

**Untersuchungen zur  
Elektron-Positron-Paarzeugung  
in relativistischen Schwerionenstößen  
mit dem Verfahren der  
gekoppelten Kanäle**

Inaugural-Dissertation  
zur  
Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften  
der Justus-Liebig-Universität Gießen  
(Fachbereich 07)

vorgelegt von  
**Matthias Gail**  
aus Friedberg

Gießen, Juni 2001

D 26

Dekan: Prof. Dr. A. Beutelspacher

1. Berichterstatter: Prof. Dr. W. Scheid

2. Berichterstatter: Prof. Dr. Dr. W. Cassing

Tag der mündlichen Prüfung:

# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1      | Elektron-Positron-Paarerzeugung . . . . .                                      | 1         |
| 1.2      | Überblick über bisherige Theorien . . . . .                                    | 2         |
| 1.3      | Motivation . . . . .   | 4         |
| 1.4      | Aufbau dieser Arbeit . . . . .   | 6         |
| <b>2</b> | <b>Theoretische Grundlagen</b>   | <b>7</b>  |
| 2.1      | Theoretische Beschreibung des Prozesses . . . . .                              | 7         |
| 2.2      | Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten . . . . .                         | 9         |
| 2.3      | Die Wahl der Basisfunktionen . . . . .   | 12        |
| <b>3</b> | <b>Das Verfahren der gekoppelten Kanäle</b>                                    | <b>15</b> |
| 3.1      | Die gekoppelten Gleichungen . . . . .  | 15        |
| 3.2      | Diskretisierung des kontinuierlichen Spektrums . . . . .                       | 18        |
| 3.3      | Störungstheorie . . . . .  | 21        |
| 3.4      | Coulomb-Randbedingungen . . . . .  | 25        |
| <b>4</b> | <b>Berechnung der Matrixelemente</b>   | <b>29</b> |
| 4.1      | Target-Target-Matrixelemente . . . . .   | 29        |
| 4.2      | Projektil-Projektil-Matrixelemente . . . . .                                   | 31        |
| 4.3      | Zwei-Zentren-Matrixelemente . . . . .  | 34        |
| 4.4      | Symmetrien der Matrixelemente . . . . .  | 42        |
| <b>5</b> | <b>Ein-Zentrum-Entwicklung</b>   | <b>47</b> |
| 5.1      | Rechnung im System des Projektilkerns . . . . .                                | 47        |
| 5.2      | Entwicklung um den Projektilkern . . . . .                                     | 53        |
| 5.2.1    | Rechnungen für Stöße von $U^{92+}$ mit $Au^{79+}$ , $Ag^{47+}$ und $Cu^{29+}$  | 54        |
| 5.2.2    | Rechnungen für Stöße von $La^{57+}$ mit $Au^{79+}$ , $Ag^{47+}$ und $Cu^{29+}$ | 66        |
| 5.3      | Erzeugung von mehreren Paaren . . . . .  | 70        |
| <b>6</b> | <b>Zwei-Zentren-Rechnungen</b>   | <b>73</b> |
| 6.1      | Rechnungen ohne Kontinuumszustände am Target . . . . .                         | 74        |
| 6.2      | Symmetrische Entwicklung . . . . .   | 78        |

|   |           |
|---|-----------|
| <b>7 Zusammenfassung und Ausblick</b>                         | <b>85</b> |
| 7.1 Ergebnisse dieser Arbeit . . . . .                        | 85        |
| 7.2 Vergleich mit anderen Verfahren . . . . .                 | 86        |
| 7.3 Ausblick . . . . .  | 88        |
| <b>A Multipolentwicklung des Potentials</b>                   | <b>91</b> |
| <b>B Fourier-Transformation</b>                               | <b>93</b> |
| B.1 Fourier-Transformation von Spinoren . . . . .             | 93        |
| B.1.1 Kontinuumswellenfunktionen . . . . .                    | 94        |
| B.1.2 Gebundene Wellenfunktionen . . . . .                    | 97        |
| B.2 Fourier-Transformation von geboosteten Spinoren . . . . . | 98        |
| <b>C Tabellen</b>   | <b>99</b> |
| C.1 Erläuterungen zu den Tabellen . . . . .                   | 100       |

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Elektron-Positron-Paarerzeugung

Das Thema dieser Arbeit ist die Erzeugung von Elektron-Positron-Paaren in relativistischen Stößen schwerer Ionen. Dabei sollen solche Stöße betrachtet werden, bei denen die Ionen aneinander vorbeifliegen, ohne sich dabei zu berühren. Man spricht dann von einem atomaren Stoß. In den sehr starken elektromagnetischen Feldern der hochgeladenen Kerne kann es zur Produktion von Teilchen-Antiteilchen-Paaren kommen, wobei gemäß der Formel  $E = mc^2$  Energie in Materie umgewandelt wird. Dabei werden in der Regel die Teilchenpaare mit der geringsten Masse, also Elektron-Positron-Paare, erzeugt.

In Stößen schwerer Ionen muß man zwischen zwei verschiedenen Reaktionsprozessen, die zur Erzeugung von Elektron-Positron-Paaren führen, unterscheiden. Einerseits können nämlich ein freies Elektron und ein freies Positron produziert werden. Dann spricht man von der freien Paarproduktion. Andererseits kann aber auch das Elektron in einem gebundenen Zustand von einem der beiden Stoßpartner produziert werden. Man spricht dann von der gebunden-freien Paarproduktion oder auch von der Paarproduktion mit Einfang.

Die gebunden-freie Paarproduktion ist auch von praktischer Bedeutung, denn sie ist der dominante Verlustprozeß für den Ionenstrahl in modernen Collidersystemen wie zum Beispiel RHIC (Relativistic Heavy Ion Collider) in Brookhaven und LHC (Large Hadron Collider) am CERN. Bei diesen Beschleunigern bewegen sich zwei Ionenstrahlen in entgegengesetzter Richtung auf einer Kreisbahn. In einer Reaktionszone werden die beiden Strahlen überlagert, so daß die Ionen in den Strahlen immer wieder aneinander vorbeifliegen müssen, sofern es nicht zu einer Reaktion der Kerne kommt. Durch die dabei auch stattfindende gebunden-freie Paarproduktion ändern jene Ionen, die bei diesem Prozeß ein Elektron „einfangen“, ihren Ladungszustand. Da jedoch nur Ionen mit einem bestimmten Ladungszustand auf der vorgesehenen Teilchenbahn im Beschleuniger gehalten werden können, gehen diese Ionen dem Teilchenstrahl verloren. Dieser

Prozeß begrenzt neben der Coulombspaltung die Lebensdauer der Ionenstrahlen in dem Beschleuniger.

## 1.2 Überblick über bisherige Theorien

Die Basis der meisten theoretischen Arbeiten auf dem Gebiet der Elektron-Positron-Paarerzeugung bilden störungstheoretische Verfahren. Dabei gibt es verschiedene Zugänge. Die ersten theoretischen Betrachtungen gehen auf die dreißiger Jahre zurück [Lan34, Bha35, Nis35], und die überwiegende Anzahl der Arbeiten benutzt die Weizsäcker-Williams-Methode [Wei34, Wil34]. Diese Methode ist insbesondere für hohe Stoßenergien  $\gamma \gg 1$  gut anwendbar, da dann das elektromagnetische Feld eines sich bewegenden Kerns fast transversal wird und näherungsweise durch einen Puls, der aus linear polarisierten ebenen Wellen besteht, ersetzt werden darf. Das Spektrum der „äquivalenten“ Photonen in einem solchen Puls wird dann im Rahmen dieser Methode mit dem Wirkungsquerschnitt für die Paarproduktion durch ein hochenergetisches Photon im Feld eines ruhenden Kerns, für den es in der niedrigsten Ordnung der Störungstheorie analytische Ausdrücke gibt, gefaltet.

Bottcher und Strayer [Bot89] berechneten Wirkungsquerschnitte für die freie Paarproduktion im Feld zweier kollidierender Kerne, wobei sie die Wechselwirkung mit beiden Kernen jeweils nur in der niedrigsten Ordnung der Störungstheorie berücksichtigten.

Becker et al. [Bec86a, Bec86b, Bec87a] führten störungstheoretische Rechnungen für die freie und die gebunden-freie Paarproduktion im Rahmen der semiklassischen Näherung im Ruhesystem des Targetkerns durch. Dabei wurde durch die Verwendung von Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns die Wechselwirkung mit diesem Kern in allen Ordnungen exakt berücksichtigt. Neben den exakten relativistischen Wellenfunktionen benutzte Becker auch Darwin- und Sommerfeld-Maue-Wellenfunktionen [Bec87b]. Die Wechselwirkung mit dem Projektilkern wurde in der ersten Ordnung der Störungstheorie betrachtet. Steih untersuchte die Eigenschaften verschiedener Distorted-Wave-Methoden [Ste96] für die Berechnung von Wirkungsquerschnitten für die freie Paarproduktion.

Bertulani und Baur [Ber88] konnten zeigen, daß die mit der Störungstheorie erster Ordnung in der semiklassischen Näherung berechneten Wahrscheinlichkeiten bei kleinen Stoßparametern und hohen Stoßenergien größer als eins werden können und somit die Unitarität verletzt wird. Nur durch die Berücksichtigung von Beiträgen höherer Ordnung konnte die Unitarität wiederhergestellt werden [Bau90].

Im Vergleich zur großen Anzahl der Arbeiten, die auf der Störungstheorie beruhen, gibt es nur relativ wenige nichtstörungstheoretische Untersuchungen zur Elektron-Positron-Paarerzeugung. Für Stöße bei sehr niedrigen Energien im Bereich der Coulomb-Barriere konnten Reinhardt et al. [Rei81] mit dem Verfahren

der gekoppelten Kanäle mit molekularen Wellenfunktionen, die die Coulombpotentiale beider Kerne beinhalteten, gute Ergebnisse erzielen.

Rumrich et al. [Rum91, Rum93] verwendeten eine Entwicklung der Wellenfunktion nach Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns und führten damit Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle durch. Ein ähnliches Verfahren wurde auch von Momberger et al. [Mom90, Mom91] verwendet. Dabei unterscheiden sich die beiden Rechnungen jedoch hinsichtlich der Beschreibung des kontinuierlichen Spektrums. Im Rahmen dieser Rechnungen wurden Wahrscheinlichkeiten für die gebunden-freie Paarproduktion bei kleinen Stoßparametern gefunden, die bis zu zwei Größenordnungen über den Ergebnissen der ersten Bornschen Näherung liegen. In Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle mit sehr großen Basissätzen fanden Baltz et al. [Bal93, Bal94] jedoch einerseits, daß die Ergebnisse der Rechnung stark von der verwendeten Eichung für das elektromagnetische Potential des Projektilkerns abhängen, und andererseits, daß die zuvor von Momberger und Rumrich gefundenen starken Überhöhungen der Wahrscheinlichkeiten für die gebunden-freie Paarproduktion über die Resultate der Störungstheorie im Wesentlichen auf die verwendeten zu kleinen Basissätze und darauf, daß die Zeitentwicklung der Wellenfunktion über einen zu kleinen Zeitraum erstreckt wurde, zurückzuführen sind.

Mit einer Entwicklung nach Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen lassen sich Elektronen und Positronen mit einem asymptotisch guten Impuls nur durch die Überlagerung von vielen Wellenfunktionen mit gutem Drehimpuls konstruieren. Für hohe Stoßenergien werden aber auch Elektronen und Positronen mit großem linearen Impuls produziert. Ferner wird bei hohen Stoßenergien der Bereich der Stoßparameter, die zum Wirkungsquerschnitt beitragen, größer. Daraus folgt, daß man in einer Entwicklung nach Drehimpulseigenfunktionen sehr hohe Drehimpulse berücksichtigen muß, um eine Konvergenz der Entwicklung zu erhalten. Aus diesem Grunde wählte Hoffstadt [Hof93] eine Entwicklung nach freien Wellenpaketen für Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle in dem Koordinatensystem, in dem sich beide Stoßpartner mit entgegengesetzt gleicher Geschwindigkeit aufeinander zu bewegen (Equal-Speed-System). Ein Nachteil dieses Verfahrens besteht darin, daß die Basisentwicklung keine gebundenen Zustände enthält und man daher keine gebunden-freie Paarproduktion beschreiben kann. Tenzer [Ten99] erweiterte diesen Zugang durch die Hinzunahme von gebundenen Zuständen in der Basisentwicklung der Wellenfunktion.

Neben dem Verfahren der gekoppelten Kanäle, das auf einer Entwicklung der Wellenfunktion beruht, gibt es noch solche Verfahren, bei denen die zeitabhängige Dirac-Gleichung auf einem Gitter gelöst wird. Bottcher und Strayer [Bot85] behandelten die Paarproduktion in Stößen von Uran-Kernen mit einem Spline-Kollokationsverfahren. Thiel [Thi92] benutzte das Verfahren der finiten Differenzen zur Beschreibung von Elektron-Positron-Paarzeugung in Stößen von Uran-Kernen bei einer Energie von 10 GeV/Nukleon und für einen Stoßparameter  $b = 0$ . Bei diesem Stoßparameter liegt natürlich eine Symmetrie um die Ver-

bindungsachse zwischen den beiden Stoßpartnern vor, und man kann sich durch die Berücksichtigung dieser Symmetrie auf zwei Raumdimensionen beschränken. Um auch Wirkungsquerschnitte berechnen zu können, wurde das Verfahren von Busic [Bus00] auf drei Dimensionen erweitert. Bei den oben genannten Verfahren wird die zeitabhängige Dirac-Gleichung im Ortsraum gelöst. Eine Methode, bei der die Dirac-Gleichung im Impulsraum gelöst wird, wurde von Momberger et al. [Mom96] entwickelt und auf die Beschreibung verschiedener atomarer Prozesse in Stößen von  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei verschiedenen Stoßenergien angewandt.

Auf dem Gebiet der ultrarelativistischen Stöße wurden gerade in jüngster Zeit, ausgehend von der Arbeit von Baltz [Bal97], große Fortschritte erzielt. Es gelang ihm, im Grenzfall unendlich großer  $\gamma$ , also in dem Grenzfall, in dem sich der Projektilkern mit Lichtgeschwindigkeit bewegt, einen exakten Ausdruck für die Übergangsamplitude herzuleiten. Dieser Zugang wurde später auf die freie Paarproduktion, betrachtet im Equal-Speed-System, erweitert [Seg98, Eic99].

Experimente zur Elektron-Positron-Paarproduktion in relativistischen Stößen schwerer Ionen wurden von Belkacem et al. [Bel97] am BEVALAC durchgeführt. In einer Reihe von Experimenten untersuchte diese Gruppe sowohl die gebundenfreie als auch die freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+}$ - und  $La^{57+}$ -Ionen mit Targets aus Cu, Ag und Au bei verschiedenen Stoßenergien im Bereich von 405 MeV/Nukleon bis 1,3 GeV/Nukleon. Am AGS in Brookhaven wurden von Belkacem et al. [Bel98] Experimente zur Paarproduktion mit Einfang in Stößen von  $Au^{79+}$  mit Au, Ag und Cu bei einer Stoßenergie von 10,8 GeV/Nukleon durchgeführt. Neue Experimente bei noch höheren Stoßenergien stammen von Krause et al. [Kra01], die Paarproduktion mit Einfang und Ionisation in Stößen von  $Pb^{82+}$ - und  $Pb^{81+}$ -Ionen mit Ar, Kr und Xe bei einer Stoßenergie von 158 GeV/Nukleon am SPS-Beschleuniger des CERN untersuchten.

### 1.3 Motivation

Wegen der sehr starken elektromagnetischen Felder der schweren Ionen kann man nicht erwarten, daß eine störungstheoretische Beschreibung für Kollisionen zwischen hochgeladenen schweren Ionen gültig ist. Der Parameter  $\alpha Z$ , nach dem man im Rahmen der Störungstheorie entwickelt, beträgt für einen Uran-Kern zum Beispiel ungefähr 0,67. Man kann daher für solche Prozesse starke nichtstörungstheoretische Effekte erwarten. Wie bereits im letzten Abschnitt bemerkt wurde, können mit der Störungstheorie berechnete Übergangswahrscheinlichkeiten bei kleinen Stoßparametern und hohen Energien die Unitarität verletzen. Daraus folgt die Notwendigkeit, solche Stoßprozesse mit nichtstörungstheoretischen Verfahren zu beschreiben.

Im letzten Abschnitt wurden bereits verschiedene nichtstörungstheoretische Verfahren erwähnt, die bisher zur Beschreibung der Elektron-Positron-Paarerzeugung verwendet wurden. Dabei ist das Verfahren der gekoppelten Kanäle bislang



das einzige Verfahren, mit dem Wahrscheinlichkeiten sowohl für die freie als auch für die gebunden-freie Paarproduktion berechnet werden können. Eine Schwäche der bisher verwendeten Verfahren liegt aber darin, daß in den Basisfunktionen, die zur Entwicklung der Wellenfunktion benutzt wurden, entweder nur das Potential von einem der beiden Stoßpartner berücksichtigt wurde (das ist bei der Entwicklung der Wellenfunktion nach Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns der Fall [Mom90, Mom91, Rum91, Bal93, Bal94]), oder gar das elektromagnetische Potential *beider* Kerne als eine äußere Störung betrachtet wird, wie zum Beispiel bei der von Hoffstadt [Hof93] und später auch von Tenzer [Ten99] verwendeten Entwicklung nach freien Wellenfunktionen. Eine Ausnahme bilden hier die in den älteren Rechnungen der Frankfurter Gruppe [Rei81] verwendeten molekularen Wellenfunktionen. Diese lassen sich jedoch grundsätzlich nur für die Beschreibung von Stößen bei sehr niedrigen Energien verwenden, da diese Wellenfunktionen asymptotisch nicht in atomare Wellenfunktionen von sich bewegenden Kernen übergehen. Außerdem wurde bei diesen Rechnungen stets nur das skalare Potential  $\phi$  der Kerne berücksichtigt. Bei relativistischen Stößen, wo die Kerne sich mit Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit bewegen, ist das offensichtlich nicht mehr zulässig.

Es stellt sich die Frage, ob man nicht eine bessere Beschreibung erreichen kann, wenn man den Einfluß beider Kerne im Basissatz berücksichtigt. Aus diesem Grunde soll in dieser Arbeit eine Entwicklung nach einem Basissatz verwendet werden, der sowohl Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns als auch des Projektilkerns beinhaltet. Ein solcher Zugang wurde bereits von Toshima und Eichler [Tos88, Tos90a, Tos90b] für die Beschreibung von Anregung und Ladungstransfer in Stößen von  $U^{92+} + U^{91+}$  bei Stoßenergien von 500 MeV/Nukleon und 1 GeV/Nukleon verwendet. Dadurch läßt sich näherungsweise auch die Ausbildung molekularer Wellenfunktionen durch eine Linearkombination atomarer Orbitale während des Stoßprozesses beschreiben. Ferner bietet dieser Zugang den Vorteil, daß man auch Wahrscheinlichkeiten für den Ladungstransferprozeß berechnen kann. Außerdem kann man hoffen, daß die Konvergenz des Verfahrens im Vergleich zu den Rechnungen, bei denen eine Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen entweder nur um den Projektilkern oder nur um den Targetkern benutzt wird, verbessert wird. Man kann sich leicht vorstellen, daß eine Entwicklung nach Wellenfunktionen mit gutem Drehimpuls nur sehr schlecht konvergiert, wenn größere Teile der Wahrscheinlichkeit an dem Stoßpartner haften bleiben, dessen Einfluß in der Entwicklung nicht berücksichtigt wird.

An dieser Stelle sollte noch darauf hingewiesen werden, daß es eine zufriedenstellende Erklärung für die Ergebnisse der oben bereits erwähnten Experimente von Belkacem et al. [Bel97] bisher nicht gibt. Nichtstörungstheoretische Rechnungen zu diesen Experimenten gibt es von Momberger [Mom96] und Busic [Bus00]. Für die gebunden-freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+} + Au$  bei einer Stoßenergie von 960 MeV/Nukleon wurde im Experiment ein Wert von  $\sigma = 2,19 \pm 0,25b$  gemessen. Momberger et al. konnten in ihren Rechnungen

nur dann einen Wirkungsquerschnitt gewinnen, wenn sie bei großen Stoßparametern einen „numerischen Untergrund“ von den Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang abzogen. Da dieser Untergrund in der Größenordnung der Wahrscheinlichkeiten selber lag, ist der von ihnen angegebene Wert von  $\sigma = 2,33$  b für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des  $U^{92+}$ -Projektilions mit Vorsicht zu betrachten und die recht akzeptable Übereinstimmung mit dem gemessenen Wert nach Feststellung der Autoren eher zufällig. Der von Busic mit dem Verfahren der finiten Differenzen berechnete Wert von  $\sigma = 1,37$  b liegt deutlich unter dem gemessenen Wirkungsquerschnitt. Auch Busic stieß bei der Berechnung der Wirkungsquerschnitte auf Schwierigkeiten, und er mußte, um nicht Wirkungsquerschnitte zu erhalten, die Größenordnungen über den experimentellen Werten lagen, einen Untergrund von seinen Wahrscheinlichkeiten abziehen. In dieser Arbeit werden dieses und andere von Belkacem vermessene [Bel97] Stoßsysteme weiter untersucht werden.

## 1.4 Aufbau dieser Arbeit

In Kapitel 2 werden die grundlegenden Gleichungen, die für die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten und Wirkungsquerschnitten benötigt werden, zusammengestellt. Der Formalismus der gekoppelten Kanäle für die speziellen, hier gewählten Basisentwicklungen mit Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen von Projektil- und Targetkern wird in Kapitel 3 entwickelt. Die praktische Berechnung der benötigten Matrixelemente wird in Kapitel 4 diskutiert. In dem darauffolgenden fünften Kapitel werden die Ergebnisse von Rechnungen vorgestellt, die mit verschiedenen Basisentwicklungen durchgeführt wurden, die jedoch nur atomare Wellenfunktionen entweder um den Targetkern oder den Projektilkern enthalten. Dabei werden zunächst die Eigenschaften von Rechnungen im System des Projektilkerns mit einer Entwicklung um den Projektilkern und anschließend Rechnungen mit einer Entwicklung um den Projektilkern, jedoch berechnet im System des Targetkerns, besprochen. In Kapitel 6 werden dann schließlich die Rechnungen mit der vollen Zwei-Zentren-Entwicklung diskutiert. Die Ergebnisse der Rechnungen werden mit anderen theoretischen Resultaten und mit den Experimenten von Belkacem et al. [Bel97] verglichen.

In der gesamten Arbeit werden, wo es nicht anders vermerkt ist, natürliche Einheiten verwendet, das heißt:  $c = \hbar = m = 1$ . Weiterhin wird hier für die Comptonwellenlänge des Elektrons die Bezeichnung  $\lambda_c = \hbar/mc \approx 386$  fm verwendet.

# Kapitel 2

## Theoretische Grundlagen

### 2.1 Theoretische Beschreibung des Prozesses

Im folgenden wird der Stoß zwischen zwei hochgeladenen, schweren Ionen betrachtet. In sehr guter Näherung [Eic95] darf man für die Beschreibung atomphysikalischer Prozesse die Bewegung der Kerne und die von ihnen erzeugten elektromagnetischen Felder klassisch betrachten. Diese Näherung wird als die semiklassische Näherung bezeichnet. Für hohe Geschwindigkeiten der Stoßpartner darf man dabei die Ablenkung der Kerne von einer geraden Bahn vernachlässigen. Im System des Targetkerns erhält man damit für die Trajektorie des Projektilkerns  $\vec{R}_P(t) = b\vec{e}_x + vt\vec{e}_z$ , so daß die Kerne bei  $t = 0$  den kürzesten Abstand  $b$  zueinander einnehmen.

Die Beschreibung der Bewegung der Elektronen und Positronen muß natürlich quantenmechanisch erfolgen. Da die Stoßpartner hochgeladene Ionen sind, ist die Wechselwirkung zwischen den Leptonen viel kleiner als deren Wechselwirkung mit den Kernen. Wir vernachlässigen daher die Lepton-Lepton-Wechselwirkung. Die Erzeugung von Elektron-Positron-Paaren kann man als eine Anregung von

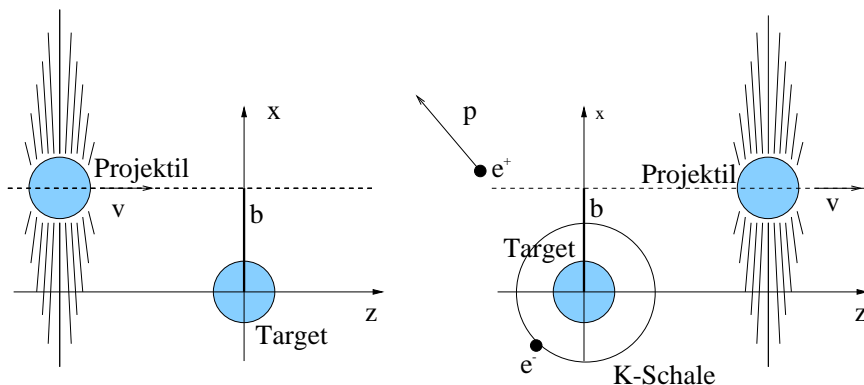


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Targetkerns im Stoß zweier nackter Kerne.

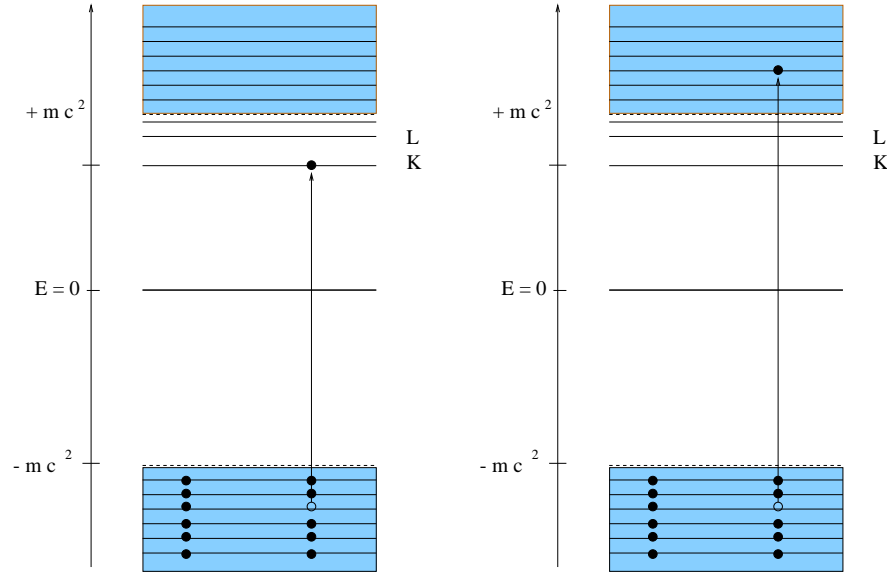


Abbildung 2.2: Elektron-Positron-Paarerzeugung als Anregung eines Elektrons mit negativer Energie aus dem vollbesetzten Dirac-See in einen Zustand mit positiver Energie. Links: Paarproduktion mit Einfang, rechts: Freie Paarproduktion.

Elektronen mit negativer Energie aus dem vollständig besetzten Dirac-See in Zustände mit positiver Energie betrachten (siehe Abbildung 2.2). Das dadurch entstandene Loch im Dirac-See wird als ein Positron interpretiert. Dabei entwickelt sich jedes einzelne Elektron unabhängig von den anderen in der Zeit, wenn man die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt. Die Dynamik der Elektronen wird dann beschrieben durch die zeitabhängige Dirac-Gleichung mit den Potentialen der stoßenden Kerne. Diese lautet im System des Targetkerns

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = [\vec{\alpha} \vec{p} + \beta + V_T + V_P] \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

mit den  $4 \times 4$ -Dirac-Matrizen

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

wobei  $\vec{\sigma}$  die Pauli-Spin-Matrizen bezeichnet. Im Ruhesystem des Targetkerns muß man hier für  $V_T$  das Coulombpotential des Targetkerns und für  $V_P$  das Liénard-Wiechert-Potential [Jac75] des sich bewegenden Projektilkerns einsetzen. Diese sind gegeben durch

$$V_T = -\frac{\alpha Z_T}{r} \quad (2.3)$$

$$V_P = -\frac{\gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z)}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2 (z-vt)^2}}, \quad (2.4)$$

wobei  $\alpha \approx 1/137,036$  die Feinstrukturkonstante und  $\gamma = (1 - v^2)^{-1/2}$  der Lorentzfaktor ist.  $Z_T$  und  $Z_P$  sind die Kernladungszahlen von Target- und Projektilkern. Im System des Projektilkerns erhält man eine analoge Gleichung, wenn man zunächst einen Lorentz-Boost auf das Ruhesystem des Projektilkerns und anschließend eine Rotation um  $180^\circ$  um die Achse, die senkrecht zur Stoßebene durch den Projektilkern verläuft, durchführt. Die entsprechende Dirac-Gleichung erhält man auch einfach durch die Ersetzung  $Z_T \rightarrow Z_P$  und  $Z_P \rightarrow Z_T$  in (2.1).

## 2.2 Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten

Der Anfangszustand vor dem Stoß, das physikalische Vakuum, ist gegeben durch den vollständig besetzten Dirac-See. Bei den Rechnungen in dieser Arbeit wird das kontinuierliche Spektrum diskretisiert, und nur Zustände mit Energien bis zu einem gewissen maximalen Energiebetrag werden berücksichtigt. Demzufolge wird das kontinuierliche Spektrum mit Hilfe einer endlichen Anzahl von Zuständen genähert. Der Anfangszustand enthält dann auch nur eine endliche Zahl von Elektronen, die die zur Verfügung stehenden Zustände mit negativer Energie auffüllen. Die  $N$ -Teilchen-Wellenfunktion für den Zustand kann dann in Form einer Slater-Determinante geschrieben werden:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1, t) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_1, t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\vec{r}_N, t) & \cdots & \psi_N(\vec{r}_N, t) \end{vmatrix}. \quad (2.5)$$

Dabei ist  $\psi_j(\vec{r}_i, t)$  die Wellenfunktion des  $i$ -ten Elektrons zum Zeitpunkt  $t$ , das ursprünglich den Zustand  $j$  besetzt hat. Die zeitliche Entwicklung der Einteilchen-Wellenfunktionen wird durch die zeitabhängige Dirac-Gleichung beschrieben. Dabei sollen die Einteilchen-Wellenfunktionen für Zeiten lange vor dem Stoß in Lösungen des „ungestörten“ Problems, wenn die Kerne weit voneinander entfernt sind, zu negativer Energie übergehen. Jede der Einteilchen-Wellenfunktionen in der Slater-Determinante (2.5) kann nun nach einem orthonormierten System von Basisfunktionen entwickelt werden gemäß

$$\psi_j(\vec{r}_i, t) = \sum_k a_{kj}(t) \phi_k(\vec{r}_i, t). \quad (2.6)$$

Dabei wählt man als Basisfunktionen am geschicktesten die oben erwähnten asymptotischen Lösungen der Dirac-Gleichung für den Fall, daß die Kerne weit voneinander entfernt sind. Dann läßt sich die Anfangsbedingung für die zeitabhängige Rechnung nämlich in der einfachen Form schreiben:

$$a_{kj}(t) \rightarrow \delta_{kj} \quad \text{für} \quad t \rightarrow -\infty. \quad (2.7)$$

Die Wahl der Basisfunktionen und die Konstruktion des Vakuums werden in Abschnitt 2.3 noch genauer diskutiert werden. Einsetzen der Entwicklung (2.6) in (2.5) ergibt

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{k_1, k_2, \dots, k_N} \begin{vmatrix} a_{k_1,1}(t) & \cdots & a_{k_1,N}(t) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k_N,1}(t) & \cdots & a_{k_N,N}(t) \end{vmatrix} \times \phi_{k_1}(\vec{r}_1, t) \cdots \phi_{k_N}(\vec{r}_N, t). \quad (2.8)$$

Sei nun  $|\phi_{j_1}, \dots, \phi_{j_N}\rangle$  ein  $N$ -Teilchenzustand, bei dem die Einteilchenzustände  $j_1, j_2, \dots, j_N$  besetzt sind. Die Amplitude  $\langle \phi_{j_1}, \dots, \phi_{j_N} | \Psi; t \rangle$  für einen Übergang in diesen Zustand ist dann

$$\langle \phi_{j_1} \phi_{j_2} \cdots | \Psi; t \rangle = \sum_{k_i} \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} a_{k_1,1}(t) & a_{k_1,2}(t) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k_n,1}(t) & a_{k_n,2}(t) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} \times [\delta_{j_1 k_1} \delta_{j_2 k_2} \cdots - \delta_{j_2 k_1} \delta_{j_1 k_2} \cdots + \cdots], \quad (2.9)$$

wobei die Orthogonalität der Einteilchen-Wellenfunktionen ausgenutzt wurde. Die Summe von Produkten von Kronecker-Symbolen in (2.9) enthält alle möglichen Permutationen der  $j_i$ . Eliminiert man die Summe über die  $k_i$  mit Hilfe der Kronecker- $\delta$ 's, dann erhält man eine Summe von Determinanten, die sich nur bezüglich des Vorzeichens und der Reihenfolge der Spalten unterscheiden. Tauscht man die Reihenfolge der Spalten in den einzelnen Termen der Summe so aus, daß alle Determinanten die gleiche Reihenfolge der Spalten haben, dann sieht man leicht, daß man eine Summe von  $N!$  gleichen Determinanten hat und die Übergangsamplitude geschrieben werden kann als

$$\langle \phi_{j_1} \phi_{j_2} \cdots \phi_{j_N} | \Psi; t \rangle = \begin{vmatrix} a_{j_1,1}(t) & \cdots & a_{j_1,N}(t) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{j_N,1}(t) & \cdots & a_{j_N,N}(t) \end{vmatrix}. \quad (2.10)$$

Mit Hilfe dieser Formel kann man gezielt die Wahrscheinlichkeit berechnen, das System nach dem Stoß in einem ganz bestimmten  $N$ -Teilchenzustand zu finden. Die Wahrscheinlichkeit  $P(i)$  dafür, daß ein gewisser Einteilchenzustand  $i$  besetzt ist, ergibt sich durch Summation über alle anderen Zustände

$$P(i) = \sum_{j_2, \dots, j_N} |\langle \phi_i \phi_{j_2} \phi_{j_2} \cdots \phi_{j_N} | \Psi; t \rangle|^2. \quad (2.11)$$

Dabei wird keine Rücksicht darauf genommen, welche anderen Zustände besetzt werden. Man sieht leicht, daß die Summe auf den einfachen Ausdruck führt:

$$P(i) = \sum_{E_j < 0} |a_{ij}|^2. \quad (2.12)$$

Die Summe läuft über alle Einteilchen-Zustände, die im Anfangszustand besetzt sind. Dabei muß man die Vollständigkeit des Systems von Basisfunktionen  $\phi_j(\vec{r}, t)$  sowie die Orthogonalität der nach der Zeit entwickelten anfänglich besetzten Einteilchenzustände benutzen. Man kann sich ebenfalls leicht klarmachen, daß man den Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten Paare erhält, wenn man  $P(i)$  über alle Zustände  $i$  mit  $E_i > 0$  summiert, also

$$\langle N_{e^+e^-} \rangle = \sum_{E_i > 0, E_j < 0} |a_{ij}|^2. \quad (2.13)$$

Dazu muß man sich nur überlegen, daß die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Zustand  $|\phi_k \phi_l \phi_{j_3} \phi_{j_4} \dots \phi_{j_N}\rangle$  besetzt wird, wobei die Zustände  $k$  und  $l$  Zustände mit positiver Energie und die Zustände  $j_i$  Zustände mit negativer Energie sind, in der Summe über die Zustände  $i$  in (2.13) genau zweimal vorkommt. Einmal ist diese Wahrscheinlichkeit nämlich in  $P(k)$  und noch einmal in  $P(l)$  enthalten. Entsprechend ist die Wahrscheinlichkeit  $P_n$  für die Erzeugung von  $n$  Paaren genau  $n$ -mal in der Summe enthalten und damit ist

$$\sum_{E_i > 0} P(i) = \sum_n n P_n = \langle N_{e^-e^+} \rangle. \quad (2.14)$$

Man kann dies auch noch etwas einfacher im Rahmen eines feldtheoretischen Zugangs zeigen [Eic95]. In der Regel ist die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von mehreren Paaren wesentlich kleiner als die für die Erzeugung eines einzigen Paares. Wenn man die Erzeugung von mehr als einem Paar vernachlässigen darf, dann ist der Erwartungswert für die Anzahl der Paare gleich der Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion. Wenn im folgenden von der Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion oder auch von der Anzahl der Paare die Rede sein wird, dann wird damit stets der Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten Paare gemeint sein, auch wenn diese Bezeichnung nicht ganz korrekt ist. Für die praktische Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion muss man jeden Zustand mit negativer Energie in der Zeit entwickeln und nach dem Stoß auf alle Zustände mit positiver Energie projizieren. Wirkungsquerschnitte berechnet man im Rahmen der semiklassischen Näherung durch Integration der stoßparameter-abhängigen Übergangswahrscheinlichkeiten  $P_{e^-e^+}(b)$  über den Stoßparameter  $b$ :

$$\sigma_{e^-e^+} = 2\pi \int_0^\infty db P_{e^-e^+}(b)b. \quad (2.15)$$

Um Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang zu berechnen, empfiehlt es sich, die Zeitumkehrsymmetrie der Übergangsamplituden auszunutzen [Bec83a]. Anstatt alle Zustände im negativen Kontinuum individuell nach der Zeit zu entwickeln, kann man auch einen gebundenen Zustand nehmen und diesen nach der Zeit entwickeln. Die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in diesen gebundenen Zustand erhält man dann, indem man den nach der

Zeit entwickelten anfänglich gebundenen Zustand auf alle Zustände mit negativer Energie projiziert. Da in der Regel der Einfang in die K-Schale dominant ist, genügt es, den  $1s_{1/2}$ -Zustand nach der Zeit zu entwickeln. Diese Vorgehensweise ist insbesondere bei Rechnungen, bei denen die zeitabhängige Wellengleichung direkt auf einem Gitter gelöst wird, von Vorteil; denn hier beansprucht die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion die gesamte Rechenzeit, und damit wird die Rechenzeit proportional zur Anzahl der Zustände, die man in der Zeit entwickeln muß. Für die in dieser Arbeit verwendete Methode der gekoppelten Kanäle ist dieser Vorteil aber weniger bedeutend, wie in Kapitel 3 noch gezeigt wird.

## 2.3 Die Wahl der Basisfunktionen

Im Stoß zweier Ionen ergibt sich ein Problem dadurch, daß die asymptotischen Lösungen der Dirac-Gleichung für das Zwei-Zentren-Coulomb-Problem analytisch nicht bekannt sind. Es stellt sich damit die Frage, auf welche Zustände man die Wellenfunktion nach der Zeitentwicklung projizieren muß, um die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion zu erhalten, und mit welchen Wellenfunktionen man das Vakuum, den Anfangszustand vor dem Stoß, konstruieren muß. Gleichbedeutend damit ist die Frage danach, welche Basis man für die Entwicklung der Einteilchen-Wellenfunktionen in (2.6) verwenden soll.

Tenzer [Ten99] führte Rechnungen in dem System durch, in dem sich beide Kerne mit entgegengesetzt gleichen Geschwindigkeiten aufeinander zu bewegen. Als asymptotische Zustände verwendete er freie Wellenpakete, die er durch Überlagerung von Wellenfunktionen freier Zustände konstruierte. Bei einer überwiegenden Mehrzahl der nichtstörungstheoretischen Verfahren [Mom91, Rum91, Bal93, Bal94, Mom96, Bus00] wurden aber Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen benutzt, die Lösungen der Dirac-Gleichung mit dem Coulomb-Potential des Targetkerns sind. Diese Verfahren haben den Vorteil, daß die Basiswellenfunktionen das Potential von einem der beiden Stoßpartner in allen Ordnungen enthalten. Der andere Stoßpartner wirkt als Störung. Man kann das Potential des Projektilkerns bei großen Abständen zwischen den beiden Kernen mit Hilfe einer Eichtransformation näherungsweise in den Wellenfunktionen berücksichtigen, wie in Abschnitt 3.4 gezeigt wird. Die so erhaltenen transformierten Zustände sind jedoch nur in einer Umgebung um das Targetion bessere asymptotische Wellenfunktionen, nicht aber im ganzen Raum.

Wie bereits weiter oben erwähnt, wird in den zeitabhängigen Rechnungen in dieser Arbeit das Kontinuum stets diskretisiert. Daraus ergibt sich das Problem, daß die Basis mit den Wellenfunktionen  $\phi_k(\vec{r}, t)$  in (2.6) nicht mehr vollständig ist und daher die Relation (2.6) nur noch näherungsweise gültig ist. Auf die Diskretisierung des kontinuierlichen Spektrums wird in Abschnitt 3.2 noch näher eingegangen werden. Bei den Rechnungen in dieser Arbeit wurden die Eigenschaften verschiedener Basisentwicklungen näher untersucht:



1. Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns werden als Basis und zur Konstruktion des Vakuums verwendet. Dieser Zugang wurde, wie bereits weiter oben bemerkt, auch in den meisten älteren Rechnungen für die Elektron-Positron-Paarproduktion mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle verwendet.
2. Die Lösungen der zeitabhängigen Dirac-Gleichung mit dem Potential des sich bewegenden Projektilkerns werden als Basis verwendet. Diese Basisfunktionen wandern mit dem Projektilkern durch den Raum. Man erhält die Basisfunktionen, indem man die Coulomb-Wellenfunktionen zunächst im Ruhesystem des Projektilkerns berechnet und dann eine Lorentz-Transformation auf das System des Targetkerns ausführt.
3. Eine Linearkombination aus Lösungen der Dirac-Gleichung mit dem Potential des Projektilkerns und Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns wird als Basissatz benutzt. In diesem Basissatz sind die Wellenfunktionen des Targetkerns nicht orthogonal zu denen des Projektilkerns. Wegen der Diskretisierung des kontinuierlichen Spektrums sind die entsprechenden Basisfunktionen nur auf ein endliches Gebiet ausgedehnt, und die Wellenfunktionen werden damit für große Abstände der Kerne orthogonal zueinander.

Ergebnisse von Rechnungen mit den oben beschriebenen verschiedenen Basisentwicklungen werden in den Kapiteln 5 und 6 diskutiert. Im folgenden werden die Basisentwicklungen 1. und 2., bei denen alle Basisfunktionen an einem Kern zentriert sind, unter dem Begriff Ein-Zentrum-Entwicklung zusammengefaßt. Entsprechend wird eine Basisentwicklung von der Form, wie unter 3. beschrieben, als Zwei-Zentren-Entwicklung bezeichnet.



# Kapitel 3

## Das Verfahren der gekoppelten Kanäle

### 3.1 Die gekoppelten Gleichungen

Im letzten Abschnitt wurde bereits auf verschiedene Basissätze eingegangen, die für eine Entwicklung der Einteilchen-Wellenfunktionen nach (2.6) verwendet werden können. Um den Formalismus möglichst allgemein zu halten, wird in diesem Abschnitt die Theorie für die Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle im Rahmen einer Entwicklung nach einem Basissatz entwickelt, der sowohl Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns als auch Lösungen der Dirac-Gleichung mit dem Potential des Projektilkerns enthält. Für die einfacheren Entwicklungen, bei denen nur Basisfunktionen benutzt werden, die entweder am Projektilkern oder am Targetkern zentriert sind, lassen sich die entsprechenden Gleichungen aus der allgemeineren Theorie sehr einfach entnehmen. Im System des Targetkerns kann man die Basisentwicklung schreiben als

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k(\vec{r}, t) + \sum_{k'} a_{k'}(t) S^{-1}(v) \psi_{k'}(\vec{r}', t'). \quad (3.1)$$

Dabei ist die erste Summe eine Entwicklung nach Basisfunktionen, die am Targetkern zentriert sind und die zweite Summe eine Entwicklung nach Basisfunktionen, die am Projektilkern zentriert sind. Im folgenden wird die Konvention verwendet, daß die Basisfunktionen, die am Projektilkern zentriert sind, durch einen gestrichelten Index gekennzeichnet werden, und Wellenfunktionen mit einem ungestrichelten Index sind am Target zentriert. Der Ansatz (3.1) wurde bereits von Toshima und Eichler [Tos88] für die Berechnung von Wirkungsquerschnitten für Anregung und Ladungstransfer in Stößen schwerer Ionen verwendet. Dabei benutzten sie eine Basis, die nur gebundene Zustände von Projektil und Target enthielt. Um Elektron-Positron-Paarerzeugung beschreiben zu können, müssen in der Basis natürlich auch Zustände des kontinuierlichen Spektrums berücksichtigt werden.

Man erhält die Wellenfunktionen am Projektilkern im Targetsystem, indem man die Wellenfunktionen im Ruhesystem des Projektilkerns bestimmt und dann einen Lorentz-Boost auf das System des Targetkerns durchführt, das sich mit der Geschwindigkeit  $-v\vec{e}_z$  gegen das System des Projektilkerns bewegt. Der Lorentz-Boost wird mit Hilfe des Boostoperators  $S^{-1}(v)$  ausgeführt, der gegeben ist durch [Eic95]

$$S^{-1}(v) = \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}(1 + \delta\alpha_z), \quad (3.2)$$

wobei

$$\delta = \sqrt{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}}. \quad (3.3)$$

Die Basisfunktionen, die um den Targetkern zentriert sind, sind Eigenfunktionen des Targetkern-Hamiltonoperators, und sie erfüllen daher die Dirac-Gleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_k(\vec{r}, t) = [\vec{\alpha}\vec{p} + \beta + V_T]\psi_k(\vec{r}, t). \quad (3.4)$$

Entsprechend erfüllen die Basisfunktionen am Projektilkern die Dirac-Gleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}S^{-1}(v)\psi_{k'}(\vec{r}', t') = [\vec{\alpha}\vec{p} + \beta + V_P]S^{-1}(v)\psi_{k'}(\vec{r}', t'), \quad (3.5)$$

wobei das Target- und das Projektilpotential  $V_T$  und  $V_P$  durch (2.3) und (2.4) gegeben sind. Für die Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen  $\psi(\vec{r})$  wird in dieser Arbeit die Schreibweise [Ros71]

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} g(r)\Omega_\kappa^\mu(\theta, \phi) \\ if(r)\Omega_{-\kappa}^\mu(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

verwendet. Dabei sind  $g(r)$  und  $f(r)$  die Radialfunktionen der großen und der kleinen Komponente und

$$\Omega_\kappa^\mu(\theta, \phi) = \sum_{m_l} \sum_{m_s} C(l\frac{1}{2}j; m_l m_s \mu) \chi_{\frac{1}{2}}^{m_s} Y_l^{m_l}(\theta, \phi). \quad (3.7)$$

Es gilt  $j = |\kappa| - \frac{1}{2}$ ,  $l = |\kappa|$ , wenn  $\kappa > 0$ , und  $l = |\kappa| - 1$  andernfalls. Weiter ist

$$\chi_{\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi_{\frac{1}{2}}^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Die radialen Wellenfunktionen  $g(r)$  und  $f(r)$  kann man dem Buch von Rose [Ros71] entnehmen. Einsetzen des Ansatzes (3.1) ergibt ein gekoppeltes System

von Differentialgleichungen für die Koeffizienten  $a_k(t)$  und  $a_{k'}(t)$ , das sich in der kompakten Form schreiben läßt:

$$i\hat{N}\frac{d\vec{a}(t)}{dt} = \hat{V}\vec{a}(t). \quad (3.9)$$

Dabei ist  $\vec{a} = (\dots, a_k, \dots, a_{k'}, \dots)$  ein Vektor, der die Besetzungsamplituden  $a_k(t)$  und  $a_{k'}(t)$  enthält. Die Matrizen  $\hat{N}$  und  $\hat{V}$  enthalten die Überlapp- und die Potentialmatrixelemente. Die Überlappmatrixelemente sind gegeben durch

$$N_{ik} = \int \psi_i^\dagger(\vec{r})\psi_k(\vec{r})d^3r e^{-i(E_k-E_i)t} \quad (3.10)$$

$$N_{ik'} = \int \psi_i^\dagger(\vec{r})S^{-1}(v)\psi_{k'}(\vec{r}')e^{iv\gamma E_{k'}z}d^3r e^{-i(\gamma E_{k'}-E_i)t} \quad (3.11)$$

$$N_{i'k} = \int \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}')S^{-1}(v)\psi_k(\vec{r})e^{-iv\gamma E_{i'}z}d^3r e^{-i(E_k-\gamma E_{i'})t} \quad (3.12)$$

$$N_{i'k'} = \int \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}')S^{-2}(v)\psi_{k'}(\vec{r}')e^{-iv\gamma(E_{i'}-E_{k'})z}d^3r e^{-i\gamma(E_k-E_i)t}, \quad (3.13)$$

und für die Wechselwirkungsmatrixelemente hat man

$$V_{ik} = - \int \psi_i^\dagger(\vec{r})\frac{\gamma\alpha Z_P(1-v\alpha_z)}{r'}\psi_k(\vec{r})d^3r e^{-i(E_k-E_i)t} \quad (3.14)$$

$$V_{ik'} = - \int \psi_i^\dagger(\vec{r})\frac{\alpha Z_T}{r}S^{-1}(v)\psi_{k'}(\vec{r}')e^{iv\gamma E_{k'}z}d^3r e^{-i(\gamma E_{k'}-E_i)t} \quad (3.15)$$

$$V_{i'k} = - \int \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}')e^{-iv\gamma E_{i'}z}S^{-1}(v)\frac{\gamma\alpha Z_P(1-v\alpha_z)}{r'}\psi_k(\vec{r})d^3r e^{-i(E_k-\gamma E_{i'})t} \quad (3.16)$$

$$V_{i'k'} = - \int \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}')S^{-2}(v)\frac{\alpha Z_T}{r}\psi_{k'}(\vec{r}')e^{-iv\gamma(E_{i'}-E_{k'})z}d^3r e^{-i\gamma(E_k-E_i)t}. \quad (3.17)$$

Dabei ist  $x' = x - b$ ,  $y' = y$  und  $z' = \gamma(z - vt)$ . Die Überlappmatrixelemente bilden offensichtlich eine hermitesche Matrix. Das gilt jedoch nicht für die Matrix  $\hat{V}$  der Wechselwirkungsmatrixelemente; denn die Matrixelemente  $V_{ik'}$  und  $V_{i'k}$  werden mit verschiedenen Potentialen berechnet. Sind die Basiswellenfunktionen im System des Targetkerns orthogonal, was zum Beispiel für die Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen der Fall ist, dann gilt außerdem  $N_{ik} = \delta_{ik}$ . Man beachte, daß die Orthogonalität der Wellenfunktionen bei einer Lorentz-Transformation im allgemeinen nur dann erhalten bleibt, wenn die Wellenfunktionen Lösungen der zeitabhängigen Dirac-Gleichung sind [Eic95]. Nur dann gilt also  $N_{i'k'} = \delta_{i'k'}$ . Die praktische Berechnung der Matrixelemente ist Gegenstand des Kapitels 4.

## 3.2 Diskretisierung des kontinuierlichen Spektrums

In der Entwicklung (3.1) der Wellenfunktion müssen auch Wellenfunktionen aus dem kontinuierlichen Spektrum berücksichtigt werden, da man ansonsten Prozesse wie die Elektron-Positron-Paarerzeugung, bei denen das Kontinuum eine besonders wichtige Rolle spielt, natürlich nicht beschreiben kann. Für eine korrekte Behandlung des kontinuierlichen Spektrums müßten neben den diskreten Summen in (3.1) über die gebundenen Zustände auch Integrale über die Energie  $E$  der Zustände des kontinuierlichen Spektrums, multipliziert mit einem Koeffizienten  $a_E(t)$ , der von dem kontinuierlichen Index  $E$  abhängt, mitgeführt werden. Für eine Behandlung der Dirac-Gleichung mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle empfiehlt es sich jedoch, das kontinuierliche Spektrum in geeigneter Weise zu diskretisieren. Die Diskretisierung wird durch die Konstruktion von Wellenpaketen erreicht, die eine Überlagerung von Wellenfunktionen des kontinuierlichen Spektrums darstellen. Hierbei unterscheidet man im wesentlichen zwei verschiedene Vorgehensweisen:

1. Die Weylschen Wellenpakete sind eine Überlagerung von zeitabhängigen Lösungen der Dirac-Gleichung:

$$\psi_E^{WP}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Delta E}} \int_{E-\Delta E/2}^{E+\Delta E/2} dE' \psi_{E'}(\vec{r}) e^{-iE't}. \quad (3.18)$$

Aufgrund der Linearität der Dirac-Gleichung sind die Weylschen Wellenpakete immer noch Lösungen der zeitabhängigen Dirac-Gleichung. Die Weylschen Wellenpakete bewegen sich im Raum. Für größer werdende Zeiten wandert das Maximum der Dichte zu größeren Radien  $r$ . Abbildung 3.1 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(r) = r^2(|g(r)|^2 + |f(r)|^2) \quad (3.19)$$

eines Weylschen Wellenpakets zu verschiedenen Zeitpunkten  $t$ . Deutlich ist zu erkennen, daß das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte für größer werdende Zeiten nach außen wandert.

2. Bei den stationären Wellenpaketen wird die zeitabhängige Exponentialfunktion aus dem Integral über die Energie herausgezogen, so daß

$$\psi_E^{SP}(\vec{r}, t) = \frac{e^{-iEt}}{\sqrt{\Delta E}} \int_{E-\Delta E/2}^{E+\Delta E/2} dE' \psi_{E'}(\vec{r}). \quad (3.20)$$

Man beachte, daß die stationären Wellenpakete weder Lösungen der zeitabhängigen noch der zeitunabhängigen Dirac-Gleichung sind. Das hat zur

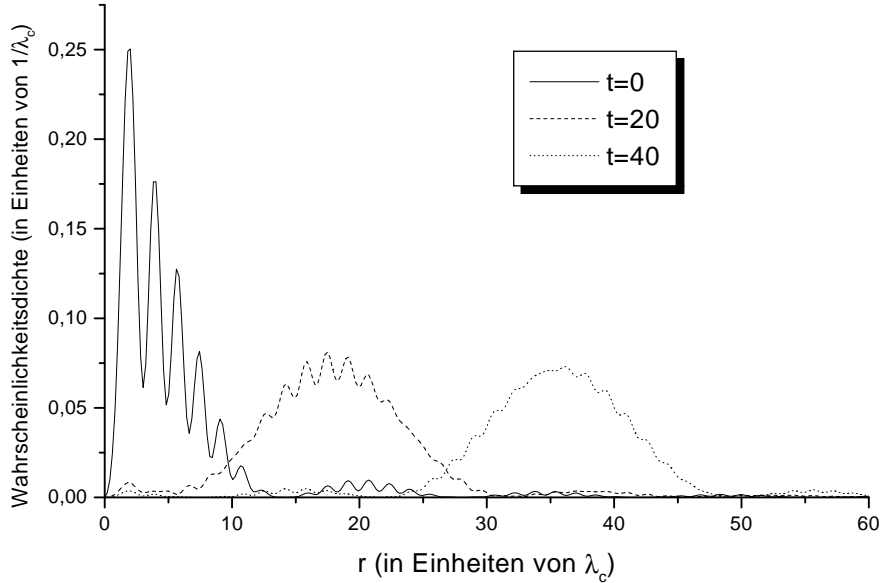


Abbildung 3.1: Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Weylsches Wellenpaket mit Drehimpuls  $\kappa = -1$  und mit der Energie  $E = -2.2mc^2$  und einer Breite  $\Delta E = 0.4mc^2$  bei einer Kernladung  $Z = 92$  für verschiedene Zeiten:  $t = 0\frac{\lambda_c}{c}$  (durchgezogen),  $t = 20\frac{\lambda_c}{c}$  (gestrichelt) und  $t = 40\frac{\lambda_c}{c}$  (gepunktet).

Folge, daß die stationären Wellenpakete nach Ausführung eines Lorentz-Boosts nicht mehr orthogonal zueinander sind. Anders als bei den Weylschen Wellenpaketen wandert die Dichte bei den stationären Wellenpaketen nicht nach außen, sondern ist im Raum fest und nach außen abfallend. Betrachtet man die stationären Wellenpakete als Näherungen zu den Weylschen Wellenpaketen, dann fällt auf, daß diese Näherung nur dann gut ist, wenn die zeitabhängige Exponentialfunktion im Integranden in (3.18) aus dem Integranden herausgezogen werden darf, wenn also die Phase  $E't$  sich im Bereich der Integration nicht merklich ändert, also  $\Delta Et \ll 2\pi$ .

Abbildung 3.2 zeigt die radialen Wellenfunktionen  $G(r) = rg(r)$  und  $F(r) = rf(r)$  der großen und kleinen Komponente eines stationären Wellenpakets. Deutlich erkennbar sind die schwebungsartigen Strukturen in der Wellenfunktion. Die Frequenz dieser Schwebungen ist proportional zu  $\Delta E$ .

Ohne eine Diskretisierung des kontinuierlichen Spektrums kann man die Wellenfunktion schreiben als

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k(\vec{r}, t) + \sum_l \int dE a_E^l(t) \psi_E^l(\vec{r}, t), \quad (3.21)$$

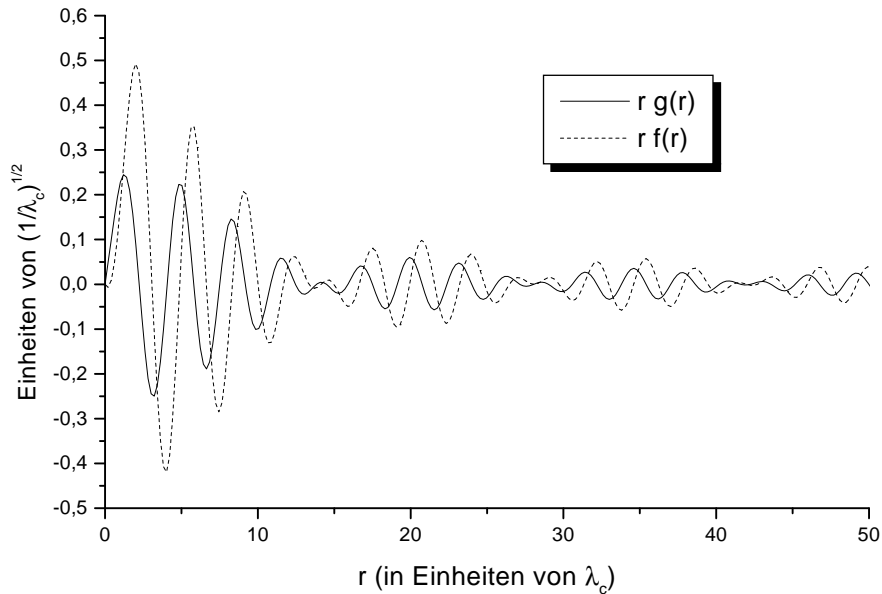


Abbildung 3.2: Radiale Wellenfunktion eines stationären Wellenpakets mit Drehimpuls  $\kappa = -1$  und mit der Energie  $E = -2.2mc^2$  und einer Breite  $\Delta E = 0.4mc^2$ . Die durchgezogene Kurve zeigt die Wellenfunktion der großen Komponente  $G(r)$  und die gestrichelte Kurve die Wellenfunktion der kleinen Komponente  $F(r)$ .

wobei  $\psi_k(\vec{r}, t)$  gebundene Wellenfunktionen und  $\psi_E^l(\vec{r}, t)$  die Wellenfunktionen des kontinuierlichen Spektrums sind. Der Index  $l$  steht hier für die Drehimpulsquantenzahlen der Kontinuumswellenfunktionen. Nimmt man nun an, daß  $a_E^l(t)$  auf Bereichen der Breite  $\Delta E$  näherungsweise konstant ist, dann darf man  $a_E^l(t)$  vor das Integral ziehen und man erhält

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k(\vec{r}, t) + \sum_l \sum_j a_{E_j}^l(t) \psi_{E_j}^{l WP}(\vec{r}, t). \quad (3.22)$$

Dabei ist  $\psi_{E_j}^{l WP}(\vec{r}, t)$  ein Weylsches Wellenpaket. Man sieht also, daß die Weylschen Wellenpakete als Näherung für das kontinuierliche Spektrum verwendet werden dürfen, wenn die Entwicklungskoeffizienten  $a_E^l(t)$  über Bereiche der Breite  $\Delta E$ , die der Breite der Wellenpakete entsprechen, näherungsweise konstant sind. Will man stationäre Wellenpakete verwenden, dann muß, wie bereits weiter oben bemerkt wurde, zusätzlich die Voraussetzung  $\Delta E t \ll 2\pi$  erfüllt sein. Die stationären Wellenpakete sind daher in ihrer Anwendung weiter eingeschränkt als die Weylschen Wellenpakete. Leider erweist sich die Verwendung der Weylschen Wellenpakete aber als zu aufwendig, da sie für alle Zeiten  $t$  neu berechnet werden müssen. Dahingegen genügt es, die stationären Wellenpakete ein einziges Mal für alle Zeiten  $t$  zu berechnen. Auch gibt es für die Wellenpakete, die



durch Überlagerung von Dirac-Coulomb-Wellenfunktionen berechnet werden, keine analytischen Formeln. Das Integral über die Energie zur Bildung der Pakete muß also numerisch berechnet werden. Obwohl die stationären Wellenpakete keine Eigenfunktionen des Coulomb-Dirac-Hamiltonoperators sind, ist die Matrixdarstellung dieses Hamiltonoperators bezüglich einer Basis diagonal, die aus gebundenen Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen und stationären Wellenpaketen besteht. Das Matrixelement des Hamiltonoperators zwischen zwei stationären Wellenpaketen ist nämlich

$$\begin{aligned}
& \langle \psi_{E_f}^{SP} | H_{CD} | \psi_{E_i}^{SP} \rangle \\
&= \frac{1}{\Delta E} \int_{E_i - \Delta E/2}^{E_i + \Delta E/2} dE' \int_{E_f - \Delta E/2}^{E_f + \Delta E/2} dE'' \int d^3r \psi_{E'}^\dagger(\vec{r}) H_{CD} \psi_{E''}(\vec{r}) \\
&= \frac{1}{\Delta E} \int_{E_i - \Delta E/2}^{E_i + \Delta E/2} dE' \int_{E_f - \Delta E/2}^{E_f + \Delta E/2} dE'' E'' \delta(E' - E'') \\
&= \frac{1}{\Delta E} \int_{E_i - \Delta E/2}^{E_i + \Delta E/2} dE' E' \delta_{E_i E_f} = E_i \delta_{E_i E_f}. \tag{3.23}
\end{aligned}$$

Der Einfachheit halber wurde hier vorausgesetzt, dass die Wellenpakete alle die gleiche Breite  $\Delta E$  haben.

### 3.3 Störungstheorie

Der Zeitentwicklungsoperator  $U_I(\tau, \tau_0)$  im Wechselwirkungsbild läßt sich in Form der Dyson-Entwicklung schreiben als [Sch61]

$$U_I(\tau, \tau_0) = 1 - i \int_{\tau_0}^{\tau} dt_1 V_I(t_1) + (-i)^2 \int_{\tau_0}^{\tau} dt_1 \int_{\tau_0}^{t_1} dt_2 V_I(t_1) V_I(t_2) + \dots, \tag{3.24}$$

wobei  $V_I(t)$  die Störung im Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild) ist. Damit ergibt sich für die Amplitude für einen Übergang von einem Zustand  $i$  nach einem Zustand  $f$  in der ersten Ordnung der Störungstheorie

$$A_{fi} = \delta_{fi} - i \int d^4x \psi_f^\dagger(\vec{r}) V(t) \psi_i(\vec{r}) e^{-i(E_i - E_f)t}. \tag{3.25}$$

Bekanntlich lassen sich die störungstheoretischen Amplituden auch aus den gekoppelten Gleichungen herleiten. Dazu betrachten wir die gekoppelten Gleichungen im Rahmen einer Entwicklung, die nur Basisfunktionen um den Targetkern enthält:

$$i \frac{d}{dt} a_f(t) = \sum_k V_{fk}(t) a_k(t). \tag{3.26}$$

Unter der Annahme, daß

$$a_i(t) = 1 \quad (3.27)$$

$$a_k(t) = 0 \quad \text{für } k \neq f. \quad (3.28)$$

erhält man  $a_f(t \rightarrow \infty) = A_{fi}$ . Im Gegensatz zur Theorie der gekoppelten Kanäle ergibt die Störungstheorie Amplituden, die in jeder Ordnung invariant unter Lorentztransformationen und Eichtransformationen des elektromagnetischen Feldes sind [Moh98].

Mit dem Liénard-Wiechert-Potential des Projektilkerns läßt sich die Übergangsamplitude nun schreiben als

$$A_{fi} = i \int d^4x \psi_f^\dagger(\vec{r}) \frac{\gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z)}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2}} \psi_i(\vec{r}) e^{-i(E_i - E_f)t}. \quad (3.29)$$

Dabei sind  $\psi_f^\dagger(\vec{r})$  und  $\psi_i(\vec{r})$  verschiedene stationäre Lösungen der Dirac-Gleichung mit dem Potential des Targetkerns. Numerische Rechnungen im Rahmen der Störungstheorie werden am geschicktesten durch Fourier-Transformation des Potentials und Integration über den Impulsübertrag durchgeführt. Dann läßt sich nämlich auch die Integration über den Stoßparameter analytisch ausführen [Eic95]. Wir benötigen jedoch auch die stoßparameterabhängigen Wahrscheinlichkeiten  $P(b)$ , damit diese mit den Ergebnissen der nichtstörungstheoretischen Rechnung mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle verglichen werden können. Der Ausdruck (3.29) läßt sich aber auch dann weiter vereinfachen. Man kann die Integration über die Zeit nämlich analytisch ausführen unter Benutzung der folgenden Darstellung der modifizierten Besselfunktion  $K_0(x)$  [Abr72]

$$K_0(a) = \int_0^{+\infty} dx \frac{\cos(ax)}{\sqrt{x^2 + 1}}. \quad (3.30)$$

Damit hat man dann

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-i(E_i - E_f)t}}{\sqrt{a^2 + \gamma^2(vt - z)^2}} &= \frac{1}{\gamma v} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{e^{-i \frac{(E_i - E_f)}{v} z} e^{-i(E_i - E_f) \frac{u}{\gamma v}}}{\sqrt{a^2 + u^2}} \\ &= e^{iq_0 z} \frac{1}{\gamma v} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{e^{-i(E_i - E_f) \frac{|a|w}{\gamma v}}}{\sqrt{1 + w^2}} = 2 \frac{e^{iq_0 z}}{\gamma v} K_0 \left( \frac{|q_0 a|}{\gamma} \right) \end{aligned} \quad (3.31)$$

mit den Abkürzungen  $a = \sqrt{(x-b)^2 + y^2}$  und  $q_0 = (E_f - E_i)/v$ . Die Übergangsamplitude in der ersten Ordnung der Störungstheorie läßt sich dann schreiben als

$$A_{fi} = 2i \frac{\alpha Z_P}{v} \int d^3r \psi_f^\dagger(\vec{r}) (1 - v \alpha_z) e^{iq_0 z} K_0 \left( \frac{q_0}{\gamma} \sqrt{(x-b)^2 + y^2} \right) \psi_i(\vec{r}). \quad (3.32)$$

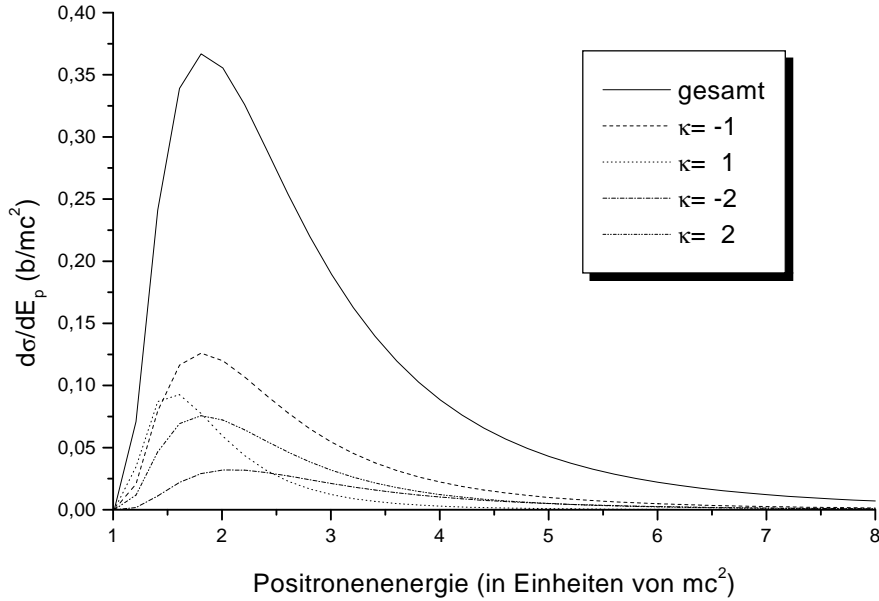


Abbildung 3.3: Differentieller Wirkungsquerschnitt für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektilions im Stoß von  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon in Abhängigkeit von der Energie des erzeugten Positrons für verschiedene Partialwellen mit Drehimpulsen  $\kappa$ . Die durchgezogene Linie zeigt den differentiellen Wirkungsquerschnitt (summiert über Partialwellen mit  $|\kappa| \leq 6$ ). Die anderen Linien zeigen partielle differentielle Wirkungsquerschnitte für verschiedene Drehimpulse. Über die magnetischen Quantenzahlen summiert.

Dieser Ausdruck kann nun zur Berechnung von differentiellen Wirkungsquerschnitten gemäß der Formel

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{dE} = 2\pi \int_0^\infty |A_{fi}|^2 b db \quad (3.33)$$

herangezogen werden. Abbildung 3.3 zeigt den differentiellen Wirkungsquerschnitt  $d\sigma/dE_p$  für die Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektils in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon in Abhängigkeit von der Energie des erzeugten Positrons. Die Abbildung zeigt die partiellen differentielle Wirkungsquerschnitte für Kontinuumszustände mit Drehimpulsen  $\kappa = -1, \kappa = 1, \kappa = -2, \kappa = 2$  und den gesamten differentiellen Wirkungsquerschnitt, der durch Summation über Drehimpulse bis zu  $|\kappa|_{max} = 6$  erhalten wurde. Man erkennt ein Maximum des Wirkungsquerschnitts bei einer Positronenenergie zwischen  $1,5 mc^2$  und  $2 mc^2$ . Für die höheren Drehimpulse  $|\kappa| = 2$  liegt das Maximum des partiellen differentielle Wirkungsquerschnitts bei

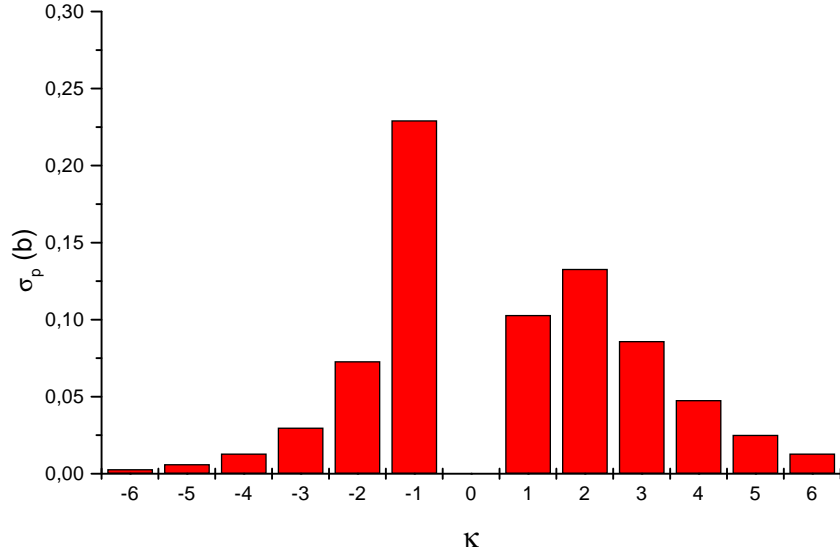


Abbildung 3.4: Partieller Wirkungsquerschnitt für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektilions im Stoß von  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon für verschiedene Partialwellen mit Drehimpuls  $\kappa$ .

etwas größeren Energien als bei den niedrigsten Drehimpulsen. Aus der Abbildung wird auch erkennbar, daß Positronenenergien bis etwa  $E_p = 8mc^2$  ausreichend sind, um totale Wirkungsquerschnitte zu bestimmen. Durch Integration über die Positronenenergie erhält man einen Wirkungsquerschnitt von  $\sigma = 0,76$  b in guter Übereinstimmung mit dem von Busic [Bus00] berechneten Wert von  $\sigma = 0,7$  b. In dem bereits erwähnten Experiment von Belkacem et al. [Bel97] wurde aber ein Wirkungsquerschnitt von  $\sigma = 2,19 \pm 0,25$  b gemessen. Dieses Experiment liefert damit einen deutlichen Hinweis auf starke nichtstörungstheoretische Effekte. Abbildung 3.4 zeigt die partiellen Wirkungsquerschnitte für Drehimpulse des Kontinuumszustandes bis zu  $|\kappa|_{max} = 6$ . Man erkennt, daß Zustände mit einem Drehimpuls  $\kappa = -1$  den größten Beitrag zum Wirkungsquerschnitt ergeben. Etwas überraschend ist die Tatsache, daß der partielle Wirkungsquerschnitt für den Drehimpuls  $\kappa = 2$  größer ist als der für den Drehimpuls  $\kappa = 1$ . Für Drehimpulse  $|\kappa| \geq 3$  findet man, daß die partiellen Wirkungsquerschnitte zum jeweils nächsthöheren Drehimpuls  $|\kappa| + 1$  mit einem Faktor  $1/2$  abfallen. Extrapoliert man diese Relation zu noch größeren Drehimpulsen  $|\kappa| > 6$ , dann findet man, daß bereits 98% des Gesamtwirkungsquerschnitts auf die Drehimpulse mit  $|\kappa| \leq 6$  fallen. Die hier dargestellten störungstheoretischen Resultate kann man nun als Anhaltspunkt für nichtstörungstheoretische Untersuchungen nehmen und damit den relevanten Bereich der Energien, Drehimpulse und Stoßparameter abschätzen,

die zum Wirkungsquerschnitt einen Beitrag liefern. Dabei muß jedoch beachtet werden, daß man in einer zeitabhängigen Rechnung nicht nur jene Zustände berücksichtigen muß, die nach dem Stoß einen Beitrag zum Wirkungsquerschnitt liefern, sondern vielmehr all jene Zustände, die zu irgendwelchen Zeiten während des Stoßprozesses merklich besetzt werden. Da man sich bei den Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle auf kleine Basissätze beschränken muß, kann man die störungstheoretischen Resultate verwenden, um die Wahrscheinlichkeiten für einen Übergang in jene Endzustände zumindest näherungsweise zu berechnen, die in der Basis nicht enthalten sind.

### 3.4 Coulomb-Randbedingungen

Für große Zeiten  $t$  fällt das Liénard-Wiechert-Potential des Projektilkerns am Ort des Targetkerns nur mit  $\frac{1}{t}$  ab. Dieser langsame Abfall der Potentialstärke spiegelt sich auch in den Wechselwirkungsmatrixelementen wider, so daß wir erwarten müssen, daß sich die Amplituden auch für große Zeiten noch recht stark verändern und die im Rahmen des Verfahrens der gekoppelten Kanäle berechneten Übergangswahrscheinlichkeiten nur langsam stationäre Werte annehmen. Daher wäre es natürlich wünschenswert, wenn die Langreichweitigkeit der Wechselwirkung beseitigt werden könnte. Einen Weg, das zu erreichen, haben Toshima und Eichler [Tos90b] vorgeschlagen. Betrachten wir dazu zunächst die Lösungen  $\psi_T(\vec{r}, t)$  der Dirac-Gleichung mit dem Potential des Targetkerns im System des Targetkerns. Multipliziert man diese mit dem Phasenfaktor  $e^{-i\nu_P \ln(R'-vt')}$ , wobei  $\nu_P = \alpha Z_P/v$ ,  $R' = \sqrt{b^2 + v^2 t'^2}$  und  $t' = \gamma(t - vz)$ , dann erfüllt die neue Wellenfunktion

$$\psi'_T(\vec{r}, t) = \psi_T(\vec{r}, t) e^{-i\nu_P \ln(R'-vt')} \quad (3.34)$$

die Dirac-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi'_T(\vec{r}, t) = \left[ \vec{\alpha} \vec{p} + \beta - \frac{Z_T \alpha}{r} - \frac{\gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z)}{\sqrt{b^2 + v^2 t'^2}} \right] \psi'_T(\vec{r}, t). \quad (3.35)$$

Im Vergleich zur Dirac-Gleichung, die von der Coulomb-Dirac-Wellenfunktion  $\psi_T(\vec{r}, t)$  erfüllt wird, enthält (3.35) einen zusätzlichen Potentialterm

$$V_T^{CB} = - \frac{\gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z)}{\sqrt{b^2 + v^2 t'^2}}. \quad (3.36)$$

Am Ort des Targetkerns, dem Ursprung des Koordinatensystems, ist dieses Potential exakt gleich dem Liénard-Wiechert-Potential, das durch den Projektilkern verursacht wird. Toshima und Eichler haben gezeigt, daß das zusätzliche Potential  $V_T^{CB}$  gerade den ersten Term einer Entwicklung des Projektilkernpotentials nach dem internuklearen Abstand  $R' = \sqrt{b^2 + v^2 t'^2}$  darstellt. Die transformierte

Wellenfunktion  $\psi'_T(\vec{r}, t)$  berücksichtigt also einen Teil des Projektilkernpotentials. Für große Zeiten kann man in der Umgebung des Targetkerns die Terme höherer Ordnung in der Entwicklung des Liénard-Wiechert-Potentials nach  $R'$  vernachlässigen. Demnach stellt die transformierte Wellenfunktion eine asymptotische Lösung der Dirac-Gleichung mit den Potentialen der beiden Streupartner im System des Targetkerns dar. Eine ähnliche Untersuchung kann man auch für die asymptotischen Zustände des Projektilkerns durchführen. Wenn  $\psi_P(\vec{r}, t)$  eine Coulomb-Dirac-Wellenfunktion des Projektilkerns im Ruhesystem des Projektilkerns darstellt, dann erhält man die entsprechende Lösung im System des Targetkerns durch Anwendung des Lorentz-Boost-Operators  $S^{-1}(v)$ . Multipliziert man diese geboostete Wellenfunktion mit dem Phasenfaktor  $e^{i\nu_T \ln(R+vt)}$ , dann erfüllt die transformierte Wellenfunktion

$$\psi'_P(\vec{r}, t) = e^{i\nu_T \ln(R+vt)} S^{-1}(v) \psi_P(\vec{r}, t) \quad (3.37)$$

die Dirac-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi'_P(\vec{r}, t) = \left[ \vec{\alpha} \vec{p} + \beta - \frac{Z_T \alpha}{R} - \gamma(1 - v\alpha_z) \frac{\alpha Z_P}{r'_P} \right] \psi'_P(\vec{r}, t), \quad (3.38)$$

wobei  $r'_P = \sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2}$  und  $R = \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$ . Hier erhält man also das zusätzliche Potential

$$V_P^{CB} = -\frac{\alpha Z_T}{R}. \quad (3.39)$$

Am Ort des Projektilkerns  $\vec{r}_P = (b, 0, vt)$  ist dieses Potential gleich dem durch den Targetkern verursachten Coulombpotential. Ähnlich wie im Fall der Targetzustände stellt die transformierte Wellenfunktion für große Zeiten wieder eine asymptotische Lösung der vollen Dirac-Gleichung mit den Potentialen der beiden Kerne dar. Man beachte, daß im Falle der Projektilzustände das zusätzliche Potential  $V_P^{CB}$  nicht vom Ort abhängig ist. Diese Tatsache ist, wie in Abschnitt 5.2 noch gezeigt wird, von großer Bedeutung. Da die oben gemachten Aussagen sich jeweils auf Umgebungen des Target- bzw. des Projektilkerns beziehen, sollten die oben beschriebenen asymptotischen Lösungen nur für Elektronen, die sich für große Zeiten in der Umgebung eines Kerns befinden, gültig sein. Damit sollten sich diese Zustände insbesondere zur Beschreibung von Anregungs- und Transferprozessen eignen.

In numerischen Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle konnten Toshima und Eichler [Tos90b] zeigen, daß mit dieser Methode berechnete Wahrscheinlichkeiten für Anregung und für den Ladungstransfer in Stößen zwischen zwei  $U^{92+}$ -Ionen bei 500 MeV/Nukleon schneller stationär werden, wenn man Coulomb-Randbedingungen verwendet, das heißt, wenn man anstatt der Entwicklung (3.1) nach atomaren Wellenfunktionen die asymptotischen Wellenfunktionen als Basisfunktionen verwendet. Außerdem fanden sie, daß die Wahr-

scheinlichkeiten für Ladungstransfer und Anregung über einen sehr langen Zeitraum vor der nächsten Annäherung der beiden Kerne praktisch gleich null bleiben und sich erst bei relativ kleinem Abstand der Kerne zu verändern beginnen. Die Folge ist, daß man die Rechnungen auf einen kleineren Zeitraum begrenzen kann. Leider gehen durch die Anwendung der Coulomb-Randbedingungen Symmetrien verloren und die Berechnung der Matrixelemente nimmt daher mehr Zeit in Anspruch. Basic [Bus00] fand, daß Coulomb-Randbedingungen auch für den Prozeß der gebunden-freien Paarproduktion von Bedeutung sind. Im Rahmen von Rechnungen mit dem Verfahren der Finiten Elemente zeigte er, daß die oben gemachten Aussagen über das Verhalten von Wahrscheinlichkeiten für Anregung und Ladungstransfer auch bei der Paarproduktion mit Einfang Gültigkeit besitzen. Die Verwendung von Coulomb-Randbedingungen führt auch hier zu Wahrscheinlichkeiten, die schneller stationär werden.

Es soll noch bemerkt werden, daß die Multiplikation der Wellenfunktion mit einem Phasenfaktor eine Eichtransformation darstellt. Daraus folgt sofort, daß Wahrscheinlichkeiten, die mit der Störungstheorie in erster Ordnung berechnet werden, unabhängig davon sind, ob Coulomb-Randbedingungen verwendet werden oder nicht, da die Störungstheorie invariant unter Eichtransformationen ist [Eic95]. Das gilt jedoch im allgemeinen nicht mehr für Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle.





# Kapitel 4

## Berechnung der Matrixelemente

### 4.1 Target-Target-Matrixelemente

Die Target-Target-Matrixelemente (3.14) (Matrixelemente des Projektilkernpotentials zwischen zwei Basisfunktionen, die am Target zentriert sind) werden am besten mit Hilfe einer Multipolentwicklung des Liénard-Wiechert-Potentials des Projektilkerns berechnet. Dazu schreibt man

$$\begin{aligned} V_P &= \frac{-\gamma\alpha Z_P(1 - v\alpha_z)}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2}} \\ &= -\gamma\alpha Z_P(1 - v\alpha_z) \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L M_L^M(r, t) Y_L^M(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Auf die Berechnung der Multipolmomente  $M_L^M(r, t)$  des Projektilpotentials wird in Anhang A genauer eingegangen. Das Matrixelement (3.14) wird damit zu

$$\begin{aligned} V_{ik} &= - \int \psi_i^\dagger(\vec{r}) \frac{\gamma\alpha Z_P(1 - v\alpha_z)}{r'} \psi_k(\vec{r}) d^3r e^{-i(E_k - E_i)t} \\ &= -\gamma\alpha Z_P \left[ \sum_L \langle \kappa_i m_i | Y_L^M | \kappa_k m_k \rangle F_{ik}^1 \right. \\ &\quad \left. - i v (\langle \kappa_i m_i | \sigma_z Y_L^M | -\kappa_k m_k \rangle F_{ik}^2 - \langle -\kappa_i m_i | \sigma_z Y_L^M | \kappa_k m_k \rangle F_{ki}^2) \right] e^{-i(E_k - E_i)t}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Dabei ist

$$F_{ik}^1 = \int_0^\infty dr r^2 (g_i(r)g_k(r) + f_i(r)f_k(r)) M_L^M(r, t) \quad (4.3)$$

$$F_{ik}^2 = \int_0^\infty dr r^2 g_i(r)f_k(r) M_L^M(r, t). \quad (4.4)$$

Die winkelabhängigen Teile des Matrixelements lassen sich analytisch berechnen. Dazu verwendet man die Beziehung [Bri68]

$$\langle l\ 1/2\ j || C_k || l'\ 1/2\ j' \rangle = (-1)^{j-k-1/2} \sqrt{\frac{2j'+1}{2k+1}} C(jj'k; \frac{1}{2} - \frac{1}{2}0), \quad (4.5)$$

wobei

$$C_k^q(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} Y_k^q(\theta, \phi). \quad (4.6)$$

Damit ergibt sich schließlich unter Ausnutzung des Wigner-Eckart-Theorems

$$\langle \kappa_i m_i | Y_L^M | \kappa_k m_k \rangle = (-1)^{j_i-L-1/2} \sqrt{\frac{2j_k+1}{4\pi}} C(j_i j_k L; \frac{1}{2} - \frac{1}{2}0) C(j_k L j_i; m_k M m_i). \quad (4.7)$$

Weiter hat man

$$\begin{aligned} \langle \kappa_i m_i | \sigma_z Y_L^M | \kappa_k m_k \rangle &= \int d\Omega \Omega_{\kappa_i}^{m_i \dagger} \sigma_z Y_L^M \Omega_{\kappa_k}^{m_k} \\ &= \sum_{m_k} \sum_{m_i} \sum_{m_s} 2m_s C(l_k \frac{1}{2} j_k; m_k m_s m_k) C(l_i \frac{1}{2} j_i; m_i m_s m_i) \int d\Omega Y_{l_i}^{m_i *} Y_L^M Y_{l_k}^{m_k}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die verbleibende Integration über die Winkel  $\theta$  und  $\phi$  kann nun analytisch ausgeführt werden unter Benutzung von [Sak94]

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) Y_{l_3}^{m_3 *}(\Omega) \\ = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}} C(l_1 l_2 l_3; m_1 m_2 m_3) C(l_1 l_2 l_3; 000), \end{aligned} \quad (4.9)$$

und man erhält damit

$$\begin{aligned} \langle \kappa_i m_i | \sigma_z Y_L^M | \kappa_k m_k \rangle &= \sum_{m_k} \sum_{m_i} \sum_{m_s} 2m_s C(l_k \frac{1}{2} j_k; m_k m_s m_k) C(l_i \frac{1}{2} j_i; m_i m_s m_i) \\ &\times \sqrt{\frac{(2l_k+1)(2L+1)}{4\pi(2l_i+1)}} C(l_k L l_i; m_k M m_i) C(l_k L l_i; 000). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Die Summationen über die magnetischen Quantenzahlen können auch analytisch mit Hilfe von Racah-Algebra ausgeführt werden. Da die dafür benötigte Rechenzeit verhältnismäßig kurz ist, werden diese Summationen bei den Rechnungen

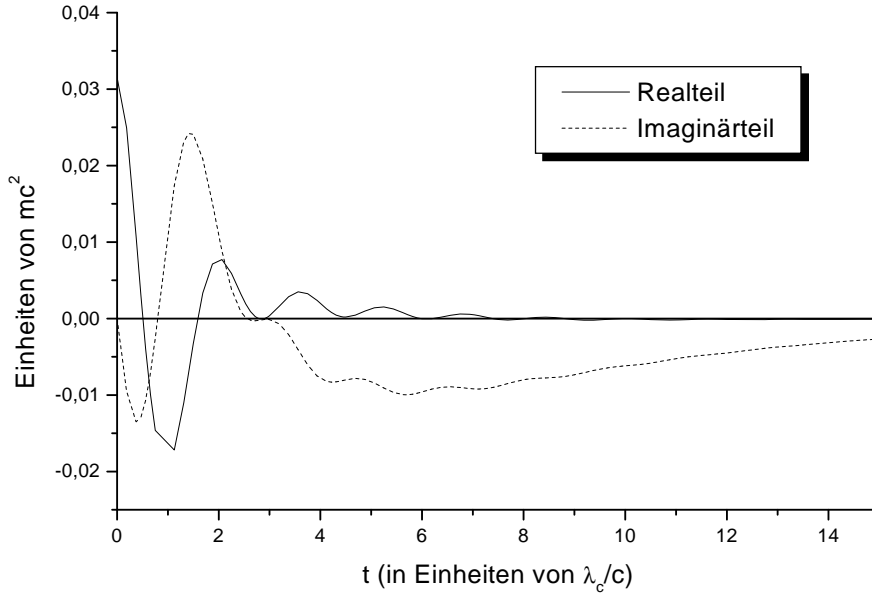


Abbildung 4.1: Wechselwirkungsmatrixelement  $\tilde{V}_{ik} = V_{ik}e^{-i(E_i-E_k)t}$  zwischen zwei Kontinuumszuständen des  $U^{92+}$  mit den Energien  $E_i = -2.5mc^2$  und  $E_k = 2.5mc^2$ ,  $\kappa_i = \kappa_k = -1$  und  $m_i = m_k = \frac{1}{2}$  in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  für einen Stoßparameter  $b = 0,125\lambda_c, \gamma = 2$  und für  $\alpha Z_P = 1$ . Die gestrichelte Linie zeigt den Imaginärteil, die durchgezogene den Realteil des Matrixelements.

in dieser Arbeit aber explizit ausgeführt. Man beachte, daß mit Hilfe der Multipolentwicklung die dreidimensionale Integration (3.14) auf eine eindimensionale reduziert werden konnte. Die verbleibende Integration über  $r$  wird numerisch mit Hilfe eines adaptiven Gauss-Kronrod-Verfahrens [Pie83] ausgeführt. Abbildung 4.1 zeigt das Wechselwirkungs-Matrixelement  $\tilde{V}_{ik} = V_{ik}e^{-i(E_i-E_k)t}$  zwischen zwei Kontinuumszuständen mit verschiedenen Energien in Abhängigkeit von der Zeit  $t$ . Deutlich erkennbar ist der recht langsame Abfall des Imaginärteils des Matrixelements mit der Zeit. Wesentlich schneller mit der Zeit fallen die Matrixelemente zwischen Zuständen mit verschiedenen magnetischen Quantenzahlen ab.

## 4.2 Projektil-Projektil-Matrixelemente

Für die Berechnung der Projektil-Projektil-Matrixelemente (3.17) (Matrixelemente des Targetpotentials zwischen zwei Basisfunktionen, die am Projektil zentriert sind)

$$V_{i'k'} = - \int d^3r \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}') S^{-2}(v) \frac{\alpha Z_T}{r} \psi_{k'}(\vec{r}') e^{-i(E_{k'}-E_{i'})t'} \quad (4.11)$$

substituiert man

$$\begin{aligned}x' &= x - b \\y' &= y \\z' &= \gamma(z - vt).\end{aligned}\tag{4.12}$$

Das Integral (4.11) wird damit zu

$$\begin{aligned}V_{i'k'} &= -\frac{1}{\gamma} \int d^3r' \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}') S^{-2}(v) \frac{\alpha Z_T}{r} \psi_{k'}(\vec{r}') e^{-i(E_{k'} - E_{i'})\gamma(t - v(\frac{z'}{\gamma} + vt))} \\ &= -\frac{1}{\gamma} \int d^3r' \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}') S^{-2}(v) \frac{\alpha Z_T}{r} e^{i(E_{k'} - E_{i'})vz'} \psi_{k'}(\vec{r}') e^{-i(E_{k'} - E_{i'})\frac{t}{\gamma}}.\end{aligned}\tag{4.13}$$

Dabei ist  $r = \sqrt{(x' + b)^2 + y'^2 + (\frac{z'}{\gamma} + vt)^2}$ . Die Integration über den Winkel  $\phi'$  kann nun analytisch ausgeführt werden. Dazu muß das folgende Integral berechnet werden:

$$I = \int_0^{2\pi} d\phi \frac{e^{i\Delta m \phi}}{\sqrt{\delta^2 + \rho^2 + b^2 + 2\rho b \cos \phi}}.\tag{4.14}$$

Dabei ist  $\delta^2 = (\frac{z}{\gamma} + vt)^2$ . Bei unseren Rechnungen werden wir uns auf solche Übergänge beschränken, bei denen  $|\Delta m| \leq 1$ . Das ist zwar eine recht starke Einschränkung, doch wird ansonsten die Zahl der zu berechnenden Matrixelemente zu groß. Mit der Abkürzung

$$a = \sqrt{b^2 + \rho^2 + \delta^2 + 2b\rho}\tag{4.15}$$

bekommt man für diese Integrale

$$I = \frac{4}{a} K\left(\frac{4b\rho}{a^2}\right),\tag{4.16}$$

falls  $\Delta m = 0$  und

$$I = \frac{1}{2b\rho} \left( 4aE\left(\frac{4b\rho}{a^2}\right) - \frac{4}{a}(b^2 + \delta^2 + \rho^2)K\left(\frac{4b\rho}{a^2}\right) \right),\tag{4.17}$$

falls  $\Delta m = \pm 1$ .  $E(x)$  und  $K(x)$  bezeichnen hierbei vollständige elliptische Integrale. Die numerische Berechnung dieser Funktionen erfolgt mit Hilfe der Approximationen (17.3.34) und (17.3.36) in [Abr72]. Die verbleibenden Integrationen über den Winkel  $\theta'$  und über  $r'$  müssen dann durch numerische Integration berechnet werden. Die Berechnung der Projektil-Projektil-Matrixelemente ist damit erheblich aufwendiger als die der Target-Target-Matrixelemente. Letztere konnten nämlich mit Hilfe der Multipolentwicklung auf eindimensionale numerische Integrationen reduziert werden.

Eine direkte Multipolentwicklung der Projektil-Projektil-Matrixelemente ist zwar möglich, wird aber durch das Auftreten der  $z$ -abhängigen Exponentialfunktion  $e^{i(E_{k'}-E_{i'})vz'}$  in (4.13) erschwert. Die Entwicklung dieser Funktion nach Kugelflächenfunktionen führt nämlich zu einer weiteren Summe über Drehimpulse. Die Folge ist, daß dann, anders als bei den Target-Target-Matrixelementen, eine unendliche Summe über Drehimpulse zu jedem Matrixelement beiträgt. Es soll aber darauf hingewiesen werden, daß es prinzipiell möglich ist, die Berechnung der Matrixelemente (4.11) auf eine eindimensionale numerische Integration zu reduzieren. Dazu substituiert man in (4.11) anstatt (4.12)  $x'' = x' = x - b$ ,  $y'' = y' = y$  und  $z'' = z'/\gamma = z - vt$ . Damit wird das zu berechnende Matrixelement

$$V_{i'k'} = - \int d^3 r'' \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}'') \frac{S^{-2}(v)\alpha Z_T}{\sqrt{(x''+b)^2 + y''^2 + (z''+vt)^2}} \psi_{k'}(\vec{r}'') e^{-i(E_{k'}-E_{i'})\left(\frac{z''}{\gamma}-\gamma v z''\right)}. \quad (4.18)$$

Nun wird die Multipolentwicklung der Coulomb-Wechselwirkung [Jac75] verwendet, und man schreibt

$$\frac{1}{\sqrt{(x''+b)^2 + y''^2 + (z''+vt)^2}} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} \frac{r''_{<}^L}{r''_{>}^{L+1}} Y_L^M(\theta'', \phi'') Y_L^M(\theta_p, 0). \quad (4.19)$$

Dabei ist

$$r''_{<} = \begin{cases} r'' & \text{wenn } r'' < R \\ R & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.20)$$

mit  $r'' = \sqrt{(x''+b)^2 + y''^2 + (z''+vt)^2}$ ,  $R = \sqrt{b^2 + (vt)^2}$  und  $\cos \theta_p = -\frac{vt}{R}$ . Eine entsprechende Relation hat man für  $r''_{>}$ . Man definiert nun

$$A_L^M(r'') = \int d\Omega'' \psi_{i'}^\dagger(\vec{r}'') S^{-2}(v) \psi_{k'}(\vec{r}'') Y_L^M(\theta'', \phi'') e^{i(E_{k'}-E_{i'})\gamma v z''} \quad (4.21)$$

und

$$I_L^M(R) = \int_0^\infty dr'' r''^2 \frac{r''_{<}^L}{r''_{>}^{L+1}} A_L^M(r''). \quad (4.22)$$

Damit läßt sich dann das Matrixelement (4.11) schreiben als

$$V_{i'k'} = -\alpha Z_T \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} Y_L^M(\theta_p, 0) I_L^M(R) e^{-i(E_{k'}-E_{i'})\frac{z''}{\gamma}}. \quad (4.23)$$

Diese Form der Zerlegung des Matrixelements hat nun im Wesentlichen zwei Vorteile. Erstens erkennt man, daß das Integral  $A_L^M(r'')$  keine Abhängigkeit von der

Zeit aufweist. Daraus folgt, daß man dieses Integral nur einmal für alle Zeiten  $t$ , die man in der Rechnung benötigt, berechnen muß. Der zweite Vorteil besteht darin, daß das Integral  $I_L^M(R)$  nur von einem Parameter  $R$  abhängt, der sowohl die Abhängigkeit vom Stoßparameter  $b$  als auch von der Zeit  $t$  beinhaltet. Man geht am besten so vor, daß man das Integral  $A_L^M(r'')$  für verschiedene Werte von  $r''$  berechnet und tabelliert. Dann berechnet und tabelliert man das Integral  $I_L^M(R)$  für alle Werte von  $R$  im Bereich von  $R_{min} = b_{min}$  bis  $R_{max} = \sqrt{b_{max}^2 + (vt_{max})^2}$ , wobei  $b_{min}$  und  $b_{max}$  den minimalen und maximalen Stoßparameter, für die eine zeitabhängige Rechnung gemacht wird, bedeuten. Wenn man die Integrale  $I_L^M(R)$  für alle Werte von  $L$  und  $M$  (bis zu einem gewissen maximalen Wert) separat tabelliert, folgt daraus, daß man diese Integrale für zeitabhängige Rechnungen bei beliebigen Stoßparametern verwenden kann. Man muß also nicht für jeden Stoßparameter die Integrale neu berechnen. Leider wird die Zahl der zu tabellierenden Integrale sehr groß, wenn man diese Integrale nun nicht nur für verschiedene Werte des Parameters  $R$ , sondern auch für alle möglichen verschiedenen Werte von  $L$  und  $M$  abspeichern muß. Bei Tests dieser Methode ergab sich jedoch außerdem das Problem, daß man das Integral  $A_L^M(r'')$  extrem dicht tabellieren muß, damit das Matrixelement  $V_{i'k'}$  auch für große Zeiten noch mit genügend hoher Genauigkeit berechnet werden kann. Aufgrund dieser Schwierigkeiten kommt diese Methode bei den Rechnungen in dieser Arbeit nicht zum Einsatz. Sie kann jedoch als Ausgangspunkt für weitergehende Untersuchungen dienen. Abbildung 4.2 zeigt das Matrixelement des Targetpotentials bezüglich zweier Wellenpakete, die am Projektilkern zentriert sind. Im Vergleich zur Abbildung 4.1, die das Matrixelement des Projektilpotentials zwischen zwei Wellenpaketen am Target darstellt, fällt auf, daß Realteil und Imaginärteil des in 4.2 gezeigten Matrixelements schneller mit der Zeit abfallen. Diese Tatsache ist, wie in Abschnitt 5.2 noch gezeigt wird, für Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle von äußerster Wichtigkeit. Wenn die Matrixelemente mit der Zeit schneller abfallen, dann ändern sich die Besetzungsamplituden für große Zeiten nicht mehr so stark, und die Wahrscheinlichkeiten werden schneller stationär.

### 4.3 Zwei-Zentren-Matrixelemente

Die Zwei-Zentren-Matrixelemente (3.11), (3.12), (3.15) und (3.16), also jene Matrixelemente, bei denen Zustände von Projektil und Target beteiligt sind, lassen sich offenbar nicht so einfach berechnen wie die Ein-Zentrum-Matrixelemente, da die Wellenfunktionen des Anfangs- und Endzustandes zu verschiedenen Zentren gehören und sich diese Integrale daher nicht, wie im Falle der Target-Target-Matrixelemente (3.14), durch eine Multipolentwicklung des Potentials auf eindimensionale Integrale zurückführen lassen. Auch läßt sich die Integration über den Winkel  $\phi$  nicht analytisch ausführen wie etwa bei den Projektil-Projektil-Matrixelementen (3.17). In ihren Rechnungen für Anregung und Ladungstrans-

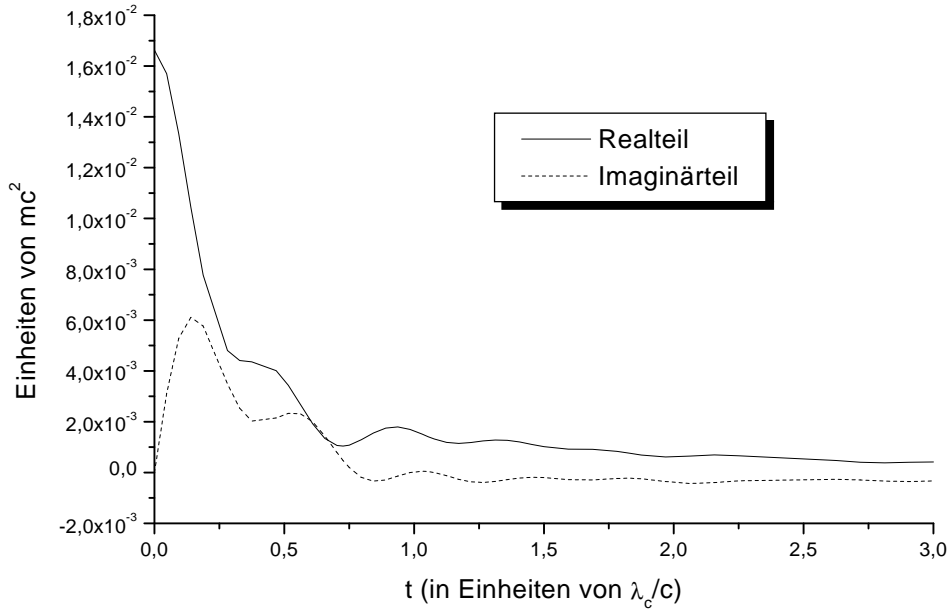


Abbildung 4.2: Wechselwirkungsmatrixelement  $\tilde{V}_{i'k'} = V_{i'k'} / e^{-i(E_{k'} - E_{i'}) \frac{t}{\gamma}}$  zwischen zwei Kontinuumszuständen des  $U^{92+}$  mit den Energien  $E_i = 2.5mc^2$  und  $E_k = -2.5mc^2$ ,  $\kappa_i = \kappa_k = -1$  und  $m_i = m_k = \frac{1}{2}$  in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  für einen Stoßparameter  $b = 0,125\lambda_c$ ,  $\gamma = 2$  und für  $\alpha Z_T = 1$ . Die gestrichelte Linie zeigt den Imaginärteil, die durchgezogene den Realteil des Matrixelements.

fer haben Toshima und Eichler [Tos88, Tos90a, Tos90b] diese Matrixelemente berechnet, indem sie zunächst eine Transformation auf spheroidal elliptische Koordinaten und dann die dreidimensionale Integration über das Volumen in diesen Koordinaten vollständig numerisch ausgeführt haben. Tests haben jedoch gezeigt, daß diese Art der Berechnung der Zwei-Zentren-Integrale für die Rechnungen in dieser Arbeit nicht geeignet ist. Erstens müssen nämlich wesentlich mehr Integrale berechnet werden als in den oben genannten Rechnungen, da hier ja auch Kontinuumszustände in der Basis mitgeführt werden, und zweitens konvergiert die numerische Integration aufgrund des oszillierenden Verhaltens des Integranden viel langsamer, wenn einer der beiden beteiligten Zustände ein Kontinuumszustand ist. Eine dreidimensionale numerische Integration der Zwei-Zentren-Matrixelemente im Ortsraum erwies sich daher als nicht praktikabel.

Im folgenden wird gezeigt, daß es besser ist, die Integration im Impulsraum statt im Ortsraum auszuführen. Dazu benötigt man die Fourier-Transformierten

der beteiligten Zustände. Zunächst soll hier das Überlappintegral (3.11)

$$N_{fi'} = \int d^3r \psi_f^\dagger(\vec{r}) S^{-1}(v) \psi_{i'}(\vec{r}') e^{-i(E_{i'}t' - E_f t)} \quad (4.24)$$

betrachtet werden. Die Fourier-Transformierte  $\tilde{\phi}_{i'}(\vec{k}, t)$  der geboosteten Wellenfunktion  $S^{-1}\psi_{i'}(\vec{r}')$  ist gegeben durch

$$\tilde{\phi}_{i'}(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r S^{-1}(v) \psi_{i'}(\vec{r}', t') e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (4.25)$$

und entsprechend ist

$$S^{-1}(v) \psi_{i'}(\vec{r}', t') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \tilde{\phi}_{i'}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (4.26)$$

Wie in Anhang B gezeigt wird, läßt sich die Fourier-Transformierte der geboosteten Wellenfunktion schreiben als

$$\tilde{\phi}_{i'}(\vec{k}, t) = \frac{S^{-1}(v)}{\gamma} \phi_{i'}(k_x, k_y, \frac{k_z}{\gamma} - v E_{i'}) e^{-ik_x b} e^{-i(\frac{E_{i'}}{\gamma} + k_z v)t}. \quad (4.27)$$

Dabei ist  $\phi_{i'}(\vec{k})$  die Fourier-Transformierte der ungeboosteten Wellenfunktion. Wenn man nun auch für die Wellenfunktion  $\psi_f(\vec{r})$  mit Hilfe der Fourier-Transformation

$$\psi_f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k' \tilde{\phi}_f(\vec{k}', t) e^{i\vec{k}'\vec{r}} \quad (4.28)$$

schreibt, und dann (4.26) und (4.28) in (4.24) einsetzt, dann kann man die Integration über die Ortskoordinaten ausführen. Da dabei eine  $\delta$ -Funktion bezüglich der Impulse  $\vec{k}$  und  $\vec{k}'$  entsteht, läßt sich nun auch die Integration über den Impuls  $\vec{k}'$  ausführen, und man erhält

$$N_{fi'} = \frac{1}{\gamma} \int d^3k \phi_f^\dagger(\vec{k}) S^{-1}(v) \phi_{i'}(k_x, k_y, \frac{k_z}{\gamma} - v E_{i'}) e^{-i(\frac{E_{i'}}{\gamma} + k_z v)t} e^{-ik_x b} e^{iE_f t}. \quad (4.29)$$

Dieser Ausdruck sieht zwar zunächst nicht einfacher aus als (4.24), doch kann man hier die Integration über den Winkel  $\phi$  analytisch ausführen. Es ist nämlich [Abr72]

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\phi_k e^{-ik_x b + i(m_{i'} - m_f)\phi_k} &= (-1)^{m_{i'} - m_f} \int_0^\pi d\phi_k 2 \cos[(m_{i'} - m_f)\phi_k] e^{ik_b \sin \theta_k \cos \phi_k} \\ &= 2\pi (-i)^{|m_{i'} - m_f|} J_{|m_{i'} - m_f|}(kb \sin \theta_k). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Dabei ist  $J_l(x)$  eine gewöhnliche Besselfunktion. Ein weiterer wichtiger Vorteil der Integration im Impulsraum besteht darin, daß die Zeit  $t$  im Integranden von



(4.29) nur noch in der Form  $e^{i(E_f - \frac{E_{i'}}{\gamma})t - ik_z vt}$  auftaucht. Nach Anhang B läßt sich die Fourier-Transformierte der Wellenfunktion schreiben als

$$\phi(\vec{p}) = (-i)^l \begin{pmatrix} \tilde{g}(p)\Omega_{\kappa}^{\mu}(\theta_p, \phi_p) \\ \tilde{f}(p)\Omega_{-\kappa}^{\mu}(\theta_p, \phi_p) \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Dabei ist  $l = j + 1/2 \operatorname{sgn}(\kappa)$ .  $\tilde{g}(p)$  und  $\tilde{f}(p)$  sind reelle Funktionen, die nur vom Radialimpuls  $p$  abhängen. Damit kann man das Integral dann schreiben als

$$N_{f_{i'}} = 2\pi(-i)^{|m_{i'}-m_f|+l_{i'}-l_f} e^{i(E_f - \frac{E_{i'}}{\gamma})t} \frac{1}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \left[ e^{-ik_z vt} \times \int_0^{\infty} dk_{\rho} k_{\rho} J_{|m_{i'}-m_f|}(k_{\rho} b) \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}} (F_1(k_{\rho}, k_z) + \delta F_2(k_{\rho}, k_z)) \right] \quad (4.32)$$

mit

$$F_1(k_{\rho}, k_z) = \left( \tilde{g}_f(k) \tilde{g}_{i'}(k') + \tilde{f}_f(k) \tilde{f}_{i'}(k') \right) \Omega_{\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta_k, 0) \Omega_{\kappa_{i'}}^{m_{i'}}(\theta'_k, 0) \quad (4.33)$$

$$F_2(k_{\rho}, k_z) = \tilde{g}_f(k) \tilde{f}_{i'}(k') \Omega_{\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta_k, 0) \sigma_z \Omega_{-\kappa_{i'}}^{m_{i'}}(\theta'_k, 0) + \tilde{f}_f(k) \tilde{g}_{i'}(k') \Omega_{-\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta_k, 0) \sigma_z \Omega_{\kappa_{i'}}^{m_{i'}}(\theta'_k, 0). \quad (4.34)$$

Dabei ist

$$k' = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left( \frac{k_z}{\gamma} - v E_{i'} \right)^2}, \quad \delta = \sqrt{\frac{\gamma-1}{\gamma+1}} \quad (4.35)$$

und

$$\theta'_k = \arccos \left[ \frac{k_z/\gamma - v E_{i'}}{k'} \right]. \quad (4.36)$$

Die Integration über  $k_{\rho}$  ist unabhängig von der Zeit. Es genügt also, diese Integration einmal auszuführen und das Ergebnis für verschiedene Werte von  $k_z$  zu tabellieren. Danach muß für jeden Zeitpunkt  $t$ , für den das Integral benötigt wird, nur noch ein eindimensionales Integral über  $k_z$  ausgeführt werden. Dadurch kann die Berechnung der Zwei-Zentren-Überlappintegrale effektiv auf eine eindimensionale numerische Integration reduziert werden. Abbildung 4.3 zeigt die Radialfunktionen  $\tilde{g}(p)$  und  $\tilde{f}(p)$  der großen bzw. kleinen Komponente der Fourier-Transformierten eines stationären Coulomb-Dirac-Wellenpakets für das  $U^{92+}$ -Ion mit  $E = -2,5mc^2$ ,  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$  und  $\kappa = -1$ . Deutlich ist zu erkennen, daß die Radialfunktion der kleinen Komponente größere Werte annimmt, was auf die negative Energie zurückzuführen ist. Ferner sieht man, daß die Wellenfunktionen für Impulse  $k$ , die größer als der Maximalimpuls des Wellenpakets

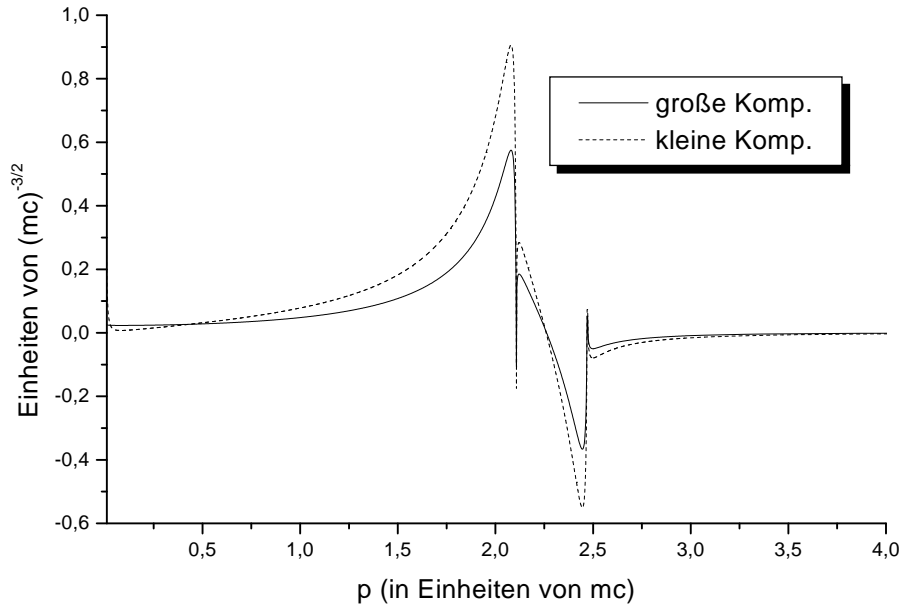


Abbildung 4.3: Radialfunktionen  $\tilde{g}(p)$  (durchgezogen) und  $\tilde{f}(p)$  (gestrichelt) der Fourier-Transformierten eines stationären Coulomb-Dirac-Wellenpakets des  $U^{92+}$ -Ions mit  $E = -2,5mc^2$ ,  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$  und  $\kappa = -1$ .

sind, sehr schnell verschwinden. Das ist für die Berechnung der Matrixelemente vorteilhaft, denn man kann so den Integrationsbereich auf relativ kleine Impulse einschränken. Gut zu erkennen sind auch die Impulse, die zu der minimalen und der maximalen Energie des Wellenpakets gehören. An diesen Stellen wird die Fourier-Transformierte der Wellenfunktion singulär.

Die Wechselwirkungsmatrixelemente  $V_{ki'}$  und  $V_{k'i}$  lassen sich analog zu (4.32) berechnen. Hier soll zunächst das Matrixelement

$$V_{ik'} = - \int d^3r \psi_i^\dagger(\vec{r}) \frac{\alpha Z_T}{r} S^{-1}(v) \psi_{k'}(\vec{r}') e^{iv\gamma E_{k'}z} e^{-i(\gamma E_{k'} - E_i)t} \quad (4.37)$$

betrachtet werden. Wie oben setzt man hier für die Wellenfunktion  $S^{-1}\psi_{k'}(\vec{r}', t')$  die zugehörige Fourier-Transformierte gemäß (4.26) ein. Anstatt der Fourier-Transformierten von  $\psi_i^\dagger(\vec{r}, t)$  benötigt man hier jedoch die Fourier-Transformierte von  $\frac{1}{r}\psi_i^\dagger(\vec{r}, t)$ . Diese läßt sich jedoch problemlos berechnen, wie in Anhang B gezeigt wird. Man kann zur Berechnung des Matrixelements  $V_{ik'}$  wieder die Formel (4.32) verwenden, wenn man die Radialfunktionen  $\tilde{g}_f(k)$  und  $\tilde{f}_f(k)$  ersetzt durch die Radialfunktionen der Fourier-Transformierten von  $\frac{1}{r}\psi_i^\dagger(\vec{r}, t)$ . Entsprechend kann man mit dem Matrixelement  $V_{i'k}$  verfahren, wobei hier die Fourier-Transformierte von  $\frac{1}{r'}S^{-1}\psi_{k'}(\vec{r}', t')$  benötigt wird. Abbildung 4.4 zeigt die Radi-

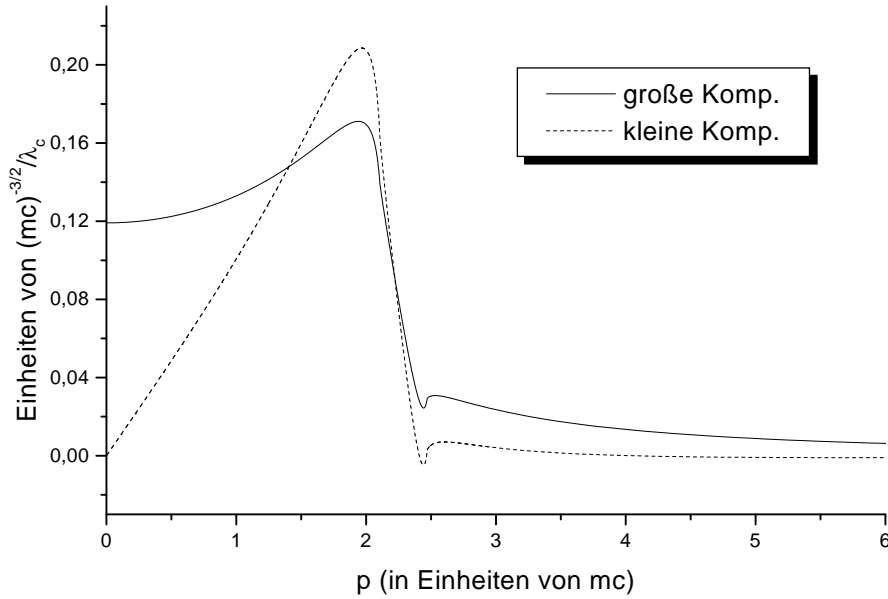


Abbildung 4.4: Radialfunktionen  $\tilde{g}(k)$  (durchgezogen) und  $\tilde{f}(k)$  (gestrichelt) der Fourier-Transformierten der Funktion  $\frac{1}{r}\psi(\vec{r})$  für ein Kontinuumswellenpaket des  $U^{92+}$ -Ions mit  $E = -2,5mc^2$ ,  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$  und  $\kappa = -1$ .

alfunktionen der Fourier-Transformierten von  $\frac{1}{r}\psi(\vec{r})$  für das gleiche Wellenpaket wie in Abbildung 4.3. Das Verhalten dieser Funktionen ist deutlich glatter als das der Fourier-Transformierten der eigentlichen Wellenfunktion. Durch den Faktor  $\frac{1}{r}$  fällt die Funktion schnell genug ab, um eine Konvergenz des Integrals über das Volumen, das man zur Berechnung der Fourier-Transformierten ausführen muß, zu garantieren. Deswegen verschwinden die vorher beobachteten Singularitäten bei den Impulsen, die zu der oberen und unteren Energie des Wellenpakets gehören.

Für die praktische Rechnung werden die Radialfunktionen der Fourier-Transformierten der Wellenfunktionen und von  $\frac{1}{r}\psi(\vec{r})$  einmal tabelliert und dann abgespeichert. Dabei wird für kleine Impulse bis zu den Maximalimpulsen der Wellenpakete ein feinmaschiges Gitter mit Abständen von  $\Delta p = 0,0025mc$  und für größere Impulse ein grobmaschiges Gitter mit  $\Delta p = 0,1mc$  gewählt. Der maximale Impuls, für den die Fourier-Transformierten tabelliert werden, ist  $p = 40mc$ , was um ein Vielfaches größer als der maximale Impuls aller in den Rechnungen dieser Arbeit verwendeten Wellenpakete ist. Bei der Berechnung der Matrixelemente wird zunächst die Integration über  $k_\rho$  durchgeführt und das Ergebnis für verschiedene  $k_z$  tabelliert. Ist einer der beteiligten Zustände ein Kontinuumszustand, so wird die Integration begrenzt auf Werte von  $k_\rho = 0$  bis  $k_\rho = \sqrt{k_{max}^2 - k_z^2}$ , da für noch größere Werte die Wellenfunktion nicht tabel-

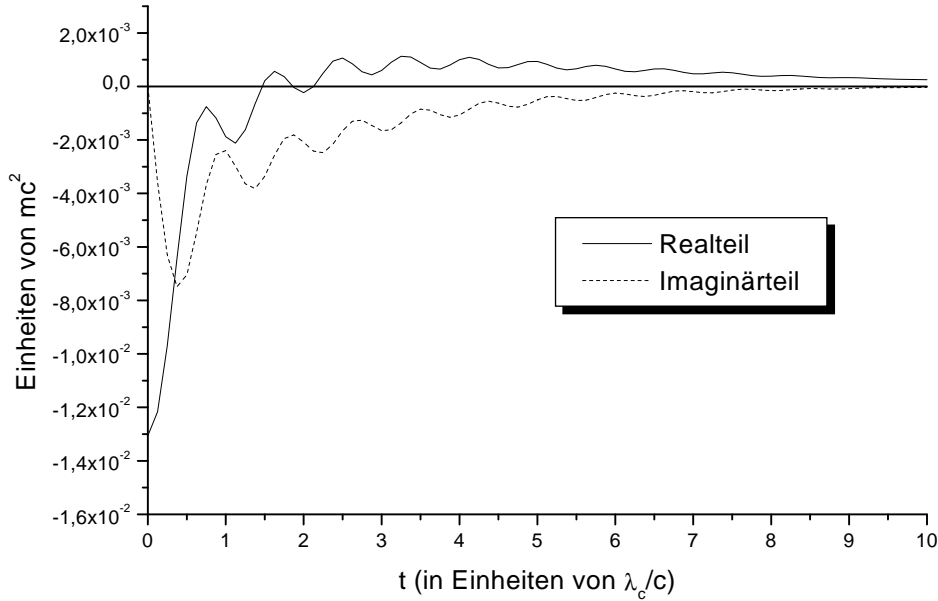


Abbildung 4.5: Target-Projektil-Wechselwirkungsmatrixelement zwischen einem  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m_i = \frac{1}{2}$  am Target und einem Kontinuumszustand mit  $E_{k'} = -2.5mc^2$ ,  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$ ,  $\kappa = -1$  und  $m_{k'} = \frac{1}{2}$  am Projektil für ein  $\text{Au}^{79+}$ -Target und ein  $\text{U}^{92+}$ -Projektil. Der Stoßparameter beträgt  $b = 0,125\lambda_c$  und die Stoßenergie ist 930 MeV/Nukleon.

liert ist. Das Integral wird berechnet für Werte von  $k_z = -24mc$  bis  $k_z = 24mc$  und die Ergebnisse werden in einem Abstand von  $0,02mc$  tabelliert. Anschließend erfolgt die Integration über  $k_z$ . Dafür wird die Kepler-Regel mit den tabellierten Werten der Integrale über  $k_\rho$  benutzt. Für große Zeiten werden mehr Werte mit kleinerem Abstand  $\Delta k_z$  verwendet, um die oszillierende Funktion  $e^{-ik_z vt}$  noch genau genug abtasten zu können. Für große Werte von  $t$  oszilliert diese Funktion immer stärker mit  $k_z$ , was für den Abfall der Matrixelemente mit der Zeit sorgt. Abbildung 4.5 zeigt das Wechselwirkungsmatrixelement (4.37) für den  $1s_{1/2}$ -Zustand eines  $\text{Au}^{79+}$ -Ions am Target und einen Kontinuumszustand des  $\text{U}^{92+}$ -Ions am Projektil. Wegen des oszillierenden Verhaltens des Matrixelements müssen hier viele Zeitschritte berechnet werden. Das ist jedoch im Rahmen des oben beschriebenen Formalismus ohne weiteres möglich, da man für jeden Zeitschritt nur ein eindimensionales Integral berechnen muß. Abbildung 4.6 zeigt das Projektil-Target-Wechselwirkungsmatrixelement für die gleichen Zustände wie in Abbildung 4.5. Im Vergleich zu dem in Abbildung 4.5 dargestellten Target-Projektil-Matrixelement fällt das glatte Verhalten des Matrixelements auf.

Leider kann das oben beschriebene Verfahren zur Berechnung der Zwei-Zentren-

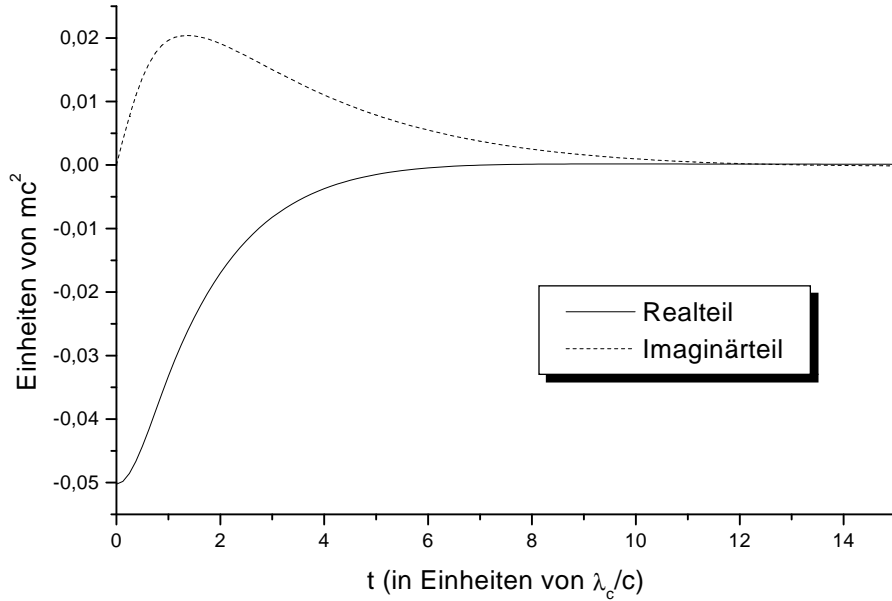


Abbildung 4.6: Projektil-Target-Wechselwirkungsmatrixelement zwischen einem  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m_k = \frac{1}{2}$  am Target und einem Kontinuumszustand mit  $E_{i'} = -2.5mc^2$ ,  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$ ,  $\kappa = -1$  und  $m_{k'} = \frac{1}{2}$  für ein  $\text{Au}^{79+}$ -Target und ein  $\text{U}^{92+}$ -Projektil. Der Stoßparameter beträgt  $b = 0,125\lambda_c$ , und die Stoßenergie ist 930 MeV/Nukleon.

Matrixelemente nicht mehr verwendet werden, wenn Coulomb-Randbedingungen berücksichtigt werden. Wie bereits in Abschnitt 3.4 diskutiert wurde, führen die Coulomb-Randbedingungen dazu, daß die Wellenfunktionen der beteiligten Zustände mit einem Phasenfaktor multipliziert werden und die Wechselwirkungspotentiale gemäß

$$\frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{b^2 + v^2 t^2}} \quad (4.38)$$

$$\frac{1}{r'} \rightarrow \frac{1}{r'} - \frac{1}{\sqrt{b^2 + v^2 \gamma^2 (t - vz)^2}} \quad (4.39)$$

transformiert werden. Der zusätzliche Potentialterm und der Phasenfaktor führen dazu, daß man die Fourier-Transformierte der transformierten Wellenfunktion und der transformierten Wellenfunktion multipliziert mit dem zusätzlichen Potentialterm nicht mehr analytisch angeben kann. Die Berücksichtigung von Coulomb-Randbedingungen führt also zwangsläufig auf die Berechnung der Matrixelemente im Ortsraum mittels dreidimensionaler numerischer Integration. Für die Rechnungen in dieser Arbeit aber wäre dieses Verfahren nur mit einer sehr kleinen

Anzahl von Kanälen praktikabel. Bei den in den folgenden Kapiteln vorgestellten Rechnungen wird daher auf die Verwendung der Coulomb-Randbedingungen verzichtet.

## 4.4 Symmetrien der Matrixelemente

Durch das Ausnutzen von Symmetrien, die von den Matrixelementen erfüllt werden, läßt sich die Anzahl der zu berechnenden Matrixelemente erheblich reduzieren. Offensichtlich erfüllen die Überlapp- und Wechselwirkungs-Matrixelemente die Relationen

$$N_{ik} = N_{ki}^* \quad N_{i'k'} = N_{k'i'}^* \quad V_{ik} = V_{ki}^* \quad V_{i'k'} = V_{k'i'}^* \quad (4.40)$$

und

$$N_{ik'} = N_{k'i}^*. \quad (4.41)$$

Beachten sollte man aber, daß die Matrix  $\hat{V}$ , die von allen Wechselwirkungs-Matrixelementen gebildet wird, selbst nicht hermitesch ist, da das Projektil-Target-Matrixelement  $V_{i'k}$  (3.16) und das Target-Projektil-Matrixelement  $V_{ik'}$  (3.15) zwei verschiedene Potentiale enthalten, so daß im allgemeinen  $V_{ik'} \neq V_{k'i}^*$ . Mit Hilfe der Überlapp-Matrixelemente läßt sich aber ein Zusammenhang zwischen den Matrixelementen der verschiedenen Potentiale herstellen. Sei dazu  $|\psi_i; t\rangle$  eine Lösung der zeitabhängigen Dirac-Gleichung mit dem Targetpotential und  $|\psi_{k'}; t\rangle$  eine zeitabhängige Lösung der Dirac-Gleichung mit dem Projektilpotential, so daß

$$\begin{aligned} \langle \psi_{k'}; t | (i\partial_t - H) | \psi_i; t \rangle &= -\langle H\psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle + i\langle \psi_{k'}; t | \partial_t | \psi_i; t \rangle \\ &= -\langle H\psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle + i(\partial_t \langle \psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle - (\partial_t \langle \psi_{k'}; t |) | \psi_i; t \rangle) \\ &= -\langle H\psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle + i\partial_t \langle \psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle + \langle i\partial_t \psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle \\ &= -\langle V_T \psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle + i\partial_t \langle \psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Da aber nun

$$\langle \psi_{k'}; t | (i\partial_t - H) | \psi_i; t \rangle = -\langle \psi_{k'}; t | V_P | \psi_i; t \rangle \quad (4.43)$$

gilt, folgt die Beziehung

$$i\partial_t \langle \psi_{k'}; t | \psi_i; t \rangle = \langle \psi_{k'}; t | (V_T - V_P) | \psi_i; t \rangle \quad (4.44)$$

und damit

$$i\frac{\partial}{\partial t} N_{k'i} = V_{ik'}^* - V_{k'i}. \quad (4.45)$$

Daraus folgt, daß man prinzipiell die Target-Projektile-Wechselwirkungsmatrixelemente  $V_{ik'}$  nicht mehr separat zu berechnen braucht, wenn man die Projektil-Target-Wechselwirkungsmatrixelemente  $V_{i'k}$  und die Zwei-Zentren-Überlappmatrixelemente kennt. Die stationären Wellenpakete erfüllen die Relation (4.44) aber nicht, da sie ja keine Lösung der zeitabhängigen Dirac-Gleichung sind. Daher werden in dieser Arbeit die Matrixelemente  $V_{ik'}$ ,  $V_{i'k}$  und die Überlappmatrixelemente  $N_{ik'}$  separat berechnet.

Eine Symmetrie der Matrixelemente ergibt sich durch Ersetzen von  $t$  durch  $-t$ . Dies soll hier am Beispiel der Target-Target-Wechselwirkungsmatrixelemente gezeigt werden. Es ist

$$\begin{aligned} V_{ik}(-t) &= - \int \psi_i^\dagger(\vec{r}) \frac{\gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z)}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z+vt)^2}} \psi_k(\vec{r}) d^3r e^{-i(E_k - E_i)(-t)} \\ &= - \int \frac{\psi_i^\dagger(x, -y'', -z'') \gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z) \psi_k(x, -y'', -z'')}{\sqrt{(x-b)^2 + y''^2 + \gamma^2(-z'' + vt)^2}} dx dy'' dz'' \\ &\quad \times e^{-i(E_k - E_i)(-t)}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

wobei  $z'' = -z$  und  $y'' = -y$  substituiert wurde. Nun gilt für die winkelabhängigen Teile der Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \Omega_{\kappa_i}^{m_i \dagger}(\theta, \phi) \Omega_{\kappa_k}^{m_k}(\theta, \phi) &= \sum_{m_i} \sum_{m_k} \sum_{m_s} C(l_i \frac{1}{2} j_i; m_i m_s m_i) C(l_k \frac{1}{2} j_k; m_k m_s m_k) \\ &\quad \times Y_{l_i}^{m_i^*}(\theta, \phi) Y_{l_k}^{m_k}(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Weiter gilt [Var88]

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^l Y_l^{-m}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) = (-1)^{l+m} Y_l^{m^*}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \quad (4.48)$$

und damit

$$\begin{aligned} \Omega_{\kappa_i}^{m_i \dagger}(\theta, \phi) \Omega_{\kappa_k}^{m_k}(\theta, \phi) \\ = (-1)^{l_i + l_k + m_i - m_k} \left( \Omega_{\kappa_i}^{m_i \dagger}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \Omega_{\kappa_k}^{m_k}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \right)^*, \end{aligned} \quad (4.49)$$

wobei ausgenutzt wurde, daß  $(-1)^{m_i + m_k} = (-1)^{m_i - m_k} = (-1)^{m_i - m_k}$ . Weiter gilt nun

$$\begin{aligned} \Omega_{\kappa_i}^{m_i \dagger}(\theta, \phi) \sigma_z \Omega_{-\kappa_k}^{m_k}(\theta, \phi) \\ = (-1)^{l_i + l_k + m_i - m_k + 1} \left( \Omega_{\kappa_i}^{m_i \dagger}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \sigma_z \Omega_{-\kappa_k}^{m_k}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \right)^*. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Man beachte, daß man hier im Vergleich zu (4.49) einen zusätzlichen Faktor  $-1$  erhält. Dieser rührt daher, daß sich die orbitale Drehimpulsquantenzahl der

oberen Komponente  $l_\kappa$  gerade um eins von der der unteren Komponente  $l_{-\kappa}$  unterscheidet, also  $l_\kappa - l_{-\kappa} = \pm 1$  gilt. Entsprechend hat man auch

$$\begin{aligned} & \Omega_{-\kappa_i}^{m_i \dagger}(\theta, \phi) \sigma_z \Omega_{\kappa_k}^{m_k}(\theta, \phi) \\ &= (-1)^{l_i + l_k + m_i - m_k + 1} \left( \Omega_{-\kappa_i}^{m_i \dagger}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \sigma_z \Omega_{\kappa_k}^{m_k}(\pi - \theta, 2\pi - \phi) \right)^* . \end{aligned} \quad (4.51)$$

Damit folgt dann schließlich für das Matrixelement (4.46) die Beziehung:

$$\begin{aligned} V_{ik}(-t) &= (-1)^{l_i + l_k + m_i - m_k} \\ &\times \left[ - \int \frac{\psi_i^\dagger(x, y'', z'') \gamma_\alpha Z_P (1 - v\alpha_z) \psi_k(x, y'', z'')}{\sqrt{(x-b)^2 + y''^2 + \gamma^2(z'' - vt)^2}} dx dy'' dz'' e^{i(E_k - E_i)t} \right]^* \\ &= (-1)^{l_i + l_k + m_i - m_k} V_{ik}^*(t). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Die Matrix  $\alpha_z$  verknüpft die oberen und unteren Komponenten der beiden Dirac-Spinoren der Zustände  $i$  und  $k$ . Da in der in dieser Arbeit verwendeten Darstellung für die Dirac-Spinoren (3.6) die untere Komponente einen Faktor  $i$  beinhaltet, taucht dieser Faktor auch in dem Teil des Matrixelements auf, der die  $\alpha_z$ -Matrix enthält. Die Relationen (4.50) und (4.51) enthalten, wie bereits weiter oben bemerkt, im Vergleich zu (4.49) einen zusätzlichen Faktor  $-1$ . Zusammen mit dem Faktor  $i$  ergibt sich in der Kombination das komplex Konjugierte des gesamten Matrixelements multipliziert mit einer Phase. Eine entsprechende Relation kann man auch leicht für die Projektil-Projektil-Matrixelemente  $V_{i'k'}$  zeigen. Ebenfalls erhält man für die Zwei-Zentren-Matrixelemente (3.11), (3.12), (3.15) und (3.16) auf die gleiche Art und Weise eine zu (4.52) analoge Beziehung, so daß man zusammenfassend schreiben kann

$$N_{\alpha\beta}(-t) = (-1)^{l_\alpha + l_\beta + m_\alpha - m_\beta} N_{\alpha\beta}^*(t) \quad (4.53)$$

$$V_{\alpha\beta}(-t) = (-1)^{l_\alpha + l_\beta + m_\alpha - m_\beta} V_{\alpha\beta}^*(t), \quad (4.54)$$

wobei  $\alpha$  und  $\beta$  jeweils sowohl Projektil- als auch Targetzustände sein können. Alle Matrixelemente müssen demzufolge entweder nur für negative oder nur für positive Zeiten berechnet werden. An dieser Stelle sei noch bemerkt, daß die Relationen (4.53) und (4.54) nicht mehr gelten, wenn Coulomb-Randbedingungen verwendet werden und man daher die Matrixelemente sowohl für negative als auch für positive Zeiten berechnen muß.

Eine weitere Symmetrie ergibt sich, wenn man in den Matrixelementen  $N_{\alpha\beta}$  und  $V_{\alpha\beta}$  die magnetischen Quantenzahlen  $m_\alpha$  und  $m_\beta$  durch  $-m_\alpha$  und  $-m_\beta$  ersetzt. Dazu betrachtet man zunächst wieder das Produkt der Winkelanteile der



Wellenfunktionen

$$\begin{aligned}
& \Omega_{\kappa_f}^{-m_f \dagger}(\theta, \phi) \Omega_{\kappa_j}^{-m_j}(\theta, \phi) \\
&= \sum_{m_{l_f} m_{l_j}} \sum_{m_s} C(l_f \frac{1}{2} j_f; -m_{l_f} - m_s - m_f) C(l_j \frac{1}{2} j_j; -m_{l_j} - m_s - m_j) \\
&\quad \times Y_{l_f}^{-m_{l_f} *}(\theta, \phi) Y_{l_j}^{-m_{l_j}}(\theta, \phi) \\
&= (-1)^{l_f + \frac{1}{2} - j_f} (-1)^{l_j + \frac{1}{2} - j_j} \\
&\quad \times \sum_{m_{l_f} m_{l_j}} \sum_{m_s} C(l_f \frac{1}{2} j_f; m_{l_f} m_s m_f) C(l_j \frac{1}{2} j_j; m_{l_j} m_s m_j) \\
&\quad \times Y_{l_f}^{-m_{l_f} *}(\theta, \phi) Y_{l_j}^{-m_{l_j}}(\theta, \phi) \\
&= (-1)^{l_f + \frac{1}{2} - j_f} (-1)^{l_j + \frac{1}{2} - j_j} \\
&\quad \times \sum_{m_{l_f} m_{l_j}} \sum_{m_s} C(l_f \frac{1}{2} j_f; m_{l_f} m_s m_f) C(l_j \frac{1}{2} j_j; m_{l_j} m_s m_j) \\
&\quad \times (-1)^{m_{l_f} + m_{l_j}} Y_{l_f}^{m_{l_f}}(\theta, \phi) Y_{l_j}^{m_{l_j} *}(\theta, \phi) \\
&= (-1)^{l_f - l_j + j_f - j_j + m_f - m_j} \left( \Omega_{\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta, \phi) \Omega_{\kappa_j}^{m_j}(\theta, \phi) \right)^* \\
&= (-1)^{l_f - l_j + j_f - j_j + m_f - m_j} \Omega_{\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta, 2\pi - \phi) \Omega_{\kappa_j}^{m_j}(\theta, 2\pi - \phi). \tag{4.55}
\end{aligned}$$

Dabei wurde im ersten Schritt die Symmetrie der Clebsch-Gordan-Koeffizienten [Bri68] benutzt. Auf die gleiche Art und Weise kann man auch die Relationen

$$\begin{aligned}
\Omega_{\kappa_f}^{-m_f \dagger}(\theta, \phi) \sigma_z \Omega_{-\kappa_j}^{-m_j}(\theta, \phi) &= (-1)^{l_f - l_j + j_f - j_j + m_f - m_j} \\
&\quad \times \Omega_{\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta, 2\pi - \phi) \sigma_z \Omega_{-\kappa_j}^{m_j}(\theta, 2\pi - \phi) \tag{4.56}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\Omega_{-\kappa_f}^{-m_f \dagger}(\theta, \phi) \sigma_z \Omega_{\kappa_j}^{-m_j}(\theta, \phi) &= (-1)^{l_f - l_j + j_f - j_j + m_f - m_j} \\
&\quad \times \Omega_{-\kappa_f}^{m_f \dagger}(\theta, 2\pi - \phi) \sigma_z \Omega_{\kappa_j}^{m_j}(\theta, 2\pi - \phi) \tag{4.57}
\end{aligned}$$

zeigen. Die Ersetzung  $\phi \rightarrow 2\pi - \phi$  entspricht der Koordinatentransformation  $y \rightarrow -y$ . Verwendet man nun in den Matrixelementen die Substitution  $y'' = -y$ , dann erkennt man leicht, daß man für die Überlapp- und die Wechselwirkungsmatrixelemente die Beziehungen

$$N_{\alpha\beta}^{-m_\alpha - m_\beta} = (-1)^{l_\alpha - l_\beta + j_\alpha - j_\beta + m_\alpha - m_\beta} N_{\alpha\beta}^{m_\alpha m_\beta} \tag{4.58}$$

$$V_{\alpha\beta}^{-m_\alpha - m_\beta} = (-1)^{l_\alpha - l_\beta + j_\alpha - j_\beta + m_\alpha - m_\beta} V_{\alpha\beta}^{m_\alpha m_\beta} \tag{4.59}$$

erhält, wobei auch hier wieder  $\alpha$  und  $\beta$  sowohl Projektil- als auch Targetzustände bezeichnen können. Durch Ausnutzen aller Symmetrien der Matrixelemente, die in diesem Abschnitt diskutiert wurden, läßt sich die Zahl der zu berechnenden Matrixelemente offensichtlich erheblich reduzieren.

# Kapitel 5

## Rechnungen mit einer Ein-Zentrum-Entwicklung

In diesem Kapitel werden Rechnungen vorgestellt, die auf Entwicklungen der Wellenfunktion nach einem Basissatz beruhen, der nur solche Wellenfunktionen enthält, die an einem der beiden Kerne zentriert sind. In Abschnitt 5.1 werden Rechnungen diskutiert, bei denen die Wellenfunktion im Ruhesystem des Projektilkerns mit einer Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns berechnet wird, während in Abschnitt 5.2 solche Rechnungen beschrieben werden, bei denen die Wellenfunktion im System des Targetkerns berechnet wird, diese Wellenfunktion aber ebenfalls nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns entwickelt wird. Obwohl dieser Zugang zunächst nicht sehr intuitiv erscheint, da die Basisfunktionen sich dann im Raum mit dem Projektilkern bewegen, hat dieses Verfahren dennoch gewisse Vorteile, wie im folgenden noch gezeigt wird.

Beiden Rechnungen ist gemeinsam, daß sie sich erheblich einfacher gestalten als solche Rechnungen, die Wellenfunktionen enthalten, die an beiden Kernen zentriert sind, da jeweils nur ein Typ von Matrixelementen berechnet werden muß. Das liegt daran, daß man in solchen Rechnungen die Zwei-Zentren-Matrixelemente (3.11), (3.12), (3.15) und (3.16) natürlich nicht benötigt.

### 5.1 Rechnung im System des Projektilkerns

Bei diesen Rechnungen wird die Lösung der Dirac-Gleichung  $\Psi_P(\vec{r}, t)$  im System des Projektilkerns nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns entwickelt:

$$\Psi_P(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k(\vec{r}, t). \quad (5.1)$$

Dabei sind die  $\psi_k(\vec{r}, t)$  atomare Wellenfunktionen des Projektilkerns. Man beachte, daß man die Dirac-Gleichung im System des Projektilkerns einfach durch die

Ersetzungen

$$Z_T \rightarrow Z_P \quad \text{und} \quad Z_P \rightarrow Z_T \quad (5.2)$$

in (2.1) erhält. Diese Form der Entwicklung wurde bisher in den meisten nichtstörungstheoretischen Rechnungen zur Elektron-Positron-Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektilions benutzt [Mom91, Rum91, Bal93, Bal94].

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Rechnungen für die Streuung von  $U^{91+}$  an  $Au^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon durchgeführt. Diese Stoßenergie entspricht einem Lorentz-Faktor  $\gamma = 2$ . Im Anfangszustand ist die K-Schale des Projektilkerns mit einem Elektron besetzt. Der hier verwendete Basissatz enthält alle gebundenen Zustände des  $U^{91+}$ -Projektilkerns mit  $n \leq 3$  und  $|\kappa| \leq 2$  und Kontinuumszustände mit Energien in den Bereichen  $-5mc^2 \leq E \leq -mc^2$  und  $mc^2 \leq E \leq 3mc^2$ . Auch bei den Kontinuumszuständen wurden nur solche mit  $|\kappa| \leq 2$  berücksichtigt. Die Breite der verwendeten stationären Wellenpakete betrug hier  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$ . Damit erhält man insgesamt 238 Basiswellenfunktionen, wovon 22 gebundene Zustände und 216 Kontinuumszustände sind. Diese Basis ist zwar nicht sehr groß und man kann nicht erwarten, daß im Rahmen dieser Entwicklung eine Konvergenz erreicht werden kann, doch die hier vorgestellten Rechnungen sollen dem Zweck dienen, die wesentlichen Eigenschaften dieser Methode aufzuzeigen. Abbildung 5.1 zeigt die Wahrscheinlichkeiten für Anregung und Ionisation für dieses Stoßsystem bei einem Stoßparameter von  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$ . Ebenfalls dargestellt ist die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$  in Stößen von nackten Uran-Kernen mit  $Au^{79+}$  bei der gleichen Stoßenergie. Diese wurden unter Benutzung der bereits erwähnten Symmetrie unter Zeitumkehr berechnet. Um die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale zu erhalten, muß man die in der Abbildung dargestellte Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in den Zustand  $1s_{1/2}$  mit  $m = \frac{1}{2}$  lediglich mit einem Faktor zwei multiplizieren. Die Zeitentwicklung wurde zur Zeit  $t = -28\frac{\lambda_c}{c}$  gestartet und bei  $t = 29\frac{\lambda_c}{c}$  gestoppt. Man erkennt aus der Abbildung, daß die Wahrscheinlichkeiten für Ionisation und Anregung bei sehr kleinen Werten beginnen und bereits sehr kurze Zeit, nachdem das Projektil den Targetkern passiert hat, stationäre Werte erreichen. Insbesondere bei der Ionisation sieht man, daß die Wahrscheinlichkeiten für Zeiten um  $t \approx 0$  stark ansteigen, der gesamte Prozeß also innerhalb sehr kurzer Zeit abläuft. Die Kurve für die Wahrscheinlichkeit für eine Anregung des Projektilions zeigt einen etwas flacheren Verlauf. Nach der Zeitentwicklung erhält man für die Ionisationswahrscheinlichkeit 46,3% und für die Anregungswahrscheinlichkeit 14,3%. Ganz anders verhalten sich aber die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang. Für Zeiten um  $t = 0$  erreichen diese Wahrscheinlichkeiten Werte von einigen Prozent, um dann sehr schnell wieder um etwa zwei Größenordnungen auf einen Wert von etwa  $5 \times 10^{-4}$  abzufallen. Die Wahrscheinlichkeiten werden jedoch nicht stationär, sondern oszillieren stark und scheinen insgesamt noch eine Tendenz zu noch kleineren Werten zu haben. Daraus folgt, daß die Zeitentwicklung

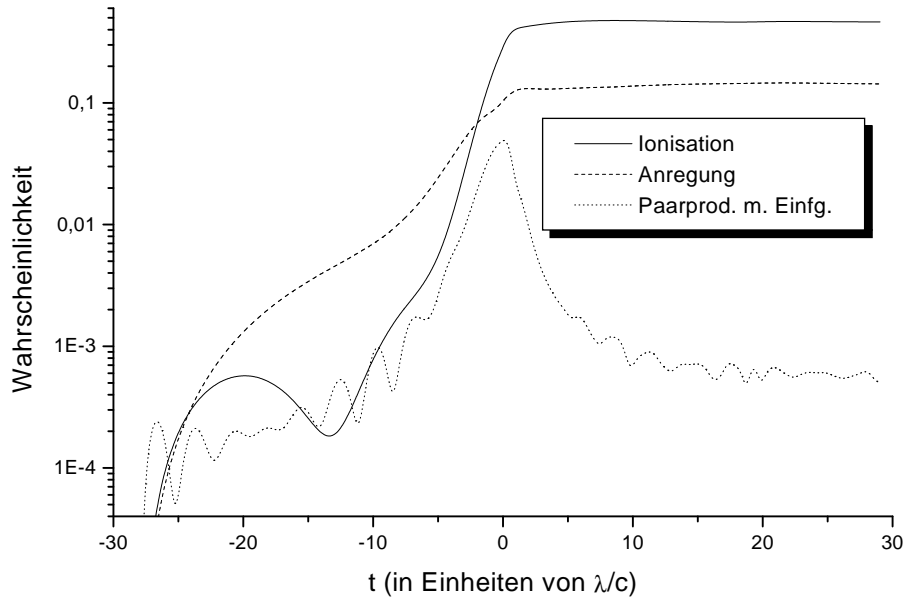


Abbildung 5.1: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation (durchgezogen) und Anregung (gestrichelt) in Stößen von  $U^{91+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei  $930 \text{ MeV/Nukleon}$  und einem Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c \approx 50 \text{ fm}$ . Die gepunktete Kurve zeigt die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$  des Projektilkerns in Stößen von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$  bei der gleichen Energie und bei gleichem Stoßparameter.

über noch längere Zeiten ausgedehnt werden muß, damit die Wahrscheinlichkeiten gegen stationäre Werte konvergieren. Dieses Verhalten der Wahrscheinlichkeiten ist überraschend. Intuitiv sollte man erwarten, daß Paare nur erzeugt werden, wenn die Kerne sehr nahe beieinander sind, und daß die Erzeugung von Elektron-Positron-Paaren dementsprechend ein schneller Prozeß ist. Stattdessen sieht man, daß es für kurze Zeit, wenn die Kerne sehr dicht beieinander sind, zur Erzeugung von virtuellen Elektron-Positron-Paaren kommt, die aber größtenteils nachher wieder verschwinden, und daß sich die Wahrscheinlichkeiten auch für große Zeiten, wenn die Kerne schon weit voneinander entfernt sind, noch verändern. Man darf dabei nicht vergessen, daß den Wellenfunktionen nur für sehr große Zeiten, wenn die Kerne weit voneinander entfernt sind, eine physikalische Bedeutung zukommt. Würde man eine andere, von der hier verwendeten verschiedene Basis verwenden, die asymptotisch wieder in die atomaren Wellenfunktionen übergeht, so würde man auch ein anderes Verhalten der Wahrscheinlichkeiten beobachten.

Das hier beobachtete adiabatische Verhalten läßt sich noch am ehesten durch eine Distortion des physikalischen Vakuums durch die Anwesenheit des anderen Kerns erklären. In der hier angestellten Betrachtung, die die Symmetrie unter

Zeitumkehr ausnutzt, kann man das so verstehen:

Die Wellenfunktion des Grundzustands wird durch die Anwesenheit des Stoßpartners stark deformiert. Nach dem Stoß stellt sich im Wesentlichen wieder eine Situation ähnlich der vor dem Stoß ein. Betrachtet man den Stoß als ein quasistatisches Problem, dann kann man die Eigenzustände des Hamiltonoperators mit dem Potential, das durch die beiden Kerne verursacht wird, in Abhängigkeit vom Abstand der beiden Kerne bestimmen. Man erhielte dann molekulare Wellenfunktionen und die Bindungsenergie des Grundzustandes würde für kleine Abstände der Kerne größer werden. Diese Grundzustandswellenfunktion würde dann gerade für kleine Abstände der Kerne einen großen Überlapp mit den atomaren Wellenfunktionen des negativen Kontinuums von einem der beiden Stoßpartner besitzen. Nach dem Stoß, für große Abstände der beiden Kerne, gehen die molekularen Wellenfunktionen wieder in atomare Zustände über und der Überlapp mit den atomaren Wellenfunktionen zu negativer Energie verschwindet dann wieder. Auch wenn sich dieses quasistatische Bild auf die in dieser Arbeit betrachteten relativistischen Stöße nicht direkt übertragen läßt, so kann man es doch zum qualitativen Verständnis des hier beobachteten Verhaltens der Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion heranziehen.

Das starke Ansteigen und Abfallen der Wahrscheinlichkeiten ist nicht nur in Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle zu finden, sondern ist allen Methoden gemeinsam, bei denen die Dirac-Gleichung im System des Projektilkerns gelöst wird und die Wahrscheinlichkeiten für Paarproduktion durch Projektion auf atomare Wellenfunktionen des Projektilkerns berechnet werden [Mom91, Rum91, Mom92, Thi92, Bal93, Bal94, Mom96, Bal97, Bus00].

Wie bereits weiter oben angedeutet wurde, ist die hier gewählte Zeitspanne, in der die Zeitentwicklung durchgeführt wird, offensichtlich nicht ausreichend, um eine Konvergenz der Wahrscheinlichkeiten bezüglich der Zeit zu erreichen. Angesichts dieser Tatsache ist es nicht überraschend, daß in älteren Rechnungen zur Paarproduktion mit Einfang [Mom91, Mom92, Rum91] extrem hohe Werte für die Wahrscheinlichkeiten gefunden wurden, die mehr als eine Größenordnung über den Ergebnissen der Störungstheorie erster Ordnung lagen. Neuere Rechnungen [Mom96, Bus00] zeigen, daß diese starken Überhöhungen unrealistisch sind. Busic [Bus00] zeigte, daß es notwendig ist, die Rechnungen mit einer Eichung durchzuführen, die die Langreichweitigkeit der Wechselwirkung beseitigt. In seinen Rechnungen mit dem Verfahren der Finiten Differenzen verwendete er die Coulomb-Randbedingungen (siehe Abschnitt 3.4) und zeigte, daß damit die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion wesentlich schneller stationär werden. Die Adiabazität der Amplituden, also das zunächst starke Ansteigen der Wahrscheinlichkeiten bis auf Werte von einigen Prozent und das starke Abfallen der Wahrscheinlichkeiten nach dem Stoß, blieb jedoch weitgehend erhalten. Während Busic die Zeitentwicklung bei Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei 930 MeV/Nukleon nur über eine relativ kurze Zeitspanne von  $t = -13, 2 \frac{\lambda_c}{c}$  bis  $t = 15, 0 \frac{\lambda_c}{c}$  ausdehnte, fand er für kleine Stoßparameter Wahrscheinlichkeiten für

gebunden-freie Paarproduktion, die weniger als eine Größenordnung größer sind als das störungstheoretische Resultat. Während Momberger [Mom92] die starke Überhöhung der Wahrscheinlichkeiten über die Ergebnisse der Störungstheorie noch auf die Distortion des Vakuums durch die starken Felder des Projektions zurückführte, muß man heute davon ausgehen, daß diese im wesentlichen durch die Unzulänglichkeiten der Zeitentwicklung bei Momberger und dadurch, daß keine Coulomb-Randbedingungen verwendet worden sind, verursacht wurden. In Rechnungen für gebunden-freie Paarproduktion in Stößen von Pb-Kernen bei sehr hohen Stoßgeschwindigkeiten zeigte Baltz [Bal97], daß man im Rahmen von Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle eine Überhöhung der Wahrscheinlichkeiten über die Störungstheorie findet. Eine für unendlich hohe Lorentz-Faktoren  $\gamma$ , also wenn sich der Targetkern (im Ruhesystem des Projektilkerns gemessen) mit Lichtgeschwindigkeit bewegt, exakte Methode aber Wahrscheinlichkeiten ergibt, die sogar kleiner als die störungstheoretischen Wahrscheinlichkeiten sind. Baltz führte das auf die Diskretisierung des Kontinuums mit stationären Wellenpaketen bei dem Verfahren der gekoppelten Kanäle und auf die oben beschriebene Adiabaticität der Amplituden zurück. Die Rechnungen mit den Wellenpaketen seien nicht in der Lage, das starke Ansteigen der Wahrscheinlichkeiten für  $t < 0$  und den fast ebenso starken Abfall für  $t > 0$  korrekt zu beschreiben. Diese Schwierigkeiten mit der Methode der gekoppelten Kanäle führten Baltz sogar dazu, den Nutzen dieser Methode, auch bei kleineren Stoßgeschwindigkeiten, anzuzweifeln:

*„This failure of the coupled channels method in the ultrarelativistic limit makes one question its utility even at more modest relativistic energies, where the same properties of adiabaticity, basis truncation, and wave packets remain.”*

Auf ein weiteres Problem, das mit den oben beschriebenen jedoch in Verbindung steht, hat Momberger [Mom96] hingewiesen. In Rechnungen, bei denen die zeitabhängige Dirac-Gleichung auf einem Gitter im Impulsraum gelöst wurde, fand er, daß die Wahrscheinlichkeiten für große Stoßparameter nicht stark genug abfallen, um eine Konvergenz der Integration von  $P(b)b$ , wobei  $P(b)$  die Wahrscheinlichkeit für die gebunden-freie Paarproduktion ist, zu garantieren. Um jedoch endliche Wirkungsquerschnitte zu erhalten, interpretierte Momberger die Wahrscheinlichkeiten für große Stoßparameter als einen numerischen Untergrund, den er von den in seinen Rechnungen erhaltenen Wahrscheinlichkeiten abzog. Dieser „Untergrund“ war jedoch in der Größenordnung der Wahrscheinlichkeiten selber, so daß die Genauigkeit dieser Rechnungen nicht sehr groß ist. Für den langsamen Abfall der Wahrscheinlichkeiten mit größer werdendem Stoßparameter muß vermutlich ein anderer Effekt verantwortlich gemacht werden. Für größere Stoßparameter muß nämlich die Rechnung über einen größeren Zeitraum ausgedehnt werden als für kleine Stoßparameter, um eine Konvergenz der Wahrscheinlichkeiten bezüglich der Zeit zu erreichen. Um das einzusehen, definieren wir eine effektive Wechselwirkungsdauer  $\bar{t}_{int}$  als die Zeit, die benötigt wird, damit das Liénard-Wiechert-Potential des Targetions am Ort des Projektions auf

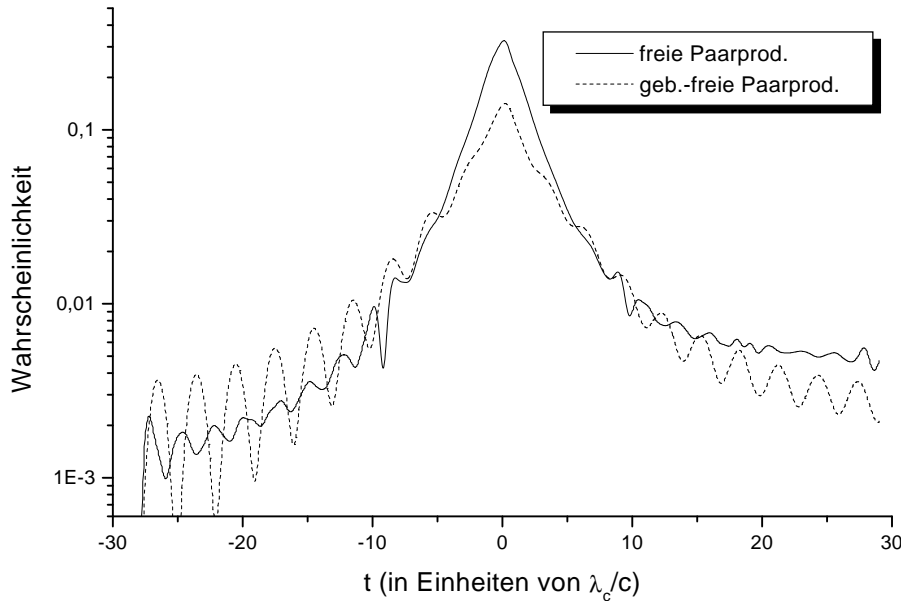


Abbildung 5.2: Wahrscheinlichkeiten für Elektron-Positron-Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon und einem Stoßparameter von  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$ .

ein Zehntel des Maximalwertes abgefallen ist. Bei einem Lorentzfaktor  $\gamma = 2$ , was einer Projektilenergie von 930 MeV/Nukleon entspricht, erhält man für den Stoßparameter  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$  eine effektive Wechselwirkungsdauer von  $\bar{t}_{int} = 7\frac{\lambda_c}{c}$ , für einen Stoßparameter von  $b = 2\lambda_c$  erhält man jedoch bereits  $\bar{t}_{int} = 107\frac{\lambda_c}{c}$ .

Außer den oben besprochenen Rechnungen, bei denen als Anfangszustand der Grundzustand des Projektilions benutzt wurde, kann man natürlich auch solche Rechnungen durchführen, bei denen der vollständig besetzte Dirac-See den Anfangszustand bildet und jeden Einteilchenzustand des negativen Kontinuums separat in der Zeit entwickeln. Auf diese Art und Weise kann man auch die Wahrscheinlichkeiten für die freie Paarproduktion gewinnen. Abbildung 5.2 zeigt das Ergebnis dieser Rechnung. Die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang scheint hier schlechter zu konvergieren und oszilliert stark für Zeiten  $t > 0$ . Offensichtlich erlaubt die Rechnung keine Rückschlüsse auf die physikalischen Wahrscheinlichkeiten, die sich ergeben, wenn man die Rechnung in der Zeit beliebig weit ausdehnen würde.

Im folgenden Abschnitt wird gezeigt werden, daß die oben besprochenen Probleme, die sich im Rahmen von nichtstörungstheoretischen Verfahren ergeben, zu einem großen Teil durch eine einfache Lorentz-Transformation auf das System des Targetkerns beseitigen lassen, ohne daß dazu Eichtransformationen benutzt werden müssen.



## 5.2 Entwicklung um den Projektilkern

Für die Lösung der Diracgleichung (2.1) im System des Targetkerns verwenden wir nun eine Entwicklung nach den Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Projektilkerns. Die Entwicklung kann dann geschrieben werden als

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{k'} a_{k'}(t) S^{-1}(v) \psi_{k'}(\vec{r}', t'). \quad (5.3)$$

Dieser Ansatz führt auf die gekoppelten Gleichungen

$$i \frac{da_{k'}(t)}{dt} = \sum_{i'} V_{k'i'} a_{i'}(t), \quad (5.4)$$

wobei vorausgesetzt wurde, daß die Basisfunktionen  $S^{-1}(v) \psi_{k'}(\vec{r}', t')$  Lösungen der zeitabhängigen Dirac-Gleichung mit dem Projektilkernpotential sind. Die Basisfunktionen „wandern“ in dieser Rechnung mit dem Projektilkern. Dieser Zugang erscheint zunächst wenig intuitiv. Außerdem haben wir bereits in Abschnitt 4.2 gesehen, daß die Berechnung der Projektil-Projektil-Matrixelemente (Matrixelemente bezüglich zweier Basisfunktionen, die am Projektil zentriert sind) erheblich zeitaufwendiger ist als die Berechnung der Matrixelemente bei einer Rechnung im System des Projektilkerns, wo die Basisfunktionen fest im Raum stehen und die Berechnung der Matrixelemente auf eindimensionale numerische Integrale reduziert werden kann. Da beide Koordinatensysteme durch eine Lorentz-Transformation ineinander überführt werden können, müssen die berechneten Wahrscheinlichkeiten natürlich gleich sein. Im allgemeinen ist das jedoch nur dann richtig, falls wir die Dirac-Gleichung exakt lösen können. Die störungstheoretischen Wahrscheinlichkeiten sind ebenfalls, wie bereits in 3.3 bemerkt, invariant unter Lorentz-Transformationen. Dies gilt jedoch im allgemeinen nicht mehr für Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle, da man dabei nur eine endliche Anzahl von Kanälen berücksichtigen kann.

Für die Darstellung des kontinuierlichen Spektrums verwenden wir wieder die stationären Wellenpakete. Das führt nun zu Problemen, denn wie bereits in 3.2 bemerkt wurde, sind diese weder Lösungen einer zeitabhängigen noch einer stationären Dirac-Gleichung. Diese Tatsache müßte bei der Aufstellung der Kanalgleichungen berücksichtigt werden. Unproblematisch wäre dagegen die Verwendung von Weylschen Wellenpaketen, die ja Lösungen der zeitabhängigen Dirac-Gleichung sind. Beachten müßten wir streng genommen auch, daß die stationären Wellenpakete nach Ausführen eines Lorentz-Boosts nicht mehr orthogonal aufeinander und auf den gebundenen Wellenfunktionen stehen. Das führt zu Schwierigkeiten bei der physikalischen Interpretation der Wellenpakete. Wir werden daher im folgenden die stationären Wellenpakete als eine Näherung für die Weylschen Wellenpakete auffassen und annehmen, daß sie näherungsweise die zeitabhängige Dirac-Gleichung erfüllen. In 3.2 haben wir gezeigt, daß diese Näherung nur dann

akzeptabel ist, wenn  $\Delta E t_{int} \ll 1$ , wobei  $t_{int}$  die Dauer der Wechselwirkung sein soll. Wir werden im folgenden sehen, daß diese Bedingung im allgemeinen nicht erfüllt ist. Wir werden unsere Näherung aber testen, indem wir Rechnungen mit Wellenpaketen verschiedener Breiten  $\Delta E$  durchführen und die Ergebnisse miteinander vergleichen. Für kleine  $\Delta E$  sollte man bessere Näherungen für echte Kontinuumsfunktionen erhalten. Die Gesamtwahrscheinlichkeit bleibt bei diesen Rechnungen stets erhalten, da für die Matrixelemente die Beziehung  $V_{i'k'} = V_{k'i'}^*$  gilt.

### 5.2.1 Rechnungen für Stöße von $U^{92+}$ mit $Au^{79+}$ , $Ag^{47+}$ und $Cu^{29+}$

Wir betrachten zunächst Stöße von  $U^{92+}$ - mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei einer Projektilgeschwindigkeit, die einem Lorentz-Faktor von  $\gamma = 2$  entspricht. Die Rechnungen werden im System des Target-Ions, also des Au-Kerns, durchgeführt, und wir verwenden eine Basis, die um den Projektilkern, also das  $U^{92+}$ -Ion zentriert ist. In unserer Basis enthalten sind alle gebundenen Wellenfunktionen mit  $n \leq 3$  and  $|\kappa| \leq 2$ . Für die Darstellung des kontinuierlichen Spektrums verwenden wir stationäre Wellenpakete mit  $-5mc^2 \leq E \leq -mc^2$  und  $mc^2 \leq E \leq 5mc^2$ . Alle Wellenpakete haben die gleiche Breite  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$ . Auch bei den Wellenpaketen beschränken wir uns auf Drehimpulse mit  $|\kappa| \leq 2$ . Ferner berücksichtigen wir nur die Kopplung zwischen Zuständen, für die  $|m_i - m_f| \leq 1$  gilt. Die Basis enthält insgesamt 310 Basiswellenfunktionen, wovon 22 gebundene Wellenfunktionen sind. Diese Näherung ist anwendbar, da der überwiegende Beitrag zur Paarproduktion von kleinen Stoßparametern herrührt, wo näherungsweise eine Symmetrie bezüglich Rotationen um die  $z$ -Achse vorliegt. Wir beginnen die Zeitentwicklung bei  $t = -30 \frac{\lambda_c}{c}$  und rechnen bis  $t = 30 \frac{\lambda_c}{c}$ .

Abbildung 5.3 zeigt die Zeitentwicklung des Erwartungswerts für die Zahl der erzeugten freien Elektron-Positron-Paare für verschiedene Stoßparameter. Angesichts der Ergebnisse, die im vorhergehenden Abschnitt im Rahmen einer Entwicklung der Wellenfunktion im Projektilsystem erhalten wurden, muß das Verhalten der Wahrscheinlichkeiten bei den hier betrachteten Rechnungen überraschen. Wir sehen, daß die Wahrscheinlichkeiten sehr schnell stationär werden. Man kann sagen, daß der gesamte Prozeß sich überhaupt nur in dem kleinen Zeitraum  $-5 \frac{\lambda_c}{c} \leq t \leq 5 \frac{\lambda_c}{c}$  abspielt, die Wechselwirkungsdauer also etwa  $10 \frac{\lambda_c}{c}$  beträgt. Das entspricht einer Zeitspanne von etwa  $10^{-20}$  s. Zwar werden auch bei diesen Rechnungen die Wahrscheinlichkeiten maximal für  $t \approx 0$ , aber das Maximum der Wahrscheinlichkeiten ist im Vergleich zu den Rechnungen im System des Projektilkerns wesentlich schwächer ausgeprägt. So erreichen die Wahrscheinlichkeiten hier für den kleinsten Stoßparameter Werte, die nur etwas mehr als doppelt so groß sind wie der stationäre Wert für große  $t$ . Die vorher bereits diskutierte Adiabazität der Amplituden ist also bei diesen Rechnungen deutlich reduziert. Man

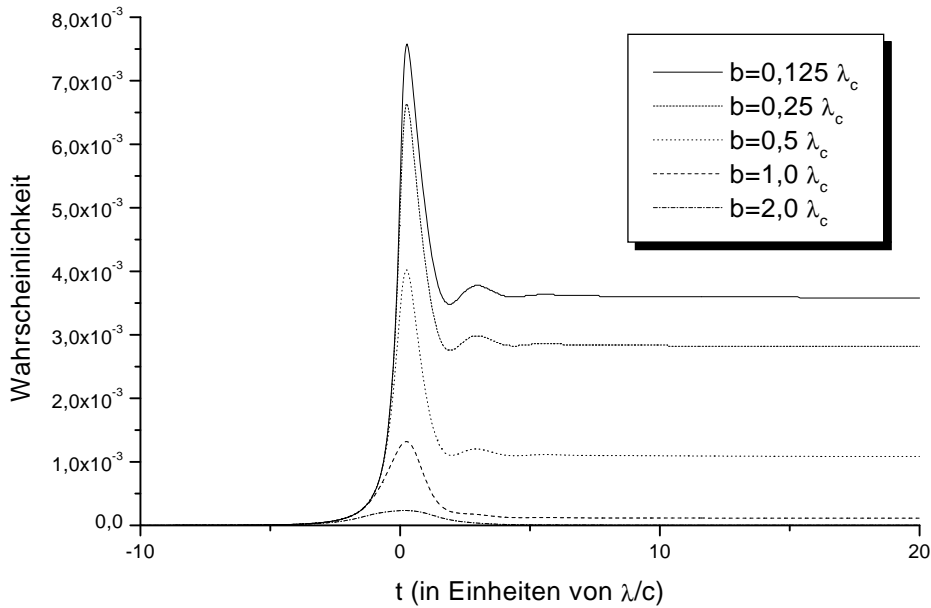


Abbildung 5.3: Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes für die Zahl freier Elektron-Positron-Paare in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon für verschiedene Stoßparameter.

bedenke, daß der Anstieg und das anschließende Abfallen der Wahrscheinlichkeiten in den Rechnungen aus Abschnitt 5 sich fast über zwei Größenordnungen erstrecken und die vorher gezeigten Abbildungen 5.1 und 5.2 eine logarithmische Skalierung der Ordinate verwenden. Für Rechnungen mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle sind die hier beobachteten Eigenschaften besonders wünschenswert, da man die Rechnungen auf einen relativ kleinen Zeitraum beschränken kann und nur die Matrixelemente in diesem Zeitraum benötigt werden.

Für das gleiche Stoßsystem wurden auch Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang berechnet. Abbildung 5.4 zeigt den Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten Paare mit dem Elektron in einem gebundenen Zustand. Wir erkennen ein ähnliches Verhalten wie im Fall der freien Paarproduktion, doch dauert es hier etwas länger, bis die Amplituden stationär werden. Die Wahrscheinlichkeiten zeigen auch für große Zeiten noch einen leichten Anstieg.

Weitere Rechnungen wurden für die Stoßsysteme  $U^{92+} + Ag^{47+}$  und  $U^{92+} + Cu^{29+}$  durchgeführt. Die stoßparameterabhängigen Wahrscheinlichkeiten  $P(b)$  für die freie Paarproduktion sind in Abbildung 5.5 für die drei verschiedenen Stoßsysteme dargestellt. Man sieht, daß die Wahrscheinlichkeiten für Paarproduktion für große Stoßparameter schnell abfallen. Ebenfalls dargestellt in dieser Abbildung sind die Ergebnisse, die man mit dem gleichen Basissatz in der Störungstheorie erster Ordnung findet. Deutlich erkennbar ist, daß die mit dem Verfahren der gekoppelten

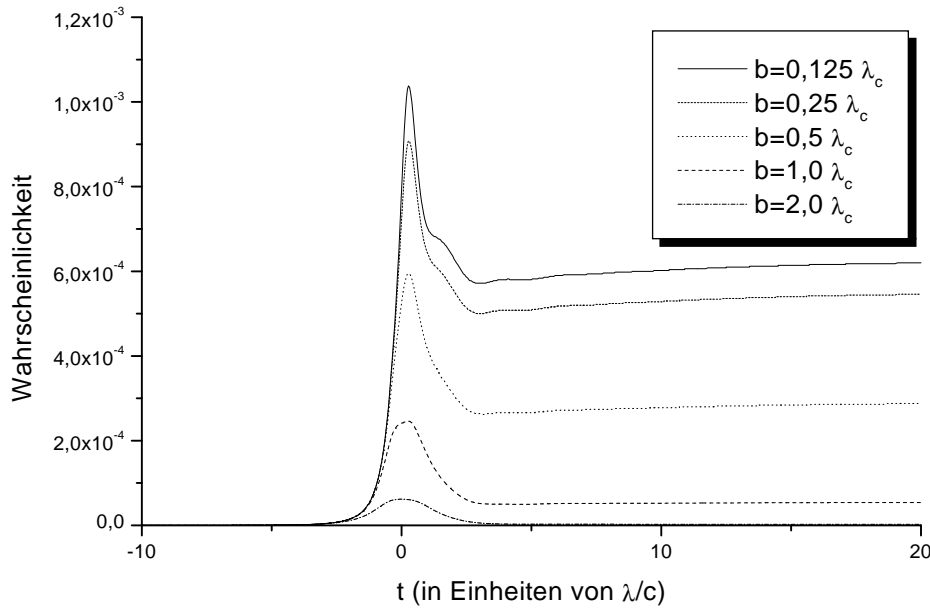


Abbildung 5.4: Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes für Elektron-Positron-Paare mit Einfang des Elektrons in einen gebundenen Zustand des Projektilkerns in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon für verschiedene Stoßparameter.

Kanäle berechneten Wahrscheinlichkeiten insbesondere bei kleinen Stoßparametern deutlich über den störungstheoretischen Werten liegen und für große Stoßparameter in die Ergebnisse der Störungstheorie übergehen. Man sieht außerdem, daß die nichtstörungstheoretischen Effekte für die höhergeladenen Targetionen deutlich stärker ausgeprägt sind. Auch der Stoßparameter, ab dem die Ergebnisse der nichtstörungstheoretischen Rechnung mit denen der störungstheoretischen in etwa übereinstimmen, sind für die höhergeladenen Targetionen größer. Für das  $Au^{79+}$ -Ion erhält man bei einem Stoßparameter  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$  als Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten freien Paare  $\langle N_{e^-e^+} \rangle = 3,6 \times 10^{-3}$ , während man mit der Störungstheorie nur  $\langle N_{e^-e^+} \rangle = 1,3 \times 10^{-3}$  findet. Für die Paarproduktion mit Einfang findet man mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle  $\langle N_{e^-e^+} \rangle = 6,2 \times 10^{-4}$  und mit der Störungstheorie  $\langle N_{e^-e^+} \rangle = 1,8 \times 10^{-4}$ . Die nichtstörungstheoretischen Effekte sind also bei der gebunden-freien Paarproduktion etwas stärker. Im Vergleich dazu wurde bei der Rechnung im System des Projektilkerns, die in Abschnitt 5.1 diskutiert wurde (siehe auch die Abbildung 5.2), eine Wahrscheinlichkeit für die freie Paarproduktion von  $\langle N_{e^-e^+} \rangle = 4,7 \times 10^{-3}$  berechnet. Das Ergebnis dieser Rechnung für die Paarproduktion mit Einfang war  $\langle N_{e^-e^+} \rangle = 2,1 \times 10^{-3}$ . Dabei muß aber berücksichtigt werden, daß die Wahrscheinlichkeiten nach der Zeitentwicklung noch keine stationären Werte angenommen

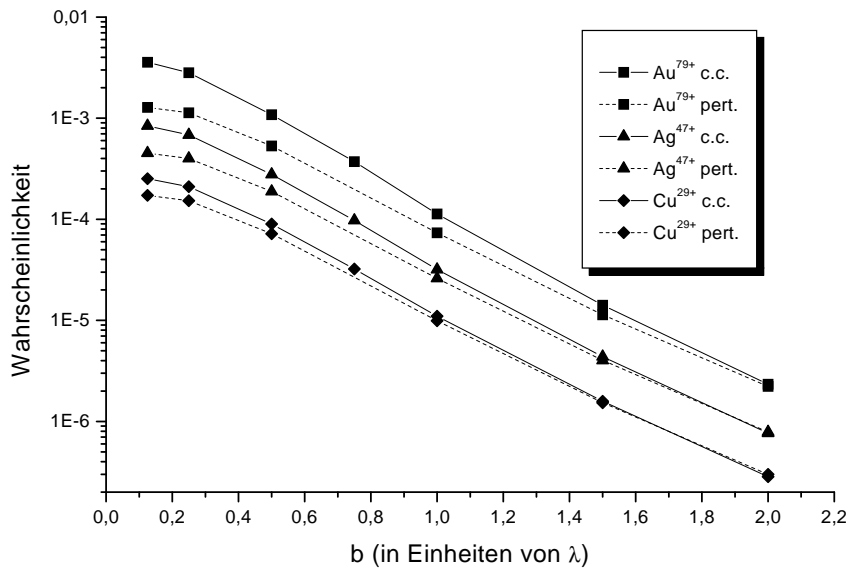


Abbildung 5.5: Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten freien Elektron-Positron-Paare in Abhängigkeit vom Stoßparameter  $b$  für die Stoßsysteme  $U^{92+}$  auf  $Au^{79+}$ ,  $Ag^{47+}$  und  $La^{57+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon. Die durchgezogenen Kurven zeigen das Ergebnis der gekoppelten Rechnung, die gestrichelten Linien sind das Ergebnis der Störungstheorie.

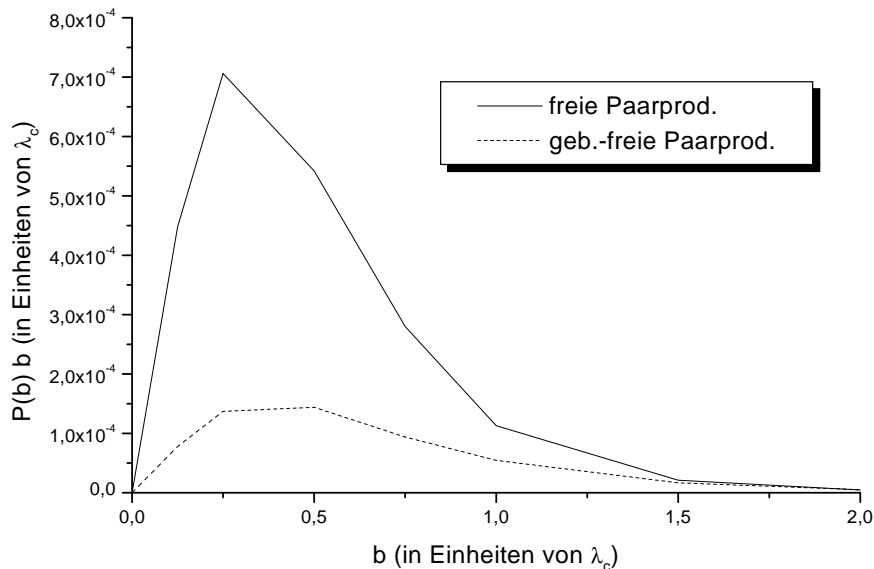


Abbildung 5.6:  $P(b)b$  für freie und gebunden-freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon in Abhängigkeit vom Stoßparameter  $b$ .

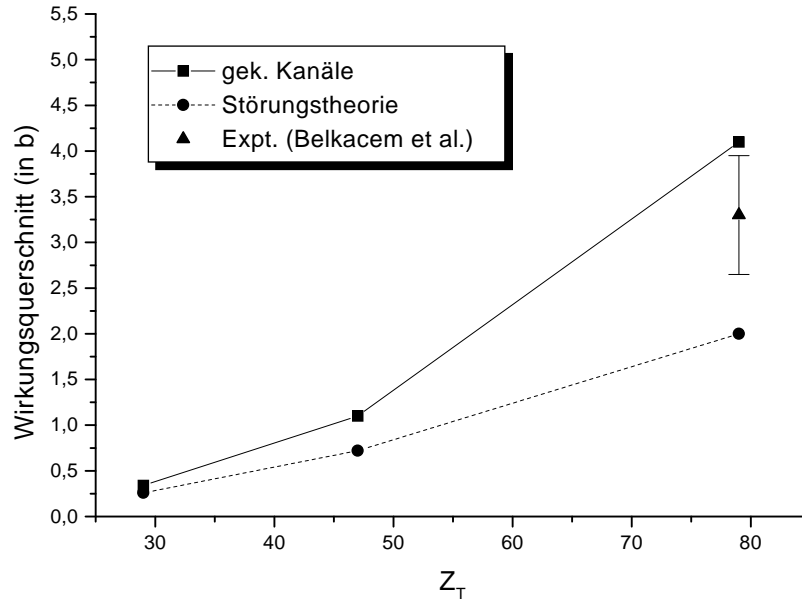


Abbildung 5.7: Wirkungsquerschnitt für freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$ ,  $Ag^{47+}$  und  $Cu^{29+}$  bei 930 MeV/Nukleon. Die Vierecke zeigen das Ergebnis der gekoppelten Rechnung, die Kreise sind das Ergebnis einer störungstheoretischen Rechnung. Das Dreieck ist ein experimentelles Ergebnis von Belkacem et al. [Bel97].

hatten. Außerdem war der Basissatz bei diesen Rechnungen etwas kleiner, da nur positive Kontinuumsenergien bis  $E = 3mc^2$  berücksichtigt wurden.

Abbildung 5.6 zeigt die mit dem Stoßparameter multiplizierten Wahrscheinlichkeiten  $bP(b)$  für das Stoßsystem  $U^{92+} + Au^{79+}$ . Die Fläche unter dieser Kurve entspricht dem totalen Wirkungsquerschnitt. Aus der Abbildung wird ersichtlich, daß die berechneten Wahrscheinlichkeiten mit wachsendem Stoßparameter schnell genug abfallen, um eine Konvergenz der Integration über den Stoßparameter zu erreichen. Aus diesem Grund ist es bei diesen Rechnungen nicht notwendig, einen „numerischen Untergrund“ von den Wahrscheinlichkeiten abzuziehen. Bei den Rechnungen von Tenzer [Ten99] und Momberger [Mom96] hingegen wurde ein solcher „Untergrund“ abgezogen, um die Konvergenz der Integration über den Wirkungsquerschnitt zu erzwingen und damit endliche Werte für den Wirkungsquerschnitt zu erhalten. Die beiden Rechnungen unterscheiden sich jedoch hinsichtlich der Art und Weise, wie dieser Untergrund bestimmt wurde. Man erkennt außerdem, daß das Maximum von  $P(b)b$  für die Erzeugung von freien Elektron-Positron Paaren bei kleineren Stoßparametern liegt als das für die Paarerzeugung mit Einfang.

Abbildung 5.7 zeigt den berechneten totalen Wirkungsquerschnitt für die freie

Paarproduktion für die drei betrachteten Stoßsysteme. Ein Fit ergibt eine Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts von der Ladung des Targetkerns gemäß  $Z_T^{2,5}$ . Das ist eine stärkere Abhängigkeit als die  $Z_T^2$ -Abhängigkeit, die sich aus der Störungstheorie erster Ordnung ergibt. Das Ergebnis der nichtstörungstheoretischen Rechnung, die einen Wirkungsquerschnitt von 4,1 b ergibt, ist größer als der von Belkacem [Bel97] gemessene Wirkungsquerschnitt von  $3,3 \pm 0,65$  b bei einer Stoßenergie von 960 MeV/Nukleon. In den Rechnungen in dieser Arbeit wurden, mit einer Ausnahme, auf die am Ende des nächsten Kapitels kurz eingegangen wird, verschiedene Stoßsysteme bei stets der gleichen Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon betrachtet. Diese Energie entspricht einem Lorentz-Faktor  $\gamma = 2$ . Wir werden jedoch trotzdem die Ergebnisse unserer Rechnungen mit den oben zitierten Experimenten bei einer Stoßenergie von 960 MeV/Nukleon vergleichen. Der Lorentz-Faktor beträgt bei dieser Energie ungefähr 2,03. Dieser sehr kleine Unterschied rechtfertigt einen direkten Vergleich zwischen den von Belkacem gemessenen Wirkungsquerschnitten und den theoretischen Resultaten.

Es stellt sich die Frage, wodurch die Unterschiede im Verhalten der Wahrscheinlichkeiten bei den Rechnungen im Projektil-System und im Target-System verursacht werden. Es ist klar, daß die zeitabhängigen Wahrscheinlichkeiten  $P(t)$  keine Lorentz-invarianten Größen sein können, und man kann demzufolge nicht erwarten, daß die Wahrscheinlichkeiten, die in verschiedenen Koordinatensystemen berechnet werden, das gleiche oder ein ähnliches Verhalten zeigen. Nur für sehr große Zeiten müssen die Wahrscheinlichkeiten die gleichen Werte ergeben, unabhängig vom verwendeten Koordinatensystem. Dennoch ist die starke Reduktion des „adiabatischen“ Verhaltens, die wir bei den Rechnungen im System des Targetkerns beobachten, überraschend. Die Tatsache, daß die im System des Projektilkerns berechneten Wahrscheinlichkeiten erst nach sehr großen Zeiten stationär werden, läßt sich noch am ehesten durch die Langreichweitigkeit der Wechselwirkung erklären. Das Liénard-Wiechert-Potential des Targetkerns fällt am Ort des Projektilkerns für große Zeiten nur mit  $\frac{1}{t}$  ab. Dieses langreichweitige Verhalten kann, wie bereits in Abschnitt 3.4 diskutiert wurde, mit Hilfe der Coulomb-Randbedingungen beseitigt werden. Wie bereits erwähnt, sind die Wahrscheinlichkeiten, die mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle berechnet werden, im allgemeinen nicht invariant unter Eichtransformationen des elektromagnetischen Feldes. Die Anwendung der Coulomb-Randbedingungen stellt eine spezielle Eichtransformation dar. Wir werden nun aber sehen, daß die mit dem oben vorgestellten Verfahren berechneten Wahrscheinlichkeiten unabhängig davon sind, ob Coulomb-Randbedingungen verwendet werden oder nicht. Wie bereits in Abschnitt 3.4 gezeigt wurde, müssen die Basisfunktionen bei der von uns gewählten Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns mit einem Phasenfaktor  $e^{i\nu_T \ln(R-vt)}$  multipliziert werden, wenn die Coulomb-Randbedingungen verwendet werden sollen. Damit hat man dann anstatt von

(5.3) die Entwicklung

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{k'} a_{k'}(t) e^{i\nu_T \ln(R-vt)} S^{-1}(v) \psi_{k'}(\vec{r}', t'). \quad (5.5)$$

Einsetzen dieser Entwicklung in die Dirac-Gleichung (2.1) liefert wieder ein System gekoppelter Gleichungen für die Koeffizienten  $a_{k'}(t)$ . Diese unterscheiden sich lediglich in den zu berechnenden Matrixelementen von den Gleichungen (5.4), die man ohne die Coulomb-Randbedingungen erhält. Man bekommt die neuen Matrixelemente durch die Ersetzung [Tos90b]

$$\frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r} - \frac{1}{R} \quad (5.6)$$

in (4.11), wobei  $R = \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$ . Der zusätzliche Potentialterm ist offensichtlich unabhängig von den Koordinaten. Wenn man voraussetzt, daß verschiedene Basisfunktionen orthogonal zueinander sind, dann bleiben demnach die Matrixelemente zwischen verschiedenen Basisfunktionen von den Coulomb-Randbedingungen unberührt. Nur die Diagonalmatrixelemente werden also von der Ersetzung (5.6) beeinflusst. Diese Tatsache führt aber lediglich zu einem physikalisch unbedeutenden Phasenfaktor in den Amplituden. Die Wahrscheinlichkeiten bleiben also unverändert und sind damit unabhängig davon, ob man Coulomb-Randbedingungen verwendet oder nicht. Man kann dieses Ergebnis auch so auffassen, daß durch die Wahl des speziellen Ansatzes (5.3) bereits die Langreichweitigkeit des Targetpotentials beseitigt wird. Man beachte, daß diese Eigenschaft aus der Tatsache resultiert, daß das zusätzliche Potential  $V_P^{CB}$  (siehe Abschnitt 3.4)

$$V_P^{CB} = -\frac{\alpha Z_T}{R}. \quad (5.7)$$

unabhängig von den Koordinaten ist. Würde man stattdessen eine Entwicklung um den Targetkern benutzen, so wäre das zusätzliche Potential  $V_T^{CB}$ , das man durch die Verwendung der Coulomb-Randbedingung erhielte,

$$V_T^{CB} = -\frac{\gamma \alpha Z_P (1 - v \alpha_z)}{\sqrt{b^2 + v^2 t'^2}}. \quad (5.8)$$

von der Koordinate  $z$  abhängig, da  $t' = \gamma(t - vz)$ . Man kann daraus schließen, daß die explizite Invarianz bezüglich der Anwendung von Coulomb-Randbedingungen auf die Zeitunabhängigkeit des Targetkernpotentials im System des Targetkerns zurückzuführen ist. Das wiederum bedeutet, daß die oben gemachten Aussagen nur für den von uns gewählten Ansatz (5.3) gelten. Jede andere Wahl der Basis, nach der die Wellenfunktion entwickelt wird, und jede andere Wahl des Koordinatensystems führen zwangsläufig zu Wahrscheinlichkeiten, die nicht unabhängig davon sind, ob Coulomb-Randbedingungen verwendet werden oder nicht.



Neben der Tatsache, daß die Wahrscheinlichkeiten sehr schnell ihren stationären Wert erreichen, kann man weiterhin feststellen, daß die Wahrscheinlichkeiten niemals so hohe Werte erreichen wie bei den Rechnungen, die im System des Projektilkerns durchgeführt wurden. Die Ursache dafür dürfte der Exponentialfaktor  $e^{i(E_{k'} - E_{i'})vz'}$  in (4.13) sein. Dieser unterdrückt effektiv die Matrixelemente, bei denen die Differenz  $E_{k'} - E_{i'}$  zwischen den Energien der beiden Zustände  $i'$  und  $k'$  groß ist.

Für das beobachtete Verhalten der Wahrscheinlichkeiten gibt es jedoch auch noch andere mögliche Gründe. Für die Darstellung des kontinuierlichen Spektrums wurden hier stationäre Wellenpakete verwendet. Dabei wurde davon ausgegangen, daß diese als eine Näherung für die zeitabhängigen Weylschen Wellenpakete betrachtet werden dürfen. Nur dann erhält man gekoppelte Gleichungen von der Form (5.4). Außerdem haben wir den Überlapp der Wellenpakete in diesen Rechnungen vernachlässigt. In Abschnitt (3.2) wurde gezeigt, daß sich das Maximum der Dichte bei einem Weylschen Wellenpaket mit der Zeit vom Kern wegbewegt. Da sich der Projektilkern, die Elektronen und die Positronen alle mit Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit bewegen, könnte es sein, daß bei der Verwendung von Weylschen Wellenpaketen ein Teil der Dichte der Wellenpakete für längere Zeit einen Überlapp mit dem Potential des Targetkerns hat, als es bei Verwendung von stationären Wellenpaketen der Fall ist.

Die endliche Ausdehnung der Wellenpakete im Raum führt außerdem dazu, daß durch die Lorentz-Kontraktion in der  $z$ -Richtung mit dem Lorentz-Faktor  $\gamma$  die Ausdehnung der Wellenfunktionen in dieser Richtung weiter reduziert wird. Man erwartet dann auch kürzere Wechselwirkungszeiten, da die Wellenfunktionen dann nur noch für eine kürzere Zeit einen nennenswerten Überlapp mit dem Coulombpotential des Targetkerns haben. Dieser Effekt wäre dann auf die Verwendung von Wellenpaketen zurückzuführen; denn die richtigen Kontinuumswellenfunktionen sind über den gesamten Raum ausgedehnt.

Um die verwendeten Näherungen zu testen, kann man Rechnungen mit Wellenpaketen kleinerer Breite  $\Delta E$  durchführen. Diese erfüllen zunächst die Bedingung  $\Delta E t_{int} \ll 1$  besser und stellen zudem bessere Näherungen für richtige Kontinuumswellenfunktionen dar. Verändern sich die Resultate der Rechnungen sehr stark, dann kann man nicht davon ausgehen, daß die Näherungen mit stationären Wellenpaketen verwendet werden dürfen. Dazu wurden wieder Rechnungen für das Stoßsystem  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei der Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon und bei einem Stoßparameter von  $b = 0.125\lambda_c \approx 48$  fm durchgeführt. Da diese Rechnung lediglich als Test für die stationären Wellenpakete dienen sollte, wurden nur Kanäle mit  $-5mc^2 \leq E \leq -1mc^2$  und  $1mc^2 \leq E \leq 3mc^2$  berücksichtigt. Ferner wurden nur solche Kontinuumszustände in der Basis berücksichtigt, für die  $|\kappa| \leq 1$ . Die Rechnungen wurden unter Verwendung von stationären Wellenpaketen der Breite  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$  (das ist die Breite, die auch in den oben beschriebenen Rechnungen benutzt wurde) und  $\Delta E = \frac{1}{6}mc^2$  durchgeführt. Abbildung 5.8 zeigt die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeiten für die beiden Rechnungen

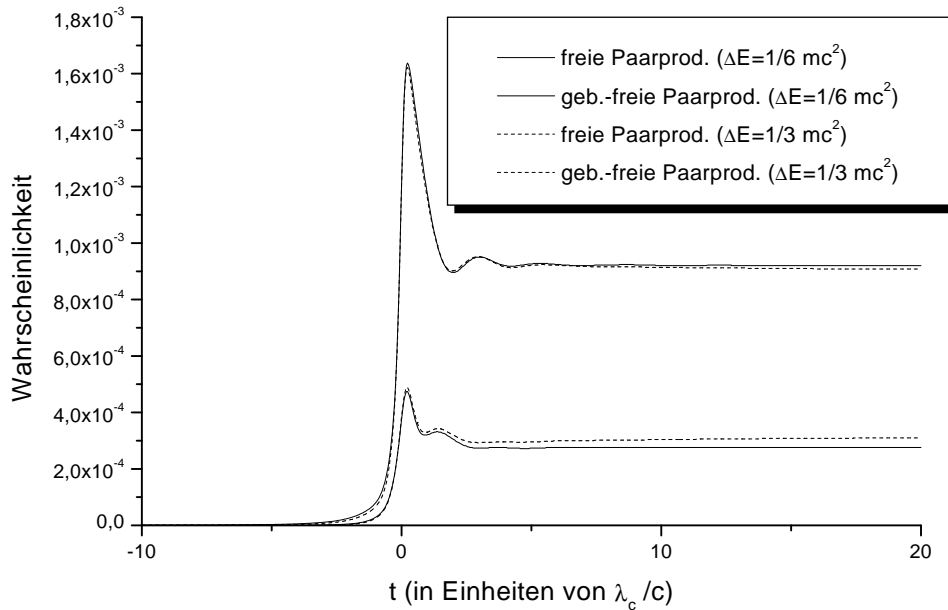


Abbildung 5.8: Vergleich zweier Rechnungen mit Wellenpaketen verschiedener Breite  $\Delta E$  für das kontinuierliche Spektrum. Die beiden oberen Kurven sind das Ergebnis für die freie, die beiden unteren Kurven für die gebunden-freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon und  $b=0,125\lambda_c$ . Durchgezogene Kurve:  $\Delta E = \frac{1}{6}mc^2$ , gestrichelte Kurve:  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$ .

mit den Wellenpaketen verschiedener Breite. Man erkennt, daß der Unterschied zwischen den beiden Ergebnissen, insbesondere im Falle der freien Paarproduktion, nur sehr klein ist. Für die freie Paarproduktion erhält man einen relativen Unterschied, der kleiner als 3% ist, während man einen Unterschied von etwa 10% für die gebunden-freie Paarproduktion bekommt. Daraus darf man schließen, daß das Verhalten der Wahrscheinlichkeiten nicht auf die Näherungen mit den stationären Wellenpaketen zurückzuführen ist, sondern tatsächlich auf die weiter oben diskutierte effektive Beseitigung der Langreichweitigkeit der Wechselwirkung.

Schließlich kann man auch mit dieser Methode Wahrscheinlichkeiten für die Anregung oder die Ionisation eines anfänglich im Projektil gebundenen Elektrons gewinnen, wenn man als Anfangszustand den Grundzustand des  $U^{91+}$ -Projektilions wählt und diesen in der Zeit entwickelt. Mit Hilfe der Symmetrie unter Zeitumkehr lassen sich dann wieder die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektils berechnen. In dieser Rechnung wurde wieder der am Anfang von Abschnitt 5.2.1 beschriebene Basissatz mit 310 Basiszuständen verwendet.

Abbildung 5.9 zeigt die Wahrscheinlichkeit für Elektron-Positron-Paarerzeu-

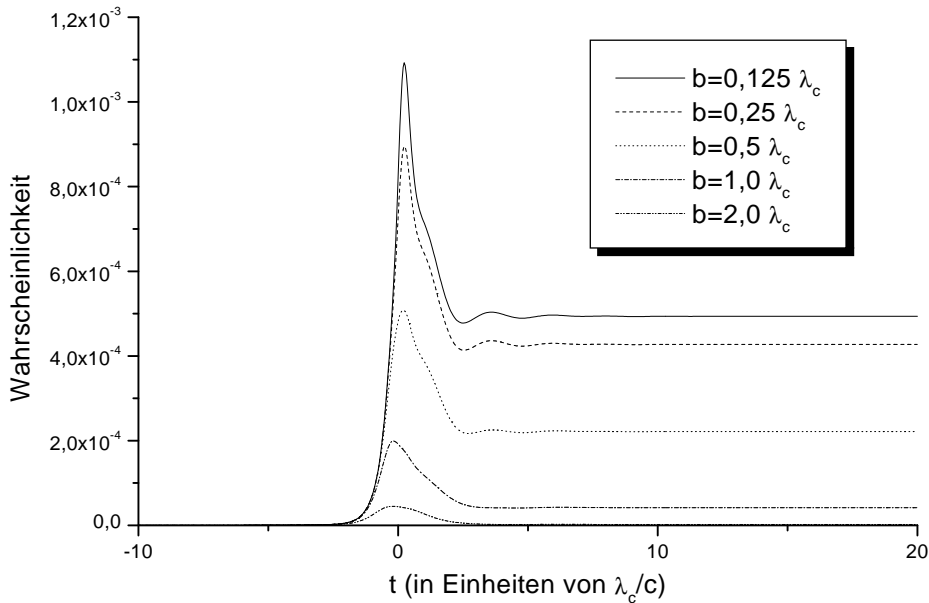


Abbildung 5.9: Wahrscheinlichkeiten für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei 930 MeV/Nukleon in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Stoßparameter.

gung mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$ . Auch hier kann man wieder feststellen, daß die Wahrscheinlichkeiten erstaunlich schnell stationär werden. Diese Rechnung erlaubt auch einen Test der Symmetrie unter Zeitumkehr, indem man die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang mit den Ergebnissen der „vollen“ Rechnung vergleicht, in der der vollbesetzte Dirac-See als Ausgangszustand benutzt wurde. Bei den Rechnungen für das Stoßsystem  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon ist festzustellen, daß bei der verwendeten Basis die relative Abweichung zwischen den beiden verschiedenen Rechnungen weniger als ein Prozent beträgt. Eine solch hervorragende Übereinstimmung zwischen der vollen Rechnung und der Rechnung mit Ausnutzung der Zeitumkehrsymmetrie ließ sich im Projektilsystem (siehe Abschnitt 5.1) nicht feststellen, wo eine relative Abweichung der Wahrscheinlichkeit für die Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale von etwa 7% berechnet wurde. Das ist auch nicht überraschend, da man bei diesen Rechnungen keine Aussagen über die Wahrscheinlichkeiten machen konnte, weil diese noch keine stationären Werte angenommen hatten. Die Symmetrie unter Zeitumkehr ist bei der in diesem Abschnitt verwendeten Methode also sehr gut erfüllt. Die in Abbildung 5.9 gezeigten Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang sind natürlich niedriger als die in Abbildung 5.4 gezeigten, da letztere auch den Einfang in höhere Schalen berücksichtigen. So ließe sich auch der leichte Anstieg der Wahrscheinlichkeiten in Abbildung 5.4 dadurch

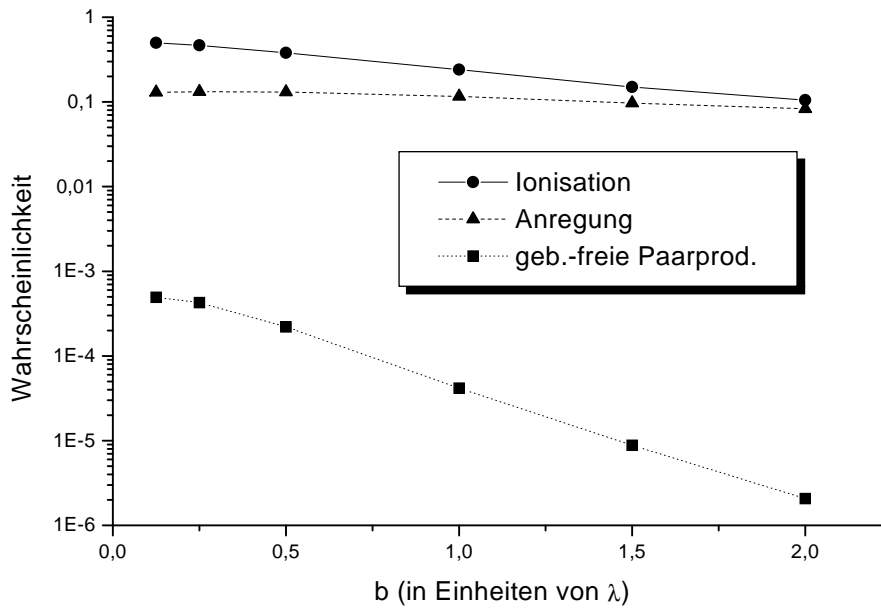


Abbildung 5.10: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation und Anregung in Stößen von  $U^{91+}$  mit  $Au^{79+}$  und für gebunden-freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$ -Ionen bei 930 MeV/Nukleon in Abhängigkeit vom Stoßparameter.

erklären, daß der Einfang in höhere Schalen aufgrund der größeren Ausdehnung der Orbitale auch zu späteren Zeitpunkten noch stattfinden kann.

Abbildung 5.10 zeigt die Wahrscheinlichkeit für Ionisation und Anregung von  $U^{91+}$ -Ionen in Stößen mit  $Au^{79+}$  und für gebunden-freie Paarproduktion in Stößen von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$  in Abhängigkeit vom Stoßparameter  $b$ . Klar erkennbar ist, daß die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion deutlich schneller mit wachsendem Stoßparameter abfällt als die für Ionisation und Anregung. Insbesondere die Anregungswahrscheinlichkeiten sind in dem betrachteten Bereich von Stoßparametern fast konstant. Für die Berechnung von Wirkungsquerschnitten für die Paarproduktion mit Einfang genügt es bei den hier betrachteten Stoßenergien offensichtlich, die Wahrscheinlichkeiten für Stoßparameter bis  $b \approx 2\lambda_c$  zu berechnen. Man kann nun auch die Verteilung der Wahrscheinlichkeit auf die Zustände zu verschiedenen Kontinuumsenergien betrachten. Auf diese Art und Weise gewinnt man zudem einen Eindruck davon, ob eine Konvergenz des Verfahrens bezüglich der maximalen positiven und negativen Energien, die im Basissatz berücksichtigt werden, erreicht ist.

Abbildung 5.11 zeigt, wie sich die Wahrscheinlichkeiten bei einem Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c$  nach der Zeitentwicklung auf die verschiedenen Kontinuumszustände verteilen. Für die positiven Energien erkennt man, daß die Wahr-

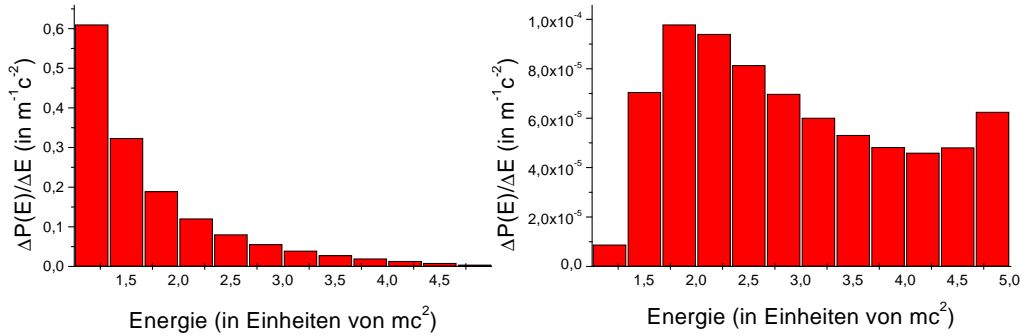


Abbildung 5.11: Verteilung der Wahrscheinlichkeit  $\Delta P(E)/\Delta E$  auf die Kontinuumszustände des Projektilions bei einem Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c$ . Die linke Abbildung zeigt die Verteilung für die Elektronen, die rechte die Verteilung für die Positronen.

scheinlichkeiten  $\Delta P(E)/\Delta E$  mit wachsender Energie stark abfallen. Für die Beschreibung des Ionisationsprozesses ist die maximale positive Energie des bei diesen Rechnungen verwendeten Basissatzes offenbar ausreichend. Das gilt jedoch nicht für die Zustände mit negativen Energien. Hier sieht man zunächst, daß die Wahrscheinlichkeiten für Energien zwischen  $1,5mc^2$  und  $2mc^2$  ein Maximum aufweisen, das aus der Abstoßung der Positronen durch die positiv geladenen Kerne resultiert. Andererseits erkennt man aber auch, daß die Wahrscheinlichkeiten für große Positronenenergien über  $4mc^2$  wieder leicht ansteigen. Dieser Anstieg ist natürlich unphysikalisch. Die Wahrscheinlichkeiten werden durch die Begrenzung der Positronenenergien in Zustände mit Energien unterhalb dieser maximalen Energie „gedrückt“ und können nicht zu größeren Positronenenergien entweichen. Dieses Phänomen ließ sich jedoch bereits in den Rechnungen von Tenzer [Ten99] beobachten. Bei kleinen Stoßparametern zumindest müßte man im Basissatz noch kleinere (negative) Energien berücksichtigen. Für größere Stoßparameter tritt dieses Problem nicht mehr auf, wie Abbildung 5.12 zeigt. Dort ist ebenfalls die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\Delta P(E)/\Delta E$  für Kontinuumszustände des Projektils mit positiver und negativer Energie dargestellt, jedoch für einen Stoßparameter von  $b = 1\lambda_c$ . Bei diesem Stoßparameter ist das Maximum in der Verteilung bei der maximalen Positronenenergie verschwunden. Im Vergleich zu den in Abschnitt 5.1 beschriebenen Rechnungen im Projektilsystem findet man eine gute Übereinstimmung bei den Wahrscheinlichkeiten für Ionisation und Anregung, nicht jedoch bei der Paarerzeugung mit Einfang in die K-Schale. Die Ergebnisse der beiden Rechnungen für die Wahrscheinlichkeiten der verschiedenen Prozesse bei einem Stoßparameter von  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$  sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt. Die leichten Unterschiede für die Ionisation und die Anregung lassen sich dadurch erklären, daß bei der Rechnung im Targetsystem ein größe-

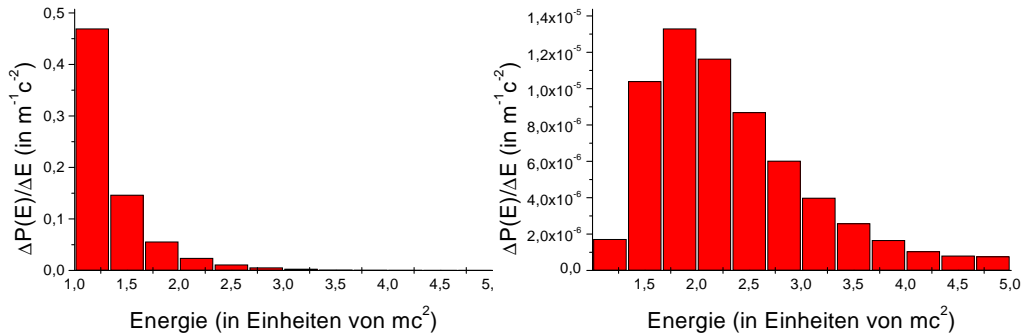


Abbildung 5.12: Verteilung der Wahrscheinlichkeit  $\Delta P(E)/\Delta E$  auf die Kontinuumszustände des Projektilions bei einem Stoßparameter von  $b = 1\lambda_c$ . Die linke Abbildung zeigt die Verteilung für Zustände mit positiver Energie, die rechte die Verteilung für negative Energien.

|                 | Ionisation | Anregung | Paarprod.             |
|-----------------|------------|----------|-----------------------|
| Projektilsystem | 0,463      | 0,143    | $1,01 \times 10^{-3}$ |
| Targetsystem    | 0,498      | 0,130    | $4,94 \times 10^{-4}$ |

Tabelle 5.1: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation, Anregung und Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale, berechnet im Projektilsystem mit dem Verfahren aus Abschnitt 5.1 (obere Zeile) und im Targetsystem (untere Spalte)

rer Basissatz, der Zustände mit höheren Elektronenenergien berücksichtigt, verwendet wurde. Man darf aus der beobachteten Übereinstimmung schließen, daß Anregung und Ionisation mit der Methode der gekoppelten Kanäle sehr gut (in beiden Koordinatensystemen) behandelt werden können.

### 5.2.2 Rechnungen für Stöße von $\text{La}^{57+}$ mit $\text{Au}^{79+}$ , $\text{Ag}^{47+}$ und $\text{Cu}^{29+}$

Neben den gezeigten Rechnungen mit dem  $\text{U}^{92+}$ -Ion als Projektil wurden auch noch Rechnungen für  $\text{La}^{57+}$ -Projektilionen mit den gleichen Targetkernen wie oben und bei der gleichen Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon durchgeführt. Gerade im Stoß mit dem  $\text{Au}^{79+}$ -Ion erscheint dieser Zugang zunächst fraglich, denn dann ist die durch das Target verursachte Störung stärker als das Projektilpotential, das in der verwendeten Basis in allen Ordnungen richtig behandelt wird. Abbildung 5.13 zeigt den Erwartungswert  $\langle N_{e-e^+}(t) \rangle$  für die Anzahl der erzeugten freien Elektron-Positron-Paare in Stößen von  $\text{La}^{57+}$  mit  $\text{Au}^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon. Wieder kann man beobachten, daß die

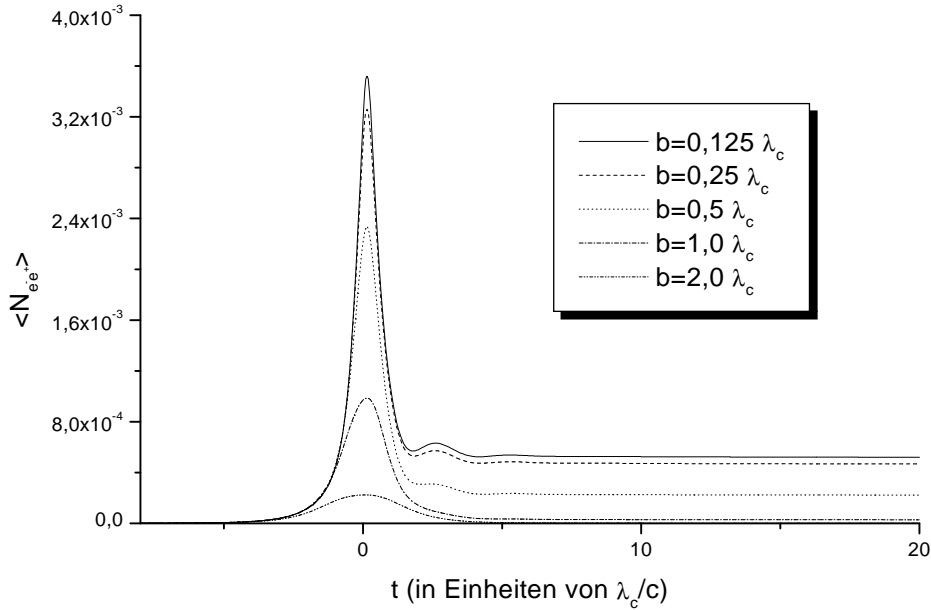


Abbildung 5.13: Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten freien Elektron-Positron-Paare in Stößen von  $\text{La}^{57+}$  mit  $\text{Au}^{79+}$  bei einer Energie von 930 MeV/Nukleon für verschiedene Stoßparameter.

Wahrscheinlichkeiten in dieser Rechnung sehr schnell einen stabilen Wert annehmen. Andererseits fällt auf, daß das Maximum der Wahrscheinlichkeiten im Vergleich zu den stationären Werten stärker als im Falle des  $\text{U}^{92+}$ -Projektils ausgeprägt ist. Das liegt daran, daß das störende Targetpotential hier wesentlich stärker ist als das Projektilpotential. Man darf davon ausgehen, daß man in einer Rechnung, die im Projektilsystem ausgeführt wird, aber mit einer Entwicklung der Wellenfunktion um das  $\text{Au}^{79+}$ -Targetion, ein schwächer ausgeprägtes Maximum finden wird. Man beachte jedoch, daß die hier beobachtete Adiabaticität der Amplituden immer noch deutlich kleiner ist als bei den Rechnungen im Projektilsystem, wo ein Ansteigen und ein Abfallen der Wahrscheinlichkeiten um fast zwei Größenordnungen gefunden wurde. Abbildung 5.14 zeigt den totalen Wirkungsquerschnitt für die Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des  $\text{La}^{57+}$ -Projektilions für verschiedene Targetladungen. Ebenfalls abgebildet sind die experimentellen Ergebnisse von Belkacem et al. [Bel97]. Man findet hier eine sehr gute Übereinstimmung der Rechnungen mit den experimentellen Werten. Allerdings scheint die Abhängigkeit von der Targetladung  $Z_T$  bei den Rechnungen stärker zu sein als die der experimentellen Werte. Während im Experiment eine  $Z_T^{2,65 \pm 0,35}$ -Abhängigkeit von der Targetladung gefunden wurde, erhält man durch einen Fit durch die theoretischen Werte eine Abhängigkeit gemäß  $Z_T^{3,0}$ . Man beachte aber, daß Experiment und Theorie übereinstimmend

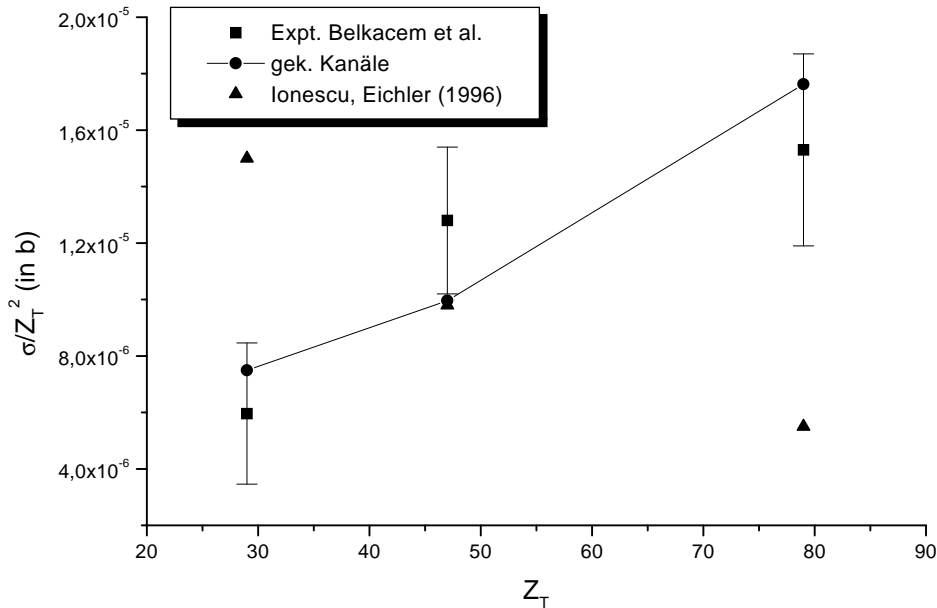


Abbildung 5.14: Wirkungsquerschnitt für Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektils in Stößen von  $\text{La}^{57+}$  mit verschiedenen Targetkernen bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon in Abhängigkeit von der Targetladung  $Z_T$ . Die experimentellen Daten wurden [Bel97] entnommen. Dreiecke: OBK-Näherung nach [Ion96].

eine in diesem Bereich der Targetladung deutlich stärkere Abhängigkeit als die  $Z_T^2$ -Abhängigkeit finden, die sich in der Störungstheorie erster Ordnung ergibt. Das ist auch nicht überraschend, denn für die hohen Targetkernladungen erwartet man natürlich auch, daß die nichtstörungstheoretischen Effekte stärker ausgeprägt sind. Ebenfalls in der Abbildung dargestellt sind die Ergebnisse einer Rechnung von Ionescu und Eichler [Ion96], die im Rahmen einer OBK-Näherung versuchten, die gebunden-freie Elektron-Positron-Paarerzeugung durch den Einfang des Elektrons aus einem Zustand negativer Energie des Targetions in einen gebundenen Zustand des Projektils zu erklären, ähnlich einem Ladungstransferprozeß. Diese Näherung ist jedoch offensichtlich ungeeignet. Sie ergibt sogar eine schwächere Abhängigkeit von der Ladung des Targetkerns als die Störungstheorie und daher keine ordentliche Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Eine schlechtere Übereinstimmung der gekoppelten Rechnung mit den experimentellen Werten findet man bei den Wirkungsquerschnitten für die freie Paarproduktion. Hier sind die theoretischen Resultate nur etwa halb so groß wie die gemessenen Werte. Die Ergebnisse der Rechnungen und die experimentellen Daten sind in Abbildung 5.15 dargestellt. Die schlechte Übereinstimmung dürfte im Wesentlichen auf die zu kleine Basis zurückgeführt werden. Vor allen Din-



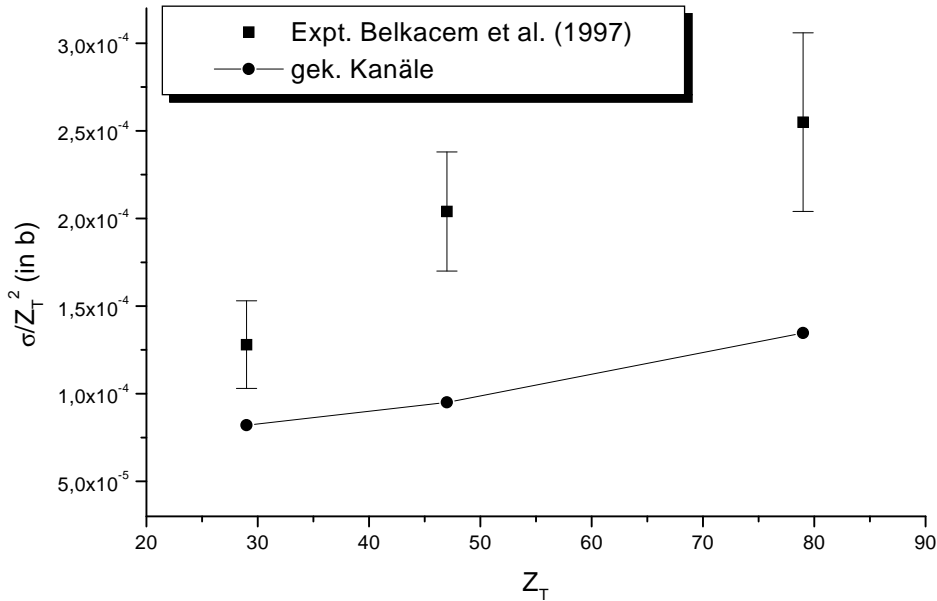


Abbildung 5.15: Wirkungsquerschnitt für freie Paarproduktion in Stößen zwischen  $\text{La}^{57+}$  und verschiedenen Targetionen in Abhängigkeit von der Targetladung  $Z_T$ . Die experimentellen Daten wurden [Bel97] entnommen.

gen reicht es vermutlich nicht aus, nur Drehimpulse mit  $|\kappa| \leq 2$  in der Basis zu berücksichtigen.

Im Falle des  $\text{Au}^{79+}$ -Targetions kann man erwarten, ein besseres Resultat zu erhalten, indem man die Entwicklung um den Targetkern anstatt um den Projektilkern durchführt; denn ansonsten ist, wie bereits oben bemerkt wurde, die durch das Target verursachte Störung größer als das Potential, das in der Basis exakt behandelt wird. Um jedoch nicht wieder auf die durch die Langreichweitigkeit der Wechselwirkung verursachten Probleme zu stoßen, die im letzten Abschnitt ausführlich besprochen wurden, wird die Dirac-Gleichung nun im System des Projektilkerns gelöst mit einer Entwicklung der Wellenfunktion um den Targetkern. Dazu wird der Basissatz so gewählt wie in den oben besprochenen Rechnungen, allerdings mit dem Unterschied, daß die Basisfunktionen nun um den  $\text{Au}^{79+}$ -Kern zentriert sind und Lösungen der Dirac-Gleichung mit dem entsprechenden Potential sind. Das Ergebnis dieser Rechnung ist ein Wirkungsquerschnitt von  $\sigma = 1,0\text{b}$  für die freie Paarproduktion, was mit dem experimentell gefundenen Wert von  $\sigma = 1,6 \pm 0,3\text{b}$  auch nicht sehr gut übereinstimmt. Das Resultat dieser Rechnung ist jedoch nur wenig größer als das der vorher beschriebenen Rechnung mit der Entwicklung um den  $\text{La}^{57+}$ -Kern, wo ein Wirkungsquerschnitt  $\sigma = 0,84\text{b}$  erhalten wurde.

Um bessere Ergebnisse zu erhalten, könnte man versuchen, Basisfunktionen

mit höheren Drehimpulsen  $|\kappa| > 2$  zu berücksichtigen. Dadurch würde jedoch die Zahl der Basisfunktionen so groß werden, daß man die Matrixelemente nicht mehr in vertretbarer Zeit berechnen könnte. Nun kann man sich vorstellen, daß es durch die Anziehung, die der Targetkern auf die Elektronen ausübt, kurzfristig zur Ausbildung molekularer Wellenfunktionen kommt. Beim Ionisationsprozeß bildet das Elektron für kurze Zeit eine Ladungswolke, die beide Stoßpartner umgibt. Solche molekularen Effekte kann man effizienter (als durch bloße Erweiterung des Basissatzes bezüglich des Drehimpulses) erfassen, indem man auch Basisfunktionen um den Targetkern zentriert, also auch Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Targetkerns in der Basis berücksichtigt. Molekulare Orbitale kann man damit näherungsweise durch Linearkombination von atomaren Orbitalen konstruieren. Ferner bietet dieser Zugang die Möglichkeit, den Ladungsaustauschprozeß beschreiben zu können. Rechnungen, die mit solchen Basissätzen gemacht wurden, werden im nächsten Kapitel diskutiert.

### 5.3 Bemerkungen zur Erzeugung von mehreren Paaren

Für die Berechnung von Wirkungsquerschnitten und Wahrscheinlichkeiten wurde bisher stets die Formel (2.13) für den Erwartungswert für die Anzahl der Paare verwendet. Die Erzeugung von mehreren Paaren wurde bisher stets vernachlässigt. Ferner wurde für den Erwartungswert für die Anzahl der Paare häufig auch einfach „die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion“ geschrieben, was streng genommen nicht richtig ist; denn der Erwartungswert für die Anzahl der Paare kann prinzipiell auch größer als Eins werden. In Abschnitt 2.2 wurde argumentiert, daß die Wahrscheinlichkeit für die Produktion mehrerer Paare sehr viel kleiner als die für die Erzeugung eines einzigen Paares sei und man daher in guter Näherung die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung eines Paares mit dem Erwartungswert für die Anzahl der Paare gleichsetzen dürfe. Um das zu verifizieren, kann man mit Hilfe der Formel (2.10) auch die exklusiven Wahrscheinlichkeiten dafür, nach dem Stoß einen ganz bestimmten  $N$ -Teilchenzustand vorzufinden, berechnen. Die Auswertung der Wahrscheinlichkeiten mit dieser Formel ist allerdings erheblich zeitaufwendiger, da eine große Anzahl von Determinanten berechnet werden muß. Am schnellsten läßt sich die exklusive Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von genau einem Paar berechnen.

Am wahrscheinlichsten dürfte die Erzeugung von mehreren Paaren bei sehr kleinen Stoßparametern und hohen Ladungen von Projektil und Target sein. Für das Stoßsystem  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon und  $b = 0,125\lambda_c$  erhält man für die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von genau einem Paar mit dem Elektron in einem gebundenen Zustand einen Wert von  $6,207 \times 10^{-4}$ . Mit Hilfe von (2.13) mit der Beschränkung der Summation auf gebundene Zustände erhält

man einen Wert von  $6,222 \times 10^{-4}$ , also einen fast identischen Wert. Subtrahiert man die exklusive Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von einem Paar von dem Ausdruck für den Erwartungswert, dann erhält man unter der Annahme, daß der resultierende Ausdruck durch die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von genau zwei Paaren dominiert wird, eine Abschätzung für die Erzeugung von zwei Paaren, wobei mindestens eines der beiden Elektronen in einem gebundenen Zustand sitzt. Für diese Wahrscheinlichkeit bekommt man damit ungefähr  $8 \times 10^{-7}$ . Auf die gleiche Art und Weise erhält man für die exklusive Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung eines freien Paares einen Wert von  $3,573 \times 10^{-3}$ , während man mit (2.13)  $3,582 \times 10^{-3}$  für den Erwartungswert für die Anzahl der Paare mit mindestens einem freien Elektron bekommt.

Die Erzeugung von mehr als einem Paar kann also in der Tat bei den in dieser Arbeit betrachteten Stößen in sehr guter Näherung vernachlässigt werden und es ist gerechtfertigt, den Erwartungswert für die Anzahl der erzeugten Paare mit der Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion gleichzusetzen.



# Kapitel 6

## Zwei-Zentren-Rechnungen

In diesem Kapitel werden Rechnungen vorgestellt, die auf einer Entwicklung der Wellenfunktion beruhen, die sowohl Basisfunktionen enthält, die um den Projektilkern zentriert sind, als auch solche, die um den Targetkern zentriert sind. Dazu muß der volle Formalismus, wie in Kapitel 3 beschrieben, benutzt werden. Im Vergleich zu den Rechnungen mit einer Ein-Zentrum-Entwicklung, die im letzten Kapitel diskutiert wurden, kann man eine bessere Darstellung der Wellenfunktion erwarten. Ein weiterer Vorteil besteht darin, daß man im Rahmen dieser Methode auch den Ladungstransferprozeß beschreiben kann, wenn der Basissatz gebundene Zustände an beiden Zentren enthält.

Ein Problem ergibt sich bezüglich der Interpretation der Kontinuumszustände an den beiden Zentren. Würde man in dieser Basis Kontinuumseigenfunktionen (ohne Diskretisierung) benutzen, so würde der Überlapp zwischen einem Kontinuumszustand an einem Zentrum und einem Zustand am anderen Zentrum auch für große Zeiten nicht verschwinden. Eine Interpretation der Betragsquadrate der Amplituden als Wahrscheinlichkeit, ein Elektron in dem entsprechenden Zustand zu finden, ist dann nicht mehr zulässig. Durch die Diskretisierung umgeht man diese Schwierigkeit, denn die Wellenpakete haben im Raum nur eine endliche Ausdehnung und der Überlapp zwischen Wellenpaketen, die zu verschiedenen Zentren gehören, wird für große Abstände zwischen den Kernen beliebig klein.

Die Zahl der zu berechnenden Matrixelemente ist bei Verwendung der Zwei-Zentren-Entwicklung deutlich größer; denn zusätzlich müssen neben den Wechselwirkungsmatrixelementen zwischen den Wellenfunktionen am gleichen Zentrum noch die Zwei-Zentren-Wechselwirkungsmatrixelemente (3.15) und (3.16) und die Überlappmatrixelemente (3.11) berechnet werden. Das Überlappmatrixelement (3.12) muß wegen der Hermitizität der Überlappmatrix nicht extra berechnet werden. Ein weiterer Nachteil besteht nun darin, daß man für jedes Stoßsystem eine separate Rechnung durchführen muß, während man bei den Rechnungen im Rahmen der Ein-Zentrum-Entwicklung die für ein bestimmtes Projektil (Target) berechneten Matrixelemente für eine Zeitentwicklung mit einem beliebigen Targetkern (Projektilkern) wiederverwerten kann, da die Ein-Zentrum-Matrixelemente

bei der Entwicklung um den Projektilkern (Targetkern) mit  $Z_T^2$  ( $Z_P^2$ ) skalieren.

Führt man im Basissatz Kontinuumszustände an beiden Zentren mit, so wird die Zahl der zu berechnenden Zwei-Zentren-Matrixelemente schnell so groß, daß man die Zahl der Kontinuumszustände stark eingrenzen muß, um die Rechnungen in vertretbarer Zeit durchführen zu können. Eine Alternative besteht darin, nur Kontinuumszustände zu einem der beiden Zentren in der Basis zu berücksichtigen, so daß man an einem Zentrum eine große, an dem anderen Zentrum aber nur eine relativ kleine Anzahl von Basisfunktionen hat. Aus diesem Grunde werden zunächst solche Rechnungen vorgestellt, bei denen nur gebundene Zustände des Targetkerns berücksichtigt werden.

## 6.1 Rechnungen ohne Kontinuumszustände am Target

Die Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$  wird in diesem Unterkapitel nach einem Basissatz entwickelt, der aus Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen besteht, die zum Teil am Target und zum Teil am Projektil zentriert sind. Dabei werden in dem Teil des Basissatzes, der um den Targetkern zentriert ist, nur Wellenfunktionen von gebundenen Zuständen berücksichtigt. In den folgenden Rechnungen wird dabei eine Entwicklung verwendet, die alle gebundenen Zustände mit  $n \leq 3$  und  $|\kappa| \leq 2$  an beiden Zentren enthält. Für die Darstellung des kontinuierlichen Spektrums werden wieder stationäre Wellenpakete benutzt. Berücksichtigt werden dabei nur Projektilzustände mit  $|E| \leq 5mc^2$  und  $|\kappa| \leq 2$ . Die Breite der Wellenpakete beträgt wie auch in den Rechnungen des vorigen Kapitels jeweils  $\Delta E = \frac{1}{3}mc^2$ . Diese Basis enthält insgesamt 332 Basiswellenfunktionen. Davon sind 22 gebundene Wellenfunktionen des Targetkerns, weitere 22 sind gebundene Wellenfunktionen des Projektilkerns und die restlichen 288 Wellenfunktionen entsprechen Kontinuumszuständen, die am Projektilkern zentriert sind.

Zunächst wird hier eine Rechnung für das Stoßsystem  $U^{91+} + Au^{79+}$  bei einer Energie von 930 MeV/Nukleon betrachtet. Abbildung 6.1 zeigt die Wahrscheinlichkeiten für Ionisation, Anregung und Ladungstransfer eines ursprünglich im Projektil gebundenen Elektrons in einen gebundenen Zustand des Targetions im Stoß  $U^{91+} + Au^{79+}$  bei einem Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c$ . Außerdem ist die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = 1/2$  des Projektilkerns im Stoß von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$  dargestellt. Bei dieser Rechnung wurde die Symmetrie unter Zeitumkehr ausgenutzt. Zunächst fällt auf, daß sich die Wahrscheinlichkeiten für Ionisation und Anregung von den vorher, ohne Berücksichtigung der gebundenen Zustände am Target, berechneten kaum unterscheiden. Während in der im letzten Kapitel diskutierten Ein-Zentrum-Rechnung Wahrscheinlichkeiten von 49,8% für die Ionisation und von 13,0% für die Anregung gefunden wurde, erhält man in der Zwei-Zentren-Rechnung nun

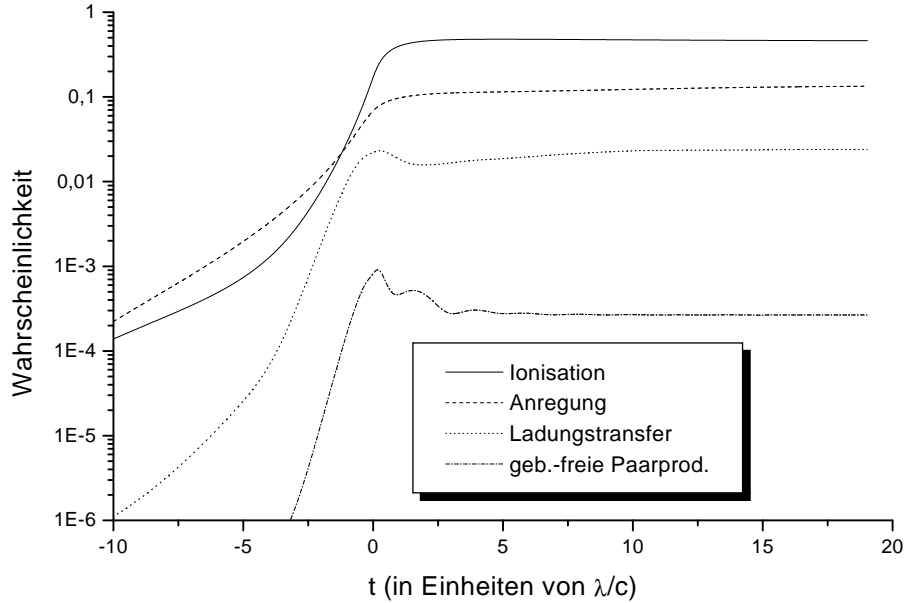


Abbildung 6.1: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation (durchgezogen) und Anregung (gestrichelt) von  $U^{91+}$ -Ionen im Stoß mit einem  $Au^{79+}$ -Targetkern bei 930 MeV/Nukleon und einem Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c$ . Die gepunktete Kurve zeigt die Wahrscheinlichkeit für Ladungstransfer in einen gebundenen Zustand des Targetions, und die gestrichelt-gepunktete Kurve zeigt die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = 1/2$  des  $U^{91+}$ -Ions in Stößen von  $U^{92+}$  und  $Au^{79+}$ .

46,1% für die Ionisation und 13,4% für den Anregungsprozeß. Die Wahrscheinlichkeit für den Transfer in einen gebundenen Zustand des Targets ergibt sich zu 2,4%. Für den Einfang in die K-Schale des Targetkerns erhält man eine Wahrscheinlichkeit von 2,0%. Für die Paarproduktion mit Einfang in den Zustand  $1s_{1/2}$  mit  $m = \frac{1}{2}$  des  $U^{91+}$ -Ions findet man einen Wert von  $2,7 \times 10^{-4}$ . Wenn man diese Werte auf einen Stoßparameter  $b = 0$  extrapoliert, dann kann man die Ergebnisse vergleichen mit denen, die von Momberger [Mom96] und Busic [Bus00] mit Verfahren berechnet wurden, bei denen die Dirac-Gleichung auf einem Gitter gelöst wird. In Tabelle 6.1 sind die Ergebnisse für die Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Prozesse bei einem Stoßparameter  $b = 0$  zusammengefaßt. Momberger et al. [Mom96] geben leider nicht an, ob es sich bei den von ihnen berechneten Wahrscheinlichkeiten für gebunden-freie Paarproduktion um die Gesamtwahrscheinlichkeit für den Einfang in die K-Schale oder den Einfang in den Anfangszustand (der zeitumgekehrten Rechnung), also den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit entweder  $m_s = \frac{1}{2}$  oder  $m_s = -\frac{1}{2}$ , handelt. Die Gesamtwahrscheinlichkeit ergibt sich hieraus durch Multiplikation mit einem Faktor zwei. Die Übereinstimmung mit

|                 | $1s_{1/2}, m = \frac{1}{2}$ | Anregung | Ionisation | Transfer | Paarprod.            |
|-----------------|-----------------------------|----------|------------|----------|----------------------|
| Busic           | 0,287                       | 0,112    | k.A.       | 0,015    | $3,1 \times 10^{-4}$ |
| Momberger       | 0,295                       | 0,098    | 0,543      | 0,025    | $3,9 \times 10^{-4}$ |
| gek. Kan. (6.1) | 0,348                       | 0,136    | 0,501      | 0,020    | $3,0 \times 10^{-4}$ |
| gek. Kan. (5.2) | 0,342                       | 0,130    | 0,530      | -        | $2,8 \times 10^{-4}$ |

Tabelle 6.1: Überlebenswahrscheinlichkeit des Grundzustands und Wahrscheinlichkeiten für Anregung, Ionisation und Ladungstransfer in die K-Schale des Targetions in Stößen von  $U^{91+} + Au^{79+}$  und für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$  des Projektils in Stößen von  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon und  $b = 0$ . Die dritte Zeile zeigt die Ergebnisse der Zwei-Zentren-Rechnung aus Abschnitt 6.1, die vierte die Ergebnisse der Ein-Zentrum-Rechnung aus Abschnitt 5.2.1.

den Ergebnissen der Gitterrechnungen von Momberger und Busic ist angesichts des hier verwendeten relativ kleinen Basissatzes gut. Die in dieser Arbeit gefundenen höheren Werte für die Anregungs- und die Überlebenswahrscheinlichkeit des Grundzustandes und der etwas kleinere Wert für die Ionisationswahrscheinlichkeit lassen sich vermutlich darauf zurückführen, daß der Basissatz bezüglich der Zustände mit positiver Energie noch erweitert werden muß. Durch die relativ wenigen Zustände im positiven Kontinuum wird ein gewisser Teil der Gesamtwahrscheinlichkeit, die hier stets erhalten bleibt, in die gebundenen Zustände „hineingedrückt“.

Die Zwei-Zentren-Entwicklung gestattet nun auch die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Targetkerns. Abbildung 6.2 zeigt die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Targetkerns und für die Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektilkerns, ebenfalls berechnet für einen Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c$ . Es fällt auf, daß die beiden Wahrscheinlichkeiten fast gleich groß sind. Ferner erkennt man, daß die gebundenen Zustände des Targets früher besetzt werden als die des Projektils und daß die Wahrscheinlichkeit für den Einfang in das Target nach dem Stoß ein oszillierendes Verhalten zeigen. Die bereits bei den Rechnungen mit der Entwicklung der Wellenfunktion im System des Projektilkerns beobachteten Effekte der Langreichweitigkeit der Wechselwirkung scheinen hier, wenn auch deutlich schwächer, wieder aufzutauchen. Im Vergleich zu der Rechnung in Abschnitt 5.2 ohne die Basisfunktionen am Targetkern ist die Wahrscheinlichkeit für gebundenfreie Paarproduktion mit Einfang in das Projektil etwas höher. Während sich dort eine Wahrscheinlichkeit von  $6,2 \times 10^{-4}$  ergab, so findet man hier  $7,1 \times 10^{-4}$  für den Einfang in einen gebundenen Projektilzustand und  $5,9 \times 10^{-4}$  für den Einfang in einen gebundenen Targetzustand. Für die freie Paarproduktion ergibt sich mit der Zwei-Zentren-Entwicklung für den Erwartungswert der Anzahl freier Paare



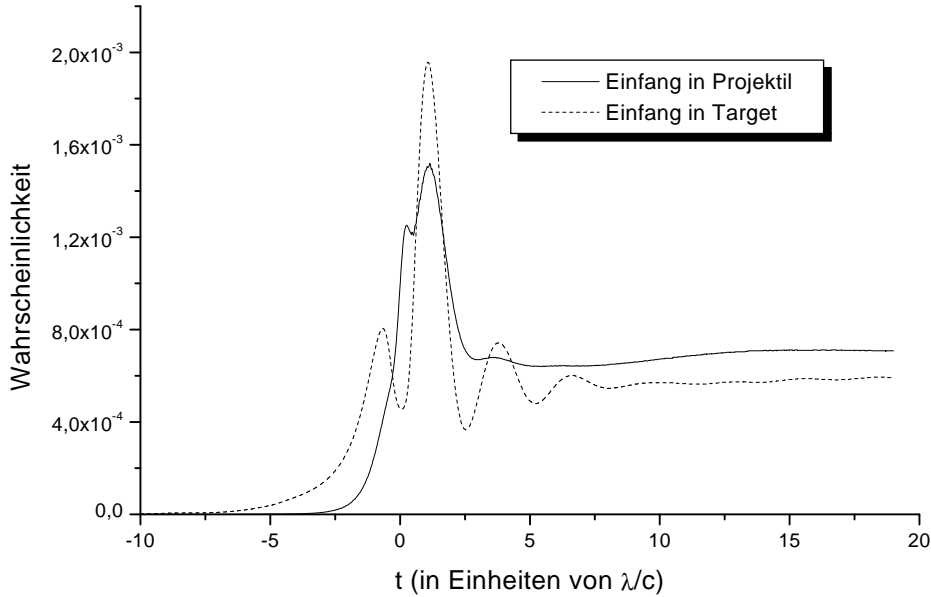


Abbildung 6.2: Wahrscheinlichkeiten für gebunden-freie Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektilkerns (durchgezogen) und des Targetkerns (gestrichelt) im Stoß von  $U^{91+} + Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon und  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$ .

$3,3 \times 10^{-3}$ . Dieser Wert ist nur wenig kleiner als der mit dem in Abschnitt 5.2 beschriebenen Verfahren berechnete Wert von  $3,6 \times 10^{-3}$ . Zumindest für kleine Stoßparameter gilt daher, daß die Hinzunahme von gebundenen Zuständen des Targets nur wenig Einfluß auf die Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion hat.

Abbildung 6.3 zeigt die Wahrscheinlichkeiten für freie Paarproduktion, Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Projektilzustand und Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Targetzustand. Es fällt auf, daß die Wahrscheinlichkeit für den Einfang in das Target nur für kleine Stoßparameter kleiner als die für den Einfang in das Projektil ist. Bereits für Stoßparameter  $b \geq \frac{1}{2}\lambda_c$  werden die Wahrscheinlichkeiten für den Einfang durch den Targetkern größer als die für den Einfang durch den Projektilkern. Die Wahrscheinlichkeiten für den Einfang in den Targetkern fallen auch deutlich langsamer ab für große Stoßparameter. Als Wirkungsquerschnitt findet man  $\sigma = 4,2$  b für die freie Paarproduktion,  $\sigma = 1,4$  b für die Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektilkerns und  $\sigma = 1,6$  b für die Paarproduktion mit Einfang durch den Targetkern. Die Tatsache, daß der Wirkungsquerschnitt für den Einfang in das Target größer als der für den Einfang in das Projektil ist, muß als unphysikalisch

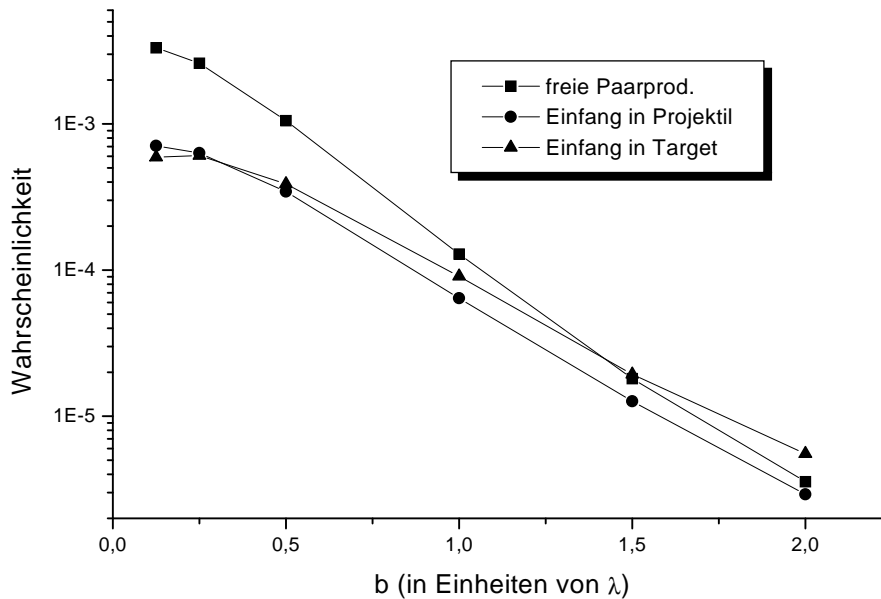


Abbildung 6.3: Wahrscheinlichkeiten für freie Paarproduktion (Quadrate) und Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektils (Kreise) und einen gebundenen Zustand des Targets (Dreiecke) in Abhängigkeit vom Stoßparameter.

betrachtet werden, da die Ladung des Projektilkerns größer als die des Targetkerns ist. Es gibt zwei mögliche Ursachen für dieses Verhalten. Einerseits ist die hier verwendete Entwicklung, die nur Kontinuumszustände am Projektil berücksichtigt, asymmetrisch bezüglich der beiden Stoßpartner. Andererseits könnte der größere Wirkungsquerschnitt auch mit den in Abschnitt 5.1 beobachteten Effekten der Langreichweitigkeit der Wechselwirkung zusammenhängen. Insbesondere der etwas langsamere Abfall der Wahrscheinlichkeiten für große Stoßparameter könnte auf längere Wechselwirkungsdauern bei großen Stoßparametern zurückzuführen sein.

## 6.2 Rechnung mit einer symmetrischen Entwicklung

Bei den in diesem Abschnitt vorgestellten Rechnungen wird eine Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen des Projektil- und des Targetkerns verwendet, die auch Kontinuumszustände an beiden Zentren beinhaltet. Dabei wird die Entwicklung möglichst symmetrisch gewählt. Das bedeutet, daß der um den Projektilkern zentrierte Teil des Basissatzes genauso groß ist wie der, der um

den Targetkern zentriert ist. Asymmetrien entstehen in der Behandlung des Problems einerseits durch die Tatsache, daß die Wellenfunktionen der Basissätze bei asymmetrischen Stoßsystemen ( $Z_P \neq Z_T$ ) natürlich verschieden sind, und andererseits durch die Verwendung eines bestimmten Koordinatensystems. In Kapitel 5 wurde bereits festgestellt, daß der Übergang vom System des Projektilkerns auf das System des Targetkerns drastische Auswirkungen auf das Verhalten der Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion hat. Insofern wird durch die hier getroffene Wahl des Ruhesystems des Targetkerns als Koordinatensystem bereits eine Asymmetrie eingeführt. Für eine möglichst symmetrische Beschreibung müßte man das Koordinatensystem zugrunde legen, in dem sich beide Kerne mit entgegengesetzt gleicher Geschwindigkeit aufeinander zu bewegen (Equal-Speed-System).

Da bei der hier verwendeten Entwicklung mit Kontinuumswellenfunktionen am Target und am Projektil die Zahl der zu berechnenden Zwei-Zentren-Matrixelemente sehr groß werden kann, muß man die Basis im Vergleich zu den Rechnungen mit einer Ein-Zentrum-Entwicklung stärker einschränken. Man darf aber annehmen, daß man im Rahmen der Zwei-Zentren-Entwicklung Zustände beschreiben kann, die bei einer Ein-Zentrum-Entwicklung nur dann darstellbar sind, wenn man auch Basisfunktionen mit höheren Drehimpulsen berücksichtigt. Dadurch kann bei einer Zwei-Zentren-Entwicklung auch dann, wenn in der Basis an beiden Zentren nur Wellenfunktionen mit kleinen Drehimpulsen verwendet werden, eine schnellere Konvergenz des Verfahrens die Folge sein.

Hier soll wieder das Stoßsystem  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon untersucht werden. Die Rechnungen in den vorangegangenen Kapiteln haben gezeigt, daß man die freie Paarproduktion für dieses Stoßsystem auch im Rahmen einer Ein-Zentrum-Entwicklung recht gut beschreiben kann. Für die gebunden-freie Paarproduktion wurde mit der Ein-Zentrum-Entwicklung jedoch ein Wert errechnet, der deutlich unter dem experimentell gefundenen Wert lag. Die Rechnungen mit dem Verfahren der Finiten Differenzen von Busic [Bus00] haben gezeigt, daß insbesondere bei größeren Stoßparametern auch hohe Drehimpulse in der Entwicklung der Wellenfunktion eine Rolle spielen. In den Rechnungen, die in den vorangegangenen Abschnitten diskutiert wurden, war der maximale Drehimpuls in der Basis stets  $|\kappa|_{max} = 2$ .

Wie oben erwähnt, muß der Basissatz in der Zwei-Zentren-Rechnung weiter eingeschränkt werden. Bei den im folgenden vorgestellten Rechnungen wurde ein Basissatz verwendet, der alle gebundenen Wellenfunktionen an beiden Zentren mit Hauptquantenzahlen  $n \leq 3$  und Drehimpulsen  $|\kappa| \leq 2$  enthält. Außerdem werden Kontinuumszustände (ebenfalls an beiden Zentren) mit  $|E| \leq 5mc^2$  und  $|\kappa| \leq 1$  in der Basis berücksichtigt. Damit enthält der Basissatz insgesamt 236 Zustände, wovon 118 am Target und 118 am Projektil zentriert sind. An jedem Zentrum hat man damit 22 gebundene Zustände und 96 Kontinuumszustände.

Abbildung 6.4 zeigt die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeit für die Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Targets und des

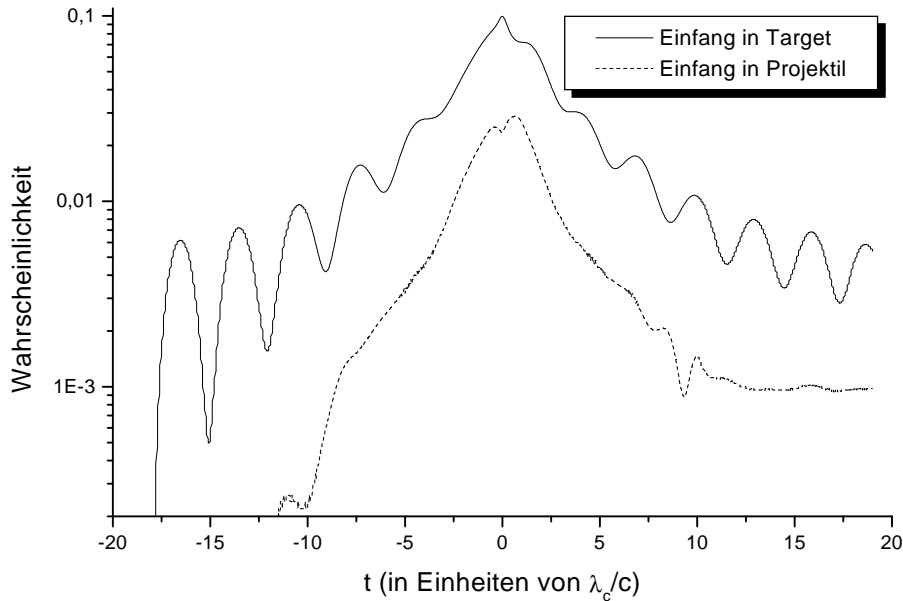


Abbildung 6.4: Wahrscheinlichkeiten für Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Targetkerns (durchgezogen) und des Projektilkerns (gestrichelt) in Stößen von  $U^{92+}$ -Ionen mit  $Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon und einem Stoßparameter von  $b = 0,125\lambda_c$ .

Projektils. Das vollkommen unterschiedliche Verhalten der beiden Wahrscheinlichkeiten überrascht angesichts der in Kapitel 5 gewonnenen Erkenntnisse nicht mehr. Die Langreichweitigkeit des Wechselwirkungspotentials führt dazu, daß die Wahrscheinlichkeit für den Einfang in das Target innerhalb der hier betrachteten Zeitspanne nicht stationär wird. Diese Wahrscheinlichkeit bleibt auch bei Ende der Rechnung noch etwa eine Größenordnung über der Wahrscheinlichkeit für die Paarproduktion mit Einfang in das Projektil, obwohl der Projektilkern höher geladen ist. Man erkennt ferner, daß die Wahrscheinlichkeit für den Einfang in das Target zwischenzeitlich sehr große Werte von bis zu einigen Prozent erreicht. Die bereits zuvor diskutierte Adiabaticität der Amplituden taucht also in den Zwei-Zentren-Rechnungen wieder auf. Vollkommen anders ist das Verhalten der Wahrscheinlichkeiten für die Paarproduktion mit Einfang in das Projektilion. Die Wahrscheinlichkeiten werden hier wesentlich schneller stationär und bleiben stets, insbesondere auch für Zeiten um  $t \approx 0$ , unter denen für den Einfang in das Targetion. Man kann daraus schließen, daß diese Rechnung nicht geeignet ist, um Aussagen über die Paarproduktion mit Einfang in den Targetkern zu machen. Für die Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektils findet man einen Wert von  $9,8 \times 10^{-4}$ . Dieser Wert ist deutlich größer als die Wahrscheinlichkeiten, die mit der Ein-Zentrum-

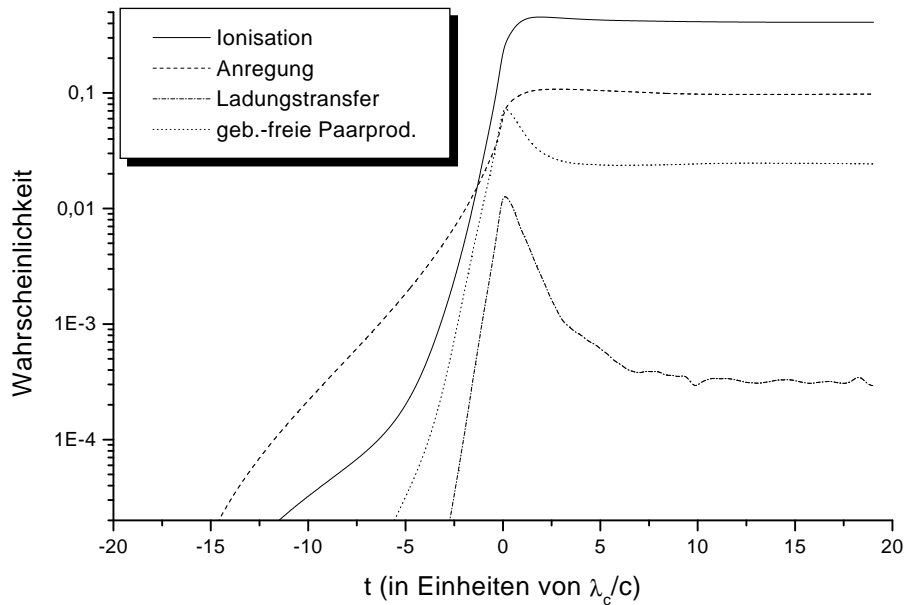


Abbildung 6.5: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation, Anregung und Ladungstransfer in einen gebundenen Zustand des Targetkerns und für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$  des Projektilkerns bei einem Stoßparameter  $b = \frac{1}{8}\lambda_c$  in Abhängigkeit von der Zeit.

Entwicklung oder mit der asymmetrischen Zwei-Zentren-Entwicklung des letzten Abschnitts gefunden wurden. Für den Einfang in die K-Schale erhält man einen Wert von  $7,2 \times 10^{-4}$ . Die obenstehenden Resultate wurden durch die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktionen des negativen Kontinuums gewonnen. Man kann nun wieder die Symmetrie unter Zeitumkehr testen, indem man den anfänglich besetzten Grundzustand des Projektilions nach der Zeit entwickelt.

Abbildung 6.5 zeigt das Ergebnis einer solchen Rechnung. Dargestellt sind die Wahrscheinlichkeiten für Ionisation, Anregung und Ladungstransfer in einen gebundenen Zustand des Targetkerns in Stößen von  $U^{91+} + Au^{79+}$  sowie die Wahrscheinlichkeit für die Paarproduktion mit Einfang ins Projektil in Stößen von  $U^{92+}$  und  $Au^{79+}$ . Aus der Abbildung erkennt man, daß die Wahrscheinlichkeit für gebunden-freie Paarproduktion um  $t \approx 0$  steil auf Werte von bis zu etwa einem Prozent ansteigt und dann relativ langsam abfällt. Die Wahrscheinlichkeit oszilliert auch für große Zeiten noch leicht. Die Tatsache, daß die Wahrscheinlichkeit erst sehr spät signifikante Werte annimmt, konnte man auch schon in den Rechnungen aus Abschnitt 5.2 feststellen, und man darf dieses Verhalten darauf zurückführen, daß hier die Rechnung mit dem  $1s_{1/2}$ -Zustand des Projektils als Anfangszustand begonnen wurde. Die hier gefundene Wahrscheinlichkeit für die Ionisation beträgt 40,9%. Das ist etwas niedriger als die Ergebnisse der zu-

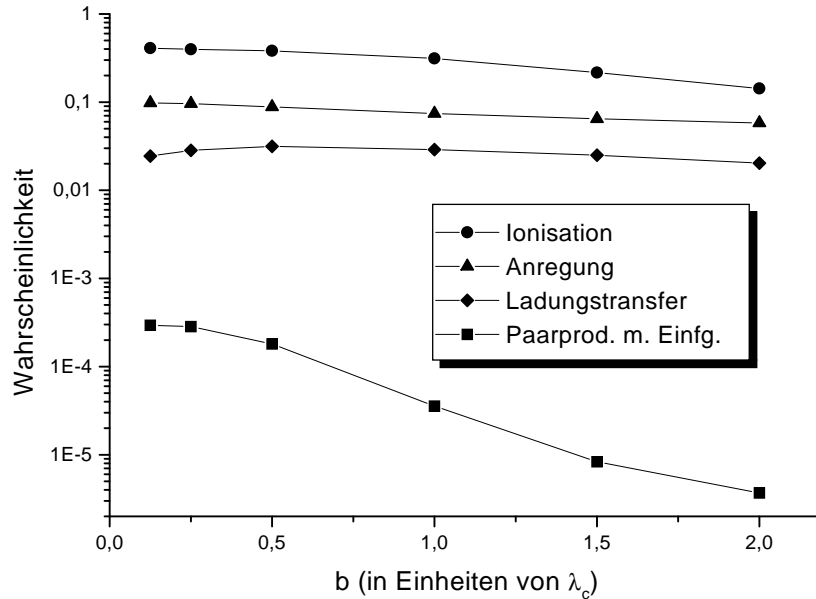


Abbildung 6.6: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation, Anregung und Ladungstransfer in einen gebundenen Zustand des Targetkerns und für Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$  des Projektilkerns in Abhängigkeit vom Stoßparameter.

vor diskutierten Rechnungen, bei denen auch Kontinuumswellenfunktionen mit Drehimpulsen  $|\kappa| = 2$  in der Basis mitgeführt wurden. Man darf daraus schließen, daß auch höhere Drehimpulse ( $> |\kappa| = 1$ ) für eine gute Beschreibung der Ionisation wichtig sind. Auch die Wahrscheinlichkeit für die Anregung des Elektrons in einen höheren gebundenen Zustand des Projektilkerns ist mit 9,8% nur etwas niedriger als bei den zuvor diskutierten Rechnungen. Für den Ladungstransfer bekommt man hier allerdings einen etwas höheren Wert von 2,4%, der sehr gut mit dem von Momberger [Mom96] gefundenen Wert von 2,5% übereinstimmt (vgl. Tab. 6.1). Für die Paarproduktion mit Einfang in den  $1s_{1/2}$ -Zustand mit  $m = \frac{1}{2}$  des  $U^{92+}$ -Ions findet man hier einen Wert von  $2,9 \times 10^{-4}$ . Das ist fast identisch mit dem Ergebnis der in Abschnitt 6.1 beschriebenen Rechnung. Allerdings ist die Symmetrie unter Zeitumkehr nicht mehr so gut gewährleistet, wie das bei den Ein-Zentrum-Rechnungen in Abschnitt 5.2 der Fall war. Bei der weiter oben beschriebenen Rechnung, bei der die Zustände des negativen Kontinuums in der Zeit entwickelt wurden, erhielt man für diese Wahrscheinlichkeit einen Wert von  $3,6 \times 10^{-4}$ , also eine um etwa 20% größere Wahrscheinlichkeit. Die stoßparameterabhängigen Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Prozesse bei diesem Stoßsystem sind in Abbildung 6.6 dargestellt. Für große Stoßparameter erkennt man ein etwas langsames Abfallen der Wahrscheinlichkeiten. Wie bereits zu-

vor bemerkt, liegt das wieder daran, daß man bei größeren Stoßparametern die Rechnung eigentlich über einen längeren Zeitraum ausdehnen müßte.

Die Tatsache, daß die Ergebnisse dieser neuen Rechnung mit den Ergebnissen der Ein-Zentrum-Rechnung aus Abschnitt 5.2 und der Zwei-Zentren-Rechnung ohne Kontinuumszustände am Targetkern recht gut übereinstimmen, zeigt, daß die hier verwendete Basis, zumindest für kleine Stoßparameter, nicht schlechter ist, obwohl in ihr nur Zustände mit  $|\kappa| \leq 1$  berücksichtigt wurden.

Mit den berechneten Wahrscheinlichkeiten lassen sich nun wieder die Wirkungsquerschnitte berechnen. Für die Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektils in Stößen von  $U^{92+} + Au^{79+}$  bei 930 MeV/Nukleon erhält man  $\sigma = 1,5$  b. Dieser Wert ist etwas größer als der, der mit der asymmetrischen Basisentwicklung in Abschnitt 6.1 gefunden wurde. Der Unterschied läßt sich aber vermutlich weniger auf eine bessere Darstellung der Wellenfunktion als auf das langsamere Abfallen der Wahrscheinlichkeiten mit wachsendem Stoßparameter zurückführen. Bei dem hier angegebenen Wert handelt es sich nur um den Wirkungsquerschnitt für die Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale. Im Rahmen der Störungstheorie kann man zeigen, daß man den Wirkungsquerschnitt für Paarproduktion mit Einfang in einen beliebigen gebundenen Zustand des Projektils durch Multiplikation mit dem Faktor 1,2 erhält. Mit dieser Skalierung erhält man dann einen Wirkungsquerschnitt von etwa 1,8 b.

Mit der gleichen Basisentwicklung wurden außerdem Rechnungen bei einer Stoßenergie von 1,3 GeV/Nukleon für das gleiche Stoßsystem durchgeführt. Hier erhält man einen Wirkungsquerschnitt von  $\sigma = 1,9$  b für die gebunden-freie Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektilkerns. Bei dieser Rechnung konnte man jedoch feststellen, daß insbesondere bei kleinen Stoßparametern auch solche Positronen-Zustände mit größeren Energien besetzt werden. Die Basisentwicklung müßte also hinsichtlich der Energien der Kontinuumszustände noch erweitert werden.





# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

### 7.1 Ergebnisse dieser Arbeit

In dieser Arbeit wurden Rechnungen für die Paarproduktion in relativistischen Stößen schwerer Ionen durchgeführt. Um dem nichtstörungstheoretischen Charakter des Stoßprozesses bei kleinen Stoßparametern gerecht zu werden, wurde hierfür das Verfahren der gekoppelten Kanäle benutzt. Die Eigenschaften verschiedener Entwicklungen der Wellenfunktion  $\Psi(\vec{r}, t)$  wurden am Beispiel von Stößen von  $U^{92+}$ - und  $La^{57+}$ -Ionen mit Targets aus Au, Ag und Cu bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon detailliert untersucht.

In Abschnitt 5.1 wurde gezeigt, daß die Langreichweitigkeit des Liénard-Wiechert-Potentials des Targetkerns Rechnungen im Projektilsystem mit einer Entwicklung der Wellenfunktion nach Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Projektilkerns deutlich erschwert; denn die Wahrscheinlichkeiten werden mit dieser Methode auch für große Zeiten nicht stationär. Außerdem kann mit dieser Methode eine starke Adiabaticität der Wahrscheinlichkeiten, das heißt, ein Ansteigen vor und ein Abfallen der Wahrscheinlichkeiten nach dem Stoß um mehrere Größenordnungen, beobachtet werden.

In Abschnitt 5.2 wurde im Rahmen einer Rechnung im System des Targetkerns und mit einer Entwicklung der Wellenfunktionen nach Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen des Projektilkerns gezeigt, daß die berechneten Wahrscheinlichkeiten für die Elektron-Positron-Paarproduktion sehr schnell stationär werden und die vorher beschriebene Adiabaticität der Amplituden deutlich unterdrückt wird. Die Tatsache, daß die Wahrscheinlichkeiten bereits kurze Zeit nach dem Stoß stabile Werte erreichen, läßt sich am wahrscheinlichsten auf eine effektive Beseitigung des langreichweitigen Verhaltens der Wechselwirkung im Rahmen dieser Entwicklung zurückführen. Es wurde gezeigt, daß die Wahrscheinlichkeiten, anders als bei der Rechnung im Projektilsystem, unabhängig davon sind, ob Coulomb-Randbedingungen verwendet werden oder nicht. Die gefundenen Eigenschaften dieser Methode sind für eine zeitabhängige Rechnung zwar vorteilhaft,

doch ist die Berechnung der Matrixelemente bei diesem Verfahren erheblich zeitaufwendiger als bei der Rechnung im Projektilsystem. Daraus folgt, daß man mit den gegenwärtig zur Verfügung stehenden Computern Rechnungen nur mit relativ kleinen Basissätzen durchführen kann. Trotzdem stimmen die Ergebnisse dieser Methode zumindest zum Teil sehr gut mit experimentellen Daten von Belkacem et al. [Bel97] überein.

In Kapitel 6 wurden Rechnungen diskutiert, bei denen eine Entwicklung der Wellenfunktion nach atomaren Wellenfunktionen sowohl des Targetkerns als auch des Projektilkerns zugrunde gelegt wurde. In Abschnitt 6.1 wurden dabei Rechnungen vorgestellt, bei denen der Teil der Basis, der am Targetkern zentriert ist, auf gebundene Wellenfunktionen beschränkt wurde. Bei diesen Rechnungen ließ sich eine recht gute Übereinstimmung mit den Resultaten des vorangegangenen Kapitels feststellen. Schließlich wurden in Abschnitt 6.2 Rechnungen mit einer symmetrischen Basisentwicklung diskutiert. Bei diesen Rechnungen wurden am Targetkern und am Projektilkern jeweils die gleichen (bezüglich ihrer Energie und ihrer Drehimpulsquantenzahlen) Basisfunktionen in der Entwicklung berücksichtigt. Dabei konnte man feststellen, daß die bereits zuvor in Abschnitt 5.1 gefundenen schlechten Eigenschaften der Basisentwicklung im System des Projektilkerns hier teilweise wieder auftauchten. Neben der Adiabaticität der Amplituden, dem langsamen Abfallen der Wahrscheinlichkeiten für große Stoßparameter und den nur langsam stationär werdenden Wahrscheinlichkeiten wurde auch eine Verletzung der Symmetrie unter Zeitumkehr gefunden.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die in Abschnitt 5.2 vorgestellte Methode, die auf einer Entwicklung der Wellenfunktion im System des Targetkerns nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns beruht, für eine zeitabhängige Rechnung sicherlich die besten Voraussetzungen bietet. Neben der Tatsache, daß die Wahrscheinlichkeiten bei diesem Verfahren sehr schnell stationäre Werte annehmen und die Adiabaticität der Amplituden praktisch nicht mehr auftritt, ist auch die Symmetrie unter Zeitumkehr sehr gut erfüllt, und die Wahrscheinlichkeiten fallen mit wachsendem Stoßparameter schnell genug ab, so daß die Integration über den Stoßparameter auf sehr kleine Bereiche eingeschränkt werden kann, ohne daß dazu ein „Untergrund“ von den Wahrscheinlichkeiten abgezogen werden muß.

## 7.2 Vergleich mit anderen nichtstörungstheoretischen Verfahren

Neben der Methode der gekoppelten Kanäle gibt es, wie bereits in den vorangegangenen Kapiteln mehrfach erwähnt, im wesentlichen noch zwei weitere nichtstörungstheoretische Verfahren, mit denen die gebunden-freie Paarproduktion in relativistischen Stößen schwerer Ionen behandelt wurde. Bei dem von Busic

[Bus00] verwendeten Verfahren wird die zeitabhängige Dirac-Gleichung direkt mit Hilfe einer Finite-Elemente-Methode auf einem Gitter im Ortsraum gelöst. Momberger [Mom96] löste im Impulsraum eine Integro-Differentialgleichung für die Fourier-Transformierte der Wellenfunktion durch Diskretisierung auf einem Gitter. Gegenüber der Lösung im Ortsraum ergibt sich dabei der Vorteil, daß die Wellenfunktion für Zeiten nach dem Stoß nicht nach außen wegläuft, weshalb das Volumen im Impulsraum auf einen solchen Bereich eingeschränkt werden kann, der so groß ist, daß er die maximalen auftretenden Impulse gerade noch beinhaltet. Der mit diesem Verfahren verbundene Rechenaufwand ist jedoch extrem hoch. Um die Wellenfunktion an einem bestimmten Vektor  $\vec{k}$  des Impulsraums einen Schritt in der Zeit zu entwickeln, muß jeweils ein Integral über den gesamten Impulsraum berechnet werden. Der Rechenaufwand steigt damit quadratisch mit der Zahl der Gitterpunkte an. Im Vergleich dazu erscheint die Lösung der Dirac-Gleichung im Ortsraum eleganter. Mit der Finite-Elemente-Methode müssen für einen Schritt in der Zeitentwicklung nur die Ableitungen an jedem Punkt im Raum bestimmt werden. Die Anwendung des Hamiltonoperators auf die Wellenfunktion kann im Rahmen dieses Verfahrens als Multiplikation einer dünn besetzten Matrix, die eine Bandstruktur aufweist, mit einem Vektor geschrieben werden [Bus00]. Damit wird klar, daß der Rechenaufwand bei diesem Verfahren im wesentlichen nur linear mit der Anzahl der verwendeten Punkte ansteigt. Man muß aber berücksichtigen, daß man bei kleinerem Gitterabstand automatisch auch kleinere Zeitschritte durchführen muß, um Instabilitäten bei der Zeitentwicklung zu vermeiden [Hoe01].

Bei dem Verfahren der gekoppelten Kanäle ergibt sich das Problem, daß der Rechenzeitbedarf quadratisch mit der Anzahl der verwendeten Kanäle ansteigt, während man bei den Methoden, bei denen die Dirac-Gleichung auf einem Gitter im Ortsraum gelöst wird, einen linearen Anstieg der Rechenzeit mit der Zahl der verwendeten Gitterpunkte verzeichnen kann. Ein Problem ergibt sich bei diesen Methoden aber bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten. In einer konsistenten Behandlung müßte man dazu nämlich die nach der Zeit entwickelte Wellenfunktion auf Gitter-Eigenfunktionen, also Eigenfunktionen des diskretisierten Problems, projizieren. Bei den oben erwähnten Rechnungen von Busic wurde jedoch nur der Anfangszustand der zeitabhängigen Rechnung durch Lösung des Eigenwertproblems auf dem Gitter gewonnen. Für die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten wurden die analytischen Coulomb-Dirac-Wellenfunktionen benutzt, da die Berechnung aller Eigenfunktionen und Eigenwerte auf dem Gitter zu aufwendig ist. Außerdem läßt sich bislang nur die gebunden-freie Paarproduktion mit den direkten Methoden auf einem Gitter berechnen. Für die freie Paarproduktion muß man nämlich die Zustände des negativen Kontinuums in der Zeit entwickeln. Für jeden dieser Zustände muß man daher eine unabhängige Rechnung durchführen. Der Rechenaufwand ist damit um ein Vielfaches größer als bei der Paarproduktion mit Einfang, wo unter Ausnutzung der Symmetrie unter Zeitumkehr nur die gebundenen Zustände in der Zeit entwickelt werden

müssen. Die oben genannten Rechnungen von Basic und von Momberger beschränkten sich sogar auf den Grundzustand, da dieser den größten Beitrag zu den Wirkungsquerschnitten für die Paarproduktion mit Einfang liefert.

Bei dem Verfahren der gekoppelten Kanäle wird die Rechenzeit im wesentlichen durch die Anzahl der zu berechnenden Matrixelemente bestimmt. Die Lösung der gekoppelten Gleichungen nimmt nur relativ wenig Zeit in Anspruch. Für eine zeitabhängige Rechnung mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle benötigt man bei einer festen Basis stets die gleichen Matrixelemente, unabhängig davon, wieviele Anfangszustände in der Zeit entwickelt werden müssen. Daher ist der Rechenzeitbedarf bei Rechnungen zur freien Paarproduktion nur unwesentlich größer als bei Rechnungen für die Paarproduktion mit Einfang.

### 7.3 Ausblick

Es stellt sich nun die wichtige Frage, welches Verfahren, insbesondere unter dem Gesichtspunkt des damit verbundenen Rechenzeitaufwands, für die Beschreibung der Elektron-Positron-Paarproduktion am besten geeignet und bei zukünftigen Rechnungen zu bevorzugen ist. Man kann heute angesichts der Ergebnisse von Basic sagen, daß die zeitabhängige Dirac-Gleichung auf einem Gitter bald mit genügend hoher Genauigkeit gelöst werden kann, um damit auch so kleine Wahrscheinlichkeiten wie die für die Paarproduktion berechnen zu können. Eine neue, sehr vielversprechende Methode wird derzeit von Hoelß [Hoe01b] zur Beschreibung von Wechselwirkungen schwerer Ionen mit sehr starken Laserfeldern verwendet. Bei diesem Verfahren wird die Wellenfunktion in Zylinderkoordinaten nach Funktionen mit guten Drehimpulsen  $J_z$  entwickelt. Die zeitabhängige Dirac-Gleichung wird dabei zu einem gekoppelten System partieller Differentialgleichungen in den Koordinaten  $z$ ,  $\rho$  und  $t$ . Für jede Drehimpulskomponente  $J_z = m\hbar$  wird die entsprechende Wellenfunktion auf ein zweidimensionales Gitter gelegt, und die Dirac-Gleichung wird mit der Finite-Elemente-Methode gelöst. Da die Paarproduktion im wesentlichen bei sehr kleinen Stoßparametern auftritt, liegt näherungsweise eine Symmetrie um die  $z$ -Achse vor, und die Entwicklung nach Drehimpulsen  $J_z$  kann auf einige wenige Komponenten beschränkt werden. Da bei dem Verfahren von Hoelß die Wellenfunktion nur auf zweidimensionalen Gittern betrachtet wird, ergeben sich im Vergleich zu der von Basic verwendeten Methode deutliche Geschwindigkeitsvorteile. Hoelß implementiert derzeit das Verfahren zur Behandlung von Stößen schwerer Ionen. Erste Resultate zeigen, daß die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion mit sehr hoher Genauigkeit in relativ kurzer Zeit berechnet werden kann.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Gitter-Methoden aufgrund des günstigeren Verhältnisses zwischen Rechenzeit und Anzahl der Gitterpunkte (bzw. Kanalzahl) für die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten für die gebunden-freie Paarproduktion besser als das Verfahren der gekoppelten Kanäle geeignet sind.

Besonders vielversprechend erscheint hier das oben erwähnte Verfahren von Hölß. Die freie Paarproduktion ist dagegen nichtstörungstheoretisch nur mit dem Verfahren der gekoppelten Kanäle behandelbar.

Damit stellt sich die Frage, ob das Verfahren der gekoppelten Kanäle durch eine andere Wahl der Basiswellenfunktionen weiterentwickelt und eventuell verbessert werden kann. Dazu kämen grundsätzlich zwei verschiedene Möglichkeiten in Frage. Man kann nämlich einerseits einfachere Basisentwicklungen zugrunde legen, so daß die Berechnung der Matrixelemente schneller erfolgen kann. Dann könnten in der Basisentwicklung mehr Basiswellenfunktionen berücksichtigt werden. Im optimalen Fall lassen sich die Matrixelemente analytisch berechnen. Das ließe sich zum Beispiel im Rahmen einer Entwicklung nach Gaußorbitalen erreichen. Man kann im Rahmen solcher Entwicklungen aber keine optimale Darstellung des kontinuierlichen Spektrums erwarten.

Auf der anderen Seite könnte man versuchen, die durch die Anwesenheit der beiden Kerne verursachte „Verzerrung“ des Vakuums besser zu beschreiben. Dies könnte durch die Konstruktion von quasimolekularen Zwei-Zentren-Wellenfunktionen [Sof79, Rei81, Wie87] geschehen. In Rechnungen mit solchen Wellenfunktionen wurden bisher aber nur Stöße bei nichtrelativistischen Geschwindigkeiten betrachtet. Dann geht das Liénard-Wiechert-Potential eines sich bewegenden Kerns in das gewöhnliche Coulomb-Potential über. Reinhardt [Rei81] hat Rechnungen zur Elektron-Positron-Paarproduktion im Equal-Speed-System durchgeführt, wobei nur der Monopolterm in der Multipolentwicklung der Coulomb-Potentiale der beiden Kerne berücksichtigt wurde. Als Basiswellenfunktionen wurden die Lösungen der stationären Dirac-Gleichung mit diesem Potential genommen. Diese haben einen guten Drehimpuls und lassen sich durch Integration der radialen Dirac-Gleichung berechnen. Bei höheren Geschwindigkeiten kann man jedoch den Teil des Wechselwirkungspotentials, der die  $\alpha_2$ -Matrix enthält, nicht mehr vernachlässigen. Da dieser Term verschiedene Drehimpulseigenfunktionen miteinander vermischt, wird die Berechnung der Eigenfunktionen im Rahmen einer Multipolentwicklung des Liénard-Wiechert-Potentials aufwendiger. Ein weiteres Problem ergibt sich dadurch, daß die Basiswellenfunktionen als Lösung einer stationären Dirac-Gleichung asymptotisch nicht in atomare Wellenfunktionen der sich bewegenden Kerne übergehen. Dieses Problem ließe sich durch die Mitnahme von atomaren Wellenfunktionen im Basissatz beheben. Es müßte aber untersucht werden, in welcher Art und Weise das kontinuierliche Spektrum behandelt werden könnte. Da im Rahmen einer solchen Rechnung die Basisfunktionen zu jedem Zeitpunkt neu berechnet werden müßten, ist ein solcher Zugang erheblich aufwendiger als der in dieser Arbeit verwendete. Für die Behandlung relativistischer Stöße mit molekularen Wellenfunktionen müßten neue Basisentwicklungen konstruiert werden.

Für Stöße im Bereich moderater, relativistischer Stoßenergien ( $\gamma \approx 2$ ) erscheint eine Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen, wie sie in dieser Arbeit zugrunde gelegt worden ist, noch am ehesten geeignet. Aufgrund der in

Abschnitt 5.2 gefundenen äußerst positiven Eigenschaften der Rechnung im Targetsystem mit einer Entwicklung nach Wellenfunktionen des Projektilkerns sollte dieser Zugang weiter untersucht werden. Dazu ist es notwendig, daß die Matrixelemente schneller als mit dem in dieser Arbeit verwendeten Verfahren berechnet werden können. Eine Möglichkeit, wie dies bewerkstelligt werden könnte, wurde bereits am Ende von Abschnitt 5.2 vorgeschlagen.

Es wäre wünschenswert, wenn Rechnungen im Rahmen der in Abschnitt 5.2 beschriebenen Methode auch mit einem anderen Verfahren als mit dem der gekoppelten Kanäle durchgeführt werden könnten. Nur so ließe sich zweifelsfrei bestätigen, daß die in dieser Arbeit beobachteten Effekte nicht auf die verwendeten Näherungen -wie zum Beispiel die Diskretisierung des Kontinuums mit stationären Wellenpaketen- zurückzuführen sind. Dazu wäre zum Beispiel das weiter oben erwähnte Verfahren von Hölß geeignet.

Bei weitaus höheren, ultrarelativistischen Stoßenergien läßt sich die bereits erwähnte, für unendlich hohes  $\gamma$  (also für einen Projektilkern, der sich mit Lichtgeschwindigkeit bewegt) exakte Lösung von Baltz [Bal97] verwenden, um Wahrscheinlichkeiten für Paarproduktion bei kleinen Stoßparametern zu berechnen. In einem Übergangsbereich größerer Stoßparameter gehen diese in die Ergebnisse der Störungstheorie über. Dabei ist jedoch unklar, wie groß der Fehler dieser Näherung bei endlichen  $\gamma$  ist und ab welchen Stoßenergien man diese Näherung verwenden kann. Eine systematische Behandlung könnte im Rahmen des Eikonalgekoppelte-Kanäle-Verfahrens erreicht werden. Damit wurde in Rechnungen für den Ladungstransfer in Stößen zwischen H-Atomen und H<sup>+</sup>-Ionen bei hohen, aber noch nichtrelativistischen Stoßenergien eine sehr gute Konvergenz der Basisentwicklung gefunden [Tos99].

# Anhang A

## Multipolentwicklung des Liénard-Wiechert-Potentials

In diesem Anhang wird die Multipolentwicklung des Liénard-Wiechert-Potentials behandelt. Die Herleitung wurde einer Veröffentlichung von Baltz et al. [Bal91] entnommen. Das Liénard-Wiechert-Potential, das durch den Projektilkern verursacht wird, der sich mit der Geschwindigkeit  $v$  in Richtung der  $z$ -Achse bewegt, ist gegeben durch

$$V_P = \frac{-\gamma\alpha Z_P(1 - v\alpha_z)}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2}}. \quad (\text{A.1})$$

Für den Fall  $\gamma = 1$  läßt sich die Multipolentwicklung einfach mit Hilfe der bekannten Formel [Jac75]

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^m(\theta, \phi) Y_l^{m*}(\theta', \phi') \quad (\text{A.2})$$

berechnen. Um die Multipolentwicklung des Liénard-Wiechert-Potentials für den allgemeinen Fall zu berechnen, benutzt man die Fourier-Transformierte des Potentials. Es ist

$$\tilde{V}_P = \frac{1}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2}} = \frac{1}{2\pi^2\gamma} \int d^3q \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}} e^{-i(\vec{b}+vt\vec{e}_z)\vec{q}}}{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2/\gamma^2}. \quad (\text{A.3})$$

Die Exponentialfunktionen im Zähler dieses Ausdrucks werden nun ausgedrückt durch ihre Multipolentwicklungen, und man erhält damit nach Ausführen der Integration über den Winkel  $\phi_q$

$$\tilde{V}_P = \frac{16\pi}{\gamma} \sum_{l,l'} \sum_m i^{l-l'} Y_l^m(\theta, \phi) Y_{l'}^{m*}(\theta_u, 0) \int_0^\infty dq q^2 j_l(rq) j_{l'}(uq) \int d\cos\theta_q Y_l^m(\theta_q, 0) \frac{Y_{l'}^m(\theta_q, 0)}{q^2(1 - v^2 \cos^2\theta_q)}. \quad (\text{A.4})$$

Dabei ist  $\theta_u$  der Winkel, den der Vektor  $\vec{u} = \vec{b} + vt\vec{e}_z$  mit der  $z$ -Achse einschließt und  $u = \sqrt{b^2 + v^2t^2}$ . Das Integral über  $q$  kann analytisch ausgeführt werden mit dem Ergebnis [Gra80]

$$\begin{aligned} R_{ll'}(r) &= \int_0^\infty dq j_l(rq) j_{l'}(uq) = \int_0^\infty dq \frac{\pi}{2q\sqrt{ru}} J_l(rq) J_{l'}(uq) \\ &= \begin{cases} \frac{\pi}{4} \frac{r^l}{u^{l'+1}} \frac{\Gamma(\frac{l'+l+1}{2})}{\Gamma(\frac{l-l}{2}+1)\Gamma(l+3/2)} {}_2F_1\left(\frac{l'+l+1}{2}, \frac{l-l'}{2}; l + \frac{3}{2}; \frac{r^2}{u^2}\right) & l \leq l' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

für den Fall, daß  $r < u$ . Das Ergebnis für  $r > u$  erhält man durch Austausch von  $r$  gegen  $u$  und gleichzeitiges Vertauschen von  $l$  mit  $l'$ . Das Integral über  $\cos\theta_q$  kann ebenfalls vereinfacht werden. Es ist

$$\begin{aligned} A_{ll'}^m &= \int d\cos\theta_q Y_l^m(\theta_q, 0) \frac{Y_{l'}^m(\theta_q, 0)}{1 - v^2 \cos^2\theta_q} \\ &= \frac{(-1)^m}{4\pi} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \sum_L C(ll'L; 000) C(ll'L; -mm0) \\ &\quad \times \int_{-1}^1 d\cos\theta_q \frac{P_L(\cos\theta_q)}{1 - v^2 \cos^2\theta_q}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Das Integral über  $\cos\theta_q$  verschwindet aus Symmetriegründen, wenn  $L$  ungerade ist. Ferner ist der Clebsch-Gordan-Koeffizient  $C(ll'L; 000)$  nur dann verschieden von Null, wenn  $l+l'+L$  gerade ist. Daher muß auch  $l+l'$  eine gerade Zahl sein. Zusammenfassend kann man schreiben:

$$\tilde{V}_P = \frac{16\pi}{\gamma} \sum_{l,m} Y_l^m(\theta, \phi) \sum_{l'} i^{l-l'} Y_{l'}^m(\theta_u, 0) R_{ll'}(r) A_{ll'}^m. \quad (\text{A.7})$$

Für  $r > u$  begrenzt das Integral in (A.5) die Summation über  $l'$ . Da in diesem Fall  $(l'-l)/2 \leq 0$  gilt, ist die hypergeometrische Funktion ein Polynom und kann auf einfache Art und Weise berechnet werden. Für  $r < u$  erstreckt sich die Summation über  $l'$  aber von  $l$  bis  $\infty$ . Tests haben gezeigt, daß die Summation über  $l'$  dann nur sehr langsam konvergiert und die Darstellung (A.7) für eine numerische Berechnung der Potentialmultipole ungeeignet ist. Bei unseren Rechnungen gehen wir daher so vor, daß wir die Potentialmultipole für Werte  $r < u$  numerisch durch Integration über die Winkel berechnen und auf einem Gitter tabellieren. Für Werte von  $r$  zwischen den Gitterpunkten wird eine kubische Spline-Interpolation verwendet. Die Potentialmultipole für  $r > u$  werden aber mit Hilfe der Formel (A.7) berechnet.



# Anhang B

## Fourier-Transformation von Dirac-Spinoren

Wie in Kapitel 4.3 ausführlich besprochen, lassen sich die Zwei-Zentren-Matrixelemente erheblich vereinfachen, wenn die Integration im Impulsraum anstatt im Ortsraum ausgeführt wird. Für die Integration benötigt man die Fourier-Transformierten sowohl der gebundenen als auch der Kontinuumswellenfunktionen. Ferner braucht man die Fourier-Transformierte eines geboosteten Dirac-Spinors. Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, wie die Fourier-Transformierte des geboosteten Spinors mit der des ursprünglichen (nicht geboosteten) Spinors zusammenhängt.

### B.1 Fourier-Transformation von Dirac-Wellenfunktionen

Der Dirac-Spinor einer Coulomb-Dirac-Wellenfunktion ist von der Form [Gre87]

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} g(r)\Omega_{\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \\ if(r)\Omega_{-\kappa}^{\mu}(\theta, \phi) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Die Fourier-Transformierte

$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3p \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}} \quad (\text{B.2})$$

läßt sich in der Form [Gai97]

$$\phi(\vec{p}) = (-i)^l \begin{pmatrix} \tilde{g}(p)\Omega_{\kappa}^{\mu}(\theta_p, \phi_p) \\ \tilde{f}(p)\Omega_{-\kappa}^{\mu}(\theta_p, \phi_p) \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

schreiben. Dabei ist  $l = |\kappa|$ , falls  $\kappa > 0$  und  $l = |\kappa| - 1$  andernfalls. Die vom Radialimpuls abhängigen Teile der Wellenfunktion  $\tilde{g}(p)$  und  $\tilde{f}(p)$  sind

$$\tilde{g}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dr r^2 j_{l_A}(pr) g(r) \quad (\text{B.4})$$

$$\tilde{f}(p) = -\text{sgn}\kappa \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dr r^2 j_{l_B}(pr) f(r). \quad (\text{B.5})$$

Für die Radialwellenfunktionen  $\tilde{g}(p)$  und  $\tilde{f}(p)$  lassen sich analytische Ausdrücke gewinnen. Diese werden im nächsten Abschnitt diskutiert.

### B.1.1 Fourier-Transformierte der Kontinuumswellenfunktionen

Für die Berechnung der Zwei-Zentren-Matrixelemente (3.11), (3.15) und (3.16) benötigt man nach dem letzten Abschnitt die Fourier-Transformierten der Radialwellenfunktionen der stationären Wellenpakete. Es macht jedoch keinen Sinn, diese durch numerische Auswertung der Integrale (B.4) und (B.5) zu berechnen, denn diese Integrale konvergieren aufgrund des langsamen Abfalls der Kontinuumswellenpakete für große  $r$  nur äußerst langsam und man müßte daher die Wellenpakete auch für sehr große  $r$  bestimmen. Viel besser geht man so vor, daß man die Fourier-Transformierte der Wellenpakete durch Superposition der Fourier-Transformierten der Kontinuums-eigenfunktionen berechnet.

In diesem Unterabschnitt sollen analytische Ausdrücke für die Fourier-Transformierte einer Coulomb-Dirac-Wellenfunktion, die zum kontinuierlichen Spektrum gehört, abgeleitet werden. Wir folgen dabei im wesentlichen der Behandlung von Momberger et al. [Mom96]. Die Radialfunktionen  $g(r)$  und  $f(r)$  der großen und kleinen Komponente sind gegeben durch [Gre87]

$$g_\kappa(r) = C_1 \frac{(2p_0)^\gamma e^{\pi y/2} |\Gamma(\gamma + iy)|}{\sqrt{\pi p_0} \Gamma(2\gamma + 1)} r^{\gamma-1} \times \Re [e^{i(\eta - p_0 r)} (\gamma + iy)_1 F_1(\gamma + 1 + iy, 2\gamma + 1, 2ip_0 r)] \quad (\text{B.6})$$

$$f_\kappa(r) = -C_2 \frac{(2p_0)^\gamma e^{\pi y/2} |\Gamma(\gamma + iy)|}{\sqrt{\pi p_0} \Gamma(2\gamma + 1)} r^{\gamma-1} \times \Im [e^{i(\eta - p_0 r)} (\gamma + iy)_1 F_1(\gamma + 1 + iy, 2\gamma + 1, 2ip_0 r)], \quad (\text{B.7})$$

wobei  $p_0 = \sqrt{E^2 - 1}$ ,  $\gamma = \sqrt{|\kappa|^2 - (Z\alpha)^2}$ ,  $y = \frac{Z\alpha E}{p_0}$  und

$$\eta = \frac{1}{2} \arg \left( -\frac{\kappa - iy/W}{\gamma + iy} \right). \quad (\text{B.8})$$

Die Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  sind

$$C_1 = \begin{cases} \sqrt{E+1} & \text{für } E > 1 \\ \sqrt{|E|-1} & \text{für } E < -1 \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

und

$$C_2 = \begin{cases} \sqrt{E-1} & \text{für } E > 1 \\ -\sqrt{|E|+1} & \text{für } E < -1. \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

Zunächst kann man feststellen, daß die Integrale (B.4) und (B.5) für eine Kontinuumswellenfunktion im allgemeinen nicht existieren. Das liegt an dem langsamen Abfallen der Kontinuumswellenfunktionen mit wachsendem Radius. So hat zum Beispiel die große Komponente  $g(r)$  für positive Energien das Verhalten

$$g(r) \approx \sqrt{\frac{E+1}{\pi p_0}} \frac{\cos(p_0 r + y \ln(2pr) + \delta)}{r} \quad (\text{B.11})$$

für große  $r$ , wobei  $y = Z\alpha E/p_0$  und  $\delta$  die vom Radius unabhängige Coulombphase ist. Die Integrale (B.4) und (B.5) existieren für Kontinuumswellenfunktionen nur im Sinne von Distributionen. Das sieht man am einfachsten am Beispiel einer freien Wellenfunktion, deren Fourier-Transformierte proportional zu einer  $\delta$ -Funktion im Impulsraum ist. Um die Konvergenz dieser Integrale zu erzwingen, multipliziert man den Integranden mit einem exponentiellen Dämpfungsfaktor  $e^{-\epsilon r}$ . Am Ende der Rechnung läßt man dann  $\epsilon$  gegen Null gehen. Man muß damit Integrale von der Form

$$I_\kappa = \int_0^\infty dr r^{\gamma+1} j_l(pr) e^{-i(p_0 - i\epsilon)r} {}_1F_1(\gamma+1 + iy, 2\gamma+1, 2ip_0 r) \quad (\text{B.12})$$

berechnen. Wir benutzen nun die folgende Darstellung der sphärischen Besselfunktionen [Mom96]

$$j_l(z) = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^l \frac{(l+n)!}{n!(l-n)!} \frac{1}{(2z)^n} \Re(i^{n-l-1} e^{iz}). \quad (\text{B.13})$$

Das zu berechnende Integral (B.12) läßt sich damit schreiben als

$$I_\kappa(p) = \frac{1}{2p} \sum_{n=0}^l \frac{(l+n)!}{n!(l-n)!} \frac{1}{(2p)^n} (i^{n-l-1} I_A(p) + (-i)^{n-l-1} I_B(p)), \quad (\text{B.14})$$

wobei

$$I_A(p) = \int_0^\infty dr r^{\gamma-n} e^{i(p-(p_0-i\epsilon))r} {}_1F_1(\gamma+1 + iy, 2\gamma+1, 2ip_0 r) \quad (\text{B.15})$$

$$I_B(p) = \int_0^\infty dr r^{\gamma-n} e^{-i(p+(p_0-i\epsilon))r} {}_1F_1(\gamma+1 + iy, 2\gamma+1, 2ip_0 r). \quad (\text{B.16})$$

Mit Hilfe der Kummer-Transformation

$$e^{-ip_0 r} {}_1F_1(\gamma + 1 + iy, 2\gamma + 1, 2ip_0 r) = e^{ip_0 r} {}_1F_1(\gamma - iy, 2\gamma + 1, -2ip_0 r) \quad (\text{B.17})$$

erhält man für das Integral  $I_A(p)$

$$I_A(p) = \int_0^\infty dr r^{\gamma-n} e^{i(p+p_0+i\epsilon)r} {}_1F_1(\gamma - iy, 2\gamma + 1, -2ip_0 r) \quad (\text{B.18})$$

$$= \left[ \int_0^\infty dr r^{\gamma-n} e^{-i(p+p_0-i\epsilon)r} {}_1F_1(\gamma + iy, 2\gamma + 1, 2ip_0 r) \right]^* \quad (\text{B.19})$$

Mit der Integraldarstellung der hypergeometrischen Funktion  ${}_2F_1(a, b, c; x)$  [Lan79]

$$\int_0^\infty dx x^\mu e^{-\nu x} {}_1F_1(a, b, cx) = \Gamma(\mu + 1) \nu^{-(\mu+1)} {}_2F_1(\mu + 1, a, b, \frac{c}{\nu}) \quad (\text{B.20})$$

erhält man dann schließlich

$$I_A(p) = \Gamma(\gamma - n + 1) \left[ (i(p_0 - i\epsilon + p))^{-(\gamma-n+1)} \times {}_2F_1\left(\gamma - n + 1, \gamma + iy, 2\gamma + 1, \frac{2p_0}{p_0 - i\epsilon + p}\right) \right]^* \quad (\text{B.21})$$

$$I_B(p) = \Gamma(\gamma - n + 1) (i(p_0 - i\epsilon + p))^{-(\gamma-n+1)} \times {}_2F_1\left(\gamma - n + 1, \gamma + 1 + iy, 2\gamma + 1, \frac{2p_0}{p_0 - i\epsilon + p}\right). \quad (\text{B.22})$$

Der Imaginärteil  $i\epsilon$  im Nenner des Arguments der hypergeometrischen Funktion ist hier wichtig, denn die hypergeometrische Funktion hat auf der reellen Achse einen Verzweigungsschnitt, und das Vorzeichen des kleinen Imaginärteils legt damit fest, von welcher Seite man sich im Grenzfall  $\epsilon \rightarrow 0$  dem Verzweigungsschnitt nähern muß. Damit kann man dann zusammenfassend für die Fourier-Transformierte der Radialwellenfunktionen schreiben:

$$\tilde{g}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} C_1 N \Re [e^{in}(\gamma + iy) I_\kappa] \quad (\text{B.23})$$

$$\tilde{f}(p) = \text{sgn}(\kappa) \sqrt{\frac{2}{\pi}} C_2 N \Im [e^{in}(\gamma + iy) I_{-\kappa}], \quad (\text{B.24})$$

wobei

$$N = \frac{(2p_0)^\gamma e^{\pi y/2} |\Gamma(\gamma + iy)|}{\sqrt{\pi p_0} \Gamma(2\gamma + 1)}. \quad (\text{B.25})$$

Neben den Fourier-Transformierten der Wellenfunktion werden für die Berechnung der Wechselwirkungsmatrixelemente noch die Fourier-Transformierten der Wellenfunktionen, multipliziert mit dem Faktor  $\frac{1}{r}$ , benötigt, also

$$\chi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 r \frac{1}{r} \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\vec{r}}. \quad (\text{B.26})$$

Für die Berechnung der Fourier-Transformierten kann wieder der oben bereits vorgestellte Formalismus benutzt werden. Dabei muß  $r^{\gamma-n}$  in (B.15) und (B.16) lediglich durch  $r^{\gamma-n-1}$  ersetzt werden. Daraus folgt dann, daß man in den Formeln (B.21) und (B.22)  $\gamma - n + 1$  im Argument der hypergeometrischen Funktion, im Argument der Gammafunktion und im Exponenten von  $(i(p_0 + p))^{-(\gamma-n+1)}$  jeweils durch  $\gamma - n$  ersetzen muß. Zu bemerken ist noch, daß die Integrale  $I_A$  und  $I_B$  im Grenzfall  $\epsilon \rightarrow 0$  an der Stelle  $p = p_0$  singularär werden. Um diese Singularität zu umgehen, wird bei der praktischen Berechnung der Wellenpakete  $\epsilon = 10^{-5}$  gesetzt. Tests haben gezeigt, daß die Wellenpakete und die damit berechneten Matrixelemente keine merkliche Abhängigkeit von diesem  $\epsilon$  aufweisen, wenn es nur klein genug gewählt wird. Für die numerische Integration über den Impuls, die zur Berechnung der Wellenpakete ausgeführt werden muß, werden Routinen aus der QUADPACK-Bibliothek [Pie83] verwendet.

### B.1.2 Fourier-Transformierte der gebundenen Wellenfunktionen

Auch für die gebundenen Zustände im Coulombpotential lassen sich analytische Formeln angeben. Es ist [Mom96]

$$\tilde{g}_{n,\kappa}(p) = \frac{N}{\sqrt{k}} \sum_{m=0}^{n'} c_{i,m}^+ I_{m,l_A} \quad (\text{B.27})$$

$$\tilde{f}_{n,\kappa}(p) = -\text{sgn}(\kappa) \frac{N}{\sqrt{k}} \sum_{m=0}^{n'} c_{i,m}^- I_{m,l_B}. \quad (\text{B.28})$$

Dabei ist

$$N = \frac{y^{\gamma+\frac{1}{2}} 2^\gamma}{\Gamma(2\gamma+1)} \sqrt{\frac{\Gamma(2\gamma+n'+1)}{2(n')! K(K-\kappa)}} \quad (\text{B.29})$$

mit

$$\gamma = \sqrt{|\kappa|^2 - (\alpha Z)^2} \quad n' = n - |\kappa| \quad (\text{B.30})$$

$$K = \sqrt{n^2 - 2n'(|\kappa| - \gamma)} \quad y = \frac{\alpha Z}{K} \quad (\text{B.31})$$

$$W = \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha Z}{n' + \gamma}\right)^2}. \quad (\text{B.32})$$

Die Koeffizienten  $c_{i,m}^\pm$  sind gegeben durch

$$c_{i,m}^\pm = \sqrt{1 \pm W} (2y)^m \frac{(-n')_m [m - n' \pm (K - \kappa)]}{m!(2\gamma + 1)_m}. \quad (\text{B.33})$$

Für die Funktionen  $I_{m,l}$  hat man weiter

$$I_{m,l} = \frac{\Gamma(\gamma + m + l + 2)}{\Gamma(l + \frac{3}{2})} \frac{\left(\frac{p}{2}\right)^{l+1/2}}{(p^2 + y^2)^{(\gamma+m+l+2)/2}} \times {}_2F_1\left(\frac{\gamma + m + l + 2}{2}, \frac{l - \gamma - m}{2}, l + \frac{3}{2}, \frac{p^2}{p^2 + y^2}\right). \quad (\text{B.34})$$

Auch hier benötigt man wieder die Fourier-Transformierten der Wellenfunktionen, multipliziert mit dem Faktor  $\frac{1}{r}$ . Diese erhält man, indem man in (B.34) im ersten und zweiten Argument der hypergeometrischen Funktion, im Argument der Gammafunktion und im Exponenten von  $(p^2 + y^2)^{(\gamma+m+l+2)/2}$  jeweils  $\gamma$  durch  $\gamma - 1$  ersetzt.

## B.2 Fourier-Transformation von geboosteten Dirac-Wellenfunktionen

Gesucht ist die Fourier-Transformierte eines geboosteten Dirac-Spinors

$$\psi'(\vec{r}', t') = S^{-1}(v)\psi(\vec{r}', t'), \quad (\text{B.35})$$

wobei  $x' = x - b$ ,  $y' = y$ ,  $z' = \gamma(z - vt)$  und  $t' = \gamma(t - vz)$ . Der Boost-Operator  $S(v)$  ist gegeben durch

$$S(v) = \sqrt{\frac{\gamma + 1}{2}}(1 - \delta\alpha_z), \quad \delta = \sqrt{\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}}. \quad (\text{B.36})$$

Die Fourier-Transformierte des geboosteten Spinors ist nun gegeben durch

$$\begin{aligned} \phi'(\vec{p}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r S^{-1}(v)\psi(\vec{r}', t') e^{-i\vec{p}\vec{r}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{S^{-1}(v)}{\gamma} \int d^3r' \psi(\vec{r}') e^{-iE\gamma(t-vz)} e^{-i\vec{p}\vec{r}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{S^{-1}(v)}{\gamma} \int d^3r' \psi(\vec{r}') e^{-iE\gamma(t-v(\frac{z'}{\gamma}+vt))} e^{-i(p_x(x'+b)+p_y y'+p_z(\frac{z'}{\gamma}+vt))} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{S^{-1}(v)}{\gamma} \int d^3r' \psi(\vec{r}') e^{-i(p_x x'+p_y y'+(\frac{p_z}{\gamma}-vE)z')} e^{-ip_x b} e^{-i(E\gamma(1-v^2)t+vp_z t)} \\ &= \frac{S^{-1}(v)}{\gamma} \phi(p_x, p_y, \frac{p_z}{\gamma} - vE) e^{-ip_x b} e^{-i(\frac{E}{\gamma}+vp_z)t}, \end{aligned}$$

wobei  $\phi(\vec{p})$  die Fourier-Transformierte der ungeboosteten stationären Wellenfunktion ist. Dieses Ergebnis hätte man auch sofort hinschreiben können. Der Exponentialfaktor  $e^{-ip_x b}$  sorgt für eine Translation in Richtung der  $x$ -Achse, und man sieht, daß die Fourier-Transformierten in der  $z$ -Richtung um  $\gamma v E$  verschoben und um den Faktor  $\gamma$  gestreckt werden.

# Anhang C

## Tabellen

| Basis | $P_{ion}$<br>( $10^{-2}$ ) | $P_{exc}$<br>( $10^{-2}$ ) | $P_{trans}$<br>( $10^{-2}$ ) | $P_{e^{-}e^{+}}(1s_{1/2})$ |
|-------|----------------------------|----------------------------|------------------------------|----------------------------|
| B1    | 46,3                       | 14,3                       | -                            | $1,01 \times 10^{-3}$      |
| B2    | 49,8                       | 13,0                       | -                            | $4,94 \times 10^{-4}$      |
| B3    | 46,1                       | 13,4                       | 2,0                          | $5,32 \times 10^{-4}$      |
| B4    | 40,9                       | 9,8                        | 1,6                          | $5,87 \times 10^{-4}$      |

Tabelle C.1: 2.-4. Spalte: Wahrscheinlichkeiten für Ionisation, Anregung und Ladungstransfer in die K-Schale des Targetions in Stößen von  $U^{91+}$  mit  $Au^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon und bei einem Stoßparameter  $b = 0,125\lambda_c$ . 5. Spalte: Wahrscheinlichkeit für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektilions in Stößen von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$  bei der gleichen Stoßenergie (berechnet unter Ausnutzung der Symmetrie unter Zeitumkehr). Eine Erklärung der Einträge in der ersten Spalte befindet sich auf der nächsten Seite.

| Basis | $P_{e^{-}e^{+}}(\text{frei})$ | $P_{e^{-}e^{+}}(\text{geb.-frei})$ | $P_{e^{-}e^{+}}(1s_{1/2})$ |
|-------|-------------------------------|------------------------------------|----------------------------|
| B1    | $4,72 \times 10^{-3}$         | $2,11 \times 10^{-3}$              | $1,08 \times 10^{-3}$      |
| B2    | $3,58 \times 10^{-3}$         | $6,22 \times 10^{-4}$              | $4,94 \times 10^{-4}$      |
| B3    | $3,32 \times 10^{-3}$         | $7,08 \times 10^{-4}$              | $5,64 \times 10^{-4}$      |
| B4    | -                             | $9,80 \times 10^{-3}$              | $7,22 \times 10^{-4}$      |

Tabelle C.2: Wahrscheinlichkeiten für freie Paarproduktion (2. Spalte), Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektilions (3. Spalte), und für Paarproduktion mit Einfang in die K-Schale des Projektils (4. Spalte) in Stößen von  $U^{92+}$  mit  $Au^{79+}$  bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon und bei einem Stoßparameter  $b = 0,125\lambda_c$ . Eine Erklärung der Einträge in der ersten Spalte befindet sich auf der nächsten Seite.

| Basis | Cu <sup>29+</sup> | Ag <sup>47+</sup> | Au <sup>79+</sup> | Au <sup>79+</sup> (geb.-frei) |
|-------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------------------|
| B2    | 0,3               | 1,1               | 4,1               | 1,2                           |
| B3    | -                 | -                 | 4,2               | 1,4                           |
| B4    | -                 | -                 | -                 | 1,5                           |

Tabelle C.3: Wirkungsquerschnitte für freie Paarproduktion in Stößen von U<sup>92+</sup> mit Cu<sup>29+</sup> (2. Spalte), Ag<sup>47+</sup> (3. Spalte) und Au<sup>79+</sup> (4. Spalte) bei einer Stoßenergie von 930 MeV/Nukleon. Die letzte Spalte enthält den Wirkungsquerschnitt für Paarproduktion mit Einfang in einen gebundenen Zustand des Projektilions in Stößen von U<sup>92+</sup> mit Au<sup>79+</sup> bei 930 MeV/Nukleon. Die Einträge in der ersten Spalte werden weiter unten erklärt. (Alle Angaben in Einheiten von b.)

| $Z_T$ | $\sigma_{e^-e^+}$ (geb.-frei) | $\sigma_{e^-e^+}$ (frei) |
|-------|-------------------------------|--------------------------|
| 29    | $6,3 \times 10^{-3}$          | $6,9 \times 10^{-2}$     |
| 47    | $2,2 \times 10^{-2}$          | 0,21                     |
| 79    | 0,11                          | 0,84                     |

Tabelle C.4: Wirkungsquerschnitte für gebunden-freie Paarproduktion (2. Spalte) und freie Paarproduktion (3. Spalte) in Stößen von La<sup>57+</sup> mit Cu<sup>29+</sup> (1. Zeile), Ag<sup>47+</sup> (2. Zeile) und Au<sup>79+</sup> (3. Zeile) bei 930 MeV/Nukleon. Alle Wirkungsquerschnitte wurden mit der Basis vom Typ B2 (siehe unten) berechnet. (Alle Angaben in Einheiten von b)

## C.1 Erläuterungen zu den Tabellen

- B1: Rechnung im Projektilsystem mit Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns wie in Abschnitt 5.1 beschrieben. Der Basissatz enthält 238 Basiszustände.
- B2: Rechnung im System des Targetkerns mit einer Entwicklung nach atomaren Wellenfunktionen des Projektilkerns wie in Abschnitt 5.2 beschrieben. Der Basissatz in dieser Rechnung enthält 310 Basiswellenfunktionen.
- B3: Asymmetrische Zwei-Zentren-Entwicklung mit atomaren Wellenfunktionen am Target- und am Projektilkern wie in Abschnitt 6.1 beschrieben. Dabei wurden am Targetkern nur gebundene Zustände berücksichtigt. Der Basissatz enthält 332 Basiswellenfunktionen.
- B4: Rechnung mit einer symmetrischen Zwei-Zentren-Entwicklung wie in Abschnitt 6.2 beschrieben. Der Basissatz besteht aus 236 Basiszuständen.



# Literaturverzeichnis

- [Abr72] M. Abramowitz und A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, 1972
- [Bal91] A. J. Baltz, M. J. Rhoades-Brown und J. Weneser, Phys. Rev. A 44, 5569 (1991)
- [Bal93] A. J. Baltz, M. J. Rhoades-Brown und J. Weneser, Phys. Rev. A 47, 3444 (1993)
- [Bal94] A. J. Baltz, M. J. Rhoades-Brown und J. Weneser, Phys. Rev. A 50, 4842 (1994)
- [Bal97] A. J. Baltz, Phys. Rev. A 78, 1231 (1997)
- [Bau90] G. Baur, Phys. Rev. A 42, 5736 (1990)
- [Bec83a] U. Becker, Diplomarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (1983)
- [Bec86a] U. Becker, Doktorarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (1986)
- [Bec86b] U. Becker, N. Grün und W. Scheid, J. Phys. B 19, 1347 (1987)
- [Bec87a] U. Becker, J. Phys. B 20, 2075 (1987)
- [Bec87b] U. Becker, J. Phys. B 20, 6563 (1987)
- [Bel97] A. Belkacem, H. Gould, B. Feinberg, R. Bossingham und W.E. Meyerhof, Phys. Rev. A 56, 2807 (1997)
- [Bel98] A. Belkacem, N. Claytor, T. Dinneen, B. Feinberg und H. Gould, Phys. Rev. A 58, 1253 (1998)
- [Ber88] C. A. Bertulani und G. Baur, Phys. Rep. 163, 299 (1988)
- [Bha35] H. J. Bhabha, Proc. R. Soc. London Ser. A 152, 559 (1935)
- [Bot85] C. Bottcher und M. R. Strayer, Phys. Rev. Lett. 54, 669 (1985)
- [Bot89] C. Bottcher und M. R. Strayer, Phys. Rev. D 39, 1330 (1989)

- [Bri68] D.M. Brink and G.R. Satchler, Angular Momentum, Clarendon Press, 1968
- [Bus99] O. Basic, private Mitteilung
- [Bus00] O. Basic, Doktorarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (2000)
- [Eic95] J. Eichler, Relativistic Atomic Collisions, Academic Press (1995)
- [Eic99] U. Eichmann, J. Reinhardt, S. Schramm und W. Greiner, Phys. Rev. A 59, 1223 (1999)
- [Gai97] M. Gail, Diplomarbeit, Justus-Liebig Universität Gießen (1997)
- [Gra80] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik, Tables of Integrals, Series and Products, Academic Press (1980)
- [Gre87] W. Greiner, Theoretische Physik Band 6, Relativistische Wellengleichungen, Verlag Harri Deutsch (1987)
- [Hei54] W. Heitler, The Quantum Theory of Radiation, Oxford University Press, Oxford (1954)
- [Hoe01] M. Hoelß, private Mitteilung (2001)
- [Hoe01b] M. Hoelß, 22. Arbeitsbericht der Arbeitsgruppe „Energierreiche atomare Stöße“ (2001)
- [Hof93] J. Hoffstadt, Diplomarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (1993)
- [Ion96] D. C. Ionescu und J. Eichler, Phys. Rev. A 54, 4960 (1996)
- [Jac75] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley & Sons (1975)
- [Kra01] H. F. Krause, C. R. Vane, S. Datz, P. Grafström, H. Knudsen, U. Mikelsen, C. Scheidenberger, R. H. Schuch und Z. Vilakazi, Phys. Rev. A 63, 2001 (2001)
- [Lan34] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, Phys. Zs. Sowjetunion 6, 244 (1934)
- [Lan79] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik Band III, Quantenmechanik, Akademie Verlag Berlin (1979)
- [Moh98] P. J. Mohr, G. Plunien und G. Soff, Physics Reports 293, 227 (1998)
- [Mom90] K. Momberger, N. Grün und W. Scheid, J. Phys. B 23, 2293 (1990)
- [Mom91] K. Momberger, N. Grün und W. Scheid, Z. Phys. D 18, 133 (1991)

- [Mom92] K. Momberger, Doktorarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (1992)
- [Mom96] K. Momberger, A. Belkacem und A.H. Sorensen, Phys. Rev. A 53, 1605 (1996)
- [Nis35] Y. Nishina, S. Tomonaga und M. Kobayashi, Sci. Pap. Inst. Phys. Chem. Res. 27, 137 (1935)
- [Pie83] R. Piessens, E. de Doncker-Kapenga, C. W. Uberhuber und D. K. Kahaner, QUADPACK, Springer Verlag, New York (1983)
- [Rei81] J. Reinhardt, B. Müller und Walter Greiner, Phys. Rev. A 24, 103 (1981)
- [Ros55] M. E. Rose, Multipole Fields, John Wiley & Sons, 1955
- [Ros71] M. E. Rose, Relativistische Elektronentheorie, Hochschultaschenbücher-Verlag (1971)
- [Rum91] K. Rumrich, K. Momberger, G. Soff, W. Greiner, N. Grün und W. Scheid, Phys. Rev. Lett. 66, 2613 (1991)
- [Rum93] K. Rumrich, G. Soff und W. Greiner, Phys. Rev. A 47, 215 (1993)
- [Sak94] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison Wesley Publishing Company (1994)
- [Sch61] S. Schweber und H. A. Bethe, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Row, Peterson and Company (1961)
- [Seg98] B. Segev und J. C. Wells, Phys. Rev. A 57, 1849 (1998)
- [Sof79] G. Soff, J. Rafelski und W. Greiner, Phys. Rev. A 20, 169 (1979)
- [Ste96] T. Steih, Diplomarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (1996)
- [Ten99] R. W. H. Tenzer, Doktorarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen (1999)
- [Thi92] J. Thiel, A. Bunker, K. Momberger, N. Grün und W. Scheid, Phys. Rev. A 46, 5 (1992)
- [Tos88] N. Toshima und J. Eichler, Phys. Rev. A 38, 2305 (1988)
- [Tos90a] N. Toshima und J. Eichler, Phys. Rev. A 41, 5221 (1990)
- [Tos90b] N. Toshima und J. Eichler, Phys. Rev. A 42, 3896 (1990)
- [Tos99] N. Toshima und T. Nakagawa, Phys. Rev. A 60, 2182 (1999)
- [Var88] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev und V. K. Khersonskii, Quantum Theory of Angular Momentum, World Scientific (1988)

[Wei34] C. F. von Weizsäcker, Z. Physik 88, 612 (1934)

[Wie87] K. Wietschorke, P. Schlüter, G. Soff, K. Rumrich und W. Greiner, Phys. Rev. A 36, 377 (1987)

[Wil34] E. J. Williams, Phys. Rev. 45, 729 (1934)

## Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei meinen akademischen Lehrern Herrn Prof. Dr. W. Scheid und Herrn Prof. Dr. N. Grün für die Anregung zu dieser Arbeit und die sehr gute Betreuung bedanken. Weiterhin gilt mein besonderer Dank Herrn Prof. N. Toshima, der mich während eines einjährigen Aufenthalts an der Universität Tsukuba in Japan betreut hat.

Bei den Mitarbeitern meines Instituts bedanke ich mich für das freundschaftliche Arbeitsverhältnis. Mein besonderer Dank gilt Herrn Dipl.-Phys. M. Hölß für die Unterstützung und Hilfestellung bei Problemen mit Hard- und Software sowie für viele nützliche Anregungen aus unseren häufigen Diskussionen. Auch möchte ich mich bei Herrn Dr. O. Basic bedanken, mit dem ein fruchtbarer Austausch von Ideen und Ergebnissen stattfand. Bei meinem Zimmerkollegen Herrn Dipl.-Phys. Z. Harman, der maßgeblich zu dem guten Klima beigetragen hat, bedanke ich mich für viele interessante Diskussionen. Mein besonderer Dank gilt auch den Sekretärinnen des Instituts Frau D. Henrich und Frau S. Gretschel für ihre fortwährende Unterstützung.

Beim John von Neumann Institut in Jülich möchte ich mich für die großzügig zur Verfügung gestellte Rechenzeit auf dem Höchstleistungsrechner CRAY-T3E bedanken. Für Rechenzeit möchte ich mich auch beim Hochschulrechenzentrum der Universität Gießen bedanken.

Für die finanzielle Unterstützung durch ein Stipendium während meines Aufenthalts in Japan bedanke ich mich beim DAAD.

Großen Dank schulde ich vor allen Dingen aber meinen Eltern, die mir durch ihre langjährige Unterstützung erst die Möglichkeit zu diesem Studium gaben.