

# Hamiltonians dominanter Wechselwirkung

Diplomarbeit  
zur Erlangung des wissenschaftlichen Grades  
Diplom-Physiker

vorgelegt von

Martin Gerlach  
geboren am 17.07.1984 in Dresden

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PHYSIK KOMPLEXER SYSTEME  
DRESDEN

2011

Eingereicht am 12.08.2011

1. Gutachter: Prof. Dr. Jan-Michael Rost
2. Gutachter: Prof. Dr. Roland Ketzmerick

## **Kurzdarstellung**

In dieser Arbeit erfolgt eine näherungsweise Beschreibung der nichtintegrablen klassischen Dynamik des Heliumatoms mit Hilfe separabler Hamiltonians in verschiedenen Phasenraumbereichen. Dabei wird entlang einer klassischen Trajektorie entsprechend der dominanten Wechselwirkung von einem zum anderen Hamiltonian gewechselt.

Am Beispiel der Elektronenstoß-Streuung wird gezeigt, dass dies eine brauchbare Näherung darstellt, durch die sich ein Klassifizierungsschema für die Trajektorien bezüglich ihres charakteristischen Verhaltens ergibt.

Eine Gegenüberstellung mit entsprechenden quantenmechanischen Rechnungen zeigt außerdem, dass im Vergleich zur ungenäherten Dynamik das genäherte System eine bessere Übereinstimmung mit den quantenmechanischen Resultaten erzielt.

## **Abstract**

In this work the non-integrable classical dynamics of the helium atom is approximated by means of separable Hamiltonians in different parts of phase space. This is realized by switching between the Hamiltonians according to the dominant interaction along a classical trajectory.

Using the example of electron-impact scattering it is shown that this proves to be a suitable approximation which provides a classification scheme for the trajectories with respect to their characteristic behaviour.

The comparison with corresponding quantum calculations shows in addition that the approximated dynamics are in better agreement with the quantum results than the full classical dynamics.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Hintergrund und Problemstellung . . . . .	1
1.2 Gliederung . . . . .	2
<b>2 Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Heliumatom - Klassische Beschreibung . . . . .	3
2.1.1 Allgemeine Eigenschaften des Hamiltonians . . . . .	4
2.1.2 Unterraum $\vec{L} = 0$ . . . . .	6
2.1.3 Regularisierung . . . . .	8
2.2 Heliumatom - Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	10
2.2.1 Unterraum $\hat{\vec{L}} = 0$ . . . . .	11
2.2.2 Numerische Vorbetrachtungen . . . . .	13
2.3 Elektronenstoß-Streuung . . . . .	16
2.3.1 Klassische Streuung . . . . .	16
2.3.2 Quantenmechanische Streuung . . . . .	21
<b>3 Dominante Wechselwirkung</b>	<b>27</b>
3.1 Motivation und Idee . . . . .	27
3.2 Anwendung auf das Heliumatom . . . . .	30
3.2.1 Fernfeldnäherung ( $s$ -Wellenmodell) . . . . .	33
3.2.2 Nahfeldnäherung (Kicks) . . . . .	36
3.2.3 Eigenschaften des Hamiltonians dominanter Wechselwirkung . . . . .	40
<b>4 Bewertung der Näherung</b>	<b>45</b>
4.1 Klassische Untersuchung . . . . .	45
4.1.1 Ablenkfunktion . . . . .	46
4.1.2 Streuwahrscheinlichkeiten . . . . .	49
4.1.3 Klassifizierung der Trajektorien . . . . .	53
4.2 Quantenmechanische Untersuchung . . . . .	57

4.2.1	Algorithmus . . . . .	57
4.2.2	Definition des Gitters . . . . .	57
4.2.3	Numerische Tests . . . . .	60
4.2.4	Streuprozess . . . . .	63
4.3	Korrespondenzverhalten . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>71</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>73</b>
A.1	Planare Bewegung durch $\vec{L} = 0$ . . . . .	73
A.2	Invarianz der Ablenkfunktion . . . . .	75
A.3	Typische Trajektorien . . . . .	77
A.3.1	Genäherte Dynamik . . . . .	77
A.3.2	Volle Dynamik . . . . .	78
<b>Literaturverzeichnis</b>		<b>81</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Hintergrund und Problemstellung

Durch die im Allgemeinen nicht-integrable Dynamik eines generischen Hamiltonians kann das Auftreten charakteristischer Eigenschaften meist nicht ohne weiteres interpretiert werden, sofern die entsprechenden Bewegungsgleichungen überhaupt eine Lösung zulassen. Um ein tieferes Verständnis für die der Dynamik zu Grunde liegenden Prozesse zu erlangen, ist man daher auf die Verwendung geeigneter Näherungsmethoden angewiesen. Für Systeme mit einer vergleichsweise geringen Anzahl an Teilchen (*Few-Body-Problem*), bei denen sich Mean-Field-Ansätze als nicht sinnvoll erweisen, wird häufig eine störungstheoretische Behandlung bemüht. Das Problem dabei ist jedoch, dass der Hamiltonian so beschaffen sein muss, dass ein Teil der Wechselwirkung lediglich als kleine Störung angesehen werden kann, was im Allgemeinen nicht erfüllt ist.

Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit der Ansatz der *Hamiltonians dominanter Wechselwirkung* verfolgt. Dabei findet eine zeitliche Separation der Dynamik statt, wobei entlang einer klassischen Trajektorie entsprechend der dominanten Wechselwirkung von einem zum anderen Hamiltonian umgeschaltet wird. Dieses Approximationsschema kann somit als Verallgemeinerung von Näherungskonzepten wie der *Strong-Field-Approximation* [1] oder des *s*-Wellenmodells [2] angesehen werden.

Motiviert durch entsprechende Ergebnisse für das System eines lasergetriebenen Atoms [3] soll das Verfahren auf die klassische Dynamik des Heliumatoms, dem kanonischen Beispielsystem der Atomphysik, angewendet werden. Ein Verständnis der klassischen Dynamik erscheint mit Hinblick auf die Verwendung semiklassischer Methoden nützlich. Jedoch beschränken sich solche Ansätze bisher auf niedrigdimensionale Unterräume, wie z.B. die kollineare Konfiguration [4], da bisher große Bereiche des vollen Phasenraumes noch nicht Gegenstand systematischer Untersuchungen waren. Schon die Behandlung der planaren Konfiguration, siehe z.B. [5, 6], kann nicht als abgeschlossen angesehen werden.

Daher ist es Ziel dieser Arbeit, mit Hilfe eines Hamiltonians dominanter Wechselwirkung ein tieferes qualitatives Verständnis für die klassische Dynamik des planaren Heliumatoms zu gewinnen.

## 1.2 Gliederung

In **Kapitel 2** werden die theoretischen Grundlagen für die klassische und die quantenmechanische Beschreibung des Heliumatoms gelegt. Darauf aufbauend erfolgt die jeweilige Formulierung der Elektronenstoß-Streuung.

Das Konzept der *Hamiltonians dominanter Wechselwirkung* wird in **Kapitel 3** vorgestellt. Dieses Schema wird auf das Heliumatom angewendet, woraus sich eine näherungsweise Beschreibung der entsprechenden klassischen Dynamik ergibt.

Diese wird in **Kapitel 4** am Beispiel der Elektronenstoß-Streuung der ungenäherten klassischen Dynamik gegenübergestellt. Dadurch kann abgeschätzt werden, inwieweit das genäherte System die Eigenschaften des ungenäherten Systems reproduziert. Im weiteren Verlauf erlaubt der Hamiltonian dominanter Wechselwirkung eine Klassifizierung der Trajektorien nach ihrem charakteristischen Verhalten. Außerdem werden Rechnungen für das quantenmechanische Heliumatom durchgeführt, um das Korrespondenzverhalten zwischen der näherungsweisen klassischen und exakten quantenmechanischen Dynamik zu untersuchen.

Das **Kapitel 5** enthält eine Zusammenfassung der erhaltenen Resultate sowie einen Ausblick.

# 2 Grundlagen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der theoretischen Beschreibung des Heliumatoms. Dabei werden grundlegende Eigenschaften in der klassischen (Abschn. 2.1) sowie quantenmechanischen (Abschn. 2.2) Formulierung, speziell des invarianten Unterraums mit Gesamtdrehimpuls  $\vec{L} = 0$ , dargelegt. Diese bilden das Grundgerüst für die Darstellung der Elektronenstoß-Streuung im Rahmen des Drei-Körper-Coulomb-Problems (Abschn. 2.3). Insbesondere wird in diesem Zusammenhang auf die Präparation des Anfangszustandes sowie die zugänglichen Observablen im klassischen und im quantenmechanischen Fall eingegangen.

## 2.1 Heliumatom - Klassische Beschreibung

Das Heliumatom, bestehend aus einem Kern und zwei Elektronen, stellt einen speziellen Fall des Drei-Körper-Coulomb-Problems (DKCP) dar, welches durch den Hamiltonian

$$H = \sum_{i=1}^3 \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^3 \frac{Z_i Z_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.1.1)$$

beschrieben wird. Dabei sind  $\vec{r}_i$  die jeweiligen Koordinaten,  $\vec{p}_i$  die Impulse,  $m_i$  die Massen sowie  $Z_i$  die Ladungen der drei Teilchen.

Die zeitliche Entwicklung des Systems wird bestimmt durch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen:

$$\frac{d}{dt} \vec{r}_i = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i}, \quad (2.1.2a)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i}. \quad (2.1.2b)$$

### 2.1.1 Allgemeine Eigenschaften des Hamiltonians

#### Separation der Kernbewegung

Das Heliumatom besteht aus einem Kern sowie zwei Elektronen. Die Massen  $m_{\text{Elektron}}$  und  $m_{\text{Kern}}$  von Elektron und Kern [7] unterscheiden sich um fast vier Größenordnungen:

$$\frac{m_{\text{Elektron}}}{m_{\text{Kern}}} \approx \frac{m_{\text{Elektron}}}{4 \cdot m_{\text{Proton}}} \approx 0.000136 \ll 1. \quad (2.1.3)$$

Dabei bezeichnet  $m_{\text{Proton}}$  die Masse eines Protons. Gemäß der *Infinite-Nucleus-Approximation* (INA) kann die Masse des Kerns deshalb als unendlich groß betrachtet und seine Dynamik vernachlässigt werden. Befindet sich der Kern im Koordinatenursprung, ergibt sich dadurch folgender Hamiltonian<sup>1</sup>:

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2} + \frac{\vec{p}_2^2}{2} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\vec{p}_1^2}{2} + \frac{\vec{p}_2^2}{2} - \frac{Z}{|\vec{r}_1|} - \frac{Z}{|\vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (2.1.4)$$

Dabei stellen  $\vec{r}_{1,2}$  die Koordinaten und  $\vec{p}_{1,2}$  die Impulse der beiden Elektronen und  $Z$  die Kernladungszahl dar.

#### Erhaltungsgrößen

Der Hamiltonian (2.1.4) besitzt zwei wichtige Erhaltungsgrößen.

Die Erhaltung der Energie  $E = H$  folgt unmittelbar daraus, dass  $H$  nicht explizit von der Zeit abhängt.

Der Gesamtdrehimpuls

$$\vec{L} = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 \quad (2.1.5)$$

stellt eine weitere Erhaltungsgröße dar. Um dies zu zeigen, wird die zeitliche Ableitung einer Komponente  $L_\alpha$  des Gesamtdrehimpulses betrachtet:

$$\frac{d}{dt} L_\alpha = \sum_{\beta, \gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} (\dot{r}_{1\beta} p_{1\gamma} + r_{1\beta} \dot{p}_{1\gamma} + \dot{r}_{2\beta} p_{2\gamma} + r_{2\beta} \dot{p}_{2\gamma}), \quad (2.1.6)$$

---

<sup>1</sup>Es werden durchgehend atomare Einheiten (a.u.) verwendet.

wobei  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  das Levi-Civita-Symbol bezeichnet. Mit Hilfe von (2.1.2) berechnen sich die Ableitungen zu

$$\dot{r}_{1\beta} = p_{1\beta}, \quad (2.1.7a)$$

$$\dot{p}_{1\gamma} = -\frac{Z}{|\vec{r}_1|^2} r_{1\gamma} + (r_{1\gamma} - r_{2\gamma}) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}, \quad (2.1.7b)$$

$$\dot{r}_{2\beta} = p_{2\beta}, \quad (2.1.7c)$$

$$\dot{p}_{2\gamma} = -\frac{Z}{|\vec{r}_2|^2} r_{2\gamma} - (r_{1\gamma} - r_{2\gamma}) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}. \quad (2.1.7d)$$

Daraus ergibt sich, dass die zeitliche Ableitung einer Komponente des Gesamtdrehimpulses verschwindet:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} L_\alpha &= \sum_{\beta, \gamma=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left( p_{1\beta} p_{1\gamma} - \frac{Z}{|\vec{r}_1|^2} r_{1\beta} r_{1\gamma} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2} r_{1\beta} r_{1\gamma} \right. \\ &\quad \left. + p_{2\beta} p_{2\gamma} - \frac{Z}{|\vec{r}_2|^2} r_{2\beta} r_{2\gamma} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2} r_{2\beta} r_{2\gamma} \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.1.8a)$$

### Skaleneigenschaft

Das Coulomb-Potential  $V$  in (2.1.4) stellt eine homogene Funktion der Koordinaten  $\vec{r}_{1,2}$  vom Grad  $-1$  dar:

$$V(\alpha \vec{r}_1, \alpha \vec{r}_2) = \alpha^{-1} V(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (2.1.9)$$

Daraus folgt, dass die Bewegungsgleichungen unter der kanonischen Transformation

$$\vec{r}_i \mapsto |E| \vec{r}_i, \quad (2.1.10a)$$

$$\vec{p}_i \mapsto |E|^{-1/2} \vec{p}_i, \quad (2.1.10b)$$

$$t \mapsto |E|^{3/2} t, \quad (2.1.10c)$$

invariant bleiben [8]. Die sich daraus ergebende Transformation des Hamiltonians (2.1.4)

$$H \mapsto |E|^{-1} H = \begin{cases} +1, & E > 0 \\ 0, & E = 0 \\ -1, & E < 0 \end{cases} \quad (2.1.11)$$

zeigt, dass dieser auf eine energieunabhängige Form gebracht werden kann. Das bedeutet, dass Trajektorien mit beliebiger Energie  $E$  mit Hilfe der Skalentransformation (2.1.10) auf eine Trajektorie mit der Energie  $E = 1, 0$  oder  $-1$  zurückgeführt werden können.

Auf den Gesamtdrehimpuls  $\vec{L}$  wirkt sich die Skalentransformation (2.1.10) folgendermaßen aus:

$$\vec{L} \mapsto |E|^{1/2} \vec{L}. \quad (2.1.12)$$

Bei der Betrachtung des Grenzübergangs  $|E| \rightarrow 0$  für endliche Werte von  $\vec{L}$ , zeigt sich, dass für den transformierten Gesamtdrehimpuls gilt:

$$|E|^{1/2} \vec{L} \rightarrow 0. \quad (2.1.13)$$

Für ein homogenes Potential vom Grad  $-1$  stellt dieser Grenzübergang den semiklassischen Limes dar [9]. In diesem Bereich können daher Trajektorien mit beliebigem (endlichen) Gesamtdrehimpuls  $\vec{L}$  auf Trajektorien mit  $\vec{L} \rightarrow 0$  transformiert werden.

## 2.1.2 Unterraum $\vec{L} = 0$

Die Dynamik des Zwei-Elektronen-Hamiltonians (2.1.4) findet in einem 12-dimensionalen Phasenraum statt. Unter Berücksichtigung der vier Erhaltungsgrößen aus Abschnitt 2.1.1, Energie und Gesamtdrehimpuls, reduziert sich der effektive Phasenraum auf acht Dimensionen. Eine weitere Vereinfachung kann durch die Beschränkung auf invariante Unterräume erreicht werden.

Eine solche Möglichkeit bietet die Betrachtung der kollinearen Konfiguration, bei der Kern und Elektronen entlang einer Achse angeordnet sind. Dabei wird zwischen der *Zee*-Konfiguration und der *eZe*-Konfiguration unterschieden, je nachdem, ob die Bewegung der Elektronen auf der gleichen Seite oder auf unterschiedlichen Seiten des Kerns erfolgt, vgl. Abb. 2.1.1. Die *Zee*- und die *eZe*-Konfiguration stellt für sich jeweils einen invarianten



**Abbildung 2.1.1:** Schematische Darstellung des Kerns ( $\square$ ) und der Elektronen ( $\bullet$ ) der kollinearen Konfigurationen des Heliumatom: a) *Zee*-Konfiguration und b) *eZe*-Konfiguration.

Unterraum dar. Die Dynamik der Elektronen wird dabei auf zwei Freiheitsgrade ( $r_1, r_2$ )

reduziert, wodurch sich der Hamiltonian vereinfacht zu:

$$H_{koll} = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 \pm r_2|}. \quad (2.1.14)$$

Dabei bezeichnen  $r_{1,2}$  die Abstände der Elektronen vom Kern und  $Z$  die Kernladungszahl. Der unterschiedliche Faktor im letzten Term ergibt sich entsprechend der gewählten Konfiguration ( $Zee: -, eZe: +$ ). Beide Fälle zeigen jedoch ein fundamental anderes Verhalten [10]: Während die  $Zee$ -Konfiguration kaum von einem integrablen System zu unterscheiden ist (nah-integrabel), zeigt der Phasenraum der  $eZe$ -Konfiguration eine chaotische Struktur.

Eine Verallgemeinerung der beiden kollinearen Anordnungen bietet der Unterraum  $\vec{L} = 0$ . Dieser ist ebenfalls invariant, da der Gesamtdrehimpuls  $\vec{L}$  eine Erhaltungsgröße darstellt (vgl. Abschnitt 2.1.1). Aus der Forderung  $\vec{L} = 0$  folgt unmittelbar, dass die Dynamik in einer zeitlich konstanten Ebene stattfindet, siehe Anhang A.1. Der somit auf eine planare Konfiguration beschränkte Hamiltonian (2.1.4) lautet in Polarkoordinaten:

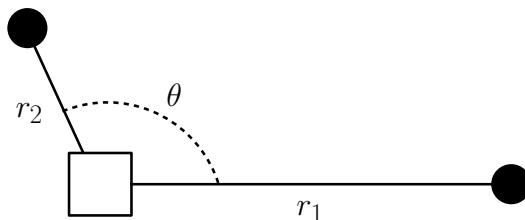
$$H = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{p_{\phi_1}^2}{2r_1^2} + \frac{p_{\phi_2}^2}{2r_2^2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\phi_1 - \phi_2)}}. \quad (2.1.15)$$

Hierbei entsprechen  $r_{1,2}$  den Abständen der Elektronen vom Kern, sowie  $\phi_{1,2}$  den Polarwinkeln der Elektronen. Die Drehimpulse der Elektronen werden durch  $p_{\phi_{1,2}}$  beschrieben. Mittels einer Transformation auf die Relativwinkel

$$\theta = \phi_1 - \phi_2, \quad (2.1.16a)$$

$$\eta = \frac{1}{2} (\phi_1 + \phi_2) \quad (2.1.16b)$$

und unter Berücksichtigung von  $\vec{L} = 0$  wird das Problem auf drei Freiheitsgrade  $r_1, r_2, \theta$  reduziert, vgl. Abb. 2.1.2.



**Abbildung 2.1.2:** Schematische Darstellung des Kerns ( $\square$ ) und der Elektronen ( $\bullet$ ) der planaren Konfiguration des Heliumatoms mit drei Freiheitsgraden  $r_1, r_2, \theta$ .

Dadurch erhält der Hamiltonian die Gestalt

$$H = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) p_\theta^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}, \quad (2.1.17)$$

wobei  $p_\theta$  den Drehimpuls eines einzelnen Elektrons darstellt. Durch die Bedingung  $\vec{L} = 0$  folgt für die Drehimpulse der Elektronen:

$$|p_\theta| = |p_{\phi_1}| = |p_{\phi_2}|, \quad (2.1.18a)$$

$$p_{\phi_1} = -p_{\phi_2}. \quad (2.1.18b)$$

Die Untersuchung des Unterraums  $\vec{L} = 0$  erscheint aus vielerlei Hinsicht interessant:

Während das Verständnis des klassischen Phasenraums für die kollinare Dynamik weit fortgeschritten ist [11], bietet die planare Dynamik zahlreiche offene Fragestellungen, z.B. bezüglich periodischer Orbits [6] oder sogenannter Dreifachkollisionen [5, 12].

Dreifachkollisionen sind Trajektorien, bei denen Kern und beide Elektronen gleichzeitig miteinander kollidieren. Diese sind von fundamentaler Bedeutung für die gesamte Dynamik des Heliumatoms [13]. Da solche Trajektorien allerdings nur im Unterraum  $\vec{L} = 0$  auftreten [14], nimmt dieser eine ausgezeichnete Stellung ein.

In Abschn. 2.1.1 wurde gezeigt, dass im semiklassischen Limes unter Ausnutzung der Skalentransformation (2.1.10) für den Gesamtdrehimpuls  $\vec{L} \rightarrow 0$  gilt. Daher erscheint mit Hinblick auf die Anwendung semiklassischer Methoden ein Verständnis der klassischen Dynamik im vollen Unterraum  $\vec{L} = 0$  als wünschenswert.

### 2.1.3 Regularisierung

Bei der numerischen Integration der Bewegungsgleichungen (2.1.2) für das Heliumatom ist zu berücksichtigen, dass im Hamiltonian (2.1.17) Singularitäten auftreten können. Dies geschieht, wenn die Elektronen entlang ihrer Trajektorie mit dem Kern kollidieren, d.h.  $r_{1,2} \rightarrow 0$ . Dabei wird zwischen Zweifachkollisionen, d.h. entweder  $r_1 \rightarrow 0$  oder  $r_2 \rightarrow 0$ , und Dreifachkollisionen, d.h.  $r_1 \rightarrow 0$  und  $r_2 \rightarrow 0$ , unterschieden. Erstere können durch Anwendung der Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [15] regularisiert werden, wodurch die Trajektorie problemlos entlang einer solchen Singularität propagiert werden kann. Dies soll im Folgenden für das Problem des planaren Heliumatoms gezeigt werden, wobei sich die Darstellung an den Ausführungen in [16, 10] orientiert.

Ausgangspunkt ist der planare Hamiltonian für das Heliumatom

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2} + \frac{\vec{p}_2^2}{2} - \frac{Z}{|\vec{r}_1|} - \frac{Z}{|\vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = E, \quad (2.1.19)$$

wobei  $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$  und  $\vec{p}_i = (p_{x_i}, p_{y_i})$  sind mit  $i = 1, 2$ . Danach werden neue Koordinaten  $(Q_i, P_i)_{i=1..4}$  definiert:

$$\begin{aligned} x_1 &= Q_1^2 - Q_2^2, & x_2 &= Q_3^2 - Q_4^2, \\ y_1 &= 2Q_1Q_2, & y_2 &= 2Q_3Q_4, \\ p_{x_1} &= \frac{Q_1P_1 - Q_2P_2}{2(Q_1^2 + Q_2^2)}, & p_{x_2} &= \frac{Q_3P_3 - Q_4P_4}{2(Q_3^2 + Q_4^2)}, \\ p_{y_1} &= \frac{Q_2P_1 + Q_1P_2}{2(Q_1^2 + Q_2^2)}, & p_{y_2} &= \frac{Q_4P_3 + Q_3P_4}{2(Q_3^2 + Q_4^2)}. \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

Daraus ergibt sich folgender Hamiltonian in den neuen Koordinaten  $(Q_i, P_i)_{i=1..4}$ :

$$\tilde{H} = \frac{1}{8} \left( \frac{\vec{P}_1^2}{\vec{R}_1^2} + \frac{\vec{P}_2^2}{\vec{R}_2^2} \right) - \frac{Z}{\vec{R}_1^2} - \frac{Z}{\vec{R}_2^2} + \frac{1}{R_{12}^2} = E, \quad (2.1.21)$$

mit den Bezeichnungen

$$\vec{R}_1 = (Q_1, Q_2), \quad (2.1.22a)$$

$$\vec{R}_2 = (Q_3, Q_4), \quad (2.1.22b)$$

$$\vec{P}_1 = (P_1, P_2), \quad (2.1.22c)$$

$$\vec{P}_2 = (P_3, P_4), \quad (2.1.22d)$$

$$\begin{aligned} R_{12}^2 &= \left[ (Q_1^2 + Q_2^2)^2 + (Q_3^2 + Q_4^2)^2 \right. \\ &\quad \left. - 2(Q_1Q_3 + Q_2Q_4)^2 + 2(Q_1Q_4 - Q_2Q_3)^2 \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (2.1.22e)$$

Anschließend wird eine fiktive Zeit  $\tau$  mittels der Transformation

$$dt = \frac{(Q_1^2 + Q_2^2)(Q_3^2 + Q_4^2)}{Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2 + Q_4^2} d\tau \quad (2.1.23)$$

eingeführt. Die Formulierung der Dynamik bezüglich der Zeit  $\tau$  erfolgt durch den Hamiltonian  $\Gamma$  in einem erweiterten Phasenraum, welcher zusätzlich die kanonisch konjugierten

Variablen  $t$  und  $-E$  berücksichtigt:

$$\Gamma = \frac{1}{\vec{R}_1^2 + \vec{R}_2^2} \left[ \frac{1}{8} (\vec{P}_1^2 \vec{R}_2^2 + \vec{P}_2^2 \vec{R}_1^2) - Z \vec{R}_1^2 - Z \vec{R}_2^2 + \vec{R}_1^2 \vec{R}_2^2 \left( \frac{1}{R_{12}^2} - E \right) \right] = 0. \quad (2.1.24)$$

Die Transformation lässt die Bewegungsgleichungen invariant, d.h. es gilt:

$$\frac{d}{d\tau} Q_i = \frac{\partial \Gamma}{\partial P_i}, \quad (2.1.25a)$$

$$\frac{d}{d\tau} P_i = -\frac{\partial \Gamma}{\partial Q_i}, \quad i = 1, \dots, 4. \quad (2.1.25b)$$

Die Zeitentwicklung der Variablen  $t$  und  $-E$

$$\frac{d}{d\tau} t = \frac{\partial \Gamma}{\partial (-E)} = \frac{(Q_1^2 + Q_2^2)(Q_3^2 + Q_4^2)}{Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2 + Q_4^2}, \quad (2.1.26a)$$

$$\frac{d}{d\tau} (-E) = -\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = 0, \quad (2.1.26b)$$

reproduziert die verwendete Zeittransformation (2.1.23) und die Energieerhaltung.

Der Hamiltonian  $\Gamma$  besitzt die Form zweier, gekoppelter, zweidimensionaler harmonischer Oszillatoren in den Koordinaten  $\vec{Q}_1, \vec{Q}_2$ . Mit Hilfe der Beziehung

$$\vec{R}_{1,2}^2 = r_{1,2} \quad (2.1.27)$$

erkennt man, dass  $\Gamma$  im Falle einer Zweifachkollision kein singuläres Verhalten aufweist. Aus diesem Grund bezeichnet man  $\Gamma$  als *regularisierten* Hamiltonian.

## 2.2 Heliumatom - Quantenmechanische Beschreibung

Die exakte Beschreibung des Heliumatoms erfolgt im Rahmen der Quantenmechanik. Die Dynamik der beiden Elektronen wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (ZASG) bestimmt. Diese ist in der Ortsdarstellung durch

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = H \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (2.2.1)$$

gegeben, wobei der Hamiltonian  $H$  in der INA folgende Gestalt besitzt:

$$H = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{Z}{|\vec{r}_1|} - \frac{Z}{|\vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (2.2.2)$$

Dabei bezeichnen  $\vec{r}_{1,2}$  die Koordinaten der Elektronen und  $Z$  die Kernladungszahl.

Bei der Betrachtung in Kugelkoordinaten ist es zweckmäßig, die ZASG für eine skalierte Wellenfunktion

$$\tilde{\psi} = r_1 r_2 \psi(r_1, \theta_1, \phi_1, r_2, \theta_2, \phi_2) \quad (2.2.3)$$

zu formulieren. Der entsprechende Hamiltonian  $\tilde{H}$ , der in der ZASG (2.2.1) für  $\tilde{\psi}$  auftaucht, lautet in Kugelkoordinaten:

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2}\tilde{\Delta}_1 - \frac{1}{2}\tilde{\Delta}_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\phi_1 - \phi_2)}}, \quad (2.2.4)$$

wobei  $\tilde{\Delta}_i$  durch

$$\tilde{\Delta}_i = \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left( \sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i^2}, \quad i = 1, 2 \quad (2.2.5)$$

gegeben ist.

## 2.2.1 Unterraum $\hat{\vec{L}} = 0$

Im Folgenden soll analog zum klassischen Hamiltonian (2.1.17) der quantenmechanische Hamiltonian mit drei Freiheitsgraden  $r_1, r_2, \theta$  für einen Gesamtdrehimpuls  $\hat{\vec{L}} = 0$  hergeleitet werden.

Im ersten Schritt wird gezeigt, dass in diesem Fall die Wellenfunktion  $\psi(r_1, \theta_1, \phi_1, r_2, \theta_2, \phi_2)$  so ausgedrückt werden kann, dass sie nur von drei Variablen abhängt: den Abständen  $r_1$  und  $r_2$  der Elektronen vom Kern sowie dem Relativwinkel  $\theta$  der Elektronen.

Dazu betrachtet man eine Wellenfunktion  $\psi_{LM}$  mit festen Eigenwerten  $L, M$  für den Gesamtdrehimpulsoperator  $\hat{L}^2$  und dessen Projektion  $\hat{L}^z$  auf die z-Achse:

$$\hat{L}^2 \psi_{LM} = L(L+1) \psi_{LM}, \quad (2.2.6a)$$

$$\hat{L}^z \psi_{LM} = M \psi_{LM}. \quad (2.2.6b)$$

Der Winkelanteil von  $\psi_{LM}$  kann in die vollständige Basis von Ein-Teilchen-Kugelflächenfunktionen  $Y_m^l$  entwickelt werden [17]:

$$\psi_{LM} = \sum_{l_1, l_2} \sum_{m_1, m_2} C_{l_1, l_2}(r_1, r_2) Y_{m_1}^{l_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{m_2}^{l_2}(\theta_2, \phi_2) \langle l_1 m_1 l_2 m_2 | LM l_1 l_2 \rangle. \quad (2.2.7)$$

Der letzte Term in der Gleichung ist ein Clebsch-Gordon-Koeffizient und ergibt sich durch Wechsel des vollständigen Satzes kommutierender Observablen von  $(\hat{L}^2, \hat{L}^z, \hat{l}_1^2, \hat{l}_2^2)$  auf

$(\hat{l}_1^2, \hat{l}_2^2, \hat{l}_1^z, \hat{l}_2^z)$ , wobei die  $\hat{\vec{l}}_i$  die Ein-Teilchen-Drehimpulsoperatoren sind.

Im Unterraum  $\hat{\vec{L}} = 0$  können einige Vereinfachungen vorgenommen werden. Zum einen folgt wegen (2.2.6)  $L = 0$  sowie  $M = 0$ . Es gilt weiterhin für den Ein-Teilchen-Drehimpulsoperator:

$$\hat{l}_1^2 = \left( \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{l}}_2 \right)^2 = \hat{l}_2^2 - \hat{\vec{l}}_2 \cdot \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{l}}_2 + \hat{L}^2 = \hat{l}_2^2. \quad (2.2.8)$$

Das hat wiederum zur Konsequenz, dass für die Erwartungswerte  $l_1, l_2, m_1, m_2$  folgt:

$$l_1 = l_2, \quad (2.2.9a)$$

$$m_1 = -m_2. \quad (2.2.9b)$$

Damit vereinfacht sich die Summe für den Ausdruck  $\psi_{L=0} := \psi_{00}$  in (2.2.7) zu

$$\psi_{L=0} = \sum_l \sum_m C_{l,l}(r_1, r_2) Y_m^l(\theta_1, \phi_1) Y_{-m}^l(\theta_2, \phi_2) \langle l m l - m | 0 0 l l \rangle. \quad (2.2.10)$$

Mit Hilfe der folgenden Identitäten kann dieser Ausdruck weiter ausgewertet werden [18]:

$$\langle l m l - m | 0 0 l l \rangle = \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}}, \quad (2.2.11a)$$

$$Y_m^{l*}(\theta_2, \phi_2) = (-1)^m Y_{-m}^l(\theta_2, \phi_2), \quad (2.2.11b)$$

$$\sum_m Y_m^{l*}(\theta_1, \phi_1) Y_m^l(\theta_2, \phi_2) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \theta). \quad (2.2.11c)$$

Dabei sind die  $P_l$  Legendre-Polynome und der Winkel  $\theta$  beschreibt den Relativwinkel zwischen den Vektoren  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  gemäß

$$\cos \theta = \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_2 - \phi_1). \quad (2.2.12)$$

Damit gelangt man schließlich zum gewünschten Ergebnis, dass die Wellenfunktion  $\psi_{L=0}$  nur von den drei Variablen  $r_1, r_2$  und  $\theta$  abhängen kann:

$$\psi_{L=0} = \sum_l C_{l,l}(r_1, r_2) (-1)^l \frac{\sqrt{2l+1}}{4\pi} P_l(\cos \theta). \quad (2.2.13)$$

Weiterführend kann dadurch der Hamiltonian (2.2.4) ebenfalls auf drei Freiheitsgrade reduziert werden.

Dazu führt man neue Winkelkoordinaten  $(\theta, \theta', \phi, \phi')$  ein, die sich aus den Winkelkoordi-

naten  $(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2)$  folgendermaßen ergeben [19]:

$$\cos \theta = \cos \theta_1 \cos \theta_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\phi_2 - \phi_1), \quad (2.2.14a)$$

$$\sin \phi \sin \theta = \sin(\phi_2 - \phi_1) \sin \theta_2, \quad (2.2.14b)$$

$$\theta' = \theta_1, \quad (2.2.14c)$$

$$\phi' = \phi_1. \quad (2.2.14d)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die Definition von  $\theta$  in (2.2.14a) genau der Definition des Relativwinkels  $\theta$  in (2.2.12) entspricht. Da die Wellenfunktion  $\psi_{L=0}$  nur von den Koordinaten  $r_1, r_2, \theta$  abhängt, verschwinden bei der Transformation des Hamiltonians (2.2.4) alle partiellen Ableitungen nach  $\theta', \phi, \phi'$ . Die Werte für  $\theta', \phi, \phi'$  werden daher in Konsistenz mit den Transformationsgleichungen festgesetzt zu  $\theta = \phi_2$ ,  $\theta' = \phi = \frac{\pi}{2}$  und  $\phi' = 0$  [20]. Dadurch gelangt man für verschwindenden Gesamtdrehimpuls zu einem Hamiltonian mit den drei Freiheitsgraden  $r_1, r_2, \theta$ :

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + V(r_1, r_2, \theta), \quad (2.2.15)$$

wobei das Potential durch

$$V(r_1, r_2, \theta) = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}. \quad (2.2.16)$$

gegeben ist. Hierbei bezeichnen  $r_1$  und  $r_2$  die Abstände der Elektronen zum Kern sowie  $\theta$  den Relativwinkel zwischen den Elektronen.

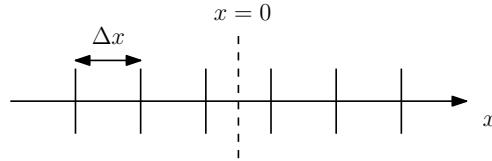
## 2.2.2 Numerische Vorberichtigungen

Bei der numerischen Lösung der ZASG (2.2.1) soll die Wellenfunktion  $\psi_{L=0}$  auf einem Gitter propagiert werden. Die dabei auftretenden Schwierigkeiten sollen im Folgenden dargestellt werden.

### Singularitäten

Der Hamiltonian (2.2.15) weist Singularitäten bei  $r_1 = 0, r_2 = 0$  sowie  $\sin \theta = 0$  auf. Im klassischen Fall wurde dieses Problem durch eine Regularisierung der Bewegungsgleichungen behoben (vgl. Abschn. 2.1.3). Im quantenmechanischen Fall kann durch die Darstellung der Wellenfunktion auf einem Gitter ein anderer Ansatz gewählt werden. Dabei wird das ortsfeste Gitter so gewählt, dass diese Singularitäten jeweils zwischen zwei solchen Gitter-

punkten liegen, vgl. Abb. 2.2.1.



**Abbildung 2.2.1:** Schematische Darstellung der Definition der Gitterpunkte mit dem Abstand  $\Delta x$  auf der Koordinatenachse  $x$  mit einer Singularität bei  $x = 0$ . Das Gitter wird so gewählt, dass die Singularität den Abstand  $\frac{\Delta x}{2}$  zu den beiden nächstgelegenen Gitterpunkten besitzt.

### Gittertransformation

Die später verwendete numerische Methode (siehe Abschn. 4.2.1) für das Lösen der ZASG verlangt ein Gitter mit festem Abstand zwischen den Gitterpunkten. Für das Coulomb-Problem scheint jedoch für die Radialkoordinaten  $r_{1,2}$  eine Darstellung mit einem variablen Abstand von Vorteil.

Zum Einen benötigt man im Bereich der Singularitäten bei  $r_1 = 0$  und  $r_2 = 0$  eine hohe Gitterpunktdichte, da sich dort das Potential stark ändert. Zum Anderen möchte man der Langreichweiteigkeit des Coulomb-Potentials Rechnung tragen und das Gitter möglichst weit ausdehnen. Das führt bei gleichmäßiger Verteilung der Gitterpunkte zu einer zu großen Gesamtanzahl an Gitterpunkten, so dass das Problem mit den verfügbaren Rechenressourcen nicht mehr behandelt werden kann.

Eine Lösung bietet sich durch eine Transformation der Koordinaten des Gitters [21]. Dabei wird ein gleichverteiltes Gitter in Hilfskoordinaten so auf den “echten” Ortsraum abgebildet, dass mit zunehmenden Abstand von den Singularitäten die Gitterpunktdichte verringert wird. Dadurch werden bei gleicher Ausdehnung des Gitters eine höhere Anzahl von Gitterpunkten in die Nähe der Singularitäten abgebildet.

Das Verfahren soll anhand des Wasserstoffproblems veranschaulicht werden. Eine Erweiterung auf das Heliumatom mit zwei radialen Variablen ist ohne Weiteres möglich [22]. Der Hamiltonian für die Radialkomponente eines Elektrons im Coulombfeld eines Kerns mit der Ladung  $Z$  ist gegeben durch

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{Z}{r}. \quad (2.2.17)$$

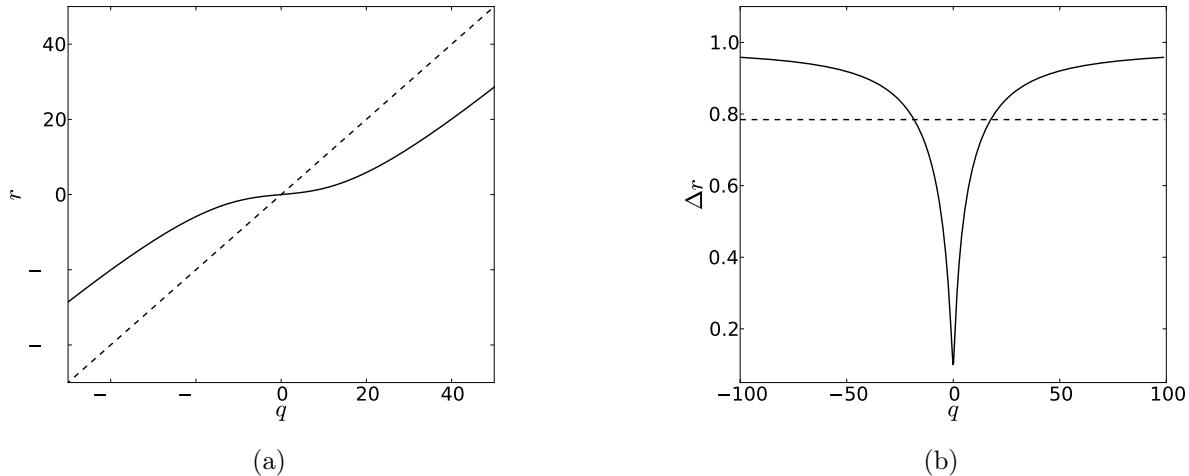
Die in [21] gewählte Transformation von Hilfskoordinaten  $q$  auf “echte” Koordinaten  $r$  lautet

$$r = q - c_0 \arctan(c_1 q). \quad (2.2.18)$$

Für  $q \gg c_0$  gilt  $r \approx q$ . In einem Intervall  $2c_1^{-1}$  um den Wert  $q = 0$  kommt es jedoch zu einer Stauchung der Abbildung in der Nähe des Punktes  $r = 0$ . Um die Bijektivität zu gewährleisten, muss für die Parameter gelten:

$$c_0 c_1 < 1. \quad (2.2.19)$$

In Abb. 2.2.2 ist für die Werte  $c_0 = 18.0$ ,  $c_1 = 0.05$  die Transformation (2.2.18) dargestellt. Es zeigt sich, dass eine Gleichverteilung der Gitterpunkte in der Koordinate  $q$  zu einem variablen Abstand der Gitterpunkte in der Koordinate  $r$  führt.



**Abbildung 2.2.2:** Beispiel für die Gittertransformation (2.2.18) mit den Parametern  $c_0 = 18.0$ ,  $c_1 = 0.05$ . a) Vergleich der Funktion  $r(q)$  (durchgezogene Linie) mit der identischen Abbildung  $r = q$  (gestrichelte Linie). b) Darstellung des variablen Gitterabstandes  $\Delta_r(r)$  (durchgezogene Linie) für ein in der Koordinate  $q$  definiertes Gitter mit  $N_q = 256$  Punkten im Intervall  $[-125, 125]$  und konstantem Gitterabstand  $\Delta_q = 2L_q/N_q$ . Die gestrichelte Linie zeigt zum Vergleich den konstanten Abstand der Gitterpunkte  $\Delta_r(r)$  für ein in der Koordinate  $r$  definiertes Gitter mit  $N_r = 256$  Punkten und gleicher Ausdehnung.

Die ZASG ist invariant gegenüber der Transformation (2.2.18):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = H(r) \psi(r, t) \mapsto i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(q, t) = \tilde{H}(q) \tilde{\psi}(q, t). \quad (2.2.20)$$

Die transformierten Größen  $\tilde{\psi}$  und  $\tilde{H}$  ergeben sich zu

$$\tilde{\psi}(q, t) = \psi(r(q), t), \quad (2.2.21a)$$

$$\tilde{H}(q) = -\frac{1}{2} \left( J^{-1}(q) \frac{\partial}{\partial q} \right)^2 - \frac{Z}{q - c_0 \arctan(c_1 q)}. \quad (2.2.21b)$$

Dabei ist  $J$  der Jacobian der Transformation (2.2.18):

$$J = \frac{dr}{dq} = 1 - \frac{c_0 c_1}{1 + (c_1 q)^2}. \quad (2.2.22)$$

## 2.3 Elektronenstoß-Streuung

In diesem Abschnitt soll der Prozess der *Elektronenstoß-Streuung* (ESS) näher betrachtet werden. Dieser bezeichnet den Beschuss eines wasserstoffartigen Atoms (ein gebundenes Elektron im Coulomb-Feld eines Kerns mit Ladung  $Z$ ) mit einem freien Elektron und stellt einen der fundamentalen Prozesse der Atomphysik dar [23]. Die theoretische Beschreibung erfolgt im Rahmen des DKCP, welches klassisch in Abschn. 2.1 und quantenmechanisch in Abschn. 2.2 vorgestellt wurde.

Die ESS bietet durch die Berechnung von Streuquerschnitten die Möglichkeit, quantitative Aussagen über die Dynamik im Heliumatom zu treffen.

Dies ermöglicht zum Einen im Rahmen der klassischen Beschreibung einen direkten Vergleich zwischen der vollen ungenäherten Dynamik des Heliumatoms und der Näherungsmethode der dominanten Wechselwirkung, welche in Kap. 3 vorgestellt wird.

Außerdem kann im semiklassischen Limes  $E \rightarrow 0$  (vgl. Abschn. 2.1.1) das klassische und das quantenmechanische DKCP gegenübergestellt werden. Dadurch gelangt man zu einer anschaulichen Interpretation der Eigenschaften des quantenmechanischen Systems mit Hilfe von klassischen Trajektorien [24, 25, 26].

Aus diesen Gründen werden im Folgenden grundlegende Aspekte der klassischen und quantenmechanischen Beschreibung der ESS dargestellt.

### 2.3.1 Klassische Streuung

#### Anfangszustand

Für die Lösung der klassischen Bewegungsgleichungen (2.1.2) muss das Anfangswertproblem (AWP) des Hamiltonians (2.1.17) definiert werden. Das bedeutet, dass die sechs

kanonischen Variablen zum Anfangszeitpunkt  $t = t_0$  gegeben sein müssen:

$$\begin{aligned} r_1(t_0) &= r_1^0, & p_{r_1}(t_0) &= p_{r_1}^0, \\ r_2(t_0) &= r_2^0, & p_{r_2}(t_0) &= p_{r_2}^0, \\ \theta(t_0) &= \theta^0, & p_\theta(t_0) &= p_\theta^0. \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

Bei einem Streuprozess wird der Anfangszustand zur Zeit  $t \rightarrow -\infty$  präpariert. Man geht davon aus, dass das wasserstoffartige System (Kern mit gebundenem Zielelektron) und das freie Projektilelektron asymptotisch weit auseinander liegen, sodass die Wechselwirkung zwischen diesen vernachlässigt werden kann. Definiert man Elektron 1 als das gebundene Elektron und Elektron 2 als das Projektilelektron ( $r_2 \rightarrow \infty$ ), so erhält man für  $t \rightarrow -\infty$  folgenden Hamiltonian:

$$H_{t \rightarrow -\infty} = H_1 + H_2 = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_\theta^2}{2r_1^2} - \frac{Z}{r_1} + \frac{p_{r_2}^2}{2}. \quad (2.3.2)$$

Das Zielelektron und das Projektilelektron können also als voneinander unabhängig betrachtet werden. Das Zielelektron stellt effektiv ein System mit zwei Freiheitsgraden ( $r_1, \theta$ ) und zwei Erhaltungsgrößen ( $H_1, p_\theta$ ) dar, während das Projektilelektron als ein System mit einem Freiheitsgrad ( $r_2$ ) und einer Erhaltungsgröße ( $H_2$ ) aufgefasst werden kann. Das bedeutet, dass die Elektronen zur Zeit  $t \rightarrow -\infty$  jeweils für sich genommen integrierbare Systeme bilden [27], und damit deren asymptotische Dynamik durch Angabe der jeweiligen Erhaltungsgrößen eindeutig definiert ist.

Für das Zielelektron wird dabei eine der Quantenmechanik analoge Konfiguration angenommen, d.h. für die Energie  $E_1 = H_1$  sowie den Drehimpuls  $l_1 = p_\theta$  werden die Werte des Grundzustandes des quantenmechanischen Wasserstoffproblems verwendet [28]:

$$E_1 = -\frac{Z^2}{2}, \quad (2.3.3a)$$

$$l_1 = 0. \quad (2.3.3b)$$

Die gebundene Bewegung des Zielelektrons wird durch die Angabe von Energie und Drehimpuls eindeutig festgelegt. Es resultiert eine periodische Dynamik in den Koordinaten  $r_1$  und  $\theta$ . Durch Fixierung der Gesamtenergie  $E$  sind Ort und Impuls des Projektilelektrons eindeutig bestimmt:

$$r_2 \rightarrow \infty, \quad (2.3.4a)$$

$$p_{r_2} = -\sqrt{2E_2} = -\sqrt{2(E - E_1)}. \quad (2.3.4b)$$

Dadurch bleiben von den ursprünglich sechs Variablen im AWP (2.3.1) lediglich zwei Variablen übrig. Für den hier beschriebenen Fall werden die beiden Veränderlichen wie folgt gewählt:

Da das gebundene Elektron einen verschwindenden Drehimpuls besitzt, bewegt es sich auf einer vollständig entarteten Ellipse mit

$$\theta = \text{konst.}, \quad (2.3.5a)$$

$$r_1 \in [0, r_1^{\max}], \quad (2.3.5b)$$

wobei  $r_1^{\max} = \frac{Z}{|E_1|}$  den maximalen Abstand des gebundenen Elektrons vom Kern bezeichnet. Das bedeutet, dass jeder Punkt  $(\theta^0, r_1^0)$  mit

$$\theta^0 \in [0, \pi], \quad (2.3.6a)$$

$$r_1^0 \in [0, r_1^{\max}], \quad (2.3.6b)$$

ein unterschiedliches AWP für die ESS definiert. Da sich die Anfangsbedingung  $r_1 = 0$  numerisch nicht realisieren lässt, wird eine andere Betrachtung gewählt.

Die Dauer einer kompletten Periode  $T$  für die gebundene Bewegung des Zielelektrons ist gegeben durch [29]

$$T = 2\pi\sqrt{Z} |2E_1|^{\frac{3}{2}}. \quad (2.3.7)$$

Während dieser Zeit werden Ziel- und Projektilelektron weiter als unabhängig voneinander betrachtet, sodass sich das Projektil mit konstanter Geschwindigkeit um die Strecke

$$R = p_{r_2} T, \quad (2.3.8)$$

bewegt. Damit kann durch Variation des (asymptotisch weit entfernten) Startpunktes des Projektilelektrons im Bereich  $r_2 \in [r_2^*, r_2^* + R]$  jede mögliche Anfangsbedingung des Ziel- elektrons simuliert werden. Dadurch lassen sich die Anfangswerte für die Bewegung des gebundenen Elektrons festsetzen zu

$$r_1 = r_1^{\max}, \quad (2.3.9a)$$

$$p_{r_1} = 0. \quad (2.3.9b)$$

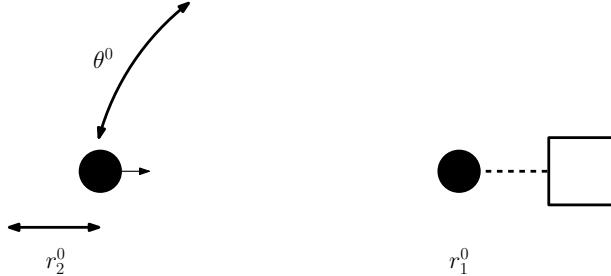
Die verbleibenden variablen Parameter für die Streuung eines freien Elektrons an einem gebundenen Elektron in Grundzustand (Energie, Drehimpuls des gebundenen Elektrons sind fest) bei fester Gesamtenergie  $E$  sind somit der Anfangswinkel  $\theta^0$  sowie die (asymptotisch

weit entfernte) Startkoordinate  $r_2^0$  des freien Elektrons, vgl. Abb. 2.3.1:

$$r_2^0 \in [r_2^*, r_2^* + R], \quad (2.3.10a)$$

$$\theta^0 \in [0, \pi]. \quad (2.3.10b)$$

Dabei ist der Wert von  $r_2^*$  beliebig, jedoch muss er so gewählt werden, dass während der



**Abbildung 2.3.1:** Schematische Darstellung des im Kern gebundenen Elektrons ( $\bullet - \square$ ) und des Projektilelektrons ( $\bullet$ ). Während die Anfangskoordinate für das gebundene Elektron  $r_1$  konstant ist, werden die Anfangskoordinaten  $r_2^0$  für das Projektilektron, sowie der Relativwinkel  $\theta^0$  variiert.

Zeitdauer  $T$  die Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen vernachlässigt werden kann. Das zu betrachtende AWP (2.3.1) für die ESS eines im Grundzustand des Kerns (Kernladungszahl  $Z$ ) gebundenen Elektrons mit Energie  $E_1$  und Drehimpuls  $l$  bei einer Gesamtenergie  $E$  kann somit folgendermaßen beschrieben werden:

$$\begin{aligned} r_1^0 &= -\frac{Z}{E_1}, & p_{r_1}^0 &= 0, \\ r_2^0 &\in [r_2^*, r_2^* + R], & p_{r_2}^0 &= -\sqrt{2(E - E_1)}, \\ \theta^0 &\in [0, \pi], & p_\theta^0 &= l. \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

### Endzustand

Unter der Zeitentwicklung des Hamiltonians (2.1.17) wird sich das Projektilektron dem Zielelektron nähern und mit diesem in Wechselwirkung treten. Für die Betrachtung der Streuung mit  $E > 0$  ergibt sich für  $t \rightarrow \infty$  eine der drei folgenden Situationen:

1. Anregung: Das Projektilektron verlässt den Kern, das Zielelektron bleibt gebunden:

$$H_{t \rightarrow \infty}^{(1)} = H_1 + H_2 = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_\theta^2}{2r_1^2} - \frac{Z}{r_1} + \frac{p_{r_2}^2}{2},$$

2. Austausch: Das Zielelektron verlässt den Kern, das Projektilektron bleibt gebunden:

$$H_{t \rightarrow \infty}^{(2)} = H_1 + H_2 = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{p_\theta^2}{2r_2^2} - \frac{Z}{r_2},$$

3. Ionisation: Das Zielelektron und das Projektilelektron verlassen den Kern:

$$H_{t \rightarrow \infty}^{(3)} = H_1 + H_2 = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2}.$$

Die Elektronen können für jeden dieser Fälle als unabhängig voneinander betrachtet werden, wodurch die asymptotische Beschreibung der Dynamik beider Elektronen für  $t \rightarrow \infty$  durch Angabe der Projektilenergie  $E_2$  und des Projektildrehimpulses  $l_2 := -p_\theta$  erfolgen kann. Die Energie und der Drehimpuls des Zielelektrons sind durch die Erhaltung der Energie ( $E_1 = E - E_2$ ) und des Gesamtdrehimpulses ( $l_1 = L - l_2 = p_\theta$ ) ebenso eindeutig beschrieben. Führt man anstatt der Energie  $E_2$  eine skalierte Energie, das Energieverhältnis

$$\epsilon_2 := \frac{E_2}{E} \quad (2.3.12)$$

ein, lässt sich leicht erkennen, welcher der drei Fälle Anregung, Austausch oder Ionisation bei der Streuung eingetreten ist:

$$\text{Anregung : } \epsilon_2 > 1 \Rightarrow E_1 < 0, E_2 > 0, \quad (2.3.13a)$$

$$\text{Austausch : } \epsilon_2 < 0 \Rightarrow E_1 > 0, E_2 < 0, \quad (2.3.13b)$$

$$\text{Ionisation : } 0 < \epsilon_2 < 1 \Rightarrow E_1 > 0, E_2 > 0. \quad (2.3.13c)$$

## Observablen

Wie oben beschrieben, stellen das Energieverhältnis  $\epsilon_2$  und der Ein-Teilchen-Drehimpuls  $l := |p_\theta|$  die interessanten Observablen der Streuung dar, da sie die asymptotische Dynamik für  $t \rightarrow \infty$  eindeutig charakterisieren. Für eine bestimmte Anfangskonfiguration (Energie, Drehimpuls des Zielelektrons sowie Gesamtenergie) werden im Allgemeinen bei Variation der verbleibenden Anfangsvariablen  $r_2^0$  und  $\theta^0$  unterschiedliche Werte für die Observablen im Limes  $t \rightarrow \infty$  beobachtet. Der Streuprozess kann somit auch als Abbildung der Anfangsvariablen auf die Observablen aufgefasst werden:

$$(r_2^0, \theta^0) \mapsto (\epsilon_2, l). \quad (2.3.14)$$

Diese Abbildung wird als *Ablenkfunktion* bezeichnet. Sie stellt das fundamentale Objekt bei Streuprozessen dar. Aus ihr können alle relevanten Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer Observablen berechnet werden [23]. Zum Beispiel ergibt sich die Wahrscheinlichkeits-

dichte  $\rho(\epsilon_2^*, l^*)$  für das Auftreten einer bestimmten Kombination von Observablen  $\epsilon_2^*, l^*$  zu:

$$\rho(\epsilon_2^*, l^*) = \frac{1}{\pi R} \int dr_2^0 \int d\theta^0 \delta(\epsilon_2(r_2^0, \theta^0) - \epsilon_2^*) \delta(l(r_2^0, \theta^0) - l^*) \quad (2.3.15a)$$

$$= \frac{1}{\pi R} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\partial(\epsilon_2, l)}{\partial(r_2^0(i), \theta^0(i))} \right|^{-1}. \quad (2.3.15b)$$

Dabei geht die Summe in (2.3.15) über alle Beiträge  $i$  der Anfangsvariablen, welche zu den Observablen  $\epsilon_2^*, l^*$  führen. Der Term  $\frac{\partial(\epsilon_2, l)}{\partial(r_2^0(i), \theta^0(i))}$  stellt den Jacobian der Ablenkfunktion dar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\epsilon_2^*, l^*) = \frac{d^2 P}{d\epsilon_2^* dl^*} \quad (2.3.16)$$

kann als normierter, zweifach-differentieller Wirkungsquerschnitt aufgefasst werden. Die Wahrscheinlichkeitsdichten  $\rho(\epsilon_2)$ ,  $\rho(l)$  ergeben sich zu

$$\rho(\epsilon_2) = \int dl \rho(\epsilon_2, l), \quad (2.3.17a)$$

$$\rho(l) = \int d\epsilon_2 \rho(\epsilon_2, l). \quad (2.3.17b)$$

Diese Funktionen besitzen analog zu (2.3.16) die Bedeutung von normierten, einfach-differentiellen Wirkungsquerschnitten.

## 2.3.2 Quantenmechanische Streuung

### Anfangszustand

Für die Lösung der ZASG (2.2.1) muss die Wellenfunktion  $\psi$  zur Zeit  $t = t_0$  als AWP gegeben sein:

$$\psi(t_0) = \psi_0. \quad (2.3.18)$$

Bei der quantenmechanischen ESS wird das Zwei-Elektronen-System durch eine Gesamtwellenfunktion beschrieben. Bei verschwindendem Gesamtdrehimpuls ergibt sich die Wellenfunktion zu (vgl. Abschn. 2.2.1)

$$\psi_{L=0}(r_1, r_2, \theta) = \sum_l c_l(r_1, r_2) \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \theta). \quad (2.3.19)$$

Dabei wurden die Koeffizienten  $c_l$  so normiert, dass gilt:

$$\sum_l \int dr_1 \int dr_2 |c_l(r_1, r_2)|^2 = 1. \quad (2.3.20)$$

In der ESS erfolgt die Präparation des Anfangszustandes zur Zeit  $t \rightarrow -\infty$ . Dies ermöglicht eine effektive Separation des Hamiltonians (2.2.15), da das Projektilelektron als asymptotisch weit entfernt vom gebundenen Elektron angesehen wird. Somit kann das gebundene Elektron durch den Ein-Teilchen-Hamiltonian

$$H_1 = -\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{1}{2} \frac{1}{r_1^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{Z}{r_1} \quad (2.3.21)$$

beschrieben werden. Dies stellt das (planare) Wasserstoffproblem mit Kernladungszahl  $Z$  dar, dessen analytische Lösung folgenden Grundzustand liefert [28]:

$$\psi_1^{(0)}(r_1) = 2Z^{3/2}r_1 e^{-Zr_1}. \quad (2.3.22)$$

Da die Operatoren  $\hat{H}_1$  sowie  $\hat{l}_1^2 := -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta})$  für das Ein-Teilchen-Problem einen vollständigen Satz kommutierender Observablen bilden, ist dieser Zustand eindeutig durch die Eigenwerte

$$E_1 = -\frac{Z^2}{2}, \quad (2.3.23a)$$

$$l_1 = 0, \quad (2.3.23b)$$

charakterisiert.

Das freie Elektron wird im Limes  $t \rightarrow -\infty$  durch den Ein-Teilchen-Hamiltonian

$$H_2 = -\frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \quad (2.3.24)$$

beschrieben. Die Eigenfunktionen dieses Operators sind Radialwellen<sup>2</sup> der Form

$$\psi_k(r_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikr_2}, \quad k \in \mathbb{R}. \quad (2.3.25)$$

Die Eigenwerte  $E_k$  sind demnach durch

$$E_k = \frac{k^2}{2} \quad (2.3.26)$$

---

<sup>2</sup>Diese besitzen durch die Transformation (2.2.3) die Gestalt einer ebenen Welle.

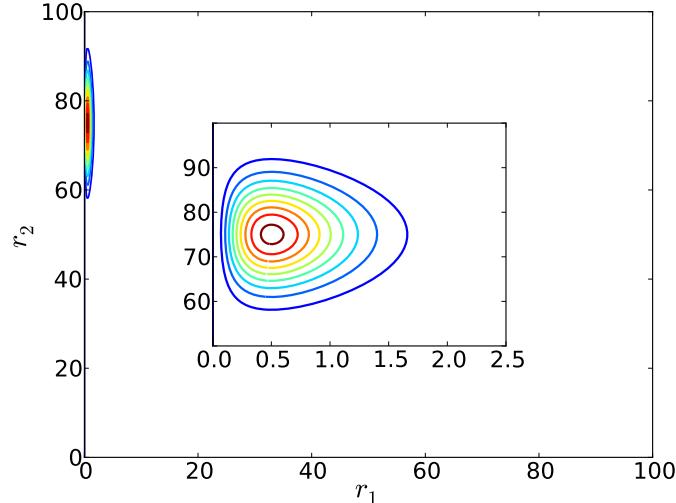
gegeben, wobei  $k$  den Impuls von  $\psi_k$  darstellt. Der Impuls  $k$  charakterisiert somit eindeutig die Eigenzustände des freien Hamiltonians (2.3.24). Das freie Elektron selber wird durch eine Linearkombination von Radialwellen beschrieben. In diesem Fall wird ein Gaußsches Wellenpaket mit dem Schwerpunkt  $s$ , der Varianz  $b$  und dem mittleren (radialem) Impuls  $k$  verwendet [30]:

$$\psi_2(r_2) = (2\pi b^2)^{-1/4} e^{-(r_2 - s)^2/4b^2} e^{ikr_2}. \quad (2.3.27)$$

Die normierte Gesamtwellenfunktion vor dem eigentlichen Streuprozess hat somit folgende Gestalt:

$$\psi_0(r_1, r_2, \theta) = \sqrt{2} Z^{3/2} (2\pi b^2)^{-1/4} r_1 e^{-Zr_1} e^{-(r_2 - s)^2/4b^2} e^{ikr_2}. \quad (2.3.28)$$

Diese Funktion ist in Abb. 2.3.2 für die Parameter  $s = 75$ ,  $b = 8.0$ ,  $k = -2.24$  gezeigt. Um der Ununterscheidbarkeit der beiden Elektronen Rechnung zu tragen, muss die Wel-



**Abbildung 2.3.2:** Darstellung von  $|\psi(r_1, r_2, \theta = \theta^*)|^2$  der unsymmetrisierten Anfangswellenfunktion aus (2.3.28) für die Parameter  $s = 75$ ,  $b = 8.0$ ,  $k = -2.24$  für einen beliebigen Winkel  $\theta^*$ . Da die Wellenfunktion für das gebundene Elektron sehr stark im Bereich kleiner  $r_1$  lokalisiert ist, wurde ein Teilbereich im Inset vergrößert dargestellt.

lenfunktion symmetriert werden:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(r_1, r_2, \theta) + \psi(r_2, r_1, \theta)), \quad (2.3.29a)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(r_1, r_2, \theta) - \psi(r_2, r_1, \theta)). \quad (2.3.29b)$$

Die Wellenfunktion  $\psi_s$  bezeichnet man als *Singlettzustand*,  $\psi_a$  als *Tripletzzustand*.

## Endzustand

Durch zeitliche Propagation der Gesamtwellenfunktion gemäß der ZASG (2.2.1) mit dem Hamiltonian (2.2.15), wird sich das Wellenpaket des freien Elektrons dem Kern nähern und dort in Wechselwirkung mit dem im Kern gebundenen Elektron treten. Die Aussagen, die über das asymptotische Verhalten eines Teilchens für  $t \rightarrow \infty$  gemacht werden können, unterscheiden sich grundlegend von denen der klassischen Formulierung der ESS.

Projeziert man die Gesamtwellenfunktion nach der Streuung ( $t \rightarrow \infty$ ) auf die Eigenzustände des freien Hamiltonians (2.3.24), kann man berechnen, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein nach dem Streuprozess freies Teilchen den Impuls  $k$  besitzt. Der Überlapp eines freien Teilchens in der Koordinate  $r_2$  mit der Radialwelle  $\psi_k(r_2)$  gemäß (2.3.25) ergibt sich zu:

$$f_k^{(2)}(r_1, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_2 > r_1} dr_2 \psi^*(r_1, r_2, \theta) e^{ikr_2}. \quad (2.3.30)$$

Dabei wird der Integrationsbereich auf  $r_2 > r_1$  beschränkt, um lediglich das asymptotisch freie Elektron in der Koordinate  $r_2$  zu untersuchen. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho^{(2)}(k)$  dafür, dass man ein freies Elektron in der Koordinate  $r_2$  mit dem Impuls  $k$  findet, ergibt sich durch Integrieren des Betragsquadrats der Wahrscheinlichkeitsamplitude  $f_k^{(2)}$  über alle verbleibenden Koordinaten:

$$\rho^{(2)}(k) = \int dr_1 \int d\theta \sin \theta \left| f_k^{(2)}(r_1, \theta) \right|^2. \quad (2.3.31)$$

Die Behandlung für ein freies Elektron in der Koordinate  $r_1$  ergibt sich analog zu den vorhergehenden Schritten einzig durch Vertauschung der Koordinaten  $r_1$  und  $r_2$ :

$$f_k^{(1)}(r_2, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1 > r_2} dr_1 \psi^*(r_1, r_2, \theta) e^{ikr_1}, \quad (2.3.32)$$

$$\rho^{(1)}(k) = \int dr_2 \int d\theta \sin \theta \left| f_k^{(1)}(r_2, \theta) \right|^2. \quad (2.3.33)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, dass ein freies Elektron den Impuls  $k$  besitzt ist somit

$$\rho(k) = \rho^{(1)}(k) + \rho^{(2)}(k). \quad (2.3.34)$$

Hat man die Wellenfunktion  $\psi(r_1, r_2, \theta)$  gemäß (2.3.29) symmetrisiert, sind die Teilchen ununterscheidbar, also  $f_k^{(1)} = f_k^{(2)}$ , und (2.3.34) vereinfacht sich zu

$$f_k(r_2, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{r_1 > r_2} dr_1 \psi_{a,s}^*(r_1, r_2, \theta) e^{ikr_1}, \quad (2.3.35a)$$

$$\rho(k) = 2 \int dr_2 \int d\theta \sin \theta |f_k(r_2, \theta)|^2. \quad (2.3.35b)$$

Auf analoge Weise kann die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines bestimmten Drehimpulses  $l$  für ein einzelnes Elektron berechnet werden. Dazu wird zunächst die Orthogonalität der Legendre-Polynome  $P_l$  [18]

$$\int d\theta \sin \theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \delta_{l,l'} \frac{2}{2l+1} \quad (2.3.36)$$

ausgenutzt, um die Komponente  $c_l$  der Wellenfunktion (2.3.19) zu ermitteln:

$$c_l(r_1, r_2) = \int d\theta \sin \theta \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \theta) \psi_{L=0}(r_1, r_2, \theta). \quad (2.3.37)$$

Der Ein-Teilchen-Drehimpulsoperator  $\hat{l}^2$  ist in der Ortsdarstellung durch

$$\hat{l}^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (2.3.38)$$

gegeben, womit für den Erwartungswert eines allgemeinen Zustands  $\psi_{L=0}$  gilt:

$$\langle \psi_{L=0} | \hat{l}^2 | \psi_{L=0} \rangle = \sum_l l(l+1) \int dr_1 \int dr_2 |c_l(r_1, r_2)|^2. \quad (2.3.39)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass die Legendre-Polynome Eigenfunktionen von  $\hat{l}^2$  sind [18]:

$$\hat{l}^2 P_l(\cos \theta) = l(l+1) P_l(\cos \theta). \quad (2.3.40)$$

Berücksichtigt man, dass die Eigenwerte von  $\hat{l}^2$  durch  $l(l+1)$  gegeben sind, lässt sich die Wahrscheinlichkeit  $p_l$  für das Auftreten des Drehimpulses  $l$  aus (2.3.39) ablesen:

$$\begin{aligned} p_l &= \int dr_1 \int dr_2 |c_l(r_1, r_2)|^2 \\ c_l &= \int d\theta \sin \theta \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l(\cos \theta) \psi_{L=0}(r_1, r_2, \theta). \end{aligned} \quad (2.3.41)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(l)$  ist durch die Beschränkung auf ganzzahlige Werte für den Drehimpuls durch

$$\rho(l) = p_l \delta(l - n), n \in \mathbb{N} \quad (2.3.42)$$

gegeben.

## Observablen

Die zugänglichen Observablen in der Quantenmechanik sind Wirkungsquerschnitte, also Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten bestimmter Endzustände. Aus (2.3.35b) und (2.3.42) kann man die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(k, l)$  berechnen:

$$\rho(k, l) = 2 \int dr_2 |f_{kl}(r_2)|^2 \delta(l - n), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.3.43)$$

wobei  $f_{kl}$  gegeben ist durch:

$$f_{kl}(r_2) = \int_{r_1 > r_2} dr_1 \int d\theta \sin \theta \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) e^{ikr_1} \psi_{s,a}(r_1, r_2, \theta). \quad (2.3.44)$$

Die Funktion  $\rho(k, l)$  gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein nach dem Streuprozess freies Elektron den Impuls  $k$  und den Drehimpuls  $l$  besitzt. Diese Observablen können mit den aus der klassischen Dynamik gewonnenen Streuquerschnitten aus (2.3.15) unmittelbar verglichen werden.

# 3 Dominante Wechselwirkung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem Konzept der Hamiltonians dominanter Wechselwirkung.

Zunächst wird in Abschn. 3.1 die grundlegende Idee vorgestellt, welche darauf beruht, die im Allgemeinen nicht-integrable Dynamik eines generischen Hamiltonians verschiedenen lokalen Näherungen zu unterwerfen. Die Näherungen ergeben sich durch Vergleich der unterschiedlichen Wechselwirkungen, von denen zu jedem Zeitpunkt lediglich der dominierende Anteil berücksichtigt werden soll. Dabei besteht das Ziel darin, durch die Vernachlässigung der nur marginal zur Dynamik beitragenden Wechselwirkungen ein tieferes Verständnis der elementaren Prozesse zu gewinnen.

Das Vorgehen wird in Abschn. 3.2 auf das System des Heliumatoms angewendet, für das ein solcher *Hamiltonian dominanter Wechselwirkung* gefunden werden soll. Dieser ermöglicht schließlich eine einfache Klassifizierung von Trajektorien nach ihrem typischen Verhalten für das genäherte als auch das ungenäherte System.

## 3.1 Motivation und Idee

Die Beschreibung eines physikalischen Systems erfolgt im Allgemeinen durch einen Hamiltonian  $H$ . Durch ihn wird die Dynamik des Systems in Form einer Bewegungsgleichung bestimmt. In der klassischen Mechanik sind dies die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für die Phasenraumkoordinaten  $\vec{q}$  und  $\vec{p}$ :

$$\frac{d}{dt}\vec{q} = \frac{\partial}{\partial \vec{p}}H(\vec{q}, \vec{p}), \quad (3.1.1a)$$

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = -\frac{\partial}{\partial \vec{q}}H(\vec{q}, \vec{p}). \quad (3.1.1b)$$

Allerdings existiert nur in wenigen Spezialfällen eine analytische Lösung der entsprechenden Differentialgleichungen.

Aus diesem Grund ist man auf die Verwendung von Näherungsmethoden angewiesen. Eine Möglichkeit besteht darin, die jeweilige Differentialgleichung numerisch zu lösen. Dieser

Ansatz ist jedoch insofern problematisch, dass er quantitative Ergebnisse liefert, aber ein qualitatives Verständnis der zu Grunde liegenden Dynamik unter Umständen nicht erreicht wird.

Daher wird häufig versucht, das Problem im Rahmen einer störungstheoretischen Betrachtung zu vereinfachen, siehe z.B. [31]. Bei dieser wird der Hamiltonian  $H$  in einen ungestörten Teil  $H_0$  und eine Störung  $\Delta H$  aufgeteilt:

$$H = H_0 + \Delta H. \quad (3.1.2)$$

Unter der Voraussetzung, dass  $\Delta H$  nur eine “kleine” Störung im Vergleich zu  $H_0$  darstellt, können die Lösungen des vollen Hamiltonians  $H$  aus den bekannten Lösungen für  $H_0$  konstruiert werden. Allerdings ist im Allgemeinen *eine eindeutige* Aufteilung eines generischen Hamiltonians  $H$  wie in (3.1.2) für den gesamten Definitionsbereich von  $H$  nicht möglich. Es bietet sich daher an, für einzelne Teilmengen des Definitionsbereichs *verschiedene* Aufteilungen des Hamiltonians wie in (3.1.2) vorzunehmen. Der daraus resultierende Hamiltonian wird als *Hamiltonian dominanter Wechselwirkung* (HDW) bezeichnet. Diese Methode ist auf die klassische Mechanik beschränkt, was in der folgenden schematischen Darstellung der grundlegenden Idee verdeutlicht werden soll.

Gegeben sei ein generischer Hamiltonian:

$$H(q, p, t) = T(q, p, t) + V_1(q, p, t) + V_2(q, p, t). \quad (3.1.3)$$

Hierbei sind  $T$  die kinetische Energie und  $V_1, V_2$  zwei beliebige Wechselwirkungspotentiale. Die Teil-Hamiltonians  $H_{1,2}$ , welche durch

$$H_1(q, p, t) = T(q, p) + V_1(q, p, t), \quad (3.1.4a)$$

$$H_2(q, p, t) = T(q, p) + V_2(q, p, t), \quad (3.1.4b)$$

definiert sind, sollen integrabel sein, wodurch das jeweilige Teilproblem prinzipiell analytisch lösbar ist. Nichtsdestotrotz wird der komplette Hamiltonian  $H$  im Allgemeinen nicht-integrabel sein. Um zu entscheiden, welcher Teil des Hamiltonians  $H$  die Störung darstellt, vergleicht man die Wechselwirkungspotentiale  $V_1$  und  $V_2$  als Funktion der Phasenraumkoordinaten, sowie der Zeit:

- Für  $V_1(q, p, t) < V_2(q, p, t)$  ist  $V_1$  die Störung,
- Für  $V_1(q, p, t) > V_2(q, p, t)$  ist  $V_2$  die Störung.

In der einfachsten Näherung wird jeweils der Term vernachlässigt, welcher die Störung darstellt:

$$V_1(q, p, t) > V_2(q, p, t) \Rightarrow H(q, p, t) \approx T + V_1 = H_1, \quad (3.1.5a)$$

$$V_1(q, p, t) < V_2(q, p, t) \Rightarrow H(q, p, t) \approx T + V_2 = H_2. \quad (3.1.5b)$$

Damit gelangt man zu einem Hamiltonian dominanter Wechselwirkung  $H_{DW}$ :

$$H_{DW} = \begin{cases} T + V_1, & V_1 > V_2 \\ T + V_2, & V_1 < V_2 \end{cases}. \quad (3.1.6)$$

Die Lösung dieses Hamiltonians setzt sich somit aus den bekannten Lösungen der Teil-Hamiltonians  $H_{1,2}$ , vgl. (3.1.4), zusammen. Diese werden an den Punkten  $(q(t^*), p(t^*))$ , für die

$$V_1(q(t^*), p(t^*), t^*) = V_2(q(t^*), p(t^*), t^*) \quad (3.1.7)$$

gilt, stetig miteinander verbunden. Der Zeitpunkt  $t^*$  definiert entlang einer Trajektorie  $(q(t), p(t))$  den Moment, an dem sich die dominante Wechselwirkung ändert. Dabei kommt es zu einem *Umschalten* des Hamiltonians  $H_{DW}$ :

$$H_{DW} = T + V_1 \xrightleftharpoons[V_1=V_2]{} H_{DW} = T + V_2. \quad (3.1.8)$$

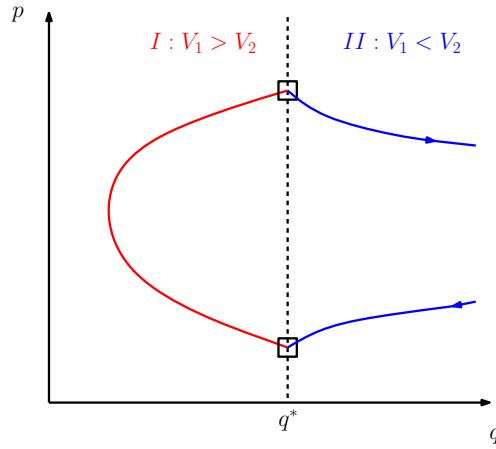
Dies ist in Abb. 3.1.1 schematisch dargestellt.

Eine erste systematische Anwendung dieses Konzepts findet sich in [3] bei der Beschreibung eines lasergetriebenen Atoms. Die Dynamik des Elektrons wird dabei durch die beiden Potentiale  $V_C(q)$ , dem Coulombfeld des Kerns und  $V_L(q, t)$ , dem zeitabhängigen äußeren Feld des Lasers, bestimmt. Das effektive Potential  $V_{HDW}$  im HDW dieses Systems ergibt sich, wie oben beschrieben, aus der Berücksichtigung der dominanten Wechselwirkung bezüglich des Phasenraumpunktes  $(q(t), p(t))$  zur Zeit  $t$ :

$$V_{HDW}(q, t) = \begin{cases} V_C(q), & V_C(q(t)) > V_L(q(t), t) \\ V_L(q, t), & V_C(q(t)) < V_L(q(t), t) \end{cases}. \quad (3.1.9)$$

Trotz der drastischen Vereinfachung lassen sich in diesem System fundamentale Prozesse des ungenäherten Problems beobachten, wie z.B. das Phänomen der Erzeugung hoher Harmonischer [32].

Dieses Beispiel zeigt, dass die Approximation eines nicht-integrablen Systems mit einem



**Abbildung 3.1.1:** Schematische Darstellung einer Trajektorie im Phasenraum  $(q, p)$  unter dem Einfluss eines HDW. Im Bereich I ( $q < q^*$ ) gilt  $V_1 > V_2$  und damit  $H_I \approx T + V_1$ . Die Trajektorie in diesem Bereich ist durch die rote Linie dargestellt. Im Bereich II ( $q > q^*$ ) gilt  $V_1 < V_2$  und damit  $H_{II} \approx T + V_2$  (blaue Linie). Erreicht die Trajektorie  $q(t) = q^*$ , gilt  $V_1(q) = V_2(q)$  (gestrichene Linie) und es kommt zu einem Umschalten des Hamiltonians ( $\square$ ).

HDW einen vielversprechenden Ansatz darstellt.

## 3.2 Anwendung auf das Heliumatom

Im Hamiltonian  $H$  des Heliumatoms für  $\vec{L} = 0$  gemäß (2.1.17)

$$H = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) p_\theta^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} \quad (3.2.1)$$

treten die Wechselwirkung zwischen dem Kern und dem jeweiligen Elektron

$$V_{eK} = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2}, \quad (3.2.2)$$

sowie die Wechselwirkung der Elektronen untereinander

$$V_{ee} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}, \quad (3.2.3)$$

auf. Dies stellt ein nicht-integrables System dar. Die separate Betrachtung der Potentiale  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  in den Hamiltonians

$$H_{eK} = T + V_{eK}, \quad (3.2.4a)$$

$$H_{ee} = T + V_{ee}, \quad (3.2.4b)$$

liefern integrable Teilprobleme, welche analytisch gelöst werden können. Eine störungstheoretische Behandlung der jeweils im Hamiltonian  $H_{eK}$  oder  $H_{ee}$  vernachlässigten Wechselwirkung ist nicht möglich. Dies ergibt sich aus dem Vergleich der beiden Wechselwirkungen  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  durch die Funktion

$$F(r_1, r_2, \theta) = \left| \frac{V_{ee}}{V_{eK}} \right|. \quad (3.2.5)$$

Mit Hilfe von  $F$  kann untersucht werden, in welchem Verhältnis die Wechselwirkungspotentiale  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  zueinander stehen. In Abb. 3.2.1 ist beispielhaft das Verhalten der Funktion  $F(r_1, r_2, \theta = \theta^*)$  für  $\theta^* = 0.1$  gezeigt. Man erkennt, dass in diesem Fall gilt:

$$F(r_1, r_2, \theta = 0.1) \in [0, 2.5]. \quad (3.2.6)$$

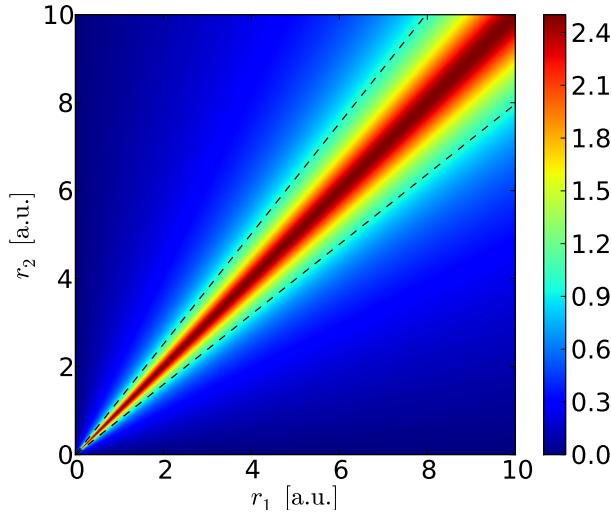
Das bedeutet, dass sich die beiden Wechselwirkungen  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  im Definitionsbereich  $(r_1, r_2, \theta)$  folgendermaßen verhalten:

$$\exists r_1, r_2, \theta : |V_{eK}| > V_{ee}, \quad (3.2.7a)$$

$$\exists r_1, r_2, \theta : |V_{eK}| < V_{ee}. \quad (3.2.7b)$$

Dadurch kann eine Einteilung der beiden Wechselwirkungen in dominante Wechselwirkung und Störung nicht für den gesamten Definitionsbereich vorgenommen werden. Aus diesem Grund erscheint es sinnvoll, die Dynamik des Heliumatoms mit einem HDW zu approximieren.

Eine “naive“ Anwendung der Idee des HDW, bei dem wie in Abschn. 3.1 zwischen den Hamiltonians  $H_{eK}$  und  $H_{ee}$  umgeschaltet wird, birgt jedoch Schwierigkeiten. Dies ist dadurch bedingt, dass die Wechselwirkungspotentiale  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  unterschiedliche Vorzeichen besitzen. Durch die Betrachtung der Absolutbeträge der Wechselwirkungen  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  kann



**Abbildung 3.2.1:** Darstellung der Funktion  $F(r_1, r_2, \theta = \theta^*)$  aus (3.2.5) für  $\theta^* = 0.1$ . Am Verhalten von  $F$  lässt sich die dominante Wechselwirkung erkennen: Für  $F > 1$  gilt  $|V_{eK}| < V_{ee}$ . Der Fall  $F < 1$  entspricht  $|V_{eK}| > V_{ee}$ . Die gestrichene Linie zeigt die Kontur  $F = 1$ .

zwar ein HDW gemäß (3.1.6) definiert werden

$$|V_{eK}| > V_{ee} \Rightarrow H \approx T + V_{eK}, \quad (3.2.8a)$$

$$|V_{eK}| < V_{ee} \Rightarrow H \approx T + V_{ee}, \quad (3.2.8b)$$

jedoch bleibt im Falle eines Umschaltens der dominanten Wechselwirkung

$$H = T + V_{eK} \xrightleftharpoons[V_{ee}=|V_{eK}|]{} H = T + V_{ee}, \quad (3.2.9)$$

auf Grund der unterschiedlichen Vorzeichen der Wechselwirkungen  $V_{eK}$  und  $V_{ee}$  die Gesamtenergie  $E = H$  nicht erhalten. Dies stellt im Vergleich mit dem ungenäherten Hamiltonian des Heliumatoms (2.1.17), bei dem die Energie  $E = H$  erhalten bleibt, eine nicht zu rechtfertigende Approximation dar.

Ein anderer Ansatz ergibt sich aus der Betrachtung der Funktion  $F$  aus (3.2.5), wobei in Abb. 3.2.1 zu erkennen ist, dass folgende Beziehungen gelten:

$$r_1 \ll r_2 : F(r_1, r_2, \theta = 0.1) \ll 1 \Leftrightarrow V_{ee} \ll |V_{eK}|, \quad (3.2.10a)$$

$$r_1 \gg r_2 : F(r_1, r_2, \theta = 0.1) \ll 1 \Leftrightarrow V_{ee} \ll |V_{eK}|, \quad (3.2.10b)$$

$$r_1 \approx r_2 : F(r_1, r_2, \theta = 0.1) \gg 1 \Leftrightarrow V_{ee} \gg |V_{eK}|. \quad (3.2.10c)$$

Dabei implizieren die Bereich  $r_1 \ll r_2$  bzw.  $r_1 \gg r_2$  einen großen räumlichen Abstand zwischen den Elektronen (*Fernfeld* der Elektron-Elektron-Wechselwirkung). Im Unterschied dazu stellt der Fall  $r_1 \approx r_2$  den Bereich dar, in dem sich die Elektronen sehr nah kommen können (*Nahfeld* der Elektron-Elektron-Wechselwirkung). Das bedeutet, dass sich der Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf die Dynamik im Fern- und im Nahfeld deutlich unterscheidet.

Das Finden einer Approximation für das charakteristische Verhalten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Fern-, sowie im Nahfeld stellt somit den Ausgangspunkt für eine Formulierung des HDW, welcher das Heliumatom näherungsweise beschreiben soll, dar. Dies soll in den beiden folgenden Unterabschnitten dargelegt werden.

### 3.2.1 Fernfeldnäherung (*s*-Wellenmodell)

Zunächst soll das Verhalten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung für den Fall des Fernfeldes, d.h. eines großen Abstandes zwischen den Elektronen, approximiert werden. Dabei wird die Idee des *s*-Wellenmodells aufgegriffen. Die ursprüngliche quantenmechanische [33, 34] sowie klassische Formulierung [2, 35] des *s*-Wellenmodells beschränkt die Dynamik der Elektronen auf Zustände mit dem Ein-Teilchen-Drehimpuls  $l = 0$ . Dadurch kann, so wie im Falle der kollinearen Konfiguration (vgl. Abschn. 2.2.1), die Dynamik des Heliumatoms auf zwei Freiheitsgrade  $r_1$  und  $r_2$  reduziert werden.

Für den HDW des Heliumatoms im Unterraum  $\vec{L} = 0$  mit den drei Freiheitsgraden  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $\theta$  (vgl. Abschn. 2.1.2) wird lediglich die Elektron-Elektron-Wechselwirkung  $V_{ee}$  in analoger Weise genähert. Dazu entwickelt man den Term  $V_{ee}$  für  $\epsilon = \frac{r_2}{r_1} \ll 1$  nach Potenzen von  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} V_{ee} &= \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} \\ &= \frac{1}{r_1} \frac{1}{\sqrt{1 + \epsilon^2 - 2\epsilon \cos \theta}} \\ &= \frac{1}{r_1} (1 + \mathcal{O}(\epsilon)) \\ &\approx \frac{1}{r_1}. \end{aligned} \tag{3.2.11}$$

Eine entsprechende Betrachtung für den Fall  $\epsilon = \frac{r_2}{r_1} \gg 1$  ergibt:

$$V_{ee} \approx \frac{1}{r_2}. \tag{3.2.12}$$

Kombiniert man beide Schritte und erweitert den Bereich der Näherung von  $r_1 \gg r_2$  (bzw.  $r_1 \ll r_2$ ) auf  $r_1 > r_2$  (bzw.  $r_1 < r_2$ ) erhält man die Näherung des  $s$ -Wellenmodells für  $V_{ee}$ :

$$V_{ee} \approx \begin{cases} \frac{1}{r_1}, & r_1 > r_2 \\ \frac{1}{r_2}, & r_1 < r_2 \end{cases} \quad (3.2.13)$$

Dadurch gelangt man zu einem Hamiltonian, welcher durch  $r_1 = r_2$  in die beiden Bereiche  $I : (r_1 > r_2)$  und  $II : (r_1 < r_2)$  unterteilt wird:

$$H_I = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) p_\theta^2 - \frac{Z-1}{r_1} - \frac{Z}{r_2}, \quad (3.2.14a)$$

$$H_{II} = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) p_\theta^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z-1}{r_2}. \quad (3.2.14b)$$

In den Bereichen  $I$  und  $II$  existieren jeweils drei Erhaltungsgrößen. Diese sind im Bereich  $I$  durch

$$l = p_\theta, \quad (3.2.15a)$$

$$E_1 = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{r_1^2} - \frac{Z-1}{r_1}, \quad (3.2.15b)$$

$$E_2 = \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{r_2^2} - \frac{Z}{r_2}, \quad (3.2.15c)$$

und im Bereich  $II$  durch

$$l = p_\theta, \quad (3.2.16a)$$

$$E_1 = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{r_1^2} - \frac{Z}{r_1}, \quad (3.2.16b)$$

$$E_2 = \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{r_2^2} - \frac{Z-1}{r_2}, \quad (3.2.16c)$$

gegeben. Hierbei bezeichnen  $l$  den Betrag des Drehimpulses eines Elektrons sowie  $E_1$  und  $E_2$  die Energien der beiden Elektronen. Daraus folgt, dass die beiden Hamiltonians  $H_I$  und  $H_{II}$  in ihrem jeweiligen Definitionsbereich die Dynamik der Elektronen separieren und somit integrable Teilsysteme darstellen. Diese Eigenschaft wird im Folgenden als *lokal integrabel* bezeichnet. Das Gesamtsystem besitzt lediglich zwei globale Erhaltungsgrößen

$$l = p_\theta, \quad (3.2.17a)$$

$$E = E_1 + E_2, \quad (3.2.17b)$$

wobei  $E$  die Gesamtenergie des Systems darstellt.

Die Mannigfaltigkeit  $r_1 = r_2$  nimmt dadurch eine besondere Stellung ein, denn durch sie wird die globale Dynamik nicht-integrabel. Gilt für eine Trajektorie  $r_1 = r_2 = r^*$ , wechselt man vom Bereich  $I$  in den Bereich  $II$  (oder umgekehrt), wodurch es zu einem Umschalten des Hamiltonians kommt:

$$r_1 > r_2 \xrightarrow{r_1=r_2} r_1 < r_2 \implies H_I \xrightarrow{r_1=r_2} H_{II} \quad (3.2.18a)$$

$$r_1 < r_2 \xrightarrow{r_1=r_2} r_1 > r_2 \implies H_{II} \xrightarrow{r_1=r_2} H_I. \quad (3.2.18b)$$

Dadurch ändert sich  $E_{1,2}$  um  $\Delta E$  und  $l$  um  $\Delta l$ :

$$E_1 \mapsto E_1 \mp \Delta E \quad (3.2.19a)$$

$$E_2 \mapsto E_2 \pm \Delta E \quad (3.2.19b)$$

$$l \mapsto l + \Delta l, \quad (3.2.19c)$$

mit den Werten

$$\Delta E = \frac{1}{r^*} \quad (3.2.20a)$$

$$\Delta l = 0. \quad (3.2.20b)$$

Durch eine Einteilung der Elektronen in inneres ( $\min\{r_1, r_2\}$ ), sowie äußeres ( $\max\{r_1, r_2\}$ ) Elektron lässt sich die Näherung des  $s$ -Wellenmodells veranschaulichen.

Der Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf das innere Elektron wird komplett vernachlässigt. Dadurch tritt das innere Elektron lediglich mit dem Coulombfeld des Kerns, welcher die Kernladungszahl  $Z$  trägt, in Wechselwirkung.

Der Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf das äußere Elektron wird auf die Abschirmung des Kerns durch das innere Elektron beschränkt. Das bedeutet, dass das äußere Elektron mit einem effektiven Coulombfeld des Kerns wechselwirkt, welcher eine um die Ladung des inneren Elektrons verminderte effektive Kernladungszahl  $Z_{\text{eff}} = Z - 1$  trägt.

Diese Näherung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigt daher insbesondere die Langreichweiteitigkeit der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen.

Andererseits wird durch diese Näherung eine Änderung des Drehimpulses  $p_\theta$  eines der Elektronen nicht berücksichtigt, vgl. (3.2.17a). Beachtet man, dass für dessen Dynamik im ungenäheren System gilt:

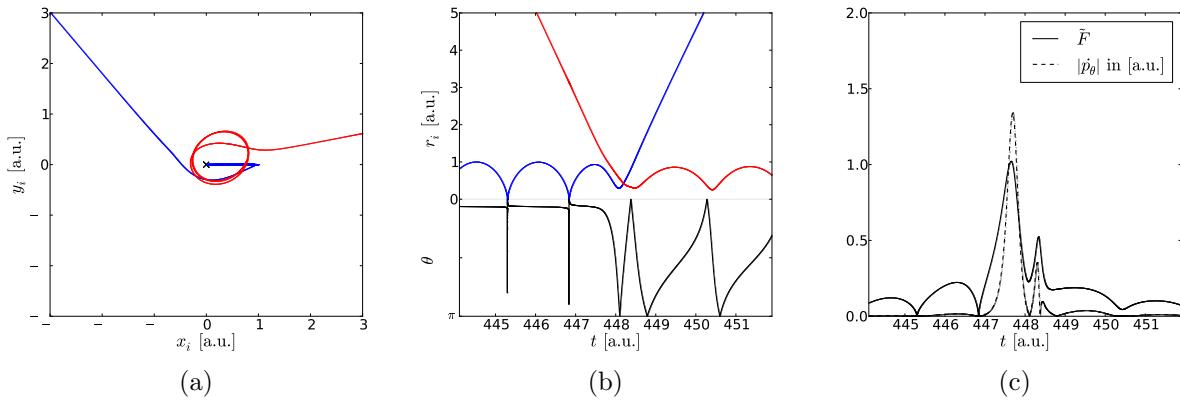
$$\frac{d}{dt} p_\theta = r_1 r_2 \frac{1}{d^3}, \quad (3.2.21)$$

wobei  $d$  den Abstand der Elektronen bezeichnet, zeigt sich, dass die Vernachlässigung des Drehimpulsaustausches zwischen den Elektronen lediglich für große Werte von  $d$  gerechtfertigt ist. Aus diesem Grund muss für kleine Abstände zwischen den Elektronen (Nahfeld) eine andere Näherung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung für die Formulierung des HDW gefunden werden.

### 3.2.2 Nahfeldnäherung (Kicks)

Während die Elektron-Elektron-Wechselwirkung für große Abstände zwischen den Elektronen in guter Näherung hauptsächlich eine Abschirmung des äußeren Elektrons bewirkt, führt sie für kleine Abstände zwischen den Elektronen zu einer merklichen Änderung des Drehimpulses  $p_\theta$ , vgl. (3.2.21).

In Abb. 3.2.2 ist dieser Zusammenhang beispielhaft für eine Trajektorie der ESS, welche zu einem kleinen Abstand  $d$  zwischen den Elektronen führt, dargestellt. Das entsprechende



**Abbildung 3.2.2:** Darstellung der Trajektorien zweier Elektronen des AWP (3.2.22) des Hamiltonians (3.2.1) im Ortsraum. Das Elektron 2 (rot) nähert sich dem gebundenen Elektron 1 (blau). Durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung kommt es zum Austausch der Elektronen: Elektron 2 bleibt gebunden und Elektron 1 verlässt den Kern. (a) Projektion der Teilchenbahnen  $(x_1(t), y_1(t))$  (blaue Linie) bzw.  $(x_2(t), y_2(t))$  (rote Linie) in eine gemeinsame Ebene. (b) Zeitliches Verhalten von  $r_1(t)$  (blaue Linie),  $r_2(t)$  (rote Linie),  $\theta(t)$  (schwarze Linie). (c) Vergleich des zeitlichen Verhaltens der dominanten Wechselwirkung  $\tilde{F}(t)$  (durchgezogene Linie) mit der Änderung des Drehimpulses  $p_\theta$  (gestrichelte Linie).

AWP für den ungenäherten Hamiltonian  $H$  aus (3.2.1) ist dabei zur Zeit  $t = 0$  gegeben durch:

$$\begin{aligned} r_1^0 &= 1.0 \text{ a.u.}, & p_{r_1}^0 &= 0.0 \text{ a.u.}, \\ r_2^0 &= 1003.16 \text{ a.u.}, & p_{r_2}^0 &= -2.24 \text{ a.u.}, \\ \theta^0 &= 0.2, & p_\theta^0 &= 0.0 \text{ a.u..} \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

Zusätzlich zum zeitlichen Verhalten der Ortskoordinaten  $(r_1, r_2, \theta)$  ist die Änderung des Drehimpulses  $\dot{p}_\theta(t)$  und die Funktion

$$\tilde{F} = \left| \frac{V_{ee}}{\frac{1}{2}V_{eK}} \right|, \quad (3.2.23)$$

welche die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und die gemittelte Elektron-Kern-Wechselwirkung ins Verhältnis setzt, abgebildet. Die Funktion  $\tilde{F}$  entspricht damit nahezu der Definition von  $F$  (3.2.5), jedoch wird durch die Mittelung von  $V_{eK}$  berücksichtigt, dass die Elektron-Kern-Wechselwirkung die Summe zweier Wechselwirkungen ist. Man erkennt in Abb. 3.2.2, dass einer Zunahme von  $\dot{p}_\theta$  stets ein Anstieg von  $\tilde{F}$  vorausgeht. Gleichzeitig ist zu beachten, dass aber eine Zunahme von  $\tilde{F}$  nicht automatisch bedeutet, dass eine merkliche Drehimpulsänderung stattfindet. Vielmehr führt erst das Überschreiten eines bestimmten Schwellenwertes der Funktion  $\tilde{F}$  zu einem sprunghaften Anstieg von  $\dot{p}_\theta$ . Das deutet darauf hin, dass das charakteristische Nahfeldverhalten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung (Änderung des Drehimpulses) dann eine wesentliche Rolle spielt, wenn die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vom Betrag her von der gleichen Größenordnung wie die gemittelte Elektron-Kern-Wechselwirkung ist.

Außerdem ist zu beobachten, dass die tatsächliche Änderung des Drehimpulses in einem sehr kurzen Zeitfenster  $\Delta t$  stattfindet, die Nahfeldwirkung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung also zeitlich sehr stark lokalisiert ist.

Der Ansatz für die Nahfeldnäherung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Rahmen eines HDW besteht somit darin, die Wechselwirkungsdauer auf  $\Delta t \rightarrow 0$  zu komprimieren. Dies kann durch eine instantane Änderung der Impulse der beiden Elektronen zu diskreten Zeiten  $t^*$  realisiert werden. Dieser Vorgang soll im Folgenden als *Kick* bezeichnet werden. Durch den oben beschriebenen Zusammenhang zwischen der Funktion  $\tilde{F}$  und dem Verhalten von  $\dot{p}_\theta$  werden diese Kicks durchgeführt, wenn für die Trajektorie die Bedingung

$$\tilde{F} \stackrel{!}{=} 1 \quad (3.2.24)$$

erfüllt ist. Dabei ist zu beachten, dass in diesem Zusammenhang  $\tilde{F}$  lediglich eine Funktion der Ortskoordinaten  $(r_1, r_2, \theta)$  darstellt, welche festlegt, wann in der genäherten Dynamik ein Kick durchgeführt wird. Die physikalische Interpretation von  $\tilde{F}$  als Indikator für die dominante Wechselwirkung kann nur im ungenäherten Modell erfolgen, in welchem die Größen Elektron-Elektron- und Elektron-Kern-Wechselwirkung, vgl. (3.2.2, 3.2.3), überhaupt definiert sind.

Das Transformationsverhalten der Impulse im Falle eines Kicks zur Zeit  $t^*$  lässt sich als

Abbildung:

$$\vec{p}_i(t^*) \mapsto \vec{p}'_i(t^*) \quad i = 1, 2, \quad (3.2.25)$$

betrachten. Dabei bezeichnen die ungestrichenen Größen die Impulse unmittelbar vor dem Kick und die gestrichenen Größen die Impulse unmittelbar nach dem Kick.

Die explizite Bestimmung der Transformationsgleichungen (3.2.25) erfolgt durch die Berücksichtigung der Erhaltungsgrößen der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Dazu betrachtet man einen Hamiltonian  $H_{ee}$  zweier Elektronen, welche lediglich durch  $V_{ee}$  miteinander wechselwirken:

$$H_{ee} = \frac{\vec{p}_2^2}{2} + \frac{\vec{p}_1^2}{2} + V_{ee}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (3.2.26)$$

Die Erhaltungsgrößen des Hamiltonians  $H_{ee}$  sind gegeben durch:

$$E = H_{ee}, \quad (3.2.27a)$$

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad (3.2.27b)$$

$$\vec{L} = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2. \quad (3.2.27c)$$

Dabei stellt  $E$  die Gesamtenergie,  $\vec{P}$  den Gesamtimpuls und  $\vec{L}$  den Gesamtdrehimpuls dar. Fordert man bei der Transformation der Impulse bei einem Kick gemäß (3.2.25) die Erhaltung dieser Größen, ergeben sich folgende Gleichungen:

$$\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2 = \vec{p}'_1^2 + \vec{p}'_2^2, \quad (3.2.28a)$$

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2, \quad (3.2.28b)$$

$$\vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 = \vec{r}_1 \times \vec{p}'_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}'_2. \quad (3.2.28c)$$

Für die planare Konfiguration ist (3.2.28c) im Sinne der Erhaltung der  $z$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses zu verstehen, wodurch sich insgesamt vier Gleichungen für die Bestimmung der  $\vec{p}'_i$  ergeben. Das Gleichungssystem besitzt eine eindeutige Lösung<sup>1</sup> für die

---

<sup>1</sup>neben der trivialen Lösung  $\vec{p}'_{1,2} = \vec{p}_{1,2}$

kartesischen Komponenten der neuen Impulse  $\vec{p}'_{1,2}$ :

$$p'_{1x} = \frac{p_{2x}(x_1 - x_2)^2 + p_{1x}(y_1 - y_2)^2 + (-p_{1y} + p_{2y})(x_1 - x_2)(y_1 - y_2)}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}, \quad (3.2.29a)$$

$$p'_{1y} = \frac{p_{1y}(x_1 - x_2)^2 + p_{2y}(y_1 - y_2)^2 + (-p_{1x} + p_{2x})(x_1 - x_2)(y_1 - y_2)}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}, \quad (3.2.29b)$$

$$p'_{2x} = \frac{p_{1x}(x_1 - x_2)^2 + p_{2x}(y_1 - y_2)^2 + (p_{1y} - p_{2y})(x_1 - x_2)(y_1 - y_2)}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}, \quad (3.2.29c)$$

$$p'_{2y} = \frac{p_{2y}(x_1 - x_2)^2 + p_{1y}(y_1 - y_2)^2 + (p_{1x} - p_{2x})(x_1 - x_2)(y_1 - y_2)}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}. \quad (3.2.29d)$$

Eine anschauliche Interpretation gelingt in Schwerpunktskoordinaten, in denen diese Transformation einer Inversion des relativen Impulses  $p_r$  der Elektronen zueinander entspricht:

$$p_r \mapsto -p_r. \quad (3.2.30)$$

Das bedeutet, dass durch den Kick der repulsive Charakter der Elektron-Elektron-Wechselwirkung richtig wiedergegeben wird.

Bei der Transformation (3.2.29) kommt es zu einem Austausch von Energie und Drehimpuls zwischen den Elektronen:

$$E_1 \mapsto E_1 + \Delta E, \quad (3.2.31a)$$

$$E_2 \mapsto E_2 - \Delta E, \quad (3.2.31b)$$

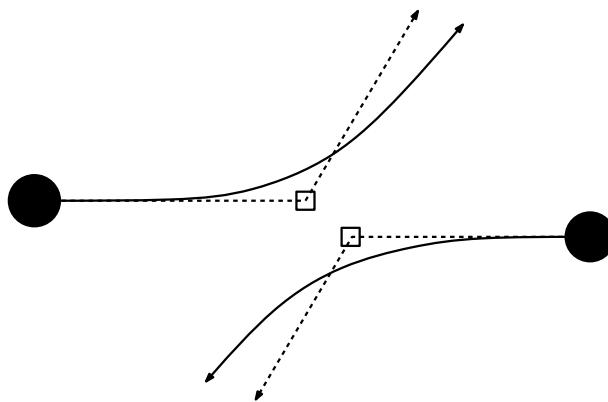
$$l \mapsto l + \Delta l, \quad (3.2.31c)$$

mit den Werten

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{1}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \left[ (x_1 - x_2)(y_1 - y_2)(p_{x_2}p_{y_2} - p_{x_1}p_{y_1}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(x_1 - x_2)^2(p_{x_2}^2 - p_{x_1}^2) + \frac{1}{2}(y_1 - y_2)^2(p_{y_2}^2 - p_{y_1}^2) \right], \end{aligned} \quad (3.2.32a)$$

$$\Delta l = \frac{x_1 y_2 - x_2 y_1}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \left[ (x_1 - x_2)(p_{x_1} - p_{x_2}) + (y_1 - y_2)(p_{y_1} - p_{y_2}) \right]. \quad (3.2.32b)$$

Das Nahfeldverhalten der Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird somit durch eine instante Änderung der Impulse (Kick) der Elektronen gemäß (3.2.29) approximiert. Dadurch kommt es bei geringen Abständen zwischen den Elektronen zu einer Änderung des Drehimpulses eines einzelnen Elektrons. Eine schematische Darstellung dieses Verhaltens ist in Abb. 3.2.3 wiedergegeben.



**Abbildung 3.2.3:** Schematische Darstellung der Approximation der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Nahfeld. Die abstoßende Wechselwirkung der Elektronen ( $\bullet$ ) unter dem vollen Potential  $V_{ee}$  ergibt eine kontinuierliche Ablenkung (durchgezogene Linie). In der Nahfeldnäherung wird das Potential  $V_{ee}$  zunächst vernachlässigt, wodurch sich die Elektronen wie freie Elektronen bewegen. Erreicht die Trajektorie den Punkt  $\tilde{F} = 1$  ( $\square$ ), welcher in der ungenäherten Dynamik den Bereich darstellt, in dem die Elektron-Elektron-Wechselwirkung dominant wird, erfahren die Elektronen einen Kick. Die dadurch entstehende Bahn ist als gestrichelte Linie wiedergegeben.

### 3.2.3 Eigenschaften des Hamiltonians dominanter Wechselwirkung

Für eine Beschreibung des Heliumatoms im Unterraum  $\vec{L} = 0$  mit Hilfe der dominanten Wechselwirkung wird die Näherung des Fernfeldes (vgl. Abschn. 3.2.1) mit der Näherung des Nahfeldes (vgl. Abschn. 3.2.2) kombiniert. Daraus ergibt sich folgender HDW:

$$H = \frac{p_{r_1}^2}{2} + \frac{p_{r_2}^2}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) p_\theta^2 - \frac{Z}{r_<} - \frac{Z-1}{r_>} \Big|_{\tilde{F}=1}^{\text{Kick}}, \quad (3.2.33)$$

wobei  $r_< = \min\{r_1, r_2\}$  und  $r_> = \max\{r_1, r_2\}$ . Die Notation " $|_{\tilde{F}=1}^{\text{Kick}}$ " soll verdeutlichen, dass die Impulse gemäß (3.2.29) transformiert werden, sobald für die Koordinaten der Trajektorie

$$\tilde{F}(r_1, r_2, \theta) = 1 \quad (3.2.34)$$

gilt, vgl. (3.2.23). Dies entspricht in der vollen Dynamik einer Situation, in der die Elektron-Elektron-Wechselwirkung die gleiche Stärke wie die gemittelte Elektron-Kern-Wechselwirkung erreicht:

$$V_{ee} = \frac{1}{2} |V_{eK}|. \quad (3.2.35)$$

Durch die eingeführten Näherungen erfolgt ein Umschalten des Hamiltonians in den Fällen:

1.  $\tilde{F} = 1$ : Austausch von kinetischer Energie und Drehimpuls durch einen Kick zwischen den Elektronen,

2.  $r_1 = r_2$ : Austausch von potentieller Energie durch Änderung des abgeschirmten Elektrons.

Diese beiden Bedingungen werden im Folgenden als *Ereignisse* bezeichnet. Sie entsprechen einer instantanen Änderung des Systems zu einem bestimmten Zeitpunkt.

Die Zeitentwicklung zwischen zwei Ereignissen erfolgt gemäß den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen. Dabei existieren jeweils drei (lokale) Erhaltungsgrößen

$$l = p_\theta, \quad (3.2.36a)$$

$$E_< = \frac{p_{r<}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{1}{r_{<}^2} p_\theta^2 - \frac{Z}{r_{<}}, \quad (3.2.36b)$$

$$E_> = \frac{p_{r>}^2}{2} + \frac{1}{2} \frac{1}{r_{>}^2} p_\theta^2 - \frac{Z-1}{r_{>}}, \quad (3.2.36c)$$

wobei  $l$  den Drehimpuls eines Elektrons,  $E_<$  die Energie des inneren Elektrons und  $E_>$  die Energie des äußeren Elektrons bezeichnen. Daraus folgt, dass die Dynamik zwischen zwei Ereignissen integabel ist.

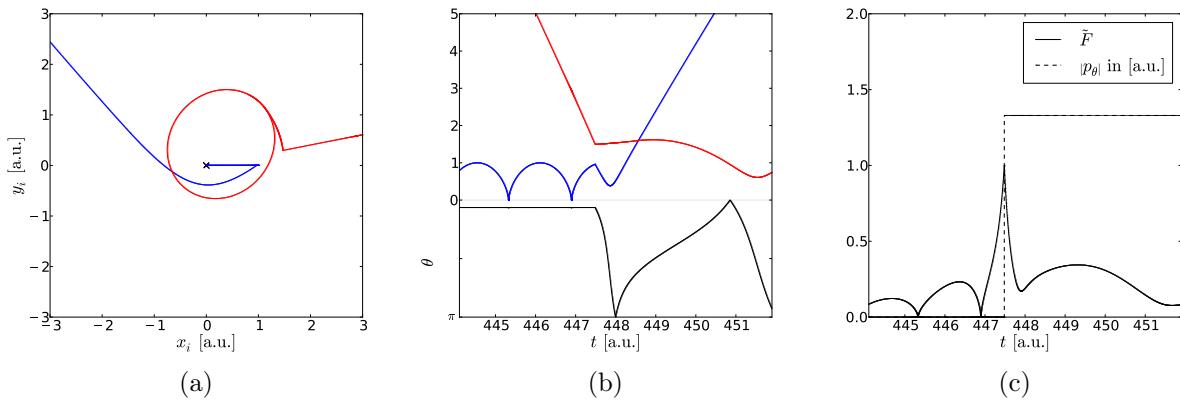
Durch die Trennung in ein inneres und ein äußeres Elektron ergibt sich zudem eine effektive Separation der Dynamik der beiden Elektronen zwischen zwei Ereignissen. Die Ereignisse  $\tilde{F} = 1$  und  $r_1 = r_2$  charakterisieren im HDW (3.2.33) somit vollständig die Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Dadurch ist eine binäre *Klassifizierung der Trajektorien* möglich. Im Verlauf der Zeitentwicklung wird das Eintreten des Ereignisses  $\tilde{F} = 1$  mit dem Zeichen '1' und das Eintreten des Ereignisses  $r_1 = r_2$  mit dem Zeichen '2' symbolisiert:

$$\tilde{F} = 1 \mapsto '1', \quad (3.2.37a)$$

$$r_1 = r_2 \mapsto '2'. \quad (3.2.37b)$$

Es ergibt sich eine Sequenz von Ereignissen, welche die Trajektorie nach ihrer Abfolge von Elektron-Elektron-Wechselwirkungen charakterisiert. Ein Beispiel für die Zeitentwicklung mit dem HDW (3.2.33) ist in Abb. 3.2.4 gezeigt, wobei die Anfangsbedingungen denen in (3.2.22) entsprechen. Die entsprechende Trajektorie wird durch die Sequenzfolge '12' charakterisiert. Das bedeutet, dass lediglich zwei Ereignisse zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung beitragen.

Dennoch zeigen sich im direkten Vergleich mit der Trajektorie des ungenäherten Problems für die gleichen Anfangsbedingungen qualitative Übereinstimmungen, vgl. Abb. 3.2.2. Der Grad dieser qualitativen Übereinstimmung kann durch die Übertragung des Konzepts der Klassifizierung der Trajektorien auf die ungenäherte Dynamik näher bestimmt werden. Dazu wird die Trajektorie der vollen Dynamik bezüglich der Ereignisse des HDW untersucht.



**Abbildung 3.2.4:** Darstellung der Trajektorien zweier Elektronen des AWP (3.2.22) unter der Zeitentwicklung des HDW (3.2.33) im Ortsraum. Das Elektron 2 (rot) nähert sich dem gebundenen Elektron 1 (blau). Durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung kommt es zum Austausch der Elektronen: Elektron 2 bleibt gebunden und Elektron 1 verlässt den Kern. (a) Projektion der Teilchenbahnen  $(x_1(t), y_1(t))$  (blaue Linie) bzw.  $(x_2(t), y_2(t))$  (rote Linie) in eine gemeinsame Ebene. (b) Zeitliches Verhalten von  $r_1(t)$  (blaue Linie),  $r_2(t)$  (rote Linie),  $\theta(t)$  (schwarze Linie). (c) Zeitliches Verhalten der dominanten Wechselwirkung  $\tilde{F}(t)$  (durchgezogene Linie). Durch das Ereignis  $\tilde{F} = 1$  kommt es zu einem Kick zwischen den Elektronen, wodurch sich der Drehimpuls  $p_\theta$  ändert (gestrichene Linie).

Die Definition der Ereignisse erfolgt dabei völlig analog zu denen im HDW, jedoch ohne Umschalten des Hamiltonians:

$$\tilde{F} = 1 \mapsto '1' \quad (3.2.38a)$$

$$r_1 = r_2 \mapsto '2'. \quad (3.2.38b)$$

Dabei entspricht Ereignis '1' in der vollen Dynamik, dass die Elektron-Elektron-Wechselwirkung gegenüber der Elektron-Kern-Wechselwirkung einen bestimmten Schwellenwert überschreitet. Wie in Abschn. 3.2.2 beschrieben wurde, findet in Folge dessen eine merkliche Änderung des Drehimpulses der Elektronen statt. Durch die starke zeitliche Lokalisierung dieses Effekts kann das Ereignis  $\tilde{F} = 1$  auch im Fall der vollen Dynamik näherungsweise als Kick angesehen werden.

Daraus ergibt sich für das ungenäherte System ebenso eine Klassifizierung der Trajektorien durch eine Sequenz diskreter Ereignisse. Diese soll näherungsweise das qualitative Verhalten der Trajektorie unter einer kontinuierlichen Elektron-Elektron-Wechselwirkung beschreiben. Für die in Abb. 3.2.2 gezeigte Trajektorie des ungenäherten Systems ergibt sich daraus die Sequenzfolge '12'. Dies entspricht der Sequenzfolge der Trajektorie des HDW, vgl. Abb. 3.2.4.

Die Übertragung der Klassifizierung der Trajektorien auf die volle Dynamik ermöglicht somit einen qualitativen Vergleich der einzelnen Trajektorien des ungenäherten Hamiltonians mit denen des Hamiltonians dominanter Wechselwirkung. Außerdem können dadurch bei der klassischen Untersuchung der ESS in Abschn. 4.1 Trajektorien, welche das gleiche charakteristische Verhalten aufweisen, identifiziert und durch Angabe der entsprechenden Sequenz zusammengefasst werden.



# 4 Bewertung der Näherung

In diesem Kapitel erfolgt eine systematische Untersuchung des Hamiltonians dominanter Wechselwirkung für das Heliumatom im Unterraum  $L = 0$  mit Hilfe der ESS (vgl. Abschn. 2.3).

Dabei wird in Abschn. 4.1 die klassische Dynamik des HDW dem des ungenähernten Systems direkt gegenübergestellt. Dies gibt Aufschluss darüber, welche Aspekte der vollen Dynamik durch den HDW Berücksichtigung finden und welche nicht. Außerdem erlaubt das durch den HDW motivierte Klassifizierungsschema eine symbolische Darstellung des charakteristischen Verhaltens einer Trajektorie.

In Abschn. 4.2 wird das entsprechende Streuexperiment im Rahmen der Quantenmechanik betrachtet.

Ein Vergleich der klassischen und der quantenmechanischen Ergebnisse wird in Abschn. 4.3 vorgenommen.

## 4.1 Klassische Untersuchung

Bei der Betrachtung der klassischen ESS werden zunächst die Ablenkfunktionen der Streuung analysiert (Abschn. 4.1.1). Dadurch können qualitative Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen voller, vgl. (3.2.33), und genäherter Dynamik, vgl. (2.1.17), des Heliumatoms identifiziert werden. Ein quantitativer Vergleich mit Hilfe von Streuquerschnitten (Abschn. 4.1.2) zeigt, dass der HDW eine brauchbare Näherung darstellt. Schließlich kann durch die Klassifizierung der Trajektorien eine natürlichen Partitionierung des Raums der Anfangsbedingungen vorgenommen werden (Abschn. 4.1.3), welche die den Ablenkfunktionen zu Grunde liegende Struktur vorgibt.

Die Untersuchung eines Streuexperiments erfolgt jeweils für feste Werte der Bindungsenergie  $E_1$  und des Anfangsdrehimpulses  $l$  des Zielelektrons sowie bei fester Gesamtenergie  $E$ . Für das Anfangswertproblem im 6-dimensionalen Phasenraum  $(r_1, r_2, \theta, p_{r_1}, p_{r_2}, p_\theta)$  ergibt

sich demnach:

$$\begin{aligned} r_1^0 &= \frac{1}{2E_1} \left( -Z + \sqrt{Z^2 + 2E_1 l^2} \right), & p_{r_1}^0 &= 0, \\ r_2^0 &\in [r_2^*, r_2^* + R], & p_{r_2}^0 &= -\sqrt{2(E - E_1)}, \\ \theta^0 &\in [0, \pi], & p_\theta^0 &= l, \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

wobei die Kernladungszahl für das Heliumatom  $Z = 2$  ist. Um zu gewährleisten, dass (4.1.1) einen Anfangszustand beschreibt, bei dem die Wechselwirkung zwischen den Elektronen untereinander sowie die Wechselwirkung zwischen Projektilelektron und Kern vernachlässigbar ist, wird  $r_2^* = 1000$  a.u. gewählt. Der Wert für  $R$  ergibt sich aus (2.3.8). Der Bereich  $(r_2^0, \theta^0)$  definiert damit die veränderlichen Anfangsbedingungen für ein Streuexperiment. Die entsprechende Trajektorie ergibt sich durch numerische Integration der regularisierten Bewegungsgleichungen, vgl. Abschn. 2.1.3. Dabei wird die Trajektorie so lange verfolgt, bis der Streuprozess beendet ist. Näherungsweise wird dies dadurch charakterisiert, dass für den Abstand der beiden Elektronen untereinander  $r_{12} > 1000$  a.u. sowie für den Abstand eines der beiden Elektronen vom Kern  $r_{1,2} > 1000$  a.u. gilt. Dadurch wird sichergestellt, dass die beiden Elektronen als unabhängig voneinander betrachtet werden können und die Wechselwirkung des asymptotisch freien Elektrons mit dem Kern vernachlässigbar ist. Im Folgenden soll die ESS an einem gebundenen Elektron, welches sich in einer zum quantenmechanischen Grundzustand analogen Konfiguration befindet, untersucht werden. Dadurch werden die Werte für  $E_1$  und  $l$  festgelegt zu

$$E_1 = -2 \text{ a.u.}, \quad (4.1.2a)$$

$$l = 0. \quad (4.1.2b)$$

Für die Gesamtenergie wird zunächst der Wert  $E = 0.5$  a.u. angenommen.

### 4.1.1 Ablenkfunktion

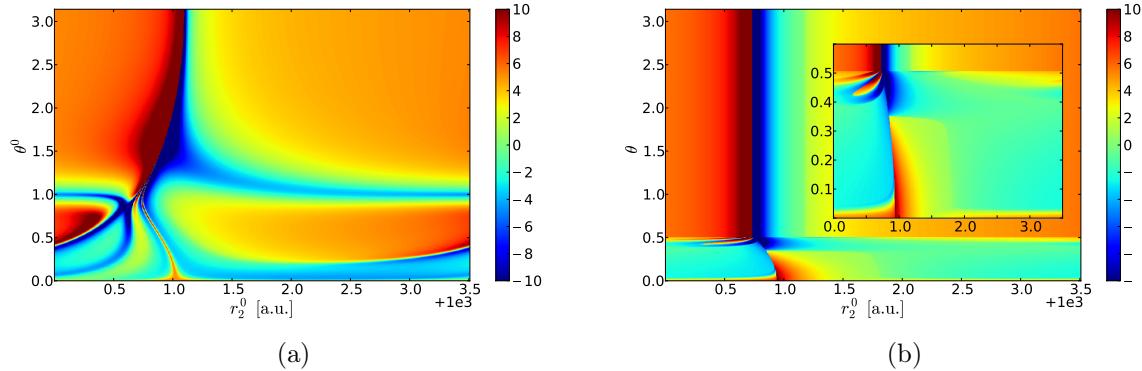
Die Ablenkfunktion stellt das zentrale Objekt eines Streuexperiments dar (vgl. Kap. 2.3.1). Sie bildet die veränderlichen Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$  auf die zu betrachtenden Observablen ab. Dies sind bei der ESS die skalierte asymptotische Energie des Projektilelektrons

$$\epsilon^* = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{E_2(t)}{E} \quad (4.1.3)$$

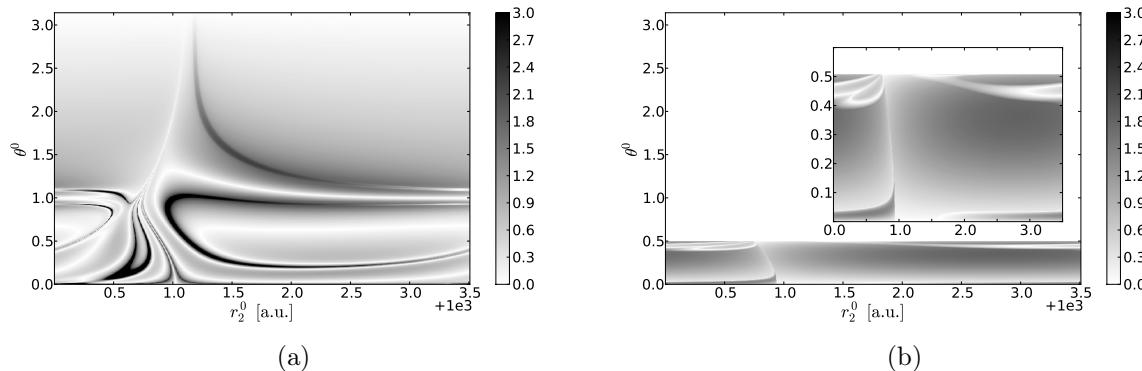
sowie der asymptotische Betrag des Drehimpulses eines Elektrons

$$l^* = \lim_{t \rightarrow \infty} |p_\theta(t)|. \quad (4.1.4)$$

Für die Berechnung der Ablenfunktionen wurden jeweils  $N = 10^6$  Trajektorien mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$  propagiert. In den Abb. 4.1.1, 4.1.2 sind die Ablenfunktionen  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  und  $l^*(r_2^0, \theta^0)$  für die ungenäherte Dynamik und die Dynamik mit dem HDW abgebildet. Anhand dieser beiden Größen können qualitative Aussagen über Unterschiede und Übereinstimmungen zwischen voller und genäherter Dynamik getroffen werden.



**Abbildung 4.1.1:** Ablenfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. für a) die ungenäherte Dynamik und b) die Dynamik mit dem HDW.



**Abbildung 4.1.2:** Ablenfunktion  $l^*(r_2^0, \theta^0)$  für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. für a) die ungenäherte Dynamik und b) die Dynamik mit dem HDW.

In der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  kann zunächst ein prinzipieller Unterschied im Verhalten für  $\theta^0 > \frac{\pi}{2}$  und  $\theta^0 < \frac{\pi}{2}$  festgestellt werden.

Im Bereich  $\theta^0 > \frac{\pi}{2}$  zeigen die volle, sowie die genäherte Dynamik in etwa die gleiche Struktur. Der einzige Unterschied besteht darin, dass sich in der vollen Dynamik der Bereich  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0) < 0$  (blau) beim Übergang  $\theta^0 = \pi \rightarrow \frac{\pi}{2}$  kontinuierlich verbreitert.

Im Bereich  $\theta^0 < \frac{\pi}{2}$  kommt es bei der vollen Dynamik dagegen zu einem völlig anderem Verhalten, welches eine wesentlich kompliziertere Struktur aufweist. Dieser Übergang ist charakterisiert durch den Winkel  $\tilde{\theta}^0 \approx 1.5$ , bei dem nahezu alle Anfangsbedingungen für  $r_2^0$  zum Endzustand  $\epsilon^*(r_2^0, \tilde{\theta}^0) < 0$  führen. Ein vergleichbarer Übergang ist in der Dynamik des HDW für den Winkel  $\tilde{\theta}^0 \approx 0.5$  zu beobachten.

Für die Ablenkfunktion  $l^*(r_2^0, \theta^0)$  dagegen ist der Grad der Übereinstimmung zwischen ungenäherter und genäherter Dynamik wesentlich geringer. Dies ist dadurch bedingt, dass für Anfangsbedingungen  $\theta^0 > 0.5$  in der Dynamik mit dem HDW  $l^* = 0$  gilt.

Der Vorteil in der Beschreibung des Heliumatoms mit dem HDW besteht darin, dass wesentliche Aspekte der Dynamik durch den diskreten Charakter der Elektron-Elektron-Wechselwirkung bestimmt werden. Dies ermöglicht im Gegensatz zur ungenäheren Dynamik eine unmittelbare Zuordnung zwischen Wechselwirkung (diskretes Ereignis) und Verhalten der Ablenkfunktion, was an zwei Beispielen demonstriert werden soll:

Einerseits kann in der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  des HDW im Bereich  $\theta^0 \in [0.5, \pi]$ ,  $r_2^0 \approx 1000.75$  a.u. ein abrupter Übergang von  $\epsilon^* > 10 \rightarrow \epsilon^* < 10$  ausgemacht werden. Dieser stellt eine Singularität dar, in der der Wert der Ablenkfunktion nicht definiert ist. Dies ergibt sich jeweils als Konsequenz daraus, dass diese Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$  zu einer Dreifachkollision führen, bei der das System eine beliebige kinetische Energie erhält [36]. Im ungenäheren System findet sich ein ähnlicher Übergang  $\epsilon^* > 10 \rightarrow \epsilon^* < 10$  für  $\theta^0 > \frac{\pi}{2}$ . Dort stellt dieser Übergang jedoch keine Singularität dar, sondern die Ablenkfunktion weist lediglich eine starke Oszillation in diesem Bereich auf. Die einzige Ausnahme bildet die Anfangsbedingung  $r_2^0 \approx 1001.1$  a.u.,  $\theta^0 = \pi$ , welche zu einer Dreifachkollision führt. Das lässt darauf schließen, dass die sich aus dieser Anfangsbedingung ergebende Trajektorie eine fundamentale Rolle für die Ablenkfunktion des ungenäheren Systems im Bereich  $\theta^0 > \frac{\pi}{2}$  spielt.

Andererseits kann durch den HDW der oben beschriebene Winkel  $\tilde{\theta}^0$ , welcher das charakteristische Verhalten der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  in einen Bereich mit regulärer ( $\theta^0 > \tilde{\theta}^0$ ) und komplizierter ( $\theta^0 < \tilde{\theta}^0$ ) Struktur gliedert, qualitativ verstanden werden. Betrachtet man im Modell des HDW die Bedingung für einen Kick gemäß (3.2.33):

$$\frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}} = \frac{1}{2} \left( \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \right), \quad (4.1.5)$$

und setzt  $r_1 = r_2$ , ergibt sich für  $\theta$  der maximale Winkel  $\theta_{\max}$ , bei dem ein Kick gerade noch möglich ist:

$$\theta_{\max} = \arccos \left( 1 - \frac{1}{2Z^2} \right) \stackrel{Z=2}{\approx} 0.505. \quad (4.1.6)$$

Das bedeutet, dass die Elektronen im Modell des HDW nur dann einen Kick ausführen können, wenn für den Relativwinkel während der Zeitentwicklung  $\theta(t) < \theta_{\max}$  gilt. Da die Elektronen im betrachteten Streuexperiment im Anfangszustand keinen Drehimpuls besitzen, vgl. (4.1.2b), führen im HDW nur Anfangsbedingungen mit  $\theta^0 \leq \theta_{\max}$  zu einem Kick entlang der Trajektorie. Die Berücksichtigung des Nahfeldes der Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Form von Kicks ist somit verantwortlich für den Wechsel des charakteristischen Verhaltens von  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  im HDW.

Zum einen führt dies zur schlechten Übereinstimmung der Ablenkfunktionen  $l^*(r_2^0, \theta^0)$ , da in der vollen Dynamik der Endzustand für Anfangsbedingungen  $\theta^0 > \frac{\pi}{2}$  meist durch einen moderaten Wert  $l^* \in [0, 1]$  für den Drehimpuls gegeben ist. Der HDW erzeugt für Anfangsbedingungen  $\theta^0 > \theta_{\max}$  jedoch jeweils Endzustände mit  $l^* = 0$ .

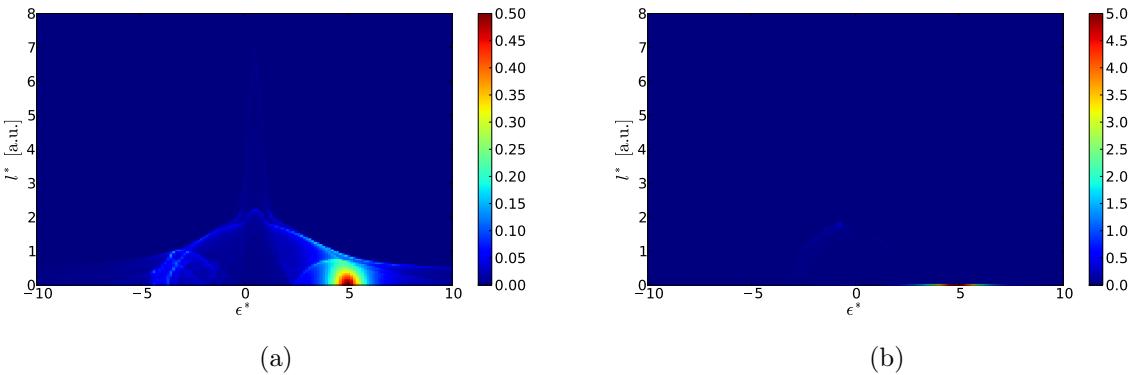
Zum anderen spielen Kicks für die Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  im Bereich  $\theta^0 > \frac{\pi}{2}$  keine Rolle, da dort das genäherte Modell mit der ungenäherten Dynamik ein qualitativ gleiches Verhalten aufweist. Da in der genäherten Dynamik die gleichmäßige Struktur von  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  für  $\theta^0 > \theta_{\max}$  durch das Auftreten der Kicks zerstört wird, liegt die Vermutung nahe, dass in der vollen Dynamik harte Stöße zwischen den Elektronen für die Änderung von  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  beim Übergang  $\theta^0 > \frac{\pi}{2} \rightarrow \theta^0 < \frac{\pi}{2}$  verantwortlich sind.

Die besprochenen Unterschiede und Gemeinsamkeiten zwischen den Ablenkfunktionen sind auch auf Streuexperimente mit anderen Werten für die Gesamtenergie  $E$  gültig. Bei einer Änderung der Gesamtenergie ergibt sich lediglich eine Umskalierung der charakteristischen Energieskala. Dies ist in Anhang A.2 für die Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  mit  $E = 0.5, 1.0, 2.0$  a.u. dargestellt. Aus diesem Grund wird im Folgenden lediglich der anfangs diskutierte Fall für die ESS an einem gebundenen Elektron im “Grundzustand” bei  $E = 0.5$  a.u. betrachtet.

### 4.1.2 Streuwahrscheinlichkeiten

Die Ablenkfunktionen  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  und  $l^*(r_2^0, \theta^0)$  enthalten die vollständige Information über das Streuexperiment, da sie die Anfangsbedingungen und die Observablen eindeutig miteinander verknüpfen. Wie in Abschn. 2.3.1 gezeigt wurde, können daraus mit (2.3.15) die Streuquerschnitte  $\rho(\epsilon^*, l^*)$  berechnet werden. Dabei wird lediglich die Häufigkeit des Auftretens eines gewissen Endzustandes  $(\epsilon^*, l^*)$  betrachtet. Dies stellt zwar eine Reduktion der

durch die Ablenkfunktion zur Verfügung stehenden Information über das Streuexperiment dar, jedoch kann dadurch eine quantitative Auswertung des Streuexperiments als Ganzem erfolgen. Die Streuquerschnitte  $\rho(\epsilon^*, l^*)$ , welche sich aus den in Abb. 4.1.1, 4.1.2 gezeigten Ablenkfunktionen ergeben, sind in Abb. 4.1.3 dargestellt. Man erkennt zunächst, dass für



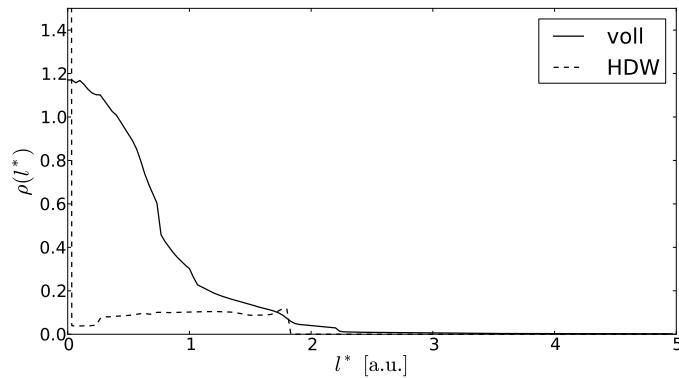
**Abbildung 4.1.3:** Häufigkeitsverteilung  $\rho(\epsilon^*, l^*)$  für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. für a) die ungenäherte Dynamik und b) die Dynamik mit dem HDW.

die volle Dynamik eine starke Korrelation zwischen den Werten für  $\epsilon^*$ ,  $l^*$  besteht. Zum Beispiel werden die größten Werte für  $l^*$  im Bereich  $\epsilon^* \in [0, 1]$  erreicht. Dies entspricht somit Fällen, in denen beide Elektronen den Kern verlassen.

Diese Korrelation geht bei der Zeitentwicklung mit dem HDW fast vollständig verloren. Nur wenige Anfangsbedingungen führen im Streuprozess zu einer Änderung des Drehimpulses. Dadurch kommt es zu einer starken Lokalisierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(\epsilon^*, l^*)$  entlang der Achse  $l^* = 0$ .

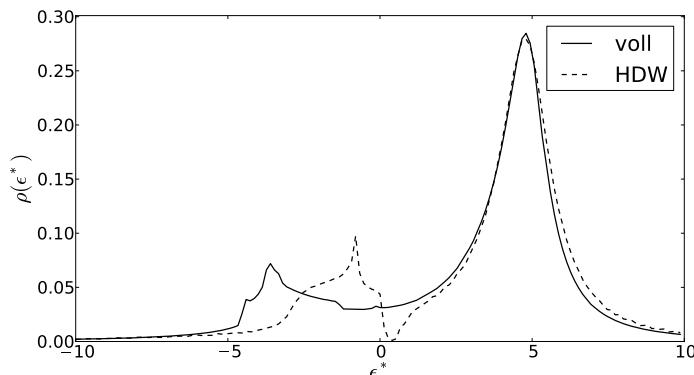
Aus dieser Beobachtung folgt sofort, dass die Beschreibung der Observablen  $l^*$  in der ESS durch den HDW nur sehr unzureichend berücksichtigt wird. Dies ist noch deutlicher an der einfach-differentiellen Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(l^*)$  zu erkennen, vgl. Abb. 4.1.4. Es zeigt sich, dass durch die im HDW stattfindenden Kicks, durch die es zu einer Drehimpulsänderung kommt, die Streuung in Zustände mit einem niedrigen Wert für  $l^*$  ( $l^* < 1$  a.u.) nicht gut reproduziert wird. Dies ist dadurch bedingt, dass es mit den gewählten Parametern im HDW nur für Anfangsbedingungen  $\theta^0 < 0.505$  zu einem Kick und damit zum Drehimpulsaustausch kommt. Erst für Endzustände  $l^* > 1$  a.u. befinden sich die Häufigkeitsverteilungen des HDW und des ungenäherten Hamiltonians in der gleichen Größenordnung.

Durch die schlechte Korrespondenz zwischen ungenäherter und genäherter Dynamik in der Verteilung der Endzustände für  $l^*$  erscheint es sinnvoll, anstatt  $\rho(\epsilon^*, l^*)$  lediglich die Vertei-



**Abbildung 4.1.4:** Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(l^*)$  zwischen der vollen Dynamik (durchgezogene Linie) und der Dynamik mit HDW (gestrichelte Linie) für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u..

lung  $\rho(\epsilon^*)$  zu betrachten. Sie offenbart ein weitgehend analoges Verhalten in der Verteilung der Endzustände  $\epsilon^*$  zwischen voller und genäherter Dynamik, vgl. Abb. 4.1.5.



**Abbildung 4.1.5:** Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(\epsilon^*)$  zwischen der vollen Dynamik (durchgezogene Linie) und der Dynamik mit HDW (gestrichelte Linie) für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u..

Im Bereich der Anregungs-Streuung ( $\epsilon^* > 1$ ), bei der das Projektilelektron den Kern wieder verlässt und das Zielelektron im Kern gebunden bleibt, ist die genäherte Dynamik von der ungenäherten Dynamik kaum zu unterscheiden.

Im Bereich der Austausch-Streuung ( $\epsilon^* < 0$ ), bei der das Zielelektron den Kern verlässt und das Projektilelektron im Kern gebunden bleibt, zeigen beide Kurven zumindest qualitativ das gleiche Verhalten. Für Werte  $\epsilon^* \in [-5, 0]$  ist jeweils ein deutliches Maximum in der Verteilung  $\rho(\epsilon^*)$  zu erkennen. Diese sind auf Sattelpunkte in der Ablenkfunktion

zurückzuführen. Durch den Wert der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  am Sattelpunkt ergibt sich die Position der Maxima in  $\rho(\epsilon^*)$ . In der ungenäherten Dynamik identifiziert man drei Sattelpunkte mit den Koordinaten  $(r_2^0, \theta^0)^S$  und den entsprechenden Werten für die Ablenkfunktion an dieser Stelle:

$$(r_2^0, \theta^0)_1^S \approx (1002.90, 0.15) \rightarrow \epsilon^* \approx -3.48, \quad (4.1.7a)$$

$$(r_2^0, \theta^0)_2^S \approx (1002.25, 1.03) \rightarrow \epsilon^* \approx -3.63, \quad (4.1.7b)$$

$$(r_2^0, \theta^0)_3^S \approx (1001.08, 0.22) \rightarrow \epsilon^* \approx -3.30. \quad (4.1.7c)$$

Diese drei Maxima überlagern sich in Abb. 4.1.5 zu einem breiten Maximum. Dies ist dadurch bedingt, dass bei der Berechnung von  $\rho(\epsilon^*)$  eine Aufteilung von  $\epsilon^*$  in Intervalle der Länge  $\Delta\epsilon^* = 0.133$  vorgenommen wurde. Die verschiedenen Maxima können somit nicht mehr einzeln aufgelöst werden. Das Maximum in der Dynamik des HDW kann dagegen auf einen einzigen Sattelpunkt zurückgeführt werden:

$$(r_2^0, \theta^0)_1^S \approx (1002.7, 0.36) \rightarrow \epsilon^* \approx -0.73. \quad (4.1.8)$$

Im Gegensatz zur vollen Dynamik ist dadurch in der Verteilung  $\rho(\epsilon^*)$  für die Dynamik des HDW der logarithmisch singuläre Charakter eines durch einen Sattelpunkt erzeugten Maximums ersichtlich [37].

Der größte Unterschied zwischen den Verteilungen findet sich im Bereich der Ionisation ( $0 < \epsilon^* < 1$ ), bei dem beide Elektronen den Kern verlassen. Dabei erfährt die Verteilung  $\rho(\epsilon^*)$  für den HDW einen starken Abfall, welcher im Verlauf für die volle Dynamik nicht beobachtet werden kann. Dieses Verhalten für die Dynamik des HDW ist durch die Verwendung der Näherung des *s*-Wellenmodells bedingt. Es zeigt sich, dass bei der ESS im klassischen *s*-Wellenmodell gewisse Endzustände für die skalierte Energie  $\epsilon^*$  im Bereich der Ionisation nicht erlaubt sind [35].

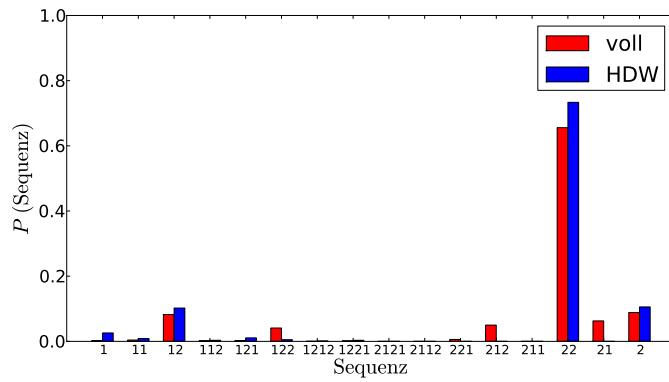
Die Analyse der Streuwahrscheinlichkeiten zeigt somit, dass der HDW die Streuung in Endzustände mit kleinen Werten für den Drehimpuls ( $l^* < 1$  a.u.) nur sehr unzureichend beschreibt. Dadurch wird dem stark korrelierten Verhalten zwischen den Größen  $\epsilon^*$  und  $l^*$  in der Verteilung  $\rho(\epsilon^*, l^*)$  im HDW kaum Rechnung getragen. Trotzdem erfolgt die Beschreibung der Energieendzustände in der Verteilung  $\rho(\epsilon^*)$  im Modell des HDW fast deckungsgleich mit der ungenäherten Dynamik.

### 4.1.3 Klassifizierung der Trajektorien

In den beiden vorherigen Unterkapiteln konnte sowohl bei der qualitativen als auch bei der quantitativen Gegenüberstellung der ungenähernten und der genäherten Dynamik gezeigt werden, dass der HDW zumindest für die Beschreibung der Energieendzustände  $\epsilon^*$  eine geeignete Approximation darstellt. In diesem Abschnitt soll daher versucht werden, mit Hilfe des HDW ein tieferes Verständnis für die volle Dynamik der Elektronen im Heliumatom zu gewinnen.

Dazu verwendet man die Klassifizierung der Trajektorien gemäß Abschn. 3.2.3, welche sich unmittelbar aus der Definition des HDW ergibt. Dabei wird die Trajektorie unter der Zeitentwicklung des HDW gemäß ihrer Abfolge von Ereignissen, welche die diskretisierte Elektron-Elektro-Wechselwirkung darstellen, charakterisiert. Dieses Schema kann auch auf die Trajektorien, welche sich aus der Zeitentwicklung mit dem vollen Hamiltonian ergeben, übertragen werden.

Im Folgenden soll daher untersucht werden, welche Sequenzfolgen in der ESS der vollen und der ungenähernten Dynamik vorkommen. Für das Streuexperiment mit  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. sind in Abb. 4.1.6 die auftretenden Sequenzfolgen und ihre relative Häufigkeit dargestellt. Man erkennt zunächst, dass eine endliche Anzahl von Sequenzen



**Abbildung 4.1.6:** Vergleich der Wahrscheinlichkeiten  $P$  des Auftretens einer bestimmten Sequenz für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. zwischen der vollen Dynamik (rot) und der Dynamik des HDW (blau).

mit einer maximalen Länge von vier Ereignissen für die Klassifikation der Trajektorien in der ESS ausreicht. Des Weiteren zeigt sich, dass die Sequenzen in der genäherten sowie in der ungenähernten Dynamik in etwa mit der gleichen Häufigkeit auftreten. Der größte Unterschied ergibt sich für die Sequenzfolgen '21' und '212', was dadurch begründet ist, dass diese für die gewählten Anfangsbedingungen unter der Zeitentwicklung des HDW nicht

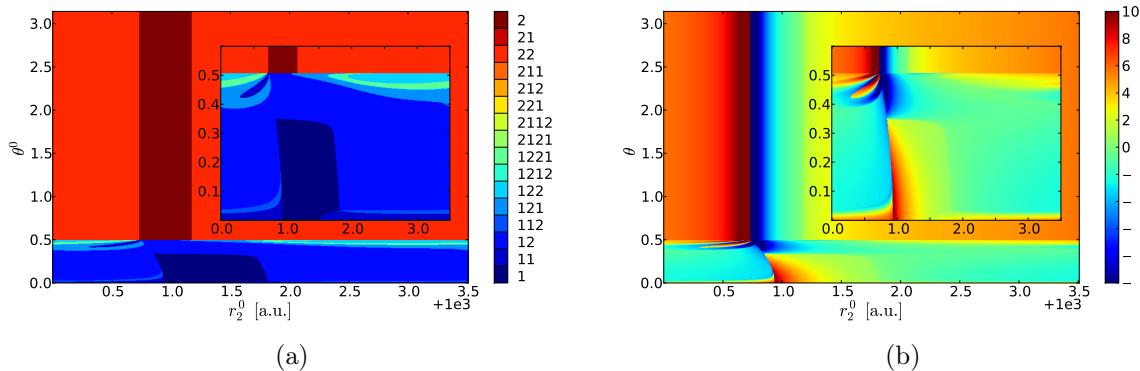
möglich sind

$$P_{HDW}('21') = P_{HDW}('212') = 0. \quad (4.1.9)$$

Dennoch wird durch diese Gegenüberstellung deutlich, dass die Klassifizierung der Trajektorien ein wichtiges Hilfsmittel darstellt, um durch die Betrachtung der Dynamik des HDW das Verhalten des ungenäherten Systems qualitativ zu verstehen.

### Klassifizierung im HDW

Im HDW ergibt sich die Klassifizierung des HDW direkt aus der diskretisierten Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Dies berechtigt zu der Annahme, dass Trajektorien mit der gleichen Sequenz von Ereignissen ein qualitativ ähnliches Verhalten aufweisen. Im Rahmen der ESS kann somit eine Quasi-Ablenkfunktion definiert werden, die bei einem Streuexperiment für jede Anfangsbedingung  $(r_2^0, \theta^0)$  untersucht, welche zeitliche Abfolge von Ereignissen auftritt. Für das bereits oben diskutierte Streuexperiment mit  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. ist die Quasi-Ablenkfunktion für den HDW in Abb. 4.1.7 gezeigt. Man er-

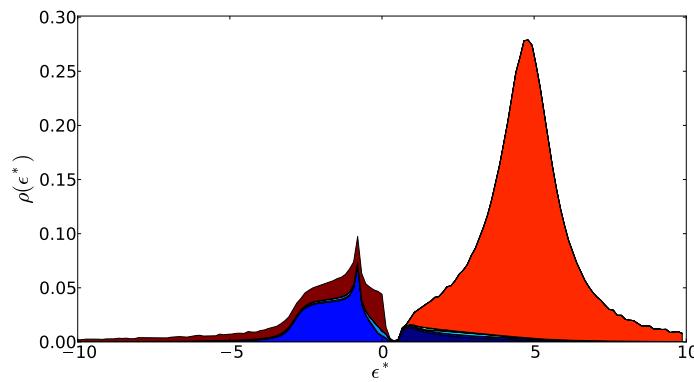


**Abbildung 4.1.7:** a) Quasi-Ablenkfunktion des HDW für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u.. Dargestellt ist die Sequenz der Abfolge von Ereignissen in Abhängigkeit von den veränderlichen Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$ . Dabei entspricht '1' einem Kick und '2' dem Ereignis  $r_1 = r_2$ . Zum Vergleich zeigt b) die entsprechende Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$ .

kennt, dass sich für  $\theta^0 > \theta_{\max} \approx 0.505$  gemäß (4.1.6) die Sequenzen '2' und '22' ergeben, da für diese Anfangsbedingungen keine Kicks ('1') auftreten. Im Bereich  $\theta^0 < \theta_{\max}$  tritt für jede Trajektorie mindestens ein Kick auf, sodass daraus die Sequenzen '1', '11', '12', '121', etc. hervorgehen. Dies stellt eine natürliche Partitionierung des Raums der Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$  dar, bei der Trajektorien mit dem gleichen charakteristischen Verhalten zusammengefasst werden. Diese Einteilung gibt die grundlegende Struktur für die Ablenk-

funktionen  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$ ,  $l^*(r_2^0, \theta^0)$  des HDW vor. Das bedeutet, dass deren Topologie durch die Einteilung in Bereiche mit gleicher Sequenz erzeugt wird. Diese Korrespondenz zwischen der Struktur der Ablenkfunktion und der Einteilung des Raums der Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$  ist jedoch keineswegs überraschend, da in der Dynamik des HDW die Wechselwirkung der Elektronen untereinander ausschließlich durch das Auftreten der diskreten Ereignisse '1' und '2' bestimmt ist.

Dies ermöglicht eine detaillierte Untersuchung des Streuquerschnitts  $\rho(\epsilon^*)$  (vgl. Abb. 4.1.5) bezüglich der einzelnen Sequenzen. In Abb. 4.1.8 ist der jeweilige Anteil einer einzelnen Sequenz für  $\rho(\epsilon^*)$  dargestellt. Daraus entnimmt man, dass die elastische Streuung ( $\epsilon^* = 5$ )

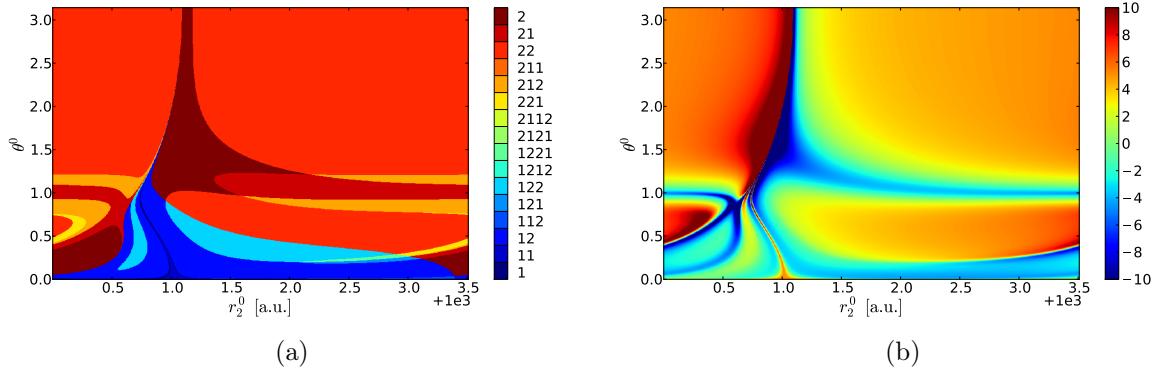


**Abbildung 4.1.8:** Darstellung der Wahrscheinlichkeitsfunktion  $\rho(\epsilon^*)$  des HDW für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u.. Die farbliche Unterscheidung der Sequenzen entspricht der von Abb. 4.1.7.

im Wesentlichen durch die Sequenz '22' bestimmt wird. Zur inelastischen Streuung tragen hauptsächlich die Sequenzen '1' (Anregung) sowie '2' und '12' (Austausch) bei. Hierbei kann das Maximum bei  $\epsilon^* \approx -0.73$  auf die Sequenzfolge '12' zurückgeführt werden. Das typische Verhalten der Trajektorien mit den Sequenzen '1', '12', '2' und '22' ist im Anhang A.3.1 dargestellt.

### Klassifizierung im ungenäherten System

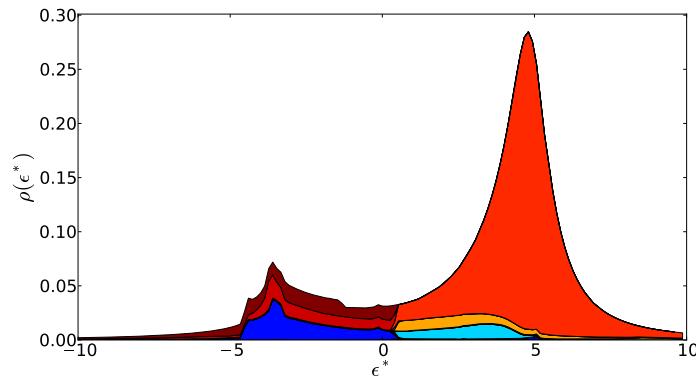
Klassifiziert man die Trajektorien des ungenäherten Systems bezüglich der Ereignisse des HDW, erhält man für jede Anfangsbedingung  $(r_2^0, \theta^0)$  eine Sequenzfolge, wodurch man eine Quasi-Ablenkfunktion für das volle System definieren kann. Diese ist in Abb. 4.1.9 zusammen mit der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  dargestellt. Dadurch ergibt sich aus der Quasi-Ablenkfunktion eine endliche Partitionierung des Raums der Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$ .



**Abbildung 4.1.9:** a) Quasi-Ablenkfunktion des ungenäherten Hamiltonians für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u.. Dargestellt ist die Sequenz der Abfolge von Ereignissen in Abhängigkeit von den veränderlichen Anfangsbedingungen  $(r_2^0, \theta^0)$ . Dabei entspricht '1' der Bedingung  $V_{ee} = \frac{1}{2} |V_{eK}|$  und '2' der Bedingung  $r_1 = r_2$ . Zum Vergleich zeigt b) die entsprechende Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$ .

Diese zeigt die gleichen charakteristischen Strukturen wie die Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$ . Daraus lässt sich schließen, dass deren Topologie ebenfalls durch die Quasi-Ablenkfunktion bestimmt ist und somit Trajektorien mit der gleichen Sequenz ein qualitativ ähnliches Verhalten zeigen.

Die aus dem HDW gewonnene Klassifizierung erlaubt somit ebenfalls eine Untersuchung der Streuquerschnitte bezüglich der einzelnen Sequenzen. In Abb. 4.1.10 ist der jeweilige Anteil einer einzelnen Sequenz für  $\rho(\epsilon^*)$  dargestellt. Man erkennt, dass die elastische



**Abbildung 4.1.10:** Darstellung der Wahrscheinlichkeitsfunktion  $\rho(\epsilon^*)$  des vollen Hamiltonians für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u.. Die farbliche Unterscheidung der Sequenzen entspricht der von Abb. 4.1.9.

Streuung ( $\epsilon^* = 5$ ) hauptsächlich durch Sequenzfolgen der Form '22' bestimmt ist. Die

Sequenzen '122' und '212' führen bei der Anregungsstreuung ( $\epsilon^* > 1$ ) zu einer Verminderung der Projektilenergie. Die Austauschstreuung ( $\epsilon^* < 1$ ) ist auf Trajektorien mit den Sequenzen '2', '12', '21' zurückzuführen. Das Maximum in diesem Bereich entsteht durch die Sequenzfolgen '12' und '21'. Typische Trajektorien dieser Sequenzfolgen sind in Anhang A.3.2 dargestellt.

## 4.2 Quantenmechanische Untersuchung

In diesem Kapitel erfolgt die Beschreibung der ESS durch den quantenmechanischen Hamiltonian (2.2.15) für das Heliumatom im Unterraum  $L = 0$  (vgl. Abschn. 2.3.2). Dies geschieht durch direkte numerische Integration des Anfangswertproblems der ZASG (2.2.1). Das Ziel besteht darin, einen qualitativen Vergleich zum klassischen Streuexperiment (vgl. Abschn. 4.1) zu ermöglichen. Es soll daher keineswegs eine systematische Betrachtung der ESS im Rahmen der Quantenmechanik, wie z.B. in [38, 39, 40, 41], durchgeführt werden. In Abschn. 4.2.1 wird zunächst erklärt, welcher Algorithmus dafür verwendet wird. Danach wird für den Konfigurationsbereich der ZASG ein diskretes Gitter definiert (Abschn. 4.2.2) und grundlegenden numerischen Tests unterzogen (Abschn. 4.2.1). In Abschn. 4.2.4 findet die eigentliche Simulation der ESS statt.

### 4.2.1 Algorithmus

Für die numerische Integration der ZASG wird die Skriptsprache *xmds* [42] verwendet, welche verschiedene Algorithmen für die Propagation der Wellenfunktion bereitstellt. Dazu wird diese im Ortsraum auf einem diskretisierten Gitter dargestellt. Dies ermöglicht eine einfache Berechnung der partiellen Ableitungen in den Ortskoordinaten mittels der Fast-Fourier-Transformation. Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion geschieht durch ein explizites Runge-Kutta-Verfahren 9. Ordnung mit adaptivem Zeitschritt. Dadurch kann der relative Fehler  $f_{\text{rel}}$  pro Zeitschritt nach oben durch  $f_{\text{rel}}^{\max}$  begrenzt werden. Im Folgenden wird für alle Berechnungen  $f_{\text{rel}}^{\max} = 10^{-8}$  gewählt. Eine detaillierte Beschreibung des Algorithmus findet sich in der Dokumentation zu *xmds* [43].

### 4.2.2 Definition des Gitters

Der Konfigurationsraum der ZASG für das Heliumatom im Unterraum  $L = 0$  in Ortsdarstellung wird durch die Radien  $r_1$  und  $r_2$  sowie den Relativwinkel  $\theta$  aufgespannt. Für die numerische Lösung der ZASG mit Hilfe des in Abschn. 4.2.1 vorgestellten Algorithmus

wird die Wellenfunktion  $\psi(r_1, r_2, \theta)$  auf einem diskreten Gitter dargestellt. Dabei werden für jede Koordinate eine bestimmte Anzahl von  $N$  Punkten in einem endlichen Intervall platziert.

### **Winkelgitter**

Die Winkelkoordinate  $\theta$  ist im Bereich  $[0, \pi]$  definiert. Jedoch ist zu beachten, dass bei der Verwendung des Algorithmus aus Abschn. 4.2.1 die Wellenfunktion periodischen Randbedingungen genügen muss. Um dies zu realisieren, wird der Definitionsbereich auf

$$\theta \in [-\pi, \pi] \quad (4.2.1)$$

erweitert. Definiert man die Wellenfunktion  $\psi$  im physikalisch nicht sinnvollen Bereich  $[-\pi, 0]$  zu

$$\psi(-\theta) = \psi(\theta), \quad \theta > 0, \quad (4.2.2)$$

folgt unmittelbar die geforderte Relation

$$\psi(-\pi) = \psi(\pi). \quad (4.2.3)$$

In allen folgenden Berechnungen wird die Anzahl der Gitterpunkte zu  $N_\theta = 16$  gewählt. Diese werden in einem Abstand  $\Delta\theta = 2\pi/N_\theta$  im Intervall  $[-\pi, \pi]$  so platziert, dass die Singularität im Hamiltonian des Heliumatoms bei  $\theta = 0$  gemäß Abschn. 2.2.2 genau zwischen zwei Gitterpunkten liegt.

### **Radialgitter**

Die Radialkoordinate  $r$  ist im Bereich  $[0, \infty)$  definiert. Die Erweiterung des Definitionsbereichs auf

$$r \in (-\infty, \infty) \quad (4.2.4)$$

erfolgt aus zwei Gründen. Zum einen muss die Wellenfunktion wegen (2.2.3) der Randbedingung

$$\psi(r = 0) = 0 \quad (4.2.5)$$

genügen. Dies kann realisiert werden, indem man für die Wellenfunktion im physikalisch nicht sinnvollen Bereich  $(-\infty, 0]$

$$\psi(-r) = -\psi(r), \quad r > 0 \quad (4.2.6)$$

fordert. Außerdem müssen für die Wellenfunktion auch in der Koordinate  $r$  periodische Randbedingungen erfüllt sein. Das impliziert die Bedingung:

$$\psi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0. \quad (4.2.7)$$

Bei der numerischen Behandlung muss die Beschreibung der Wellenfunktion in einem endlichen Intervall  $[-L_r, L_r]$  erfolgen. Somit muss man in Konsistenz mit (4.2.7) fordern:

$$\psi(r \rightarrow L_r) \rightarrow 0. \quad (4.2.8)$$

Das bedeutet, dass der Wert für  $L_r$ , insbesondere in einem Streuexperiment, groß genug gewählt werden muss.

Gleichzeitig muss für den Fall des Heliumatoms im Bereich des Ursprungs ein kleiner Abstand zwischen den Gitterpunkten gegeben sein. Damit dadurch die Gesamtanzahl der Gitterpunkte nicht zu groß wird, ist es zweckmäßig, ein Gitter mit einem variablen Abstand zwischen den Gitterpunkten zu definieren. Da für das numerische Lösungsverfahren entsprechend Abschn. 4.2.1 ein Gitter mit einem gleichbleibenden Abstand erforderlich ist, wird dazu die ZASG bezüglich der Koordinate  $q$ , gegeben durch die Transformation

$$r = q - c_0 \arctan(c_1 q) \quad (4.2.9)$$

entsprechend Abschn. 2.2.2, formuliert. Das Gitter im  $q$ -Raum ist durch  $N_q$  Punkte in einem Intervall  $[-L_q, L_q]$  gegeben. Die Punkte besitzen somit untereinander einen konstanten Abstand  $\Delta q = 2L_q/N_q$  und werden so verteilt, dass sich die Koordinate  $q = 0$  zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten befindet (vgl. Abschn. 2.2.2).

Die Parameter werden folgendermaßen gewählt:

$$N_q = 256, \quad (4.2.10a)$$

$$L_q = 125.0 \text{ a.u.}, \quad (4.2.10b)$$

$$c_0 = 18.0, \quad (4.2.10c)$$

$$c_1 = 0.05. \quad (4.2.10d)$$

Daraus ergibt sich im  $r$ -Raum gemäß Abb. 2.2.2 ein Gitter im Bereich  $[-L_r, L_r]$  mit:

$$L_r \approx 99.58 \text{ a.u.}, \quad (4.2.11a)$$

$$\Delta r(r \rightarrow 0) \approx 0.1, \text{ a.u.}, \quad (4.2.11b)$$

$$\Delta r(r \rightarrow L_r) \approx 0.95, \text{ a.u..} \quad (4.2.11c)$$

### 4.2.3 Numerische Tests

In diesem Abschnitt sollen grundlegende numerische Tests durchgeführt werden, um zu überprüfen, ob die Wahl des Gitters für die Winkel-, sowie Radialkoordinaten gerechtferigt ist.

Dabei wird für verschiedene Hamiltonians  $H(x)$ , wobei  $x$  für die jeweils betrachteten Koordinaten steht, das Spektrum  $\sigma(E)$  numerisch berechnet. Dieses erhält man durch Propagation eines Wellenpakets mit der entsprechenden ZASG:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(x) \psi(x, t). \quad (4.2.12)$$

Durch Fouriertransformation der Korrelationsfunktion

$$c(t) = \int dx \psi(x, 0)^* \psi(x, t) \quad (4.2.13)$$

erhält man bis auf Vorfaktoren das Spektrum des Hamiltonians [30]:

$$\sigma(E) \sim \int dt e^{iEt} c(t). \quad (4.2.14)$$

Dabei stellt  $\psi(x, 0)$  die Wellenfunktion zur Zeit  $t = 0$  dar.

#### Winkelgitter

Um das Gitter entlang der Koordinate  $\theta$  zu untersuchen, betrachtet man den Winkelanteil der kinetischen Energie im Hamiltonian (2.2.15) des Heliumatoms:

$$H_\theta = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right). \quad (4.2.15)$$

Dieser Operator entspricht einem Drehimpulsoperator  $\hat{l}^2$ , dessen Spektrum bekannt ist:

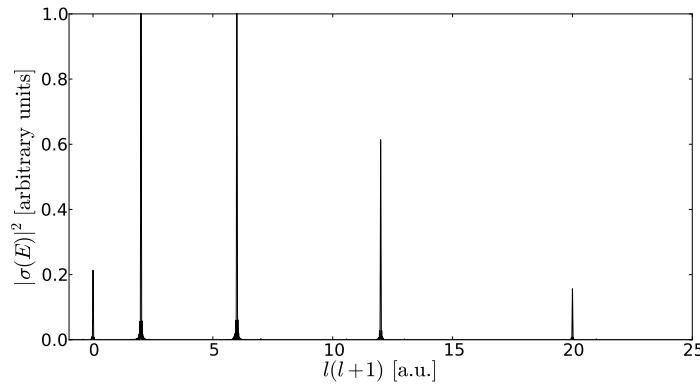
$$\hat{l}^2 \psi_l = l(l+1) \psi_l, \quad l \in \mathbb{N}, \quad (4.2.16)$$

wobei  $\psi_l$  die Eigenfunktionen von  $\hat{l}^2$  sind. Für ein Wellenpaket

$$\psi(\theta, 0) = e^{-4(\theta-\pi)^2} \quad (4.2.17)$$

ergibt sich nach einer Propagationsdauer von  $t = 200$  a.u. das in Abb. 4.2.1 gezeigte Spektrum  $\sigma(E)$ .

Es zeigt sich, dass durch  $N_\theta = 16$  die fünf niedrigsten Energien im Spektrum (4.2.16) von



**Abbildung 4.2.1:** Spektrum des Operators  $H_\theta$  durch numerische Integration des Wellenpakets aus (4.2.17) für eine Zeitdauer  $t = 200$  a.u. auf einem Gitter mit  $N_\theta = 16$  Punkten.

$H_\theta$  eindeutig reproduziert werden. Daher kann angenommen werden, dass das dynamische Verhalten der Wellenfunktion entlang der Koordinate  $\theta$  für Drehimpulse  $l \lesssim 5$  a.u. hinreichend gut beschrieben wird.

### Radialgitter

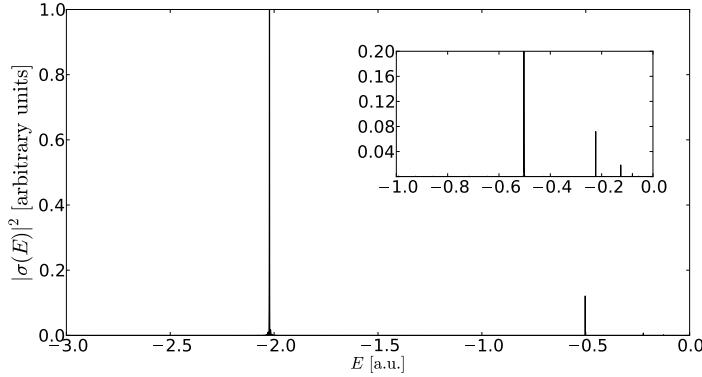
Bei der Betrachtung der ESS wird das im Kern gebundene Elektron im Grundzustand präpariert (vgl. Abschn. 2.3.2). Daher soll untersucht werden, ob durch das in Abschn. 4.2.2 gewählte Gitter für die Radialkoordinate  $r$  das Spektrums des Hamiltonoperators des Wasserstoffproblems

$$H_r = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{Z}{r} \quad (4.2.18)$$

reproduziert wird. Dazu wird für  $Z = 2$  der Anfangszustand

$$\psi(r, 0) = r e^{-r^2} \quad (4.2.19)$$

für eine Zeitdauer von  $t = 10000$  a.u. propagiert. Das daraus bestimmte Spektrum ist in Abb. 4.2.2 zu dargestellt. Dort identifiziert man Maxima für die Werte  $E = -2.02, -0.502,$



**Abbildung 4.2.2:** Spektrum des Operators  $H_r$  durch numerische Integration des Wellenpakets aus (4.2.19) für eine Zeitdauer  $t = 10000$  a.u. auf einem Gitter mit  $N_r = 256$  Punkten im Bereich  $[-L_r, L_r]$  mit  $L_r = 100$  a.u.. Das Gitter wurde dabei gemäß (4.2.9) mit den Parametern  $c_0 = 18.0, c_1 = 0.05$  transformiert.

$-0.125, -0.080$  a.u.. Diese können eindeutig mit den Eigenwerten des Hamiltonians  $H_r$

$$E_n = E_0 \frac{1}{(n+1)^2}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.2.20)$$

identifiziert werden, wobei im Fall  $Z = 2$  für die Grundzustandsenergie  $E_0$  gilt:

$$E_0 = -2 \text{ a.u..} \quad (4.2.21)$$

Der Unterschied in den Amplituden der Maxima ist dadurch begründet, dass der Anfangszustand (4.2.19) nur einen sehr geringen Überlapp mit den angeregten Eigenzuständen ( $n \geq 1$ ) von  $H_r$  besitzt.

Trotzdem zeigt dies, dass die Dynamik des gebundenen Elektrons in der Radialkoordinate durch das gewählte Gitter ausreichend beschrieben wird.

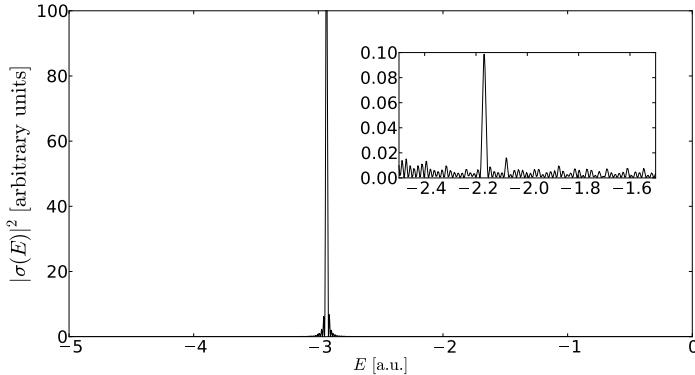
### Winkel- und Radialgitter

Für die Beschreibung des Heliumatoms wird die Koordinate  $\theta$  als Winkelgitter und die Koordinaten  $r_1$  und  $r_2$  als Radialgitter diskretisiert. Zur Evaluierung wird das Spektrum des Hamiltonians des Heliumatoms im Unterraum  $L = 0$  (2.2.15) betrachtet. Für den

Anfangszustand zur Zeit  $t = 0$

$$\psi(r_1, r_2, \theta, 0) = r_1 r_2 e^{-r_1^2 - r_2^2 - (\theta - \pi)^2}, \quad (4.2.22)$$

ergibt sich nach einer Propagationszeit von  $t = 200$  a.u. das in Abb. 4.2.3 gezeigte Spektrum. In diesem ist ein eindeutiges Maximum bei  $E = -2.935$  a.u. zu erkennen. Dies



**Abbildung 4.2.3:** Spektrum des Hamiltonians (2.2.15) durch numerische Integration des Wellenpakets aus (4.2.22) für eine Zeitdauer  $t = 200$  a.u.. Das Gitter besteht aus  $N_\theta = 16$  Punkten im Intervall  $[-\pi, \pi]$  für die Koordinate  $\theta$  und jeweils  $N_r = 256$  Punkten im Intervall  $[-L_r, L_r]$  mit  $L_r = 100$  a.u. für die Radialkoordinaten  $r_1$  und  $r_2$ , welche gemäß (4.2.9) mit den Parametern  $c_0 = 18.0$ ,  $c_1 = 0.05$  transformiert wurden.

entspricht mit einem relativen Fehler von  $10^{-2}$  dem akzeptierten Wert für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms, welcher bei  $E_0 = -2.90372$  a.u. liegt [44]. Des Weiteren zeichnet sich im Bereich  $E = -2.17$  a.u. ein weiteres Maximum ab, welches mit dem ersten angeregten Zustand  $2^3S$ , dessen Energie  $E_{2^3S} = -2.17523$  a.u. beträgt [44], identifiziert werden kann. Die kleine Amplitude dieses Maximums ergibt sich aus dem geringen Überlapp des Anfangszustandes (4.2.22) mit dem Zustand  $2^3S$  sowie der vergleichsweise kurzen Propagationsdauer. Dennoch kann das Ergebnis als befriedigend angesehen werden, da mit dem gewählten Gitter und dem verwendeten Algorithmus die Grundzustandsenergie und der Abstand zum ersten angeregten Zustand reproduziert werden.

#### 4.2.4 Streuprozess

Für die Betrachtung der quantenmechanischen ESS wird die ZASG mit dem Hamiltonian (2.2.15) des Heliumatoms im Unterraum  $L = 0$  numerisch mit Hilfe des in Abschn. 4.2.1 vorgestellten Algorithmus gelöst. Die Definition des diskreten Gitters erfolgt nach dem in Abschn. 4.2.2 dargelegten Schema. Die Koordinate  $\theta$  wird als Winkelgitter durch  $N_\theta = 16$

Punkte und die Koordinaten  $r_1$  und  $r_2$  jeweils als Radialgitter durch  $N_r = 256$  Punkte dargestellt.

Das Streuexperiment soll das quantenmechanische Analogon zur klassisch betrachteten ESS (vgl. Abschn. 4.1) beschreiben. Daher wird das im Kern gebundene Elektron im Grundzustand mit der Energie  $E_1$  und dem Drehimpuls  $l$ , gegeben durch

$$E_1 = -2 \text{ a.u.}, \quad (4.2.23a)$$

$$l = 0, \quad (4.2.23b)$$

präpariert. Das freie Elektron wird als Gaußsches Wellenpaket mit dem mittleren (radialen) Impuls  $k$  dargestellt. Mit (2.3.28) lautet die Gesamtwellenfunktion zur Zeit  $t = 0$

$$\psi(r_1, r_2, \theta, t = 0) = \sqrt{2}Z^{3/2} (2\pi b^2)^{-1/4} r_1 e^{-Zr_1} e^{-(r_2 - s)^2/4b^2} e^{ikr_2}. \quad (4.2.24)$$

Der Wert für  $k$  ergibt sich durch Festsetzen des Erwartungswertes der Gesamtenergie  $E = 0.5 \text{ a.u.}$  zu

$$k = -\sqrt{2(E - E_1)} = -2.236 \text{ a.u.} \quad (4.2.25)$$

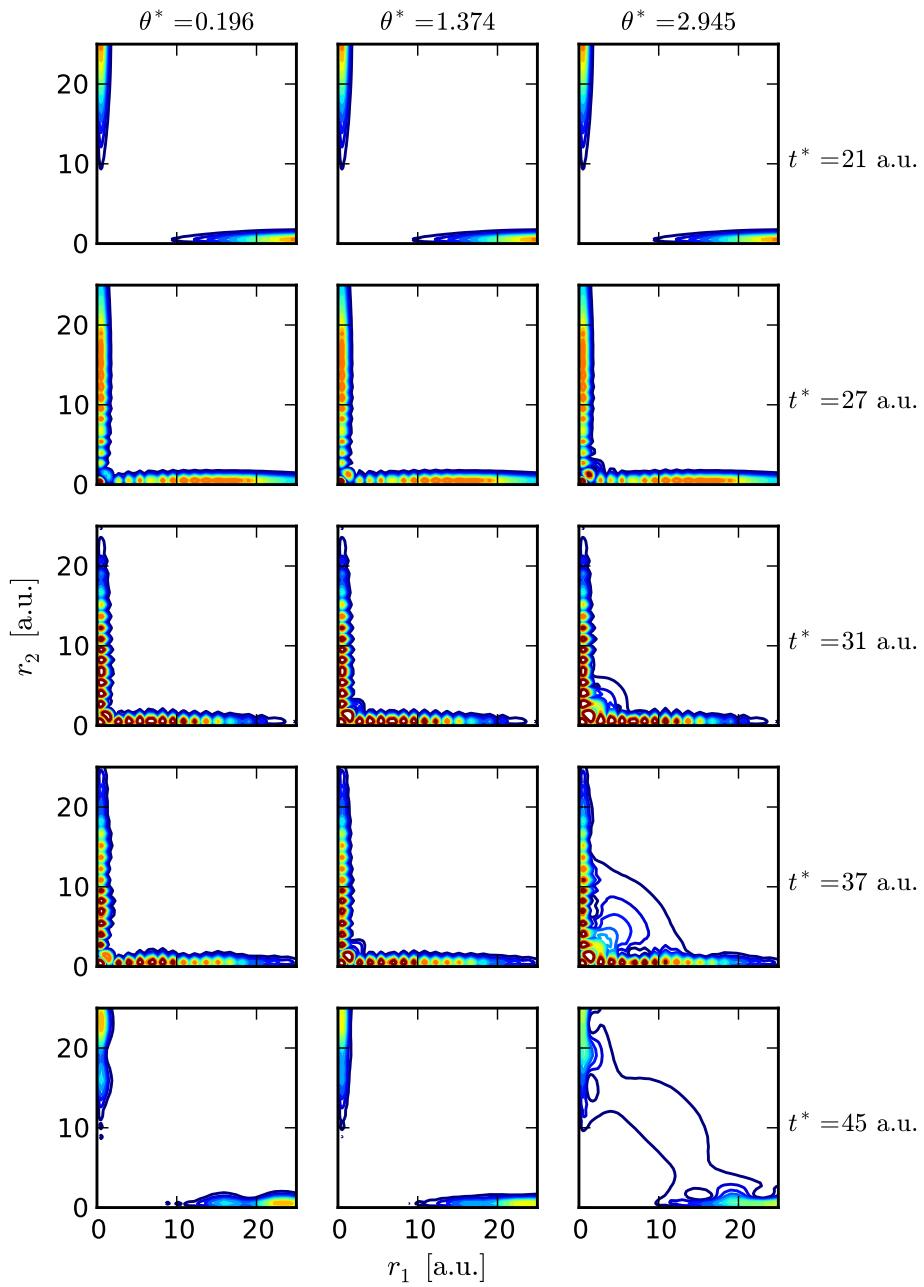
Die Parameter  $s$  und  $b$  des Wellenpakets werden folgendermaßen gewählt:

$$s = 75 \text{ a.u.}, \quad (4.2.26a)$$

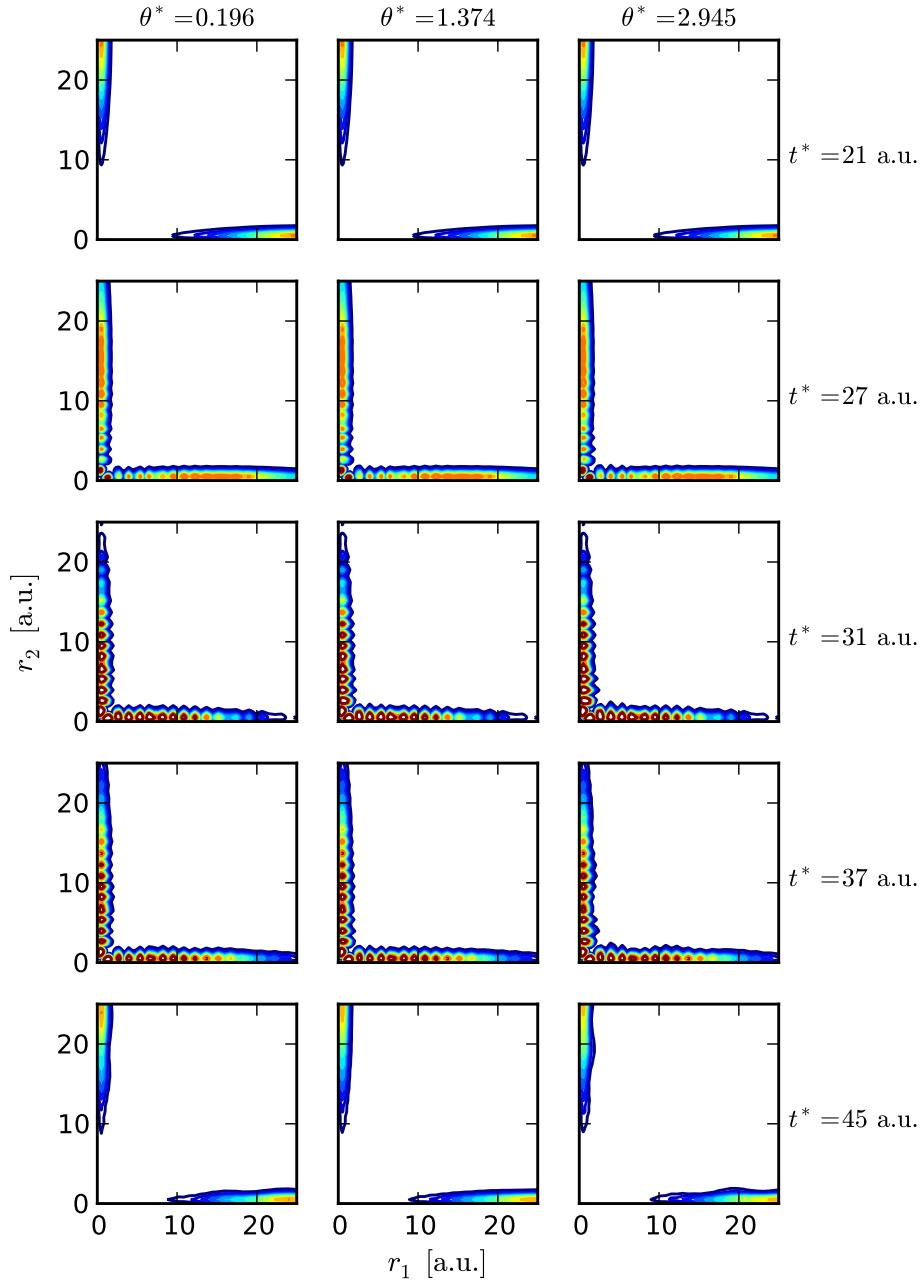
$$b = 8.0 \text{ a.u..} \quad (4.2.26b)$$

Dadurch können die Elektronen im Anfangszustand als annähernd unabhängig voneinander betrachtet werden. Außerdem ist die Impulsverteilung des freien Elektrons stark um den Wert  $k = -2.236 \text{ a.u.}$  lokalisiert [45]. Eine Darstellung des Anfangszustandes (4.2.24) mit den gewählten Parametern findet sich in Abb. 2.3.2.

Um der Ununterscheidbarkeit der beiden Elektronen Rechnung zu tragen, wird der Zustand (4.2.24) gemäß (2.3.29) symmetrisiert, wodurch eine gesonderte Betrachtung des Singlett- und des Triplettzustandes erforderlich wird. Das zeitliche Verhalten der Wellenfunktion während des Streuprozesses ist für diese beiden Fälle in den Abb. 4.2.4, 4.2.5 dargestellt.



**Abbildung 4.2.4:** Darstellung von  $|\psi(r_1, r_2, \theta = \theta^*, t = t^*)|^2$  des Singlettzustandes im Bereich des Kerns für verschiedene Werte  $\theta^*$  und zu unterschiedlichen Zeiten  $t^*$  während der ESS.



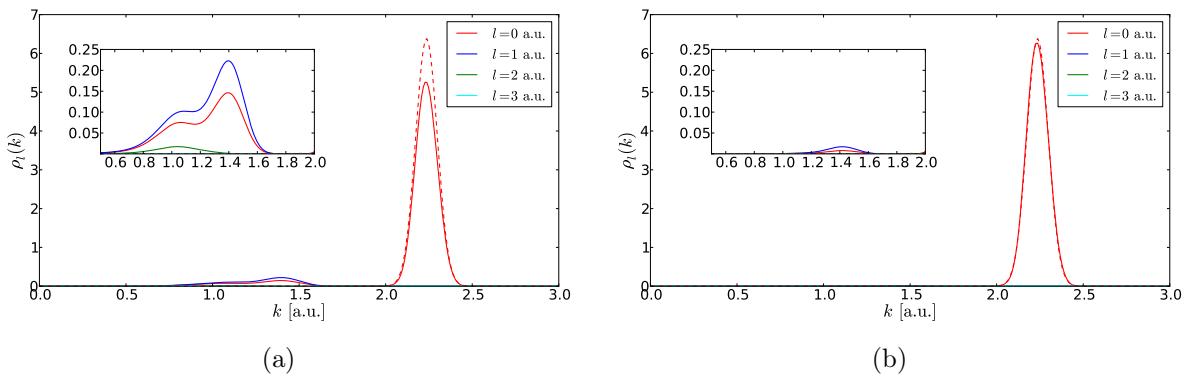
**Abbildung 4.2.5:** Darstellung von  $|\psi(r_1, r_2, \theta = \theta^*, t = t^*)|^2$  des Tripletzustandes im Bereich des Kerns für verschiedene Werte  $\theta^*$  und zu unterschiedlichen Zeiten  $t^*$  während der ESS.

Dabei zeigt sich für den Singletzustand, dass die Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine starke  $\theta$ -Abhängigkeit der Wellenfunktion induziert. Im Gegensatz dazu ist ein solches

Verhalten für den Triplettzustand nicht zu beobachten.

Dies hat einen maßgeblichen Einfluss auf die jeweiligen Streuquerschnitte,  $\rho_l(k)$ , welche angeben, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein asymptotisch freies Elektron nach dem Streuprozess den radialen Impuls  $k$  und den Drehimpuls  $l$  besitzt (vgl. Abschn. 2.3.2). Die Notation soll dabei verdeutlichen, dass für diese Größen  $k \in \mathbb{R}$  und  $l \in \mathbb{N}$  gilt. Die Propagation der Wellenfunktion erfolgt demnach so lange, bis für die Größe  $\rho_l(k)$  Konvergenz erreicht ist und die ESS als abgeschlossen betrachtet werden kann.

Die Ergebnisse der Streuquerschnitte für den Singlett- sowie den Triplettzustand sind in Abb. 4.2.6 dargestellt. Man erkennt, dass es für den Drehimpuls  $l = 0$  als Folge der elas-



**Abbildung 4.2.6:** Streuquerschnitte  $\rho_l(k)$  für ein freies Elektron nach dem Streuprozess (durchgezogene Linie) für a) den Singlettzustand und b) den Triplettzustand. Als Vergleich ist die Verteilung  $\rho_l(-k)$  für ein freies Elektron vor dem Streuprozess (gestrichelte Linie) eingezeichnet.

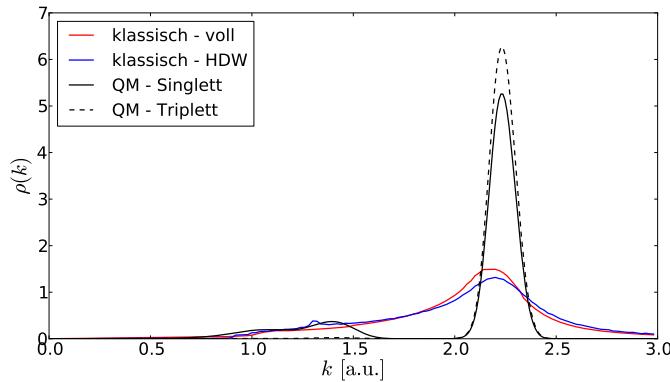
tischen Streuung ein großes Maximum bei  $k \approx 2.25$  a.u. gibt. Des Weiteren ergeben sich für niedrigere Werte von  $k$  weitere Maxima mit Drehimpulsen  $l \geq 0$ . Diese entstehen durch Anregung des im Kern gebundenen Elektrons. Die diskrete Natur der gebundenen Zustände bedingt in der Impulsverteilung für das freie Elektron das Auftauchen einzelner Maxima. Bei der ESS des Triplettzustandes stellt sich heraus, dass die Wahrscheinlichkeit für die unelastische Streuung nahezu null ist.

## 4.3 Korrespondenzverhalten

In diesem Abschnitt sollen die Ergebnisse der klassischen (vgl. Abschn. 4.1) und der quantenmechanischen (vgl. Abschn. 4.2) ESS miteinander verglichen werden.

Dafür wird für beide Fälle die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(k)$  betrachtet, welche angibt mit welcher Häufigkeit der Impuls  $k$  für ein nach dem Streuprozess freies Elektron

auftritt. Die Ergebnisse für die volle und genäherte klassische sowie die quantenmechanische Dynamik für den Singlett- und den Triplettzustand sind in Abb. 4.3.1 dargestellt. Man erkennt, dass die beiden klassischen Verteilungen sehr nah beieinander liegen, was

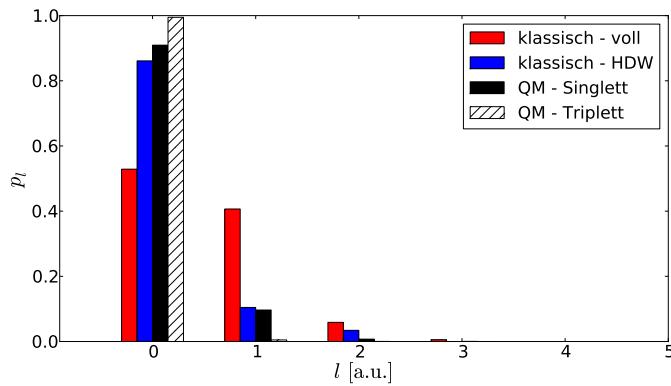


**Abbildung 4.3.1:** Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\rho(k)$  für den Impuls  $k$  eines freien Elektrons nach dem Streuprozess für das klassische und das quantenmechanische Streuexperiment.

in der Tatsache begründet ist, dass die Beschreibung der Energieendzustände  $\epsilon^*$  für den HDW und die volle Dynamik einen hohen Grad an Übereinstimmung aufweist (vgl. Abschn. 4.1.2). Der Singlettzustand im quantenmechanischen Modell unterscheidet sich von den klassischen Rechnungen dadurch, dass die Verteilung im Bereich der elastischen Streuung ( $k \approx 2.25$  a.u.) ein stärkeres Maximum aufweist. Dies ergibt sich jedoch unmittelbar daraus, dass die gebundenen Zustände in der quantenmechanischen Beschreibung diskretisiert liegen, wodurch das nach dem Streuprozess freie Elektron bestimmte Werte für den Impuls  $k$  nicht annehmen kann. Im Unterschied dazu kann in der klassischen Beschreibung das gebundene Elektron jeden Wert  $E_1 \in (-\infty, 0)$  für die Energie annehmen. Es zeigt sich jedoch für Werte  $k \lesssim 1.5$  a.u., welches einer Anregung des gebundenen Elektrons in angeregte Zustände entspricht, dass die klassischen und quantenmechanischen Verteilungen gut miteinander korrespondieren. Die Verteilung des HDW zeigt zusätzlich ein kleines Maximum im Bereich  $k \approx 1.3$  a.u., welcher auf einen Sattelpunkt in der Ablenkfunktion zurückgeführt werden kann (vgl. Abschn. 4.1.2). Dieses Verhalten ist ebenfalls in der Verteilung des Singlettzustands im Bereich  $k \approx 1.4$  a.u. zu beobachten. Dieses Detail legt es nahe, dass der HDW besser mit der Verteilung des Singlettzustands übereinstimmt als die volle Dynamik. Demgegenüber zeigt der Triplettzustand nahezu keine Korrespondenz mit den klassischen Streuquerschnitten, da die Wahrscheinlichkeit für inelastische Streuung gegen null geht.

Das gleiche Verhalten lässt sich bei der Betrachtung der Endzustände für den Drehim-

puls  $l$  beobachten. Da die klassischen Streuexperimente eine kontinuierliche Verteilung für die Werte von  $l$  zeigen (vgl. Abschn. 4.1.2), wird diese entsprechend dem quantenmechanischen Spektrum diskretisiert. Dieses Vorgehen wird standardmäßig bei der quasiklassischen Trajektorien-Methode verwendet [46]. Das bedeutet, dass die klassische Verteilung mit  $l \in \mathbb{R}$  auf die quantenmechanisch erlaubten Werte für  $l \in \mathbb{N}$  projiziert wird [47]. Dadurch ergeben sich die in Abb. 4.3.2 gezeigten Wahrscheinlichkeiten  $p_l$  für das Auftreten des Drehimpulses  $l$  für ein freies Elektron nach der Streuung. Es zeigt sich, dass die



**Abbildung 4.3.2:** Wahrscheinlichkeiten  $p_l$  für den Drehimpuls  $l$  eines freien Elektrons nach dem Streuprozess für das klassische und das quantenmechanische Streuexperiment, dabei wurden die klassischen Werte  $l \in \mathbb{R}$  auf das quantenmechanisch erlaubte Spektrum  $l \in \mathbb{N}$  projiziert.

Dynamik des HDW eine bessere Korrespondenz mit dem quantenmechanischen Verhalten des Singlettzustands aufweist als die volle Dynamik. Für den Tripletztzustand ist durch die Unterdrückung der inelastischen Streuung die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Zuständen mit  $l > 0$  nahezu null. Dieses Verhalten lässt sich mit Hilfe des HDW durch eine Analogiebetrachtung verstehen: Im HDW tritt die inelastische Streuung nur dann auf, wenn während der Zeitentwicklung der Trajektorie ein Kick auftritt. Dieser findet jedoch nur im Bereich  $r_1 \approx r_2$  statt, wenn die Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine dominante Rolle spielt. Für den Tripletztzustand gilt

$$\psi(r_1 = r_2, \theta) = 0, \quad (4.3.1)$$

wodurch die Wellenfunktion im Bereich der klassischen Kicks nur eine sehr geringe Amplitude besitzt.

Durch die qualitative Übereinstimmung der Streuwahrscheinlichkeiten  $\rho(k)$  und  $p_l$  zwischen dem quantenmechanischen Singlettzustand und der klassischen Beschreibung im Rahmen

des HDW scheint somit die Möglichkeit gegeben, das Verhalten der Wellenfunktion im Heliumatom mit Hilfe der Sequenzfolgen für die Trajektorien des HDW zu interpretieren.

# 5 Zusammenfassung

Ausgehend von der Beschreibung des Heliumatoms im invarianten Unterraum mit Gesamtdrehimpuls  $L = 0$  wurde die klassische und die quantenmechanische Formulierung für die Elektronenstoß-Streuung vorgenommen. In diesem Zusammenhang wurde insbesondere dargelegt, in welcher Art jeweils die Präparation der Anfangszustände und die Berechnung der Streuquerschnitte zu erfolgen hat.

Danach wurde für die klassische Dynamik des Heliumatoms ein Hamiltonian dominanter Wechselwirkung entwickelt. In dieser Näherung wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung entsprechend ihres charakteristischen Verhaltens im Nah- und im Fernfeld durch zeitlich diskrete Ereignisse approximiert, bei denen ein Umschalten des Hamiltonians stattfindet. Der Vorteil dieses Modells ist, dass zwischen diesen Ereignissen eine effektive Separation der Dynamik der beiden Elektronen stattfindet, wodurch das System lokal integrierbar wird.

Anschließend wurde für die Elektronenstoß-Streuung die Dynamik des genäherten Systems der vollen klassischen Dynamik gegenübergestellt. Dabei zeigte sich in den Ablenkfunktionen zumindest eine qualitative Übereinstimmung. Ein quantitativer Vergleich erfolgte durch Betrachtung der Streuquerschnitte für die Energie und den Drehimpuls. Es stellte sich heraus, dass im genäherten System die Streuung in Zustände mit niedrigen Werten für den Drehimpuls nur unzureichend berücksichtigt wird, wodurch im Vergleich zur vollen Dynamik die starke Korrelation zwischen Energie und Drehimpuls in den Endzuständen verloren geht. Im Gegensatz dazu wird das Verhalten des einfach-differentiellen Streuquerschnitts für die Energie des Projektilelektrons durch die genäherte Dynamik nahezu exakt reproduziert.

Des Weiteren ergibt sich aus der Struktur des Hamiltonians dominanter Wechselwirkung ein Schema zur Klassifizierung der Trajektorien durch eine Sequenz von diskreten Ereignissen für das genäherte und das ungenäherte System, woraus eine Partitionierung des Raums der Anfangsbedingungen resultiert. Durch Vergleich mit den Ablenkfunktionen zeigt sich, dass Trajektorien mit der gleichen Sequenz das gleiche charakteristische Verhalten aufweisen. Folglich können die verschiedenen Maxima im Streuquerschnitt jeweils eindeutig einer bestimmten Sequenzfolge zugeordnet werden.

Schließlich wird das exakte quantenmechanische Streuproblem betrachtet, um zu untersuchen inwieweit dieses mit der klassischen Beschreibung korrespondiert. Ein Vergleich der Streuquerschnitte offenbart qualitative Übereinstimmungen zwischen der genäherten bzw. ungenäherten klassischen Dynamik und der quantenmechanischen Dynamik des Singletzustandes bei der Streuung des gebundenen Elektrons in angeregte Zustände. Bemerkenswert ist dabei, dass mit dem Hamiltonian dominanter Wechselwirkung eine bessere Übereinstimmung mit den quantenmechanischen Resultaten zu beobachten ist.

Folglich wäre es interessant, die Trajektorien des Hamiltonians dominanter Wechselwirkung für eine semiklassische Approximation der Wellenfunktion zu verwenden. Dadurch könnten unter Umständen Strukturen der quantenmechanischen Streuquerschnitte mit den Sequenzen, welche sich aus dem Klassifizierungsschema für die Trajektorien ergeben, identifiziert werden.

Weiterführend sollte die Frage untersucht werden, ob der Hamiltonian dominanter Wechselwirkung ohne Umweg über die Semiklassik auch quantenmechanisch formuliert werden kann.

# A Anhang

## A.1 Planare Bewegung durch $\vec{L} = 0$

Hier soll gezeigt werden, dass durch die Forderung  $\vec{L} = 0$  die klassische Dynamik des Heliumatoms unter Einfluss des Hamiltonians (2.1.4) in einer zeitlich konstanten Ebene verläuft. Bei der Betrachtung der Bewegungsgleichungen (2.1.2) in kartesischen Koordinaten:

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i), \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.1.1})$$

ergibt sich für die z-Komponente beider Elektronen

$$\dot{z}_{1,2} = p_{z_{1,2}}, \quad (\text{A.1.2a})$$

$$\dot{p}_{z_{1,2}} = -Z \frac{z_{1,2}}{|r_{1,2}|^3} \pm (z_1 - z_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3}. \quad (\text{A.1.2b})$$

Man kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass zur Zeit  $t_0$  gilt:

$$z_i(t_0) = 0, \quad i = 1, 2 \quad (\text{A.1.3})$$

woraus sich für (A.1.2b) unmittelbar ergibt:

$$\dot{p}_{z_{1,2}}(t_0) = 0. \quad (\text{A.1.4})$$

Aus der Forderung  $\vec{L} = 0$  folgt aus der  $x$ - und  $y$ -Komponente außerdem:

$$p_{z_1} = -\frac{y_2}{y_1} p_{z_2}, \quad (\text{A.1.5a})$$

$$p_{z_1} = -\frac{x_2}{x_1} p_{z_2}. \quad (\text{A.1.5b})$$

Diese Gleichungen führen auf folgenden Zusammenhang zwischen den  $x$ - und  $y$ -Koordinaten der beiden Elektronen:

$$\frac{y_2}{y_1} = \frac{x_2}{x_1}. \quad (\text{A.1.6})$$

Im Allgemeinen ist diese Aussage jedoch nicht wahr, weshalb (A.1.5) nur durch die triviale Lösung

$$p_{z_1} = p_{z_2} = 0 \quad (\text{A.1.7})$$

erfüllt werden kann. Somit folgt mit Hilfe von (A.1.2a) und (A.1.4)

$$\dot{z}_i(t_0) = 0, \quad (\text{A.1.8a})$$

$$\dot{p}_{z_i}(t_0) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (\text{A.1.8b})$$

so dass für alle Zeiten  $t$  gilt:

$$\begin{aligned} z_i(t) &= 0, \\ p_{z_i}(t) &= 0, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{A.1.10})$$

Daraus folgt, dass die durch Elektronen und Kern zur Zeit  $t_0$  definierte Ebene gemäß (A.1.3) einen invarianten Unterraum darstellt. Somit liegt durch die Bedingung  $\vec{L} = 0$  eine planare Konfiguration vor.

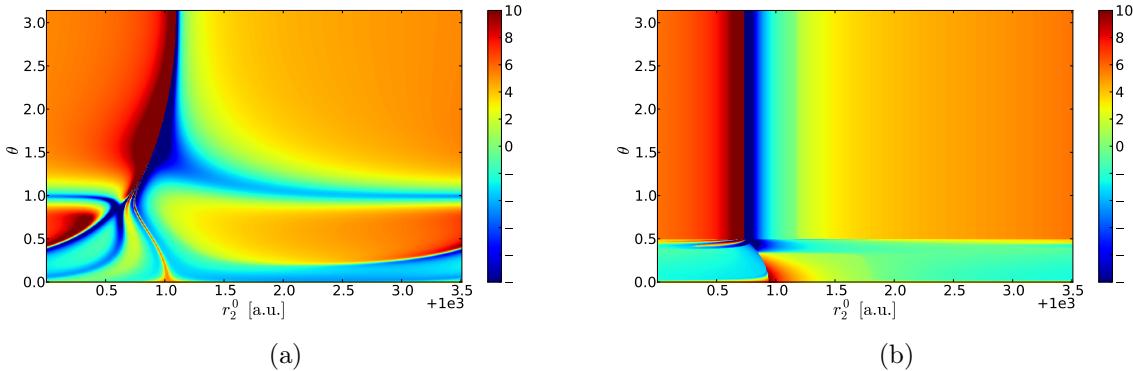
## A.2 Invarianz der Ablenkfunktion

Im Folgenden soll gezeigt werden, dass die Topologie der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  invariant unter einer Änderung der Gesamtenergie  $E$  ist. Es tritt lediglich eine Skalierung der charakteristischen Energieskala auf. Dafür wird die ESS für die Streuung an einem im Kern gebundenen Elektron, welches sich im “Grundzustand” befindet, untersucht. Dadurch sind die Werte für die Parameter  $E_1$  und  $l$  fest:

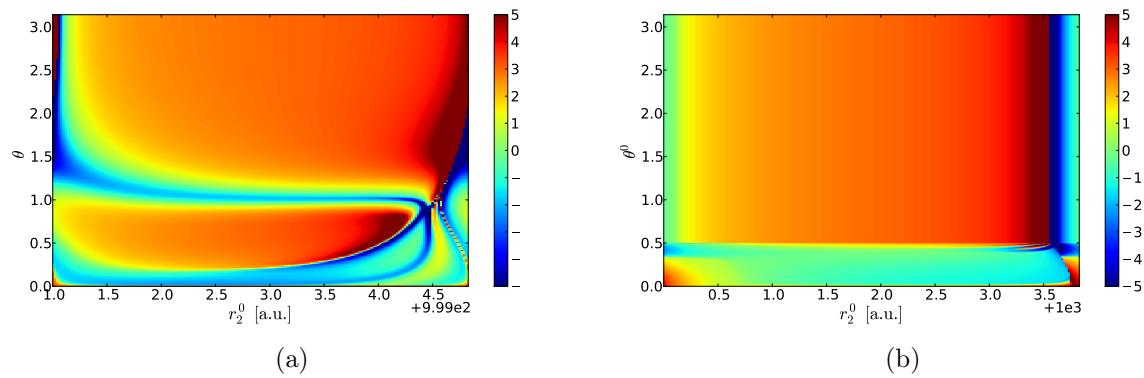
$$E_1 = -2 \text{ a.u.}, \quad (\text{A.2.1a})$$

$$l = 0. \quad (\text{A.2.1b})$$

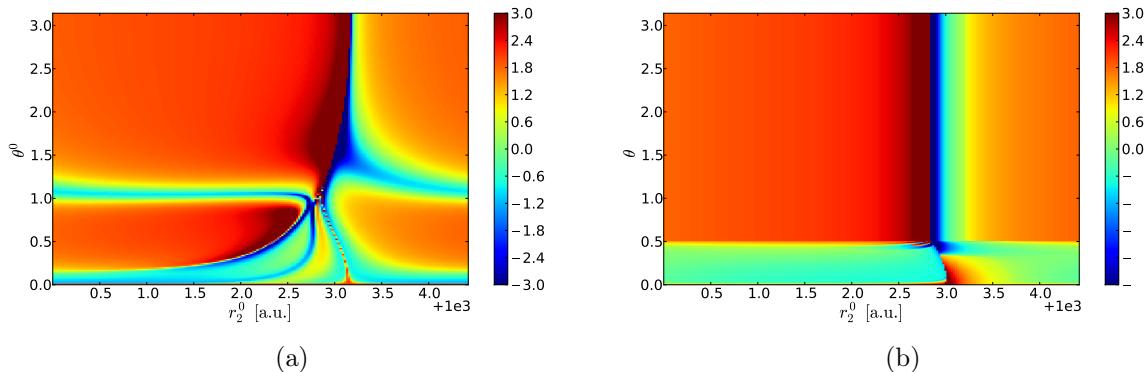
Das entsprechende Streuexperiment wird bei den Gesamtenergiwerten  $E = 0.5, 1.0, 2.0 \text{ a.u.}$  für die volle Dynamik und die Dynamik mit HDW durchgeführt. Die entsprechenden Ablenkfunktionen sind in den Abb. A.2.1, A.2.2, A.2.3 zu sehen. Dabei wurden für die Ablenkfunktion bei  $E = 0.5 \text{ a.u.}$   $N = 10^6$  Trajektorien verwendet. Für die Ablenkfunktionen bei  $E = 1.0, 2.0 \text{ a.u.}$  wurden  $N = 4 \cdot 10^4$  Trajektorien verwendet, da dies ausreicht, um die grundlegende Struktur offenzulegen. Man erkennt, dass durch die Veränderung der Gesamtenergie die Ablenkfunktion relativ zur Koordinate  $r_2^0$  verschoben wird. Dies ergibt sich daraus, dass das Projektilelektron gemäß (4.1.1) jeweils einen anderen Anfangsimpuls besitzt. Berücksichtigt man diese relative Verschiebung, zeigen die Ablenkfunktionen bei verschiedenen Werten für die Gesamtenergie  $E$  das gleiche Verhalten. Der einzige Unterschied besteht lediglich in der Wahl der Skala für die farbliche Darstellung der Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$ .



**Abbildung A.2.1:** Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2 \text{ a.u.}$ ,  $l = 0$ ,  $E = 0.5 \text{ a.u.}$  für a) die ungenäherte Dynamik und b) die Dynamik mit dem HDW.



**Abbildung A.2.2:** Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 1.0$  a.u. für a) die ungenäherte Dynamik und b) die Dynamik mit dem HDW.



**Abbildung A.2.3:** Ablenkfunktion  $\epsilon^*(r_2^0, \theta^0)$  für das Streuexperiment mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 2.0$  a.u. für a) die ungenäherte Dynamik und b) die Dynamik mit dem HDW.

## A.3 Typische Trajektorien

Im Folgenden sollen für die Dynamik des HDW (A.3.1) sowie für die volle Dynamik (A.3.1) typische Trajektorien der ESS mit den Parametern  $E_1 = -2$  a.u.,  $l = 0$ ,  $E = 0.5$  a.u. gezeigt werden. Es wird dabei für jede Sequenzfolge, welche mit einer Wahrscheinlichkeit  $P > 10^{-2}$  (vgl. Abb. 4.1.6) auftritt, die Zeitentwicklung einer entsprechenden Trajektorie, welche durch die Anfangsbedingungen  $r_2^0$ ,  $\theta^0$  bestimmt ist, als Beispiel für das charakteristische Verhalten dargestellt.

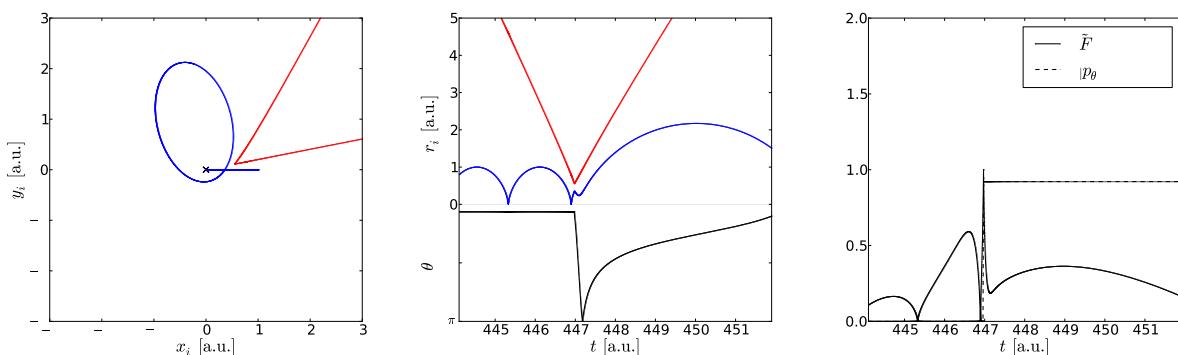
### A.3.1 Genäherte Dynamik

Bei der genäherten Dynamik treten die Sequenzfolgen '1', '12', '2' und '2' jeweils mit einer Wahrscheinlichkeit  $P > 10^{-2}$  auf. Die Darstellung der Trajektorie erfolgt jeweils drei Teile in den Abbildungen A.3.1 - A.3.4.

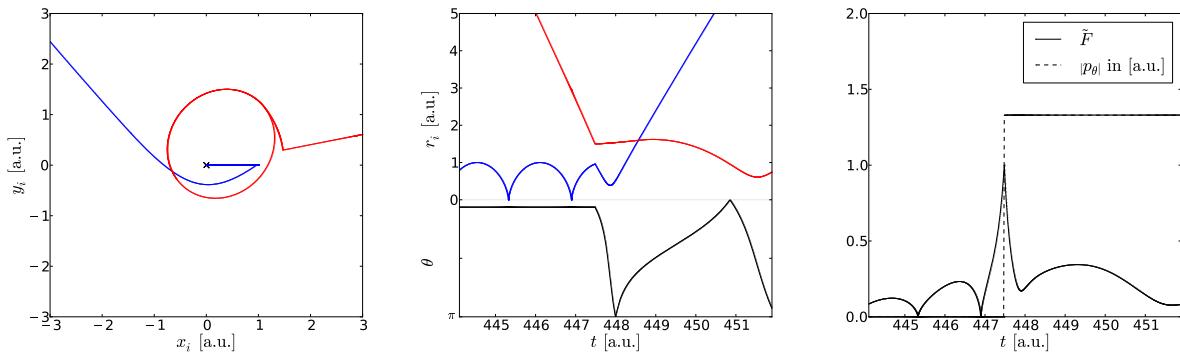
Es wird die Projektion der beiden Teilchenbahnen in eine gemeinsame Ebene ohne zeitliche Auflösung gezeigt. Dabei ist das Projektilelektron durch eine rote Linie und das Zielelektron durch eine blaue Linie dargestellt. Die Position des Kerns ist durch ein 'x' gekennzeichnet.

Des Weiteren wird der zeitliche Verlauf der Koordinaten  $r_1(t)$  (blaue Linie für das Zielelektron),  $r_2(t)$  (rote Linie für das Projektilelektron) sowie der Relativwinkel  $\theta(t)$  (schwarze Linie) abgebildet.

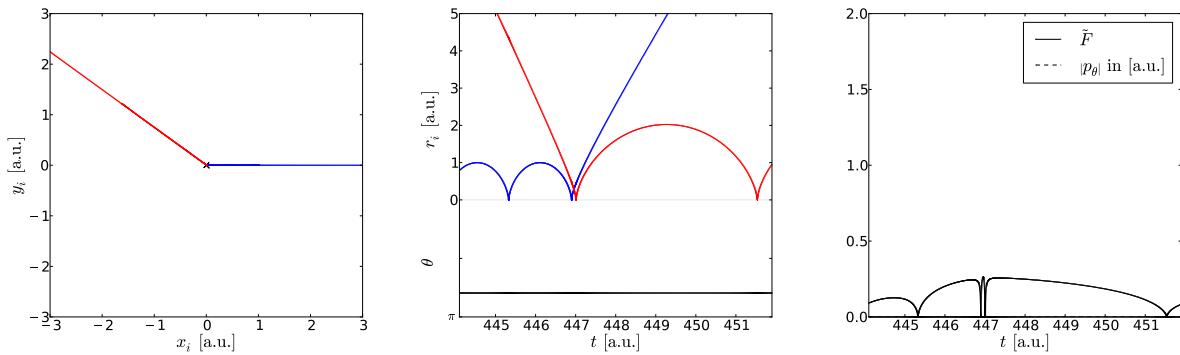
Schließlich wird der zeitliche Verlauf der Funktion  $\tilde{F}$  (3.2.23) mit dem Drehimpuls  $|p_\theta(t)|$  verglichen.



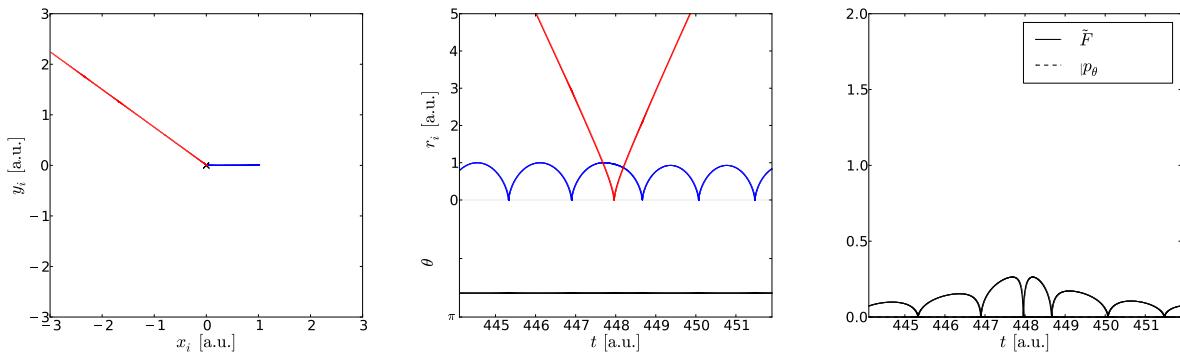
**Abbildung A.3.1:** Typische Trajektorie für die Sequenz '1' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1001.225$  a.u.,  $\theta^0 = 0.2$ .



**Abbildung A.3.2:** Typische Trajektorie für die Sequenz '12' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1003.150$  a.u.,  $\theta^0 = 0.2$ .



**Abbildung A.3.3:** Typische Trajektorie für die Sequenz '2' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1000.980$  a.u.,  $\theta^0 = 2.5$ .

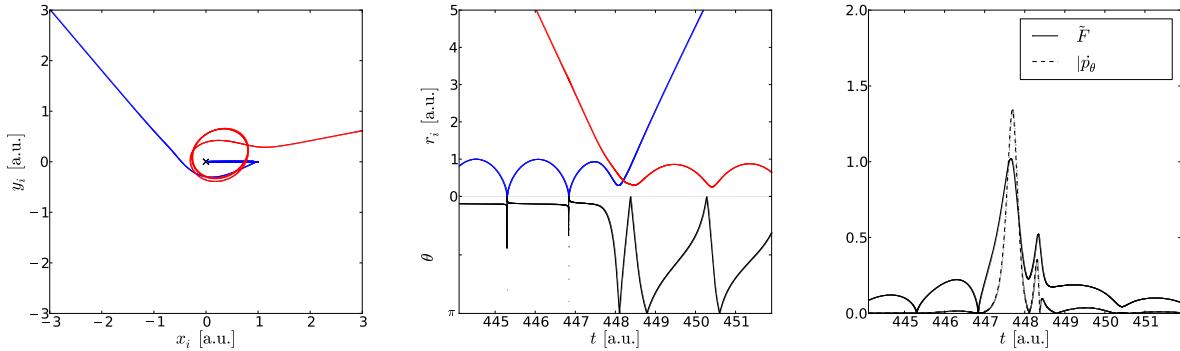


**Abbildung A.3.4:** Typische Trajektorie für die Sequenz '22' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1003.15$  a.u.,  $\theta^0 = 2.5$ .

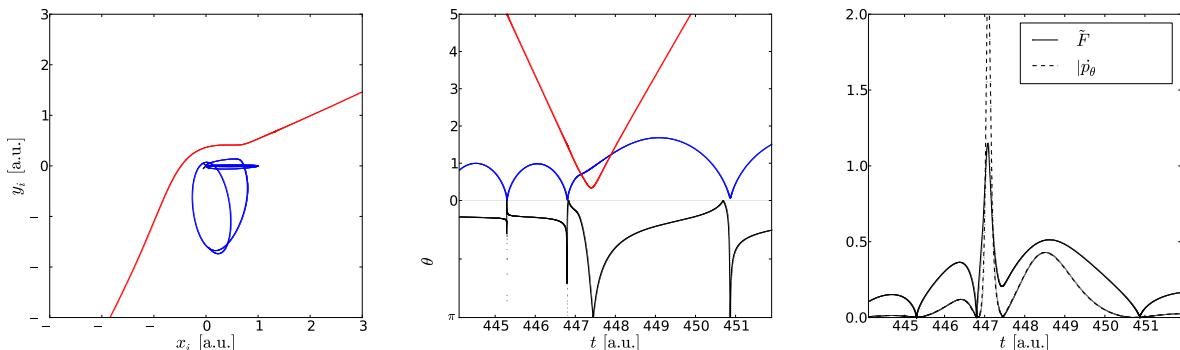
### A.3.2 Volle Dynamik

Bei der vollen Dynamik treten die Sequenzfolgen '12', '122', '2', '21', '22' und '212' jeweils mit einer Wahrscheinlichkeit  $P > 10^{-2}$  auf. die Darstellung der typischen Trajektorien

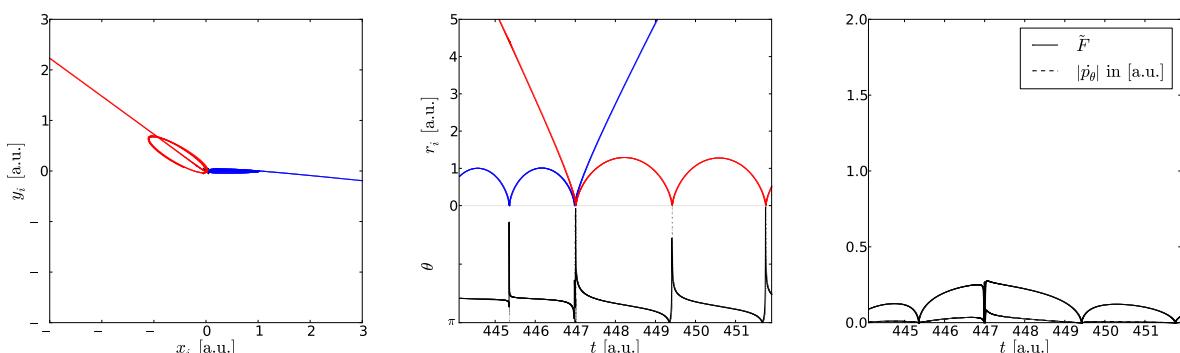
erfolgt analog zu Anhang A.3.1 in den Abb. A.3.5 - A.3.10 , mit dem einzigen Unterschied, dass die Funktion  $\tilde{F}$  mit dem zeitlichen Verhalten der Drehimpulsänderung  $|\dot{p}_\theta(t)|$  verglichen wird.



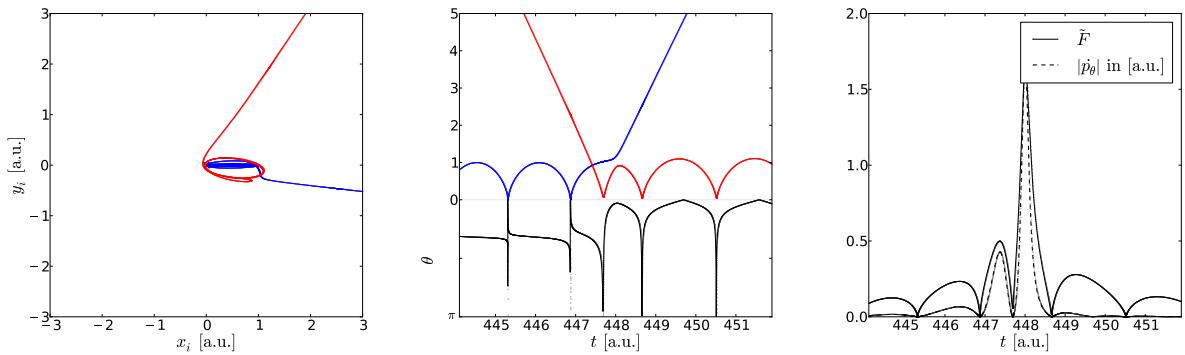
**Abbildung A.3.5:** Typische Trajektorie für die Sequenz '12' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1003.150$  a.u.,  $\theta^0 = 0.2$  .



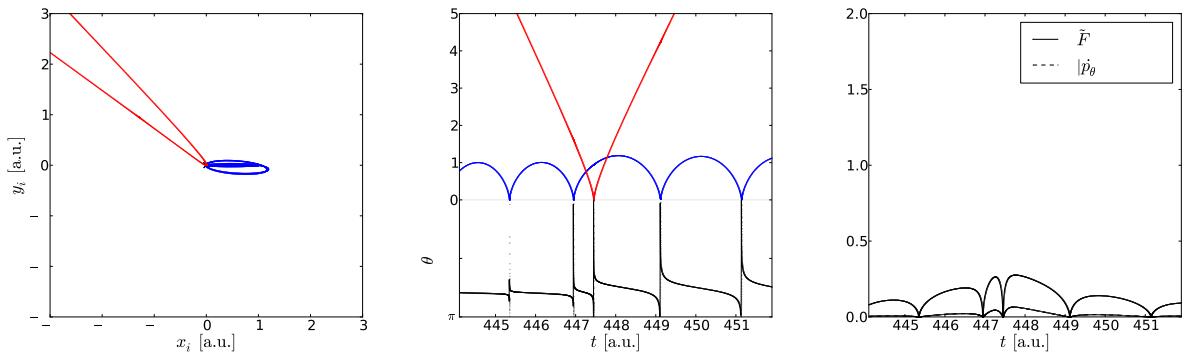
**Abbildung A.3.6:** Typische Trajektorie für die Sequenz '122' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1001.505$  a.u.,  $\theta^0 = 0.45$  .



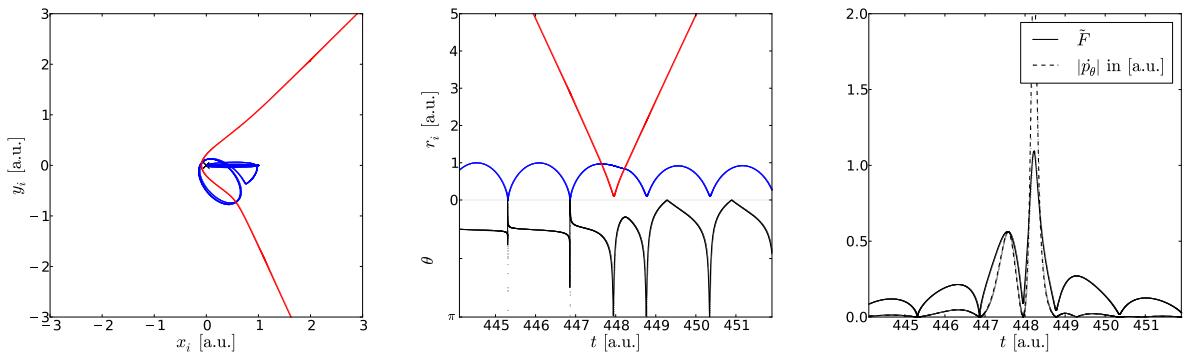
**Abbildung A.3.7:** Typische Trajektorie für die Sequenz '2' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1001.120$  a.u.,  $\theta^0 = 2.5$  .



**Abbildung A.3.8:** Typische Trajektorie für die Sequenz '21' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1002.800$  a.u.,  $\theta^0 = 1.0$ .



**Abbildung A.3.9:** Typische Trajektorie für die Sequenz '22' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1002.100$  a.u.,  $\theta^0 = 2.5$ .



**Abbildung A.3.10:** Typische Trajektorie für die Sequenz '212' mit den Anfangsbedingungen  $r_2^0 = 1002.975$  a.u.,  $\theta^0 = 0.8$ .

# Literaturverzeichnis

- [1] L. KELDYSH: *Ionization in Field of a Strong Electromagnetic Wave*, Sov. Phys. JETP **20**, 1307 (1965).
- [2] G. HANDKE, M. DRAEGER und H. FRIEDRICH: *Classical dynamics of s-wave helium*, Physica A **197**, 113 (1993).
- [3] C. ZAGOYA, C.-M. GOLETZ, F. GROSSMANN und J.-M. ROST: *High Harmonic Generation for Pedestrians*, nicht veröffentlicht (2011).
- [4] G. S. EZRA, K. RICHTER, G. TANNER und D. WINTGEN: *Semiclassical cycle expansion for the helium atom*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **24**, L413 (1991).
- [5] M.-H. LEE, G. TANNER und N. N. CHOI: *Classical dynamics of two-electron atoms near the triple collision*, Phys. Rev. E **71**, 056208 (2005).
- [6] M. M. SANO und K. TANIKAWA: *Periodic orbits and binary collisions in the classical three-body Coulomb problem*, Phys. Lett. A **372**, 6899 (2008).
- [7] H. FRIEDRICH: *Theoretical Atomic Physics*, Springer-Verlag, 3. Aufl., 2006.
- [8] L. D. LANDAU und E. M. LIFSCHITZ: *Lehrbuch der Theoretischen Physik Band 1: Mechanik*, Verlag Harri Deutsch, 14. Aufl., 1997.
- [9] H. FRIEDRICH, W. IHRA und P. MEERWALD: *Threshold behaviour of ( $e, 2e$ ) reactions in classical and quantum mechanics*, Aust. J. Phys. **52**, 323 (1999).
- [10] K. RICHTER, G. TANNER und D. WINTGEN: *Classical mechanics of two-electron atoms*, Phys. Rev. A **48**, 4182 (1993).
- [11] G. TANNER, K. RICHTER und J.-M. ROST: *The theory of two-electron atoms: between ground state and complete fragmentation*, Rev. Mod. Phys. **72**, 497 (2000).
- [12] M. M. SANO: *Dynamics starting from zero velocities in the classical Coulomb three-body problem*, Phys. Rev. E **75**, 026203 (2007).

- [13] N. N. CHOI, M.-H. LEE und G. TANNER: *Classical Dynamics near the Triple Collision in a Three-Body Coulomb Problem*, Phys. Rev. Lett. **93**, 054302 (2004).
- [14] M. C. GUTZWILLER: *Moon-Earth-Sun: The oldest three-body problem*, Rev. Mod. Phys. **70**, 589 (1998).
- [15] P. KUSTAANHEIMO und E. STIEFEL: *Perturbation Theory of Kepler motion based on spinor regularization*, J. Reine Angew. Math. **218**, 204 (1965).
- [16] S. J. AARSETH und K. ZARE: *A regularization of the three-body problem*, Celestial Mech. **10**, 185 (1974).
- [17] G. S. EZRA und R. S. BERRY: *Correlation of two particles on a sphere*, Phys. Rev. A **25**, 1513 (1982).
- [18] A. LINDNER: *Drehimpulse in der Quantenmechanik*, Teubner Verlag, 1984.
- [19] E. A. HYLLERAAS: *Über den Grundzustand des Heliumatoms*, Z. Phys. **48**, 469 (1928).
- [20] S. WÜSTER: *Classical and Quantum Field Theory of Bose-Einstein Condensates*, Dissertation, Australian National University, Canberra, 2007.
- [21] E. FATTAL, R. BAER und R. KOSLOFF: *Phase space approach for optimizing grid representations: The mapped Fourier method*, Phys. Rev. E **53**, 1217 (1996).
- [22] U. KLEINEKATHÖFER und D. J. TANNOR: *Extension of the mapped Fourier method to time-dependent problems*, Phys. Rev. E **60**, 4926 (1999).
- [23] J.-M. ROST: *Semiclassical S-matrix theory for atomic fragmentation*, Phys. Rep. **297**, 271 (1998).
- [24] J.-M. ROST: *The fragmentation threshold in two-electron atoms: an illustration with classical orbits*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **27**, 5923 (1994).
- [25] J.-M. ROST: *Two-electron escape near threshold: A classical process?*, Phys. Rev. Lett. **72**, 1998 (1994).
- [26] J.-M. ROST: *Threshold ionization of atoms by electron and positron impact*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **28**, 3003 (1995).
- [27] A. M. O. DE ALMEDIA: *Hamiltonian Systems: Chaos and quantization*, Cambridge University Press, 1988.

- [28] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU und LALOE: *Quantenmechanik*, Walter de Gruyter, 2. Aufl., 1999.
- [29] H. GOLDSTEIN, C. POOLE und J. SAFKO: *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, 3. Aufl., 2000.
- [30] D. J. TANNOR: *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective*, University Science Books, 2007.
- [31] V. I. ARNOLD: *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, 2. Aufl., 1989.
- [32] M. PROTOPAPAS, C. H. KEITEL und P. L. KNIGHT: *Atomic physics with super-high intensity lasers*, Rep. Prog. Phys. **60**, 389 (1997).
- [33] A. TEMKIN: *Nonadiabatic Theory of Electron-Hydrogen Scattering*, Phys. Rev. **126**, 130 (1962).
- [34] R. POET: *The exact solution for a simplified model of electron scattering by hydrogen atoms*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **11**, 3081 (1978).
- [35] G. HANDKE, M. DRAEGER, W. IHRA und H. FRIEDRICH: *Scattering and ( $e, 2e$ ) reactions in classical s-wave helium*, Phys. Rev. A **48**, 3699 (1993).
- [36] R. MCGEHEE: *Triple Collision in Collinear Three-Body Problem*, Invent. Math. **27**, 191 (1974).
- [37] L. VAN HOVE: *The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal*, Phys. Rev. **89**, 1189 (1953).
- [38] M. PINDZOLA und D. SCHULTZ: *Time-dependent close-coupling method for electron-impact ionization of hydrogen*, Phys. Rev. A **53**, 1525 (1996).
- [39] G. BUFFINGTON, D. MADISON, J. PEACHER und D. SCHULTZ: *Lattice, time-dependent approach for electron-hydrogen scattering*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **32**, 2991 (1999).
- [40] D. ODERO, J. PEACHER, D. SCHULTZ und D. MADISON: *Time-dependent treatment of electron-hydrogen scattering for higher angular momenta ( $L > 0$ )*, Phys. Rev. A **63** (2001).
- [41] P. L. BARTLETT: *A complete numerical approach to electron-hydrogen collisions*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. **39**, R379 (2006).

- [42] WWW.XMDS.ORG.
- [43] P. T. COCHRANE, G. CELLECUT, P. DRUMMOND und J. J. HOPE: *xmds: An open source numerical simulation package*, 2008.
- [44] C. L. PEKERIS:  $1^1S$  ,  $2^1S$  and  $2^3S$  States of  $H^-$  and of  $He$ , Phys. Rev. **126**, 1470 (1962).
- [45] W. IHRA, M. DRAEGER, G. HANDKE und H. FRIEDRICH: *Time-dependent approach to electron scattering and ionization in the s-wave model*, Phys. Rev. A **52**, 3752 (1995).
- [46] G. C. SCHATZ und H. ELGERSMA: *A quasi-classical trajectory study of product vibrational distributions in the  $OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$  reaction*, Chem. Phys. Lett. **73**, 21 (1980).
- [47] I. C. PERCIVAL: *Planetary Atoms*, P. Roy. Soc. A - Math. Phy. **353**, 289 (1977).

## **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Dabei danke ich besonders:

- meinem Betreuer, Prof. J.-M. Rost, durch dessen Erfahrung, Wissen und Überblick ich viel lernen konnte und der mich immer wieder auf die richtige Spur zurückgebracht hat,
- meinen Arbeitskollegen im Institut,
- Sebastian Wüster für die Hilfe bei den quantenmechanischen Rechnungen,
- Alex, Martin, Christian, Clemens und Gerald für das Korrekturlesen der Arbeit,
- meiner Familie, meinen Freunden und speziell Antje für die Unterstützung, die ich von ihnen erhalten habe.

## **Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Martin Gerlach

Dresden, August 2011