

# Fragmentierung diatomarer Moleküle durch langsame Streuprozesse

Achim Czasch

Institut für Kernphysik  
Frankfurt am Main

und

Lawrence Berkeley National Laboratory  
Berkeley, USA

November 1999

Orientierungsabhängige Fragmentierung  
von  $D_2$ -Molekülen durch Stoßprozesse mit  ${}^3He$   
bei einer Energie von  $3,3 \text{ keV/amu}$

Für meine Familie  
und Ariane, die  
ein Jahr lang auf  
mich gewartet hat

Atomare Einheiten	SI-Einheiten
1 <i>au</i> Energie	27,2 <i>eV</i>
1 <i>au</i> Geschwindigkeit	$2,1947 \cdot 10^6 \text{ m/s}$
1 <i>au</i> Impuls	$1,985 \cdot 10^{-24} \text{ kg m/s}$
1 <i>au</i> Masse	$\frac{1,6605}{1836} \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
1 <i>au</i> Länge	$0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
1.1	Vorwort . . . . .	7
1.2	Physikalischer Hintergrund . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Meßprinzip</b>	<b>15</b>
2.1	Begriffe und Definitionen . . . . .	15
2.2	Prinzip des Aufbaus . . . . .	16
2.3	Das Spektrometer . . . . .	18
2.4	Die Delayline-Detektoren . . . . .	19
2.5	Der Target-Jet . . . . .	21
2.6	Signalverarbeitung . . . . .	22
<b>3</b>	<b>Koordinatensystem und Formalismus</b>	<b>31</b>
3.1	Definition des Koordinatensystems . . . . .	31
3.2	Herleitung der Formeln . . . . .	32
3.3	Die Meßgenauigkeit des Systems . . . . .	40
<b>4</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>43</b>
4.0.1	Energiespektren . . . . .	43
4.0.2	Die Winkelverteilung im Impulsraum . . . . .	47
4.0.3	Die Streuung des Projektils . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Ein einfaches Modell</b>	<b>55</b>
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>61</b>
<b>A</b>	<b>Ergänzungen</b>	<b>65</b>
A.1	Interferenzeffekte . . . . .	66
A.2	Restgaseffekte . . . . .	68
A.3	Messung der Detektoreffizienz . . . . .	73



# Kapitel 1

## Einleitung und Hintergründe

### 1.1 Vorwort

Seit dem Beginn der Atomphysik haben im Bereich der experimentellen Techniken enorme Fortschritte stattgefunden. Zu der Spektralanalyse, die Rückschlüsse auf energetische Zustände innerhalb von Atomen ermöglichte, kam als weiteres wichtiges Prinzip das Streuexperiment hinzu, in dem ein Ziel - das sogenannte Target - mit Ionen, Elektronen oder Photonen beschossen wird. Hiermit konnten zunächst nur totale Wirkungsquerschnitte von Reaktionen gemessen werden. Ein Großteil der zugrunde liegenden Physik wird aber erst dann zugänglich, wenn mehrere Parameter gleichzeitig in Koinzidenz zueinander gemessen werden können, wie zum Beispiel Winkel- und Energieverteilungen. Das Fehlen von ortsauflösenden Teilchendetektoren stellte ein großes Problem dar: Es konnte nie der gesamte Orts- bzw. Impulsraum während eines Experiments erfaßt werden. Statt dessen wurden immer sehr kleine Ausschnitte nacheinander beobachtet, die zusammen dann den gewünschten Raumbereich abdeckten. Koinzidenzmessungen, d.h. zum Beispiel welche Korrelation besteht zwischen den Impulsen der beim Stoß beteiligten Teilchen, waren kaum möglich. Die Tatsache, daß jeweils nur ein kleiner Bereich des Ereignisraums zu einer Zeit vermessen werden konnte, hatte sehr lange Meßzeiten zur Folge, weshalb viele Experimente nicht realisiert werden konnten und die meisten interessantesten Fragestellungen zunächst unbeantwortet blieben. Eine Analogie ist ein Mannschaftsspiel, bei dem der Beobachter nur freien Blick auf jeweils einen kleinen Teil der Spielfläche hat. Anhand seiner Beobachtungen ist es ihm wahrscheinlich unmöglich, die Spielregeln zu rekonstruieren, da sie die Dynamik des ganzen Spiels bestimmen und nicht vollständig anhand der Bewegung eines einzelnen Spielers abgeleitet werden können. Mit der Entwicklung hochgenauer ortsempfindlicher Detektoren konnte eine Technik entwickelt werden, die die oben beschriebenen Probleme fast gänzlich hinter sich läßt. Mit der sogenannten COLTRIMS<sup>1</sup>-Technik kann im Grunde genommen der gesamte Phasenraum eines Streuexperiments für jede Reaktion individuell abgedeckt werden. Durch elektrische und magnetische

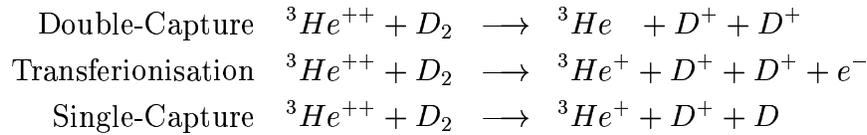
---

<sup>1</sup>Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy

Felder werden die Endprodukte der Streuexperimente auf ortsempfindliche Detektoren umgeleitet. Diese Projektion ermöglicht die Erfassung des gesamten Raumwinkels von  $4\pi$  mit Hilfe von nur ein bis zwei Detektoren. Mit dieser Technik wurden in den vergangenen Jahren erfolgreich viele Experimente durchgeführt. Es wurde vor allem Helium untersucht [19, 18, 47], da es das einfachste zwei-Elektronensystem ist. Als Projektil wurden Ionen und auch Photonen verwandt. In jüngerer Zeit wurde versucht, mit dieser Technik auch das Ionisationsverhalten von diatomaren Molekülen nach Beschuß mit Photonen zu untersuchen. Ebenfalls interessant sind Einfangs- und Transferionisationsmechanismen nach Reaktionen mit Ionen. Diese Experimente sind sehr kompliziert, da insgesamt bis zu fünf Teilchen orts- und zeitauflösend nachgewiesen werden müssen (zwei Elektronen, zwei Kerne und das Projektil). Die Messung des Streuwinkels des Projektils ist wichtig, da mit dieser Information direkt auf den Impulsübertrag auf den Massenschwerpunkt des Moleküls rückgeschlossen werden kann. In der vorliegenden Arbeit wird solch ein Experiment beschrieben. Es ist nicht das erste COLTRIMS-Experiment, in dem Stoßprozesse zwischen Molekülen und Ionen untersucht werden. I. Ali hat 1997 in Frankfurt im Rahmen seiner Dissertation [21] solch ein Multi-Hit-Experiment beschrieben. Die kinetische Energie des Projektils lag in seinem Experiment bei ca.  $200\text{ keV}$ , das heißt, die Passage des Projektils geschah so schnell, daß kaum Impuls zwischen Projektil und Massenschwerpunkt des Moleküls ausgetauscht werden konnte.

In dem Experiment, das Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist, wurde dagegen mit einer Projektilenergie von nur  $10\text{ keV}$  gearbeitet. Der Impulsübertrag zwischen Projektil und Molekül darf bei solch geringen Geschwindigkeiten nicht unberücksichtigt bleiben. Es handelt sich vielmehr um ein echtes Dreikörperproblem, dessen Dynamik die Ergebnisse des Experiments viel stärker beeinflusst, als dies bei höheren Projektilenergien der Fall ist. Auf diesen Umstand wird an gegebener Stelle zusammen mit einer Diskussion über das sogenannte Non-Franck-Condon-Verhalten (Kap. 4.0.1) eingegangen werden. Der grundlegende Unterschied zwischen dem hier vorgestellten Experiment und ähnlichen Experimenten mit schweren hochgeladenen Ionen besteht in der Abhängigkeit der Reaktionen vom Stoßparameter. Im Falle von schweren hochgeladenen Ionen finden die Elektronenübergänge zwischen Ziel und Projektil schon bei so großen Entfernungen statt, daß die Orientierung des Moleküls im Raum in einem Großteil der Reaktionen keine Rolle spielt. Im vorliegenden Experiment jedoch setzen die Reaktionen erst bei solch kleinen Stoßparameter zwischen dem  ${}^3\text{He}^{++}$ -Projektil und dem Molekül ein, daß das Projektil sogar in manchen Fällen zwischen den Moleküllernen hindurchfliegt. Ein weiterer Unterschied zwischen dem hier vorgestellten Experiment und ähnlichen Versuchen besteht in der Möglichkeit, die Streuebene des Projektils zu bestimmen. Während es bei Streuexperimenten mit schweren hochgeladenen Ionen als Projektile aufgrund ihrer Masse kaum möglich ist, den Streuwinkel des Projektils zu bestimmen, war diese Messung ein Teil des in dieser Arbeit besprochenen Experiments. Die in den letzten Abschnitten dargestellten Überlegungen bildeten den Anstoß für die vorliegende Arbeit.

Untersucht wurden die folgenden Reaktionen bei einer Projektilenergie von  $10\text{ keV}$ :



Nach der Ionisation des Moleküls wirkt sofort das repulsive Potential zwischen den Deuteriumkernen. Die Folge ist eine sogenannte Coulombexplosion im Falle, daß zwei  $D^+$ - Ionen entstehen (Double-Capture und Transferionisation) bzw. je nach Anregungsgrad eine Dissoziation des Moleküls im Fall von Single-Capture.

Die oben beschriebenen Reaktionskanäle unterscheiden sich grundlegend in der Anzahl der frei werdenden Deuteriumionen ( $D^+$ ) und neutralen Deuteriumatome ( $D$ ). Aus diesem Grund mußten zwei verschiedene Auswertungformalismen entwickelt werden. Die Präsentation der Ergebnisse ist in drei Teile untergliedert. Im ersten werden die Energiespektren der Coulombexplosionen diskutiert. Im zweiten und dritten Teil wird der Zusammenhang zwischen Ausrichtung des Moleküls, Stoßparameter und Streuung des Projektils beschrieben.

Der Hauptteil der Arbeit wird von einem Kapitel abgeschlossen, in dem ein einfaches, auf der klassischen Mechanik beruhendes Simulationsmodell des Streuprozesses beschrieben wird, das die experimentellen Ergebnisse und vor allem die Stoßkinetik besser verstehen hilft.

## 1.2 Der physikalische Hintergrund

Experimentelle Untersuchungen und theoretische Näherungsverfahren<sup>2</sup> für  $D_2$  ergeben, daß der mittlere Abstand der Kerne zueinander im energetischen Grundzustand ca. 0.741 Å beträgt [2]. Daraus folgt eine mittlere kinetische Energie von ca. 9,7 eV pro Fragment. Die Fragmente werden im Impulsraum demnach auf dem Rand einer Hohlkugel liegen, die einen Radius von ca. 50  $au$  hat.

Anhand des Experiments sollte untersucht werden, inwiefern die Wirkungsquerschnitte der Reaktionen und die Streuung des Projektils von der anfänglichen Ausrichtung des Moleküls und dem Stoßparameter abhängen.

Die Reaktion  $He^{++} + D_2$  hat mehrere Ausgangskanäle. Die folgende Tabelle faßt die Wirkungsquerschnitte ( $cm^2$ ) für die Reaktion mit  $H_2$  anstelle von  $D_2$  zusammen, wie sie Afrosimov et al. gemessen haben [1].

Für den Fall der Transferionisation, während der ein Elektron aus dem Molekül ins Kontinuum gehoben wird, ist nicht bekannt, wie die Reaktion zeitlich genau abläuft. Es kann sein, daß das Elektron schon während des Stoßes frei wird oder daß zunächst

---

<sup>2</sup>wie z.B. die LCAO („Linear combination of atomic orbitals“) oder Heitler-London-Näherung [48]

Endprodukte				Wirkungsquerschnitte [ $cm^2$ ] nach [1]
*	$H^+$	$H^+$	$He^0$	$1.7 \cdot 10^{-17}$
*	$H^+$	$H^+$	$He^+$ , $e^-$	$9 \cdot 10^{-17}$
	$H^+$	$H^0(0eV)$	$He^+$	$3 \cdot 10^{-18}$
*	$H^+$	$H^0$	$He^+$	$6 \cdot 10^{-17}$
	$H_2^+$	$He^+$		$1.7 \cdot 10^{-16}$
	$H^+$	$H^+$	$He^{++}$ , $2e^-$	$7 \cdot 10^{-19}$
	$H^+$	$H^0(0eV)$	$He^{++}$	$< 10^{-20}$
	$H^+$	$H^0(7eV)$	$He^{++}$	$7 \cdot 10^{-20}$
	$H_2^+$	$He^{++}$	$e^-$	$1 \cdot 10^{-17}$

Tabelle 1.1: Im vorliegenden Experiment wurden die mit (\*) markierten Kanäle untersucht. Die Tabelle soll einen Überblick über die Wirkungsquerschnitte geben. Es sind hierbei keine schwerwiegenden Unterschiede zwischen  $H_2$  und  $D_2$  zu erwarten, da die zusätzlichen Neutronen im  $D_2$  keinen Einfluß auf das Verhalten der Elektronen im Molekül haben. Unterschiede treten jedoch in den Vibrations- und Rotationszuständen der Moleküle auf.

ein Double-Capture-Prozeß abläuft und das Elektron später durch einen Augerzerfall emittiert wird.

## Abstandswellenfunktion und Energieverteilung

Abbildung 1.1 zeigt die Potentialkurven eines  $D_2$ -Moleküls im Grundzustand und in den ionisierten Zuständen. Es sind nicht alle Kurven dargestellt. Zwischen den beiden unteren Kurven zum Beispiel liegt eine ganze Kurvenschar, die durch verschieden starke Anregungen des ersten Deuteriumatoms entsteht. In der Abbildung sind z.B. nur die beiden Grenzkurven - keine Anregung zum einen und vollständige Ionisation zum anderen - dargestellt und nicht die dazwischenliegende Kurvenschar.

Dem Franck-Condon-Prinzip zufolge geschieht der Elektronentransfer bei solchen Kollisionen so schnell, daß der Zustand des Systems von der unteren in eine der oberen Kurven überwechselt, ohne daß sich der Kernabstand während dessen ändern konnte. Aufgrund der niedrigen internen Temperatur des Gasjets nach der Überschallexpansion liegen die Moleküle hauptsächlich im Vibrationsgrundzustand vor. In dieser Region kann die Potentialkurve durch ein harmonisches Potential angenähert werden. Die Ortswahrscheinlichkeitsfunktion des quantenmechanischen harmonischen Oszillators bildet im Grundzustand eine Gaußkurve  $P(r)$  um den Abstandsmittelwert  $r_0 = 0,741 \text{ \AA}$  mit einem für diesen Zustand charakteristischem Sigma von  $\sigma = 0,074 \text{ \AA}$  [2]. Damit läßt sich die zu erwartende Energieverteilung  $N(E)$  berechnen:

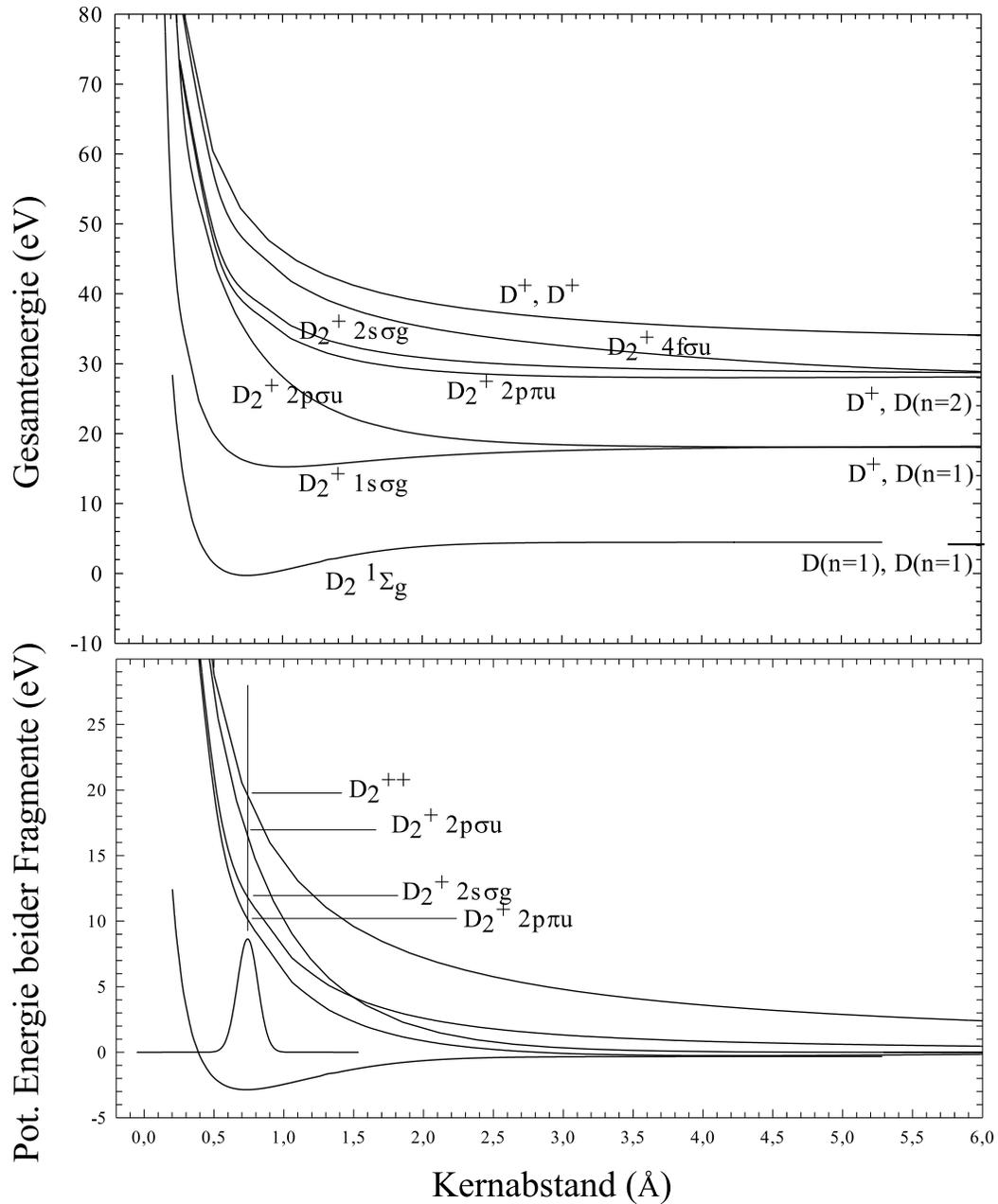


Abbildung 1.1: Dargestellt sind verschiedene Zustände eines  $D_2$ -Moleküls nach [6]. In der unteren Darstellung sind die Kurven vertikal verschoben, so daß die asymptotischen Energien auf einem Niveau liegen. Dadurch kann die Gesamtenergie der Coulombexplosion direkt abgelesen werden. Die Gaußkurve stellt die theoretische [2] Wahrscheinlichkeitsdichte der Abstandswellenfunktion des  $D_2$ -Moleküls dar.

Mit

$$E(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} \implies r(E) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot E} \quad (1.1)$$

und

$$P(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r-r_0}{\sigma}\right)^2} \quad (1.2)$$

ergibt sich

$$N(E) = P\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot E}\right) \quad (1.3)$$

Die Abbildung 1.2 zeigt die Verteilung, die im Experiment zu erwarten ist. Es handelt sich um keine reine Gaußfunktion mehr, wie anhand der Gleichung und der rechten Seite der Kurve zu sehen ist.

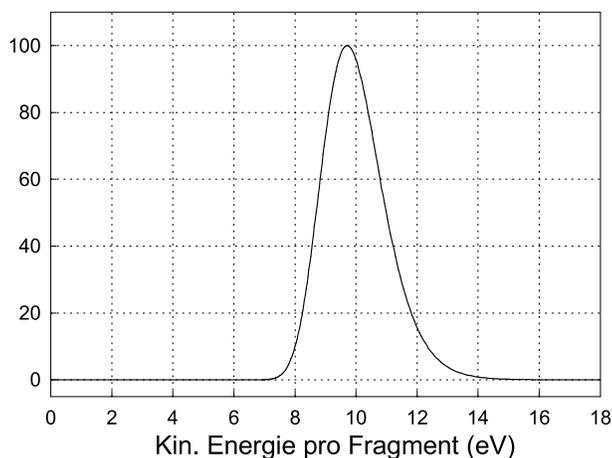


Abbildung 1.2: Theoretisch berechnetes Energiespektrum einer Coulombexplosion

## Energetische Zustände und die Bedeutung des Q-Werts

Aufgrund der Energieerhaltung muß die Gesamtenergie der Endprodukte der Reaktion gleich der anfänglichen Energie des Gesamtsystems sein. Ändern sich die Bindungsenergien der Elektronen, so muß sich diese Differenz in einer Änderung der kinetischen Energie der Reaktionsendprodukte widerspiegeln.

Der Q-Wert einer Reaktion bezeichnet die Änderung der Summe der Bindungsenergien der Elektronen durch die Reaktion und ist somit ein Maß für die Inelastizität des Stoßes. Die Energie hierzu wird der kinetischen Energie des Projektils entnommen<sup>3</sup>. Für die im Experiment vorliegenden Energieverhältnisse von ca.  $|Q| < 50 \text{ eV}$  und einer kinetischen Energie des Projektils von ca.  $E_P = 10 \text{ keV}$  gilt für die Änderung des

<sup>3</sup>siehe [18] Kap. 3 Seite 21

Longitudinalimpuls des Projektils in recht guter Näherung  $\Delta P_P \approx \frac{Q}{V_P}$  mit  $V_P$  für die anfängliche Geschwindigkeit des Projektils.

Im Double-Capture-Kanal ist nur die Reaktion  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \longrightarrow {}^3\text{He} + \text{D}^+ + \text{D}^+$  möglich. Infolge der Coulombexplosion erhalten die beiden Deuterium-Ionen eine kinetische Energie, deren Verteilung ihr Maximum bei  $9,7 \text{ eV}$  pro Ion hat. Der Q-Wert ( $-47,35 \text{ eV}$ ) dieser Reaktion ist die Differenz zwischen der Energie, die benötigt wird, um die beiden Elektronen des Moleküls ins Kontinuum zu heben ( $31,65 \text{ eV}$ ) und der durch den Einfang der Elektronen in die K-Schale des Heliumatoms frei werdenden Energie ( $79 \text{ eV}$ ).

Im Falle der Transferionisation  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \longrightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$ , in der zwei Deuterium-Ionen frei werden, ergibt sich ein Q-Wert von  $-22,75 \text{ eV}$ , da nur ein Elektron eingefangen wird. Die kinetische Energie der  $\text{D}^+$ -Ionen ist mit  $9,7 \text{ eV}$  die gleiche wie in der Double-Capture-Reaktion.

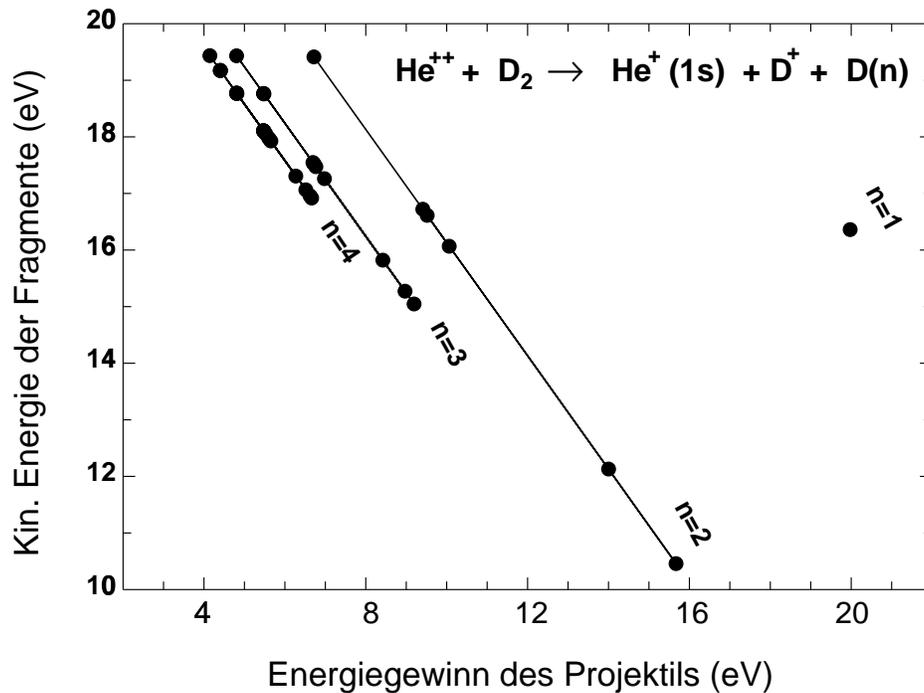


Abbildung 1.3: Zusammenhang zwischen Q-Wert, kinetischer Gesamtenergie der Fragmente (vertikale Achse) und Energieniveau des neutralen Deuteriumatoms für die Reaktionen  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \longrightarrow {}^3\text{He}^+(1s) + \text{D}^+ + \text{D}(n)$ . Bei der kinetischen Gesamtenergie handelt es sich jeweils um die Position der Maxima im Energiespektrum. Um jedes dieser Maxima befindet sich eine Verteilung der Form 1.2. Das vollständige Energiespektrum der Reaktion wird aus diesem Grund keine scharf voneinander getrennte Peaks aufweisen, da die einzelnen Energieverteilungen ineinander übergehen (siehe Darstellung 4.2).

Die oben angeführten Werte sind die Q-Werte der Reaktionen, bei denen die Elektronen immer in den tiefstmöglichen Energiezustand (K-Schale) fallen. Es kann jedoch auch geschehen, daß die Reaktionspartner nach der Reaktion angeregt sind. In diesen Fällen ergeben sich kleinere Q-Werte. Für die Single-Capture-Reaktionen in den  $1s$ -Zustand des Projektils ist der Zusammenhang zwischen Q-Wert, kinetische Endenergie der Fragmente und Energieniveau des neutralen Deuteriumatoms in Abbildung 1.3 dargestellt. Die Q-Werte der Reaktionen werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit keine große Rolle spielen. Bei der Analyse der Daten müssen sie jedoch berücksichtigt werden.

## Der Zusammenhang zwischen Streuwinkel und Stoßparameter

In Experimenten, in denen ein einatomiges Target beschossen wird, gibt es die Regel<sup>4</sup>, daß der Streuwinkel des Projektils größer wird, wenn der Stoßparameter abnimmt, da ein kleiner Stoßparameter einen großen Impulsübertrag zur Folge hat.

Im vorliegenden Experiment ist dieser Zusammenhang auch im Rahmen der klassischen Mechanik nicht mehr eindeutig, da es sich bei den Reaktionen um ein Drei-Körper-Problem handelt. Genauer gesagt gibt es immer zwei mögliche Passagen durch das Molekül, die den gleichen Streuwinkel des Projektils ergeben. Der genaue Zusammenhang ist kompliziert und soll deshalb zusammen mit dem weiter unten angeführten Modell in Kapitel 5 auf Seite 59 diskutiert werden.

---

<sup>4</sup>innerhalb ihrer durch quantenmechanische Gesetzmäßigkeiten bestimmten Gültigkeitsgrenzen (siehe Kapitel 5 Seite 59 f.)

# Kapitel 2

## Das Meßprinzip

Für das Verständnis der nachfolgenden Beschreibung des Experimentaufbaus ist die Klärung einiger oft vorkommender Begriffe notwendig.

### 2.1 Begriffe und Definitionen

**Ereignis, Event:** Eine einzelne Reaktion zwischen dem Projektil und einem  $D_2$ -Molekül.

**TDC:** Time to Digital Converter. Ein Gerät, das Zeitspannen zwischen elektrischen Signalen mißt und in Zahlenwerte umwandelt, die es dann in einem Speicher ablegt.

**Eventauslese:** Auf ein bestimmtes Signal hin (das Common-Stop-Signal) stoppt der TDC die Konvertierung und gibt die gesammelten Daten an ein anderes Modul weiter.

**Recoil-Ionen, Fragmente:** Die Teile des  $D_2$ -Moleküls, die aufgrund der Reaktion einen Rückstoß erhalten und durch das elektrische Feld innerhalb des Spektrometers auf den Recoil-Detektor geleitet werden.

**Projektil:** Im Experiment wurden in der Ionenquelle  $^3He$ -Ionen erzeugt, auf eine kinetische Energie von  $10\text{ KeV}$  beschleunigt und auf das Target geschossen.

**Target-Jet:** Das Ziel, im vorliegenden Fall  $D_2$ -Moleküle. Die  $D_2$ -Moleküle werden als dünner Gasstrahl durch die Versuchskammer geleitet. Näheres dazu in Kap. 2.5

**Zeitsignal:** Ein vom Detektor ausgehender Puls, der signalisiert, daß er ein Teilchen nachgewiesen hat. Es ist ein reines Signal in der Zeit. Die Ortsinformation wird von der Delayline-Anode geliefert.

**Transversalimpuls:** Der durch die Reaktion zwischen Projektil und Molekülschwerpunkt ausgetauschte Impuls  $\vec{P}_\perp$  in der  $\vec{x} \times \vec{y}$ -Ebene<sup>1</sup>. Die entsprechende Größe in Strahlrichtung wird Longitudinalimpuls genannt.

---

<sup>1</sup>Transversalebene senkrecht zum Projektilstrahl, siehe Abb. 3.1 auf Seite 31

## 2.2 Das Prinzip des Aufbaus

Der folgende Abschnitt skizziert den Aufbau des Experiments. Auf die einzelnen Komponenten wird danach separat eingegangen werden.

Die Heliumionen wurden in der Ionenquelle erzeugt, auf  $10\text{ keV}$  kinetische Energie beschleunigt<sup>2</sup> und in die Hauptkammer des Experiments geleitet. Das Target war ein dünner  $D_2$ -Gasjet, der vom Boden der Kammer aus nach oben zum Jetdump führte. Der Jetdump ist eine rohrförmige Vorrichtung, die den Gasjet möglichst effektiv auffangen soll, damit das Vakuum der Versuchskammer nicht verunreinigt wird. Um die bei der Reaktion frei werdenden Ionen (Recoils) nachzuweisen, mußten sie mit Hilfe eines möglichst homogenen elektrischen Feldes auf einen Detektor geleitet werden. Das elektrische Feld wurde mit Hilfe des Spektrometers erzeugt, in dessen Zentrum sich die Kollisionszone zwischen Projektilstrahl und Target-Jet befand. Das Spektrometer be-

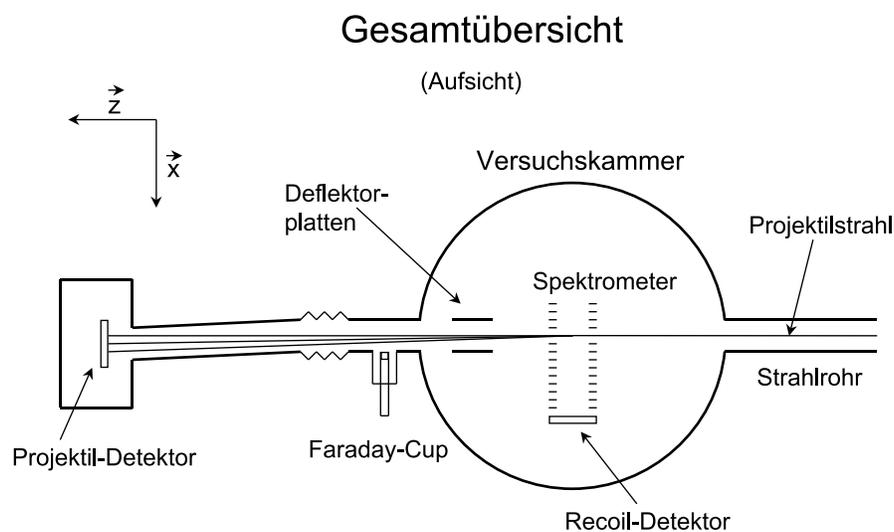


Abbildung 2.1: Der von der Ionenquelle kommende Projektilstrahl tritt in die Versuchskammer ein und wird nach Passieren des Spektrometers mit Hilfe von zwei elektrostatischen Deflektorplatten nach Ladungszuständen getrennt. Durch Anpassen des Deflektorfeldes und Versetzen des Projektildetektors konnten die Ladungszustände sehr gut voneinander getrennt werden.

steht im wesentlichen aus Kupferrahmen, die über eine Widerstandskette miteinander verbunden sind. Dadurch läßt sich ein ausreichend homogenes elektrisches Feld mit konstanter Feldstärke erzeugen. Das Feld muß ausreichend stark sein, damit alle Ionen auf dem Detektor auftreffen. Anhand der Orts- und Flugzeitinformation der Fragmente kann auf die ursprüngliche Orientierung des Moleküls im Laborsystem rückgeschlossen werden. Das Projektil wurde auf einem zweiten Detektor nachgewiesen. Die Richtung und Größe des transversalen Impulsübertrags zwischen Molekül und Projektil konnte

<sup>2</sup> $10\text{ keV}$  entsprechen für  ${}^3\text{He}$  ca.  $8 \cdot 10^5\text{ m/s}$  bzw.  $0,365\text{ au}$  Geschwindigkeit

so direkt ermittelt werden. Mit Hilfe von elektrostatischen Deflektor-Platten hinter dem Spektrometer wurden die verschiedenen Reaktionsausgangskanäle separiert, die zu einem neutralen  $He$ -Atom (Double-Capture) oder zu einem einfach geladenen  $He^+$ -Ion (Transferionisation oder Single-Capture) führen.

## Die Ionenquelle AEER

Die Abkürzung AEER steht für „Advanced Electron Cyclotron Resonance“. Es existieren mehrere verschiedene Typen von Ionenquellen. Zwei Merkmale sind für Ionenquellen entscheidend: Die Stärke des produzierten Ionenstroms und die Höhe des Ionisationsgrades, d.h. konkret bis zu welchem Element im Periodensystem eine vollständige Ionisation erzeugt werden kann. Neben den ECRs gibt es z.B. die EBITs<sup>3</sup>. Beide Verfahren haben gemeinsam, daß innerhalb der Quelle ein Plasma erzeugt wird, in dem den Ionen durch Kollisionen mit anderen Teilchen im Plasma sukzessiv Elektronen entzogen werden. Um das zu erreichen, müssen die Ionen über einen ausreichend großen Zeitraum hinweg im Plasma eingeschlossen werden. Der Einschluß<sup>4</sup> wird durch Magnetfelder realisiert. Im Fall der EBIT werden die Ionen durch die Raumladung eines dichten Elektronenstrahls festgehalten. In der ECR wird das solenoidförmige Feld durch Magnetspulen oder Permanentmagneten erzeugt. Elektrisch geladene Teilchen, deren Geschwindigkeiten eine Komponente transversal zum Magnetfeld aufweisen, bewegen sich auf Kreis- bzw. Spiralbahnen um die Magnetfeldlinien herum. Die Umlauffrequenz wird Zyklotronfrequenz genannt und ist abhängig von der Stärke des Magnetfeldes, der Masse und der Ladung des Teilchens, was sich leicht durch Gleichsetzen der Terme für die Lorentzkraft und die Zentripetalkraft ergibt.

$$m \frac{v_{\perp}^2}{r} \stackrel{!}{=} q v_{\perp} B \quad \Longrightarrow \quad \omega = \frac{q B}{m} \quad (2.1)$$

Durch Anlegen eines Mikrowellenfeldes mit genau dieser Frequenz kann den Teilchen Rotationsenergie hinzugefügt werden. In der ECR werden die Elektronen im Plasma durch diesen Effekt beschleunigt und heizen damit das Plasma. Manche Ionen überwinden die Potentialschwelle am Rand der Fallenregion und werden anschließend beschleunigt.

## Die Strahlführung bis zum Spektrometer

Die Strahlgeometrie- und Divergenz wurde durch zwei ca. 80 cm voneinander entfernten angebrachten Kollimatoren bestimmt. Die Kollimatorblenden wurden in jede Richtung um 0,5 mm geöffnet. Der letzte Kollimator befand sich 1,3 m vom Targetjet entfernt, d.h. der Querschnitt des Strahls wird an dieser Stelle ca. 4 mm<sup>2</sup> betragen

<sup>3</sup>für „Electron Beam Ion Trap“

<sup>4</sup>in der Fachliteratur „confinement“ genannt

haben. Um die Strahlrichtung hinter den Kollimatoren beeinflussen zu können, waren zwischen Hauptkammer und dem letzten Kollimator zwei Deflektorplatten und zwei Magnetspulen angebracht worden. Die Deflektorplatten erzeugten ein von außen steuerbares elektrisches Feld, mit dem die Richtung des Ionenstrahl horizontal beeinflusst werden konnte. Die Magnetspulen ermöglichten die vertikale Steuerung.

## 2.3 Das Spektrometer

Die bei der Reaktion im Target-Jet frei werdenden Recoil-Ionen bilden im Impulsraum eine kugelförmige Verteilung. Das Spektrometer dient dazu, diese Sphäre auf den Recoil-Detektor zu projizieren. Der Aufbau des Spektrometers ist in Abbildung 2.2 skizziert. Hauptbestandteil des Spektrometers waren 25 quadratische Kupferrah-

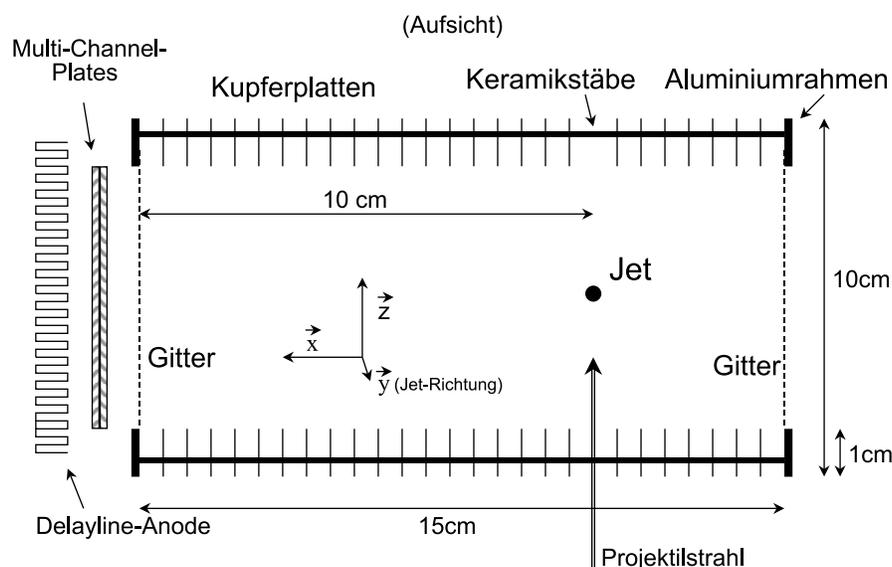


Abbildung 2.2: Das Spektrometer besteht aus quadratischen Kupferplatten, die durch vier Keramikstäbe fixiert werden.

men mit einer Kantenlänge von  $10\text{ cm}$  und einer Dicke von  $0,5\text{ mm}$ , die in einem Abstand von jeweils  $0,5\text{ cm}$  voneinander montiert wurden. Das Spektrometer wurde auf seiner Länge durch vier Keramikstäbe zusammengehalten. In den Kupferrahmen war jeweils ein Loch mit einem Durchmesser von  $8\text{ cm}$  ausgefräst worden, um den Durchflug der Fragmente zu ermöglichen. Die Kupferplatten waren durch eine Widerstandskette elektrisch miteinander verbunden, um im Innenraum das gewünschte elektrische Feld zu erzeugen.

Über den gesamten Bereich des Spektrometers wurde ein elektrisches Feld von ca.  $E = 51\text{ V/cm}$  angelegt. Eine lange Flugzeit der Fragmente erhöht die Auflösung in Ort und

Zeit. Um das zu erreichen, sollte das Feld so schwach wie möglich gehalten werden. Es muß jedoch sichergestellt sein, daß auch wirklich alle Ionen auf den Detektor geleitet werden. Dieser Umstand begrenzt die Stärke des Feldes nach unten. Es gab keine sogenannte Drift-Region<sup>5</sup>. Die Flugstrecke innerhalb des Spektrometers wurde durch ein feines Drahtnetz abgeschlossen, damit die Feldkonfiguration am Spektrometerausgang nicht durch Linseneffekte gestört wird. Der Teil des Spektrometers, der dem Recoil-Detektor gegenüber lag, wurde auf ein Potential von  $0\text{ V}$  gelegt. Das Gitter auf der Detektorseite lag auf einem Potential von  $-765\text{ V}$  relativ zur Erde. In ca.  $0,5\text{ cm}$  Entfernung dazu befand sich die Oberfläche des ersten Multichannel-Plates, das auf ca.  $-2000\text{ V}$  gegenüber Erde gelegt wurde. Die hintere Seite der Channel-Plates war geerdet, um innerhalb der Kanäle eine Beschleunigungsspannung für die Elektronenlawinen zu erzeugen. Das Potential der Drahtebenen wurde auf ca.  $+150\text{ V}$  eingestellt, um eine Fokussierung der aus den Kanälen austretenden Elektronenwolke zu bewirken.

## 2.4 Funktionsprinzip der verwendeten Delayline-Detektoren

Bei dieser Art Experiment werden an die Detektoren sehr hohe Anforderungen gestellt. Sie sollen einzelne Ionen oder Elektronen mit sehr niedrigen Energien von einigen hundert Elektronenvolt in Ort und Zeit sehr genau bei Raten bis zu  $100\text{ KHz}$  detektieren können. Bei Delayline-Detektoren hängt die erreichte Genauigkeit der Messung weniger vom Detektor selbst, als von der signalverarbeitenden Elektronik, insbesondere den TDCs, ab. Delayline-Detektoren bestehen aus zwei voneinander getrennten Einheiten - den Multi-Channel-Plates (MCPs) und der Delayline-Anode.

### Die Multi-Channel-Plates

Die MCP sind Sekundärelektronenvervielfacher, die auch in üblichen Photomultipliern verwendet werden. Die aus Bleiglas bestehenden Plates sind üblicherweise ca.  $1\text{ mm}$  dick und variieren im Durchmesser zwischen  $4\text{ cm}$  und  $10\text{ cm}$ . Sie sind von ca.  $10\text{ }\mu\text{m}$  bis  $40\text{ }\mu\text{m}$  breiten Röhren durchzogen, deren Wände mit einem Material überzogen sind, das sich durch eine sehr geringe Austrittsarbeit für Elektronen auszeichnet<sup>6</sup>. Ca.  $60\%$  der Oberfläche eines MCP bestehen aus diesen Röhren. Trifft ein Teilchen in eine dieser Röhren, so wird es in einem sehr flachen Winkel auf die Innenseite der Röhre einschlagen und dabei Sekundärelektronen produzieren. Diese Elektronenwolke wird durch ein das gesamte Channelplate durchdringendes elektrisches Feld entlang der Röhre beschleunigt und erzeugt durch Wiederholung des Prozesses weitere freie Elektronen. Die Verstärkung eines einzelnen Channelplates beträgt ca.  $5$

---

<sup>5</sup>Feldstärke  $E = 0$

<sup>6</sup>z.B. Cäsiumjodid, Magnesiumfluoride- oder oxide, Kupferjodid und Gold

$\cdot 10^3$  bis  $5 \cdot 10^4$  je nach Kanallänge. Durch Hintereinanderschalten mehrerer MCPs läßt sich dieser Faktor entsprechend potenzieren. Bei Konfigurationen mit zwei MCPs wird von einer Chevron-Anordnung gesprochen, bei dreien von einer Z-Stack-Anordnung. Bei der letztgenannten wird schon eine Sättigung der Verstärkung erreicht. Das homogene elektrische Feld innerhalb der MCPs wird durch Anlegen einer Spannung von üblicherweise ca.  $1\text{ kV}$  pro MCP an die mit einem leitenden Material überzogenen Oberflächen erzeugt. Der Prozeß, während dessen die Ladungswolke innerhalb des Kanals abläuft, erzeugt eine kurzzeitige Schwankung der Oberflächenladung auf den MCPs. Dieses Signal kann verstärkt und als sogenanntes Zeitsignal verwandt werden. Es gibt Auskunft über den Zeitpunkt des Auftreffens des Teilchens, enthält aber keinerlei Ortsinformation. Zu diesem Zweck wird die hinter dem MCP liegende Delayline-Anode benötigt.

## Die ortsempfindlichen Delayline-Anoden

Es folgt eine sehr vereinfachte Darstellung des Funktionsprinzips von Delaylinedetektoren. Je nach Material eines Drahtes und der Dielektrizitätskonstanten seiner Umgebung, verlaufen elektrische Signale mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Ist diese Geschwindigkeit bekannt, so kann anhand der Laufzeit eines Signals auf den Erzeugungsort auf dem Draht rückgeschlossen werden. Dabei ist die Summe der Laufzeiten an beiden Drahtenden immer konstant - unabhängig vom Ort des Auftreffens. Die Zeitsumme kann demnach als Kriterium benutzt werden, ob die Signale an den beiden Drahtenden auch wirklich zu ein und demselben Ereignis gehören. Um die gesamte Fläche des Detektors abzudecken, wird der Draht um einen Keramikrahmen gewickelt, so daß ein Signal einen langen Weg zurücklegt, ehe es die aktive Fläche der Anode verläßt (siehe Abbildung 2.3). Die Laufzeiten eines Signals reichen von  $0\text{ ns}$  bis

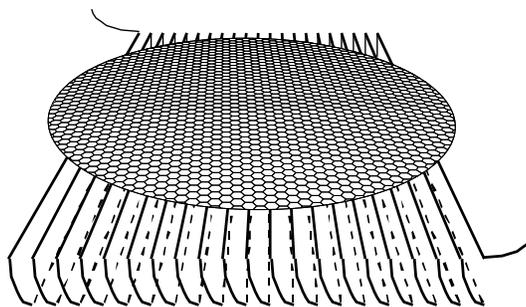


Abbildung 2.3: Eine der zwei Drahtebenen der Delayline-Anode für eine Raumkoordinate.

ca.  $80\text{ ns}$ . Die Signale werden von den aus den MCPs austretenden Ladungswolken in die Delayline-Drähte induziert. In Wirklichkeit handelt es sich bei den Drähten jeweils um ein Drähtepaar, das zusammen eine Lecherleitung bildet, um die Weiterleitung des Signals zu ermöglichen. Darauf und auf den komplizierten Ablauf der Signalbildung auf den Drähten soll an dieser Stelle nicht weiter eingegangen werden, da hier nur

das Funktionsprinzip der Anoden skizziert werden sollte<sup>7</sup>. Eine Drahtebene liefert die Ortsinformation in einer Dimension, d.h. es sind mindestens zwei orthogonal zueinander verlaufende Drahtebenen notwendig, was pro detektiertem Teilchen insgesamt vier Signale ergibt. Die genaue Vorgehensweise bei der Auswertung dieser Signale wird in Sektion 2.6 beschrieben werden.

## Das Projektil ${}^3\text{He}^{++}$

Um eine hohe Winkelauflösung auf dem Projektildetektor zu erreichen, muß der Bereich, in dem die Projektile auftreffen, sehr großflächig sein. Je niedriger die Projektilgeschwindigkeit, desto größer wird bei gegebenem Transversalimpuls die Streuung sein. Es konnte keine niedrigere Projektilgeschwindigkeit als  $10\text{ keV}$  gewählt werden, da die verwandte Ionenquelle unterhalb einer Beschleunigungsspannung von  $10\text{ kV}$  nicht mehr optimal arbeitet. Die Wahl fiel deshalb mit  ${}^3\text{He}$  auf ein leichteres Projektil, das bei gleichem Transversalimpuls eine größere Auslenkung erfährt. Bei gleichbleibender kinetischen Energie wird  ${}^3\text{He}$  im Vergleich zu  ${}^4\text{He}$  eine um das  $\sqrt{4/3}$ -fache höhere Geschwindigkeit besitzen, was zunächst einer größeren Ablenkung entgegenwirkt. Bei gleichem Transversalimpuls jedoch gelangt man letztendlich zu einer um den Faktor  $\sqrt{4/3} \approx 15\%$  größeren Auslenkung.

## 2.5 Der Target-Jet

In Abbildung 2.4 ist schematisch ein Schnitt durch das Jet-System dargestellt. Das Jetgas ( $D_2$ ) wird durch eine Düse geleitet und breitet sich anschließend mit Überschallgeschwindigkeit aus. Ca.  $1\text{ cm}$  oberhalb der Düse befindet sich der trichterförmige Skimmer, der einen Teil des Gasstroms herausschält. Der Teil des Gases, der die Skimmeröffnung passiert hat, muß nochmals durch eine kleine Öffnung treten und gelangt dann in die Hauptkammer. Für eine ausführliche Beschreibung des Jetsystems und der Spektrometertechnik sei auf die hervorragenden Arbeiten von O. Jagutzki [32] und V. Mergel [18, 47] hingewiesen.

Abschätzung der Targetdichte:

Der Druckunterschied im Jet-Dump zwischen an- und abgeschalteten Jet betrug ca.  $\Delta P = 5 \cdot 10^{-8}\text{ mbar}$ . Die Pumpleistung der an den Jet-Dump angeschlossenen Turbomolekularpumpe lag bei ca.  $V_{Pump} = 300\text{ l/s}$ . Daraus ergibt sich ein Teilchenstrom von  $N = 4.03 \cdot 10^{14}$  Teilchen pro Sekunde<sup>8</sup>. Der Jet war auf eine Temperatur von  $77\text{ K}$  stickstoffgekühlt. Nach der Überschallexpansion besitzt der Jet eine Geschwindigkeit von  $v = \sqrt{\frac{5}{2}kT \frac{2}{m_{D_2}}}$ . Der Durchmesser des Jets betrug ca.  $\varnothing = 2\text{ mm}$  und entspricht

<sup>7</sup> siehe hierzu [52, 53]

<sup>8</sup>  $\frac{\Delta P V_{Pump}}{22,4\text{ bar}} 6.022 \cdot 10^{23} = 4.03 \cdot 10^{14}\text{ s}^{-1}$

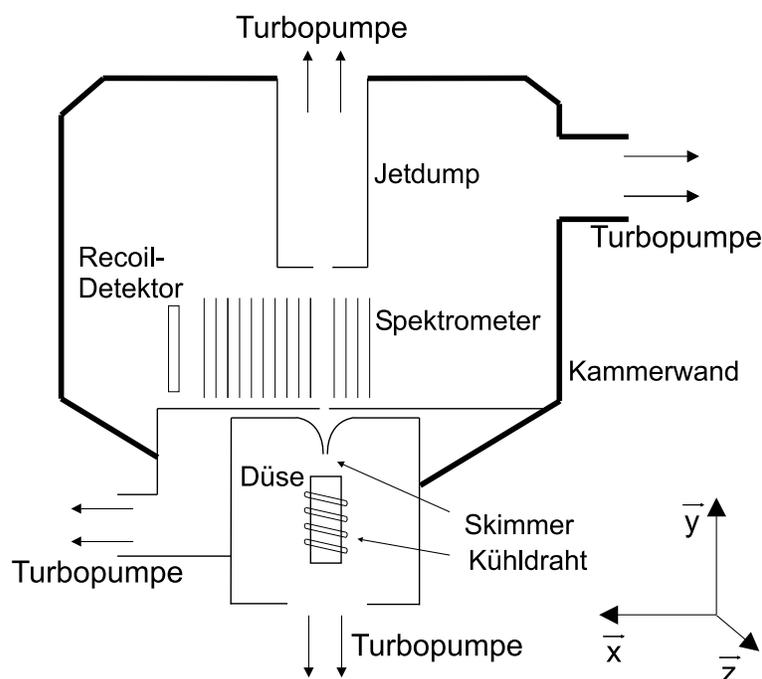


Abbildung 2.4: Schematischer Schnitt durch die Versuchskammer

damit dem Durchmesser des Projekttilstrahls an dieser Stelle. Zusammen führt dies zu einer Targetdichte von  $\frac{N}{v\varnothing} \approx 3,9 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ .

Die Unsicherheit in diesem Ergebnis ist beträchtlich, da nicht klar ist, ob der gesamte Jet auch wirklich im Jet-Dump gefangen wird und wie groß der Durchmesser des Jets in der Kollisionszone ist.

## 2.6 Die Signalverarbeitung

Der Schaltplan der signalverarbeitenden Elektronik des Experiments ist in Abbildung 2.5 skizziert. Die Delaylinesignale wurden zunächst in einem Differenzverstärker verstärkt und dann in Constant Fraction Discriminators (CFDs) geleitet, in denen die analogen Vorverstärkersignale in digitale NIM-Signale umgewandelt wurden. Von dort aus wurden sie direkt in den Multihit Time-to-digital Converter (LeCroy TDC 3377) geführt. Im einfachsten Fall solch einer Schaltung soll das Zeitsignal vom Channelplate die Auslese des TDC auslösen. Es muß sichergestellt werden, daß alle Signale aus der Delaylineanode im TDC erfaßt wurden, bevor die Auslese gestartet wird. Nun kann es sein, daß ein Signal durch die gesamte Delayline laufen muß, was zu Verzögerungen um bis  $80 \text{ ns}$  führen kann. Das Zeitsignal für die Auslese muß in diesem einfachen Fall demnach um mindestens  $100 \text{ ns}$  bis  $200 \text{ ns}$  verzögert werden, damit sichergestellt ist, daß auch das langsamste Signal erfaßt worden ist, bevor die TDC-Auslese startet.

## Signalverarbeitung

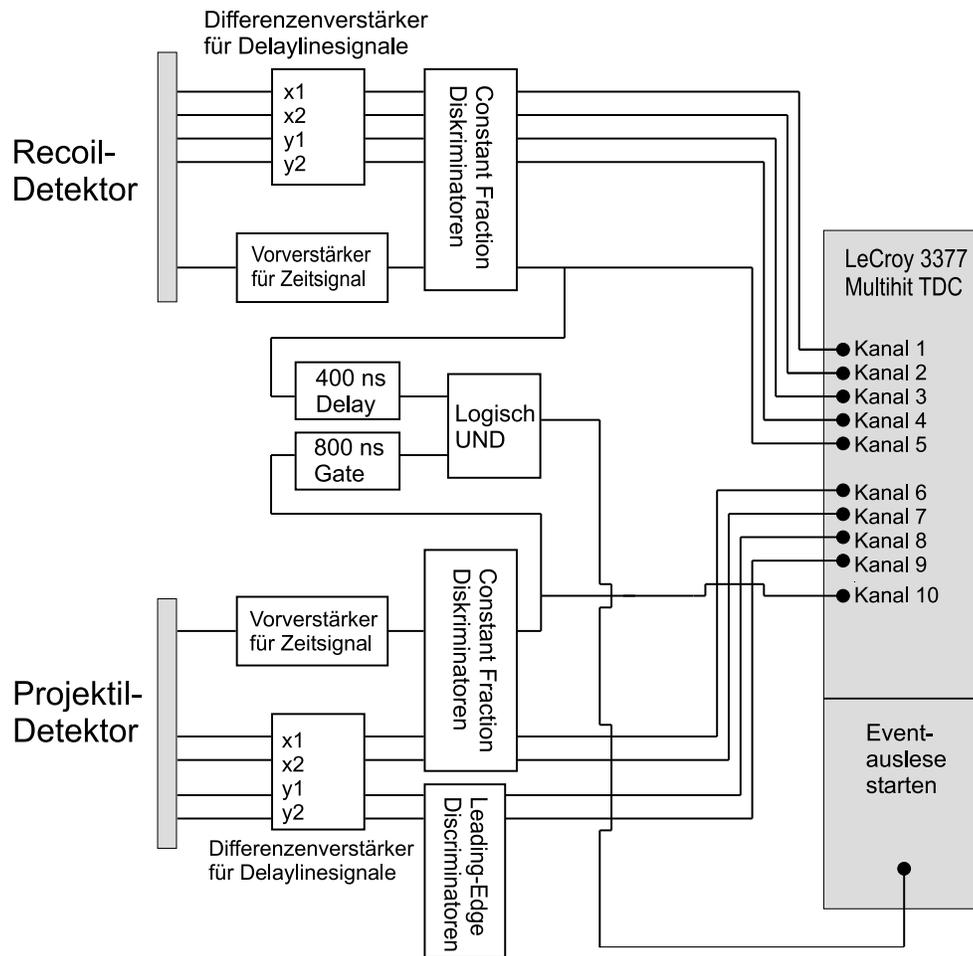


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der signalverarbeitenden Elektronik

Die Verarbeitung der von den Multichannelplates kommenden Zeitsignale war jedoch etwas komplizierter. Aus schon weiter oben erwähnten Gründen<sup>9</sup> ist die Zählrate auf dem Recoildetektor viel größer als die Rate der Reaktionen, die eigentlich untersucht werden sollten. Um die Masse der anfallenden Daten zu reduzieren, mußte eine Koinzidenzschaltung zwischen den Zeitsignalen beider Detektoren konstruiert werden.

Die Flugzeit des Projektils nach der Reaktion betrug ca.  $1,25 \mu s$  und war konstant. Die Flugzeiten des Fragments, das zuerst auf dem Recoil-Detektor auftrifft und das Zeitsignal auslöst, variieren zwischen ca.  $0,8 \mu s$  und  $0,915 \mu s$ , je nachdem, ob es direkt in die Richtung des Recoil-Detektor geflogen ist, oder ob es sich zunächst parallel zur Detektoroberfläche bewegt hat. Der letztgenannte Fall führt dazu, daß beide Recoils nach  $0,915 \mu$  gleichzeitig auftreffen.

<sup>9</sup>z.B. Reaktionen mit dem Restgasen  $N_2$  und  $H_2O$  in der Kammer

Das Fragment, das zunächst vom Detektor wegfliegt und deshalb eine maximale Flugzeit von ca.  $1,05 \text{ ns}$  erreicht, kommt immer zuletzt am Detektor an und ist demnach für das Auslösen der Eventauslese irrelevant. Es sei aber schon hier angemerkt, daß es aufgrund der nicht vollkommenen Nachweiseffizienz des Detektors dennoch sein kann, daß das Zeitsignal vom zweiten Fragment ausgelöst wird, weil das erste Teilchen nicht nachgewiesen wurde. Aus dem Verhältnis der Anzahl dieser Fälle zur Anzahl der Ereignisse, in denen beide Teilchen nachgewiesen wurden, läßt sich im Prinzip die Gesamtnachweiseffizienz des Systems Spektrometer/Detektor berechnen<sup>10</sup>. Um eine

### Zeitdiagramm der Signale

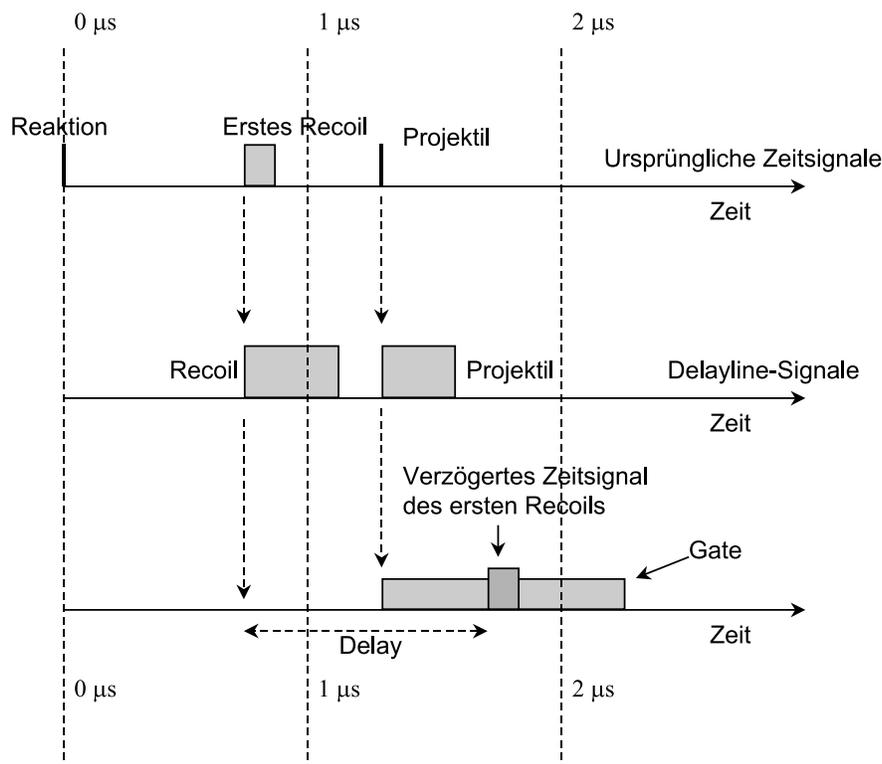


Abbildung 2.6: Zeitliche Gegenüberstellung der verschiedenen Signale. Schraffierte Bereiche markieren die Regionen, in denen die Zeitsignale liegen können.

Koinzidenzschaltung zwischen den beiden Zeitsignalen der Detektoren zu realisieren, muß das Recoil-Zeitsignal den oben angegebenen Zeiten gemäß um mindestens  $450 \text{ ns}$  verzögert werden, damit es später als das Projektilsignal eintrifft. Nun kann mit Hilfe eines Gate-Generators das Projektilsignal auf ca.  $600 \text{ ns}$  aufgeweitet und mit dem verzögerten Recoilzeitsignal in einer UND-Schaltung verknüpft werden. Die Breite des Gates bestimmt, welche Ereignisse auf dem Recoildetektor die Eventauslese starten.

<sup>10</sup>siehe Anhang A.3

Sollen nur die schnellen  $D^+$ -Ionen beobachtet werden, so genügt ein Gate von ca.  $500\text{ns}$  Breite. Wird die Breite aber auf ca.  $800\text{ns}$  eingestellt, so kann ein Stoppsignal und damit die Eventauslese auch von einem  $D_2^+$ -Molekül ausgelöst werden. Das ermöglicht es, auch die Reaktion  ${}^3\text{He}^{++} + D_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + D_2^+$  zu untersuchen. Es ist aber noch nicht

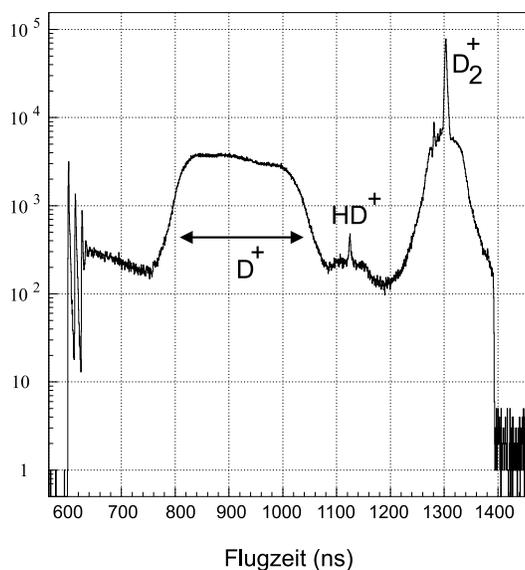


Abbildung 2.7: In Flugzeitspektrum der Recoils ist zu sehen, daß die Zahl der nicht dissoziierten  $D_2^+$ -Moleküle beträchtlich ist. Durch Anpassung des Gates können diese Signal unterdrückt werden.

sichergestellt, daß die Delaylinesignale des Projektil-Detektors bis zum TDC gelangen, ehe er ausgelesen wird. Aus diesem Grund wurde ein Delay von ca.  $700\text{ns}$  gewählt, der das Auslesesignal nochmals verzögert.

## Die Datenaufnahme und Verarbeitung

Der Datenfluß während des Experiments war sehr hoch und machte ein direktes Auslesen des TDCs durch den Computer unmöglich. Nach jedem Ereignis wurden die Daten des TDC deshalb von einem Listprozessor-Modul zwischengespeichert, das im gleichen Crate plazierte war. Der kurze Signalweg zum TDC ermöglicht ein vielfach schnelleres Auslesen durch den Listprozessor. Erst wenn der Speicher des Listprozessors vollkommen gefüllt ist, gibt er die Daten in Form eines Datenpakets an den Computer weiter. Der Nachteil ist, daß der Listprozessor über die CAMAC-spezifischen  $\langle N, A, F \rangle$ -Befehle programmiert werden muß, was die Programmierung des Datenaufnahmesystems sehr kompliziert. Im Aufnahmecomputer werden die Daten im List-Modus gespeichert, d.h. sie werden sequentiell in ein großes File geschrieben. Gleichzeitig überwachte ein zu diesem Zweck geschriebenes Monitorprogramm (Kmax) den Datenstrom und zeigt zur Kontrolle einen Bruchteil der einkommenden Daten graphisch an. Die endgültige Auswertung geschah offline mit Hilfe des am C.E.R.N (Genf)

entwickelten Programmpakets PAW++<sup>11</sup>.

## Verarbeitung der Delayline-Signale

Im folgenden werden die vom TDC gemessenen Zeiten an den vier verschiedenen Drahtenden mit  $t_{X1}, t_{X2}, t_{Y1}$  und  $t_{Y2}$  bezeichnet. Es gilt:

$$\begin{aligned} t_{X1} + t_{X2} &= \text{const.} \\ t_{Y1} + t_{Y2} &= \text{const.} \\ t_{X1} - t_{X2} &= x \\ t_{Y1} - t_{Y2} &= y \end{aligned}$$

wobei  $x$  und  $y$  die horizontale bzw. vertikale Position auf dem Detektor bedeuten. Die Zeitsummen können zur Überprüfung herangezogen werden, ob die Signale auch wirklich alle zum gleichen Teilchen gehören. Die Ortsinformation wird anhand von Signallaufzeiten ermittelt. Für jede Drahtebene auf jeder Delayline-Anode existiert ein fester Skalenfaktor, der die Beziehung zwischen Signallaufzeiten und Ort beschreibt. Diese Faktoren müssen durch Eichmessungen an den Detektoren bestimmt werden. Genauere Untersuchungen zeigen, daß die Zeitsummen der Laufsignale doch etwas ( $\pm 1 \text{ ns}$ ) vom Erzeugungsort auf der Anode abhängen. Die Zeitsummen spielen bei der Rekonstruktion unvollständiger Ereignisse eine so wichtige Rolle, daß in der Analyse eine ortsabhängige Korrektur der Zeitsummen eingefügt wurde.

Mit Hilfe der Zeitsummen können fehlende Signale von Drahtenden rekonstruiert werden. Grundsätzlich darf die Möglichkeit und die Qualität von rekonstruierten Signalen nicht überschätzt werden. Viel wichtiger ist es, von vornherein möglichst reine Signale aufzunehmen, die frei von Reflektionen, Nachschwingern und Rauschen sind.

Die Tatsache, daß bei manchen Reaktionen immer zwei Fragmente frei werden, führt zu einigen sehr hilfreichen Kriterien, anhand derer für jedes einzelne Event individuell entschieden werden kann, ob es aus einer „echten“ Reaktion mit dem Target-Jet stammt, oder ob es von zufällig auf den Detektor auftreffenden Teilchen erzeugt wurde.

Eines dieser Kriterien betrifft die Koinzidenz der detektierten Teilchen im Ort. Die  $D^+$ -Ionen aus der Coulombexplosion müssen den Recoil-Detektor an Orten treffen, die sich diametral gegenüberliegen. Anders ausgedrückt heißt das, daß die Flugbahn des gemeinsamen Massenschwerpunktes der Fragmente den Detektor ungefähr in seinem Zentrum schneiden muß. Anhand der Endpositionen der Fragmente kann auf den Ort rückgeschlossen werden, an dem der Massenschwerpunkt aufgetroffen ist. Diese Position entspricht nicht exakt dem arithmetischen Mittel der beiden Fragmentpositionen. Das ist nur dann der Fall, wenn beide Fragmente gleichzeitig auftreffen. Es folgt die Berechnung des Ortsvektors des Massenschwerpunktes.

---

<sup>11</sup>für „Physics Analysis Workstation“

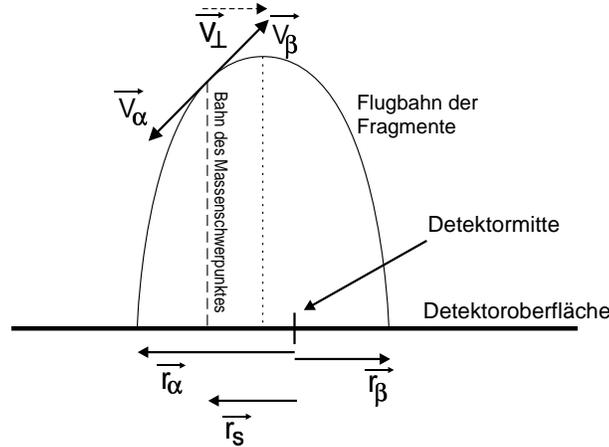


Abbildung 2.8: Skizze zur Berechnung des Massenschwerpunktes

Seien  $\vec{r}_\alpha$  und  $\vec{r}_\beta$  die Endpositionen der Fragmente auf dem Recoil-Detektor. Dann gilt für den Ortsvektor  $\vec{r}_S$  des Massenschwerpunktes

$$\vec{r}_S = \frac{\vec{r}_\alpha + \vec{r}_\beta}{2} - \frac{\vec{V}_\perp}{2} \Delta t \quad (2.2)$$

wobei  $\Delta t$  die Differenz der Flugzeiten der Fragmente sind und  $\vec{V}_\perp$  die Komponente der anfänglichen Geschwindigkeit aus der Coulombexplosion ist, die senkrecht zur Beschleunigung verläuft<sup>12</sup>. Anhand Abbildung 2.8 ist zu erkennen, daß

$$\vec{V}_\perp = \frac{\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta}{t_\alpha + t_\beta} \quad (2.3)$$

gilt, wobei  $t_\alpha$  und  $t_\beta$  die Flugzeiten (TOFs<sup>13</sup>) der Fragmente sind. Die Flugzeiten können nicht direkt gemessen werden, da der Zeitpunkt der Reaktion selbst nicht gemessen werden kann. Die Flugzeiten sind nur relativ zum Auftreffen des Projektils auf dem Projektildetektor bekannt. Eine konstante Flugzeit der Projektile vorausgesetzt könnten so die realen Flugzeiten  $t_\alpha$  und  $t_\beta$  ermittelt werden. Die Summe  $t_\alpha + t_\beta$  kann jedoch auch gut mit Hilfe der bekannten Zeitdifferenz  $\Delta t$  zwischen den Fragmenten angenähert werden. Die entsprechende Herleitung wird an späterer Stelle in Kapitel 3.2 (Gleichung 3.5) erfolgen. Die Gleichung kann unter Vernachlässigen des Transversalimpulses nach  $\Delta t/T$  entwickelt werden, wobei  $T = \sqrt{\frac{2l}{a}} \approx 915 \text{ ns}$  die reine Flugzeit des aus der Ruhe beschleunigten Massenschwerpunktes und  $l$  die Wegstrecke vom Jet zum Recoil-Detektor ist:

$$t_\alpha + t_\beta \approx 2T \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\Delta t}{T} \right)^2 \right] \quad (2.4)$$

<sup>12</sup>oder anders ausgedrückt parallel zur Detektoroberfläche

<sup>13</sup>Time of Flight

Eine Abschätzung zeigt, daß die Genauigkeit dieser Näherung innerhalb von  $\pm 1\%$  liegt. Diese Rechnungen basieren auf der Annahme, daß das Molekül im Laborsystem keinen anfänglichen Impuls besitzt. In Wirklichkeit jedoch muß zuerst der Einfluß vom Transversalimpuls aus der Orts- und Zeitinformation der Fragmente herausgerechnet werden, bevor die oben dargestellte Berechnung angestellt werden kann.

Nachdem die Position des Massenschwerpunktes auf dem Detektor berechnet ist, kann entschieden werden, ob er in der Mitte des Detektors liegt oder zu weit am Rand und damit das Ereignis als nicht echt verworfen werden sollte.

Ein weiteres Kriterium für die Weiterverarbeitung eines Ereignisses betrifft die Flugzeitinformation. Aus der Flugzeit des ersten  $D^+$ -Ions und dem auf dem Projektildetektor gemessenen Transversalimpuls kann die Geschwindigkeitskomponente des zweiten Fragments entlang der Spektrometerachse berechnet werden. Daraus kann auf die Flugzeit des zweiten Fragments geschlossen und mit der gemessenen Zeit verglichen werden. Wenn die Differenz der berechneten Flugzeit und der gemessenen zu groß ist, dann sollte das betreffende Ereignis verworfen werden.

Die Darstellung des Ortsabstandes  $\Delta r = |\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|$  gegen die Zeitdifferenz  $\Delta t = t_\alpha - t_\beta$  birgt eine Fülle an Information über die Qualität der Meßdaten (siehe Abb. 2.9). Echte Ereignisse aus einer Coulombexplosion müssen in dieser Form der Darstellung auf einem Bogen liegen, der aufgrund der Breite der Energieverteilung der Coulombexplosion ebenfalls eine gewisse Ausdehnung besitzt.

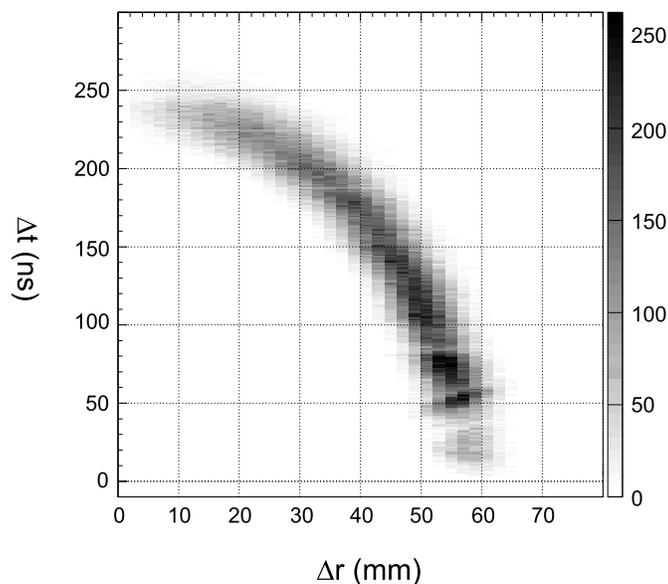


Abbildung 2.9: Gegenüberstellung des Abstandes der Endpositionen der Fragmente in Ort  $\Delta r$  und Zeit  $\Delta t$ .

Es kann sein, daß in dieser Darstellung scharfe horizontale Linien auftreten. Das ist ein sicheres Zeichen für Signalreflexionen in der Delayline-Anode oder der signalverarbeitenden Elektronik. In der Darstellung wird ein weiteres bei Multi-Hit-Experimenten auftretendes Problem sichtbar. Die sogenannten Totzeiten der Constant-Fraction-Diskriminatoren und des TDCs haben zur Folge, daß das System zwei kurz hintereinander eintreffende Fragmente nicht trennen kann, bzw. das zweite nicht detektiert wird. Die kombinierte Totzeit von CFD und TDC müßte theoretisch ca.  $15\text{ ns}$  betragen. Wie in der Abbildung jedoch zu sehen ist, beginnt der kritische Bereich schon etwas unterhalb von  $50\text{ ns}$ . Ohne die Anwendung von Rekonstruktionsroutinen treten unterhalb von ca.  $25\text{ ns}$  keine Signale mehr auf. Selbst nach ausgiebiger Analyse des Problems ist nicht geklärt, wie solch große Gesamttozeiten des System aus den relativ kurzen einzelnen Totzeiten der Signalkanäle entstehen können.

Es gibt Mechanismen, die selbst bei relativ großen Zeitdifferenzen noch zu Signalverlusten führen können. Trifft das zweite Teilchen beispielsweise zur richtigen Zeit an einem Ort auf, an dem sich gerade auf der Delayline-Anode ein Signal des vorangegangenen ersten Teilchens befindet, so geht ein Teil der Information des zweiten Teilchens verloren (siehe Abb. 2.10) Diese Fälle können prinzipiell anhand der be-

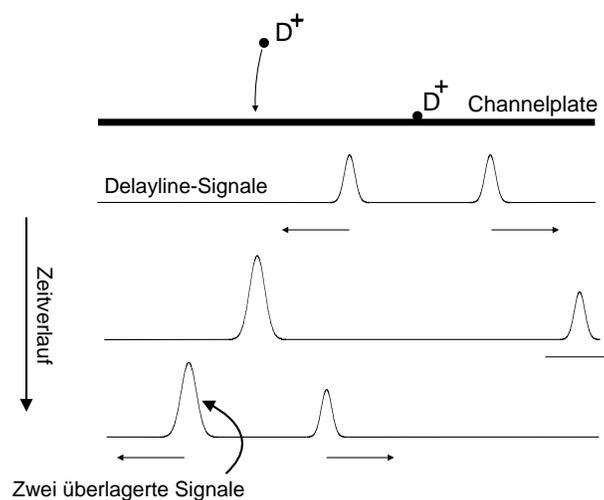


Abbildung 2.10: Ein Teilchen erzeugt auf jeder Drahtebene jeweils zwei Signale, die in entgegengesetzte Richtungen fortlaufen. Durch das Auftreffen des zweiten Fragments kann es zu einer Signalüberlagerung kommen.

kannten Zeitsummen der Signale rekonstruiert werden. Bei solchen Rekonstruktionen besteht jedoch die Gefahr, z.B. aus Reflexionen an den Drahtenden „echt“ aussehende Signale künstlich zu erzeugen. Das kann insbesondere bei einem Multihit-Experiment fatal sein. Geschieht eine Reflexion zufällig an einem Drahtende der einen Drahtebene *und* an einem Drahtende der *anderen* Drahtebene, so wird der ursprüngliche erste Treffer ein zweites Abbild von sich erzeugen, das dem wahren Auftreffort diametral zur Detektormitte gegenüberliegen wird. Solch ein Ereignis könnte dann fälschlicherweise

als ein echtes Teilchenpaar interpretiert werden, denn der scheinbare Massenschwerpunkt liegt exakt in der Mitte des Detektors, was - wie bereits oben beschrieben - bei der Auswertung ein wichtiges Filterkriterium ist. Selbst solche Fälle können jedoch in der Regel erfolgreich aussortiert werden, denn in diesen Fällen hat die Differenz der Zeitsummen der beiden vermeintlichen Treffer einen charakteristischen Betrag und entspricht exakt der Signallaufzeit von einem Drahtende durch die Anode zum anderen Drahtende (ca.  $100\text{ ns}$ ) - unabhängig von der Position des echten ersten Hits. Solche Ereignisse würden in Abb. 2.9 zu einer scharfen horizontalen Linie führen.

Treffen zwei Teilchen zeitgleich auf den Detektor ein, so ist die Zuordnung der Delayline-Signale zueinander nicht mehr eindeutig. Das erste Signal vom Drahtende  $X1$  wird zum zweiten von  $X2$  gehören und umgekehrt. Das Auswertungsprogramm muß unter Verwendung der bekannten Zeitsummen nach Signalkombinationen suchen, die wahrscheinlich ein echtes Ereignis darstellen. Im oben beschriebenen Fall von zwei zeitgleich eintreffenden Teilchen wird das Programm erfolgreich zwei horizontale und zwei vertikale Positionen berechnen können. Welche horizontale Position zu welcher vertikalen gehört, ist in diesem besonderen Fall jedoch prinzipiell nicht bestimmbar. In allen anderen Fällen (wenn  $\Delta t > 20\text{ ns}$ ) kann das Problem durch Heranziehen des zweiten Zeitsignals vom Multi-Channel-Plate gelöst werden.

# Kapitel 3

## Koordinatensystem und Formalismus

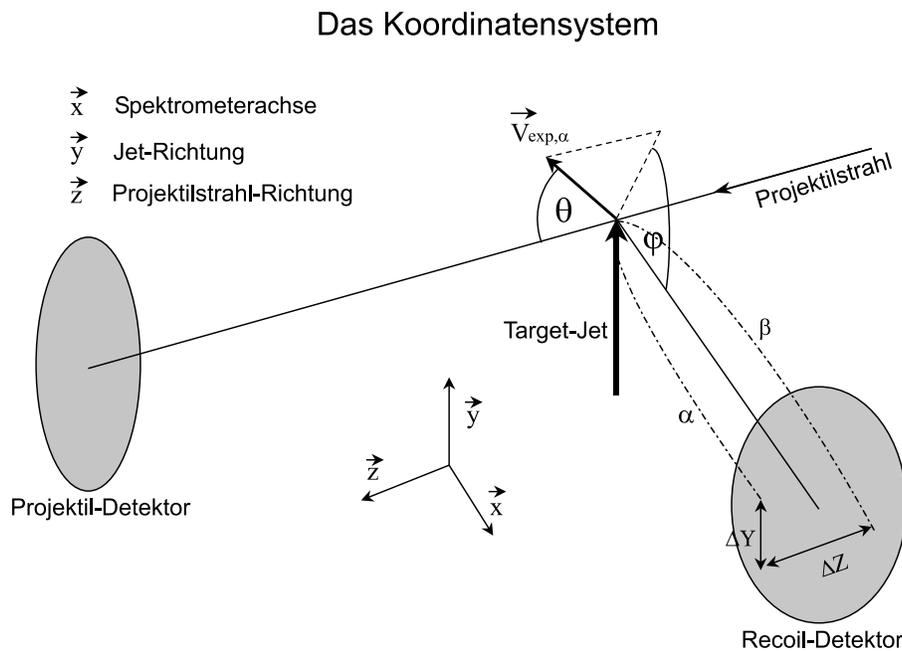


Abbildung 3.1: Darstellung des Koordinatensystems und der Definition der Winkel

### 3.1 Definition des Koordinatensystems

Das Koordinatensystem, das in den folgenden Herleitungen verwendet wird, ist in Abbildung 3.1 skizziert. Die drei Einheitsvektoren  $\vec{x}, \vec{y}$  und  $\vec{z}$  bilden ein rechtshändiges Koordinatensystem.  $\vec{x}$  zeigt entlang der Spektrometerachse in Richtung des Recoil-Detektors,  $\vec{z}$  zeigt in Richtung des Projektilstrahls und  $\vec{y}$  weist orthogonal zu den

beiden anderen Einheitsvektoren entlang des Targetjets nach oben. Die Geschwindigkeiten der Fragmente unmittelbar nach der Reaktion setzen sich aus zwei Komponenten zusammen - derjenigen, die aus dem Impulsübertrag mit dem Projektil stammt ( $\vec{V}_{kick}$ ) und der Komponente aus der Coulombexplosion ( $\vec{V}_{exp}$ ) (siehe Abb. 3.2).

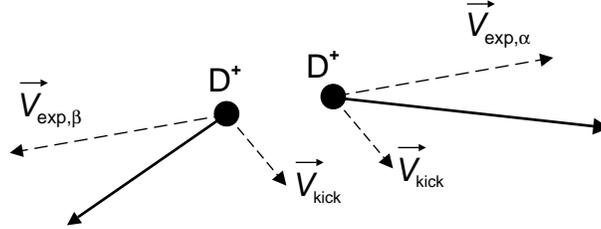


Abbildung 3.2: Die durchgehend gezeichneten Pfeile repräsentieren die im Laborsystem resultierenden Geschwindigkeitsvektoren der Fragmente unmittelbar nach der Reaktion.

Der Polarwinkel zwischen dem Projektilstrahl  $\vec{z}$  und dem Geschwindigkeitsvektor ( $\vec{V}_{exp,\alpha}$ ) desjenigen Deuteriumkerns, der zuerst auf den Recoil-Detektor auftritt (im folgenden mit dem Index  $\alpha$  bezeichnet), wird  $\theta$  genannt. Ein Molekül, das parallel zum Projektilstrahl ausgerichtet ist, entspricht demnach  $\theta = 0$  bzw.  $\theta = \pi$ . Der Winkel Azimutalwinkel zwischen  $\vec{x}$  und der Projektion von  $\vec{V}_{exp,\alpha}$  in die Transversalebene ( $\vec{x} \times \vec{y}$ ) wird im folgenden als  $\varphi$  bezeichnet. Die Winkel  $\theta$  und  $\varphi$  sind Winkel im Laborsystem. Die Streuebene wird durch den Vektor  $\vec{z}$  und den Impulsvektor des Projektils nach der Reaktion aufgespannt. In der Darstellung der Ergebnisse wird jedoch niemals der absolute Laborwinkel  $\varphi$ , sondern immer  $\varphi$  im Bezug zur Streuebene des Projektils auftauchen, da dieser die relevante Winkelinformation enthält. Er wird im folgenden  $\psi$  genannt.

## 3.2 Herleitung der Formeln

Dem Aufbau des Experiments und der Auswertung der Daten liegen folgende Annahmen zugrunde:

Es wird davon ausgegangen, daß der Elektronentransfer instantan geschieht, während die Deuteriumkerne stillstehen, das heißt, daß das Franck-Condon-Prinzip gilt.

Weiterhin wird angenommen, daß die Passage des Projektils an dem Molekül vorbei so schnell geschieht, daß die Teile des Moleküls keine Zeit haben, sich zu bewegen; die Information über die anfängliche Ausrichtung des Moleküls bleibt auch nach der Reaktion weitgehend erhalten. Im Anhang A wird gezeigt, daß die letztgenannte Annahme gerechtfertigt ist.

Je nach Reaktion werden zwei oder nur ein  $D^+$ -Ion frei. Die Arten der Auswertung d.h. der verwendete Auswertungsformalismus dieser Reaktionen unterscheiden sich grundlegend voneinander.

Im Fall von zwei  $D^+$ -Ionen muß der absolute Ursprungsort und Zeitpunkt der Reaktion nicht bekannt sein. Stattdessen genügen die Relativabstände der Hits in Ort und

Zeit. Dadurch wird eine sehr gute Winkel- und Energieauflösung erreicht. Die Tatsache, daß zwei korrelierte Teilchen nachgewiesen werden, ermöglicht zudem eine sehr genaue Unterscheidung zwischen echten Ereignissen und zufälligen Signalen. Diese Art der Auswertung erfordert zwei nachgewiesene Teilchen. Die Gesamtnachweiseffizienz des Recoil-Detektorsystems liegt demnach nicht mehr bei ca. 35% für Einzelteilchen-nachweis, sondern nur noch bei ca. 12%. Diese Art der Auswertung soll im folgenden Double-Hit-Analyse genannt werden.

Im Gegensatz dazu gibt es den Single-Capture-Kanal, der nur ein  $D^+$ -Ion produziert. Das neutrale Deuteriumatom wird vom elektrischen Feld innerhalb des Spektrometers nicht erfaßt und kann nicht auf dem Recoil-Detektor nachgewiesen werden. Bei der Double-Hit-Analyse genügte das Wissen um die Relativabstände der Hits auf dem Detektor. Bei Reaktionen, in denen nur ein  $D^+$ -Ion frei wird, gibt es eine solche Information nicht. Hierbei muß nun ein fester Reaktionsort angenommen werden, der aufgrund der Ausdehnung des Targetjets und Projektilstrahls nur auf ca. 2 mm genau bestimmt ist. Die Energie- und Winkelauflösung ist bei dieser Art Auswertung deshalb auch sehr viel schlechter als in der Double-Hit-Analyse. Diese Art der Auswertung soll im folgenden Single-Hit-Analyse genannt werden.

Um die Dinge nicht unnötig zu komplizieren, wird bei der späteren Präsentation der Ergebnisse nicht zwischen den beiden Methoden der Auswertung unterschieden, d.h. es soll nicht immer erklärt werden, welche Darstellung mit welcher Art Analyse erstellt wurde. Aufgrund der unterschiedlichen Genauigkeiten muß jedoch eine direkte Gegenüberstellung zweier ähnlicher Graphen aus verschiedenen Analysen vermieden werden, da zum Beispiel Kurvenbreiten aus beiden Analysen nicht miteinander verglichen werden können.

Bedeutung	Variablenname
Geschwindigkeitsvektor des Fragments $\alpha$ bzw. $\beta$ im Laborsystem:	$\vec{V}_\alpha, \vec{V}_\beta$
kinetische Energie bzw. Geschwindigkeitsbetrag des Projektils vor der Reaktion:	$E_{kin,P}, V_P = \sqrt{\frac{2E_{kin,P}}{m_P}}$
Geschwindigkeit der Fragmente relativ zum gemeinsamen Massenschwerpunkt als Folge der Coulombexplosion:	$\vec{V}_{exp,\alpha}, \vec{V}_{exp,\beta}$ wobei $\vec{V}_{exp,\alpha} = -\vec{V}_{exp,\beta}$
Ortsvektoren nach Auftreffen auf den jeweiligen Detektor:	$\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta, \vec{r}_P$
Flugzeiten der Fragmente bzw. des Projektils:	$t_\alpha, t_\beta, T_P$
Impulsübertrag zwischen Projektil und Molekülschwerpunkt orthogonal zum Strahl: (Definition: Positiver Betrag im Fall des Molekülschwerpunktes)	$\vec{P}_\perp$
Totale Impulsänderung des Projektils:	$\Delta\vec{P}_P \approx \frac{-Q}{V_P} \vec{z} - \vec{P}_\perp$
Geschwindigkeitsänderung des Molekülschwerpunktes:	$\vec{V}_{kick} = -\frac{\Delta\vec{P}_P}{2m_D}$
Masse eines Deuteriumkerns bzw. des Projektils:	$m_D, m_p$
Q-Wert der Reaktion:	$Q$
Elektrisches Feld innerhalb des Spektrometers:	$\vec{E}$
Elektrische Elementarladung:	$e$
Entfernung des Recoil-Detektors zum Jet:	$L$
Entfernung des Projektil-Detektors zum Jet:	$l_P$
Beschleunigung der Fragmente durch das elektrische Feld:	$\vec{a} = \frac{\vec{E}e}{m_D}$

Die nun folgenden Herleitungen geschehen unter der Annahme, daß der zwischen Projektil und Molekülschwerpunkt übertragene Impuls zu gleichen Teilen auf die Fragmente verteilt wird, d.h. daß die Impulsänderung jedes einzelnen Fragments  $-\Delta\vec{P}_P/2$  beträgt. Diese Annahme gilt nur für sehr kleine Annäherungen des Projektils an einen der Kerne nicht mehr. Dies wird zusammen mit der in solchen Fällen darauf zurückzuführenden Verschiebung der Aufbruchenergie an späterer Stelle diskutiert werden.

## Herleitungen zur Double-Hit-Analyse

Die Geschwindigkeitssvektoren der beiden Recoil-Ionen lauten in Abhängigkeit von der Zeit  $t$ :

$$\begin{aligned}\vec{V}_\alpha(t) &= \vec{V}_{exp,\alpha} + \vec{V}_{kick} + \vec{a}t \\ \vec{V}_\beta(t) &= -\vec{V}_{exp,\alpha} + \vec{V}_{kick} + \vec{a}t\end{aligned}$$

Daraus folgt für die Orte der Fragmente  $\alpha$  und  $\beta$  auf dem Recoildetektor:

$$\begin{aligned}\vec{r}_\alpha &= (\vec{V}_{exp,\alpha} + \vec{V}_{kick})t_\alpha + \frac{\vec{a}}{2}t_\alpha^2 \\ \vec{r}_\beta &= (-\vec{V}_{exp,\alpha} + \vec{V}_{kick})t_\beta + \frac{\vec{a}}{2}t_\beta^2 \\ \Delta\vec{r} = \vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta &= \vec{V}_{exp,\alpha}(t_\alpha + t_\beta) + \vec{V}_{kick}(t_\alpha - t_\beta) + \frac{\vec{a}}{2}(t_\alpha - t_\beta)(t_\alpha + t_\beta)\end{aligned}$$

und mit  $\Delta t = t_\alpha - t_\beta$

$$\Delta\vec{r} = \vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta = \vec{V}_{exp,\alpha}(t_\alpha + t_\beta) + \vec{V}_{kick}\Delta t + \frac{\vec{a}}{2}\Delta t(t_\alpha + t_\beta) \quad (3.1)$$

$$\iff \vec{V}_{exp,\alpha} = \frac{\Delta\vec{r} - \vec{V}_{kick}\Delta t}{t_\alpha + t_\beta} - \frac{\vec{a}}{2}\Delta t \quad (3.2)$$

Abgesehen von  $t_\alpha + t_\beta$  enthält die rechte Seite dieser Gleichung ausschließlich gemessene Größen.  $t_\alpha + t_\beta$  wird in einem späteren Abschnitt (Gleichung 3.5) mit Hilfe von  $\Delta t$  berechnet werden und kann deshalb hier schon als bekannt vorausgesetzt werden. Der Vektor  $\vec{V}_{exp,\alpha}$  enthält die Information über die Ausrichtung des Moleküls zum Zeitpunkt der Reaktion im Laborsystem. Im folgenden Abschnitt werden daraus die entsprechenden Winkel  $\theta$  und  $\varphi$  berechnet. Aus Gleichung 3.2 folgt:

$$\begin{aligned}\vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{x} &= V_{exp,\alpha} \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \\ \Delta\vec{r} \cdot \vec{x} = 0 &= \frac{-\vec{V}_{kick} \cdot \vec{x} \Delta t}{t_\alpha + t_\beta} - \frac{a}{2}\Delta t \\ &= \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{x}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \frac{\Delta t}{t_\alpha + t_\beta} - \frac{a}{2}\Delta t\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{y} &= V_{exp,\alpha} \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi \\ &= \frac{\Delta\vec{r} \cdot \vec{y} - \vec{V}_{kick} \cdot \vec{y} \Delta t}{t_\alpha + t_\beta} \\ &= \frac{\Delta Y}{t_\alpha + t_\beta} + \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{y}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \frac{\Delta t}{t_\alpha + t_\beta}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{z} &= V_{exp,\alpha} \cdot \cos\theta \\ &= \frac{\Delta Z}{t_\alpha + t_\beta} - \frac{Q}{2m_D V_P} \frac{\Delta t}{t_\alpha + t_\beta}\end{aligned}$$

## Berechnung der Winkel

Aus den zuletzt hergeleiteten Termen könnten nun unter Verwendung der Arcussinus- und Arcuscossinusfunktion die Winkel berechnet werden. Die Verwendung der Arcustangensfunktion ist jedoch günstiger, da sie keinen beschränkten Definitionsbereich besitzt. Durch Kombinieren der letzten Gleichungen ergeben sich die etwas länglichen Ausdrücke

$$\begin{aligned}\tan \varphi &= \frac{V_{exp,\alpha} \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi}{V_{exp,\alpha} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi} \\ &= \frac{\Delta Y + \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{y}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \Delta t}{\frac{\vec{r}_P \cdot \vec{x}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \Delta t - \frac{a}{2} \Delta t (t_\alpha + t_\beta)} \\ \tan \theta &= \frac{\sqrt{(V_{exp,\alpha} \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi)^2 + (V_{exp,\alpha} \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi)^2}}{V_{exp,\alpha} \cdot \cos \theta} \\ &= \frac{\sqrt{\left(\frac{\vec{r}_P \cdot \vec{x}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \Delta t - \frac{a}{2} \Delta t (t_\alpha + t_\beta)\right)^2 + \left(\Delta Y + \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{y}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \Delta t\right)^2}}{\Delta Z - \Delta t \frac{Q}{2m_D V_P}}\end{aligned}$$

## Berechnen der Energie der Coulombexplosion

Anhand der Position und der Flugdauer der Fragmente kann auf die kinetische Energie rückgeschlossen werden, die sie durch die Repulsion der Kerne erhalten haben.

Im folgenden wird die Formel zur Berechnung der Aufbruchenergie hergeleitet. Im Grunde genommen wird der Geschwindigkeitsvektor  $\vec{V}_{exp,\alpha}$  rekonstruiert;  $\frac{m_D}{2} (\vec{V}_{exp,\alpha})^2$  ergibt dann die kinetische Energie pro Fragment im Schwerpunktsystem. Der Impulsübertrag zwischen Projektil und Massenschwerpunkt des Moleküls muß auch hier wieder berücksichtigt werden, da dieser die Flugbahnen der Fragmente beeinflusst. Dies geschieht wieder unter der Annahme, daß der Transversalimpuls des Projektils zu gleichen Teilen auf die beiden Kerne übertragen wird. Die berechneten Energien sind somit keine im Laborsystem gemessenen Energien mehr.

$$\begin{aligned}\Delta Z &= \Delta \vec{r} \cdot \vec{z} = \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{z} (t_\alpha + t_\beta) + \vec{V}_{kick} \cdot \vec{z} \Delta t = \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{z} (t_\alpha + t_\beta) + \Delta t \frac{Q}{2m_D V_P} \\ \Delta Y &= \Delta \vec{r} \cdot \vec{y} = \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{y} (t_\alpha + t_\beta) + \vec{V}_{kick} \cdot \vec{y} \Delta t = \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{y} (t_\alpha + t_\beta) - \Delta t \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{y}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \\ \Delta \vec{r} \cdot \vec{x} (= 0) &= \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{x} (t_\alpha + t_\beta) + \vec{V}_{kick} \cdot \vec{x} \Delta t + \Delta t \frac{a}{2} (t_\alpha + t_\beta) \\ \implies 0 &= \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{x} (t_\alpha + t_\beta) + \Delta t \frac{-\vec{r}_P \cdot \vec{x}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} + \Delta t \frac{a}{2} (t_\alpha + t_\beta)\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \vec{V}_{exp,\alpha}^2(t_\alpha + t_\beta) &= \left( \Delta Z - \Delta t \frac{Q}{2m_D V_P} \right)^2 + \left( \Delta Y + \Delta t \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{y}}{T_P} \frac{m_p}{2m_D} \right)^2 \\ &+ \left( -\Delta t \frac{a}{2}(t_\alpha + t_\beta) + \Delta t \frac{\vec{r}_P \cdot \vec{x}}{T_P} \frac{m_p}{2m_D} \right)^2 \end{aligned}$$

und damit schließlich die Aufbruchenergie pro Fragment

$$E_{exp} = \frac{m_D}{2} \vec{V}_{exp,\alpha}^2 \quad (3.3)$$

Es gibt noch einen Aspekt, der den Formalismus zur Berechnung der Aufbruchenergie erheblich kompliziert: Die absoluten Flugzeiten der Fragmente  $t_\alpha$  und  $t_\beta$  sind nicht bekannt, da der Zeitpunkt der Reaktion nicht direkt gemessen werden kann. Das Zeitsignal des Projektildetektors könnte nach Subtraktion der festen Projektilflugzeit als Zeitpunkt der Reaktion verwendet werden. Das ist in der Tat der Weg, der in der Single-Hit-Analyse begangen werden muß. Es gibt jedoch eine elegantere Methode das Problem zu beheben und allein anhand der Zeitdifferenz  $\Delta t$  die Summe  $t_\alpha + t_\beta$  zu berechnen bzw. anzunähern:

Aus

$$\begin{aligned} L &= \left( \vec{V}_{exp,\alpha} + \vec{V}_{kick} \right) \cdot \vec{x} t_\alpha + \frac{1}{2} a t_\alpha^2 \\ \text{und } L &= \left( -\vec{V}_{exp,\alpha} + \vec{V}_{kick} \right) \cdot \vec{x} t_\beta + \frac{1}{2} a t_\beta^2 \end{aligned}$$

ergeben sich durch Subtraktion bzw. Addition der beiden Gleichungen die folgenden Ausdrücke:

$$\begin{aligned} \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{x} &= -\frac{\vec{V}_{kick} \cdot \vec{x} \Delta t}{t_\alpha + t_\beta} - \frac{1}{2} a \Delta t \\ \text{und } 2L &= \vec{V}_{exp,\alpha} \cdot \vec{x} \Delta t + \vec{V}_{kick} \cdot \vec{x} (t_\alpha + t_\beta) + \frac{a}{4} [(t_\alpha + t_\beta)^2 + \Delta t^2] \end{aligned}$$

Die beiden letzten Gleichungen lassen sich wieder vereinigen. Zusammen mit der Substitution  $T = \sqrt{2l/a}$  führt dies zu

$$(t_\alpha + t_\beta)^2 = 4T^2 \left[ 1 + \left( \frac{\Delta t}{2T} \right)^2 + (t_\alpha + t_\beta) \frac{\vec{V}_{kick} \cdot \vec{x}}{2T^2} \left( \left( \frac{\Delta t}{t_\alpha + t_\beta} \right)^2 - 1 \right) \right] \quad (3.4)$$

$T = \sqrt{2L/a}$  ist die Flugzeit des Massenschwerpunktes des Moleküls bis zum Recoil-Detektor für den Fall, daß es aus der Ruhe, d.h. mit  $\vec{V}_{kick} = 0$ , beschleunigt würde.

Da sich die Gleichung nicht weiter nach  $t_\alpha + t_\beta$  umformen läßt, muß an dieser Stelle eine Annäherung verwendet werden. Mit  $t_\alpha + t_\beta \approx 2T$  gelangt man schließlich zu<sup>1</sup>

$$(t_\alpha + t_\beta)^2 \approx 4T^2 \left[ 1 + \left( \frac{\Delta t}{2T} \right)^2 + \frac{2\vec{V}_{kick} \cdot \vec{x}}{aT} \left( 1 - \left( \frac{\Delta t}{2T} \right)^2 \right) \right] \quad (3.5)$$

wobei aufgrund der Impulserhaltung  $\vec{V}_{kick} \cdot \vec{x} = -\frac{\vec{r}_P \cdot \vec{x}}{T_P} \frac{m_P}{2m_D}$  gilt, was bekannt ist, da  $\vec{r}_P$  auf dem Projektildetektor direkt gemessen werden kann.

## Herleitungen zur Single-Hit-Analyse

Der Ortsvektor des  $D^+$ -Ions nach Auftreffen auf den Recoil-Detektor ist:

$$\vec{r}_\alpha(t_\alpha) = \left( \vec{V}_{exp} + \vec{V}_{kick} \right) t_\alpha + \frac{\vec{a}}{2} t_\alpha^2 \quad (3.6)$$

Daraus folgt für die horizontale Koordinate:

$$\vec{r}_\alpha(t_\alpha) \cdot \vec{z} = V_{exp} \cos(\theta) t_\alpha + \frac{Q}{2m_D V_P} t_\alpha \quad (3.7)$$

und in vertikaler Richtung:

$$\vec{r}_\alpha(t_\alpha) \cdot \vec{y} = V_{exp} \sin(\theta) \sin(\varphi) t_\alpha - \vec{r}_P \cdot \vec{y} \frac{m_P}{2m_D} \frac{t_\alpha}{T_P} \quad (3.8)$$

Für die Richtung entlang der Spektrometerachse gilt folgende Beziehung:

$$\vec{r}_\alpha(t_\alpha) \cdot \vec{x} = L = \frac{a}{2} t_\alpha^2 + V_{exp} \sin(\theta) \cos(\varphi) t_\alpha - \vec{r}_P \cdot \vec{x} \frac{m_P}{2m_D} \frac{t_\alpha}{T_P} \quad (3.9)$$

Im Gegensatz zur Double-Hit-Analyse muß in der Single-Hit-Analyse der Reaktionsort, d.h. die exakte Position der Kollisionszone zwischen Targetjet und Projektilstrahl im Raum, bekannt sein. Anhand der Double-Hit-Analyse kann der Ort auf dem Recoildetektor bestimmt werden, an dem der Massenschwerpunkt des Moleküls auftrifft. Diese Position entspricht dem Reaktionsort in der  $\vec{y} \times \vec{z}$ -Ebene, ist aber in horizontaler Richtung durch den Effekt des Q-Wertes etwas versetzt. In der Single-Hit-Analyse wurde diese Position als Nullpunkt in  $\vec{z}$ - und  $\vec{y}$ -Richtung gewählt. Das entspricht einer geringfügigen Verschiebung des Koordinatensystems entlang des Projektilstrahls. Infolgedessen kann der Q-Wert nun gleich Null gesetzt werden, wodurch sich Gleichung 3.7 vereinfacht. Das Vernachlässigen dieses Terms stellt schon eine grobe Näherung dar, da die Flugzeit  $t_\alpha$  keine Konstante ist.

<sup>1</sup>eine Abschätzung zeigt, daß diese Annäherung innerhalb von ca. 1 % genau ist.

Nun können die Winkel  $\varphi$ ,  $\theta$  und die Geschwindigkeit des  $D^+$ -Ions, die es infolge der Coulombexplosion relativ zum Molekülschwerpunkt erhält, berechnet werden.

$$\begin{aligned}\tan(\theta) &= \sqrt{\left(\vec{r}_\alpha \cdot \vec{y} + \vec{r}_P \cdot \vec{y} \frac{m_P}{2m_D} \frac{t_\alpha}{T_P}\right)^2 + \left(L - \frac{a}{2}t_\alpha^2 + \vec{r}_P \cdot \vec{x} \frac{m_P}{2m_D} \frac{t_\alpha}{T_P}\right)^2} \frac{1}{\vec{r}_\alpha \cdot \vec{z}} \\ \tan(\varphi) &= \frac{\vec{r}_\alpha \cdot \vec{y} + \vec{r}_P \cdot \vec{y} \frac{m_P}{2m_D} \frac{t_\alpha}{T_P}}{L - \frac{a}{2}t_\alpha^2 + \vec{r}_P \cdot \vec{x} \frac{m_P}{2m_D} \frac{t_\alpha}{T_P}} \\ V_{exp} &= \frac{\vec{r}_\alpha \cdot \vec{z}}{\cos(\theta) t_\alpha}\end{aligned}$$

Die Single-Hit-Analyse soll nur auf die Reaktionskanäle angewendet werden, die nur ein Recoilion produzieren. In der Single-Hit-Analyse werden deshalb alle Ereignisse ignoriert, die mehr als ein Recoilion beinhalten. Die Detektoren arbeiten jedoch lediglich mit einer Nachweiseffizienz von ca. 50%. In Kombination mit dem zu ca. 79% durchlässigen Gitter führt dies zu einer Nachweiseffizienz des Recoildetektors von ca. 40% für Einzelteilchen. Wenn also in Wirklichkeit zwei Recoilionen auf den Detektor auftreffen und eines davon nachgewiesen wird, wird in 60% dieser Fälle das andere nicht erfaßt werden. Das hat zur Folge, daß auch Ereignisse aus der Transferionisation  $\implies {}^3\text{He}^+ + D^+ + D^+ + e^-$  in den Spektren der Single-Hit-Analyse für den Single-Capture-Kanal auftauchen und nicht von den anderen Reaktionen getrennt werden können, die wirklich nur ein  $D^+$ -Ion produzieren.

### 3.3 Die Meßgenauigkeit des Systems

Für die spätere Interpretation der Ergebnisse ist es notwendig, die Meßgenauigkeit der Apparatur zu kennen. Der Zusammenhang zwischen den einzelnen Größen ist sehr komplex. Eine einfache Rechnung nach der klassischen Fehlerfortpflanzung ist daher nicht möglich. Statt dessen wurde eine Monte-Carlo-Simulation entwickelt. Ziel der Monte-Carlo-Simulation des Experiments war es, die Richtigkeit der hergeleiteten Formeln und die Fehlergrenzen der Auswertung zu ermitteln. Um Verwirrung vorzubeugen, sei angemerkt, daß diese MC-Simulation nicht mit dem am Ende der Arbeit vorgestellten Modell, das ebenfalls eine MC-Simulation ist, zusammenhängt. Die beiden Simulationen sind vollkommen unabhängig voneinander.

Der Simulation liegen folgende idealisierte Annahmen zugrunde:

- Die Orientierung der  $D_2$ -Moleküle ist isotrop, daß heißt der gesamte Raumwinkel von  $4\pi$  wird von den auseinanderfliegenden Fragmenten gleichmäßig abgedeckt.
- Feste kinetische Energie des Projektils.
- Targettemperatur von  $0\text{ K}$
- Ein recht großzügig angenommener, gleichmäßiger (kein Gauß) Meßfehler von  $\pm 0.5\text{ mm}$  im Ort und  $\pm 1\text{ ns}$  in der Zeit. Beide Fehlergrößen sind eine Folge der begrenzten Zeitauflösung des LeCroy-TDCs von  $0.5\text{ ns}$  pro Kanal.
- Ein fester Q-Wert von  $22,75\text{ eV}$  für die  ${}^3\text{He}^+(1s) + 2D^+ e^-$  - Reaktion bzw.  $47,35\text{ eV}$  für den  ${}^3\text{He} + 2D^+$  - Kanal.
- Eine gleichmäßige Verteilung des transversalen Impulsübertrags zwischen Projektil und Molekülschwerpunkt von  $0\text{ au}$  bis  $30\text{ au}$ .

#### Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation

Aus der MC-Simulation ergibt sich eine Unsicherheit in  $\theta$  von  $\Delta\theta = \pm 0,6^\circ$  und in  $\varphi$  von  $\Delta\varphi = \pm 0,5^\circ$  für die Double-Hit-Analyse und  $\Delta\theta = \pm 5,6^\circ$  und  $\Delta\varphi = \pm 3,8^\circ$  für Single-Hit.

Der Fehler in der kinetischen Energie, die jedes einzelne Fragment aus der Coulombexplosion fortträgt, beträgt  $\Delta E = 0.34\text{ eV}$  FWHM (Double-Hit-Analyse) bzw.  $\Delta E = 1,2\text{ eV}$  FWHM (Single-Hit-Analyse).

Die Winkelauflösung in  $\varphi_P$  auf dem Projektildetektor hängt sehr stark von der Streu-

weite des Projektils ab. Bei einem Radius<sup>2</sup> von unter  $2mm$  ist es aufgrund des Fehlers im Ort aussichtslos, den Winkel bestimmen zu wollen.

Der Unsicherheit nimmt mit zunehmenden Radius  $r$  rasch ab:

Radius $r$	Fehler $\Delta\varphi_P$
$2mm < r < 4mm$	$9^\circ$
$4mm < r < 6mm$	$4,6^\circ$
$6mm < r < 8mm$	$3,6^\circ$
$8mm < r$	$2^\circ$

In der Simulation wurden keine eventuellen Störungen des elektrischen Feldes innerhalb des Spektrometers und keine Linseneffekte im Bereich zwischen dem Austrittsgitter und der MCP-Oberfläche berücksichtigt. Die oben aufgeführten Fehlerwerte werden daher leider überschritten werden. Sie geben dennoch einen Hinweis darauf, in welchem Bereich sich die Meßgenauigkeiten befinden.

Nicht mehr zur MC-Simulation gehörend, aber trotzdem an dieser Stelle angebracht ist der Hinweis, daß das Detektorsystem im Fall der Double-Hit-Analysis nicht über den gesamten Bereich von  $4\pi$  im Impulsraum empfindlich ist. Die Totzeiten des TDC und der CF-Discriminators führen dazu, daß die Zeitsignale zweier Teilchen, die innerhalb von ca.  $30ns$  auf das MCP eintreffen, vom Detektorsystem nicht als zwei getrennte Signale erkannt werden. Mit Hilfe der Delayline-Signale können solche Ereignisse in vielen Fällen rekonstruiert werden, es gibt aber dennoch Verluste. Dies führt auf die Kugelschale im Impulsraum bezogen zu einer gürtelförmigen Zone verminderter Nachweiseffizienz in der  $\vec{z} \times \vec{y}$ -Ebene. Dieser Effekt kann in Bereichen von  $\theta$  um  $\pi/2$  vernachlässigt werden. Im Bereich um  $\theta = 0$  bzw.  $\theta = \pi$  dagegen muß er bei der Auswertung der Daten unbedingt berücksichtigt werden.

---

<sup>2</sup> $2mm$  entsprechen einem Streuwinkel von ca.  $2mrad$  und einem Transversalimpuls  $P_\perp \approx 4au$



# Kapitel 4

## Die Ergebnisse des Experiments

### Ergebnisse

Im folgenden werden die Ergebnisse des Experiments präsentiert und diskutiert. Die einzelnen Reaktionen sollen nicht getrennt, sondern jeweils im Vergleich zueinander dargestellt werden, um Unterschiede deutlicher herausstellen zu können. Bei dem im folgenden verwendeten Begriff der kinetischen Energie der Fragmente muß beachtet werden, daß es sich hierbei nicht um kinetische Energien im Laborsystem handelt. Vielmehr ist wie in Kap. 3.2 auf Seite 36 beschrieben der Einfluß des übertragenen Transversalimpulses abgezogen worden, um die Energiekurven mit der theoretisch berechneten Form (Abb. 1.2) vergleichen zu können.

#### 4.0.1 Energiespektren

Abbildung 4.1 zeigt die kinetische Energie, die jedes  $D^+$ -Ion aus der Coulombexplosion davonträgt für den Double-Capture-Kanal (gestrichelte Linie) und für die Transferionisation (Punkte). Die Energieverteilung wird der theoretisch berechneten am ähnlichsten sein, wenn der störende Einfluß des Transversalimpulsübertrages minimal ist. In Abbildung 4.1 sind die Messungen für kleine Transversalimpulse ( $P_{\perp} < 5 au$ ) aufgetragen.

Im Single-Capture-Kanal treten mehrere Reaktionen<sup>1</sup> auf. Es zeigt sich, daß das Aussehen des Energiespektrums stark vom Streuwinkel des Projektils, d.h. genauer gesagt vom Stoßparameter abhängt. In Abbildung 4.2 auf Seite 45 sind die entsprechenden Energiespektren dargestellt.

Der Hauptpeak in Abbildung 4.2 bei ca.  $9 eV$  besteht in Wirklichkeit aus mehreren Peaks, die jedoch zu eng beieinander liegen, um getrennt werden zu können. Um  $9,7 eV$  muß der Peak aus der Transferionisation  ${}^3He^{++} + D_2 \longrightarrow {}^3He^+ + 2D^+ + e^-$  liegen, der aufgrund der begrenzten Nachweiseffizienz des Recoildetektors auch in der

---

<sup>1</sup> $\longrightarrow {}^3He^+ + D(n) + D^+$ . Siehe dazu die Diskussion in Abschnitt 1.2

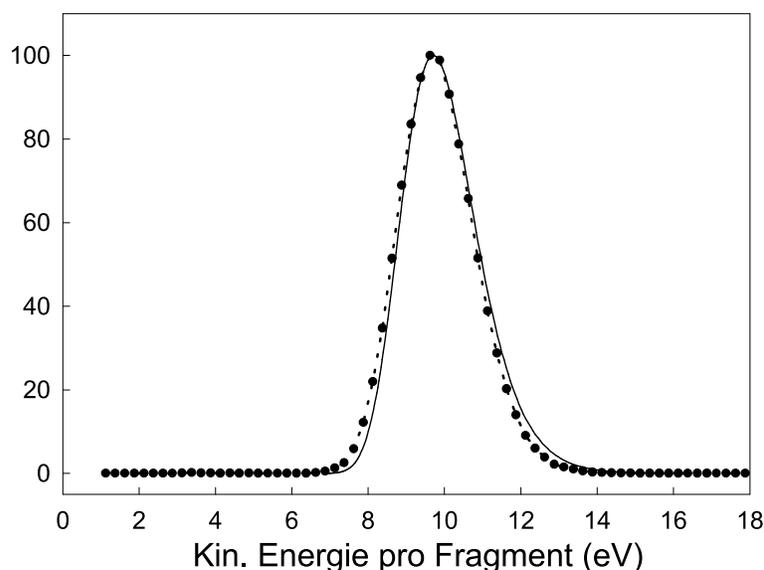


Abbildung 4.1: Die gestrichelte Linie und die Punkte repräsentieren die Meßdaten aus der Double-Capture-Reaktion bzw. der Transferionisation. Die durchgehende Linie stellt die theoretisch zu erwartende Energieverteilung dar. Es wurden lediglich die Amplituden angeglichen, um einen direkten Vergleich der Kurven zu ermöglichen.

Single-Hit-Analyse zu ca. 60% enthalten sein muß<sup>2</sup>. Dicht daneben liegen mindestens ein Peak bei ca. 8,5 eV aus der Reaktion  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}$ , gefolgt von zwei niederenergetischen Reaktionen bei 6,1 eV und 5,2 eV<sup>3</sup>. Der Anteil der nicht herausgefilterten Ereignisse aus der Transferionisation ist vergleichbar mit dem benachbarten Peak bei 8,5 eV und damit nicht vernachlässigbar. Von einer wirklichen Trennung der Reaktionskanäle kann an dieser Stelle folglich nicht gesprochen werden. In der Abbildungsserie fällt zunächst der Untergrund auf, der in den Spektren der Double-Hit-Analyse erfolgreich ausgefiltert werden konnte, in der Single-Hit-Analyse aber unvermeidbar ist. Eine genauere Untersuchung zeigt, daß alle Ereignisse im Energiespektrum oberhalb von 12,5 eV nicht mehr aus „echten“ Reaktionen stammen, sondern zu zufällig auf die Detektoren auftreffenden Teilchen gehören, die aber jeweils einzeln für sich betrachtet nicht von echten Ereignissen getrennt werden können.

Weiterhin fällt auf, daß sich der Hauptpeak mit zunehmendem Transversalimpuls etwas zu höheren Energien verschiebt. Dies kann folgendermaßen erklärt werden:

In der Berechnung der Energie wird davon ausgegangen, daß sich der auf das Molekül übertragene Impuls gleichmäßig auf beide Fragmente verteilt. Diese Annahme ist bei sehr nahen Zusammenstößen nicht mehr gerechtfertigt. In der Berechnung führt das dann zu geringfügig höheren Energien. In Abbildung 4.3 auf Seite 46 wird solch ein Prozeß beschrieben. In diesem Beispiel wird fast der gesamte Transversalimpuls aus

<sup>2</sup>siehe 3.2 letzter Absatz

<sup>3</sup>vergleiche dazu Abb. 1.3 auf Seite 13 und Abb. 1.1 auf Seite 11

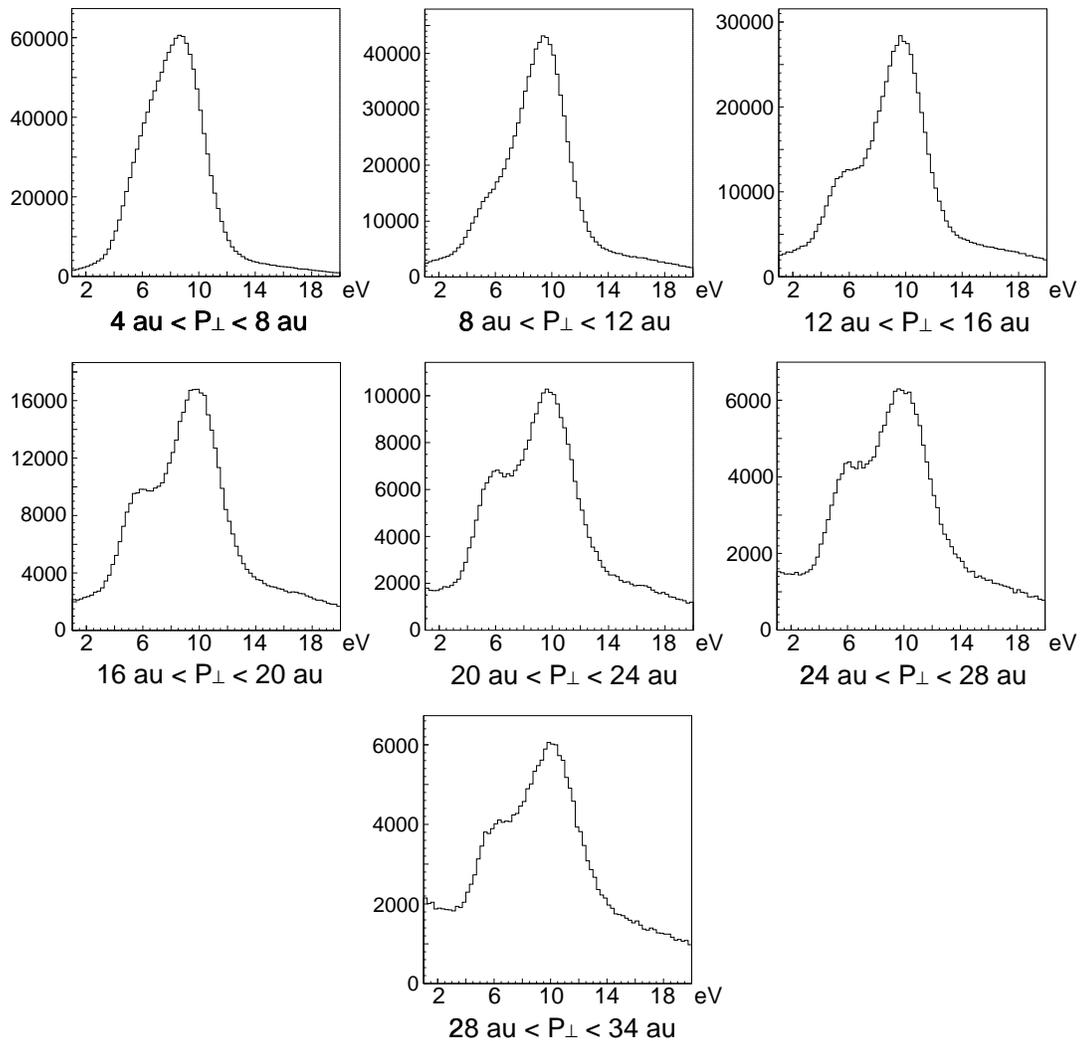


Abbildung 4.2: Energiespektren (eV) des Single-Capture-Kanals für verschiedene Transversalimpulse

der Streuung in Relativbewegung der Fragmente zueinander umgesetzt und in der Berechnung nicht als zusätzliche Energie von der eigentlichen Energie aus der Coulombexplosion getrennt. Die Abbildung 4.4 auf Seite 46 zeigt die dem Beispiel entsprechende Energiekurve aus dem Experiment. Dieser Effekt wird oft als „Non-Franck-Condon-Verhalten“ bezeichnet [13, 14]. Damit soll zum Ausdruck gebracht werden, daß in solchen Fällen die Aufbruchenergie nicht mehr ohne weiteres direkt aus den Potentialkurven abgelesen werden kann und somit anscheinend eine Verletzung des Franck-Condon-Prinzips vorliegt. Diese Bezeichnung ist jedoch, wie die oben angeführte Überlegung zeigt, irreführend, da die Verschiebung im Energiespektrum auch unter Beibehaltung des Franck-Condon-Prinzips erklärt werden kann.

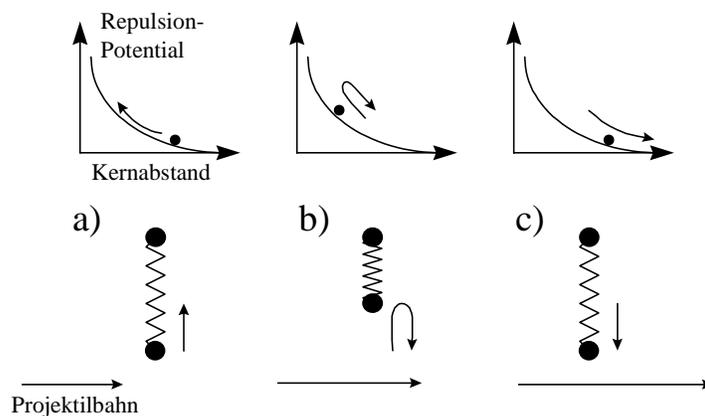


Abbildung 4.3: Ein Beispiel dafür, wie Energie aus dem Transversalimpulsübertrag zwischen Projektil und Molekül in Relativbewegung zwischen den  $D^+$ -Kernen umgewandelt werden kann. Dies führt bei der Analyse solch eines Ereignisses zu einer scheinbar größeren Aufbruchenergie um bis zu  $2\text{ eV}$ .

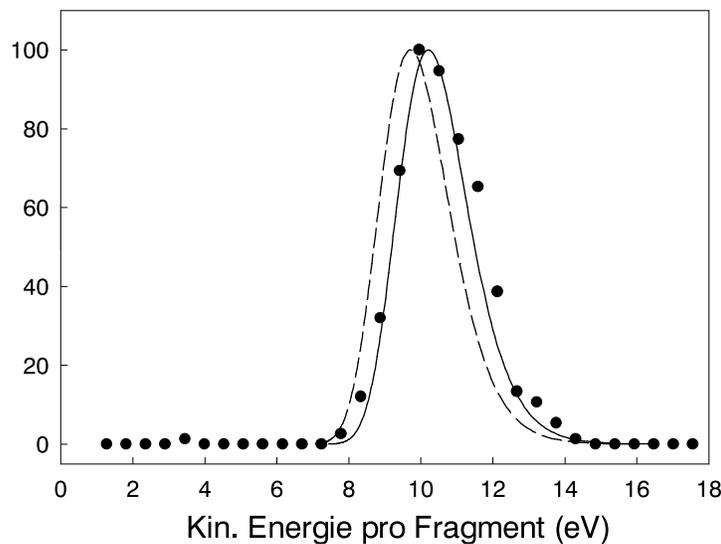


Abbildung 4.4: Dargestellt sind nur Reaktionen, in denen das Projektil stark (20 bis  $24\text{ au}$  Impuls) gestreut wurde. Es sind nur solche Reaktionen enthalten, die Abb. 4.3 entsprechen, d.h. bei denen die Molekülachse in der Streuebene lag und das Molekül senkrecht zum Strahl orientiert war. Die Punkte geben die Daten aus der Double-Capture-Reaktion wieder. Die durchgezogene Linie ist die theoretische, nach obigem Modell berechnete, verschobene Energiekurve. Die gestrichelte Linie ist nochmals zum Vergleich die theoretisch zu erwartende Verteilung aus Abbildung 4.1. Diese Abbildung bildet das Gegenstück zu Abb. 4.1, in der nur Ereignisse mit kleinen Transversalimpulsen dargestellt sind.

## 4.0.2 Die Winkelverteilung im Impulsraum

Die Ausrichtung des Moleküls im Laborsystem wird durch den Polarwinkel  $\theta$  und den Azimutalwinkel  $\varphi$  beschrieben. Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß der Winkel  $\theta$  nur die Ausrichtung des Moleküls betrifft und nicht mit dem Streuwinkel des Projektils in Verbindung steht. Die Darstellung des Azimutalwinkels relativ zur Streuebene, die durch den Streuwinkel des Projektils definiert ist, ist jedoch sinnvoller und soll deshalb im folgenden an Stelle von  $\varphi$  verwandt werden. Dieser Zwischenwinkel wird mit  $\psi$  gekennzeichnet.

In den folgenden Diagrammen wird die Intensität pro Raumwinkelement  $d\Omega$  dargestellt. Da

$$d\Omega \sim d\psi d(\cos\theta) = d\psi d\theta \ 1/\sin\theta$$

gilt, muß entweder jedes Ereignis mit dem Faktor  $1/\sin\theta$  gewichtet werden oder, um die Gefahr von Singularitäten zu vermeiden,  $\cos\theta$  direkt dargestellt werden.

Abbildung 4.5 auf Seite 48 zeigt die Winkelverteilungen für bestimmte Intervalle im Transversalimpulsübertrag  $P_{\perp}$ .

Es ist ein Zusammenhang zwischen Transversalimpuls und  $\theta$  sichtbar: Große Transversalimpulse scheinen nur dann möglich, wenn das Molekül nicht senkrecht zum Projektilstrahl stand, sondern geneigt war. Das ist daran zu erkennen, daß die beiden Hauptpeaks für große Transversalimpulse nach außen wandern. Dieses Verhalten ist jedoch plausibel, wenn man bedenkt, daß im Falle des entlang des Projektilstrahls orientierten Moleküls das Projektil sehr dicht an beiden Kernen vorbeifliegen kann. Das ist bei einem senkrecht zum Strahl orientierten Molekül nicht der Fall. Hier kann das Projektil nur an einem Kern nah vorbei fliegen.

Zunächst zeigen die beiden Bilderreihen für den Double-Capture bzw. die Single-Capture-Kanäle qualitativ das gleiche Verhalten. Ein Unterschied aber besteht zwischen den maximalen Intensitäten, d.h. den Wirkungsquerschnitten in den Maxima der Verteilungen. Das Verhältnis zwischen dem jeweils ersten und dritten Bild beträgt im Falle des Double-Capture-Kanals ca. 20% und 46% für den Single-Capture-Kanal. Bei genauerer Betrachtung fallen auch qualitative Unterschiede zwischen den Single-Capture-Reaktionen auf (siehe Abb. 4.7 auf Seite 50).

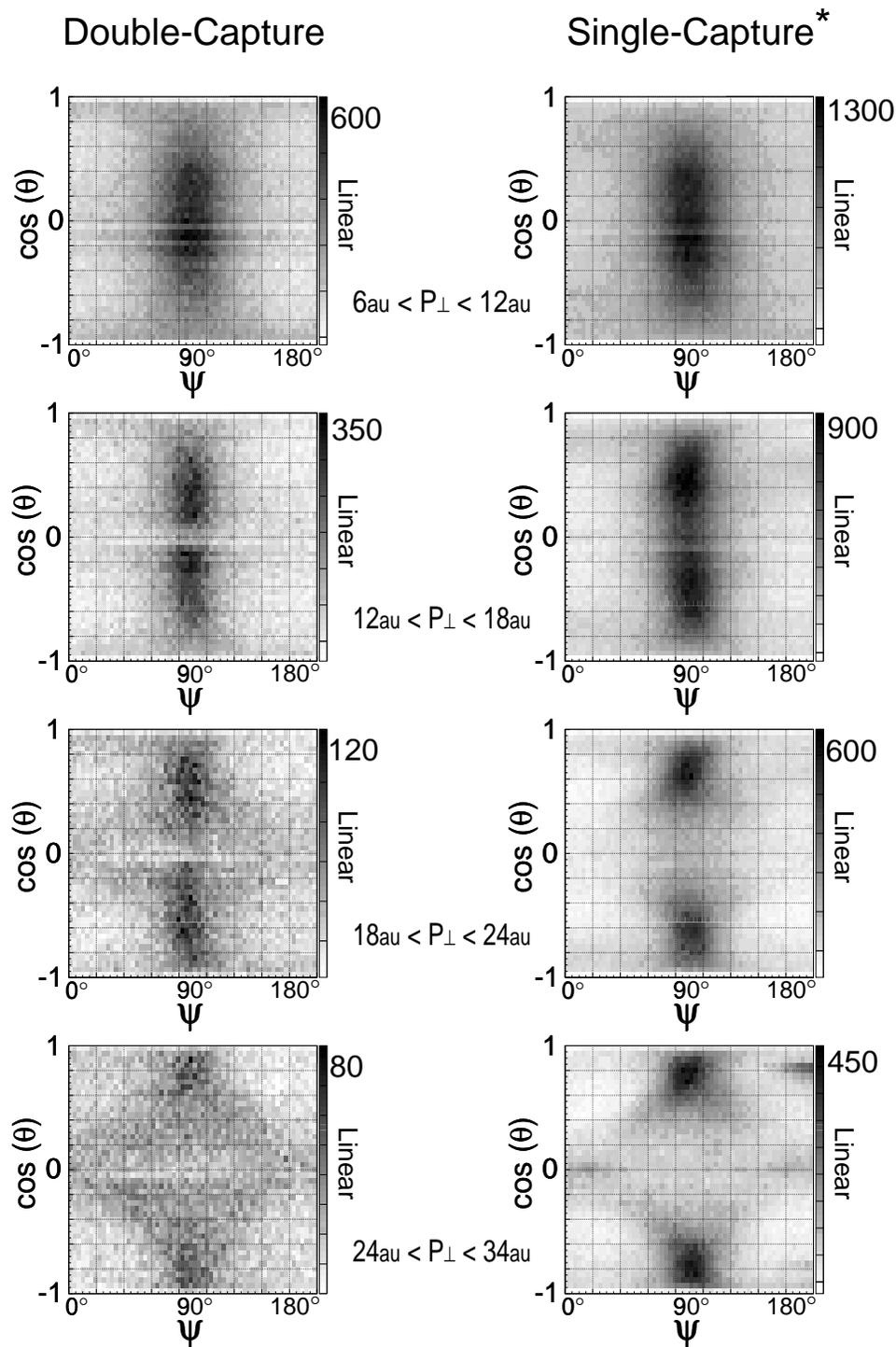


Abbildung 4.5: Gegenüberstellung des Double-Capture- und der Single-Capture-Kanäle in der Orientierung des Moleküls für verschiedene Transversalimpulse. Es zeigt sich eine hohe Konzentration um  $\psi = 90^\circ$ . Geometrisch ist dies folgendermaßen zu verstehen: Sei  $\vec{m}$  die Projektion der Molekülachse in die  $\vec{x} \times \vec{y}$ -Ebene, d.h. der Ebene, die senkrecht zum Projekttilstrahl orientiert ist. Dann bedeutet ein Winkel von  $\psi = 90^\circ$ , daß das Projektil senkrecht zu  $\vec{m}$  gestreut wurde. Dieser Umstand wird weiter unten im Rahmen einer einfachen Monte-Carlo-Simulation nochmals beobachtet. \*Auch in den an dieser Stelle gezeigten Darstellungen des Single-Capture-Kanals sind Ereignisse aus der Transferionisation aufgrund der begrenzten Nachweiseffizienz des Detektors teilweise noch enthalten.

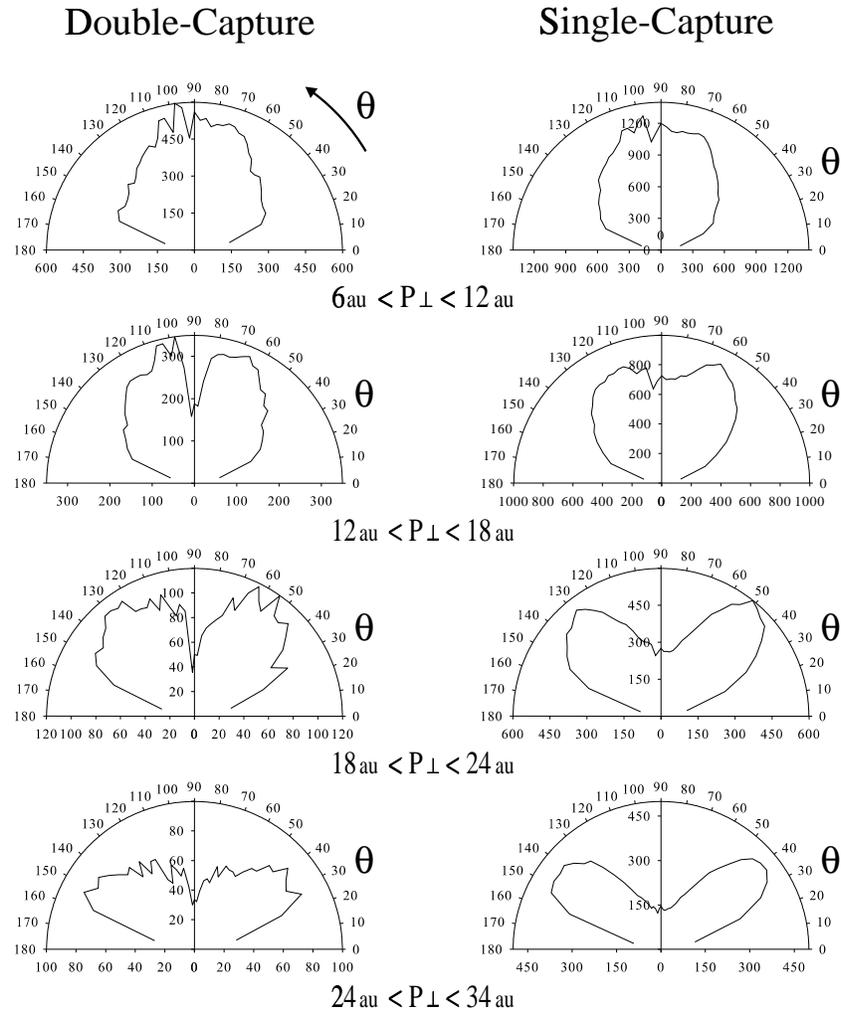


Abbildung 4.6: Darstellung von Schnitten durch die Winkelverteilungen in Abbildung 4.5 in Polar-darstellung. Dargestellt sind Ereignisse mit  $105^{\circ} > \psi > 75^{\circ}$ . Die Einschnitte bei  $\theta = 0^{\circ}$  bzw.  $\theta = 180^{\circ}$  sind auf ein Binningproblem zurückzuführen, das bei genauerer Betrachtung auch in Abbildung 4.5 bei  $\cos(\theta) = \pm 1$  auffällt.

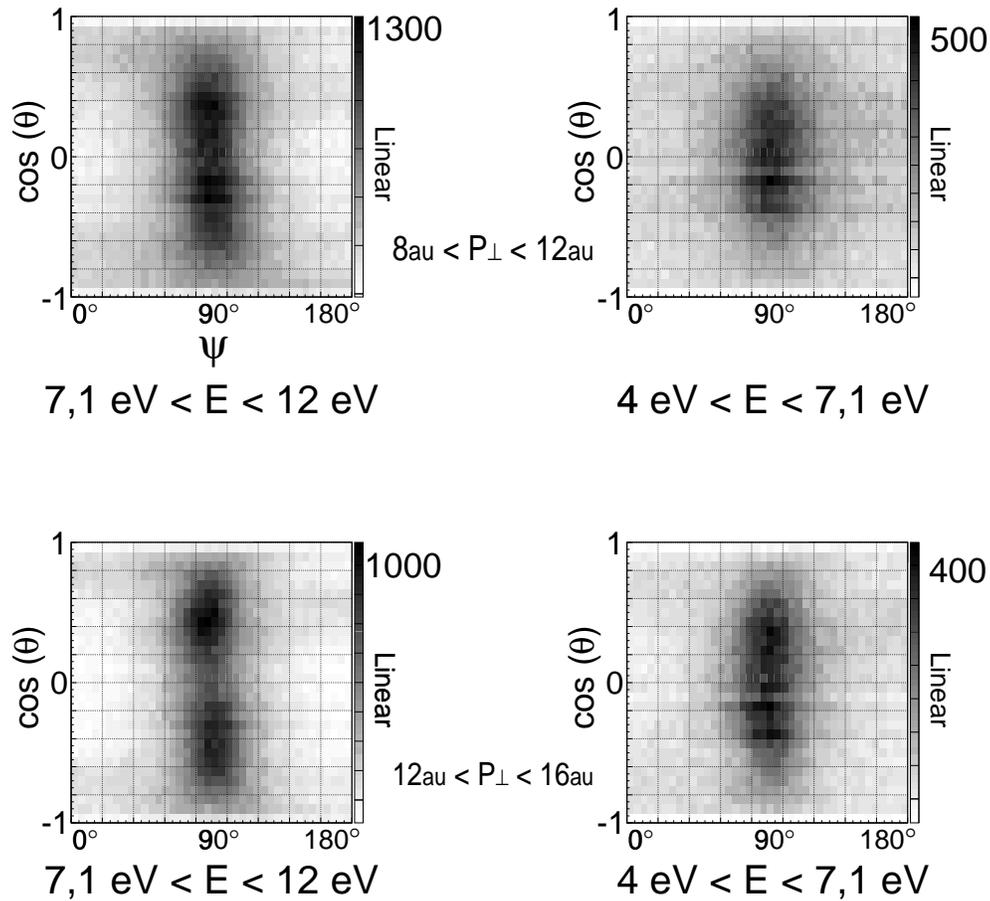


Abbildung 4.7: Die Single-Capture-Reaktionen können im Energiespektrum nur grob getrennt werden. Dargestellt ist die Winkelverteilung für zwei unterschiedliche Energiebereiche und Transversalimpulse. Es zeigt sich, daß sich selbst die Single-Capture-Prozesse untereinander in der Winkelverteilung unterscheiden. Es kann jedoch leider wiederum nicht entschieden werden, wie stark sich der störende Resteinfluß der Ereignisse aus der Transferionisation bei diesen Darstellungen auswirkt.

### 4.0.3 Die Streuung des Projektils

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, inwiefern die Streuweite des Projektils (d.h. die Größe des Transversalimpulses) von der Art der Reaktion und der Orientierung des Moleküls abhängt. Dabei wird versucht, zwischen den Reaktionen im Single-Capture-Kanal zu differenzieren. Die beiden niederenergetischen Single-Capture-Reaktionen können im Energiespektrum separiert werden, da unterhalb von ca.  $7,9 \text{ eV}$  keine Beiträge der anderen, höherenergetischen Reaktionen zu erwarten sind. Eine Unterscheidung der Reaktionen im Bereich oberhalb von  $7,9 \text{ eV}$  ist nicht möglich, da sie im Energiespektrum zu dicht beieinander liegen.

In den folgenden Abbildungen ist der Transversalimpuls dargestellt, den das Projektil relativ zur Ausrichtungsebene des Moleküls erhält. In Abbildung 4.8 wird diese Art der Darstellung genauer erläutert.

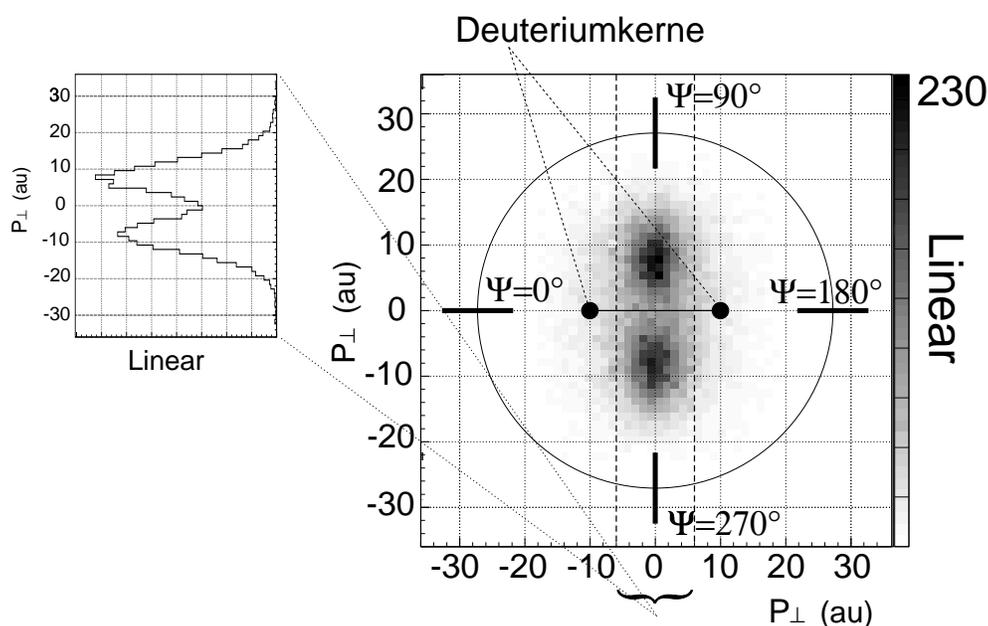


Abbildung 4.8: Erläuterung der folgenden Darstellungen an einem Beispielgraph. Das  $D_2$ -Molekül ist horizontal ausgerichtet. Eine Streuung des Projektils nach oben entspricht z.B. in dieser Darstellung einem Streuwinkel von  $\psi = 90^{\circ}$ . Die eindimensionalen Projektionen sind vertikale Schnitte entlang eines  $12 \text{ au}$  breiten Streifens.

Beschränkt man sich bei der Untersuchung im Single-Capture-Kanal auf die beiden niederenergetischen Reaktionen (d.h. unterhalb von  $7,9\text{ eV}$ ), so wird keine Aufspaltung des Peaks in den Darstellungen sichtbar, d.h. sie sehen exakt so aus wie die in Abb. 4.9 dargestellten Bilder für den Double-Capture-Kanal, weshalb sie an dieser Stelle nicht gesondert gezeigt werden.

Im Single-Capture-Kanal liegen im Bereich zwischen ca.  $9,3\text{ eV}$  und  $12,5\text{ eV}$  viele Reaktionen des Typs  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \longrightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}(n)$  und Reste der Transferionisation  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \longrightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$ . In diesem Energiebereich ist eine Aufspaltung sichtbar (Abb. 4.10 Seite 54), allerdings ist sie schwächer ausgeprägt als in Abb. 4.9 auf Seite 53. Es kann nicht entschieden werden, ob die Reste der Transferionisation  $\longrightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$  allein nur die Aufspaltung zeigen und die anderen Reaktionen nicht, oder ob die Single-Capture-Reaktionen in dieser Region auch eine Aufspaltung aufweisen, die aber schwächer ausfällt. In Abbildung 4.11 auf Seite 54 ist der Transversalimpuls gegen die kinetische Energie der Fragmente aufgetragen.

Im Double-Capture-Kanal ist gut zu sehen, wie ein größerer Transversalimpuls zu leicht erhöhten Aufbruchenergien führt. An dieser Stelle wird das Phänomen nochmals sichtbar, das bereits unter dem Stichwort „Non-Franck-Condon-Verhalten“ in Kapitel 4.0.1 auf Seite 44 diskutiert wurde.

Im Bild für den Single-Capture-Kanal zeigt sich ein großer Unterschied zwischen den Reaktionen überhalb und unterhalb von ca.  $7,9\text{ eV}$ . Anscheinend laufen die niederenergetischen Reaktionen im Vergleich zu den höherenergetischen eher in größeren Entfernungen zu den Deuteriumkernen ab, denn sonst würden sie nicht so geringe Transversalimpulse aufweisen.

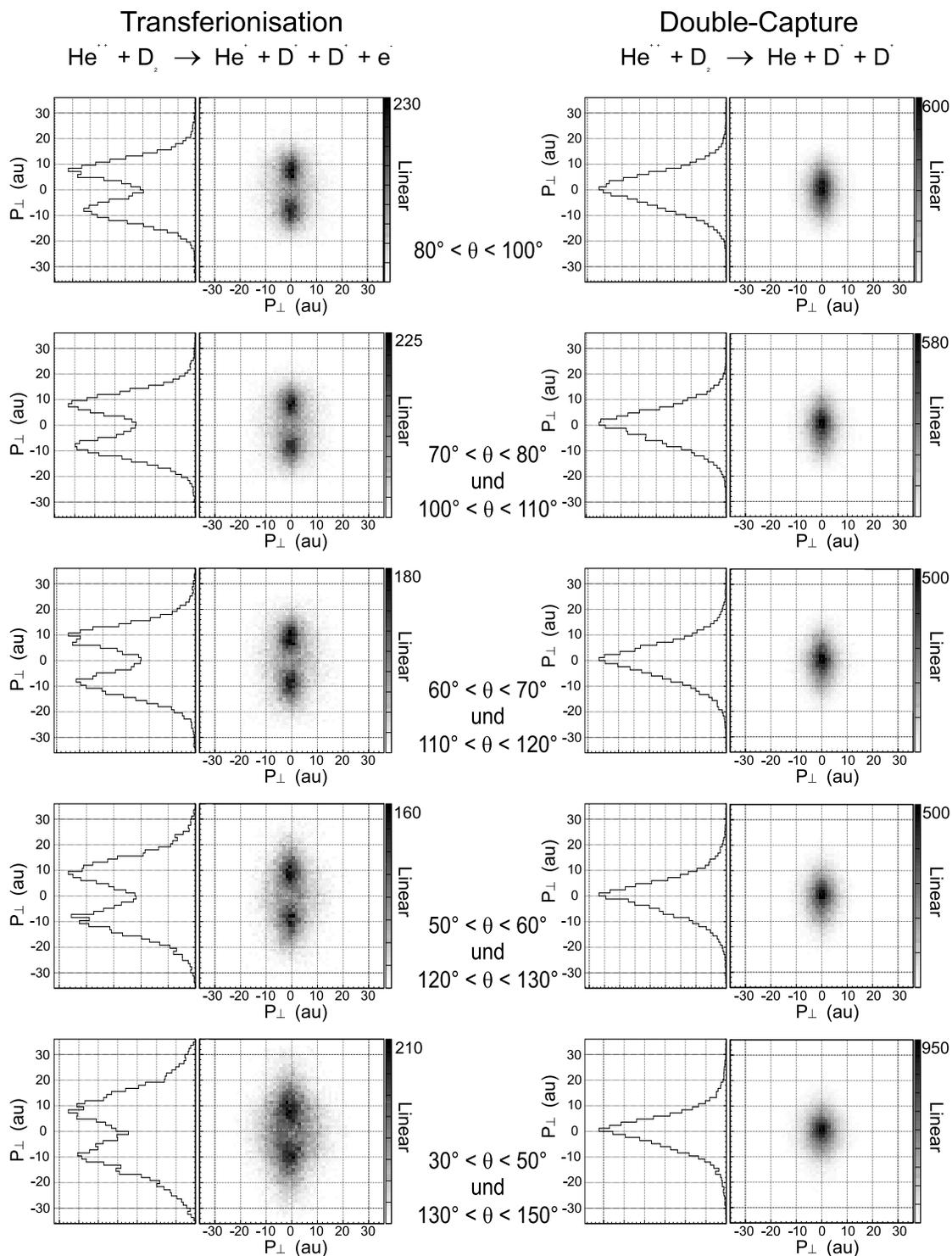


Abbildung 4.9: Vergleich zwischen der Projektilstreuung im Double-Capture-Kanal und der Transferionisation  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$ . Die Bilder sind aufgeteilt nach bestimmten Intervallen in  $\theta$ . Die entsprechenden Abbildungen für die Single-Capture-Reaktionen unterhalb von  $7,9\text{ eV}$  weisen wie für Double-Capture gezeigt nur einen Peak auf und sind deshalb nicht nochmals dargestellt.

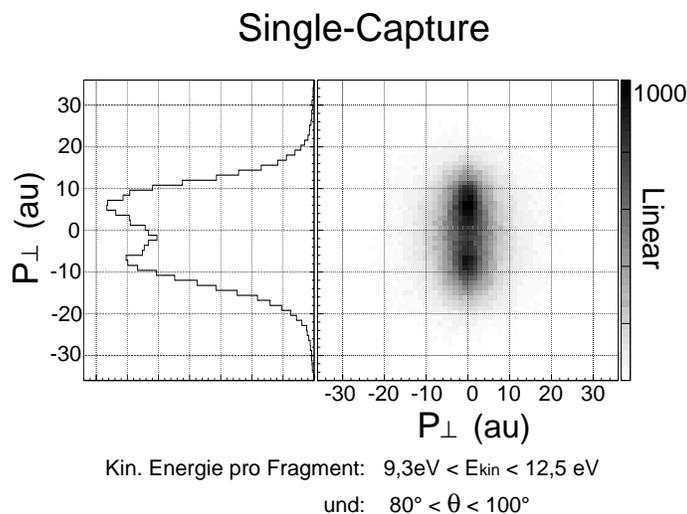


Abbildung 4.10: Im Single-Capture-Kanal liegen im Bereich zwischen ca.  $9,3\text{ eV}$  und  $12,5\text{ eV}$  viele Reaktionen des Typs  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}(n)$  und Reste der Transferionisation  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$ . In diesem Energiebereich ist eine Aufspaltung sichtbar (Abb. 4.10 Seite 54), allerdings ist sie schwächer ausgeprägt als in Abb. 4.9 auf Seite 53. Es kann nicht entschieden werden, ob die Reste der Transferionisation  $\rightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$  alleine nur die Aufspaltung zeigen und die anderen Reaktionen nicht, oder ob die Single-Capture-Reaktionen in dieser Region auch eine Aufspaltung aufweisen, die aber schwächer ausfällt.

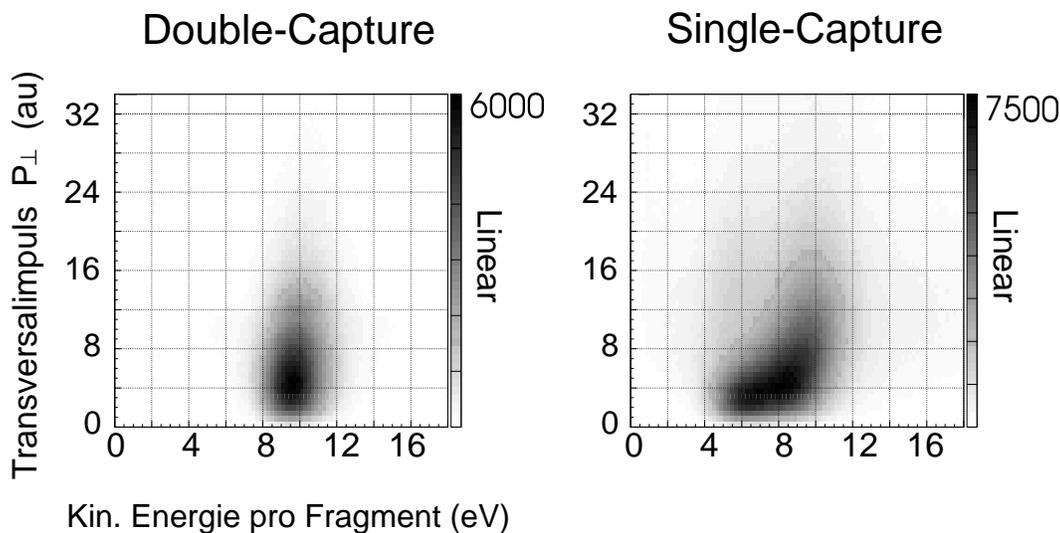


Abbildung 4.11: Gegenüberstellung des Transversalimpulses und der Aufbruchenergie pro Fragment für den Double-Capture- und den Single-Capture-Kanal. Die Energien sind wieder keine Energien im Laborsystem sondern die anhand des Transversalimpulses korrigierten. Zwischen der entsprechenden Darstellung für die Transferionisation und dem Double-Capture- Kanal sind keine Unterschiede sichtbar. Sie wurde aus diesem Grund nicht dargestellt.

# Kapitel 5

## Ein einfaches Modell

Im folgenden wird ein einfaches Modell beschrieben, das verstehen hilft, inwiefern die Resultate des Experiments von der Kinetik der Kerne oder vom Transferverhalten der Elektronen abhängen. Es handelt sich um eine reine Rutherford-Streuung an zwei Stoßzentren, die die Kerne des Moleküls darstellen. Anhand dieses Modells wurde eine Monte-Carlo-Simulation durchgeführt. Als Target wurden  $D_2^+$ -Moleküle mit einem festen Kernabstand und einer homogenen Verteilung in  $\cos(\theta)$  und  $\varphi$  gewählt. Bei dieser Art Simulation sind bestenfalls qualitative Übereinstimmungen mit den Meßergebnissen zu erwarten, da nur die Stoßzentren an sich betrachtet werden und zum Beispiel keine Abschirmungseffekte durch die umgebende Elektronenwolke. Eine physikalisch exaktere Methode zur Simulation der Stoßprozesse ist die CTMC-Simulation (Classical Trajectory Monte Carlo), die von Ron Olson et al. [44, 50] für Berechnungen am  $D_2$ -Molekül benutzt wird. Dabei wird die Stoßkinematik zwischen den beteiligten Teilchen (inklusive den Elektronen) klassisch berechnet, die Anfangszustände des Systems entsprechen jedoch quantenmechanisch berechneten bzw. experimentell bestimmten Werten. Das heißt, die Elektronen und Kerne werden den quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten gemäß im Impuls- und Ortsraum verteilt.

## Mathematische Beschreibung des Modells

Um den Vorbeiflug des Projektils an dem Molekül zu simulieren, wird zunächst der Impulsübertrag zwischen den Kernen und dem Projektil einzeln berechnet und dann summiert. Es wird nur der Impulsübertrag senkrecht zur Strahlrichtung berücksichtigt, d.h. der Transversalimpuls.

Das Streuzentrum (in diesem Fall ein Deuteriumkern) liegt bei der Rechnung zunächst im Koordinatenursprung. Das Projektil bewegt sich mit einer Geschwindigkeit  $v$  aus dem Unendlichen ( $z = -\infty$ ) entlang der  $z$ -Achse auf das Streuzentrum zu.  $x$  und  $y$  entsprechen dem Stoßparameter bei der klassischen Rutherford-Streuung. Um den

Transversalimpuls z.B. in  $\vec{x}$ -Richtung zu berechnen, muß die abstoßende Kraft entlang der Flugzeit integriert werden:

$$P_x(x, y) = \int_{t=-\infty}^{t=+\infty} \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{x^2 + y^2 + (vt)^2} \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + (vt)^2}} dt \quad (5.1)$$

$$= \int_{z=-\infty}^{z=+\infty} \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dz \quad (5.2)$$

$$= \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 v} x \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} (x^2 + y^2)} \Big|_{z=-\infty}^{z=+\infty} \quad (5.3)$$

$$= \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 v} x \frac{1}{x^2 + y^2} \quad (5.4)$$

Nun soll mit Hilfe dieses Modells ein Vorbeiflug am Molekül, d.h. ein Stoß mit zwei Streuzentren berechnet werden. Im einfachsten Fall liegen die beiden Kerne an den Positionen  $(x = +d/2, y = 0, z = 0)$  und  $(-d/2, 0, 0)$ , wobei  $d$  für den mittleren Kernabstand des Moleküls  $d = 0,741 \text{ \AA}$  steht. Der Transversalimpuls  $P'_x$  berechnet sich wie folgt:

$$P'_x(x, y) = P_x(x + \frac{d}{2}, y) + P_x(x - \frac{d}{2}, y) \quad (5.5)$$

Analog dazu verläuft die Rechnung für  $P'_y = P_y(x + \frac{d}{2}, y) + P_y(x - \frac{d}{2}, y)$ .

Es sei nochmals erwähnt, daß in diesem Modell keine Abschirmungseffekte und verschiedene Ladungszustände des Projektils berücksichtigt werden.

## Die simulierte Winkelverteilung

Ein wichtiges Ergebnis der Simulation ist, daß dieses einfache Modell die Konzentration um  $\psi = 90^\circ$  und die Aufspaltung in  $\cos(\theta)$  bei großen Transversalimpulsen zumindest qualitativ erklären kann. Die Bilder in Abbildung 5.1 sind mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation erstellte Darstellungen. Sie können direkt mit den entsprechenden Darstellungen 4.5 der Meßdaten in Kapitel 4.0.2 (Seite 47) verglichen werden.

## Die simulierte Streuung des Projektils

In Kapitel 4.0.3 wurde anhand der Meßdaten gezeigt, daß sich zumindest die Transferrionisation  ${}^3\text{He}^{++} + \text{D}_2 \longrightarrow {}^3\text{He}^+ + \text{D}^+ + \text{D}^+ + e^-$  vom Double-Capture-Kanal sehr in der Abhängigkeit vom Stoßparameter unterscheidet. Mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation wurde versucht, diesen Unterschied abzuschätzen. Es wird versucht werden, die Ergebnisse in Abbildung 4.9 auf Seite 53 zumindest qualitativ zu reproduzieren. Da

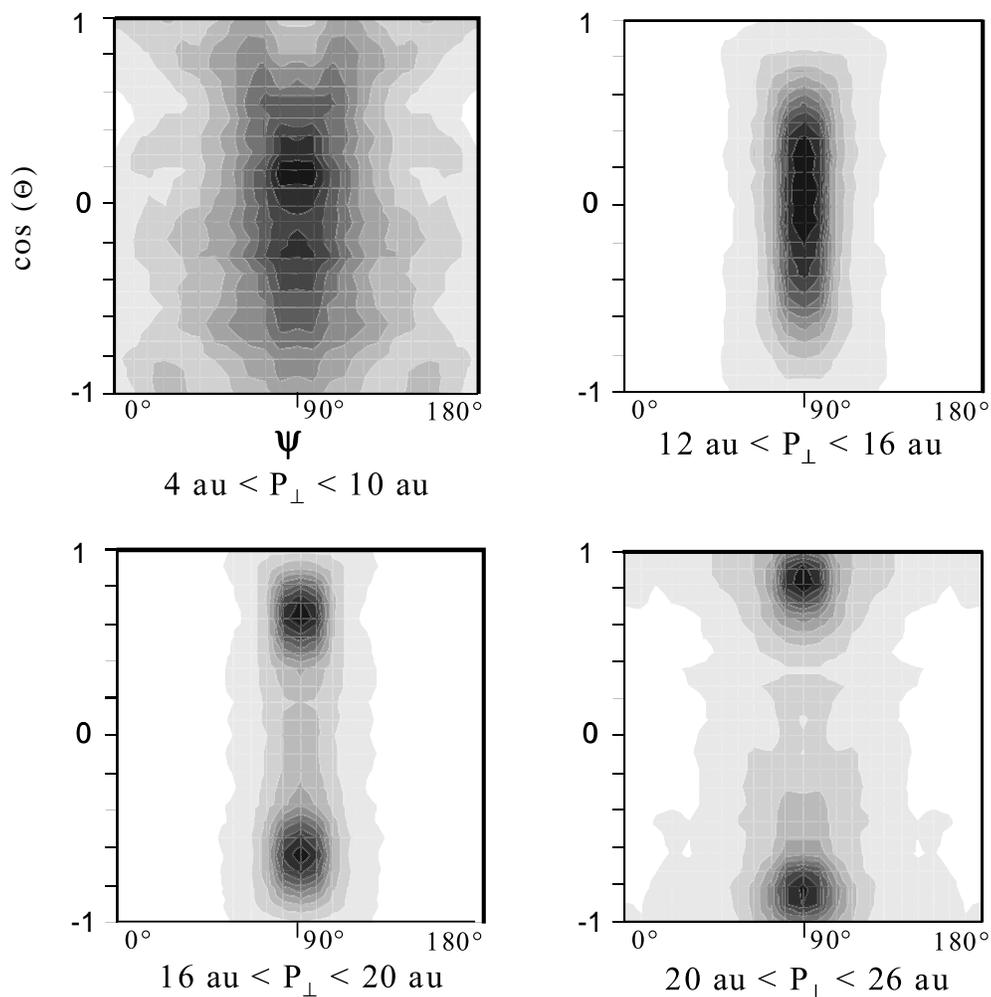


Abbildung 5.1: Mit dem Modell berechnete Winkelverteilung. Vergleiche hierzu Abbildung 4.5 auf Seite 48

in diesem Modell keine Abschirmeffekte der Elektronenwolken und keine exakten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen berücksichtigt werden, kann damit keine genaue Simulation durchgeführt werden. Trotzdem soll versucht werden auch auf die Unterschiede zwischen Double-Capture und Transferionisation einzugehen.

An dieser Stelle muß genauer auf den Begriff Stoßparameter eingegangen werden. Ursprünglich stammt er aus der Physik der Streuprozesse, bei denen das Streuzentrum selbst keine signifikante Ausdehnung und Struktur besitzt, so daß die Angabe des Stoßparameters als einfaches Skalar vollkommen genügt, um die asymptotische Anfangsgeometrie des Stoßprozesses zu beschreiben. Schon bei einem diatomaren Molekül jedoch genügt die einfache Angabe des Stoßparameters relativ zum Molekülmittelpunkt nicht mehr, da sie keine genaue Information darüber enthält, wie nahe das Projektil einem Deuteriumkern kam. Den folgenden Rechnungen liegt die Annahme zugrunde, daß ein

Doppel-Einfang am wahrscheinlichsten ist, wenn das Projektil das Molekül in dessen Mitte zwischen den Kernen durchfliegt, da dort die Wahrscheinlichkeit am größten ist, beide Elektronen anzutreffen. Transferionisations- und Single-Capture-Reaktionen dagegen werden eher ablaufen, wenn das Projektil dem einen oder dem anderen Deuteriumkern nahe kam, denn bei beiden Reaktionen fängt das Projektil nur ein Elektron ein. Wie schon erwähnt tauchen in dieser einfachen Simulation keine Elektronendichten auf. Um trotzdem die oben genannten Annahmen in das Modell einfließen zu lassen, muß die Verteilung der Reaktionswahrscheinlichkeit entsprechend modelliert werden. Im Falle von Double-Capture wurde deshalb eine Gaußförmige Verteilung der Reaktionswahrscheinlichkeit über der Mitte des Moleküls angenommen ( $\sigma = 0,082 \text{ \AA}$ ). Für die Transferionisation bzw. Single-Capture wurden über die Deuteriumkerne Gaußkurven ( $\sigma = 0,22 \text{ \AA}$ ) gelegt, die in der Addition miteinander verschmelzen. Dies ist in Abbildung 5.2 verdeutlicht.

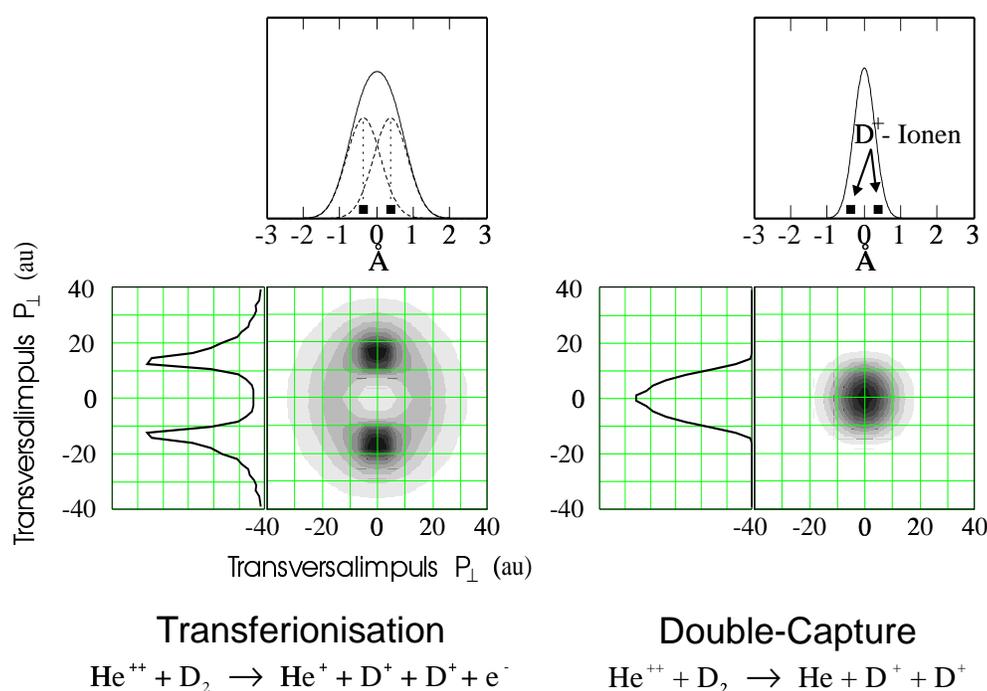


Abbildung 5.2: Die beiden Bilder sind direkt mit denen in Abb. 4.9 auf Seite 53 vergleichbar. Die beiden oberen Kurven zeigen die Verteilungen der Reaktionswahrscheinlichkeiten, die für die Simulation verwandt wurden, um grob die ungefähren Elektronendichten im Molekül zu berücksichtigen. Bei dieser Berechnung stand das Molekül stets senkrecht zum Projektilstrahl ( $\theta = 90^\circ$ ).

Es zeigt sich, daß bei geeigneter Wahl der Kurvenbreiten dieses sehr einfache Modell die experimentellen Ergebnisse zumindest qualitativ reproduzieren kann. Afrosimov et al. [1] findet für die Double-Capture-Reaktion und die Transferionisation Wirkungsquerschnitte von  $0,17 \text{ \AA}^2$  bzw.  $0,9 \text{ \AA}^2$ . Diese Werte entsprechen in einfachster Näherung Radien von ca.  $0,23 \text{ \AA}$  bzw.  $0,54 \text{ \AA}$ . Diese Werte sind größer als die modellierten

Kurvenbreiten. Die Quotienten sind sich jedoch mit  $\frac{0,54}{0,23} \approx 2,3$  bzw.  $\frac{0,22}{0,082} \approx 2,7$  sehr ähnlich.

## Zusammenhang zwischen Stoßparameter und Streuwinkel

Es stellt sich heraus, daß anhand der Endposition des Projektils nicht eindeutig auf den Stoßparameter rückgeschlossen werden kann. Vielmehr existieren immer zwei mögliche Passagen durch, bzw. am Molekül vorbei, die die gleiche Ablenkung des Moleküls zur Folge haben. In Abbildung 5.3 wird dies verdeutlicht. Das  $D_2^+$ -Molekül ist horizontal ausgerichtet. Die Kerne befinden sich bei ca.  $X = \pm 0,37 \text{ \AA}$ . Im Extremfall einer sehr starken Ablenkung des Projektils kann zwar ausgerechnet werden, wie nahe es einem Kern kam - es kann aber keine Aussage darüber getroffen werden, an welchem es gestreut wurde. Da nicht bekannt ist, welchen Weg das Projektil geflogen ist, sollten evtl. Interferenzeffekte zu erwarten sein. Dies soll in Kapitel A.1 gesondert diskutiert werden.

Die dem oben beschriebenen Modell zugrunde liegenden Berechnungen sind dem Be-

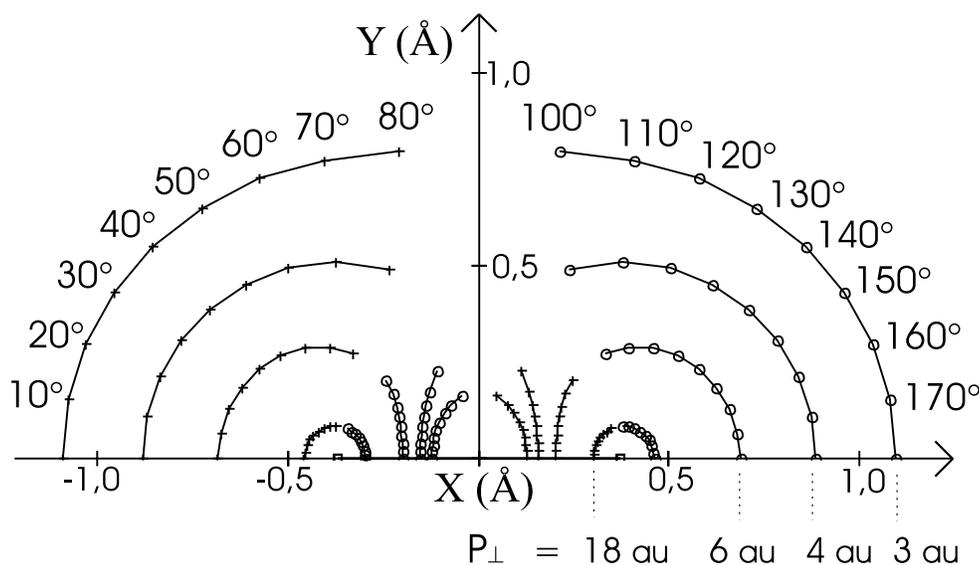


Abbildung 5.3: Das Bild zeigt, auf welchen Wegen das Projektil am Molekül vorbeifliegen muß, um einen bestimmten Transversalimpuls  $P_{\perp}$  zu erhalten. Die Gradangaben beziehen sich auf die Endposition des Projektils auf dem Projektildetektor relativ zur Molekülebene. Die Kerne des Moleküls liegen auf der horizontalen Achse und sind durch kleine Kästchen symbolisiert. Kreise stehen für Passagen, bei denen das Projektil in dieser Darstellung nach rechts abgelenkt wird - Kreuze für eine Ablenkung nach links.

reich der klassischen Mechanik entnommen. Es stellt sich die Frage, wo die Gültigkeitsgrenzen dieser Rechnungen liegen, d.h. an welcher Stelle der Einfluß quantenmechanischer Effekte so stark wird, daß die rein klassisch motivierten Überlegungen nicht mehr gerechtfertigt sind.

N. Bohr [7]<sup>1</sup> schlägt für klassische Berechnungen des Streuprozesses das folgende modifizierte Coulombpotential vor:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \exp\left(\frac{-r}{a}\right) \quad (5.6)$$

Die Ergänzung durch die Exponentialfunktion soll Abschirmungseffekten der Elektronenwolken Rechnung tragen; dabei ist  $a$  ein Maß für die Abschirmung. Er schlägt weiterhin vor, für die Abschirmung

$$a = \frac{a_0}{\sqrt{Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}}} \quad (5.7)$$

anzunehmen, wobei  $a_0 = 0,52 \text{ \AA}$  der Bohrsche Radius ist. Es stellt sich heraus [9], daß klassische Rechnungen in diesem Rahmen erlaubt sind, wenn zwei Kriterien erfüllt sind: Die DeBroglie-Wellenlänge  $\lambda = h/p$  des Projektils soll klein gegenüber dem Stoßmaß  $d$  sein<sup>2</sup>, d.h.

$$\lambda \ll d = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\frac{1}{2} m_{red} v^2} \quad (5.8)$$

wobei  $m_{red}$  für die reduzierte Masse  $\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  des Systems und  $v$  für die Projektilgeschwindigkeit steht. Diese Bedingung erinnert an Beugungsexperimente am Spalt. Dort ist auch das Verhältnis zwischen Wellenlänge und Spaltbreite für das klassische bzw. quantenmechanische Verhalten der gestreuten Teilchen oder Lichtwellen entscheidend.

Das zweite Kriterium betrifft den Streuwinkel, um den das Projektil aus seiner anfänglichen Bahn herausgelenkt wird. Es besagt, daß eine klassische Beziehung zwischen Streuwinkel und Stoßparameter nur dann angenommen werden darf, wenn der Streuwinkel größer als ein bestimmter Grenzwinkel  $\beta$  ist.

$$\beta \approx \frac{\lambda}{2\pi a} \quad (5.9)$$

Im Falle des hier vorgestellten Experiments ist die erste Bedingung  $\lambda \ll d$  mit  $\lambda = 1,66 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}$  und  $d = 1,30 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$  erfüllt. Der Grenzwinkel für die Streuung des Projektils beträgt  $\beta \approx 0,5 \text{ mrad}$ . Dies entspricht in diesem speziellen Experiment einem Transversalimpuls von ca.  $1 \text{ au}$ . Im Abschnitt zur Meßgenauigkeit des Systems (siehe Kap. 2 auf Seite 41) ist gezeigt worden, daß es schon aufgrund der begrenzten Ortsauflösung des Projektildetektors und der ausgedehnten (ca.  $4 \text{ mm}^2$ ) Kollisionszone zwischen Projektilstrahl und Target-Jet nicht sinnvoll ist, zwischen Transversalimpulsen unterhalb von ca.  $4 \text{ au}$  differenzieren zu wollen. Das bedeutet, daß im vorliegenden Experiment - im Rahmen der Meßgenauigkeit der Apparatur - der Zusammenhang zwischen Streuwinkel, Transversalimpuls und Stoßparameter klassisch diskutiert werden darf.

---

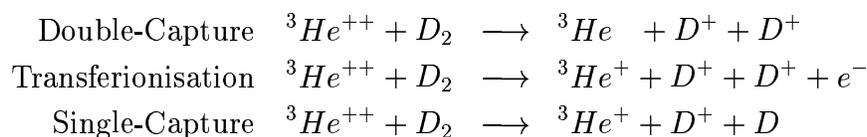
<sup>1</sup>siehe auch [8]

<sup>2</sup> $d$  ist die Mindestdistanz, auf die das Projektil dem Stoßzentrum nahe kommen kann, wenn es direkt darauf zufliegt (Stoßparameter  $b = 0$ ) und es keine Abschirmungseffekte gibt.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Es wurden erstmals die Reaktionen



mit vollständiger Winkelauflösung und Messung der Streuebene des Projektils bei einer Projektilenergie von  $3,3 \text{ keV}/amu$  untersucht.

Es stellte sich heraus, daß vor allem im Single-Capture-Kanal die Form des Energiespektrums (Seite 45: Abb. 4.2 und Seite 54: Abb. 4.11 rechts) stark vom Streuwinkel und damit vom Stoßparameter abhängt. Weiterhin wurde beobachtet und beschrieben, wie durch den Stoß zwischen Projektil und Molekülkernen Energie in die Relativbewegung zwischen den Molekülkernen verlagert werden kann und so zu etwas größeren Aufbruchsenergien führt. Das ist ein Prozeß, der oftmals etwas irreführend als Non-Franck-Condon-Effekt bezeichnet wird [13, 14].

Weiterhin wurde ein starker Zusammenhang zwischen Winkelausrichtung des Moleküls und der Streurichtung des Projektils beobachtet: Es zeigt sich, daß das Projektil meist senkrecht zu  $\vec{m}$  gestreut wird, wobei  $\vec{m}$  die Linie darstellt, die sich ergibt, wenn die Molekülachse in die  $\vec{x} \times \vec{y}$ -Ebene senkrecht zum Projektilstrahl projiziert wird. Des weiteren wurde beobachtet, daß große Streuwinkel des Projektils meist nur dann zustande kommen, wenn das Molekül parallel zum Projektilstrahl ausgerichtet ist (Abb. 4.5, Seite 48). Diese beiden Beobachtungen konnten mit Hilfe einer einfachen Monte-Carlo-Simulation reproduziert werden (Abb. 5.1, Seite 57).

Die in diesem Abschnitt diskutierten Effekte werden erst durch die Messung der Streuebene des Projektils sichtbar. Wird die Streuebene nicht bestimmt<sup>1</sup> und nur  $\cos(\theta)$  dargestellt, dann ist die Aufspaltung der zwei Peaks in  $\cos(\theta)$  kaum sichtbar (siehe Abbildung 6.1). Zwischen dem Double-Capture- und dem Transferionisationskanal be-

---

<sup>1</sup>Dies ist zum Beispiel bei ähnlichen Experimenten mit schweren Projektilen nicht möglich.

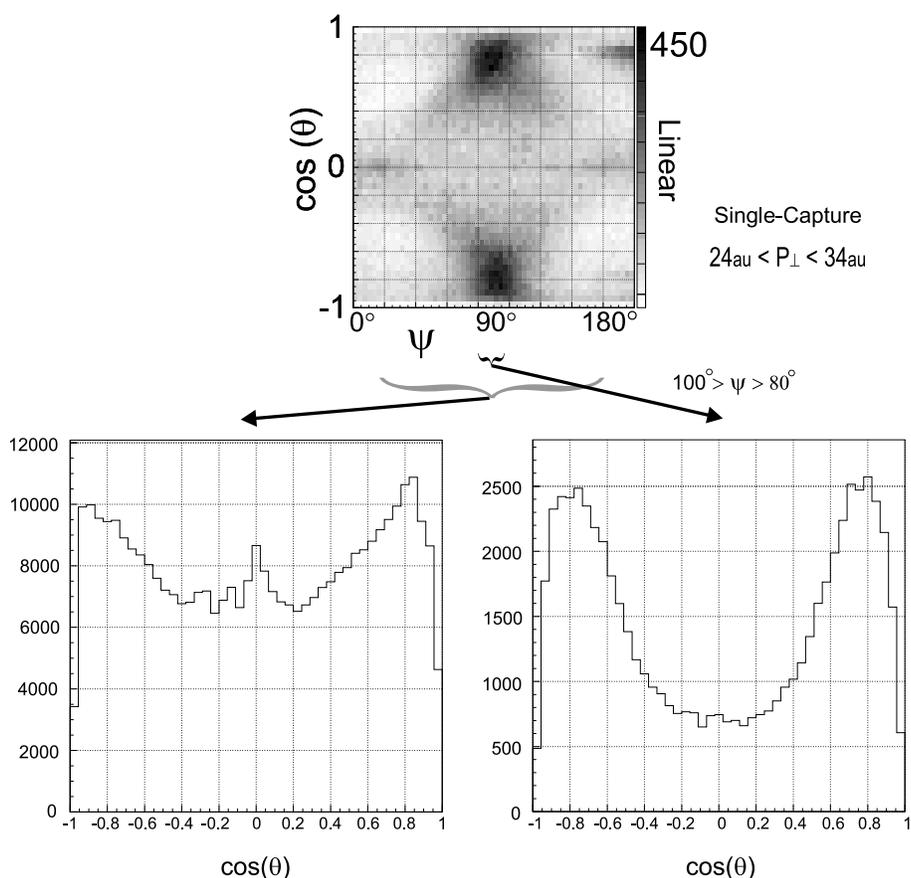


Abbildung 6.1: Das linke Bild entspricht einer Messung, in der die Streuebene nicht berücksichtigt wird. Die Aufspaltung in  $\cos(\theta)$  ist in dieser Darstellung nur sehr schwach ausgeprägt. Weiterhin ist nicht zu erkennen, woher der kleine Zentralpeak stammt. Anhand der zweidimensionalen Darstellung jedoch ist zu erkennen, daß dieser Zentralpeak von den Außenbereichen in  $\psi$  stammt.

stehen große Unterschiede in der Größe des Streuwinkels des Projektils (Abb. 4.9, Seite 53). Dies kann als direkte Folge des Double-Capture- bzw. Transferionisation-Prozesses gedeutet werden. Auch diese Beobachtung wurde mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation reproduziert (Abb. 5.2, Seite 58). Es bleibt jedoch fraglich, ob hierbei nicht die Fähigkeiten dieses einfachen Modells überschritten wurden.

Im Falle der Single-Capture-Reaktion stellt sich die Frage, ob ein Zusammenhang derart besteht, daß aus dem Deuteriumkern, dem das Elektron abgenommen wurde, später auch das  $D^+$ -Ion wird<sup>2</sup>. Wenn das der Fall ist, dann müßten die Darstellungen in Abb. 4.7 eine rechts-links-Asymmetrie aufweisen. Das widerspricht jedoch den experimentellen Befunden. Das Fehlen der Asymmetrie in den Abbildungen ist jedoch verständlich, wenn man die relativ langsame Bewegung der Kerne im Vergleich zu der

<sup>2</sup>Das ist eine etwas überzogene Formulierung. Die beiden Elektronen im Molekülorbital können nicht eindeutig dem einen oder anderen Kern zugerechnet werden

des verbleibenden Elektrons bedenkt. In dem Zeitraum, den die Kerne brauchen, um sich während der Dissoziation signifikant voneinander zu entfernen, wird das Elektron viele Umläufe innerhalb des Moleküls vollendet haben, so daß die Information über seine Position zur Zeit der Reaktion längst nicht mehr zur Verfügung steht. Dies ist aber nur eine ungesicherte Interpretation.

## Ausblick

Streuexperimente mit Ionen an Molekülen werden in Zukunft zweifelsohne verstärkt durchgeführt werden. Neueste Verbesserungen an den differentiellen Vorverstärkern, die Signalreflexionen fast vollständig beseitigen, werden die Durchführung und die Auswertung dieser Multihitexperimente vereinfachen und die Datenqualität erheblich verbessern. Eine wichtige Fragestellung, die in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt wurde, betrifft das Verhalten der frei werdenden Elektronen und inwiefern deren Bewegung mit dem restlichen Geschehen in der Reaktion korreliert ist. Dieser Aspekt sollte in zukünftigen Experimenten beachtet werden. Die Verwendung von *HD*-Molekülen als Target könnte neue interessante Effekte sichtbar machen, da in diesen Fällen die Symmetrie des Moleküls gebrochen ist. Bei symmetrischen Molekülen dagegen könnte gezielt nach Interferenzeffekten gesucht werden. Diesem Thema ist im Anhang dieser Arbeit ein kurzer Abschnitt gewidmet. Es stellt sich heraus, daß die Interferenzeffekte - sofern sie denn wirklich vorhanden sind - leider knapp jenseits der Auflösungsmöglichkeit des hier beschriebenen Experiments liegen müßten. Ein Nachfolgeexperiment wird wahrscheinlich noch in diesem Jahr (1999) am Lawrence Berkeley National Laboratory stattfinden. An der Kansas State University in den USA werden ähnliche Experimente unter der Leitung von Professor Lew Cocke durchgeführt.



# Anhang A

## Ergänzungen

### Die Wirkungsspanne des Stoßprozesses

Betrachtet wird die Auswirkung des Impulsübertrags auf ein  $D^+$ -Ion, das innerhalb eines sehr kleinen Stoßparameters  $b$  vom Projektil passiert wurde. Es soll nur die Bewegung in der Ebene senkrecht zum Projektilstrahl berücksichtigt werden. Eine Längeneinheit ( $LE$ ) sei ein Moleküldurchmesser. Während des Vorbeifluges des Projektils wird die abstoßende Kraft zwischen den beiden Teilchen immer rascher zunehmen, ihren Maximalwert erreichen und danach wieder abfallen. Wählt man einen recht kleinen Stoßparameter von z.B.  $b = 1/8 LE$ , so stellt sich heraus, daß sich das Projektil schon um mindestens  $17 LE^1$  weiterbewegt hat, wenn das  $D^+$ -Ion erst eine Strecke von  $1/2 LE$  zurücklegen konnte.

Dieses einfache Beispiel verdeutlicht, daß die Annahme eines stillstehenden Moleküls während der Reaktion gerechtfertigt ist.

Die Rechnung im einzelnen:

Sei  $V_P$  die Geschwindigkeit des Projektils im Laborsystem und  $b$  der Stoßparameter.  $z$  markiere die Position des Projektils entlang des Projektilstrahls relativ zum Streuzentrum. Um den durch den Stoßprozeß übertragenen Transversalimpuls  $P_{\perp}$  zu berechnen, muß die Coulombkraft entlang der Zeit integriert werden<sup>2</sup>. Die Rechnung verläuft ähnlich zu der in Kapitel 5.

---

<sup>1</sup>Je nachdem, bei welcher Annäherung der Ionisationsprozeß von statten geht, wird angenommen, daß der Elektronentransfer erst bei allernächster Annäherung zwischen Target und Projektil erfolgt, so ergeben sich in diesem Modell  $34 LE$  anstatt von  $14 LE$

<sup>2</sup>das betrifft nur die Komponente orthogonal zum Projektilstrahl.

$$P_{\perp} = \frac{2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{t=-\infty}^{t=+\infty} \frac{1}{b^2 + (V_P t)^2} \frac{b}{\sqrt{b^2 + (V_P t)^2}} dt \quad (\text{A.1})$$

$$= \frac{2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{z=-\infty}^{z=+\infty} \frac{b}{V_P} \frac{1}{(b^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dz \quad (\text{A.2})$$

$$= \frac{2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{z b}{V_P \sqrt{b^2 + z^2}} \Big|_{z=-\infty}^{z=+\infty} \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{b V_P} \quad (\text{A.4})$$

$$(\text{A.5})$$

Damit läßt sich die Länge der Wegstrecke  $s$  berechnen, die das Projektil weitergeflogen ist, während das  $D^+$ -Ion  $1/2 LE$  zurücklegen konnte ( $1LE \hat{=} 1$  Moleküldurchmesser):

$$s = \frac{V_P}{\frac{P_{\perp}}{m_D}} \frac{1}{2} LE \quad (\text{A.6})$$

mit  $m_D$  für die Masse des  $D^+$ -Ions.

## A.1 Interferenzeffekte

In Kapitel 5 wurde darauf hingewiesen, daß es zu einem Streuwinkel grundsätzlich zwei verschiedene Wege gibt, wie das Projektil das Molekül passiert haben kann. Im Fall eines Double-Capture-Prozesses sind die beiden zurückbleibenden Recoil-Ionen nicht unterscheidbar. Solche Stoßprozesse an einem zweiatomigen Molekül ähneln somit einer Streuung am Doppelspalt, was prinzipiell zu Interferenzerscheinungen führen müßte [43, 45, 46].

Das folgende Beispiel soll diesen Umstand verdeutlichen:

In Abbildung A.1 ist ein Molekül mit dem Kernabstand  $d$  und zwei möglichen Passagen des Projektils eingezeichnet, die beide zum gleichen Streuwinkel  $\alpha$  führen.  $\lambda = h/p$  sei die Compton-Wellenlänge des Projektils mit dem Impuls  $p$ . Im Unendlichen wird es zu konstruktiver oder destruktiver Interferenz kommen, je nachdem, ob die Bedingungen  $d \sin \alpha = m\lambda$  oder  $d \sin \alpha = (m - 1/2)\lambda$  erfüllt sind, wobei  $m$  eine natürliche Zahl ist.

Mit  $p = 3.95 \cdot 10^{-21} \text{ kg m/s}$  ( $1980 \text{ au}$ ) und einem mittleren Kernabstand von  $d = 0.741 \text{ \AA}$  führt dies zu  $\Delta\alpha \approx 2.3 \text{ mrad}$ . Auf dem sich ca. einen Meter entfernt befindenden Projektil-Detektor müßten die Interferenzmaxima demnach einen jeweiligen Abstand

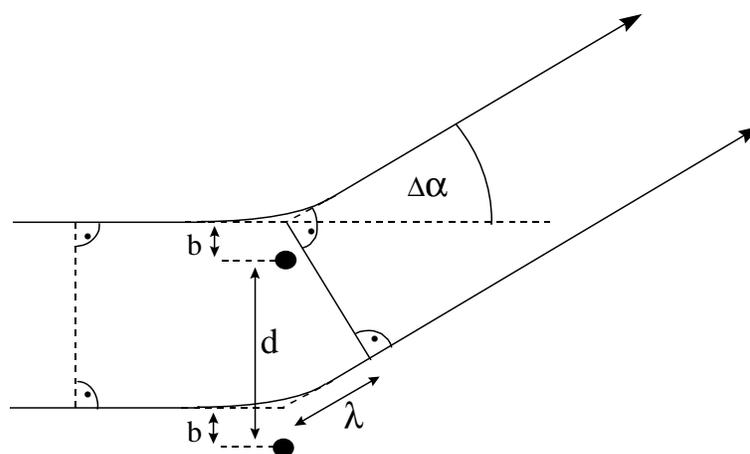


Abbildung A.1: Schematische Darstellung zu Interferenzeffekten

von ca. 2, 3 *mm* aufweisen. Bei der Auswertung der Meßdaten ist zu bedenken, daß nur diejenigen Ereignisse beachtet werden, bei denen das Molekül orthogonal zum Projektilstrahl (d.h.  $\theta = 90^\circ$ ) orientiert war.

Es gibt jedoch einen Grund, warum dieser Interferenz-Effekt in diesem Experiment nicht nachgewiesen werden könnte, selbst wenn er wirklich existierte:

Der Durchmesser der Kollisionszone zwischen Target-Jet und Projektilstrahl beträgt ca. 2 *mm*. Hinzu kommt die generelle Unsicherheit im Ort von ca. 0.5 *mm*. Dadurch werden alle Strukturen auf dem Projektildetektor, die im Bereich um 2 *mm* liegen, ausgeglättet.

Der Kernabstand  $d$  ist nicht für jede Reaktion gleich, sondern bildet der Abstandswellenfunktion entsprechend eine Gaußförmige Verteilung um den Mittelwert  $d = 0.741 \text{ \AA}$ . Nun hängt aber der Abstand der Interferenzmaxima  $\Delta\alpha$  direkt mit dem Abstand der beiden Streuzentren zusammen, was die Interferenzstrukturen verwischen würde. Anhand der für jede einzelne Reaktion gemessenen Aufbruchenergie der Coulombexplosion kann jedoch auf den anfänglichen Kernabstand rückgeschlossen werden, womit jedes einzelne Ereignis zum Beispiel auf den mittleren Kernabstand von  $d = 0.741 \text{ \AA}$  normiert werden kann.

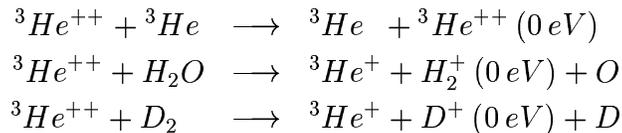
Im vorliegenden Experiment wurden keine Interferenzeffekte gefunden. Um sie nachzuweisen, müßte wahrscheinlich der gesamte Aufbau des Experiments darauf ausgelegt werden. Eine geringere Targetdichte bei kleinerer Kollisionszone und eine viel bessere Winkelauflösung für den Streuwinkel des Projektils wären notwendig. Diese Dinge stellen jedoch keine technische Schwierigkeit dar und könnten bei zukünftigen Experimenten von vornherein berücksichtigt werden. Für einer detaillierte Diskussion von möglichen Interferenzeffekten möchte ich auf die Dissertationsarbeit von I. Ali verweisen ([21], Kap. 2.4)

## A.2 Reaktionen der Projektile mit dem Restgas

Auf der gesamten Länge des Projektilstrahls kann es zu Reaktionen mit Teilchen des Restgases im Vakuumsystem kommen. Findet solch eine Reaktion innerhalb des Spektrometers statt, so werden die erzeugten positiven Ionen auf den Recoil-Detektor geleitet und erzeugen dort unerwünschte Störsignale. Es muß daher ein möglichst reines Vakuum im gesamten Kammer-System erzeugt werden. Mit Hilfe von vier Turbomolekularpumpen und einer  $LN_2$ -Kühlfalle konnten bei aktivem Jet und Projektilstrahl Drücke von ca.  $6.8 \cdot 10^{-8}$  Torr erreicht werden.

Es stellt sich die Frage, inwiefern doch eventuelle Restgaseffekte die Qualität der Messung beeinflussen und die Daten verunreinigen.

Infolge solcher Reaktionen mit dem Restgas können z.B.  $N^+$  oder  $N_2^+$  oder  $H_2O^+$  entstehen. Die Flugzeit dieser Reaktionsprodukte wird durch ihr Masse-zu-Ladungsverhältnis bestimmt.  $D^+$ -Ionen besitzen einen  $\frac{m}{q}$ -Wert von 2. Für  $N^+$ -Ionen z.B. liegt der Wert entsprechend bei  $\frac{m}{q} = 14$ . In Kapitel 2.6 wurde die Koinzidenz-Schaltung zwischen Projektil- und Recoil-Detektor beschrieben. Es wurden nur dann Ereignisse weiterbearbeitet, wenn der zeitliche Abstand zwischen Projektil-Signal und erstem Recoil-Signal innerhalb eines bestimmten Zeitfensters lag. Dadurch wurde der größte Teil der Restgasreaktionen herausgefiltert. Während der Analyse der Daten wurden jedoch drei Reaktionen gefunden, die durch diese Maßnahme alleine nicht eliminiert werden konnten:



Das  ${}^3He$  war aus der Ionenquelle durch die Beamline in die Hauptkammer gedriftetes Gas. Die Angabe (0 eV) bedeutet, daß die entstandenen Ionen keine anfängliche Geschwindigkeit besitzen, sondern durch das elektrische Feld beschleunigt direkt auf den Recoil-Detektor zufallen. Die dritte Reaktion mit  $D_2$  ist keine Reaktion mit einem Restgas sondern mit Gas des Target-Jets, das nicht in den Jet-Dump gelangt war und sich in der Kammer verteilt hatte.

Im folgenden wird beschrieben, an welcher Stelle in der Analyse diese Reaktionen sichtbar wurden und wie sie herausgefiltert werden konnten:

Im Falle einer „echten“ Reaktion des Projektils mit dem Target-Jet setzen sich die Impulse der beiden Recoil-Ionen unmittelbar nach der Reaktion aus den Impulsen aus der Coulombexplosion und dem Transversalimpulsübertrag aus der Streuung mit dem Projektil zusammen. Anhand der Endposition des Projektils auf dem Projektildetektor kann der zwischen Projektil und Target ausgetauschte Transversalimpuls direkt gemessen werden. Es kann somit der reine Impuls aus der Coulombexplosion rekonstruiert werden. Dieser Weg wurde in den weiter oben aufgeführten Herleitungen besprochen.

Die Rechnung soll für die Zeitrichtung<sup>3</sup> nochmals wiederholt werden. Dabei wird gezeigt werden, an welcher Stelle „falsche“ Reaktionen mit dem Restgas sichtbar werden.

Sei  $L$  die Entfernung zwischen Target-Jet und Recoil-Detektor,  $t$  die Flugzeit des Recoil-Ions und  $a$  die Beschleunigung, die ein  $D^+$ -Ion ( $q/m = 1/2$ ) durch das Feld im Spektrometer erfährt.

$$\begin{aligned}
 L &= \frac{1}{2}at^2 + \left( \vec{V}_{exp} - \frac{\Delta\vec{P}_P}{2m_D} \right) \cdot \vec{x}t \\
 L &= \frac{1}{2}at^2 + V_x t - \frac{X_P}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} t \\
 \iff V_x &= \frac{L}{t} - \frac{1}{2}at + \frac{X_P}{T_P} \frac{m_P}{2m_D}
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

mit:

$V_x = \vec{V}_{exp} \cdot \vec{x}$	für diejenige Geschwindigkeitskomponente des Recoils in Richtung der Spektrometerachse, die rein aus der Coulombexplosion des $D_2^+$ -Moleküls stammt
$X_P$	für die horizontale Position des Projektils auf dem Projektildetektor
$t$	für die reale Flugzeit des Recoils
$T_P$	für die aus der Beschleunigungsspannung in der AECR berechneten Flugzeit des Projektils vom Target-Jet bis zum Projektil-Detektor.

Die Abbildung A.2 zeigt das Ergebnis dieser Berechnung für den Double-Capture-Kanal ( ${}^3He$ ) bzw. für die Transferionisation und den Single-Capture-Kanal ( ${}^3He^+$ ). In diesem Formalismus wird davon ausgegangen, daß das Projektil nur dann aus seiner Flugbahn ausgelenkt wird, wenn es an einem Teilchen aus dem Target-Jet gestreut wurde und daß sich dieser Impuls zu gleichen Teilen auf die Molekülhälften verteilt. Bei den drei oben aufgeführten Reaktionen wird aber kaum Impuls zwischen Projektil und Streuzentrum ausgetauscht. Die Ionen fallen - ohne anfängliche Geschwindigkeit - alleine durch das Spektrometerfeld beschleunigt auf den Recoildetektor. Die unterschiedliche Ablenkung des Projektils kommt in solch einem Falle alleine durch das elektrische Feld im Spektrometer zustande und nicht durch den Stoßprozeß während der Reaktion. Die Stärke der Ablenkung richtet sich danach, ob es kurz nach Eintritt ins Spektrometer oder erst nach einer gewissen Flugstrecke neutralisiert wurde. Projektil treffen auf den Mittelpunkt des Projektildetektors, wenn sie im Jet eine Reaktion eingegangen sind, rechts davon, wenn vor Erreichen des Jets eine Reaktion mit dem Restgas stattfand und links, wenn die Reaktion hinter dem Jet vor Verlassen des Spektrometers erfolgte.

Im Falle einer Reaktion mit dem Restgas sollte die oben dargestellte Rechnung nicht mehr durchgeführt werden. Leider ist den Signalen der Detektoren nicht anzusehen, ob

<sup>3</sup>entlang der Spektrometerachse, d.h. in  $\vec{y}$ -Richtung

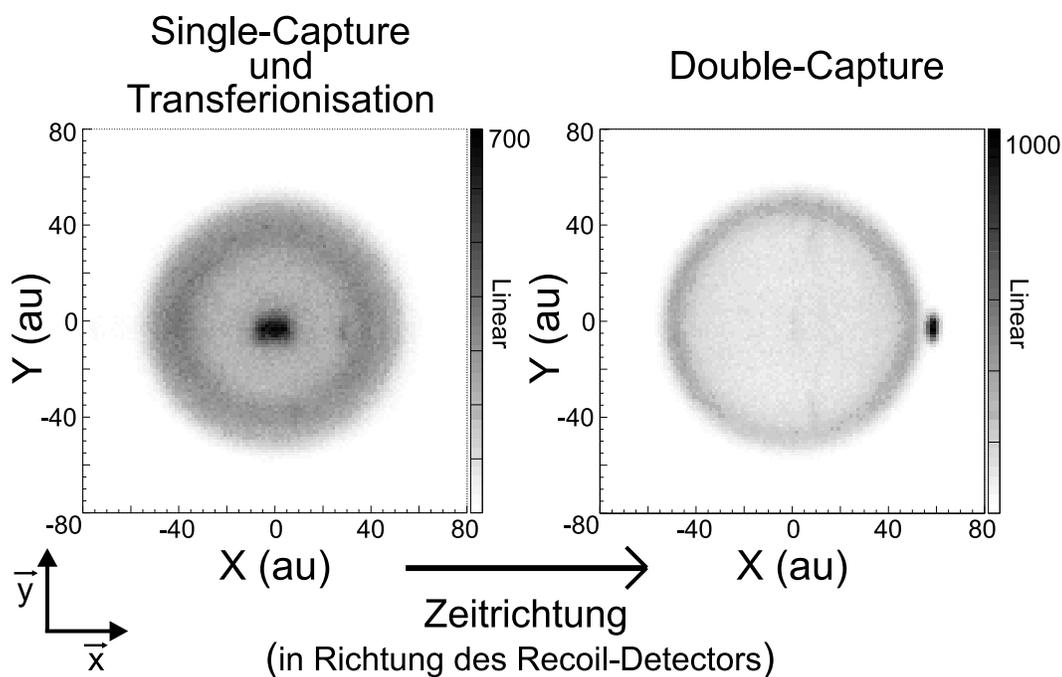


Abbildung A.2: Bei geeigneter Darstellung werden Effekte sichtbar, die auf Kollisionen des Projektilstrahls mit dem Restgas in der Versuchskammer zurückzuführen sind. In der rechten Abbildung wird der intensive Fleck durch  ${}^3\text{He}^{++}$ -Ionen erzeugt; in der rechten Abbildung sind es  $D^+$ -Ionen und  $H_2^+$ -Fragmente ohne anfänglichen Impuls.

sie von solchen Reaktionen stammen. Im folgenden wird diskutiert, an welcher Stelle diese Reaktionen in der Analyse auftreten.

Nach einer Reaktion mit dem Restgas kommt die Auslenkung des Projektils  $X_P$  durch einen vollkommen anderen Prozeß zustande. Die Flugzeit  $T_P$  des Projektils nach der Reaktion ist keine Konstante mehr, sondern hängt von dem Ort der Reaktion entlang des Projektilstrahls ab.

Wie anhand der Bilder jedoch sichtbar wird, liefert diese Art der Darstellung der Daten eine sehr geeignete Methode, die Restgasreaktionen aus den Daten herauszufiltern. Im folgenden wird gezeigt, zu welchen Effekten Restgasreaktionen führen, wenn sie wie echte Reaktionen behandelt werden. Es wird sich herausstellen, daß die in den beiden Darstellungen (Abb. A.2) sichtbaren intensiven Bereiche dadurch eindeutig als Restgasreaktionen entlang des Projektilstrahls identifiziert werden können.

Die Ablenkung, die das Projektil durch das Spektrometerfeld erfährt, ist abhängig von der Länge der Wegstrecke, während der es dem Feld ausgesetzt war. Wird es zum Beispiel direkt nach Eintritt ins Spektrometer durch eine Reaktion mit dem Restgas neutralisiert, so wird das Feld im Spektrometer überhaupt keine Auswirkung auf die Bahn des Projektils haben. Im folgenden wird diese Wegstrecke, gemessen vom Target-Jet aus und mit positivem Betrag in Strahlrichtung, als  $\Delta z$  bezeichnet.

Die Ablenkung ist für Double-Capture-Reaktionen bzw. Transferionisation- und Single-Capture-Reaktionen mit dem Restgas unterschiedlich, da das Projektil nach der Reaktion entweder neutral oder einfach positiv geladen ist:

$$X_P^{DC} = 2a \frac{2}{3} \frac{\Delta z}{V_P} T_P \quad (\text{A.8})$$

für Double-Capture und

$$\begin{aligned} X_P^{SC} &= 2a \frac{2}{3} \frac{\Delta z}{V_P} T_P + 2a \frac{1}{3} \frac{r_S - \Delta z}{V_P} T_P \\ &= a \frac{2}{3} \frac{\Delta z + r_S}{V_P} T_P \end{aligned}$$

für einen Single-Capture- oder Transferionisations-Prozess, in dem das Projektil nach der Reaktion noch einen  $\frac{q}{m}$ -Wert von  $\frac{1}{3}$  hat. In den Gleichungen steht  $r_S$  für den inneren Radius der Spektrometerringe.

Geht man mit diesen Ausdrücken in Gleichung A.7 ein, so ergibt sich für Double-Capture:

$$\begin{aligned} V_x &= \frac{L}{t} - \frac{1}{2}at + a \frac{4}{3} \frac{\Delta z}{V_P} T_P \cdot \frac{1}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \\ &= \frac{L}{t} - \frac{1}{2}at + a \frac{\Delta z}{V_P} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

und

$$\begin{aligned} V_x &= \frac{L}{t} - \frac{1}{2}at + a \frac{2}{3} \frac{\Delta z + r_S}{V_P} T_P \cdot \frac{1}{T_P} \frac{m_P}{2m_D} \\ &= \frac{L}{t} - \frac{1}{2}at + a \frac{1}{2} \frac{\Delta z + r_S}{V_P} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

für Single-Capture oder Transferionisation.

In den Gleichungen bezeichnet  $t$  die Flugzeit des Recoil-Ions. Dieser Wert war jedoch im Experiment nicht direkt meßbar. Der Zeitpunkt der Reaktion ist prinzipiell unbekannt, weil mit einem kontinuierlichen und keinem gepulsten Projektilstrahl gearbeitet wurde. Für die echten Reaktionen, die alle aus der Kollisionszone zwischen Jet und Projektilstrahl stammen, kann eine konstante Flugzeit  $T_P$  des Projektils angenommen werden. Eine Messung der Zeitdifferenz  $\Delta t$  zwischen Projektil und Recoil-Ion liefert somit mit  $t = T_P - \Delta t$  trotzdem Information über die absolute Flugzeit  $t$  des Recoil-Ions. Im Falle einer Reaktion mit dem Restgas ist die Flugzeit des Projektils jedoch nicht mehr konstant. Vielmehr beträgt die echte Flugzeit in diesen Fällen  $T_P^{real} = T_P - \frac{\Delta z}{V_P}$ ,

d.h. die Beziehung  $t = T_P - \Delta t$  führt nicht mehr zu der wahren Flugzeit  $t^{real}$  des Recoil-Ions, sondern zu

$$\begin{aligned} t &= T_P - (T_P^{real} - t^{real}) = T_P - \left( T_P - \frac{\Delta z}{V_P} - t^{real} \right) \\ &= t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P} \end{aligned}$$

Dies ergibt nach Einsetzen in Gleichung A.9 und A.10:

$$V_x = \frac{L}{t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P}} - \frac{1}{2}a \left( t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P} \right) + a \frac{\Delta z}{V_P}$$

für Double-Capture und

$$V_x = \frac{L}{t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P}} - \frac{1}{2}a \left( t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P} \right) + a \frac{1}{2} \frac{\Delta z + r_S}{V_P}$$

für Single-Capture oder Transferionisation.

Der Teil  $\frac{L}{t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P}}$  läßt sich vereinfachen, da  $\Delta z$  gegenüber der nach der Reaktion verbleibenden Gesamtflugstrecke des Projektils sehr klein ist.

$$\frac{L}{t^{real} + \frac{\Delta z}{V_P}} = \frac{L}{t^{real}} \left( \frac{1}{1 + \frac{\Delta z}{V_P t^{real}}} \right) \approx \frac{L}{t^{real}} \left( 1 - \frac{\Delta z}{V_P t^{real}} \right) \quad (\text{A.11})$$

Um zu zeigen, wie sich  $V_x$  mit  $\Delta z$  ändert, wird jeweils die Ableitung nach  $\Delta z$  gebildet:

Double-Capture:

$$\frac{dV_x}{d(\Delta z)} = -\frac{L}{V_P (t^{real})^2} + \frac{1}{2} \frac{a}{V_P} = 0 \quad (\text{A.12})$$

Single-Capture oder Transferionisation:

$$\frac{dV_x}{d(\Delta z)} = -\frac{L}{V_P (t^{real})^2} \quad (\text{A.13})$$

Das bedeutet, daß in der Impulsdarstellung der Coulombexplosion für den Double-Capture- Kanal tatsächlich eine punktförmige Verteilung zu erwarten ist. Für den Fall von Single-Capture oder Transferionisation sollte sich nach diesen Berechnungen und für einen Spektrometerdurchmesser von ca. 8 cm eine Verteilung ergeben, die in horizontaler Richtung ca. 20 au breit ist, was ebenfalls mit den Messungen übereinstimmt (siehe Abb. A.2 auf Seite 70).

### A.3 Messung der Detektoreffizienz

Die Flugzeit eines aus der Ruhe heraus auf den Recoil-Detektor beschleunigten  $D^+$ -Ions betrug ca.  $915\text{ ns}$ . Während einer Double-Capture-Reaktion werden immer zwei  $D^+$ -Ionen erzeugt, die aufgrund der Coulombexplosion einen Impuls von jeweils ca.  $50\text{ au}$  besitzen. Das erste auf dem Detektor nachgewiesene Ion muß demnach immer eine kürzere Flugzeit (TOF) als  $915\text{ ns}$  und das zweite Ion immer eine längere Flugzeit aufweisen, da das eine immer von Anfang an eine gewisse Geschwindigkeitskomponente in Richtung des Recoildetektors besitzt, während das andere sich zunächst vom Detektor entfernt. Nur in dem Fall, wenn beide anfänglichen Impulsvektoren der Ionen in einer Ebene parallel zur Oberfläche des Detektors lagen, können beide Flugzeiten gleich lang ( $915\text{ ns}$ ) sein. Aufgrund der begrenzten Nachweiseffizienz des Detektors wird in manchen Fällen das erste Ion nicht nachgewiesen werden. Statt dessen taucht evtl. das zweite Ion im Flugzeitspektrum bei Zeiten größer als  $915\text{ ns}$  auf. Aus dem Verhältnis zwischen der Anzahl der Ereignisse vor bzw. nach der  $915\text{ ns}$ -Grenze im Flugzeitspektrum kann auf die Effizienz des Detektors rückgeschlossen werden. Genauer gesagt handelt es sich dabei um die kombinierte Effizienz des Detektors zusammen mit der Durchlässigkeit des Drahtnetzes, das die Feldgeometrie am Ende des Spektrometers abschließt und sich ca.  $5\text{ mm}$  vor der Oberfläche des Detektors befindet (siehe Abb. 2.2 auf Seite 18).

Der Recoil-Detektor wird in Sektoren unterteilt. Zwei Sektoren stehen sich jeweils gegenüber. Im folgenden wird solch eine Sektorenpaar A und B betrachtet. Wenn ein  $D^+$ -Ion aus dem Double-Capture-Kanal beispielsweise in A nachgewiesen wird, so muß das zweite in Sektor B landen, da der Massenschwerpunkt der auseinanderfliegenden Fragmente immer recht genau in der Mitte des Detektors liegt. Die Wahrscheinlichkeit,

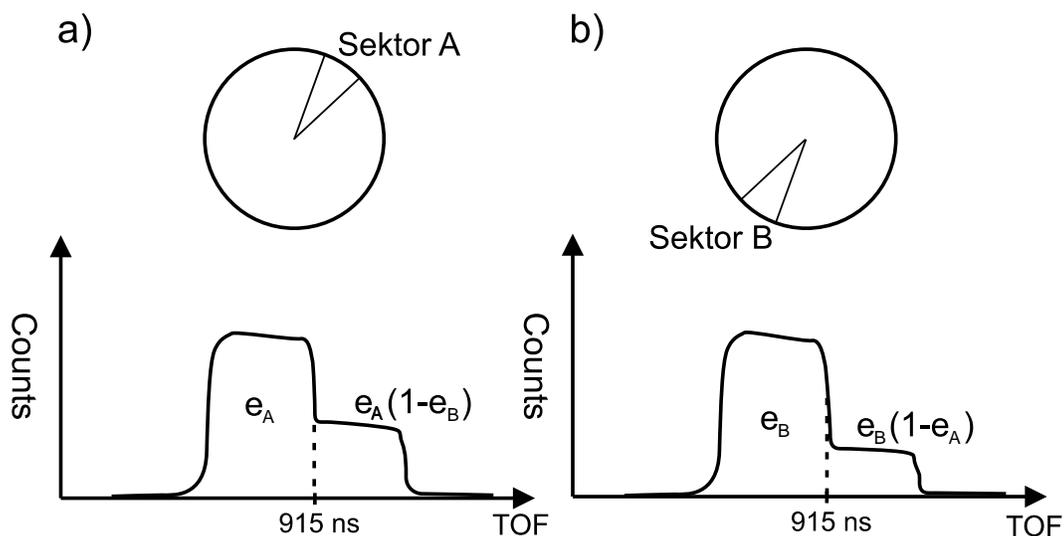


Abbildung A.3: Darstellung der gegenüberliegenden Sektoren A und B und die dazugehörigen Flugzeitspektren (schematisch). In den Spektren ist nur das erste nachgewiesene Ion enthalten.

daß ein Teilchen, das in Sektor A bzw. B auftritt, auch wirklich nachgewiesen wird, sei  $e_A$  bzw.  $e_B$ . Dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß nicht das erste Teilchen, sondern stattdessen das zweite nachgewiesen wird, gleich  $e_A(1 - e_B)$  in Sektor A bzw.  $e_B(1 - e_A)$  in Sektor B.

Sei  $R_A$  bzw.  $R_B$  das Verhältnis zwischen der Zahl der Counts vor und hinter der 915 ns-Grenze, dann ist

$$R_A = \frac{e_A}{e_A(1 - e_B)} \quad \text{und} \quad R_B = \frac{e_B}{e_B(1 - e_A)}$$

und nach Umformen der Gleichungen

$$e_B = \frac{R_A - 1}{R_A} \quad \text{und} \quad e_A = \frac{R_B - 1}{R_B}$$

Das heißt, das Verhältnis der Zählraten im Flugzeitspektrum des einen Sektors liefert Information über die Nachweiseffizienz auf der Fläche des gegenüberliegenden Sektors und umgekehrt.

Die mit dieser Methode ermittelte Nachweiseffizienz des Recoildetektors in Kombination mit dem davorliegenden Gitter lag im Mittel bei ca.  $38\% \pm 5\%$ .

# Literaturverzeichnis

- [1] *Interaction of He<sup>++</sup> - Ions with hydrogen molecules* V.V. Afrosimov, G.A. Leiko, M.N. Panov Sov. Phys. Tech. Phys. **25** (3), März 1980, Seite 313
- [2] *Spectra of diatomic Molecules* Herzberg, 2nd edition, D. van Nostrand Company, Seite 533
- [3] *Analysis of Collision Induced Dissociation of Na<sup>2+</sup> Molecular ions* J.C. Brenot, H. Dunet, Phys. Rev. Lett., Vol. **77**, Number 7, Seite 1246 12.Aug.1996
- [4] *Detailed experimental and theoretical study of collision-induced dissociation of Na<sup>2+</sup> ions on He and H<sub>2</sub> targets at KeV Energies* J.A. Fayeton, M. Barat, J.C. Brenot, H. Dunet, Y.J. Picard Phys. Rev. A, Vol. **57**, Number 2, Seite 1058, Feb. 1998
- [5] *He<sup>++</sup> - H<sub>2</sub> collisions: non-dissociative and dissociative one-electron capture* R. Hoekstra, H.O. Folkerts, J.P. M. Beijers, R. Morgenstern, F.J. de Heer J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27** (1994) 2021-2031. Printed in UK
- [6] *Atomic Data Vol. 2* T.E. Sharp,(1971), Seite 119
- [7] N. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat-fys. Medd. **18**, 8 (1948)
- [8] *Classical Calculation of Differential Cross Section for Scattering from a Coulomb Potential with Exponential Screening* E. Everhart, G. Stone, R.J. Carbone, Phys. Rev., Vol. **99**, Number 4, (1955), Seite 1287
- [9] *The Theory of Atomic Collisions* N.F. Mott and H.S.W. Massey, Oxford Univ. Press, London, 1949, zweite Auflage, Kap. VII, Abschnitt 4 und 5
- [10] J.M. Hodgkinson et al., J.Phys. B **28**, (1995), Seite 393
- [11] *The double ionization of hydrogen by 5 – 30 keV protons* F.B. Yousif et al, J. Phys. B **21**, 4157 (1988)
- [12] *The dissociative Ionization of Hydrogen by 5 – 25 keV protons: energy spectra and angular distribution of fragment ions* B.G. Lindsay et al, J.Phys. B **20**, 2759 (1987).
- [13] *Fragmentation of D<sub>2</sub> molecules by Xe<sup>19+</sup> impact* C.R. Feeler, R. E. Olson, R.D. DuBois, T. Schlatholter, O. Hadjar, R. Hoekstra and R. Morgenstern, XXI ICPEAC Abstracts of Contributed Papers, Vol. 2, Japan (Sendai), (1999) Seite 613

- [14] *Non-Franck-Condon fragmentation dynamics in slow multiply charged ion-molecule collisions* R.D. DuBois, C.R. Feeler, R.E. Olson, T. Schlatholter, O. Hadjar, R. Hoeckstra and R. Morgenstern, XXI ICPEAC Abstracts of Contributed Papers, Vol. 2, Japan, Seite 613
- [15] *Angular distribution of dissociated Deuterons by impact of 2-16 MeV  $O^{8+}$*  S. Cheng et al, Phys. Rev. A **47** 3923 (1993).
- [16] *Collisional ionization and excitation of  $H_2$ : Dependence on the orientation of the internuclear axis* A.K. Edwards et al, Phys. Rev. A **46**, 6970 (1992).
- [17] *Orientation-dependent atomic model for electron transfer in ion-molecule collisions: Application to  $H^+ + H_2$  and  $He^{++} + H_2$*  R. Shingal, C.D. Lin, Phys. Rev. A, Vol. **40**, Number 3 Aug.1989,Seite 1302
- [18] *Dynamik von Elektronentransferreaktionen am Stoßsystem  $p + He \longrightarrow H^0 + He^+$*  Volker Mergel, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main 17.2.1994, IKD-D 561
- [19] *Intra-atomic Electron-Electron Scattering in  $p - He$  Collisions (Thomas Process) Investigated by Cold Target Ion Recoil Momentum Spectroscopy* 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, Đ. Belkić, C.L. Cocke and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett., Vol. bf 79, Nummer 3, (1997), Seite 387
- [20] *Impulstransfer in Proton-Helium-Stößen* Thorsten Weber, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main (1998) IKF-D 672
- [21] *Ein ortsempfindliches Multi-Hit-Detektorsystem* Imad Ali, Dissertation, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main (1997)
- [22] A. Kounis, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1997) IKF-D 649
- [23] A. Krämer, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1996) IKF-D 655
- [24] H. Kollmus, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1996) IKF-D 653
- [25] L.L. Limon, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1997) IKF-D 659
- [26] L. Spielberger, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1994) IKF-D 509
- [27] O. Jagutzki, Diplomarbeit, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1989) IKF-D 418

- [28] H. Berg, Dissertation, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1993) IKF-D 542
- [29] Kh. Khayyat, Dissertation, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1998) IKF-D 655
- [30] J. Ullrich, Habilitationsschrift, Universität Frankfurt am Main/GSI, GSI-94-08 Report, ISSN 0171-4546
- [31] L. Spielberger, Dissertation, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1996) IKF-D 640
- [32] O. Jagutzki, Dissertation, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1994) IKF-D 558
- [33] Kh. Khayyat, Dissertation, Institut für Kernphysik, Frankfurt am Main,(1998)
- [34] R. Dörner, Dissertation, GSI-91-28 Report,(1991),ISSN 0171-4546
- [35] *Free Jet Sources in Atomic and Molecular Beam Methods* G. Scoles, Oxford University Press, Oxford New-York (1988)
- [36] *Theorie und Praxis der Vakuumtechnik* M. Wutz, H. Adam and Walcher, Vieweg-Verlag, Braunschweig-Wiesbaden,(1982)
- [37] V. Mergel, R. Dörner, J. Ulrich, O. Jagutzki, S. Lencinas, S. Nüttgens, L. Spielberger, M. Unverzagt, C.L. Cocke, R.E. Olson, M. Schulz, U. Buck and H. Schmidt-Böcking, Nucl. Inst. Meth. Phys. B **98**, Seite 593, (1995)
- [38] G.H. Dunn, L.J. Kieffer, Phys. Rev., Vol. **132**, Nr. 5, Seite 2109, (1963)
- [39] R. Wehlitz, F. Heiser, O. Hemmers, B. Langer, A. Menzel and U. Becker, Phys. Rev. Lett., Vol. **67**, 3764 (1990)
- [40] M.Y. Amusia, E.G. Drukarev, V.G. Gorshov and M.P. Kazachkov, J. Phys. B **67**,Seite 1248 (1975)
- [41] T.N. Chang and R.T. Poe, Phys. Rev. A **12**: 1432 (1975)
- [42] J.A.R. Samson, Phys. Rev. Lett. **65**: 3764 (1990)
- [43] N.C. Deb, A. Jain and J.H. McGuire, Phys. Rev. A, Vol. **38**, Nr. 7: 3769 (1988)
- [44] R.E. Olson, T.J. Gay, Phys. Rev. Lett., Vol **61** Number 3 (1988) Seite 302-305
- [45] Y.D. Wang, J.H. McGuire and R.D. Rivarola, Phys. Rev. A, Vol. **40**, Nr. 7: 3673 (1989)
- [46] Y.D. Wang, J.H. McGuire, Phys. Rev. A, Vol. **44**, Nr. 1: 367 (1991)
- [47] *Dynamische Elektronenkorrelation in Helium* Volker Mergel, Dissertation, Universität Frankfurt am Main (1996), Shaker Verlag ISBN 3-8265-2067-X

- [48] *Experimentalphysik 3: Atome, Moleküle und Festkörper* Demtröder, Springer Lehrbuch, 1. Auflage (1996), ISBN 3-540-57095-0
- [49] *Optimized dynamical representation study of  $He^{++} + H$  in the impact energy range of 2 – 2000 keV* A. Henne, H.J. Lüdde and R.M. Dreizler, J. Phys. B **30**, (July 1997), Seite 565-570
- [50] *Double electron removal and fragmentation model of the  $H_2$  molecule by highly charged ions* C.J. Wood and R.E. Olson, Phys. Rev.A, Vol. **59**, Number 2, Seite 1317
- [51] *Fragmentation of  $H_2$  and HD molecules by  $C^{6+}$  impact* C.R. Feeler, C.J. Wood and R.E. Olson, HCI-Conference, Benzheim, 1998
- [52] *Fast position and time resolved read-out of micro-channelplates with delay-line technique for single particle and photon detection* O. Jagutzki, V. Mergel, K. Ullmann-Pfleger, L. Spielberger, U. Meyer, R. Dörner and H. Schmidt-Böcking, SPIE-Proc. No. 3438 Imaging Spectroscopy IV (1998), San Diego, USA
- [53] M.B. Williams, S.E. Sobottka and J.A. Sheppard, IEEE Trans. Nucl. Sci **38**, (1991), Seite148

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Dargestellt sind verschiedene Zustände eines $D_2$ -Moleküls nach [6]. In der unteren Darstellung sind die Kurven vertikal verschoben, so daß die asymptotischen Energien auf einem Niveau liegen. Dadurch kann die Gesamtenergie der Coulombexplosion direkt abgelesen werden. Die Gaußkurve stellt die theoretische [2] Wahrscheinlichkeitsdichte der Abstandswellenfunktion des $D_2$ -Moleküls dar. . . . .	11
1.2	Theoretisch berechnetes Energiespektrum einer Coulombexplosion . . . . .	12
1.3	Zusammenhang zwischen Q-Wert, kinetischer Gesamtenergie der Fragmente (vertikale Achse) und Energieniveau des neutralen Deuteriumatoms für die Reaktionen ${}^3He^{++} + D_2 \rightarrow {}^3He^+(1s) + D^+ + D(n)$ . Bei der kinetischen Gesamtenergie handelt es sich jeweils um die Position der Maxima im Energiespektrum. Um jedes dieser Maxima befindet sich eine Verteilung der Form 1.2. Das vollständige Energiespektrum der Reaktion wird aus diesem Grund keine scharf voneinander getrennte Peaks aufweisen, da die einzelnen Energieverteilungen ineinander übergehen (siehe Darstellung 4.2). . . . .	13
2.1	Der von der Ionenquelle kommende Projekttilstrahl tritt in die Versuchskammer ein und wird nach Passieren des Spektrometers mit Hilfe von zwei elektrostatischen Deflektorplatten nach Ladungszuständen getrennt. Durch Anpassen des Deflektorfeldes und Versetzen des Projektildetektors konnten die Ladungszustände sehr gut voneinander getrennt werden. . . . .	16
2.2	Das Spektrometer besteht aus quadratischen Kupferplatten, die durch vier Keramikstäbe fixiert werden. . . . .	18
2.3	Eine der zwei Drahtebenen der Delayline-Anode für eine Raumkoordinate. . . . .	20
2.4	Schematischer Schnitt durch die Versuchskammer . . . . .	22
2.5	Schematische Darstellung der signalverarbeitenden Elektronik . . . . .	23
2.6	Zeitliche Gegenüberstellung der verschiedenen Signale. Schraffierte Bereiche markieren die Regionen, in denen die Zeitsignale liegen können. . . . .	24
2.7	In Flugzeitspektrum der Recoils ist zu sehen, daß die Zahl der nicht dissoziierten $D_2^+$ -Moleküle beträchtlich ist. Durch Anpassung des Gates können diese Signal unterdrückt werden. . . . .	25
2.8	Skizze zur Berechnung des Massenschwerpunktes . . . . .	27
2.9	Gegenüberstellung des Abstandes der Endpositionen der Fragmente in Ort $\Delta r$ und Zeit $\Delta t$ . . . . .	28

2.10	Ein Teilchen erzeugt auf jeder Drahtebene jeweils zwei Signale, die in entgegengesetzte Richtungen fortlaufen. Durch das Auftreffen des zweiten Fragments kann es zu einer Signalüberlagerung kommen. . . . .	29
3.1	Darstellung des Koordinatensystems und der Definition der Winkel . . . . .	31
3.2	Die durchgehend gezeichneten Pfeile repräsentieren die im Laborsystem resultierenden Geschwindigkeitsvektoren der Fragmente unmittelbar nach der Reaktion. . . .	32
4.1	Die gestrichelte Linie und die Punkte repräsentieren die Meßdaten aus der Double-Capture-Reaktion bzw. der Transferionisation. Die durchgehende Linie stellt die theoretisch zu erwartende Energieverteilung dar. Es wurden lediglich die Amplituden angeglichen, um einen direkten Vergleich der Kurven zu ermöglichen. . . . .	44
4.2	Energiespektren (eV) des Single-Capture-Kanals für verschiedene Transversalimpulse	45
4.3	Ein Beispiel dafür, wie Energie aus dem Transversalimpulsübertrag zwischen Projektil und Molekül in Relativbewegung zwischen den $D^+$ -Kernen umgewandelt werden kann. Dies führt bei der Analyse solch eines Ereignisses zu einer scheinbar größeren Aufbruchenergie um bis zu $2\text{ eV}$ . . . . .	46
4.4	Dargestellt sind nur Reaktionen, in denen das Projektil stark (20 bis $24\text{ au}$ Impuls) gestreut wurde. Es sind nur solche Reaktionen enthalten, die Abb. 4.3 entsprechen, d.h. bei denen die Molekülachse in der Streuebene lag und das Molekül senkrecht zum Strahl orientiert war. Die Punkte geben die Daten aus der Double-Capture-Reaktion wieder. Die durchgezogene Linie ist die theoretische, nach obigem Modell berechnete, verschobene Energiekurve. Die gestrichelte Linie ist nochmals zum Vergleich die theoretisch zu erwartende Verteilung aus Abbildung 4.1. Diese Abbildung bildet das Gegenstück zu Abb. 4.1, in der nur Ereignisse mit kleinen Transversalimpulsen dargestellt sind. . . . .	46
4.5	Gegenüberstellung des Double-Capture- und der Single-Capture-Kanäle in der Orientierung des Moleküls für verschiedene Transversalimpulse. Es zeigt sich eine hohe Konzentration um $\psi = 90^\circ$ . Geometrisch ist dies folgendermaßen zu verstehen: Sei $\vec{m}$ die Projektion der Molekülachse in die $\vec{x} \times \vec{y}$ -Ebene, d.h. der Ebene, die senkrecht zum Projektilstrahl orientiert ist. Dann bedeutet ein Winkel von $\psi = 90^\circ$ , daß das Projektil senkrecht zu $\vec{m}$ gestreut wurde. Dieser Umstand wird weiter unten im Rahmen einer einfachen Monte-Carlo-Simulation nochmals beobachtet. *Auch in den an dieser Stelle gezeigten Darstellungen des Single-Capture-Kanals sind Ereignisse aus der Transferionisation aufgrund der begrenzten Nachweiseffizienz des Detektors teilweise noch enthalten. . . . .	48
4.6	Darstellung von Schnitten durch die Winkelverteilungen in Abbildung 4.5 in Polardarstellung. Dargestellt sind Ereignisse mit $105^\circ > \psi > 75^\circ$ . Die Einschnitte bei $\theta = 0^\circ$ bzw. $\theta = 180^\circ$ sind auf ein Binningproblem zurückzuführen, das bei genauerer Betrachtung auch in Abbildung 4.5 bei $\cos(\theta) = \pm 1$ auffällt. . . . .	49

4.7 Die Single-Capture-Reaktionen können im Energiespektrum nur grob getrennt werden. Dargestellt ist die Winkelverteilung für zwei unterschiedliche Energiebereiche und Transversalimpulse. Es zeigt sich, daß sich selbst die Single-Capture-Prozesse untereinander in der Winkelverteilung unterscheiden. Es kann jedoch leider wiederum nicht entschieden werden, wie stark sich der störende Resteinfluß der Ereignisse aus der Transferionisation bei diesen Darstellungen auswirkt. . . . . 50

4.8 Erläuterung der folgenden Darstellungen an einem Beispielgraph. Das  $D_2$ -Molekül ist horizontal ausgerichtet. Eine Streuung des Projektils nach oben entspricht z.B. in dieser Darstellung einem Streuwinkel von  $\psi = 90^\circ$ . Die eindimensionalen Projektionen sind vertikale Schnitte entlang eines  $12\text{ au}$  breiten Streifens. . . . . 51

4.9 Vergleich zwischen der Projektilstreuung im Double-Capture-Kanal und der Transferionisation  ${}^3\text{He}^{++} + D_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + D^+ + D^+ + e^-$ . Die Bilder sind aufgeteilt nach bestimmten Intervallen in  $\theta$ . Die entsprechenden Abbildungen für die Single-Capture-Reaktionen unterhalb von  $7,9\text{ eV}$  weisen wie für Double-Capture gezeigt nur einen Peak auf und sind deshalb nicht nochmals dargestellt. . . . . 53

4.10 Im Single-Capture-Kanal liegen im Bereich zwischen ca.  $9,3\text{ eV}$  und  $12,5\text{ eV}$  viele Reaktionen des Typs  ${}^3\text{He}^{++} + D_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + D^+ + D(n)$  und Reste der Transferionisation  ${}^3\text{He}^{++} + D_2 \rightarrow {}^3\text{He}^+ + D^+ + D^+ + e^-$ . In diesem Energiebereich ist eine Aufspaltung sichtbar (Abb. 4.10 Seite 54), allerdings ist sie schwächer ausgeprägt als in Abb. 4.9 auf Seite 53. Es kann nicht entschieden werden, ob die Reste der Transferionisation  $\rightarrow {}^3\text{He}^+ + D^+ + D^+ + e^-$  alleine nur die Aufspaltung zeigen und die anderen Reaktionen nicht, oder ob die Single-Capture-Reaktionen in dieser Region auch eine Aufspaltung aufweisen, die aber schwächer ausfällt. . . . . 54

4.11 Gegenüberstellung des Transversalimpulses und der Aufbruchenergie pro Fragment für den Double-Capture- und den Single-Capture-Kanal. Die Energien sind wieder keine Energien im Laborsystem sondern die anhand des Transversalimpulses korrigierten. Zwischen der entsprechenden Darstellung für die Transferionisation und dem Double-Capture- Kanal sind keine Unterschiede sichtbar. Sie wurde aus diesem Grund nicht dargestellt. . . . . 54

5.1 Mit dem Modell berechnete Winkelverteilung. Vergleiche hierzu Abbildung 4.5 auf Seite 48 . . . . . 57

5.2 Die beiden Bilder sind direkt mit denen in Abb. 4.9 auf Seite 53 vergleichbar. Die beiden oberen Kurven zeigen die Verteilungen der Reaktionswahrscheinlichkeiten, die für die Simulation verwandt wurden, um grob die ungefähren Elektronendichten im Molekül zu berücksichtigen. Bei dieser Berechnung stand das Molekül stets senkrecht zum Projektilstrahl ( $\theta = 90^\circ$ ). . . . . 58

5.3 Das Bild zeigt, auf welchen Wegen das Projektil am Molekül vorbeifliegen muß, um einen bestimmten Transversalimpuls  $P_\perp$  zu erhalten. Die Gradangaben beziehen sich auf die Endposition des Projektils auf dem Projektildetektor relativ zur Molekülebene. Die Kerne des Moleküls liegen auf der horizontalen Achse und sind durch kleine Kästchen symbolisiert. Kreise stehen für Passagen, bei denen das Projektil in dieser Darstellung nach rechts abgelenkt wird - Kreuze für eine Ablenkung nach links. . . . 59

6.1	Das linke Bild entspricht einer Messung, in der die Streuebene nicht berücksichtigt wird. Die Aufspaltung in $\cos(\theta)$ ist in dieser Darstellung nur sehr schwach ausgeprägt. Weiterhin ist nicht zu erkennen, woher der kleine Zentralpeak stammt. Anhand der zweidimensionalen Darstellung jedoch ist zu erkennen, daß dieser Zentralpeak von den Außenbereichen in $\psi$ stammt. . . . .	62
A.1	Schematische Darstellung zu Interferenzeffekten . . . . .	67
A.2	Bei geeigneter Darstellung werden Effekte sichtbar, die auf Kollisionen des Projektilstrahls mit dem Restgas in der Versuchskammer zurückzuführen sind. In der rechten Abbildung wird der intensive Fleck durch ${}^3\text{He}^{++}$ -Ionen erzeugt; in der rechten Abbildung sind es $D^+$ -Ionen und $H_2^+$ -Fragmente ohne anfänglichen Impuls. . . . .	70
A.3	Darstellung der gegenüberliegenden Sektoren A und B und die dazugehörigen Flugzeitspektren (schematisch). In den Spektren ist nur das erste nachgewiesene Ion enthalten. . . . .	73

# Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Professor Schmidt-Böcking vom Institut für Kernphysik in Frankfurt und Herrn PhD. Michael Prior vom Lawrence Berkeley National Laboratory in Berkeley. Da ich unmittelbar nach Abschluß meines sechsten Semesters nach Berkeley gekommen war, hatte ich zu diesem Zeitpunkt kaum praktische Erfahrung aufzuweisen. Ich möchte deshalb Herrn Prior für seine Geduld und die immerwährende Hilfe und Unterstützung danken. Ein Großteil dieser Arbeit ist auch seine Arbeit oder basiert auf seinen Ideen.

Das Jahr in Berkeley hat für mich unschätzbaren Wert, und ich habe viel Freunde gefunden. Durch die Position als Mitarbeiter von Herrn Prior habe ich sehr viel gelernt. All dies wäre ohne den Einsatz von Herrn Professor Schmidt-Böcking nicht möglich gewesen. Von seiner Motivation habe ich oft neue Energie geschöpft. Tief beeindruckt hat mich, wie verständnisvoll und vorbehaltlos er Zwischenmenschliches und Privates neben der Forschung und dem Erfolg zuläßt. Vor allem das werde ich ihm immer danken.

Für die stets gebotene Hilfe bei alle Fragen rund um die Computersysteme möchte ich Dr. Victor Ninov im LBNL und Klaus Ullmann und Alkis Müller im Institut für Kernphysik danken. Viel Hilfe fand ich auch bei Dr. Reinhard Dörner, Thorsten Weber, Lothar Schmidt, Dr. Lutz Spielberger und Dr. Ottmar Jagutzki ebenfalls im Institut für Kernphysik.

Danken möchte ich besonders meinen Eltern, die mir für das Studium alle Möglichkeiten und Freiheiten gaben und alle meine Entscheidungen immer mit vollem Vertrauen unterstützten.