine ausführlichere Beschreibung über die hier aufgeführten Methoden lässt sich in [156, 179] finden oder in den in den jeweiligen Unterkapiteln zitierten Referenzen. Der Aufbau dieses Kapitels orientiert sich weiterhin an den in [114, 156, 180] vorgestellten Arbeiten.

## 7.1. Classical Trajectory Monte Carlo Simulation (CTMC)

Klassische Ansätze zur Lösung der Bewegungsgleichungen atomarer Stoßprozesse sind seit langem bekannt, halten dem Vergleich mit experimentellen Messungen aber nur sehr bedingt stand. Eine Erweiterung dieser Rechnungen ist die CTMC-Methode, in der die Teilchentrajektorien auf Basis klassischer Mechanik berechnet werden, der Anfangszustand aber gewisse quantenmechanische Bedingungen erfüllt [181, 182]. In der Regel werden die Elektronen des Targetsystems dabei als unabhängige, nicht miteinander wechselwirkende Teilchen betrachtet, die sich auf klassischen Ellipsenbahnen um den Atomkern bewegen. Dem Prinzip der Aufenthaltswahrscheinlichkeit wird dadurch Rechnung getragen, dass eine Vielzahl zufällig ausgewählter Anfangszustände verwendet wird, wobei für jede einzelne Anfangsbedingung die zeitliche Entwicklung des Systems allein nach den Gesetzen der Newtonschen Mechanik und Elektrodynamik (aufgrund der zugrundeliegenden Coulombkraft) berechnet wird. Quantenmechanische Effekte wie Interferenzen können daher nicht reproduziert werden. Ein Problem stellt hierbei auch die Grundzustandsenergie der Elektronen dar, für die es kein klassisches Analogon gibt und die in einer klassischen Theorie zu Autoionisationen führen kann, sofern Wechselwirkungen der Elektronen untereinander berücksichtigt werden. Um dies zu vermeiden, kann etwa ein abgeschirmtes Kernpotential verwendet werden [183]. Für einen Überblick über die CTMC-Methode siehe auch [180] sowie die dort angegebenen Referenzen.

Der Vorteil dieser klassischen Betrachtungsweise liegt in dem numerischen Aufwand, der im Gegensatz zu anderen numerischen Verfahren auch bei größeren Störungen durch das Projektil gleich bleibt. Häufig werden quantenmechanische Ansätze zur Berechnung der Streuquerschnitte verwendet, in denen die Bewegung des Projektils weiterhin klassisch betrachtet wird. Dieser semi-klassische Ansatz ist für die meisten Ionenstoß-Prozesse aufgrund der großen Projektilmasse eine relativ gute Vorgehensweise zur Beschreibung des Systems und wird vor allem in nicht-perturbativen Verfahren zur Berechnung der Elektronenemissionsspektren eingesetzt (siehe Unterkapitel 7.3).

## 7.2. Störungstheoretische Rechnungen

Häufig werden störungstheoretische Methoden zur Analyse eines atomaren Stoßprozesses verwendet. Hierbei wird die Wechselwirkung des Projektils mit dem ansonsten unbeeinflussten Targetsystem als Störung betrachtet. Die Gültigkeit dieser Näherungen ist auf Fälle begrenzt, in der diese Entwicklung nach dem Störungsparameter  $\eta = Z_P/v_P$  konvergiert, das heißt  $\eta \ll 1$  (siehe Gleichung 6.2). Man spricht in diesem Fall vom perturbativen Regime.

Ausgangspunkt der meisten perturbativen Ansätze ist die Schrödingergleichung, aus der sich die Eigenzustände  $|\psi\rangle$  (unter Vernachlässigung des Spins) ergeben,

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle . \quad (7.1)$$

Der Hamiltonoperator  $H$  des vollständigen Systems lässt sich aufteilen in

$$H = H_0 + V , \quad (7.2)$$

mit einem ungestörten Anteil  $H_0$  und der Störung  $V$  im Anfangszustand. Dabei setzt sich der Hamiltonoperator des ungestörten Systems,  $H_0$ , aus den Hamiltonoperatoren des Projektils und des Targets zusammen. Für den Endzustand muss nicht unbedingt dieselbe Aufteilung vorgenommen werden, es gilt aber allgemein  $H = H'_0 + V'$ . Betrachtet man nur die Einfachionisation, gilt für Anfangs- und Endzustand die Beziehung

$$H_0 = H'_0 \quad \text{sowie} \quad V' = V . \quad (7.3)$$

Damit folgt für die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (7.4)$$

$$H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (7.5)$$

$$H'_0 |\phi'\rangle = E |\phi'\rangle \quad (7.6)$$

für die jeweiligen Eigenzustände des vollständigen,  $|\psi\rangle$ , und der ungestörten Systeme vor,  $|\phi\rangle$ , und nach,  $|\phi'\rangle$ , dem Stoß.

Die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung ergeben sich zu:

$$|\Psi\rangle = e^{-iEt} |\psi\rangle \quad (7.7)$$

$$|\Phi\rangle = e^{-iEt} |\phi\rangle \quad (7.8)$$

$$|\Phi'\rangle = e^{-iEt} |\phi'\rangle \quad (7.9)$$

Vor dem Stoß ( $t \rightarrow -\infty$ ) befindet sich das System im Anfangszustand  $|\Phi^i\rangle$ , wobei im weiteren Verlauf die hochgestellten Indizes  $i, f$  den Anfangs- bzw. Endzustand symbolisieren. Während des Stoßes selbst kann die Wechselwirkung zwischen Projektil und Target durch das Potential  $V$  nicht mehr vernachlässigt werden, und der Anfangszustand ändert sich durch das einlaufende Projektil zu  $|\Psi^i(t)\rangle$ , der nun ein Eigenzustand zu  $H$ , des vollständigen Systems, ist.

Durch eine Projektion von  $\lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi^i(t)\rangle$  auf den Endzustand  $|\Phi^f\rangle$  erhält man die Wahrscheinlichkeit, das System nach dem Stoß in diesem nunmehr ungestörten Endzustand zu finden. Dieser sogenannte Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  der Reaktion ist dann proportional zum Quadrat des Übergangsmatrixelementes  $A^{f,i}$ :

$$\sigma \propto (A^{f,i})^2, \quad (7.10)$$

mit

$$A^{f,i} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Phi'^f | \Psi^i \rangle. \quad (7.11)$$

Zur Berechnung von  $A^{f,i}$  eignet sich Gleichung 7.11 jedoch weniger, da die Phasen der Eigenzustände das nicht konvergierende (oszillierende) Integral  $\exp(-iEt)$  enthalten. Sind, wie bei der Ionisation der Fall, die Zustände  $|\Phi'^f\rangle$  und  $|\Psi^i\rangle$  im Grenzfall  $t \rightarrow -\infty$  orthogonal, lässt sich Gleichung 7.11 in

$$A^{f,i} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi'^f | \Psi^i \rangle \quad (7.12)$$

umformen. Mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödingergleichung ergibt sich nun

$$\begin{aligned} A^{f,i} &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Phi'^f | (H - H_0) | \Psi^i \rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Phi'^f | V' | \Psi^i \rangle \\ &= -i \langle \phi'^f | V' | \psi_+^i \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(E^f - E^i)t} \\ &= -2\pi i \langle \phi'^f | V' | \psi_+^i \rangle \delta(E^f - E^i). \end{aligned} \quad (7.13)$$

$A^{f,i}$  lässt sich als

$$A^{f,i} = -2\pi i T^{f,i} \delta(E^f - E^i) \quad (7.14)$$

schreiben, wobei

$$T^{f,i} = \langle \phi'^f | V' | \psi_+^i \rangle \quad (7.15)$$

die sogenannte  $T$ -Matrix in der *post*-Form darstellt und  $|\psi_+^i\rangle$  die Randbedingungen einer auslaufenden Welle erfüllt. Diese Herleitung ist auch in der zeit-umgekehrten Form möglich, wobei sich die zugehörige  $T$ -Matrix dann in die *prior*-Form,  $T^{f,i} = \langle \psi_-^f | V | \phi^i \rangle$  umwandelt und  $|\psi_-^f\rangle$  den Randbedingungen einer einlaufenden Welle genügt.

Die Bestimmung des Übergangsmatrixelementes nach Gleichung 7.14 ist eine exakte Lösung des Streuproblems. Das Problem liegt allerdings in der Bestimmung der Eigenzustände  $|\psi_+^i\rangle$  und  $|\psi_-^f\rangle$ , die nicht analytisch lösbar sind und daher über Näherungsverfahren bestimmt werden müssen. Einige häufig verwendete Näherungsverfahren werden im Folgenden kurz vorgestellt.

## Bornsche Näherung

Das wohl bekannteste Näherungsverfahren ist die nach Max Born benannte und vor allem durch Hans Bethe [2] erweiterte Bornsche Näherung, die eine Entwicklung nach dem bereits eingeführten Störungsparameter  $\eta = Z_P/v_P$  zugrunde liegt. Die Voraussetzung für diese Näherung liegt in der Konvergenz der verwendeten Reihenentwicklung, die nur für  $\eta \ll 1$  gegeben ist. Die Bornsche Näherung ist daher auf Anwendungen, in denen die durch das Projektil verursachte Störung gering ist, beschränkt.

Das Stoßsystem wird hierbei in zwei Teilsysteme, das Projektil- und das Targetsystem, aufgeteilt, die beide vor und nach dem Stoß voneinander unabhängig sind. Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems setzt sich somit zusammen aus

$$H = H_P + H_T + V, \quad (7.16)$$

mit  $H_P$  als der Hamiltonoperator des freien Projektils und  $H_T$  dem Hamiltonoperator des ungestörten Targetsystems. Die Wechselwirkung zwischen beiden Systemen ist dabei über das Coulombpotential

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \sum_j \frac{Z_P}{|\vec{r}_P - \vec{r}_{e_j}|} \quad (7.17)$$

gegeben. Die Ladungszustände des Projektils und des Targettrumpfes sind dabei über  $Z_P$  bzw.  $Z_T$  charakterisiert, während  $\vec{r}_P$  und  $\vec{r}_{e_j}$  den Ort des Projektils und der an der Reaktion beteiligten Elektronen im Referenzsystem des Targettrumpfes angeben und  $R$  den Abstand der beiden Ladungsträger definiert.

Das Projektil kann dabei durch eine ebene Welle beschrieben werden, weshalb die Eigenzustände des ungestörten Systems sich zu

$$|\phi\rangle = |\varphi, \vec{p}_P\rangle = (2\pi)^{-3/2} \cdot e^{i\vec{p}_P \vec{r}_P} |\varphi\rangle \quad (7.18)$$

ergeben. Dabei sind  $|\varphi\rangle$  die Zustände des Targetelektrons und  $\vec{p}_P$  der Projektilimpuls.

Die Schrödingergleichung des Gesamtsystems  $(E - H_0)|\Psi\rangle = V|\Psi\rangle$  kann nun beispielsweise durch die Lippman-Schwinger-Gleichung exakt gelöst werden (für eine ausführliche Herleitung siehe auch [178]):

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_{\pm} V |\psi_{\pm}\rangle \quad (7.19)$$

mit dem freien Greenschen Operator

$$G_{\pm} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}. \quad (7.20)$$

Die Zustände  $|\psi_{\pm}\rangle$  ergeben sich nun über:

$$\begin{aligned}
 |\psi_{(0)}^i\rangle &= |\phi^i\rangle \\
 |\psi_{(1)\pm}^i\rangle &= |\phi^i\rangle + G_{\pm}V|\phi^i\rangle \\
 |\psi_{(2)\pm}^i\rangle &= |\phi^i\rangle + G_{\pm}V|\phi^i\rangle + G_{\pm}VG_{\pm}V|\phi^i\rangle \\
 |\psi_{(3)\pm}^i\rangle &= \dots
 \end{aligned} \tag{7.21}$$

Setzt man die so entwickelten Zustände in Gleichung 7.15 ein, lautet der Ausdruck für die  $T$ -Matrix

$$T^{f,i} = \langle \phi^f | V | \phi^i \rangle + \langle \phi^f | VG_{\pm}V | \phi^i \rangle + \langle \phi^f | VG_{\pm}VG_{\pm}V | \phi^i \rangle + \dots \tag{7.22}$$

Für das durch Gleichung 7.17 gegebene Potential entspricht dies gerade einer Entwicklung nach den Potenzen der Störung  $\eta$ . Dabei kann jeder weitere Term der Reihe einer weiteren Wechselwirkung zwischen Projektil und Target zugerechnet werden.

### Erste Bornsche Näherung

Oftmals wird bei geringen Störungen diese Reihe bereits nach dem ersten Term abgebrochen, man spricht dann von der ersten Bornschen Näherung, FBA (aus dem Englischen, first Born approximation). In vielen Fällen ist dies eine adäquate Beschreibung von Systemen mit kleiner Störung. Allerdings ist mit der FBA nur eine einmalige Wechselwirkung des Projektil mit dem ionisierten Elektron berücksichtigt, Effekte die eine mehrmalige Interaktion erfordern (wie etwa gleichzeitige Anregungsprozesse oder Wechselwirkung des Projektils mit dem Targetkern) lassen sich hierdurch nicht beschreiben.

Das Übergangsmatrixelement in der ersten Bornschen Ordnung ist

$$T_{1B}^{f,i} = \langle \phi^f | V | \phi^i \rangle ; \tag{7.23}$$

zusammen mit dem Wechselwirkungspotential aus Gleichung 7.17 und den über Gleichung 7.18 berechneten Zuständen ergibt sich nach Integration über die Projektilkoordinate und Lösen des Bethe-Integrals (siehe etwa [178])

$$T_{1B}^{f,i} = \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi^f \left| Z_T - \sum_j e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{e_j}} \right| \varphi^i \right\rangle , \tag{7.24}$$

wobei  $\vec{q}$  den Impulsübertrag vom Projektil auf das Target darstellt. Dabei beschreibt der erste Term des Störoperators,  $Z_T$ , die Kern-Kern-Wechselwirkung des Projektils mit dem Targettrumpf. Der Anfangs- und Endzustand  $|\varphi^i\rangle$  und  $|\varphi^f\rangle$  sind beide Eigenzustände des gleichen Hamiltonoperators,  $H_T$ , und im Falle der Ionisation

orthogonal. Aus diesem Grund verschwindet der erste Beitrag des Wechselwirkungspotentials und die T-Matrix vereinfacht sich zu

$$T_{1B}^{f,i} = \frac{Z_P}{2\pi^2 q^2} \left\langle \varphi^f \left| \sum_j e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_{e_j}} \right| \varphi^i \right\rangle. \quad (7.25)$$

Zur Berechnung der Übergangsamplitude müssen nun noch die gebundenen Anfangszustände  $|\varphi^i\rangle$  und die Kontinuums-Endzustände  $|\varphi^f\rangle$  bestimmt werden. Dies ist nur im Falle des Wasserstoffatoms exakt möglich, wo der Anfangszustand durch die Wellenfunktion des (1s)-Grundzustandes und der Endzustand durch eine Coulombwelle (der exakten Lösung des Elektrons im Kontinuum des Coulomb-Zentralpotentials des Targetkerns, siehe [156]) gegeben ist. Der Anfangszustand eines Mehrelektronensystems ist deutlich komplizierter und kann nur angenähert werden. Hierzu wird oft eine Wasserstoff- oder Hartree-Fock-Wellenfunktion (siehe etwa [178]) angenommen. Im Falle der Alkalimetalle, wie etwa Lithium, ist diese Annahme sicherlich eine gute Näherung, im Falle des häufig verwendeten Helium-Targets können aber durch diese Abschätzung Informationen über eventuelle Elektronen-Korrelationen verloren gehen.

Der totale Wirkungsquerschnitt kann nun über

$$\sigma \propto |T_{1B}^{f,i}|^2 \quad (7.26)$$

bestimmt werden und ändert sich mit  $Z_P^2$ , ist also unabhängig vom Vorzeichen der Projektilladung (in der ersten Bornschen Näherung).

### Zweite Bornsche Näherung

Will man weitere Wechselwirkungen zwischen dem Projektil und Target berücksichtigen, kann der zweite Term der Reihenentwicklung aus Gleichung 7.22 berücksichtigt werden, die Übergangsmatrix ändert sich damit zu

$$T^{f,i} = T_{1B}^{f,i} + T_{2B}^{f,i}, \quad (7.27)$$

mit der zweiten Born-Amplitude

$$T_{2B}^{f,i} = \left\langle \Phi^f \left| V G_{\pm} V \right| \Phi^i \right\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\langle \phi^f \left| V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \right| \phi^i \right\rangle. \quad (7.28)$$

Dabei tritt  $H_0$  im Nenner des Operators auf. Sofern  $|\varphi, \vec{p}_P\rangle$  der vollständige Satz der Eigenfunktionen zu  $H_0$  ist, kann Gleichung 7.28 umgeformt werden in

$$T_{2B}^{f,i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_n \int d^3 \vec{p}_P \frac{\left\langle \phi^f \left| V \right| \varphi_n \vec{p}_P \right\rangle \left\langle \varphi_n \vec{p}_P \left| V \right| \phi^i \right\rangle}{E - E_n - E_P + i\epsilon}. \quad (7.29)$$

Hierbei tritt nun eine unendliche Summe auf, die angenähert werden muss. In der sogenannten „closure approximation“ [184] wird hierbei für einen Zwischenzustand  $|\varphi_n, \vec{p}_P\rangle$  eine gemittelte Energie  $\bar{E}_n$  verwendet. Die Übergangsamplitude in der zweiten Bornschen Näherung ergibt sich schließlich zu

$$T_{2B}^{f,i} = \left(\frac{Z_P}{2\pi^2}\right)^2 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3\vec{p}_P \frac{\langle \phi^f | Z_T^2 - Z_T \sum_j (e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_{e_j}} + e^{i\vec{q}_2 \cdot \vec{r}_{e_j}}) + \sum_{i,j} (e^{i\vec{q}_2 \cdot \vec{r}_{e_i}} e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_{e_j}}) | \phi^f \rangle}{q_1^2 q_2^2 (E - E - \bar{E}_n - E'_P + i\varepsilon)}, \quad (7.30)$$

mit der Zwischenzustandsenergie des Projektils,  $E_P$ , und den in einer ersten und zweiten Wechselwirkung übertragenen Impulsen,  $\vec{q}_1$  und  $\vec{q}_2$ . In Gleichung 7.30 steht der erste Term des Übergangsmatrixelementes,  $Z_T^2$ , für die Doppelstreuung des Projektils am Targetkern, welcher für inelastische Stöße verschwindet. Der zweite Term beschreibt Stöße des Projektils mit dem  $j$ -ten Elektron und dem Targetkern, während der letzte Term einer Wechselwirkung des Projektils zuerst mit dem  $i$ -ten und anschließend mit dem  $j$ -ten Elektron entspricht. Damit werden nun auch Kern-Kern Wechselwirkungen in dieser Näherung berücksichtigt, für den Fall  $i = j$  können zusätzlich PCI-Effekte in die Kalkulation der Wirkungsquerschnitte mit einbezogen werden.

Der totale Wirkungsquerschnitt ergibt sich nun zu

$$\sigma \propto |T_{1B}^{f,i} + T_{2B}^{f,i}|^2 = \alpha_1 Z_P^2 + \alpha_2 Z_P^3 + \alpha_3 Z_P^4. \quad (7.31)$$

Dabei entspricht der mittlere Term Interferenzeffekten zwischen Einfach- und Zweifach-Wechselwirkungen des Projektils mit dem Target, während der erste und letzte Term die reinen Wechselwirkungen erster und zweiter Ordnung darstellen.

## Rechnungen mit gestörten Wellen

Die Bornsche Näherung beruht auf der Annahme, dass sich Projektil und Target im Anfangs- und Endzustand nicht beeinflussen. Diese Annahme kann jedoch nur gelten, wenn die Störung durch das Projektil nicht zu groß ist und auch die Zeitspanne der Wechselwirkung gering bleibt, also solange  $\eta \ll 1$ . Bei größeren Störungen hingegen verzerrt das langreichweitige Coulombpotential des Projektils die Target-Zustände schon vor und auch nach dem Stoß und eine Bestimmung der Wirkungsquerschnitte über die Bornsche Näherung ist unzureichend, da diese nicht mehr konvergiert. Um dieses Problem zu umgehen, können beispielsweise Rechnungen mit gestörten Wellen durchgeführt werden, in denen die Entwicklung nach dem Parameter  $\eta = Z_P/v_P$  aus der Bornschen Näherung durch  $\eta' = Z_P/v_P^2$  ersetzt wird und damit bis zu deutlich höheren Störungen gültig bleibt.

Hierbei wird der Hamiltonoperator des Gesamtsystems in einen ungestörten Anteil und eine Störung aufgeteilt, die wiederum unterteilt wird:



$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + V = H_0 + U + W && (\text{Anfangszustand}) \\
 H &= H'_0 + V' = H'_0 + U' + W' && (\text{Endzustand})
 \end{aligned}
 \tag{7.32}$$

Dabei stellen  $U^{(\prime)}$  die sogenannten Distortions-Potentiale dar, die bereits das langreichweitige Coulombpotential beinhalten, und  $W^{(\prime)}$  die nun im Vergleich zur Bornschen Näherung deutlich schwächeren Störpotentiale. Im Allgemeinen sind die Operatoren  $U$  und  $W$  nicht hermitesch. Ein Teil der eigentlichen Wechselwirkung zwischen Projektil und Target wird damit in bereits „gestörten“ Eigenfunktionen  $|\chi_{\pm}\rangle$  berücksichtigt. Diese Eigenfunktionen sind gegeben über die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}
 (H_0 + U) |\chi_+\rangle &= E |\chi_+\rangle \\
 (H'_0 + U') |\chi_-\rangle &= E |\chi_-\rangle,
 \end{aligned}
 \tag{7.33}$$

woraus sich das T-Matrix-Element über

$$T^{f,i} = \langle \chi_-^f | W' | \psi_+^i \rangle + \langle \chi_+^f | V - W' | \phi^i \rangle
 \tag{7.34}$$

berechnen lässt. Dabei ist der zweite Term in den meisten Fällen sehr gering und kann vernachlässigt werden. Ausgehend von Gleichung 7.34 gibt es nun verschiedenste theoretische Ansätze, die sich vor allem in der Aufspaltung der Potentiale und damit durch die Wahl der gestörten Zustände  $|\chi_{\pm}\rangle$  unterscheiden. Dabei können einerseits die  $|\chi_{\pm}\rangle$  festgesetzt werden und so das Potential  $U$  bestimmt werden, oder das Potential wird zuerst gewählt und daraus die gestörten Zustände berechnet.

Eine häufig verwendete Methode ist dabei die CDW-Näherung (aus dem Englischen, continuum distorted wave), die auf Arbeiten von Belkić [185] zurückgeht. Hierbei wird  $|\chi_{\pm}\rangle$  folgendermaßen durch die ungestörten Zustände des Elektrons  $|\phi^{i,f}\rangle$  ausgedrückt:

$$|\chi_{\pm,CDW}^{i,f}\rangle = |\phi^{i,f}\rangle |CW\rangle
 \tag{7.35}$$

Die Coulombwelle  $|CW\rangle$  stellt dabei die Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron dar und verzerrt dessen ungestörte Zustände vor und nach dem Stoß. Es zeigte sich jedoch, dass die CDW-Näherung gerade in Ionisationsexperimenten deutliche Diskrepanzen zu den experimentell ermittelten Werten zeigte, die teilweise deutlich größer ausfielen als durch eine Bornsche Näherung. Als Grund wurden Normierungsprobleme der Zustände  $|\chi_{\pm}\rangle$ , vor allem des Anfangszustandes, ausgemacht [186].

Eine Erweiterung dieses Ansatzes wurde 1983 von Crothers et al. [187] vorgeschlagen, in welcher der Endzustand zwar unverändert übernommen wird, im Anfangszustand jedoch die Coulombwelle durch eine Eikonalphase  $|EP\rangle$  (siehe etwa [30])

ersetzt wird, die sogenannte CDW-EIS-Näherung. Gleichung 7.35 ändert sich damit zu

$$\begin{aligned} |\chi_{-,CDW}^f\rangle &= |\phi^f\rangle |CW\rangle \\ |\chi_{+,CDW}^i\rangle &= |\phi^i\rangle |EP\rangle . \end{aligned} \quad (7.36)$$

Die Eikonalphase beschreibt dabei auch die Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron und unterliegt denselben Randbedingungen, ist aber normierbar. Um Streuquerschnitte mit Hilfe der CDW-EIS Theorie zu berechnen, werden auch hier Näherungen wie etwa ein effektives Targetpotential mit nur einem aktiven Elektron verwendet.

### Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkungen

In der CDW-EIS Theorie werden prinzipiell weiterhin Wechselwirkungen zwischen dem Projektil und dem Targetkern ignoriert, die vor allem bei größeren Störungen signifikante Auswirkungen auf die differentiellen Wirkungsquerschnitte haben können. Um diese zu berücksichtigen, können die Zustände  $|\chi_{\pm}\rangle$  durch sogenannte „Ansatz-Wellenfunktion“ [188] genähert werden. Hierbei wird der jeweilige Zustand durch ein Produkt aus drei Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen ausgedrückt, die jeweils den Wechselwirkungen zwischen ionisiertem Elektron und Targettrumpf, dem auslaufenden Projektil mit dem Targettrumpf, und dem Projektil und dem ionisierten Elektron darstellen. Das Drei-Körper-Problem wird somit auf drei Zwei-Körper-Probleme reduziert. Da hier PCI-Effekte explizit berücksichtigt werden, verbessert dieser Ansatz die Berechnung der Wirkungsquerschnitte meist sichtbar.

Dieses Prinzip wird etwa in der 3DW-EIS-Theorie [52, 64] (aus dem Englischen, three distorted wave- eikonal initial state) angewandt, einer Erweiterung des Standard CDW-EIS-Prinzips. Der Teil der Wellenfunktion, der dabei der Kern-Kern-Wechselwirkung entspricht, wird dabei durch eine Coulombwelle beziehungsweise eine Eikonalphase beschrieben.

Auf derselben Methode baut auch die in dieser Arbeit häufig zum Vergleich der experimentell ermittelten Ergebnisse verwendete CDW-EIS-NN Theorie auf, in der die Kern-Kern Wechselwirkung im Vergleich zur CDW-EIS Theorie explizit berücksichtigt wird [15].

## 7.3. Nicht-perturbative Methoden

Die störungstheoretische Ermittlung der Zustände  $|\psi\rangle$  ist nur für genügend kleine Störungsparameter  $\eta$  möglich, da ansonsten die Reihenentwicklung nicht oder nur

langsam konvergiert. Durch die Methode der gestörten Zustände lässt sich dies zwar teilweise umgehen, aber auch hier müssen bei hohen Störungen mehrere Glieder der Störungsreihe aufwendig berechnet werden. Um dies zu vermeiden, können alternativ nicht-perturbative, numerische Methoden wie die „exterior complex scaling“-Methode, (ECS, siehe hierzu [4, 189]) oder Rechnungen mit gekoppelten Kanälen zur Berechnung von  $|\psi\rangle$  angewandt werden.

Bei dieser Methode wird die zeitunabhängige Schrödingergleichung numerisch gelöst, indem eine Basisentwicklung des Zustandes  $\Psi(\vec{r}, \vec{r}_e, t)$  durchgeführt wird. Der Zustand des Gesamtsystems ist demnach eine Superposition aller ungestörten Zustände des Targetelektrons

$$\Psi(\vec{r}, \vec{r}_e, t) = \sum_n \int f_n(t) \cdot \varphi_n(\vec{r}, \vec{r}_e), \quad (7.37)$$

wobei  $\vec{r}$  und  $\vec{r}_e$  den Abstand von Projektil und Atomkern sowie des Elektrons vom (zeitabhängigen) Schwerpunkt des Systems angeben. Der über Gleichung 7.37 bestimmte Zustand des Systems wird dabei umso genauer, je mehr Basiszustände (oder Kanäle) hierfür verwendet werden. Aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ergibt sich nun die gekoppelte-Kanal-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} f_m = \sum_n \int \left\langle \varphi_m \left| H - i \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_n \right\rangle f_n(t). \quad (7.38)$$

Es muss dabei über die diskreten, gebundenen Zustände summiert und über die Kontinuumszustände integriert werden. Bei der numerischen Lösung dieser Gleichung führen die unendlichen Kontinuumszustände, die hauptsächlich in Ionisationsprozessen von Bedeutung sind, dabei zu Problemen. Aus diesem Grund wurden die Methode der gekoppelten Kanäle ursprünglich hauptsächlich auf Anregungsprozesse angewandt, in denen Kontinuumszustände vernachlässigt werden können. Durch die Verwendung von diskreten Pseudozuständen kann aber auch das Kontinuum berücksichtigt und die gekoppelte Kanal-Rechnungen auf die Ionisation angewandt werden.

Ein Beispiel dieser Methode ist die „convergent close coupling“ (CCC) -Näherung, in der die Zustände  $|\varphi_n\rangle$  durch eine Laguerre-Basis ausgedrückt werden und das Kontinuum durch diskrete Pseudozustände aufgespannt wird. Die Qualität der so berechneten Wirkungsquerschnitte kann nun von der Anzahl der verwendeten Pseudozustände abhängen und liefert nur dann ein aussagekräftiges Ergebnis, solange die Näherung konvergiert. Dies kann durch eine Berechnung mit mehr Kanalfunktionen überprüft werden.

Eine prinzipiell ähnliche Methode stellte McGovern et al. 2009 in ihrer „impact parameter coupled pseudostate approximation“(CP)-Theorie [190, 191] vor. Auch hier werden gekoppelte Gleichungen gelöst, die sich aus der Schrödingergleichung und der Entwicklung der Eigenzustände nach den gebundenen und, im Kontinuum

diskretisierten, Pseudozuständen ergeben. Obwohl in dieser Näherung das Projektil klassisch, d.h. im Stoßparameterbild, beschrieben wird, ist es auch hier möglich, die Projektilstreuung zu berechnen und damit vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte zu extrahieren.

Dies wird etwa in [68] angewandt, um die Elektronenemission verschiedener Helium-Stoßsysteme zu berechnen. Ein Vergleich mit Wirkungsquerschnitten, welche über die Bornsche Näherung oder mit dem 3DW-EIS-Modell berechnet wurden, zeigte eine gute Übereinstimmung dieser völlig unterschiedlichen Methoden, sofern die CP-Berechnung konvergierte [68, 69].

Auch der sogenannte „time dependent close-coupling approach“ (TDCC, [70, 78, 79, 192]) konnte die in [13] gemessenen Ergebnisse der Stoßionisation von Helium erstaunlich gut reproduzieren, da sich hier ein Mehr-Elektronensystem explizit berücksichtigen lässt. In der TDCC-Methode wird, anders als in den meisten nicht-perturbativen Streutheorien, die zeitabhängige (diskretisierte) Schrödingergleichung gelöst [193]. Hierdurch wird das Problem, geeignete Randbedingungen für die Bewegung mehrerer Teilchen in einem Coulombfeld zu finden, umgangen und Prozesse, die mehrere Elektronen involvieren, können detailliert berücksichtigt werden.

## **Teil V.**

# **Einfachionisation von Lithium durch geladene Projektile**



# Einfachionisation von Lithium durch geladene Projektile

Gerade mit Blick auf die in Kapitel 1 beschriebenen, noch nicht geklärten Diskrepanzen der stoßinduzierten Ionisationsquerschnitte für das Helium-Target, ist es von Interesse, Einflüsse, die auf die elektronische Struktur des Targetatoms zurückzuführen sind, genauer zu untersuchen. In den meisten theoretischen Modellen wird das Target als ein effektives Ein-Elektronen-System behandelt, in dem das zweite Elektron des Heliums nur bezüglich seiner abschirmenden Wirkung (z.B. im Rahmen eines Hartree-Fock-Ansatzes [178]) berücksichtigt wird. Dabei werden potentielle Einflüsse der Elektronenkorrelation auf die Dynamik der Reaktion vernachlässigt.

Die Verwendung eines Lithium-Targets bietet die einmalige Möglichkeit, die Stoßdynamik in einem zu Helium sehr verschiedenen elektronischen System zu untersuchen. Lithium besitzt im Grundzustand ein einzelnes Valenzelektron in der (2s)-Schale, dessen Wechselwirkung mit den beiden Elektronen des (1s)-Zustandes deutlich geringer ausfällt als dies zwischen Elektronen derselben Schale der Fall ist. Eine dem Helium ähnlich starke Korrelation kann jedoch für die beiden Elektronen der K-Schale angenommen werden. Es ist daher sehr aufschlussreich, die unterschiedlichen Wirkungsquerschnitte für eine Ionisation aus beiden Schalen zu untersuchen. In den folgenden Kapiteln werden daher kinematisch vollständige Untersuchungen zur Stoßionisation an einem Lithium-Target vorgestellt, die nicht nur einen bisher unerreichten Einblick in die zustands-selektive Ionisation ermöglichen, sondern bei denen auch eine vormals nicht übertroffene Auflösung realisiert werden konnte. Dabei werden Ergebnisse präsentiert, die sich ebenfalls in den Veröffentlichungen [77, 194, 195] finden lassen.





## 8. Reaktionskanäle der Einfachionisation von Lithium

Die unterschiedlichen Ionisationspotentiale der Elektronen in den verschiedenen Schalen des Lithiums erlauben es, Ionisationsprozesse aus diesen beiden Zuständen zu separieren. Das Ionisationspotential entspricht dem in Kapitel 6.1 definierten  $Q$ -Wert, der aufgrund der Energie- und Impulserhaltung mit

$$Q = q_{\parallel} \cdot v_P - E_e \quad (8.1)$$

angegeben werden kann. Dabei ist  $v_P$  die Geschwindigkeit des Projektils,  $E_e$  die kinetische Energie des Elektrons und  $q_{\parallel}$  der longitudinale Impulsübertrag.  $Q$  beschreibt damit die „Inelastizität“ des Stoßes, da er den Verlust an kinetischer Energie des Systems ausdrückt. In Abbildung 8.1 in der unteren Graphik ist die Anzahl der gemessenen Ereignisse über ebendiesem  $Q$ -Wert aufgetragen. Es treten zwei gut getrennte Maxima bei  $-65$  eV und  $-5.4$  eV auf, die den Ionisationspotentialen der beiden  $n = 1, 2$ -Schalen entsprechen. Es ist also möglich, anhand der unterschiedlichen  $Q$ -Werte die Ionisation eines Innerschalen- und eines Valenzelektrons zu unterscheiden. Aufgrund des niedrigeren Ionisationspotentials ist der Ionisationsquerschnitt aus dem (2s)-Zustand erheblich höher als die Ionisation aus der K-Schale.

Der Wirkungsquerschnitt der Ionisation ist in Abbildung 8.1 ebenfalls als Funktion des  $Q$ -Wertes und des Projektilstreuwinkels  $\theta_P$  dargestellt, wie in der oberen Graphik zu sehen ist. Die Richtungsänderung  $\theta_P$  des Projektils ist im Allgemeinen gering und wird aus diesem Grund nicht direkt gemessen, sondern aus dem Impulsübertrag der Reaktion über

$$\theta_P \approx q_{\perp} / p_P^i \quad (8.2)$$

bestimmt (siehe hierzu Kapitel 6.1). Dabei stellt  $q_{\perp} = p_{R,\perp} + p_{e,\perp}$  den transversalen Impulsübertrag und  $p_P^i$  den ursprünglichen Projektilimpuls dar. Da die relative Impulsänderung der zuvor ruhenden Targetfragmente deutlich größer als die relative Änderung der Projekttilflugbahn ist, lassen sich somit Abweichungen von unter einem Grad auflösen. Die Breite der in Abb. 8.1 dargestellten Wirkungsquerschnitte ist somit nicht durch die Auflösung gegeben, sondern auf die intrinsische quantenmechanische Impulsverteilung zurückzuführen.

Um die Unterschiede zwischen der (1s)- und (2s)-Ionisation zu untersuchen, wurden die einfach differentiellen Wirkungsquerschnitte  $d\sigma/dE_e$  der beiden Reaktions-

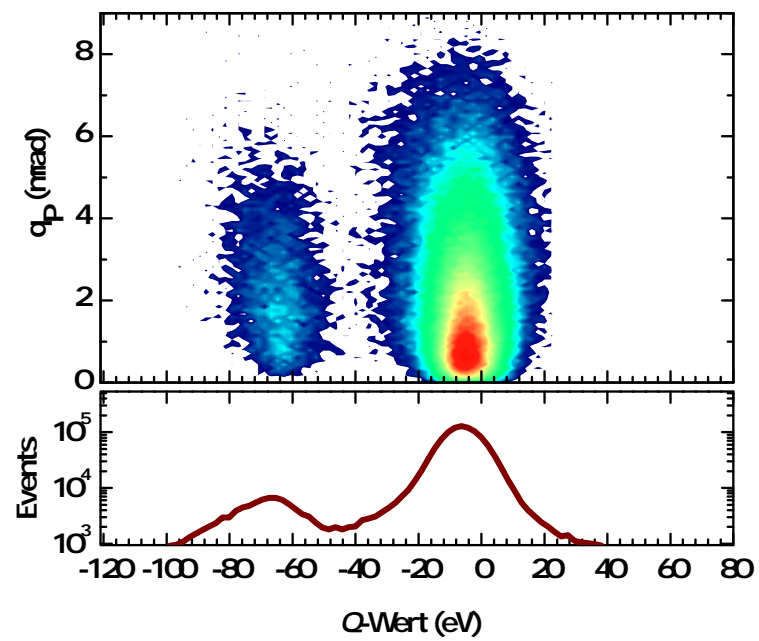


Abbildung 8.1.: Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation von  $1.5 \text{ MeV/u O}^{8+} + \text{Li}$  als Funktion des  $Q$ -Wertes und des Projektilstreuwinkels.

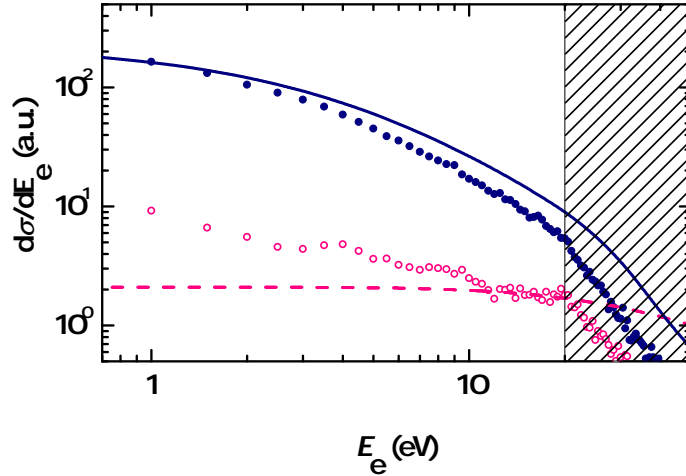


Abbildung 8.2.: Experimentell und mit Hilfe der CDW-EIS-Theorie berechnete einfach differenzielle Wirkungsquerschnitte  $d\sigma/dE_e$  für Ionisationen aus dem (2s)- (in dunkelblau bzw. durch geschlossene Kreise dargestellt) und (1s)- (in magenta, offene Kreise, dargestellt) Zustand.

kanäle über der kinetischen Energie der Elektronen in einem doppelt logarithmischen Diagramm aufgetragen (siehe Abbildung 8.2). Ionisationen aus der Valenzschale sind dabei in blau dargestellt, während Ereignisse, deren  $Q$ -Wert bei  $-65$  eV lag, magentafarben abgebildet sind. Eine theoretische Berechnung der Wirkungsquerschnitte, die auf der CDW-EIS-Theorie (siehe [15] sowie Kapitel 7.2 dieser Arbeit) beruht, ist ebenfalls für Ionisation aus dem (1s)- (gestrichelte Linie) und (2s)- (durchgezogene Linie) Zustand eingezeichnet. Das verwendete theoretische Modell beruht auf einer störungstheoretischen Beschreibung des Systems und wird in Kapitel 7.2 vorgestellt. Dabei wird ein Ein-Elektronen-Hartree-Fock-Zustand des Targets verwendet [178].

In Experimenten mit Reaktionsmikroskopen ist es nicht möglich, totale Wirkungsquerschnitte zu messen, da spezifische experimentelle Eigenschaften wie Targetdichte, Projektilstrom und Detektoreffizienz in aller Regel nicht mit ausreichender Genauigkeit bekannt sind. Aus diesem Grund werden die experimentellen Daten mit einem im Prinzip frei wählbaren Faktor auf die theoretischen Kurven normiert. In den hier gezeigten Graphen wurde die Normierung anhand des Wirkungsquerschnittes für die (2s)-Ionisation bei der Elektronenenergie  $E_e = 0$  eV vorgenommen.

Die hier untersuchten Wirkungsquerschnitte liegen im Bereich  $E_e < 20$  eV. Der

bei beiden Messkurven zu beobachtende schnellere Abfall der Wirkungsquerschnitte bei größeren Energien  $E_e > 20$  eV liegt an der beschränkten transversalen Impuls-Akzeptanz des Spektrometers. Bei hohen Energien werden nicht mehr alle Ereignisse auf dem Detektor abgebildet und der Wirkungsquerschnitt zeigt einen schnelleren Abfall. Dieser Bereich ist in Graphik 8.2 schraffiert dargestellt. Für Elektronen, die entgegengesetzt zur Extraktionsrichtung emittiert werden, ist dieser Akzeptanzbereich noch weiter eingeschränkt und liegt bei  $E_e > 9$  eV. Die Störung des hier betrachteten Systems ist mit  $\eta = 1.03$  jedoch so groß, dass die Emission der Elektronen in die rückwärtige Richtung aufgrund der PCI (siehe Kapitel 6.2) stark unterdrückt wird und hier vernachlässigt werden kann.

Ein Vergleich der experimentellen Daten mit der Theorie zur Ionisation aus der Valenzschale ergibt eine quantitativ relativ gute Übereinstimmung der beiden Kurven. Es fällt allerdings auf, dass auch bei Elektronenenergien  $E_e < 20$  eV die gemessenen Wirkungsquerschnitte mit zunehmender Elektronenenergie leicht schneller abfallen als dies von der Theorie vorausgesagt wird. Ein möglicher Grund hierfür liegt in der Extraktion der Energien aus den gemessenen Flugzeitspektren. Hierbei treten Singularitäten (an den Positionen der sogenannten „Wiggles“, siehe Kapitel 3.4) in den ermittelten Spektren auf, an denen eine korrekte Impulsbestimmung nicht möglich ist. Diese Abschnitte werden aus den ermittelten Daten vor der Impulsrekonstruktion herausgenommen. Da der Einfluss dieser Abschnitte mit zunehmender Elektronenenergie ansteigt, ist dies ein möglicher Grund für den subjektiv schnelleren Abfall der experimentellen Wirkungsquerschnitte.

Die theoretischen und experimentellen Ergebnisse der (1s)-Ionisation (in Abb. 8.2 magenta dargestellt) zeigen jedoch deutliche Diskrepanzen vor allem bei kleinen Elektronenenergien, wobei der experimentelle Wirkungsquerschnitt deutlich höher liegt. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass eine Messung der Targetfragmente keine Aussage über den Ablauf der Reaktion erlaubt, sondern nur über den Endzustand selbst. Die in Abbildung 8.2 in magenta dargestellten Ereignisse können daher Reaktionen zugeordnet werden, deren Rückstoßionen sich in einem angeregten  $\text{Li}^{1+}$ -Zustand befinden und deren Änderung der Bindungsenergie  $-65$  eV entspricht. Es gibt jedoch prinzipiell zwei Prozesse, die zu diesem Endzustand führen können: Der einfachste Prozess ist die direkte Ionisation eines Innerschalen-Elektrons durch die Wechselwirkung mit dem Projektil. Das Valenzelektron nimmt in diesem Fall die Rolle eines unbeteiligten Zuschauers ein und beeinflusst den ermittelten Wirkungsquerschnitt nicht direkt (siehe auch [196]). Dieser Prozess ist in Abbildung 8.3 (a) schematisch dargestellt und wird auch in dem hier verwendeten theoretischen Modell berücksichtigt.

Ein weiterer Reaktionskanal ist die Anregung eines K-Schalen-Elektrons in ein höheres Niveau. Durch die hierbei auftretenden kleinen Stoßparameter (das heißt nahe Stöße) ist diese Anregung häufig begleitet von einer simultanen Einfachionisation und trägt zu dem hier betrachteten Wirkungsquerschnitt bei. Dieser Prozess

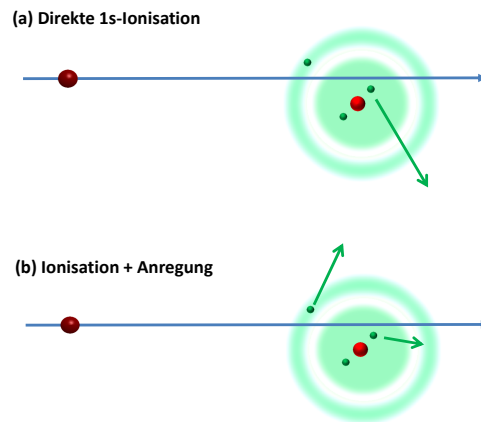


Abbildung 8.3.: Schematische Darstellung möglicher Reaktionskanäle, die zu einem angeregten  $\text{Li}^+$ -Endzustand führen.

ist in Abbildung 8.3 (b) dargestellt und wird in der CDW-EIS-Theorie nicht berücksichtigt. Aufgrund der beobachteten Diskrepanzen liegt die Vermutung nahe, dass dieser Prozess der simultanen Anregung und Ionisation die Elektronenemission bei kleinen Energien dominiert.

Dieser Effekt wurde bereits 1999 mit Hilfe der Elektronen-Spektroskopie beobachtet [197], indem die Entleerung der K-Schale des Lithium-Atoms durch  $95 \text{ MeV/u Ar}^{18+}$ -Ionen untersucht wurde. Dabei blieb das Targetatom in einem angeregten  $\text{Li}^+$ -Zustand zurück. Auch hier konnte eine gleichzeitige Anregung und Ionisation des Targets als der dominante Beitrag des Prozesses bestimmt werden. Unabhängig von diesem spezifischen Stoßsystem wurde die Ionisation und Anregung auch in Stoßreaktionen von Elektronen mit einem Helium-Target beobachtet [198, 199] und durch entsprechende Theorien [200, 201] bestätigt. In einem Helium-Atom befinden sich beide Elektronen in derselben Schale und der Prozess der simultanen Ionisation und Anregung ist daher deutlich durch die Korrelation der beiden Elektronen geprägt. In der hier untersuchten Reaktion kann aber vermutet werden, dass der Wirkungsquerschnitt der Einfachionisation bei kleinen Elektronenenergien durch zwei voneinander unabhängige Wechselwirkungen des Projektils mit dem Targetsystem dominiert wird, da einerseits die Korrelation der Elektronen im Lithium erheblich schwächer ist als für Helium, und andererseits die Störung in dem untersuchten Stoßsystem so groß ist, dass Beiträge höherer Ordnung erheblich mehr beitragen.

Dies eröffnet einige interessante Einsichten in die Dynamik von Elektronen-Emissions-Prozessen: Bei der Untersuchung der Ionisation eines Valenzelektrons limitiert der Anregungsprozess diese Reaktion auf kleine Stoßparameter, beeinflusst aber da-

von abgesehen den Wirkungsquerschnitt der Stoßionisation in erster Näherung nicht weiter. Es ist daher möglich, aus der Emissionscharakteristik der Elektronen eine Aussage über die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes von der Größe des Stoßparameters zu machen, eine dem Experiment nicht explizit zugängliche Messgröße.

Zudem ist es über diesen Reaktionskanal möglich, die Anregung eines Elektrons in einem Reaktionsmikroskop detailliert zu untersuchen, indem die Emission des schwächer gebundenen Elektrons als eine Art „Marker“ für diesen Prozess verwendet wird. Bislang waren differentielle Streuquerschnitte für Anregungsprozesse durch geladene Projektile nur für sehr geringe Projektilenergien möglich, da die Änderung des Projektilimpulses ohne die Messung der Targetfragmente nur schwer möglich ist [11].

## 9. Stoßdynamik der 1s, 2s und 2p-Ionisation

Mehrfach differentielle Wirkungsquerschnitte erlauben es, die Dynamik des Systems in Hinblick auf verschiedenste Parameter zu untersuchen. In diesem Kapitel werden doppelt differentielle Wirkungsquerschnitte (DDCS) der Ionisation von Lithium als Funktion der Elektronenenergie und des transversalen Impulsübertrags vorgestellt. Dabei ist es nicht nur möglich, zwischen Prozessen aus unterschiedlichen Elektronenschalen zu unterscheiden (wie dies im vorangegangenen Kapitel gezeigt wurde), sondern sogar Prozesse unterschiedlicher Bahndrehimpulse aufzulösen. Es zeigt sich eine deutliche Zustandsabhängigkeit der beobachteten Wirkungsquerschnitte, die auch in theoretischen Modellen wiedergefunden wird.

Um die Abhängigkeit der Dynamik von der Störung des Systems zu untersuchen, wurden hierbei neben der Ionisation durch 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Ionen zusätzlich 6 MeV Protonen als Projektil verwendet, was Störungsparametern von  $\eta = 1.03$  ( $O^{8+}$ ) bzw.  $\eta = 0.06$  ( $p^+$ ) entspricht.

Ein Lithium-Atom im Grundzustand hat die Elektronenkonfiguration  $Li(1s^2 2s)$ . Da sich die Atome in der magneto-optischen Falle in einem Laserfeld befinden, welches den Übergang des Valenzelektrons in den  $Li(1s^2 2p)$  Zustand induziert, befindet sich zu jedem Zeitpunkt ein Teil der Atome in dem angeregten (2p)-Zustand. Während jedoch Ionisationsprozesse aus verschiedenen n-Zuständen durch einen deutlich anderen  $Q$ -Wert unterschieden werden können, beträgt die Differenz des Ionisationspotentials zwischen dem  $Li(2s)$ - und  $Li(2p)$ -Zustand 1.9 eV und kann in unserem Experiment nicht aufgelöst werden. Um diese Zustände zu trennen, muss daher ein anderer Weg beschritten werden.

Wie bereits in Kapitel 4.5 berichtet, wird im Verlauf einer Messung das Magnetfeld der Atomfalle periodisch geschaltet. Der zur Anregung der Atome notwendige Laser wird im Allgemeinen nicht ausgeschaltet, um eine bessere Wiedereinfangrate der Atome zu gewährleisten. Um eine Auflösung der beiden Unterzustände des Lithiums zu ermöglichen, wird der Kühlstrahl jedoch während der Datenaufnahme für 200  $\mu s$  ausgeschaltet. Aufgrund der sehr kurzen Lebensdauer des angeregten Zustandes von 27 ns befinden sich in dieser Zeitspanne alle Atome im (2s)-Grundzustand. Vor und nach dieser „Dunkelperiode“ befindet sich eine bestimmte Anzahl  $\rho_{ee}$  der Atome im angeregten Zustand, abhängig von der Intensität und Verstimmung der Laser. Der relative Wirkungsquerschnitt der Ionisation aus dem (2p)-Zustand kann nun

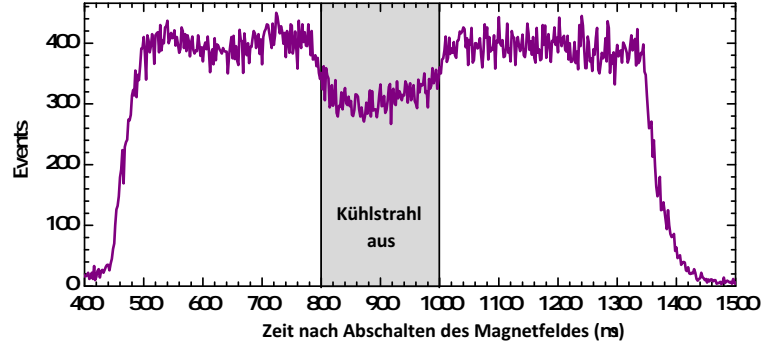


Abbildung 9.1.: Anzahl der gemessenen Ereignisse aufgetragen als Funktion der Zeit nach Abschalten des MOT-Magnetfeldes. Zum Zeitpunkt  $t = 800 \mu\text{s}$  wurde der Kühllaser für  $200 \mu\text{s}$  ausgeschaltet und es befinden sich alle Atome im Grundzustand (grau hinterlegte Zeitspanne). Aufgrund des geringeren Wirkungsquerschnitts der (2s)- im Vergleich zur (2p)-Ionisation sinkt die Rate in dieser Zeitspanne sichtbar ab. Die Abweichung der Verteilung vom theoretischen Stufenverlauf ist vor allem auf die recht lange Totzeit des Datenaufnahmesystems (etwa  $150 \mu\text{s}$ ) und die in dieser Messreihe hohe Koinzidenzrate zurückzuführen.

über die Differenz der Anzahl der Events während einer „hellen“ Phase ( $N_{an}$ ) und der Anzahl der beobachteten Ereignisse während der Dunkelphase ( $N_{aus}$ ) bestimmt werden,

$$N_{2p} = \frac{1}{\rho_{ee}} [N_{an} - (1 - \rho_{ee})N_{aus}] \quad (9.1)$$

wobei  $N_{2p}$  die Anzahl der Atome im (2p)-Zustand ist.

Aus der Änderung der Rate während der Phasen mit und ohne Laserlicht (siehe Abbildung 9.1), sowie unter Berücksichtigung der theoretischen Wirkungsquerschnitte für beide Zustände, konnte der Anteil  $\rho_{ee}$  der Atome im angeregten (2p)-Zustand mit etwa  $20 \pm 5\%$  bestimmt werden. In Kapitel 4.1 wird eine Abschätzung der Besetzungswahrscheinlichkeit eines angeregten Zustandes über

$$\rho_{ee} = \frac{s_0/2}{1 + s_0 + (2\delta/\gamma)^2}, \quad (9.2)$$

definiert, wobei  $s_0 = I/I_s$  die Intensität des Kühllasers im Verhältnis zur Sättigungsintensität ist,  $\delta$  die Rotverschiebung der Laser und  $\gamma$  die inverse Lebensdauer des Systems definiert. Mit den während dieser Messzeit verwendeten Werten (siehe



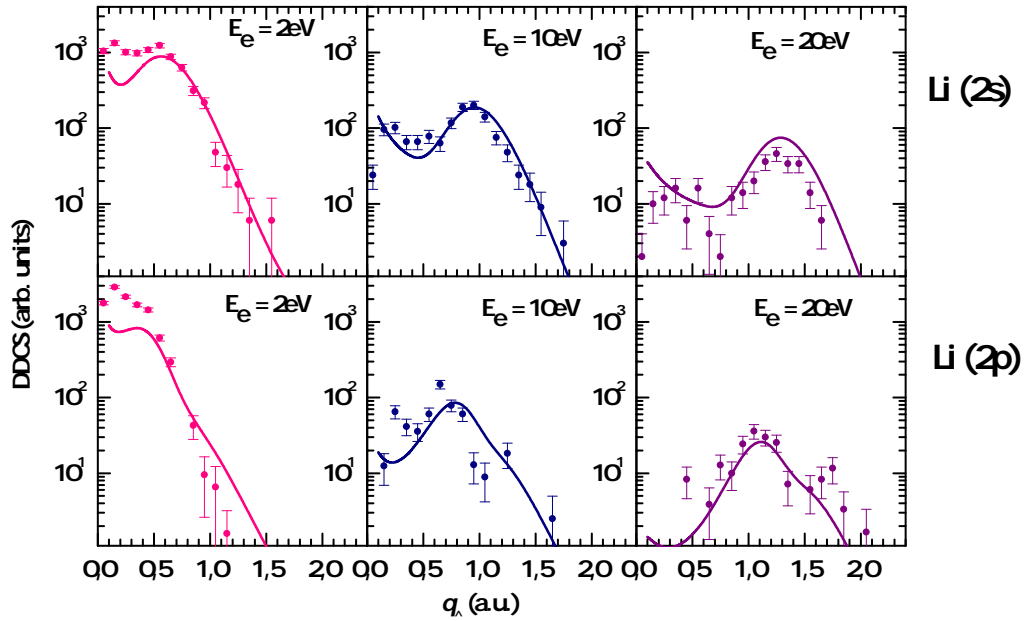


Abbildung 9.2.: DDCS für die Einfachionisation von Li(2s) (obere Reihe) und Li(2p) (untere Reihe) durch 6 MeV  $p^+$ -Projektile als Funktion des transversalem Impulsübertrags  $q_{\perp}$  für verschiedene Elektronenenergien  $E_e$ . Zum Vergleich sind theoretische Kurven (durchgehende Linien) der CDW-EIS Theorie eingezeichnet.

hierzu Tabelle 4.3) ergibt sich eine Besetzung von 19% des (2p)-Zustandes und bestätigt die oben genannte Abschätzung hervorragend.

In Abbildung 9.2 sind die doppelt differentiellen Wirkungsquerschnitte für die Reaktion  $6 \text{ MeV } p^+ + \text{Li}$  als Funktion des transversalen Impulsübertrags  $q_{\perp}$  dargestellt. Dabei werden die Ionisationen aus dem (2s)-Grundzustand und dem (2p)-angeregten Zustand für Elektronenenergien von jeweils 2 eV, 10 eV und 20 eV verglichen. Zusätzlich sind in Abb. 9.2 die mit Hilfe der CDW-EIS-Theorie berechneten Wirkungsquerschnitte eingetragen. Für die sehr kleine Störung dieses Systems von  $\eta = 0.06$  ergibt eine Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung im theoretischen Modell in dem hier gezeigten Impulsbereich keine sichtbare Abweichung und ist daher nicht eingezeichnet. Eine Normalisierung der experimentellen Daten wurde für die Ionisation des (2s)-Zustandes bei  $q_{\perp} = 0.65 \text{ a.u.}$  und  $E_e = 2 \text{ eV}$  vorgenommen und für alle weiteren Wirkungsquerschnitte übernommen.

Aufgrund der geringen Störung des Systems bietet diese Reaktion eine gute Möglichkeit, Messungen an einem Lithium-Target mit Untersuchungen anderer Targetsysteme zu vergleichen (siehe etwa [13, 46]). Mit Ausnahme der Daten für 2 eV lässt

sich in Abbildung 9.2 ein ausgeprägtes Maximum bei mittleren Impulsüberträgen beobachten. Dieser sogenannte „Bethe-Grad“ liegt etwa in dem Bereich, in dem der Impuls des Elektrons  $\sqrt{2E_e}$  dem Impulsübertrag des Gesamtsystems entspricht und wird deshalb als die Signatur von binären Stößen zwischen Projektil und Targetelektron gedeutet. Der Einfluss dieses Zwei-Körper-Prozesses auf den Wirkungsquerschnitt wurde bereits in [196] beobachtet.

In den hier vorgestellten Daten lässt sich generell eine relativ gute Übereinstimmung der Messwerte mit den durch das CDW-EIS-Modell berechneten Wirkungsquerschnitten feststellen, sowohl für Ionisation aus dem (2s)- als auch aus dem (2p)-Zustand. Allein die Daten für sehr kleine Impulsüberträge ( $q_{\perp} < 0.5$  a.u.) und bei geringen Elektronenenergien weichen etwas von den theoretischen Kurven ab. Da die Messwerte gut den theoretisch ermittelten Querschnitten der (2p)-Ionisation entsprechen, bestätigt dies die Extraktion dieser Daten aus den gesamten Messdaten durch die oben vorgestellte Subtraktion.

Vergleicht man die gewonnenen Daten der Ionisationen aus beiden Unterschalen, lässt sich ein Einfluss des Anfangszustandes auf die ermittelten Wirkungsquerschnitte gut erkennen, der sich sowohl auf die Größe als auch auf die Form des Querschnitts auswirkt. Die Lage des Maximums der DDCS ist etwa für die Ionisation aus dem (2p)-Zustand zu leicht kleineren Impulsüberträgen verschoben. Dieser Einfluss des Anfangszustands wird auch von der Theorie wiedergegeben, so weichen etwa die Wirkungsquerschnitte der beiden Zustände für kleine Impulsüberträge bei einer Energie von 20 eV deutlich voneinander ab, im Falle der (2p)-Ionisation werden hier um den Faktor 10 kleinere DDCS vorhergesagt als dies für die Ionisation aus dem Grundzustand der Fall ist. Experimentell bestätigt sich dies und für Impulsüberträge kleiner als  $q_{\perp} < 0.5$  a.u. konnten aufgrund der geringen Wirkungsquerschnitte keine Daten mehr registriert werden.

In Abbildung 9.3 sind DDCS für die Stoßionisation von Lithium durch 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Projektilen als Funktion des Impulsübertrags dargestellt. Die experimentellen und theoretischen Streuquerschnitte wurden wiederum für die Ionisation des (2s)-Zustandes bei  $q_{\perp} = 0.65$  a.u. und  $E_e = 2$  eV aufeinander normiert.

Aufgrund der deutlich höheren Störung dieses Systems von  $\eta = 1.03$  unterscheiden sich die Ergebnisse verschiedener theoretischer Modelle erheblich. Beim CDW-EIS-NN-Modell wird die Kern-Kern-Wechselwirkung explizit quantenmechanisch berücksichtigt [15]. Beim CDW-EIS-CLNN-Modell hingegen wird diese Wechselwirkung des Projektils mit dem Targetatom mit Hilfe der klassischen Streutheorie durch eine Faltung berücksichtigt. Dieses Modell wird etwa in [67] vorgestellt. Wie bereits in Kapitel 1 berichtet, führt diese quantenmechanisch nicht korrekte Betrachtung des Stoßsystems im Allgemeinen zu einer besseren Übereinstimmung der so ermittelten differentiellen Wirkungsquerschnitte mit experimentellen Daten für die Stoßionisation von Helium. Dieses prinzipiell überraschende Ergebnis wurde durch den Einfluss der endlichen Kohärenzlänge des Projektils durch Egodapitiya et al. in [81] auf die

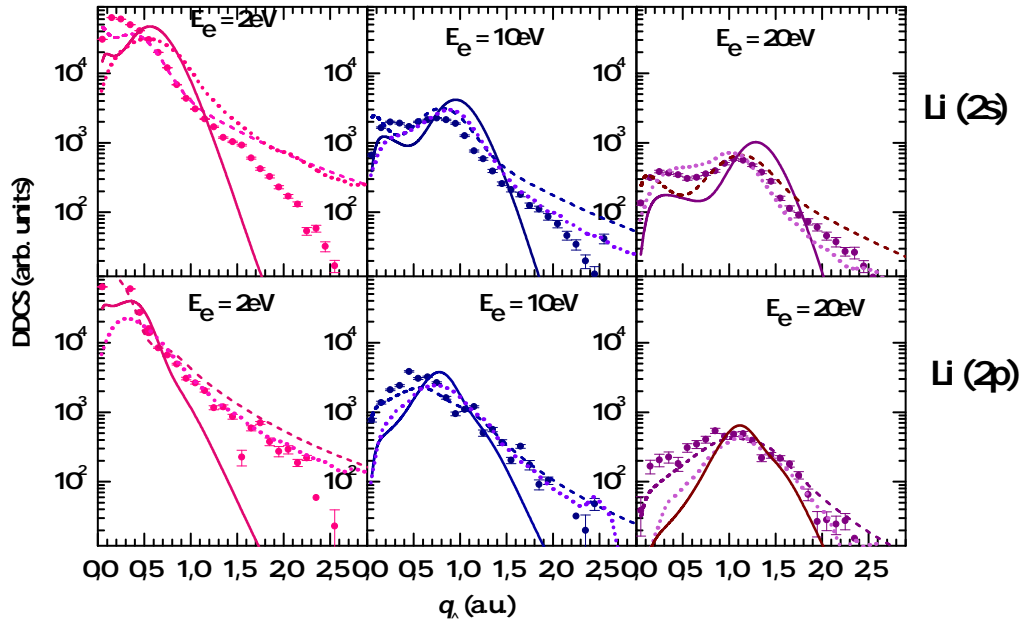


Abbildung 9.3.: DDCS für Einfachionisation von Li(2s) (obere Reihe) und Li(2p) (untere Reihe) durch 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Projektile als Funktion des transversalem Impulsübertrags für verschiedene Elektronenenergien. Durchgezogene Linie: CDW-EIS; gestrichelte Linie: CDW-EIS-NN; gepunktete Linie: CDW-EIS-CLNN.

ermittelten Wirkungsquerschnitte begründet. Je nach Kohärenzlänge des Projektiles eignen sich vollständig quantenmechanische oder klassische Betrachtungen dieser Kern-Kern-Wechselwirkung zur Reproduktion der Wirkungsquerschnitte.

Im Gegensatz zu dem System mit kleinerer Störung scheint die CDW-EIS-Theorie hier generell keine gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Daten zu erreichen. Das durch die effektiven Zwei-Körper-Stöße hervorgerufene Maximum ist zwar weiterhin zu sehen, ist aber deutlich schwächer ausgeprägt als dies in Abbildung 9.2 der Fall ist. Dies ist nicht überraschend, da Systeme höherer Störung die Wahrscheinlichkeit zusätzlicher Wechselwirkungen des Projektiles mit dem Target erhöhen. Diese Effekte höherer Ordnung reduzieren nun die klare Ausbildung eines Maximums. Es lassen sich jedoch auch in den Daten zur  $O^{8+}$ -Stoßionisation erkennbare Unterschiede der Anfangszustände, vor allem bei kleinen Impulsüberträgen, erkennen.

Bei der Betrachtung der (2p)-Ionisation führt die Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung innerhalb der CDW-EIS-NN-Theorie zu einer deutlichen Verbesserung der theoretischen Wirkungsquerschnitte. Dies ist insbesondere für kleine Impulsüberträge zu beobachten, bei denen im Allgemeinen ein weniger starker

Einfluss von Wechselwirkungen höherer Ordnung erwartet wird. Die halb-klassische Theorie der CWD-EIS-CLNN wiederum erreicht eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten für mittlere bis große Impulsüberträge, führt aber zu einigen Diskrepanzen für Werte von  $q_{\perp} < 0.5$  a.u.. Eine ähnliche Abhängigkeit der DDCS konnte auch beispielsweise für ein  $p^+ + H$ -Stoßsystem in [85] gefunden werden. Beide Theorien geben die experimentell ermittelten Daten für große Impulsüberträge, bei denen ein großer Einfluss der Kern-Kern-Wechselwirkung zu erwarten ist, gut wieder. Dies und die Tatsache, dass bei höheren Elektronenenergien die CWD-EIS-CLNN-Theorie die Messwerte etwas besser reproduzieren kann, legt die Vermutung nahe, dass sich die Kern-Kern-Wechselwirkung im Falle der (2p)-Ionisation klassisch verhält.

Für die Ionisation aus dem (2s)-Grundzustand fällt ein Vergleich der Theorie mit den Messwerten deutlich ernüchternder aus. Mit Ausnahme der Region um das Maximum der DDCS herum, verschwindet die Übereinstimmung der Daten weitestgehend, vor allem bei hohen Impulsüberträgen. Selbst die CWD-EIS-NN und CWD-EIS-CLNN-Theorien überschätzen die gemessenen Wirkungsquerschnitte um das bis zu Zehnfache. Ein ähnliches Phänomen wurde bereits in einem 3.6 MeV/u  $Au^{53+} + He$ -Stoßsystem in [46] beobachtet. Hierbei ist zusätzlich bemerkenswert, dass der Entwicklungsparameter der Störungsreihe der CDW-Theorie,  $\eta' = Z_p/v_p^2$ , im Falle der  $Au^{53+}$ -Projektilen 0.38 betrug und damit eine Abweichung für hohe Impulsüberträge auch auf die abnehmende Konvergenz dieser Entwicklung zurückzuführen sein könnte. In dem hier betrachteten System beträgt  $\eta' = 0.13$  und liegt daher gut innerhalb der Gültigkeit dieser Entwicklung. Es ist daher überraschend, dass die Übereinstimmung in diesem System nicht besser ist.

Im Falle des halb-klassischen CDW-EIS-CLNN Modells lassen sich große Diskrepanzen in den betrachteten Wirkungsquerschnitten vor allem bei kleinen Elektronenenergien finden. Diese reduzieren sich allerdings im Gegensatz zu dem CDW-EIS-NN Modell für steigende  $E_e$ . Bei 20 eV ist eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu finden. Für kleine Elektronenenergien scheint die Kern-Kern-Wechselwirkung in der (2s)-Ionisation aber nicht nach klassischen Gesetzmäßigkeiten zu verlaufen.

Eine Erklärung dieser Diskrepanzen zwischen verschiedenen Anfangszuständen lässt sich nur schwer finden. Zwar gibt es prinzipielle Unterschiede zwischen diesen beiden Zuständen wie etwa eine geänderte Bindungsenergie oder eine unterschiedliche Impulsverteilung der Elektronen im Anfangszustand, es fällt jedoch schwer, die beobachteten Effekte darauf zurückzuführen.

In Abbildung 9.4 sind die doppelt differentiellen Wirkungsquerschnitte für Ionisationen mit einem  $Q$ -Wert von 65 eV aufgetragen, die zu einem angeregten  $Li^+$  im Endzustand führen. Die zum Vergleich aufgezeigten theoretischen Wirkungsquerschnitte sind, wie bereits im vorangegangenen Kapitel erwähnt, für eine direkte Ionisation des (1s)-Zustandes berechnet. Es fällt auf, dass die Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung im Falle der  $O^{8+}$ -Projektilen einen deutlichen Effekt auf

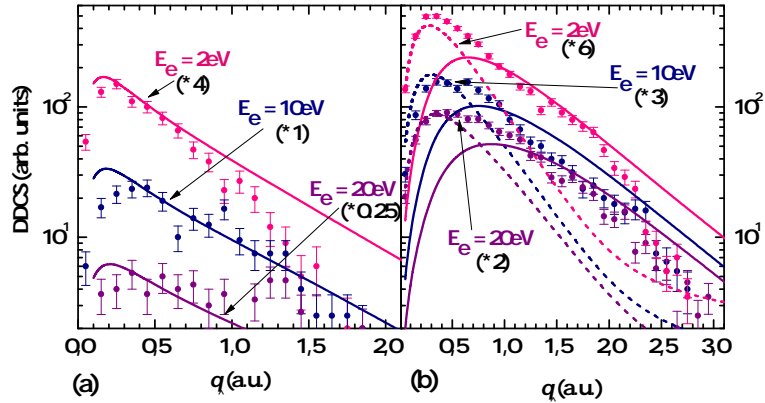


Abbildung 9.4.: DDCS eines gleichzeitigen Anregungs- und Ionisationsprozesses von Lithium durch (a) 6 MeV  $p^+$  und (b) 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Ionen für Elektronenenergien von 2 eV, 10 eV und 20 eV. Durchgezogene Linien: CDW-EIS; gestrichelte Linien: CDW-EIS-NN.

die theoretischen Wirkungsquerschnitte ausübt, der den Einfluss derselben auf die Streuquerschnitte der (2s)- und (2p)-Ionisation sogar noch übertrifft. Der Grund hierfür liegt in der Tatsache, dass die Ionisation eines Innerschalenelektrons bei deutlich geringeren Stoßparametern stattfindet und der Einfluss der Kern-Kern-Wechselwirkung deshalb ansteigt.

Zudem nimmt der theoretische Wirkungsquerschnitt für abnehmende Elektronenenergien im Verhältnis zu den experimentell ermittelten Werten unverhältnismäßig stark zu. In Abbildung 9.4 wurden verschiedene Skalierungsfaktoren auf die unterschiedlichen Elektronenenergien angewandt, der Wert des jeweiligen Faktors ist in der Graphik angegeben. Trotzdem bleiben einige qualitative Unterschiede zwischen experimentellen und theoretischen Wirkungsquerschnitten bestehen. Diese Abweichungen weisen wiederum darauf hin, dass der hier auftretende Reaktionskanal nicht allein die direkte Ionisation des Innerschalen-Elektrons ist, sondern dass eine Anregung des (1s)-Elektrons mit der simultanen Ionisation eines Valenzelektrons beiträgt. Im Allgemeinen führt eine Ionisation aus der (1s)-Schale zu durchschnittlich höheren Elektronenenergien als dies für eine Ionisation der Valenzschale der Fall ist. Es kann daher erwartet werden, dass der Beitrag der direkten (1s)-Ionisation mit zunehmender Elektronenenergie ansteigt. Dies lässt sich durch einen für größere  $E_e$  abnehmenden Skalierungsfaktor in Abbildung 9.4 nachvollziehen. Zumindest im Falle der Ionisation durch Protonen gleichen sich daher experimentelle und theoretische Wirkungsquerschnitte für Energien von 20 eV an.

Um diesen Abweichungen auf den Grund zu gehen, werden im folgenden Kapitel vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte der hier behandelten Stoßsysteme vorgestellt.



# 10. Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte: Ein detailliertes Bild der Anfangszustandsabhängigkeit

Den tiefsten Einblick in die Dynamik einer Stoßreaktion bieten vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte (FDCS), in denen die Emissionscharakteristik der ionisierten Elektronen nicht nur in Abhängigkeit der Energie und des Impulsübertrags, sondern auch in Bezug auf den Emissionswinkel untersucht wird. Die Darstellung dieser FDCS erfolgt beispielsweise über eine dreidimensionale Graphik, wie in Kapitel 6.3 vorgestellt. Dabei können die Wirkungsquerschnitte für jeweils feste Werte von  $E_e$  und  $q_{\perp}$  in Abhängigkeit des azimuthalen,  $\varphi_e$ , und polaren,  $\vartheta_e$ , Winkels dargestellt werden. Dies eröffnet die Möglichkeit, Effekte zu untersuchen, die in DDCS aufgrund der Integration über den gesamten Raumwinkel nicht sichtbar werden.

In Abbildung 10.1 (a) ist die Winkelverteilung der emittierten Elektronen für eine Stoßionisation des (2s)-Grundzustands durch 6 MeV  $p^+$ -Projektilen dargestellt. Vergleicht man diese mit typischen Emissionsspektren eines Helium-Targets (wie beispielsweise in Abbildung 6.3 dargestellt), fällt als erstes die völlige Abwesenheit des Recoil-Peaks in Richtung des negativen Impulsübertrags  $-\vec{q}$  auf. Grund hierfür ist das deutlich kleinere Ionisationspotential von Lithium von 5.4 eV (im Vergleich zu  $I_P(He) = 24.6$  eV). Die für die Ausprägung des Recoilpeaks wichtige Wechselwirkung zwischen dem Elektron und dem Atomrumpf ist im Falle von Lithium im Anfangszustand also schwächer.

Die Emission des verhältnismäßig schwach gebundenen Elektrons ist daher hauptsächlich in Richtung des Impulsübertrags zu beobachten. Die Verteilung der Elektronenemission ist für den Lithium-Grundzustand, wie dies auch bei Helium zu beobachten ist, spiegelsymmetrisch bezüglich der Streuebene, die durch die Flugrichtung des Projektils sowie die Richtung des Impulsübertrags bestimmt wird. Dies ist bei einer isotropen Verteilung der Elektronen-Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Atom zu erwarten. Die Breite dieser Verteilung ist ebenfalls aufgrund des geringeren Ionisationspotentials deutlich schmaler als bei einem Helium-Target.

Geht man nun zu Ionisationsprozessen aus dem (2p)-Zustand, wäre zu vermuten, dass die Emissionscharakteristik aufgrund des zusätzlich reduzierten Ionisati-

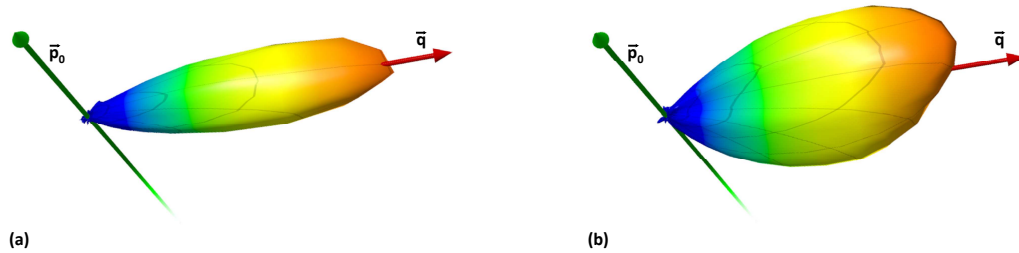


Abbildung 10.1.: Dreidimensionale, vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte für Ionisation von (a) Li(2s) und (b) Li(2p) durch 6 MeV  $p^+$ -Projektilen für  $E_e = 6.5 \text{ eV}$  und  $q_{\perp} = 0.75 \text{ a.u.}$ . Der Farbverlauf entspricht dabei der Intensität.

onspotentials eine nochmals schmalere aber ansonsten symmetrische Verteilung um  $q$  aufweist. Betrachtet man die gemessenen Wirkungsquerschnitte dieser Reaktion (Abbildung 10.1 (b)), bietet sich jedoch ein völlig anderes Bild. Die Winkelverteilung der Elektronen ist deutlich breiter als dies für eine Ionisation aus dem (2s)-Zustand der Fall ist, darüber hinaus lässt sich auch eine deutliche Asymmetrie bezüglich der Streuebene feststellen.

Diese Symmetriebrechung ist auf eine spezifische Eigenschaft der Target-Präparation zurückzuführen. Es wurde bereits erwähnt, dass zum Zeitpunkt dieser Messung etwa 20 % aller Atome im angeregten Zustand zu finden sind. Aufgrund des vorhandenen magnetischen Feldes des Reaktionsmikroskops kommt es zu einer Zeeman-Aufspaltung der magnetischen Unterzustände proportional zur Magnetfeldstärke  $B$ . Dabei werden Zustände mit einer negativen Magnetquantenzahl  $m_L$  zu geringeren Energien verschoben, Zustände mit  $m_L > 0$  zu höheren. Dementsprechend spaltet der angeregte ( $2^2P_{3/2}$ )-Zustand (unter Vernachlässigung der Hyperfeinstruktur, eine Abschätzung die nur bedingt gerechtfertigt ist, siehe hierzu Kapitel 4.6) in drei Unterniveaus auf, während der ( $2^2S_{1/2}$ )-Grundzustand nicht weiter aufspaltet.

Zum Betrieb der Atomfalle ist zudem rotverschobenes Licht notwendig (für eine Beschreibung der theoretischen Grundlagen sowie des Funktionsprinzips einer MOT siehe auch Kapitel 4.1), das heißt, dass die Photonenenergie etwas unterhalb der tatsächlichen Resonanzfrequenz des Kühl-Überganges liegt. Da die Frequenz des verwendeten Lichts nun näher an der Resonanzfrequenz des Übergangs zum ( $m_L = -1$ )-Zustand liegt, ist eine Bevölkung dieses Unterzustandes wahrscheinlicher als eine Anregung in die anderen magnetischen Unterzustände. Es kommt daher zu einer vermehrten Bevölkung des ( $m_L = -1$ )-Zustands im Vergleich zu anderen Unterzuständen. Man spricht hierbei von einer Polarisation des Targets. Diese atomare Polarisation lässt sich durch einen Vergleich der Polarisationen des ausge-



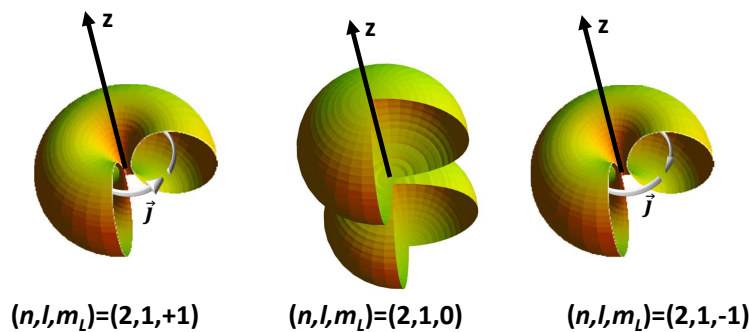


Abbildung 10.2.: Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten des Elektrons für den Li(2p)-Zustand für die jeweiligen  $m_L$ -Unterzustände.

sandten Fluoreszenz-Lichtes der Atomwolke, wie in Kapitel 4.6 beschrieben, messen. Für die hier vorgestellten Messungen ließ sich eine Bevölkung des ( $m_L = -1$ ) - Zustands zu etwa 90 % und des ( $m_L = 0$ ) -Zustands zu etwa 10 % feststellen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des ( $m_L = +1$ ) -Zustands ist dabei vernachlässigbar.

Diese atomare Polarisation hat nun weitreichende Folgen. In Abbildung 10.2 sind die Wellenfunktionen des Li(2p)-Zustandes für die jeweiligen  $m_L$ -Unterzustände dargestellt. Addiert man diese drei Zustände inkohärent, muss die Wellenfunktion wiederum kugelsymmetrisch sein. Ein unpolarisiertes Atom, welches alle drei Unterzustände gleichmäßig bevölkert, hat daher insgesamt eine symmetrische Aufenthaltswahrscheinlichkeit, wohingegen diese Symmetrie für ein polarisiertes Atom aufgehoben ist. Insbesondere den Zuständen mit  $m_L = +1$  und  $m_L = -1$  kann eine nicht verschwindende Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $\vec{j}$  zugeordnet werden, deren Richtung zueinander gegenläufig um die Quantisierungsachse verläuft. Anschaulich betrachtet dreht sich der Wahrscheinlichkeitsstrom für  $m_L = -1$  aus Abbildung 10.2 „entgegen dem Uhrzeigersinn“. Durch diese Symmetriebrechung wird eine weitere Vorzugsrichtung in das Gesamt-Stoßsystem eingeführt, die sich in der Elektronenemission widerspiegelt. Für eine kugelsymmetrische Verteilung des Anfangszustandes (wie dies für die (2s)-Ionisation der Fall ist) sind Richtungen im Ortsraum nur durch  $\vec{p}_0$  und  $\vec{q}$  vorgegeben, daher können die FDCS nur von den relativen Winkeln der Elektronenemission im Bezug auf diese Vektoren abhängen. Ionisationen aus einem nicht kugelsymmetrischen Anfangszustand unterliegen dieser Bedingung nicht mehr. Diese Symmetriebrechung der Elektronen-Emissionscharakteristik ist auch unter dem Begriff des Dichroismus (genauer „orientational dichroism“) bekannt und wurde beispielsweise bei der Ionisation von polarisierten Natrium-Atomen durch

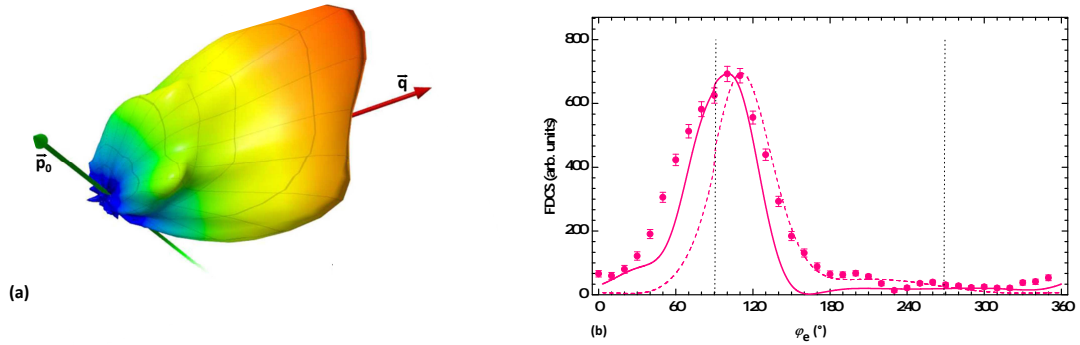


Abbildung 10.3.: Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt für die Ionisation von Li(2p) durch 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Projektile für  $E_e = 1.5$  eV und  $q_{\perp} = 0.3$  a.u.. In (a) ist eine dreidimensionale Abbildung des FDCS zu sehen, in (b) der Schnitt in der Azimuthalebene. Gestrichelte Linie: CDW-EIS; Durchgezogene Linie: CDW-EIS-NN.

Elektronenstoß beobachtet [202].

Diese Asymmetrie verstärkt sich für Systeme höherer Störung, wie in Abbildung 10.3 zu erkennen ist. Hierbei ist der dreidimensionale FDCS für die Stoßionisation des Li(2p)-Zustandes durch ein  $O^{8+}$ -Projektil für Elektronenenergien von  $E_e = 1.5$  eV und einem Impulsübertrag von  $q_{\perp} = 0.3$  a.u. abgebildet. Dieselben Effekte treten durchaus auch bei höheren  $E_e$  und  $q$  auf. Hier wurden die Werte gewählt, bei denen die Asymmetrie am deutlichsten zu erkennen ist. Des Weiteren tritt die Asymmetrie besonders ausgeprägt in der Azimuthalebene, also der Ebene senkrecht zum Projektilstrahl, auf, wie dies in Abbildung 10.3 (b) dargestellt wird. Dabei sind die FDCS über dem azimuthalen Winkel  $\varphi_e$  aufgetragen, der dabei die Richtung des Impulsübertrags  $\vec{q}$  bei  $\varphi_e = 90^\circ$  und  $-\vec{q}$  bei  $270^\circ$  (in Abb. 10.3 (b) durch die beiden senkrechten Linien verdeutlicht) schneidet. Die durch den Dichroismus hervorgerufene Verschiebung des Maximums um etwa  $15^\circ$  lässt sich gut erkennen.

Die Verschiebung des Querschnitts wird auch durch eine CDW-EIS-Theorie reproduziert und ist in Abbildung 10.3 durch eine gestrichelte Linie dargestellt. Dabei wurde eine Besetzungswahrscheinlichkeit von 70% des ( $m_L = -1$ )-Zustandes und 30% des ( $m_L = 0$ )-Zustandes angenommen. Es ist festzustellen, dass die Form der Verteilung nur relativ gering mit dem Beitrag von  $m_L = 0$  variiert, da der Querschnitt für diesen magnetischen Unterzustand erheblich geringer ist als für  $m_L = \pm 1$ . Eine nochmals bessere Übereinstimmung der experimentellen Daten mit der Theorie wird erreicht, sobald die Kern-Kern-Wechselwirkung berücksichtigt wird, wie dies in einer CDW-EIS-NN-Näherung (in obiger Abbildung als durchgezogene Linie gezeigt) der Fall ist. Die Verschiebung des Schwerpunktes der Verteilung wird mit dieser Me-

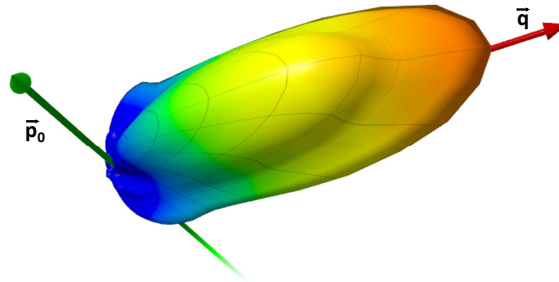


Abbildung 10.4.: FDCS für Ionisation von Li(2s) durch 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Projekte für  $E_e = 1.5$  eV und  $q_{\perp} = 0.3$  a.u..

thode nun sehr gut wiedergegeben. Die Kern-Kern-Wechselwirkung scheint also den Effekt des Dichroismus zu reduzieren. Die experimentellen Daten zeigen ein etwas breiteres Maximum auf als von der Theorie vorausgesagt, dies lässt sich jedoch auf die experimentelle Auflösung zurückführen.

In Abbildung 10.4 ist die Ionisation aus dem Li(2s) Grundzustand für die gleichen kinematischen Bedingungen wie die (2p)-Ionisation in Abbildung 10.3 dargestellt. Bemerkenswert ist hier vor allem die Ausbildung von „Schultern“ in der Azimutalebene, welche die Elektronenemission dieser Reaktion von Ionisationen aus dem Li(2p)-Zustand und von vorherigen Stoßexperimenten an Helium-Targetatomen unterscheidet. Die Ausprägung dieser Schultern ist dabei stärker, wenn ein größerer Impulsübertrag gewählt wird. Für  $q_{\perp} = 1$  a.u. sind sogar separate Seitenmaxima zu beobachten (siehe Abbildung 10.5 (a)).

Bei dem Blick in die Azimutalebene fällt auf, dass zwar die Winkelverteilung, wie für die kugelsymmetrische (2s)-Elektronenschale erwartet, symmetrisch um  $\vec{q}$  herum ist, der Vergleich der störungstheoretischen Rechnungen mit und ohne eine Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung zeigt aber deutlichere qualitative Unterschiede als im Fall der (2p)-Ionisation.

In der CDW-EIS-Näherung (gestrichelte Linie in Abbildung 10.5 (b)) lassen sich keinerlei Seitenmaxima erkennen. Auch die Intensität wird deutlich unterschätzt, so dass die in 10.5 (b) eingezeichnete Kurve mit einem Faktor 5 skaliert wurde, um die Höhe des Hauptmaximas in den Bildbereich einzupassen.

Berücksichtigt man hingegen die Interaktion zwischen Projektil und Targettrumpf, lässt sich eine relativ gute Übereinstimmung zwischen experimentell und theoretisch ermittelten Wirkungsquerschnitten erreichen, in der die Seitenpeaks wiedergegeben werden. Zudem lässt sich hier in beiden theoretischen Modellen und den experimentellen Daten ein kleines Maximum bei  $\varphi_e = 270^\circ$ , in Richtung des negativen Im-

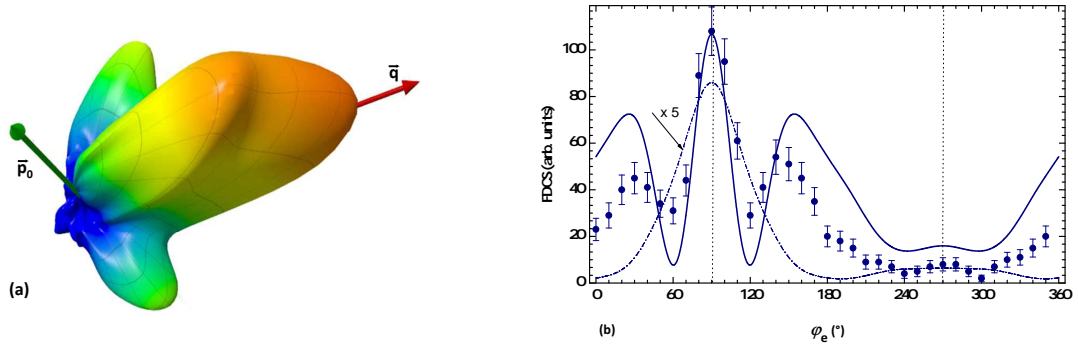


Abbildung 10.5.: Vollständig differentieller Wirkungsquerschnitt für die Ionisation von Li(2s) durch 1.5 MeV/u  $O^{8+}$ -Projektile für  $E_e = 1.5$  eV und  $q_{\perp} = 1.0$  a.u.. In (a) ist eine dreidimensionale Abbildung des FDCS zu sehen, in (b) der Schnitt in der Azimuthalebene. Gestrichelte Linie: CDW-EIS; Durchgezogene Linie: CDW-EIS-NN.

pulsübertrags erkennen. An dieser Position findet sich in Helium-Stoßexperimenten zumeist der Recoil-Peak (siehe Kapitel 6.4), der in den Daten zur Li(2p)-Ionisation jedoch nicht zu erkennen war. Hinsichtlich der qualitativen Übereinstimmung, beispielsweise der korrekten Position und auch Höhen der Seitenmaxima, bleiben allerdings einige Diskrepanzen zwischen experimentellen Daten und der CDW-EIS-NN-Theorie bestehen.

Die Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung scheint einen starken Einfluss auf eine korrekte Wiedergabe der Wirkungsquerschnitte zu haben, kann aber nicht der alleinige Grund für das Auftreten der Seitenmaxima sein, da diese Effekte in der Ionisation aus einem (2p)-Zustand oder für Helium-Targets nicht beobachtet werden konnten. Einen weiteren Hinweis auf eine Ursache dieser Strukturen erhält man bei einem Blick auf die räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Elektronenkonfigurationen. In Abbildung 10.6 sind die radialen Wellenfunktionen für Li(2s), Li(2p) und He(1s) abgebildet. Der Li(2s)-Zustand zeigt im Gegensatz zu den beiden anderen vorgestellten Zuständen einen Knoten in der Wellenfunktion bei etwa  $r = 0.8$  a.u.. Eine Rechnung innerhalb des CDW-EIS-NN-Modells mit einem Anfangszustand, der die Knotenstruktur einer (1s)-Welle, aber die Bindungsenergie des (2s)-Zustands aufweist, liefert keine Seitenmaxima in den FDCS. Die beobachtete Struktur scheint also die Signatur der Anfangszustands-Wellenfunktion zu sein, die in das Kontinuum abgebildet wird.

Die Tatsache, dass die Seitenmaxima in der Rechnung nur unter Berücksichtigung der Kern-Kern-Wechselwirkung auftreten, kann wie folgt verstanden werden: Der Radialteil der (2s)-Wellenfunktion hat zwei Maxima, ein sehr gering ausgepräg-

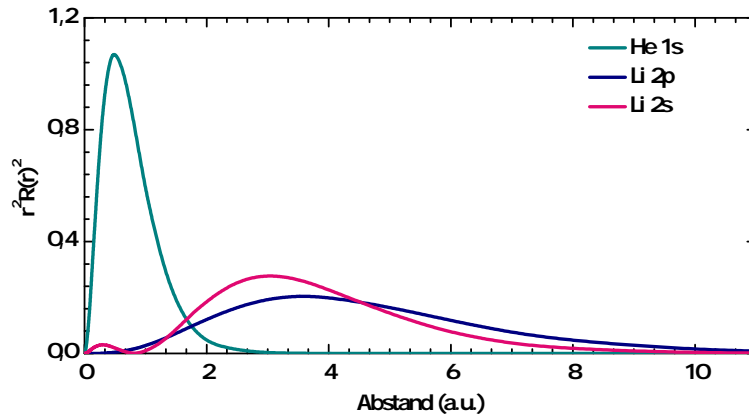


Abbildung 10.6.: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Li(2s) in magenta, Li(2p) in dunkelblau und He(1s) in türkis. Berechnet mit dem Hartree-Fock-Code aus [203].

tes bei  $r = 0.3$  a.u. und ein Hauptmaximum bei  $r = 3$  a.u., wobei nur etwa 2% der Elektronenintensität in der kleineren Peakstruktur zu finden sind. Damit ein Einfluss der Knotenstruktur sichtbar wird, müssen beide Teile der Wellenfunktion signifikant zur Reaktion beitragen. Betrachtet man den Streuprozess semi-klassisch im Stoßparameterbild, findet die Ionisation zumeist bei großen Stoßparametern ( $b > 1$  a.u.) statt. Der Einfluss des inneren Maximums der Wellenfunktion ist dann zu vernachlässigen. Es müssen also sehr nahe Stöße ( $b \approx 1$  a.u.) selektiert werden, um den Einfluss der Knotenstruktur sichtbar zu machen. In der CDW-EIS-Rechnung, in der die Kern-Kern-Wechselwirkung vernachlässigt wird, findet kein Impulsübertrag vom Projektil auf den Targettrumpf statt und die Änderung des Projektilimpulses findet allein aufgrund einer Wechselwirkung mit dem beteiligten Elektron statt. Unter diesen Bedingungen ist die Korrelation zwischen  $q_{\perp}$  und  $b$  relativ schwach und es ist daher nicht möglich, Werte für  $E_e$  und  $q_{\perp}$  zu finden, für welche der Stoßparameter klein sein muss.

Wird eine Kern-Kern-Wechselwirkung berücksichtigt, kommt es zu einer stärkeren Abhängigkeit des Impulsübertrags auf das Targetatom und dem Stoßparameter. Bei kinematischen Zuständen, in denen der Gesamt-Impulsübertrag  $q$  groß und hauptsächlich durch den Rückstoßimpuls gegeben ist (und damit der Impuls des Elektrons im Endzustand gering ist), sollten also kleine Stoßparameter beitragen, so dass die Seitenmaxima deutlich sichtbar werden. Umgekehrt sollte die Ausprägung der Seitenmaxima für kleinere  $q_{\perp}$  geringer werden, was beispielsweise in Abbildung 10.4, einer Darstellung der FDCS für  $E_e = 1.5$  eV und  $q_{\perp} = 0.3$  a.u., erkennbar ist.

Verallgemeinernd kann man die hier beobachteten Strukturen als eine Interfe-

renz zweier Beiträge der Übergangsamplitude beschreiben, von denen einer mit dem inneren Abschnitt, der zweite mit dem äußeren Abschnitt der Wellenfunktion in Verbindung gebracht werden kann. Eine Bedingung für eine solche Interferenz ist allerdings die Kohärenz des Projektils über beide Abschnitte der Wellenfunktion. Der Einfluss eines kohärenten bzw. inkohärenten Projektilstrahles wurde kürzlich von Wang et al. in [23] für die Stoßionisation von Helium untersucht und ein deutlicher Einfluss dieser Projektileigenschaft auf die Wirkungsquerschnitte festgestellt. Es zeigte sich, dass eine vollständig quantenmechanische Betrachtung der Projektilstreuung nur im Falle kohärenter Ionenstrahlen eine korrekte Wiedergabe der experimentell ermittelten Daten ermöglicht. Es ist daher vorstellbar, dass die noch vorhandenen qualitativen Diskrepanzen zwischen einer CDW-EIS-NN-Theorie und der gemessenen Wirkungsquerschnitte auf eine nicht vollständige Kohärenz des Projektils zurückzuführen sind. Die Diskrepanzen in den Peakstrukturen der Messwerte aus Abbildung 10.5 können prinzipiell auch auf die experimentelle Auflösung zurückgeführt werden. Allerdings führt eine Faltung der Wirkungsquerschnitte mit der experimentellen Auflösung zu keiner signifikanten Änderung der FDCS bzw. zu einer Verschiebung der Maxima.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass in der hier betrachteten Untersuchung der vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitte der Ionisation von Lithium bislang nicht betrachtete Effekte gefunden werden konnten, die sich den spezifischen Eigenschaften des Bahndrehimpulses und der magnetischen Unterzustände zuordnen lassen.

**Teil VI.**  
**Zusammenfassung**





# 11. Stoßinduzierte Einfachionisation von Lithium

In dieser Arbeit wurde die durch Ionenstoß induzierte Einfachionisation von Lithium in einem kinematisch vollständigen Experiment untersucht. Dieser Prozess ist eine fundamentale Realisierung des quantenmechanischen Mehr-Körper-Problems. Während kinematisch vollständige Experimente durch Elektronenstoß seit 1969 [8] durchgeführt werden und eine detaillierte Untersuchung der Stoßdynamik erlauben, ist die experimentelle Untersuchung von Stoßsystemen mit geladenen Ionen in dieser Tiefe erst mit der Erfindung des Reaktionsmikroskops möglich geworden [12, 103]. Die Herausforderung liegt dabei in den extrem kleinen Änderungen der Projektilflugbahn, deren Kenntnis aber für eine vollständige Untersuchung der Dynamik des System erforderlich ist.

Vollständig differentielle Wirkungsquerschnitte der Ionenstoß-Ionisation wurden erstmals 2001 vorgestellt [26], und bis zu der gegenwärtigen Arbeit lagen solche nur für die Ionisation eines Helium-Targets vor (beispielsweise [15, 26]). Bei den Spektren dieser frühen Experimente wurden überraschende Abweichungen zu theoretischen Querschnitten beobachtet, deren Ursachen in der Folge kontrovers diskutiert wurden. Im Wesentlichen gibt es vier Ansätze, die zur Erklärung der Diskrepanzen angeführt wurden: (i) Die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Projektil und Target ist für den Ionenstoß nur näherungsweise perturbativ [15, 52, 64] oder über eine endliche Anzahl von gekoppelten Kanälen [190] möglich. Die Drei- (oder Mehr-)Körper-Dynamik, und insbesondere der Einfluss der Streuung des Projektils am Targettrumpf [13], kann also nicht exakt berechnet werden. (ii) Bereits die Beschreibung des Helium-Targets stellt ein Drei-Körper-Problem dar und die elektronische Korrelation der im Helium gebundenen Elektronen kann nur sehr schwer und nicht exakt berücksichtigt werden [62]. (iii) Die experimentelle Auflösung kann einen deutlichen Einfluss auf die Form der Wirkungsquerschnitte haben [45], im Vergleich zwischen Theorie und Experiment ist eine Einbeziehung dieser experimentellen Effekte aber sehr aufwändig [54]. (iv) Die endliche Kohärenzlängen der Projektil-Materiewelle ist bislang in keiner Rechnung berücksichtigt, es gibt aber experimentelle Hinweise, dass die Kohärenz-Eigenschaften einen Einfluss auf die Form der Wirkungsquerschnitte hat [75, 81, 83].

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein neuartiger experimenteller Apparat zur Untersuchung der Dynamik in Ion-Atom-Stößen aufgebaut, mit dem drei der vier

oben genannten Effekte substantiell abgeschwächt werden, so dass neue Einblicke in die Stoßdynamik gewonnen werden konnten.

Hierzu wurden erstmals drei modernste experimentelle Techniken in einen Aufbau vereint: Ein Reaktionsmikroskop (ReMi), welches die Detektion der Impulsfragmente aller an einer Ionisationsreaktion beteiligten Stoßpartner über den vollen Raumwinkel ermöglicht, wurde mit einer magneto-optischen Falle (MOT) zur Präparation des Targets kombiniert. Der Einbau dieses MOTReMis in einen Ionenspeicherring erlaubt nun zudem die Verwendung eines intensiven Projektilstrahls mit einer geringen Impulsunschärfe, woraus sich eine große Kohärenzlänge der Projektilwelle ergibt.

Als Target wurde Lithium gewählt, das sich aufgrund seiner asymmetrischen elektronischen Struktur mit nur einem Valenzelektron stark von Helium unterscheidet. Bei der Beschreibung vieler Prozesse kann angenommen werden, dass Korrelationseffekte zwischen dem äußeren Elektron und den K-Schalen-Elektronen vernachlässigbar gering sind. Durch die Verwendung der Laserkühlung zur Targetpräparation kann eine um mindestens zwei Größenordnungen niedrigere Targettemperatur als in Gasjets erreicht werden, was eine deutliche Verbesserung der experimentellen Auflösung erlaubte [77]. Darüber hinaus konnte auch die Ionisation von optisch angeregtem und sogar polarisiertem Lithium untersucht werden [194, 195].

Der Betrieb einer MOT in Kombination mit einem Reaktionsmikroskop ist vor allem wegen der Inkompatibilität der verwendeten Magnetfelder eine erhebliche Herausforderung. Dies kann prinzipiell dadurch gelöst werden, dass das MOT-Magnetfeld zyklisch aus- und wieder angeschaltet wird, dies entspricht einem Wechsel zwischen dem Messbetrieb mit dem Reaktionsmikroskop und dem Kühlbetrieb des Targets. In dem in dieser Arbeit vorgestellten Aufbau gelingt dies erstmals vor allem aufgrund zweier Weiterentwicklungen gegenüber früheren Experimenten [92]: Einerseits wurde eine spezielle Konfiguration von Spulen zur Erzeugung des MOT-Magnetfeldes entwickelt. Diese Spulen ermöglichen hohe Magnetfeldgradienten, die die Eigenschaften der Atomfalle bestimmen, wobei die räumliche Ausdehnung des Magnetfeldes insgesamt möglichst beschränkt bleibt. Dadurch können Verzögerungen beim Ausschalten des Feldes durch langsam abklingende Wirbelströme, die beispielsweise in der Wand der Vakuumkammer induziert werden, effektiv reduziert werden. Andererseits wird der Einfluss des zur Elektronenimpulsmessung notwendigen homogenen Magnetfeldes auf die in der MOT gefangenen Atome durch unkonventionell gewählte Kühlaser-Polarisationen minimiert. Dies ermöglicht, dass die Atome nach dem Aus- und wieder Einschalten des MOT-Magnetfeldes erneut gefangen werden können, und nicht das Fallenvolumen verlassen. Auf diese Weise wurde ein relative Messdauer von etwa 21 % erreicht.

Mit diesem neuen Aufbau konnten Targetdichten von bis zu  $10^8$  Atome/cm<sup>3</sup> mit etwa einer Million gefangener Atome beobachtet werden. Die gemessene Temperatur der Targetwolke betrug etwa 2.6 mK, ein Wert, der um bis zu drei Größenordnungen

---

niedriger liegt als dies in konventionellen Helium-Targets erreicht wird.

In einer Testmessung zur Ionisation von angeregten Lithium durch 266 nm - Photonen wurde die Impuls-Auflösung des Reaktionsmikroskops bestimmt. Diese betrug je nach Betriebsweise und Raumrichtung etwa 0.04 a.u. bis 0.1 a.u., sowie 0.01 a.u. bis 0.1 a.u. Halbwertsbreite (FWHM) für Ionen bzw. für Elektronen. Insbesondere die Werte für die Rückstoßionen sind meines Wissens nach die Besten bisher in einem Reaktionsmikroskop erreichten, und etwa um den Faktor 2 bis 3 niedriger als in den oben genannten früheren Experimenten zur Ionenstoß-Ionisation von Helium.

Im Zuge dieser Arbeit wurden Experimente an zwei Stoßsystemen mit unterschiedlichen Störungen durchgeführt. Zum Einen wurden 6 MeV Protonen als Projekttilstrahl verwendet, was einer Störung von  $\eta = 0.06$  entspricht. Die Ionisation in diesem Systems liegt damit deutlich im perturbativen Bereich und es wurde eine gute Übereinstimmung der ermittelten Wirkungsquerschnitte mit störungstheoretischen Modellen erwartet. Um Einflüsse von Beiträgen höherer Ordnung zu untersuchen, wurde zum Anderen 24 MeV  $O^{8+}$ -Ionen als Projektile gewählt, wobei der Störungsparameter hier bei  $\eta = 1.03$  liegt.

In der Untersuchung des Energieübertrags vom Projektil auf das Target in der Einfachionisation von Lithium durch 24 MeV  $O^{8+}$ -Projektile wurden dabei unterschiedliche Targetzustände identifiziert [77]. Mit großer Wahrscheinlichkeit war das  $Li^+$ -Rückstoßion nach der Streuung im Grundzustand, ein geringer Anteil befand sich aber auch in einem angeregtem Zustand. Die Energieverteilung der Elektronen konnte gut durch die Valenzelektronen-Ionisation in einer CDW-EIS-Rechnung [15] beschrieben werden, sofern das Rückstoßion im Grundzustand war. Das Modell scheiterte aber an der Beschreibung für die angeregten Target-Ionen. Dies wird darauf zurückgeführt, dass zwei unterschiedliche Reaktionskanäle zum gleichen angeregten Endzustand führen können, nämlich die direkte Ionisation eines (1s)-Elektrons, aber auch die Anregung eines (1s)-Elektrons begleitet von der Ionisation des Valenzelektrons. In dem verfügbaren Modell kann bislang nur der erste Mechanismus berechnet werden.

Bei der Analyse der Ionisation des Valenzelektrons lassen sich wiederum Unterschiede zwischen den verschiedenen Anfangszuständen des Elektrons beobachten [194]. Dabei wurde das Target sowohl im (2s)-Grundzustand als auch im ersten angeregten (2p)-Zustand präpariert. Der Vergleich der doppelt differentiellen Wirkungsquerschnitte als Funktion der Elektronenenergien und des Impulsübertrags der Ionisation durch 6 MeV Protonen erbrachte eine relativ gute Wiedergabe der experimentell ermittelten Daten sowohl für die (2s)- als auch eine (2p)-Ionisation durch eine CDW-EIS-Theorie [15]. Der Verlauf der Wirkungsquerschnitte zeigt dabei deutliche Unterschiede zwischen beiden Anfangszuständen, die auch von der Theorie wiedergegeben werden. Kleinere Abweichungen treten dabei vor allem bei geringen Energien und Impulsüberträgen auf.

Bei der höheren Störung zeigen sich größere Diskrepanzen zwischen experimentell ermittelten und durch verschiedene CDW-EIS-Modelle berechneten Wirkungsquerschnitten. Insgesamt ist die Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnungen, welche die Kern-Kern-Wechselwirkung berücksichtigen, für die Ionisation des (2p)-Elektrons aber zufriedenstellend. Für die (2s)-Ionisation treten hingegen deutliche Abweichungen insbesondere für sehr kleine und sehr große Impulsüberträge auf, wobei eine klassische Behandlung der Kern-Kern-Streuung in der CDW-EIS-CLNN-Theorie [67] etwas bessere Ergebnisse liefert als die voll quantenmechanische CDW-EIS-NN-Methode [15], ein Effekt der auch bei der Ionisation von He- und H-Targets beobachtet werden konnte [67, 85].

Die Anfangszustandsabhängigkeit wurde detaillierter anhand von vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten untersucht [195]. Die gewonnenen Spektren weisen dabei Charakteristika auf, die bei keiner der früheren Messungen an Helium-Targets beobachtet werden konnten. Für die Ionisation des (2p)-Zustandes zeigt die Winkelverteilung des emittierten Elektrons eine Asymmetrie bezüglich der Streuebene, die für isotrope Anfangszustände prinzipiell nicht auftreten darf. Dieser Effekt wurde bei beiden untersuchten Stoßsystemen beobachtet und ist auf die Polarisierung des angeregten Zustandes zurückzuführen. Durch das Magnetfeld des Reaktionsmikroskops und die Rotverschiebung des Anregungs- bzw. Kühllasers wird hauptsächlich nur ein magnetisches Unterniveau des Zeeman-aufgespaltenen (2p)-Zustandes bevölkert, wodurch sich ein Polarisationsgrad des Targets von nahezu 90% ergibt.

Darüber hinaus konnten in der Ionisation aus dem (2s)-Grundzustand bei der hohen Störung ausgeprägte Seitenmaxima in den vollständig differentiellen Wirkungsquerschnitten festgestellt werden, die weder in der Ionisation von Li(2p) noch in der Ionisation von Helium beobachtet wurden. Dies wird als Signatur der Knotenstruktur des Radialteils der (2s)-Wellenfunktion interpretiert. Ein Vergleich mit CDW-EIS-NN-Modellen zeigt eine bemerkenswerte Übereinstimmung, sofern die Kern-Kern-Wechselwirkung in die Rechnung mit einbezogen wird, insgesamt ist aber auch hier die Übereinstimmung der (2p)-Ionisation etwas besser.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass es mit dem hier vorgestellten neuen experimentellen Aufbau gelungen ist, hoch aufgelöste, kinematisch vollständige Experimente zur Stoßionisation von Lithium durch geladene Projektile durchzuführen. Die im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Daten stellen eine neue Prüfmarke für theoretische Modelle dar, wobei nicht nur die Auflösung im Vergleich zu früheren Messungen an Helium erheblich verbessert werden konnte, es ist zum ersten Mal auch möglich, die Anfangszustandsabhängigkeit der Stoßdynamik zu untersuchen. Erste Rechnungen theoretischer Gruppen zu den untersuchten Stoßsystemen sind bereits veröffentlicht [204].

Die Beobachtung, dass die berechneten Querschnitte zur (2p)-Ionisation generell eine etwas bessere Übereinstimmung zu den gemessenen Daten zeigen, kann als Hinweis gewertet werden, dass die verwendete Näherung des (2s)-Zustandes schlechter

---

ist als die des angeregten (2p)-Zustandes. Dies scheint plausibel, da der räumliche Überlapp zwischen der K-Schale und dem Valenzelektron für den s-Zustand größer ist als für den p-Zustand. Deshalb könnten in diesem Fall Korrelationseffekte der Elektronen untereinander stärker sein, so dass sie bei der Beschreibung der Stoßdynamik berücksichtigt werden müssen.

Prinzipiell ist aber auch denkbar, dass die Projektil-Kohärenzlänge, die auch im Speicherring zumindest für das schwerere Sauerstoff-Projektil kleiner ist als die Größe des Targetatoms, für die Diskrepanzen verantwortlich ist. Um den Einfluss der Kohärenzlänge zu verstehen, ist es aus jetziger Sicht aber unumgänglich, diese in die theoretischen Modelle einzubeziehen. Hierfür gibt es seit Kurzem zwar erste Ansätze [205], eine volle Berücksichtigung ist aber noch nicht möglich und eine große Herausforderung.

Das im Rahmen dieser Arbeit aufgebaute MOTReMi stellt eine substantielle Erweiterung bisheriger Techniken zur Impulsspektroskopie dar, und erlaubt die kinematisch vollständige Untersuchung von atomaren Fragmentationsprozessen in im Prinzip allen denkbaren Stoßsystemen mit Ionen, Elektronen oder Photonen in starken Laserfeldern. Dabei sticht es nicht nur wegen der hervorragenden Auflösung für die Rückstoßionen gegenüber konventionellen Spektrometern heraus, damit sind auch zum ersten Mal Alkalimetalle und optisch angeregte Anfangszustände für solche kinematisch vollständigen Experimente zugänglich. Dies wird in Zukunft einen erheblichen Beitrag leisten können, um die theoretische Beschreibung atomarer Mehr-Körper-Probleme rigoros zu testen und ein tieferes Verständnis der korrelierten Dynamik solcher Systeme zu gewinnen.



**Teil VII.**

**Anhang**





# A. Zeeman-Aufspaltung realer Atome

## Feinstruktur und Hyperfeinstruktur

Bislang wurde die Aufspaltung der atomaren Zustände auf die Wechselwirkung des Elektronen-Bahndrehimpulses mit dem äußeren Magnetfeld zurückgeführt ( $m_L$ -Aufspaltung). Dies vernachlässigt allerdings Effekte aufgrund von weiteren Aufspaltungen wie etwa der Feinstruktur und Hyperfeinstruktur. Im Folgenden soll deshalb ein kurzer Überblick über das Verhalten eines Lithium-Atoms in einem Magnetfeld gegeben werden. Dabei orientiert sich der Aufbau dieses Kapitels unter anderem an der Arbeit von M. Gehm [138]. Die hier vorgestellten Begriffe und Herleitungen lassen sich zudem in Standard-Lehrwerken wie etwa [129, 178] finden.

In der einfachsten Beschreibung atomarer Energiezustände wird nur ein einzelnes Valenzelektron explizit berücksichtigt, das sich in einem kugelsymmetrischen Potential bewegt. Dabei setzt sich das Potential aus den elektrischen Feldern des Kerns und aller weiteren Elektronen des Atoms zusammen. In dieser Beschreibung, auch als „central field approximation“ bekannt, werden die resultierenden Energielevels durch die Quantenzahlen  $n$  und  $L$  charakterisiert. Die Bezeichnungen  $2^2S$  und  $2^2P$  stehen für den Grund- und ersten angeregten Zustand von Lithium (siehe hierfür Abbildung 4.7 in der linken Spalte).

Berücksichtigt man nun den Spin des Elektrons  $S$ , wechselwirkt dieser mit dem Bahndrehimpuls  $L$  aufgrund der damit verbundenen magnetischen Dipolmomente. Es ergibt sich ein zusätzlicher Wechselwirkungsterm im Hamiltonoperator [138]

$$H'_{SB} = \frac{e}{2m_e^2 c^2 \hbar^2} \left[ \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \right] \vec{L} \cdot \vec{S}. \quad (\text{A.1})$$

Dabei stellen  $U$  das Potential des Targetkerns und der restlichen Elektronen dar,  $r$  den Abstand des Elektrons zum Potentialursprung und  $\vec{L}$  bzw.  $\vec{S}$  die Bahndreh- und Spinoperatoren. Beide Operatoren lassen sich nun in einem weiteren Operator zusammenfassen,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (\text{A.2})$$

dem Operator des Gesamtdrehimpulses. Die zugehörige Quantenzahl  $J$  kann nun Werte zwischen

$$|L - S| \leq J \leq (L + S) \quad (\text{A.3})$$

annehmen. Mit Hilfe der Identität

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} \quad (\text{A.4})$$

gilt:

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \quad (\text{A.5})$$

$\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$  und  $J_z$  bilden einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren.

Diese Spin-Bahn-Kopplung führt zu einer Aufspaltung der Energieniveaus, die unter dem Namen der Feinstruktur-Aufspaltung bekannt ist.

Für Lithium im Grundzustand gilt  $L = 0$  und  $S = 1/2$ , und die Quantenzahl  $J$  kann nur den Wert  $J = 1/2$  annehmen. Der erste angeregte Zustand ( $L = 0, S = 1/2$ ) hingegen hat zwei mögliche Zustände,  $J = 1/2$  und  $J = 3/2$ . Es kommt daher zu einer Aufspaltung der Energielevels, die mit  ${}^2P_{1/2}$  und  ${}^2P_{3/2}$  bezeichnet werden.

Des Weiteren muss auch die Wechselwirkung des Gesamtdrehimpulses des Elektrons mit dem magnetischen Moment des Kerns berücksichtigt werden. Der Hamiltonoperator der Wechselwirkung für den Kern im Feld des Elektrons lässt sich schreiben als [138]

$$H'_{HFS} = -\vec{\mu}_K \cdot \vec{B}(0) + \frac{1}{6} e \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{\partial^2 \phi(0)}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\text{A.6})$$

mit dem Operator des magnetischen Dipolmoments des Kerns,  $\vec{\mu}_K$ , und dem Operator des elektrischen Quadrupolmoments des Kerns,  $Q_{ij}$ .  $\vec{B}(0)$  bezeichnet den magnetischen Feldoperator, sowie  $\phi(0)$  das elektrische Potential am Ort des Kerns.  $H'_{HFS}$  setzt sich demnach aus einem magnetischen Dipolterm und einem Quadrupolterm zusammen, welcher für kugelsymmetrische Felder verschwindet.

Es bietet sich an, einen weiteren Operator zu definieren,

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}, \quad (\text{A.7})$$

mit der zugeordneten Quantenzahl  $F$  und

$$|J - I| \leq F \leq (J + I). \quad (\text{A.8})$$

Analog zur Spin-Bahn-Kopplung bilden auch hier  $\vec{F}^2, \vec{J}^2, \vec{I}^2$  und  $F_z$  einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren.

Die durch diese Wechselwirkung hervorgerufene Energieaufspaltung, die Hyperfeinstruktur, ergibt sich zu [206]

$$\Delta E_{HFS} = \frac{1}{2}a_{HFS}C + \frac{3}{8}b_{HFS}\frac{C(C+1)}{I(2I-1)J(2J-1)}, \quad (\text{A.9})$$

mit  $C = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)$ . Die Hyperfeinstrukturkonstanten können dabei experimentell ermittelt werden und betragen für  ${}^7\text{Li}$

$$a_{HFS}({}^2S_{1/2}) = 401.76 \text{ MHz} \quad (\text{A.10})$$

für den Grundzustand [207], sowie

$$\begin{aligned} a_{HFS}({}^2P_{3/2}) &= -3.05 \text{ MHz} \\ b_{HFS}({}^2P_{3/2}) &= -0.221 \text{ MHz} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

für den angeregten ( ${}^2P_{3/2}$ )-Zustand [208]. Der Quadrupolterm mit  $b_{HFS}$  in A.9 ist dabei deutlich kleiner als der Dipolbeitrag und kann vernachlässigt werden.

Mit einem Kernspin von  $I = 3/2$  spaltet der  ${}^7\text{Li}$ -Grundzustand ebenso wie der ( ${}^2P_{1/2}$ )-angeregte Zustand in zwei Hyperfein-Komponenten mit  $F = 1, 2$  auf, der ( ${}^2P_{3/2}$ )-Zustand geht in vier Unterkomponenten mit  $F = 0, 1, 2, 3$  über. In Abbildung 4.7 ist diese Aufspaltung schematisch dargestellt. Aufgrund des negativen Wertes der Hyperfeinkonstante für den angeregten ( ${}^2P_{3/2}$ )-Zustand ist hier die energetische Reihenfolge der Hyperfeinlevels gerade umgekehrt als dies für den Grundzustand der Fall ist.

## Atome in einem externen Magnetfeld

Befinden sich Atome in einem externen Magnetfeld, koppeln die intrinsischen magnetischen Momente mit diesem Feld und es kommt zum Zeeman-Effekt. Die Wechselwirkung ist gegeben über den Hamiltonoperator des magnetischen Feldes

$$H_B = -\frac{\mu_B}{\hbar} \sum_x g_x \vec{X} \cdot \vec{B}, \quad (\text{A.12})$$

mit dem g-Faktor  $g_x$  und der Summe über alle guten Quantenzahlen des Systems,  $\vec{X}$ . Für schwache Magnetfelder ist die Zeeman-Aufspaltung der Energieniveaus klein gegenüber der Hyperfeinstruktur und es gilt

$$\Delta E_Z = \frac{\mu_B}{\hbar} g_F m_F B. \quad (\text{A.13})$$

Der g-Faktor des Systems  $g_F$  berechnet sich dabei über

$$g_F = g_J \frac{F(F+1) - I(I+1) + J(J+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{F(F+1) + I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)} \quad (\text{A.14})$$

Dabei ist der zweite Term um den Faktor  $m_P/m_e \approx 1836$  kleiner und kann im Folgenden vernachlässigt werden. Der g-Faktor des Elektrons,  $g_J$ , konnte experimentell zu 2.002 301 0 für den ( ${}^2S_{1/2}$ )-Zustand und 1.335 für den ( ${}^2P_{3/2}$ )-Zustand von Lithium bestimmt werden [208].

Aufgrund der sehr geringen Hyperfeinkonstante des angeregten Zustandes in Lithium ist die Zeeman-Aufspaltung bereits bei einer Feldstärke von wenigen Gauss vergleichbar mit der Hyperfeinstruktur und A.13 verliert seine Gültigkeit.  $F$  stellt keine gute Quantenzahl mehr dar und es müssen Eigenzustände des kombinierten Hamiltonoperators

$$H_{int} = H_B + H_{HFS} \quad (\text{A.15})$$

gefunden werden. Dies erfolgt über eine Diagonalisierung der Hamiltonmatrix für den ( ${}^2S_{1/2}$ )-Grundzustand und den ( ${}^2P_{3/2}$ )-angeregten Zustand für  ${}^7\text{Li}$  mit Hilfe eines Mathematica-Codes aus [138] und ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Auf dieselbe Weise lassen sich nun auch die  $m_L$ -Beiträge zu den einzelnen Energieniveaus bei einer bestimmten Magnetfeldstärke berechnen (siehe Kapitel 4.6).

Für deutlich höhere Magnetfelder ist wiederum die Hyperfeinstruktur im Vergleich zu der nun starken Zeeman-Aufspaltung vernachlässigbar, und die Energieniveaus sind über

$$\Delta E_Z = \frac{\mu_B}{\hbar} (g_J m_J + g_I m_I) B \quad (\text{A.16})$$

gegeben. Dies wird als Paschen-Back-Effekt bezeichnet. Spektroskopisch lassen sich nun Spektrallinien beobachten, die durch die Quantenzahl  $m_J$  beschrieben werden können. Für  ${}^7\text{Li}$  weist jede dieser Linien eine Substruktur von vier Linien der vier möglichen  $m_I$  auf.

## Wechselwirkung mit einem externen optischen Feld

Übergänge zwischen den einzelnen Energieniveaus können durch die Wechselwirkung mit einem externen optischen Feld nahe der resonanten Wellenlänge beschrieben werden. Dabei wird der Übergang aus einem Hyperfeinniveau  $| (JI) F m_F \rangle$  in ein angeregtes Niveau  $| (J'I') F' m_{F'} \rangle$  durch das Dipolmatrixelement

$$\mu_{eg} = \langle (J'I') F' m_{F'} | \mu | (JI) F m_F \rangle \quad (\text{A.17})$$

mit dem Dipoloperator  $\mu$  beschrieben. Mit Hilfe des Wigner-Eckart-Theorems [178] lässt sich dies durch ein von  $m_F$  unabhängiges reduziertes Matrixelement ausdrücken:

---


$$\mu_{eg} = (-1)^{F'-m_{F'}} \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -m_{F'} & q & m_F \end{pmatrix} \langle (J'I')F' || \mu(1) || (JI)F \rangle, \quad (\text{A.18})$$

mit  $q = -1, 0, 1$  für  $\sigma^-$ ,  $\pi$  und  $\sigma^+$  -polarisiertes Licht und dem Wigner 3-J Symbol.

Ein Übergang zwischen zwei Hyperfeinzuständen mit unterschiedlichen  $F$  ändert nur die Quantenzahl  $J$ . Das reduzierte Matrixelement lässt sich daher weiter vereinfachen zu

$$\langle (J'I')F'm_{F'} || \mu(1) || (JI)Fm_F \rangle = \delta_{I'I} (-1)^{J'+I+F+1} \sqrt{(2F'+1)(2F+1)} \times \begin{bmatrix} J' & 1 & F \\ F & q & J \end{bmatrix} \langle J' || \mu(1) || J \rangle, \quad (\text{A.19})$$

mit dem Wigner 6-J Symbol in eckigen Klammern.

Damit ergibt sich das Übergangsmatrixelement zu

$$\mu_{eg} = \delta_{I'I} (-1)^{J'+I+F+F'-m_{F'}+1} \sqrt{(2F'+1)(2F+1)} \times \begin{pmatrix} J' & 1 & J \\ -m_{F'} & q & m_F \end{pmatrix} \begin{bmatrix} J' & 1 & F \\ F & q & J \end{bmatrix} \langle J' || \mu(1) || J \rangle. \quad (\text{A.20})$$

Das Betragsquadrat des reduzierten Matrixelements ist dabei über die Relation der Einstein A-Koeffizienten gegeben [138, 209]:

$$\frac{1}{\tau} = A_{J,J'} = \frac{2\omega^3}{3\epsilon_0 c^3 h} \frac{1}{(2J+1)} |\langle J' || \mu(1) || J \rangle|^2 \quad (\text{A.21})$$

Durch eine experimentelle Bestimmung der Zerfallsraten  $1/\tau$  lässt sich daher das reduzierte Matrixelement  $\langle J' || \mu(1) || J \rangle$  ausrechnen. Deshalb hängt die Lebensdauer allein von der Feinstruktur ab und ist für alle Hyperfeinniveaus gleich. Gehrhardt gibt in [138] den Wert des reduzierten Matrixelementes für den Kühlübergang der magneto-optischen Falle mit  $\langle J' = 3/2 || \mu(1) || J = 1/2 \rangle = 3.977 \times 10^{-29}$  C m an.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen zwei atomaren Zuständen lassen sich über das Betragsquadrat des Übergangsmatrixelementes  $|\mu_{eg}|^2$  aus Gleichung A.20 berechnen [129]. In Abbildung B.1 sind diese (relativen) Übergangswahrscheinlichkeiten für die Übergänge der  $D2$  -Linie in Lithium aufgeführt. Alle Werte wurden auf ganze Zahlen normiert. In Abbildung B.1 (a) sind die möglichen ( $\Delta m = 0$ ) -Übergänge ( $\pi$  -Polarisation) angegeben, in Abb. B.1 (b) ( $\Delta m = +1$ ) -Übergänge ( $\sigma^+$  -Polarisation). Die Übergangswahrscheinlichkeiten der ( $\Delta m = -1$ ) -Übergänge ( $\sigma^-$  -Polarisation) ergeben sich ebenfalls aus Abb. B.1 (b), sofern man alle  $m_F$ -Zustände durch  $-m_F$  austauscht.



# B. Relative Übergangswahrscheinlichkeiten für Lithium

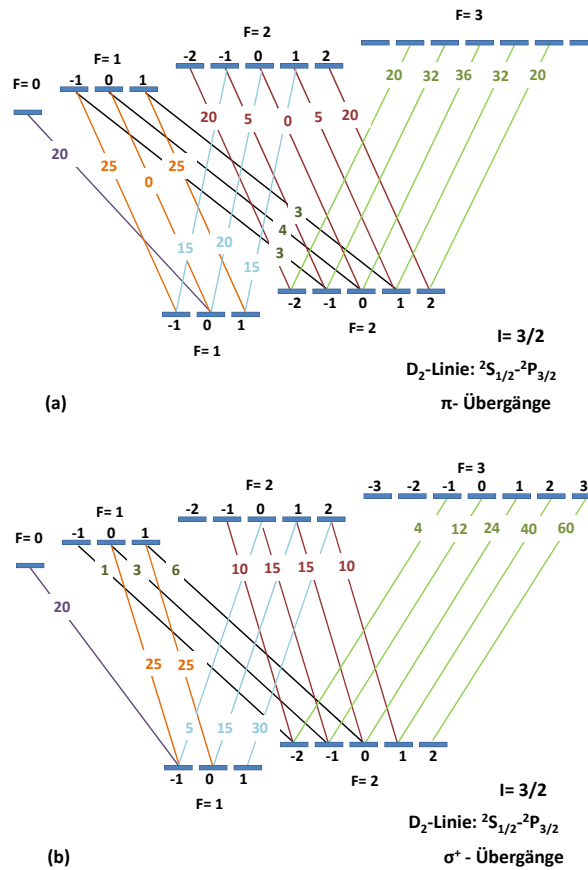


Abbildung B.1.: Relative Übergangsstärken der Übergänge der  $D_2$ -Linie in Lithium für Licht mit (a) linearer  $\pi$ -Polarisation und (b) zirkularer  $\sigma^+$ -Polarisation. Die Übergangswahrscheinlichkeiten für die  $\sigma^-$ -Polarisation ergeben sich ebenfalls aus Abb. B.1 (b), sofern man alle  $m_F$ -Zustände durch  $-m_F$  austauscht.





## C. Atomare Einheiten

In der Atomphysik werden relevante Größen häufig durch atomare Einheiten, a.u. (aus dem Englischen, atomic unit), ausgedrückt. Die Basiseinheiten dieses Systems sind dabei durch die entsprechenden Größen eines Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms definiert und es gilt:

$$e \equiv \hbar \equiv m_e \equiv 1$$

Relevante Größen sind demnach:

Größe	Atomare Einheiten	SI-Einheiten
Länge	1 a.u.	$a_0 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$
Masse	1 a.u.	$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
	1 u bzw. 1 amu	$u = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Zeit	1 a.u.	$1.52 \times 10^{-16} \text{ s}$
Geschwindigkeit	1 a.u.	$v_0 = 2.19 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$
Lichtgeschwindigkeit	137 a.u.	$c = 2.99 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Ladung	1 a.u.	$e = 1.60 \times 10^{-19} \text{ A s}$
Energie	1 a.u.	$2R_y = 4.36 \times 10^{-18} \text{ J} = 27.2 \text{ eV}$
Impuls	1 a.u.	$2.00 \times 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}$



# Literaturverzeichnis

- [1] I. Newton. *Philosophiæ naturalis principia mathematica*. London, 1687. <http://cudl.lib.cam.ac.uk/view/PR-ADV-B-00039-00001/9>.
- [2] H. Bethe. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. *Annalen der Physik*, 397(3):325–400, 1930.
- [3] M. Born. Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Zeitschrift für Physik*, 38(11-12):803–827, 1926.
- [4] T. N. Rescigno, M. Baertschy, W. A. Isaacs, and C.W. McCurdy. Collisional breakup in a quantum system of three charged particles. *Science*, 286(5449):2474–9, 1999.
- [5] Igor Bray. Close-coupling approach to coulomb three-body problems. *Phys. Rev. Lett.*, 89:273201, Dec 2002.
- [6] J. Feist, S. Nagele, R. Pazourek, E. Persson, B. I. Schneider, L. A. Collins, and J. Burgdörfer. Nonsequential two-photon double ionization of helium. *Phys. Rev. A*, 77:043420, Apr 2008.
- [7] Xiaoxu Guan, K. Bartschat, and B. I. Schneider. Dynamics of two-photon double ionization of helium in short intense xuv laser pulses. *Phys. Rev. A*, 77:043421, Apr 2008.
- [8] H. Ehrhardt, M. Schulz, T. Tekaas, and K. Willmann. Ionization of helium: Angular correlation of the scattered and ejected electrons. *Phys. Rev. Lett.*, 22:89–92, Jan 1969.
- [9] E. Horsdal-Pedersen, C. L. Cocke, and M. Stockli. Experimental observation of the Thomas peak in high-velocity electron capture by protons from He. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1910–1913, Jun 1983.
- [10] H. Vogt, R. Schuch, E. Justiniano, M. Schulz, and W. Schwab. Experimental test of higher-order electron-capture processes in collisions of fast protons with atomic hydrogen. *Phys. Rev. Lett.*, 57:2256–2259, Nov 1986.
- [11] J. T. Park, J. E. Aldag, J. L. Peacher, and J. M. George. Angular differential cross sections for excitation of atomic hydrogen by 25-, 50-, and 100-keV protons. *Phys. Rev. Lett.*, 40:1646–1648, Jun 1978.

- [12] J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn, R. Dörner, L. P. H. Schmidt, and H. Schmidt-Böcking. Recoil-Ion And Electron Momentum Spectroscopy: Reaction-Microscopes. *Reports On Progress In Physics*, 66(9):1463–1545, Sep 2003.
- [13] M. Schulz, R. Moshhammer, D. Fischer, H. Kollmus, D. H. Madison, S. Jones, and J. Ullrich. Three-dimensional imaging of atomic four-body processes. *Nature*, 422:48–50, March 2003.
- [14] R. Moshhammer et al. Double ionization of helium and neon for fast heavy-ion impact: Correlated motion of electrons from bound to continuum states. *Phys. Rev. Lett.*, 77:1242–1245, Aug 1996.
- [15] D. Fischer, R. Moshhammer, M. Schulz, A. Voitkiv, and J. Ullrich. Fully differential cross sections for the single ionization of helium by ion impact. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36(17):3555, 2003.
- [16] N. V. Maydanyuk, A. Hasan, M. Foster, B. Tooke, E. Nanni, D. H. Madison, and M. Schulz. Projectile-residual-target-ion scattering after single ionization of helium by slow proton impact. *Phys. Rev. Lett.*, 94:243201, Jun 2005.
- [17] D. Fischer et al. Projectile-charge sign dependence of four-particle dynamics in helium double ionization. *Phys. Rev. Lett.*, 90:243201, Jun 2003.
- [18] D. Fischer, M. Schulz, K. Schneider, M. F. Ciappina, T. Kirchner, A. Kelkar, S. Hagman, M. Grieser, K.-U. Kühnel, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Systematic analysis of double-ionization dynamics based on four-body dalitz plots. *Phys. Rev. A*, 80:062703, Dec 2009.
- [19] M. Schulz, R. Moshhammer, W. Schmitt, H. Kollmus, R. Mann, S. Hagmann, R. E. Olson, and J. Ullrich. Correlated three-electron continuum states in triple ionization by fast heavy-ion impact. *Phys. Rev. A*, 61:022703, Jan 2000.
- [20] A. Cassimi, S. Duponchel, X. Flechard, P. Jardin, P. Sortais, D. Hennecart, and R. E. Olson. State-selective electron capture in low velocity multiply charged ion, helium collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 76:3679–3682, May 1996.
- [21] Hong-Keun Kim, M. S. Schöffler, S. Houamer, O. Chuluunbaatar, J. N. Titze, L. Ph. H. Schmidt, T. Jahnke, H. Schmidt-Böcking, A. Galstyan, Yu. V. Popov, and R. Dörner. Electron transfer in fast proton-helium collisions. *Phys. Rev. A*, 85:022707, Feb 2012.
- [22] H. Kollmus, R. Moshhammer, R. E. Olson, S. Hagmann, M. Schulz, and J. Ullrich. Simultaneous projectile-target ionization: A novel approach to (e, 2e) experiments on ions. *Phys. Rev. Lett.*, 88:103202, Feb 2002.

- 
- [23] X. Wang, K. Schneider, A. Kelkar, M. Schulz, B. Najjari, A. Voitkiv, M. Gundmundsson, M. Grieser, C. Krantz, M. Lestinsky, A. Wolf, S. Hagmann, R. Moshhammer, J. Ullrich, and D. Fischer. Mutual projectile and target ionization in 1-MeV/amu  $N^{4+}$  and  $N^{5+} + He$  collisions. *Phys. Rev. A*, 84:022707, Aug 2011.
- [24] V. Mergel, R. Dörner, M. Achler, Kh. Khayyat, S. Lencinas, J. Euler, O. Jagutzki, S. Nüttgens, M. Unverzagt, L. Spielberger, W. Wu, R. Ali, J. Ullrich, H. Cederquist, A. Salin, C. J. Wood, R. E. Olson, D. ž. Belkić, C. L. Cocke, and H. Schmidt-Böcking. Intra-atomic electron-electron scattering in  $p$ -He collisions (Thomas process) investigated by cold target recoil ion momentum spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 79:387–390, Jul 1997.
- [25] M. Schulz, X. Wang, M. Gundmundsson, K. Schneider, A. Kelkar, A. B. Voitkiv, B. Najjari, M. Schöffler, L. Ph. H. Schmidt, R. Dörner, J. Ullrich, R. Moshhammer, and D. Fischer. Strongly enhanced backward emission of electrons in transfer and ionization. *Phys. Rev. Lett.*, 108:043202, Jan 2012.
- [26] M. Schulz et al. Triply differential single ionization cross sections in coplanar and non-coplanar geometry for fast heavy ion-atom collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34(9):L305, 2001.
- [27] P. D. Fainstein, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Target dependence of slow electrons emitted in swift ion-atom collisions. *Phys. Rev. A*, 63:062720, May 2001.
- [28] T. Kirchner, L. Gulyás, R. Moshhammer, M. Schulz, and J. Ullrich. Doubly differential electron-emission spectra in single and multiple ionization of noble-gas atoms by fast highly-charged-ion impact. *Phys. Rev. A*, 65:042727, Apr 2002.
- [29] P. D. Fainstein, V. H. Ponce, and R. D. Rivarola. A theoretical model for ionisation in ion-atom collisions. Application for the impact of multicharged projectiles on helium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 21(2):287, 1988.
- [30] P. D. Fainstein, V. H. Ponce, and R. D. Rivarola. Two-centre effects in ionization by ion impact. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 24(14):3091, 1991.
- [31] J. O. P. Pedersen, P. Hvelplund, A. G. Petersen, and P. D. Fainstein. Two-centre effects in electron emission from the impact of fast multiply charged projectiles on helium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 23(19):L597, 1990.

- [32] J. O. P. Pedersen, P. Hvelplund, A. G. Petersen, and P. D. Fainstein. Two-centre effects in ejected-electron spectra from ionization of helium atoms in collisions with fast, fully stripped ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 24(18):4001, 1991.
- [33] N. Stolterfoht, H. Platten, G. Schiwietz, D. Schneider, L. Gulyás, P. D. Fainstein, and A. Salin. Two-center electron emission in collisions of fast, highly charged ions with He: Experiment and theory. *Phys. Rev. A*, 52:3796–3802, Nov 1995.
- [34] Y. D. Wang, V. D. Rodriguez, C. D. Lin, C. L. Cocke, S. Kravis, M. Abdallah, and R. Dörner. Analysis of final-state momentum distributions of ionization products in ion-atom collisions. *Phys. Rev. A*, 53:3278–3286, May 1996.
- [35] S. D. Kravis et al. Single ionization of He by low-velocity protons and  $C^{6+}$ : Ejected electron momentum distributions. *Phys. Rev. A*, 54:1394–1403, Aug 1996.
- [36] M. Abdallah, S. Kravis, C. L. Cocke, Y. Wang, V. D. Rodriguez, and M. Stöckli. Velocity-space pictures of continuum electrons produced by slow, bare, highly charged ions. *Phys. Rev. A*, 56:2000–2004, Sep 1997.
- [37] Lokesh C. Tribedi, P. Richard, Y. D. Wang, C. D. Lin, L. Gulyas, and M. E. Rudd. Ionization dynamics in fast ion-atom collisions. I. Energy and angular distributions of low-energy electrons emitted in ionization of He by bare carbon ions. *Phys. Rev. A*, 58:3619–3625, Nov 1998.
- [38] Lokesh C. Tribedi, P. Richard, Y. D. Wang, C. D. Lin, R. E. Olson, and L. Gulyas. Ionization dynamics in fast ion-atom collisions. II. Final-state momentum distributions of the ionization products in collisions of He with bare carbon ions. *Phys. Rev. A*, 58:3626–3633, Nov 1998.
- [39] Lokesh C. Tribedi, P. Richard, L. Gulyás, and M. E. Rudd. Two-center effect on low-energy electron emission in collisions of 1-MeV/u bare ions with atomic hydrogen, molecular hydrogen, and helium: II.  $H_2$  and He. *Phys. Rev. A*, 63:062724, May 2001.
- [40] C. J. Wood, C. R. Feeler, and R. E. Olson. Projectile charge-state dependence on final-state momentum distributions for single ionization of helium. *Phys. Rev. A*, 56:3701–3709, Nov 1997.
- [41] R. E. Olson, C. J. Wood, H. Schmidt-Böcking, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Complete single-ionization momentum spectra for strong perturbation collisions. *Phys. Rev. A*, 58:270–279, Jul 1998.

- 
- [42] R. E. Olson and J. Fiol. Mapping of the Bethe surface in single-ionization ion-atom collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34(19):L625, 2001.
- [43] R. E. Olson and J. Fiol. Dynamics underlying fully differential cross sections for fast  $C^{6+} + He$  collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36(20):L365, 2003.
- [44] S. Otranto, R. E. Olson, and J. Fiol. Angular distributions and Dalitz plots for  $C^{6+}$  ionization of He. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39(7):L175, 2006.
- [45] J. Fiol, S. Otranto, and R. E. Olson. Critical comparison between theory and experiment for  $C^{6+} + He$  fully differential ionization cross sections. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39(14):L285, 2006.
- [46] R. Moshhammer, A. Perumal, M. Schulz, V. D. Rodriguez, H. Kollmus, R. Mann, S. Hagmann, and J. Ullrich. Three-body Coulomb problem probed by mapping the Bethe surface in ionizing ion-atom collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 87:223201, Nov 2001.
- [47] M. Schulz, R. Moshhammer, A. N. Perumal, and J. Ullrich. Triply differential single-ionization cross sections in fast ion-atom collisions at large perturbation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 35(7):L161, 2002.
- [48] D. Madison, M. Schulz, S. Jones, M. Foster, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Comparison of theoretical and absolute experimental fully differential cross sections for ion-atom impact ionization. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 35(15):3297, 2002.
- [49] M. Schulz, R. Moshhammer, D. Fischer, and J. Ullrich. Evidence for significant projectile-target nucleus scattering in single ionization of helium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36(19):L311, 2003.
- [50] D. Fischer, A. B. Voitkiv, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Three-body momentum exchange in singly ionizing 2-MeV/u  $C^{6+}$ -helium collisions. *Phys. Rev. A*, 68:032709, Sep 2003.
- [51] D. H. Madison, D. Fischer, M. Foster, M. Schulz, R. Moshhammer, S. Jones, and J. Ullrich. Probing scattering wave functions close to the nucleus. *Phys. Rev. Lett.*, 91:253201, Dec 2003.
- [52] M. Foster, D. H. Madison, J. L. Peacher, M. Schulz, S. Jones, D. Fischer, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Fully differential cross sections for  $C^{6+}$  single

- ionization of helium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(8):1565, 2004.
- [53] M. Schulz, R. Moshhammer, D. Fischer, and J. Ullrich. Two-particle versus three-particle interactions in single ionization of helium by ion impact. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(20):4055, 2004.
- [54] M. Dürr, B. Najjari, M. Schulz, A. Dorn, R. Moshhammer, A. B. Voitkiv, and J. Ullrich. Analysis of experimental data for ion-impact single ionization of helium with Monte Carlo event generators based on quantum theory. *Phys. Rev. A*, 75:062708, Jun 2007.
- [55] M. F. Ciappina, W. R. Cravero, and C. R. Garibotti. Post-prior discrepancies in the continuum distorted wave-eikonal initial state approximation for ion-helium ionization. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36(18):3775, 2003.
- [56] M. F. Ciappina and W. R. Cravero. Post-prior discrepancies in CDW-EIS calculations for ion impact ionization fully differential cross sections. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39(5):1091, 2006.
- [57] M. F. Ciappina and W. R. Cravero. Fully differential cross sections for  $C^{6+}$  single ionization of helium: the role of nucleus-nucleus interaction. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39(9):2183, 2006.
- [58] V. D. Rodriguez. CDW-EIS theoretical calculations of projectile deflection for single ionization in highly charged ion-atom collisions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 205(0):498 – 503, 2003. 11th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions.
- [59] F. Járαι-Szabó and L. Nagy. Semiclassical description of kinematically complete experiments. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40(21):4259, 2007.
- [60] W. Schmitt, R. Moshhammer, F. S. C. O'Rourke, H. Kollmus, L. Sarkadi, R. Mann, S. Hagmann, R. E. Olson, and J. Ullrich. Ultralow-energy electrons from fast heavy-ion helium collisions: The Target Cusp. *Phys. Rev. Lett.*, 81:4337–4340, Nov 1998.
- [61] J. Fiol and R.E. Olson. Correlation in fast collisions of highly charged ions with atoms. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 205(0):474 – 478, 2003. 11th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions.



- 
- [62] J. Fiol and R. E. Olson. Three- and four-body dynamics in fast heavy ion–atom ionization. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(19):3947, 2004.
- [63] R. E. Olson and J. Fiol. Extreme sensitivity of differential momentum transfer cross sections to target atom initial conditions. *Phys. Rev. Lett.*, 95:263203, Dec 2005.
- [64] M. Foster, D. H. Madison, J. L. Peacher, and J. Ullrich. Highly charged particle impact ionization of He. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(19):3797, 2004.
- [65] P. D. Fainstein and L. Gulyás. Three- and four-body dynamics in single ionization of He by swift highly charged Au<sup>53+</sup> ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 38(4):317, 2005.
- [66] R. T. Pedlow, S. F. C. O’Rourke, and D. S. F. Crothers. Fully differential cross sections for 3.6 MeV/u Au<sup>Z<sub>P</sub>+</sup> + He collisions. *Phys. Rev. A*, 72:062719, Dec 2005.
- [67] M. Schulz, M. Dürr, B. Najjari, R. Moshhammer, and J. Ullrich. Reconciliation of measured fully differential single ionization data with the first Born approximation convoluted with elastic scattering. *Phys. Rev. A*, 76:032712, Sep 2007.
- [68] M. McGovern, D. Assafrão, J. R. Mohallem, Colm T. Whelan, and H. R. J. Walters. Coincidence studies of He ionized by C<sup>6+</sup>, Au<sup>24+</sup>, and Au<sup>53+</sup>. *Phys. Rev. A*, 81:042704, Apr 2010.
- [69] M. McGovern, Colm T. Whelan, and H. R. J. Walters. C<sup>6+</sup>-impact ionization of helium in the perpendicular plane: Ionization to the ground state, excitation-ionization, and relativistic effects. *Phys. Rev. A*, 82:032702, Sep 2010.
- [70] J. Colgan, M. S. Pindzola, F. Robicheaux, and M. F. Ciappina. Fully differential cross sections for the single ionization of He by C<sup>6+</sup> ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44(17):175205, 2011.
- [71] M. Schulz, R. Moshhammer, D. Fischer, and J. Ullrich. Comment on “coincidence studies of he ionized by C<sup>6+</sup>, Au<sup>24+</sup>, and Au<sup>53+</sup> ”. *Phys. Rev. A*, 81:066701, Jun 2010.
- [72] K. A. Kouzakov, S. A. Zaytsev, Y. V. Popov, and M. Takahashi. Singly ionizing 100-MeV/amu C<sup>6+</sup> + He collisions with small momentum transfer. *Phys. Rev. A*, 86:032710, Sep 2012.

- [73] I. B. Abdurakhmanov, I. Bray, D. V. Fursa, A. S. Kadyrov, and A. T. Stelbovics. Fully differential cross section for single ionization in energetic  $C^{6+}$ -He collisions. *Phys. Rev. A*, 86:034701, Sep 2012.
- [74] H. R. J. Walters and Colm T. Whelan. Ionization of He by  $C^{6+}$ ,  $\bar{C}^{6-}$ ,  $e^-$ , and  $e^+$ . *Phys. Rev. A*, 85:062701, Jun 2012.
- [75] X. Wang, K. Schneider, A. LaForge, A. Kelkar, M. Grieser, R. Moshhammer, J. Ullrich, M. Schulz, and D. Fischer. Projectile coherence effects in single ionization of helium. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 45(21):211001, 2012.
- [76] Li Xia, Ma Xiao-Yan, Sun Shi-Yan, and Jia Xiang-Fu. Fully differential cross sections for  $C^{6+}$  single ionization of helium. *Chinese Physics B*, 21(11):113403, 2012.
- [77] D. Fischer, D. Globig, J. Goullon, M. Grieser, R. Hubele, V. L. B. de Jesus, A. Kelkar, A. LaForge, H. Lindenblatt, D. Misra, B. Najjari, K. Schneider, M. Schulz, M. Sell, and X. Wang. Ion-Lithium Collision Dynamics Studied with a Laser-Cooled In-Ring Target. *Phys. Rev. Lett.*, 109:113202, Sep 2012.
- [78] M. S. Pindzola, F. Robicheaux, and J. Colgan. Single and double ionization in  $C^{6+} + He$  collisions. *Phys. Rev. A*, 82:042719, Oct 2010.
- [79] M. S. Pindzola, F. Robicheaux, and J. Colgan. Double ionization of helium by fast bare ion collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40(10):1695, 2007.
- [80] L. Mandel and E. Wolf. *Optical Coherence and quantum optics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [81] K. N. Egodapitiya, S. Sharma, A. Hasan, A. C. Laforge, D. H. Madison, R. Moshhammer, and M. Schulz. Manipulating atomic fragmentation processes by controlling the projectile coherence. *Phys. Rev. Lett.*, 106:153202, Apr 2011.
- [82] T. Young. The bakerian lecture: On the theory of light and colours. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 92:12–48, 1802.
- [83] K. Schneider, M. Schulz, X. Wang, A. Kelkar, M. Grieser, C. Krantz, J. Ullrich, R. Moshhammer, and D. Fischer. Role of projectile coherence in close heavy ion-atom collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 110:113201, Mar 2013.

- 
- [84] T. Ferger. *Untersuchung der Mehr-Teilchen-Dynamik in Stößen von 200 keV  $H^-$  mit Helium und Aufbau eines kalten atomaren Wasserstofftargets für Ionisationsexperimente.* Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2006.
- [85] A. C. Laforge, K. N. Egodapitiya, J. S. Alexander, A. Hasan, M. F. Ciappina, M. A. Khakoo, and M. Schulz. Three-body dynamics in single ionization of atomic hydrogen by 75 keV proton impact. *Phys. Rev. Lett.*, 103:053201, Jul 2009.
- [86] B. Eike. *Laser-trapped atoms as a precision target for the heavy-ion storage ring TSR.* Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2002.
- [87] K. Schneider. *Dynamics in charge transfer and ionization processes in fast ion-helium collisions.* Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2012.
- [88] Steffen Wolf and Hanspeter Helm. Ion-recoil energy measurement in photoionization of laser-cooled rubidium. *Phys. Rev. A*, 56:R4385–R4388, Dec 1997.
- [89] M. van der Poel, C. V. Nielsen, M.-A. Gearba, and N. Andersen. Fraunhofer diffraction of atomic matter waves: Electron transfer studies with a laser cooled target. *Phys. Rev. Lett.*, 87:123201, Aug 2001.
- [90] J. W. Turkstra, R. Hoekstra, S. Knoop, D. Meyer, R. Morgenstern, and R. E. Olson. Recoil momentum spectroscopy of highly charged ion collisions on magneto-optically trapped Na. *Phys. Rev. Lett.*, 87:123202, Aug 2001.
- [91] X. Flechard, H. Nguyen, E. Wells, I. Ben-Itzhak, and B. D. DePaola. Kinematically complete charge exchange experiment in the  $Cs^+ + Rb$  collision system using a MOT target. *Phys. Rev. Lett.*, 87:123203, Aug 2001.
- [92] J. Steinmann. *Multiphoton Ionization of Laser Cooled Lithium.* Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2007.
- [93] J. Blicke, X. Flechard, A. Cassimi, H. Gilles, S. Girard, and D. Hennecart. A new magneto-optical trap-target recoil ion momentum spectroscopy apparatus for ion-atom collisions and trapped atom studies. *Review of Scientific Instruments*, 79(10):103102, 2008.
- [94] E. Rutherford. The scattering of alpha and beta particles by matter and the structure of the atom. *Phil. Mag.*, 21:669–688, 1911.
- [95] R. Moshhammer, J. Ullrich, M. Unverzagt, W. Schmidt, P. Jardin, R. E. Olson, R. Mann, R. Dörner, V. Mergel, U. Buck, and H. Schmidt-Böcking. Low-energy electrons and their dynamical correlation with recoil ions for single

- ionization of helium by fast, heavy-ion impact. *Phys. Rev. Lett.*, 73:3371–3374, Dec 1994.
- [96] M. Grieser et al. Storage ring at HIE-ISOLDE. *The European Physical Journal Special Topics*, 207(1):1–117, 2012.
- [97] M. Beutelspacher, H. Fadil, T. Furukawa, M. Grieser, A. Noda, K. Noda, D. Schwalm, T. Shirai, and A. Wolf. Electron cooling experiments at the heavy ion storage ring TSR. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 532(1–2):123 – 128, 2004. International Workshop on Beam Cooling and Related Topics.
- [98] A. Wolf et al. Experiments with highly-charged ions in the storage ring TSR. In *Supplement to Z. Phys. D - Atoms, Molecules and Clusters 21*, pages 69–75. Springer Verlag, Heidelberg, 1991.
- [99] S. Artikova. *Low-Energy Ions in the Heavy Ion Cooler Storage Ring TSR*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2012.
- [100] Max-Planck-Institut für Kernphysik. The Heidelberg Ion Beam Facilities. <http://www.mpi-hd.mpg.de/blaum/accelerators/index.de.html>. Accessed: May 2013.
- [101] R. Repnow, M. Goldschmidt, K. Haberkant, K.D. Hildenbrand, G. Hortig, E. Jaeschke, B. Martin, and R. Schulé. The Heidelberg MP tandem Van de Graaff. *Nuclear Instruments and Methods*, 122(0):179 – 189, 1974.
- [102] M. Beutelspacher. *Systematische Untersuchungen zur Elektronenkühlung am Heidelberger Schwerionenspeicherring TSR*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2000.
- [103] R. Moshhammer, M. Unverzagt, W. Schmitt, J. Ullrich, and H. Schmidt-Böcking. A  $4\pi$  recoil-ion electron momentum analyzer: A high-resolution microscope for the investigation of the dynamics of atomic, molecular and nuclear reactions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 108(4):425 – 445, 1996.
- [104] CERN. Non-evaporable getter (NEG) thin film coatings. <http://knowledgetransfer.web.cern.ch/technology-transfer/external-partners/non-evaporable-getter-neg-thin-film-coatings>. Accessed: May 2013.
- [105] M. Nofal et al. Radiative electron capture to the continuum and the short-wavelength limit of electron-nucleus bremsstrahlung in 90a MeV  $U^{88+}$  ( $1s^22s^2$ )+ $N_2$  collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 99:163201, Oct 2007.

- [106] L. Strüder et al. Large-format, high-speed, X-ray pnCCDs combined with electron and ion imaging spectrometers in a multipurpose chamber for experiments at 4th generation light sources. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 614(3):483 – 496, 2010.
- [107] W. C. Wiley and I. H. McLaren. Time-Of-Flight Mass Spectrometer With Improved Resolution. *Review Of Scientific Instruments*, 26(12):1150–1157, Dec 1955.
- [108] R. Dörner et al. Kinematically complete experiments using cold target recoil ion momentum spectroscopy. *Nuclear Instruments And Methods In Physics Research Section B*, 124(2-3):225–231, Apr 1997.
- [109] M. Sell. *Entwicklung, Aufbau und Test eines ortsempfindlichen Teilchendetektors zur Untersuchung von Stößen zwischen Ionen und lasergekühlten Atomen*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Bachelorarbeit, 2010.
- [110] D. Fischer. *Aufbau eines Reaktionsmikroskopes zur Untersuchung von Ion-Atom-Stößen*. Albrecht-Ludwigs-Universität, Freiburg, Diplomarbeit, 2000.
- [111] M. Schuricke. *Multiphoton Ionization of Lithium*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diplomarbeit, 2008.
- [112] GSI Darmstadt. Offizielle Homepage des Go4-Projektes an der GSI Darmstadt. <http://www-win.gsi.de/go4/>. Accessed: May 2013.
- [113] CERN. Root-Projektseite des CERN. <http://root.cern.ch/drupal/>. Accessed: May 2013.
- [114] D. Fischer. *Mehr-Teilchen-Dynamik in der Einfach- und Doppelionisation von Helium durch geladene Projektile*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2003.
- [115] L. Ph. H. Schmidt, T. Jahnke, A. Czasch, M. Schöffler, H. Schmidt-Böcking, and R. Dörner. Spatial imaging of the  $H_2^+$  vibrational wave function at the quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 108:073202, Feb 2012.
- [116] R. E. Grisenti and J. P. Toennies. Cryogenic microjet source for orthotropic beams of ultralarge superfluid helium droplets. *Phys. Rev. Lett.*, 90:234501, Jun 2003.
- [117] T. Jahnke et al. Experimental observation of interatomic coulombic decay in neon dimers. *Phys. Rev. Lett.*, 93:163401, Oct 2004.

- [118] J. Mukherjee, L. M. Gantayet, and S. A. Ahmad. Free jet expansion of atomic beam: Simulation studies of some parameters. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 33(11):1386, 2000.
- [119] Roger Campargue. *Atomic and Molecular Beams*. Springer Verlag, 2001. part II, chapter 4.
- [120] S. Cohen, M. M. Harb, A. Ollagnier, F. Robicheaux, M. J. J. Vrakking, T. Barillot, F. Lépine, and C. Bordas. Wave function microscopy of quasibound atomic states. *Phys. Rev. Lett.*, 110:183001, May 2013.
- [121] M. Schuricke. *Two and Three Photon Double Ionization of Lithium*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Dissertation, 2012.
- [122] A. Kastler. Quelques suggestions concernant la production optique et la détection optique d'une inégalité de population des niveaux de quantification spatiale des atomes. application à l'expérience de stern et gerlach et à la résonance magnétique. *J. Phys. Radium*, 11(6):255–265, 1950.
- [123] D. Wineland and H. Dehmelt. Proposed  $10^{14} \Delta\nu < \nu$  Laser Fluorescence Spectroscopy on  $Tl^+$  mono-ion oscillator. *Bulletin Of The American Physical Society*, 20:637, 1975.
- [124] T. W. Haensch and A. L. Schawlow. Cooling Of Gases By Laser Radiation. *Optics Communications*, 13(1):68–69, Jan 1975.
- [125] A. L. Migdall, J. V. Prodan, W. D. Phillips, T. H. Bergeman, and H. J. Metcalf. First Observation of Magnetically Trapped Neutral Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 54(24):2596–2599, Jun 1985.
- [126] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov. Optical Dipole Traps For Neutral Atoms. *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, 42:95–170, Feb 2000.
- [127] R. Hubele. *Implementation of an optical dipole trap for lithium*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diplomarbeit, 2009.
- [128] A. Ashkin. Trapping of Atoms by Resonance Radiation Pressure. *Phys. Rev. Lett.*, 40(12):729–732, Mar 1978.
- [129] H.J. Metcalf and P. van der Straten. *Laser Cooling and Trapping*. Springer Verlag, 1999.
- [130] W. D. Phillips. Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Review Of Modern Physics*, 70(3):721–741, Jul 1998.

- 
- [131] C. N. Cohen-Tannoudji and W. D. Phillips. New mechanisms for laser cooling. *Physics Today*, 43:33–40, October 1990.
- [132] E. L. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu, and D. E. Pritchard. Trapping of neutral sodium atoms with radiation pressure. *Phys. Rev. Lett.*, 59:2631–2634, Dec 1987.
- [133] R.C. Weat, M.J. Astle, and W.H. Beyer, editors. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Boca Raton, 64th edition edition, 1983.
- [134] National Institute of Standards and Technology-NIST. Atomic weights and isotopic compositions for all elements. <http://physics.nist.gov>. Accessed: May 2013.
- [135] National Institute of Standards and Technology-NIST. Nist atomic spectra database. <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>.
- [136] D. Das and V. Natarajan. Absolute frequency measurement of the lithium D lines: Precise determination of isotope shifts and fine-structure intervals. *Phys. Rev. A*, 75:052508, May 2007.
- [137] W. I. McAlexander, E. R. I. Abraham, and R. G. Hulet. Radiative Lifetime Of The  $^2P$  State Of Lithium. *Physical Review A*, 54(1):5–8, Jul 1996.
- [138] M.E. Gehm. *Preparation of an optically-trapped degenerate Fermi Gas of  $^6Li$ : Finding the route to degeneracy*. Department of Physics Duke University, Dissertation, 2003.
- [139] D. Chen, Z. Fang, H. Cai, and R. Qu. Polarization Characteristics of an External Cavity Diode Laser With Littman-Metcalf Configuration. *Photonics Technology Letters, IEEE*, 21(14):984–986, 2009.
- [140] Toptica. Brochure: Specifications and configurations of high power diode lasers and amplifiers. <http://www.toptica.com>. Accessed: May 2013.
- [141] Y. Xiong, S. Murphy, J. L. Carlsten, and K. Repasky. Design and characteristics of a tapered amplifier diode system by seeding with continuous-wave and mode-locked external cavity diode laser. *Optical Engineering*, 45(12):124205–124205–5, 2006.
- [142] W. D. Phillips and H. Metcalf. Laser deceleration of an atomic beam. *Phys. Rev. Lett.*, 48:596–599, Mar 1982.
- [143] B. Höltkemeier. *2D MOT as a source of a cold atom target*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diplomarbeit, 2011.

- [144] T. G. Tiecke, S. D. Gensemer, A. Ludewig, and J. T. M. Walraven. High-flux two-dimensional magneto-optical-trap source for cold lithium atoms. *Phys. Rev. A*, 80:013409, Jul 2009.
- [145] Müller-Alhorn. Kapton-Datenblatt. <http://www.mueller-ahlhorn.com/de/kapton>. Accessed: May 2013.
- [146] D. Globig. *A Laser Cooled Lithium Beam Source for the Loading of a Magneto-Optical Trap in a Reaction Microscope*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diplomarbeit, 2011.
- [147] C. J. Dedman, K. G. H. Baldwin, and M. Colla. Fast switching of magnetic fields in a magneto-optic trap. *Review of Scientific Instruments*, 72(11):4055–4058, 2001.
- [148] S. Chu, M.G. Prentiss, A.E. Cable, and J.E. Bjorkholm. Laser cooling and trapping of atoms. *Laser Spectroscopy VIII, proceedings of the eighth international confernece*, 22-26 June 1987.
- [149] V. S. Bagnato, N. P. Bigelow, G. I. Surdutovich, and S. C. Zílio. Dynamical stabilization: a new model for supermolasses. *Opt. Lett.*, 19(19):1568–1570, Oct 1994.
- [150] F. Servane. *The setup of a Magneto Optical Trap for the preparation of a mesoscopic degenerate Fermi gas*. Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diplomarbeit, 2007.
- [151] U. Schünemann, H. Engler, M. Zielonkowski, M. Weidemüller, and R. Grimm. Magneto-optic trapping of lithium using semiconductor lasers. *Optics Communications*, 158(1–6):263 – 272, 1998.
- [152] N. Amin, S. Mahmood, M. Saleem, M. A. Kalyar, and M. A. Baig. Photoionization cross-section measurements from the 2p, 3d and 3s excited states of lithium. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, 40(3):331–337, 2006.
- [153] C. N. Yang. On the angular distribution in nuclear reactions and coincidence measurements. *Phys. Rev.*, 74:764–772, Oct 1948.
- [154] Steven T. Manson and Anthony F. Starace. Photoelectron angular distributions: energy dependence for *s* subshells. *Rev. Mod. Phys.*, 54:389–405, Apr 1982.
- [155] S. N. Nahar and S. T. Manson. Photoelectron angular distribution of the excited  $2p^23p^2$  state of atomic nitrogen. *Phys. Rev. A*, 40:5017–5019, Nov 1989.



- 
- [156] N. Stoltherfoht, R.D. DuBois, and R.D. Rivarola. *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions*. Springer-Verlag, Volume 20 of Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, 1997.
- [157] M. E. Rudd, Y. K. Kim, D. H. Madison, and T. J. Gay. Electron production in proton collisions with atoms and molecules: energy distributions. *Rev. Mod. Phys.*, 64:441–490, Apr 1992.
- [158] J.J. Thomson. XLII. Ionization by moving electrified particles. *Philosophical Magazine Series 6*, 23(136):449–457, 1912.
- [159] Michal Gryziński. Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions. *Phys. Rev.*, 138:A336–A358, Apr 1965.
- [160] D. H. Lee, P. Richard, T. J. M. Zouros, J. M. Sanders, J. L. Shinpaugh, and H. Hidmi. Binary-encounter electrons observed at 0 degree in collisions of 1–2-MeV/amu  $H^+$ ,  $C^{6+}$ ,  $N^{7+}$ ,  $O^{8+}$ , and  $F^{9+}$  ions with  $H_2$  and He targets. *Phys. Rev. A*, 41:4816–4823, May 1990.
- [161] L. Vriens. Binary-encounter proton-atom collision theory. *Proc. Phys. Soc.*, 90:935–944, Apr 1967.
- [162] R. Moshhammer, P. D. Fainstein, M. Schulz, W. Schmitt, H. Kollmus, R. Mann, S. Hagmann, and J. Ullrich. Initial state dependence of low-energy electron emission in fast ion atom collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 83:4721–4724, Dec 1999.
- [163] J. H. McGuire. *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions*. Cambridge University Press, 1997.
- [164] P. D. Fainstein, L. Gulyas, F. Martin, and A. Salin. Angular asymmetry of low-energy electron emission in ion-atom collisions. *Phys. Rev. A*, 53:3243–3246, May 1996.
- [165] L. H. Andersen, P. Hvelplund, H. Knudsen, S. P. Møller, K. Elsener, K. G. Rensfelt, and E. Uggerhøj. Single and double ionization of helium by fast antiproton and proton impact. *Phys. Rev. Lett.*, 57:2147–2150, Oct 1986.
- [166] Kh. Khayyat et al. Differential cross sections in antiproton- and proton-helium collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 32(4):L73, 1999.
- [167] R. Moshhammer et al. Ionization of Helium in the Attosecond Equivalent Light Pulse of 1 GeV/Nucleon  $U^{92+}$  Projectiles. *Phys. Rev. Lett.*, 79:3621–3624, Nov 1997.

- [168] C.F. v. Weizsäcker. Ausstrahlung bei Stößen sehr schneller Elektronen. *Zeitschrift für Physik*, 88(9-10):612–625, 1934.
- [169] E. J. Williams. Nature of the high energy particles of penetrating radiation and status of ionization and radiation formulae. *Phys. Rev.*, 45:729–730, May 1934.
- [170] S. Sharma, A. Hasan, K. N. Egodapitiya, T. P. Arthanayaka, G. Sakhelashvili, and M. Schulz. Projectile coherence effects in electron capture by protons colliding with H<sub>2</sub> and He. *Phys. Rev. A*, 86:022706, Aug 2012.
- [171] A. B. Voitkiv and A. V. Koval'. Cross sections for hydrogen and helium ionization by impacts of fast highly charged ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 31(3):499, 1998.
- [172] A. B. Voitkiv and A. V. Koval'. Asymptotic scaling properties of atom multielectron ionization cross sections in atom - fast highly charged ion collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 29(13):2661, 1996.
- [173] M. B. Shah, D. S. Elliott, and H. B. Gilbody. Ionisation and charge transfer in collisions of H<sup>+</sup> and He<sup>2+</sup> with lithium. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 18(21):4245, 1985.
- [174] M. R. Fiori, G. Jalbert, C. E. Bielschowsky, and W. Cravero. Ionization of lithium by impact of fast bare ions. *Phys. Rev. A*, 64:012705, Jun 2001.
- [175] J. W. McConkey, A. Crowe, and M. A. Hender. Differential cross sections in the electron impact ionization of atoms and molecules. *Phys. Rev. Lett.*, 29:1–4, Jul 1972.
- [176] J. Ullrich, R. Moshhammer, M. Unverzagt, W. Schmidt, P. Jardin, R.E. Olson, R. Dörner, V. Mergel, and H. Schmidt-Böcking. Ionization collision dynamics in 3.6 MeV/u Ni<sup>24+</sup> on He encounters. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 98(1–4):375 – 379, 1995. The Physics of Highly Charged Ions.
- [177] A. Lahman-Bennani. Thirty years of experimental electron-electron (e,2e) coincidence studies: achievements and perspectives. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 123(2):365–376, May.
- [178] B.H. Bransden and C.J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Prentice Hall, 2003.
- [179] M.R.C. McDowell and J.P. Coleman. *Introduction to the theory of ion-atom collisions*. North-Holland Pub. Co., 1970.

- 
- [180] M.S. Schöffler. *Grundzustandskorrelationen und dynamische Prozesse untersucht in Ion-Helium-Stößen*. Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, Dissertation, 2006.
- [181] Michał Gryziński. Two-particle collisions. I. General relations for collisions in the laboratory system. *Phys. Rev.*, 138:A305–A321, Apr 1965.
- [182] Michał Gryziński. Two-particle collisions. II. Coulomb collisions in the laboratory system of coordinates. *Phys. Rev.*, 138:A322–A335, Apr 1965.
- [183] H. O. Folkerts, F. W. Blik, L. Meng, R. E. Olson, R. Morgenstern, M. V. Von Hellermann, H. P. Summers, and R. Hoekstra.  $\text{He}^{2+}$ –He collisions: One-electron capture and target-ion excitation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 27(15):3475, 1994.
- [184] L.L. Foldy and J.D. Walecka. On the theory of the optical potential. *Annals of Physics*, 54(3):447 – 504, 1969.
- [185] Dz. Belkic. A quantum theory of ionisation in fast collisions between ions and atomic systems. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 11(20):3529, 1978.
- [186] D. S. F. Crothers. Refined orthogonal variational treatment of continuum distorted waves. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 15(13):2061, 1982.
- [187] D. S. F. Crothers and J. F. McCann. Ionisation of atoms by ion impact. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 16(17):3229, 1983.
- [188] S. P. Lucey, J. Rasch, and Colm T. Whelan. On the use of analytic ansatz three-body wave functions in the study of (e, 2e) band related processes. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 455(1981):349–383, 1999.
- [189] C. W. McCurdy, M. Baertschy, and T. N. Rescigno. Solving the three-body coulomb breakup problem using exterior complex scaling. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(17):R137, 2004.
- [190] M. McGovern, D. Assafrão, J. R. Mohallem, Colm T. Whelan, and H. R. J. Walters. Differential and total cross sections for antiproton-impact ionization of atomic hydrogen and helium. *Phys. Rev. A*, 79:042707, Apr 2009.
- [191] M. McGovern, D. Assafrão, J. R. Mohallem, Colm T. Whelan, and H. R. J. Walters. Pseudostate methods and differential cross sections for antiproton ionization of atomic hydrogen and helium. *Phys. Rev. A*, 81:032708, Mar 2010.

- [192] M. S. Pindzola and D. R. Schultz. Time-dependent close-coupling method for electron-impact ionization of hydrogen. *Phys. Rev. A*, 53:1525–1536, Mar 1996.
- [193] J. Colgan and M.S. Pindzola. Application of the time-dependent close-coupling approach to few-body atomic and molecular ionizing collisions. *The European Physical Journal D*, 66(11):1–24, 2012.
- [194] A. C. LaForge, R. Hubele, J. Goullon, X. Wang, K. Schneider, V. L. B. de Jesus, B. Najjari, A B Voitkiv, M. Grieser, M. Schulz, and D. Fischer. Initial-state selective study of ionization dynamics in ion-Li collisions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 46(3):031001, 2013.
- [195] R. Hubele, A. LaForge, M. Schulz, J. Goullon, X. Wang, B. Najjari, N. Ferreira, M. Grieser, V. L. B. de Jesus, R. Moshhammer, K. Schneider, A. B. Voitkiv, and D. Fischer. Polarization and Interference Effects in Ionization of Li by Ion Impact. *Phys. Rev. Lett.*, 110:133201, Mar 2013.
- [196] N. Stolterfoht et al. Two- and three-body effects in single ionization of Li by 95MeV/u Ar<sup>18+</sup> Ions: Analogies with photoionization. *Phys. Rev. Lett.*, 80:4649–4652, May 1998.
- [197] J. A. Tanis et al. Production of Hollow Lithium by Multielectron Correlation in 95 MeV/nucleon Ar<sup>18+</sup> + Li Collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1131–1134, Aug 1999.
- [198] G. Sakhelashvili, A. Dorn, C. Höhr, J. Ullrich, A. S. Kheifets, J. Lower, and K. Bartschat. Triple coincidence ( $e, \gamma 2e$ ) experiment for simultaneous electron impact ionization excitation of helium. *Phys. Rev. Lett.*, 95:033201, Jul 2005.
- [199] S. Bellm, J. Lower, and K. Bartschat. Electron-impact ionization and excitation of helium to the  $n = 1 - 4$  ionic states. *Phys. Rev. Lett.*, 96:223201, Jun 2006.
- [200] J. M. Ngoko Djiokap, E. Fomouo, M. G. Kwato Njock, X. Urbain, and B. Piraux. Electron-impact ionization excitation of helium in the quasiphoton regime. *Phys. Rev. A*, 81:042712, Apr 2010.
- [201] O. Zatsarinny and K. Bartschat. Nonperturbative treatment of ionization with excitation of helium by electron impact. *Phys. Rev. Lett.*, 107:023203, Jul 2011.
- [202] A. Dorn, A. Elliott, J. Lower, E. Weigold, J. Berakdar, A. Engels, and H. Klar. Orientational dichroism in the electron-impact ionization of laser-oriented atomic sodium. *Phys. Rev. Lett.*, 80:257–260, Jan 1998.

- [203] Plasma Laboratory of Weizmann Institute of Science. R.D.Cowan's RCN code. <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/finalch/rcn.html>. Accessed: May 2013.
- [204] M. F. Ciappina, M. S. Pindzola, and J. Colgan. Fully differential cross section for  $O^{8+}$ -impact ionization of Li. *Phys. Rev. A*, 87:042706, Apr 2013.
- [205] Konstantin A. Kouzakov, Sergey A. Zaytsev, Yuri V. Popov, and Masahiko Takahashi. Reply to "comment on 'singly ionizing 100-mev/amu  $C^{6+} + He$  collisions with small momentum transfer'". *Phys. Rev. A*, 87:046702, Apr 2013.
- [206] Igor I. Sobel'man. *Introduction to the theory of atomic spectra*. Pergamon Press, 1972.
- [207] J. Walls, R. Ashby, J.J. Clarke, B. Lu, and W.A. van Wijngaarden. Measurement of isotope shifts, fine and hyperfine structure splittings of the lithium D lines. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, 22(2):159–162, 2003.
- [208] E. Arimondo, M. Inguscio, and P. Violino. Experimental determinations of the hyperfine structure in the alkali atoms. *Rev. Mod. Phys.*, 49:31–75, Jan 1977.
- [209] W. Demtroeder. *Experimentalphysik 3*. Springer Verlag, 2010.

