

Hartree-Fock-Rechnungen zur Photoionisation von leichten bis mittelschweren Atomen und Ionen in Neutronenstern-Magnetfeldern

Von der Fakultät für Mathematik und Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

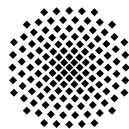
Peter Diemand

aus Stuttgart

Hauptberichter: Prof. Dr. Günter Wunner

Mitberichter: Prof. Dr. Günter Haag

Tag der mündlichen Prüfung: 23. Oktober 2012



1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart

2012

Inhaltsverzeichnis

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	7
Zusammenfassung	9
Abstract	11
1. Einleitung	13
1.1. Motivation	13
1.2. Aufbau der Arbeit	14
2. Atome und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern	17
2.1. Atome in starken Magnetfeldern	17
2.2. Hamiltonoperator in atomaren Einheiten	20
2.3. Quantenzahlen und Energieniveaus gebundener Zustände	21
2.3.1. Bindungsenergien beim Wasserstoffatom	21
2.3.2. Energieniveaus bei Mehrelektronensystemen	23
3. Vielteilchensysteme	27
3.1. Ritzsches Variationsprinzip	27
3.2. Hartree-Verfahren	28
3.3. Hartree-Fock-Methode	28
3.4. Anwendung des Hartree-Fock-Verfahrens auf Mehrelektronensysteme in Neutronenstern-Magnetfeldern	30
3.5. Hartree-Fock-Roothaan-Methode	30
3.6. Finite Elemente und B-Splines	32
4. Photoionisation	35
4.1. Ungebundenes Elektron, Anfangs- und Endzustand	35
4.2. Wirkungsquerschnitt	36
4.2.1. Herleitung für das Wasserstoffatom	37
4.2.2. Beliebige Atome und Ionen	42
4.3. Photonendichte	44
5. Implementierung und Aufbau	47
5.1. Grundzustandssuche und Besetzungswahrscheinlichkeiten	47

5.2.	Einschränkung der Quantenzahlen	48
5.3.	Aufteilung der ungebundenen Wellenfunktion in symmetrischen und antisymmetrischen Anteil	50
5.4.	Normierung der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons	51
5.5.	Gauß-Quadratur	51
5.6.	Schematischer Aufbau des Programms	52
5.7.	Runge-Kutta-Verfahren	56
5.8.	Adaptive Simpson-Methode	57
5.9.	Einfallsrichtung und Polarisation der Strahlung	58
6.	Einzelwirkungsquerschnitt	61
6.1.	Analyse nach Quantenzahlen	61
6.1.1.	Helium	64
6.1.2.	Einfluss der Energie des ungebundenen Elektrons	68
6.1.3.	Heliumähnliche Ionen	73
6.1.4.	Verschiedene Magnetfeldstärken	79
7.	Gesamtwirkungsquerschnitt	85
7.1.	Anzahl der Zustände	86
7.2.	Konvergenz der ungebundenen Wellenfunktion	88
7.3.	Einbeziehung der Besetzungswahrscheinlichkeit	91
7.4.	Einfluss der Photonendichte	93
7.5.	Helium	99
7.5.1.	Analyse nach Knotenzahlen der gebundenen Zustände	99
7.5.2.	Analyse nach magnetischen Quantenzahlen	107
7.5.3.	Analyse nach Besetzung des Ausgangszustandes	109
7.5.4.	Zirkular polarisierte Strahlung	112
7.5.5.	Heliumionen	118
7.6.	Sauerstoffionen	121
7.6.1.	Analyse nach Knotenzahlen der gebundenen Zustände	123
7.6.2.	Analyse nach magnetischen Quantenzahlen	126
7.6.3.	Analyse nach Besetzung des Ausgangszustandes	128
7.6.4.	Zirkular polarisierte Strahlung	129
7.6.5.	Wasserstoffähnliche Sauerstoffionen	134
8.	Zusammenfassung und Ausblick	139
8.1.	Zusammenfassung	139
8.2.	Ausblick	141
	Summary	143
	A. Atomare Rydberg-Einheiten	151

B. Landau-Wellenfunktionen	153
C. Effektive Potentiale	155
C.1. Adiabatisches Elektron-Kern-Potential	155
C.2. Adiabatisches Elektron-Elektron-Potential	156
Literaturverzeichnis	159
Danksagung	163

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

α	Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante
β	Magnetischer Feldstärkeparameter $\beta = B/B_0$
β_Z	Z-skaliertes magnetischer Feldstärkeparameter $\beta = \beta/Z^2$
ϵ	Polarisationsvektor
\hbar	Reduziertes Plancksches Wirkungsquantum ($\hbar = 1$ a.u.)
ν	Longitudinale Knotenzahl
ω	Übergangsenergie
ψ	Amplitude der longitudinalen Wellenfunktion
σ	Wirkungsquerschnitt
σ_{Th}	Thomson-Wirkungsquerschnitt
ϑ	Winkel der einfallenden Strahlung
B	Magnetische Feldstärke
B_0	Magnetische Bezugsfeldstärke ($B_0 = \sqrt{2}$ a.u.)
c	Lichtgeschwindigkeit ($c = 2/\alpha$ a.u.)
e	Elementarladung ($e = \sqrt{2}$ a.u.)
E'	Energie des ungebundenen Elektrons
E_∞	Rydberg-Energie ($E_\infty = 1$ a.u.)
k_B	Boltzmann-Konstante
M	Summe der magnetischen Quantenzahlen ($M = \sum_i m_i$)
m	Magnetische Quantenzahl
m_e	Elektronenmasse ($m_e = 1/2$ a.u.)
N	Elektronenzahl
P_0	normierte Photonendichte
T	Temperatur
Z	Kernladungszahl
a.u.	Atomare Einheiten
Abb.	Abbildung
CGS	Einheitensystem (Centimetre Gram Second)
EWQS	Einzelwirkungsquerschnitt
GWQS	Gesamtwirkungsquerschnitt
SI	Einheitensystem (Système international d'unités)
Tab.	Tabelle

Zusammenfassung

Die Photoionisation von Atomen und Ionen in der Neutronensternatmosphäre stellt eine mögliche Ursache der Absorptionsmerkmale im Emissionsspektrum des isolierten Neutronensterns 1E 1207.4 – 5209 dar. In dieser Arbeit wird ein Programm zur Bestimmung des Wirkungsquerschnitts vorgestellt, welches in wenigen Tagen mehrere hunderttausend Übergänge berechnen kann. Nach der Herleitung des Wirkungsquerschnitts werden Übergänge für verschiedene Kernladungszahlen und bei unterschiedlichen Magnetfeldstärken untersucht. Für die Berechnung der Gesamtwirkungsquerschnitte werden außerdem die Photonendichte und die thermische Besetzung der Zustände berücksichtigt. Bei der Analyse von Helium und heliumähnlichen Sauerstoffionen werden die Übergänge nach ihren Quantenzahlen aufgeteilt und nach ihrem Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt untersucht. Auf diese Weise ermitteln wir, welche Übergänge in welchem Energiebereich den Hauptbeitrag liefern und welche vernachlässigt werden können. Darüber hinaus werden die Gesamtwirkungsquerschnitte für linear und zirkular polarisierte Strahlung verglichen. Die Analyse der Wirkungsquerschnitte soll dazu beitragen, die Berechnung der benötigten atomaren Rohdaten von gebunden-frei Übergängen bei Neutronensternmagnetfeldern auch für höhere Elemente zu ermöglichen deren Kenntnis die Voraussetzung dafür ist, die Zusammensetzung der Atmosphäre mithilfe astrophysikalischer Atmosphärenmodellierung zu bestimmen.

Abstract

The photoionisation of atoms and ions in the neutron star atmosphere is one possible cause for the absorption features in the emission spectrum of the isolated neutron star 1E 1207.4 – 5209. In this thesis, we present a programme that allows us to compute the cross sections of hundreds of thousands of transitions in a few weeks. First, we derive the photoionisation cross section, then transitions are analysed for different nuclear core charges and magnetic field strengths. Furthermore, photon density and thermal occupation of the states are taken into account for the calculation of the total cross section. For helium and He-like oxygen the transitions are analysed in terms of quantum numbers, and the contribution of the respective parts to the total cross section is examined. In this way, we will figure out, which transitions are negligible and which ones are most relevant in different energy ranges. Moreover, total cross sections for linear and circular polarisation of the radiation are compared. The analysis of the total cross section can serve as a useful guide for the calculation of bound-free transitions in neutron star magnetic fields also for higher elements, which is a prerequisite to determine the composition of the atmosphere by appropriate astrophysical atmosphere modelling.

1. Einleitung

1.1. Motivation

Neutronensterne stellen ein mögliches Endstadium der Sternentwicklung dar. Sie entstehen durch eine Supernova, bei der ein massereicher Stern kollabiert. Der daraus hervorgehende Neutronenstern ist deutlich kleiner als der ursprüngliche Himmelskörper und besitzt eine ähnliche Dichte wie Atomkerne. Beim Kernkollaps bleibt der magnetische Fluss näherungsweise erhalten, weshalb auf Neutronensternen extrem starke Magnetfelder herrschen können. Die Magnetfeldstärken liegen für die in dieser Arbeit betrachteten Klasse von Neutronensternen zwischen 10^8 und 10^{10} Tesla. Diese besitzen die 1,4- bis dreifache Masse unserer Sonne, der Radius beträgt etwa 10 km und die Oberflächentemperatur liegt bei über einer Million Kelvin.

In der Atmosphäre, welche aufgrund der hohen Gravitation vermutlich nur einige Zentimeter dick ist, könnten sich verschiedenste Elemente von Wasserstoff ($Z = 1$) bis Eisen ($Z = 26$) in allen möglichen Ionisierungsstufen befinden. Um die Zusammensetzung dieser Atmosphäre zu entschlüsseln, wurden im Jahr 1999 die zwei Röntgensatelliten *Chandra* von der NASA und *XMM-Newton* von der ESA auf eine exzentrische Umlaufbahn um die Erde gebracht. Diese haben das Emissionsspektrum des Neutronensterns 1E 1207.4-5209 gemessen, welches Absorptionsfeatures um 0,7 und 1,4 keV aufweist, siehe Abbildung 1.1. Die auf der Oberfläche stark variierenden Magnetfeldstärken könnten die Breite der Absorptionsmerkmale erklären. Diese kommen dadurch zustande, dass Photonen in der Neutronensternatmosphäre absorbiert werden, wo sie atomare Übergänge verursachen. Dies können entweder Übergänge in angeregte gebundene Zustände sein oder solche, bei denen das Atom ionisiert wird.

Gebunden-gebunden Übergänge von Atomen und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern wurden bereits in [2] und [3] untersucht und sind auch aktuell noch Gegenstand der Forschung, siehe [4], [5] und [6]. Weitere Arbeiten, wie etwa [7], die eine Sauerstoff/Neon-Atmosphäre für 1E 1207.4-5209 vorschlagen, beschäftigen sich auch mit dem Thema atomarer Übergänge. Diese verfolgen jedoch einen anderen Ansatz, welcher im Gegensatz zum hier verwendeten Programm keine selbstkonsistenten Ergebnisse liefert. In der vorliegenden Arbeit, welche sich ausschließlich mit der Photoionisation von Atomen und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern beschäftigt, wird ein Verfahren zur effizienten parallelen Berechnung von Wirkungsquerschnitten vorgestellt. Dieses liefert die zur Modellierung der Neutronensternatmosphäre benötigten Rohdaten und berücksichtigt dabei bereits die thermische Besetzung der Zustände sowie die Photonendichte.

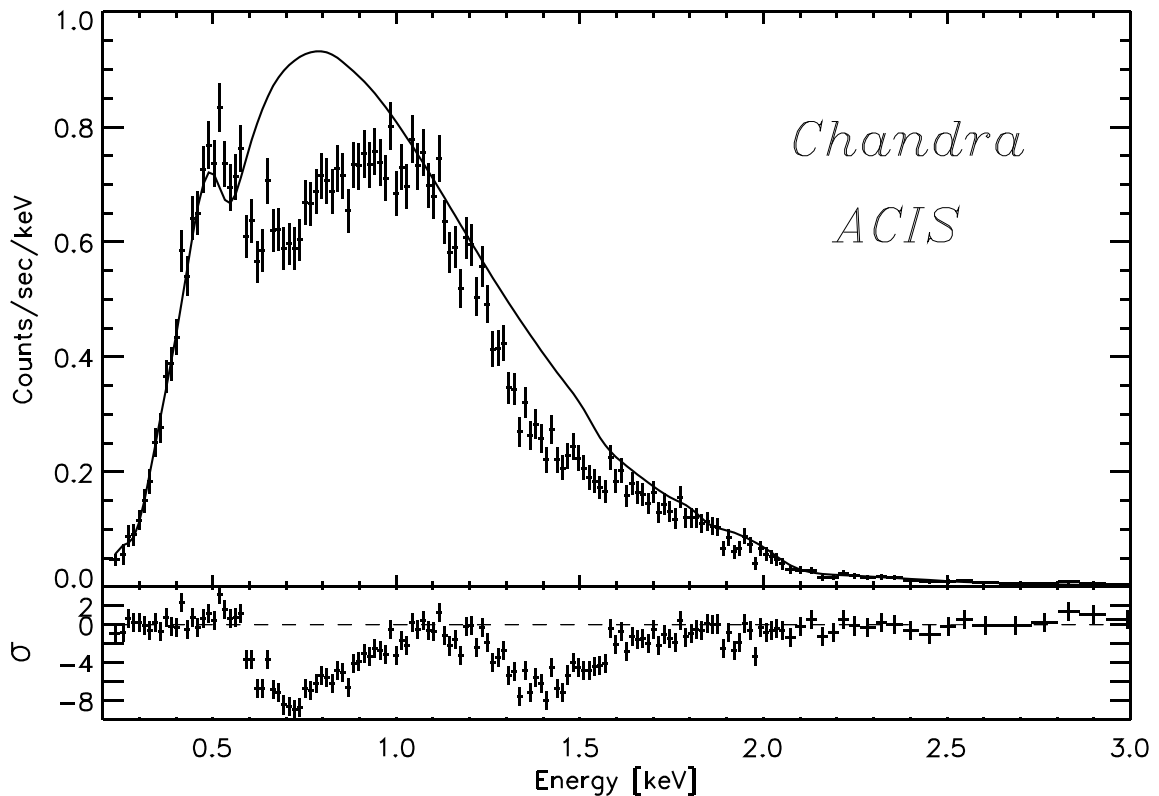


Abb. 1.1.: Spektrum des isolierten Neutronensterns 1E 1207.4-5209 aufgenommen mit dem *ACIS*-Detektor des Röntgenobservatoriums *Chandra*: Auffällig sind die breiten Absorptionsmerkmale bei etwa 0,7 und 1,4 keV. Quelle: [1].

Mithilfe der atomaren Daten lässt sich die Zusammensetzung der Atmosphäre mit der Magnetfeldstärke, Oberflächentemperatur und Rotverschiebung als zusätzliche Parameter berechnen, woraus dann auf das Masse-Radius-Verhältnis geschlossen werden kann. Dies ist in [8] anhand des Neutronensterns Cassiopeia A aufgezeigt, welcher jedoch ein vergleichsweise schwaches Magnetfeld besitzt.

1.2. Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 behandeln wir Atome in starken Magnetfeldern, stellen den Hamiltonoperator auf und untersuchen das Verhalten der Energieniveaus von Wasserstoffatomen in Abhängigkeit von der Magnetfeldstärke.

Kapitel 3 beschreibt die Grundlagen der Hartree-Fock Methode und die Zusammensetzung der Gesamtwellenfunktionen von Mehrelektronensystemen. Außerdem wird kurz dargelegt, wie die gebundenen Einteilchenwellenfunktionen mit dem Hartree-Fock-Roothaan-Verfahren berechnet werden und danach auf die hierzu verwendete Methode der finiten

Elemente in B-Spline-Basis eingegangen.

In Kapitel 4 werden die benötigten Formeln zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte ausgehend von Fermis goldener Regel hergeleitet, zuerst für Wasserstoff, dann allgemein für beliebige Atome und Ionen. Des Weiteren wird die Berechnung der ungebundenen Wellenfunktion sowie deren Normierung erläutert und die Aufteilung in symmetrischen und antisymmetrischen Anteil motiviert.

Kapitel 5 behandelt die Implementierung und beschreibt neben einigen numerischen Verfahren auch den Aufbau des Programms. Darüber hinaus werden einige weitere Voraussetzungen zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte thematisiert, unter anderem deren Winkelabhängigkeit, die Beschränkung der Quantenzahlen und die Suche nach dem Grundzustand.

Die Untersuchung zweier Übergänge für verschiedene Elemente bei verschiedenen Magnetfeldstärken folgt in Kapitel 6. Diese dient einerseits dem Verständnis, wie die Einzelwirkungsquerschnitte zustande kommen. Andererseits soll auch erörtert werden, welche Übergänge größere Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern und welche vernachlässigt werden können, und wie dies von der Kernladung oder der Magnetfeldstärke abhängt.

Welche Schlüsse wir daraus für den Gesamtwirkungsquerschnitt ziehen können, wie viele und welche Übergänge letztendlich berücksichtigt werden müssen, wird in Kapitel 7 diskutiert. Neben dem Einfluss zweier temperaturabhängiger Parameter, der Photondichte und der Besetzungswahrscheinlichkeit der Zustände, wird der Beitrag bestimmter Gruppen von Übergängen zum Gesamtwirkungsquerschnitt untersucht. Zuerst wird der Gesamtwirkungsquerschnitt von Helium und Heliumionen für verschieden polarisierte Strahlung untersucht. Danach folgt der Vergleich mit helium- und wasserstoffähnlichen Sauerstoffionen.

Kapitel 8 fasst die Ergebnisse zusammen und liefert einen Ausblick, wie die in dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse dazu dienen können, die Gesamtwirkungsquerschnitte sämtlicher Elemente von Wasserstoff bis Eisen in allen Ionisierungsstufen zu berechnen. Als Ergänzung zu den oben aufgeführten Kapiteln ist in Anhang A das atomare Einheitensystem beschrieben, Anhang B behandelt die Landau-Niveaus der Elektronen und Anhang C führt die zur Berechnung der Wellenfunktionen benötigten effektiven Potentiale auf.

2. Atome und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern

In diesem Kapitel wird der Einfluss der sehr hohen Magnetfeldstärken in der Neutronensternatmosphäre auf die Struktur der Atome behandelt. Das Magnetfeld stellt hier keine kleine Störung dar, sondern führt zu völlig anderen Orbitalen als im feldfreien Fall. Zuerst werden wir ein einzelnes Elektron im Magnetfeld betrachten. Anschließend nehmen wir die Wechselwirkung mit dem Kern und der Elektronen untereinander hinzu und stellen den Hamiltonoperator für das Gesamtsystem auf. Ausgehend davon überlegen wir zunächst für den einfachsten Fall, ein Wasserstoffatom, welches die guten Quantenzahlen unseres Systems sind und welche Energieniveaus sich abhängig von diesen ergeben.

2.1. Atome in starken Magnetfeldern

Bei einer Magnetfeldstärke $B_0 \approx 4,70 \cdot 10^5$ T ist der Bohr-Radius gleich dem Larmor-Radius. Bei deutlich kleineren Magnetfeldstärken dominiert die elektrische Wechselwirkung zwischen Kern und Elektronen, bei deutlich größeren die Wechselwirkung mit dem Magnetfeld. In der Neutronensternatmosphäre bewegen sich die Elektronen aufgrund der enormen Magnetfeldstärken auf Landau-Niveaus, nur in der Richtung des Magnetfeldvektors wird die elektrische Wechselwirkung der Elektronen untereinander und mit dem Kern relevant. Insgesamt ergibt sich eine zylindrische Symmetrie für die Atome und nicht die aus der Atomphysik gewohnte Kugelsymmetrie. Unser Koordinatensystem wählen wir so, dass der Magnetfeldvektor in z -Richtung zeigt. Durch die viel schnellere Bewegung der Elektronen in der Ebene orthogonal zum Magnetfeldvektor können wir die Wellenfunktion separieren: Ein Anteil beschreibt den Zustand in z -Richtung, welcher durch die elektrische Wechselwirkung mit dem Kern sowie die der Elektronen untereinander bestimmt ist. Der andere Anteil beschreibt das Elektron orthogonal dazu unter dem Einfluss des Magnetfeldes. Die Gesamtwellenfunktion ergibt sich aus dem Produkt dieser beiden Anteile. Dies ist die von Schiff und Snyder schon 1937 eingeführte „adiabatische Näherung“, siehe [9].

Für ein solches Atom wollen wir nun bei konstantem Magnetfeld \mathbf{B} den Hamiltonoperator aufstellen. Hierzu betrachten wir zunächst ein freies Elektron im Magnetfeld mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.1)$$

2. Atome und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern

Dabei ist $\boldsymbol{\sigma}$ der Vektor der Pauli-Matrizen und \mathbf{A} das Vektorpotential, welches in der Form

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (2.2)$$

gewählt wird (Zylindereichung). Bei \mathbf{p} handelt es sich um den kinetischen Impuls, der kanonische Impuls wird durch den Operator

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (2.3)$$

beschrieben. Für ein Magnetfeld in z -Richtung, also $B_x = B_y = 0$, $B_z = B$ ergibt sich für das Vektorpotential in dieser Eichung

$$A_x = -\frac{1}{2}yB, \quad A_y = \frac{1}{2}xB, \quad A_z = 0. \quad (2.4)$$

Aufgrund der deutlich schnelleren Bewegung der Elektronen in transversaler Richtung (ρ, ϕ) gegenüber der Bewegung in longitudinaler Richtung (z) verwenden wir einen Separationsansatz für die Wellenfunktion, siehe (2.25).

Die für den Spinflip benötigte Energie liegt bereits für die niedrigste betrachtete Magnetfeldstärke (10^8 T) über 10 keV. Da dies weit über der Energie der beobachteten Strukturen im Emissionsspektrum liegt, können wir also annehmen, dass alle Spins antiparallel zum Magnetfeldvektor ausgerichtet sind. Für die folgende transversale Rechnung können wir somit vorläufig den Spinanteil des Hamiltonoperators sowie die z -Komponente des Impulsoperators weglassen. Dadurch gelangen wir zum Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\pi_x^2 + \pi_y^2) \quad (2.5)$$

mit

$$\pi_x = p_x - \frac{eB}{2c}y, \quad \pi_y = p_y + \frac{eB}{2c}x. \quad (2.6)$$

Setzen wir nun

$$Q_x \equiv \frac{c}{eB}\pi_y, \quad (2.7)$$

so erhalten wir einen harmonischen Oszillator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\pi_x^2 + \frac{1}{2}m_e\omega^2 Q_x^2 \quad (2.8)$$

mit der Frequenz

$$\omega = \frac{eB}{m_e c} \quad (2.9)$$

und den bekannten Energieeigenwerten

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

Die transversale Bewegung des Elektrons verläuft also auf den sogenannten Landau-Niveaus (siehe Anhang B) mit obiger Energie, welche durch die Quantenzahl n charakterisiert ist. Wir können nun den Auf- beziehungsweise Absteigeoperator definieren:

$$\pi_{\pm} = \sqrt{\frac{c}{eB2\hbar}} (\pi_x \pm i \pi_y) \quad (2.11)$$

$$\pi_+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \pi_- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (2.12)$$

Der Grundzustand ist unendlichfach entartet (siehe [10]), weshalb wir zur eindeutigen Bestimmung einen weiteren Operator benötigen, der sowohl mit dem Hamiltonoperator als auch mit p_z vertauscht. Mögliche Operatoren sind die Mittelpunktsgoordinaten der klassischen (zweidimensionalen) Kreisbahnen:

$$x_0 = x - \frac{v}{\omega} \sin(\omega t) = x - \frac{v_y}{\omega} \quad (2.13)$$

$$y_0 = y + \frac{v}{\omega} \cos(\omega t) = y - \frac{v_x}{\omega}. \quad (2.14)$$

Die Geschwindigkeiten v_i der klassischen Lösung drücken wir durch die Impulsoperatoren π_i aus, welche den kanonischen Impuls beschreiben,

$$v_i = \frac{\pi_i}{m_e}. \quad (2.15)$$

Die Energie des Elektrons hängt nicht von den Mittelpunktsgoordinaten ab, x_0 und y_0 vertauschen also mit \hat{H} und p_z , jedoch nicht miteinander:

$$[x_0, y_0] = \frac{i\hbar}{m_e\omega}, \quad (2.16)$$

x_0 und y_0 können also nicht gleichzeitig bestimmt werden. Die Wellenfunktion ist eindeutig bestimmt als Eigenfunktion der Operatoren

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} (\pi_x^2 + \pi_y^2), \quad p_z, \quad R(x_0, y_0), \quad (2.17)$$

wobei R eine beliebige Funktion von x_0 und y_0 ist. Wir wählen $R = x_0^2 + y_0^2$, was wiederum einem harmonischen Oszillator entspricht, welcher die Eigenwerte

$$r_0^2 = x_0^2 + y_0^2 = \frac{2\hbar}{m_e\omega} \left(s + \frac{1}{2} \right) \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (2.18)$$

besitzt. Die Mittelpunkte der Kreisbahnen mit Radius r_1 im Magnetfeld liegen selbst auf einem Kreis mit Radius r_0 .

$$r_1^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = \frac{2}{m_e \omega^2} \hat{H} = \frac{2\hbar}{m_e \omega} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.19)$$

Die Größe r_1^2 stellt eine Konstante der Bewegung dar, genauso wie die z -Komponente des Drehimpulses

$$L_z = xp_y - yp_x = x\pi_y - y\pi_x - \frac{m_e \omega}{2} (x^2 + y^2). \quad (2.20)$$

L_z ist eine Linearkombination der Operatoren \hat{H} und $x_0^2 + y_0^2$ und lässt sich somit durch die Radien r_0 und r_1 beziehungsweise die Quantenzahlen n und s ausdrücken, deren Differenz $m = n - s$ die magnetische Quantenzahl darstellt.

$$L_z = \frac{1}{2} m_e \omega (r_1^2 - r_0^2) = \hbar (n - s) = \hbar m. \quad (2.21)$$

Nehmen wir nun den Spinterm wieder hinzu so beträgt die Gesamtenergie in transversaler Richtung

$$E_{\perp} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} + m_s \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (2.22)$$

Sind die Spins antiparallel zum Magnetfeldvektor ausgerichtet und befindet sich das Elektron im niedrigsten Landau-Niveau ($n = 0$), so haben wir keinen Energiebeitrag ($E_{\perp} = 0$). Die Energie der Elektronen im Landau-Niveau ist zunächst unabhängig von der magnetischen Quantenzahl m , durch die Wechselwirkung mit dem Kern wird die Entartung der Zustände jedoch aufgehoben.

2.2. Hamiltonoperator in atomaren Einheiten

Um sich auf das Wesentliche konzentrieren zu können und nicht diverse Naturkonstanten in unterschiedlichen Potenzen durch sämtliche Rechnungen zu ziehen, wie dies in SI- oder CGS-Einheiten nötig wäre, verwenden wir in dieser Arbeit von nun an atomare Rydberg-Einheiten (siehe Anhang A). Als Längeneinheit dient hierbei der Bohrradius $a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} \approx 5,29 \cdot 10^{-11}$ m, die Energie wird in Einheiten von $E_{\infty} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2} \approx 13,6$ eV angegeben. Magnetfeldstärken lassen sich durch den dimensionslosen Feldstärkeparameter $\beta = \frac{B}{B_0}$ darstellen mit der bereits erwähnten Feldstärke $B_0 = \frac{2m_e^2 c^3}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = \sqrt{2}$ a.u. Für $\beta \gg 1$ dominiert Zylindersymmetrie.

Um den gesamten Hamiltonoperator für ein Atom mit Kernladungszahl Z und N Elektronen in starken Magnetfeldern aufzustellen, benötigen wir noch die Wechselwirkung

des Elektrons mit dem Kern sowie die Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Mit dem Laplaceoperator in Zylinderkoordinaten

$$\Delta_{z_i, \rho_i, \varphi_i} = \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} + \frac{1}{\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad (2.23)$$

erhalten wir

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\Delta_{z_i, \rho_i, \varphi_i} - 2i\beta \frac{\partial}{\partial \varphi_i} + \beta^2 \rho_i^2 + 2\beta m_s - \frac{2Z}{|\mathbf{r}_i|} \right] + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.24)$$

Hierbei stellt $-2i\beta \frac{\partial}{\partial \varphi_i}$ den paramagnetischen Term dar, $\beta^2 \rho_i^2$ ist der diamagnetische Anteil und $2\beta m_s$ ist der Spinterm, wobei m_s aufgrund der antiparallelen Ausrichtung in unseren Rechnungen immer $-\frac{1}{2}$ ist. Die Wechselwirkung mit dem Kern wird durch $-\frac{2Z}{|\mathbf{r}_i|}$ beschrieben, die Elektron-Elektron Wechselwirkung durch $\sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$.

2.3. Quantenzahlen und Energieniveaus gebundener Zustände

Thema dieses Abschnitts sind die Elektronenzustände der Atome und Ionen und wie man sich die Verteilung der Energieniveaus in Abhängigkeit der Quantenzahlen vorstellen kann. Als Ausgangspunkt wählen wir das einfachste Atom, den Wasserstoff.

2.3.1. Bindungsenergien beim Wasserstoffatom

In Abschnitt 2.1 haben wir festgestellt, dass bei den sehr starken Magnetfeldern in der Neutronensternatmosphäre Zylindersymmetrie vorherrscht und sich ein Separationsansatz für die Wellenfunktion anbietet. Darüber hinaus können wir für $\beta_Z = \frac{\beta}{Z^2} \gg 1$ eine weitere Vereinfachung vornehmen: Bei derart hohen Magnetfeldstärken stellt die Beschränkung auf das niedrigste Landau-Niveau ($n = 0$) eine ausreichend genaue Näherung dar. Sämtliche Ausgangs- und Endzustände der Photoionisation werden in dieser adiabatischen Näherung berechnet:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = g_{m\nu}(z) \Phi_m(\rho, \varphi). \quad (2.25)$$

Bei $\Phi_m(\rho, \varphi)$ handelt es sich um die Landau-Wellenfunktionen (siehe Anhang B), m und ν stellen die Quantenzahlen unseres Systems dar. Die Landau-Quantenzahl n ist auch eine gute Quantenzahl, taucht jedoch aufgrund der adiabatischen Näherung im Folgenden nicht mehr in den Gleichungen auf.

2. Atome und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern

In unserem System definieren die magnetische Quantenzahl m (z -Komponente des Gesamtdrehimpulses) sowie die Anzahl ν der Knoten in der z -Wellenfunktion die Zustände. Die z -Parität, welche direkt aus der Knotenzahl ν folgt, ist eine gute Quantenzahl. Der Übergang der Energieniveaus vom kugelsymmetrischen Atom mit den gewohnten Quantenzahlen zu unserem Fall ist schön dargestellt in [11], siehe Abbildung 2.1.

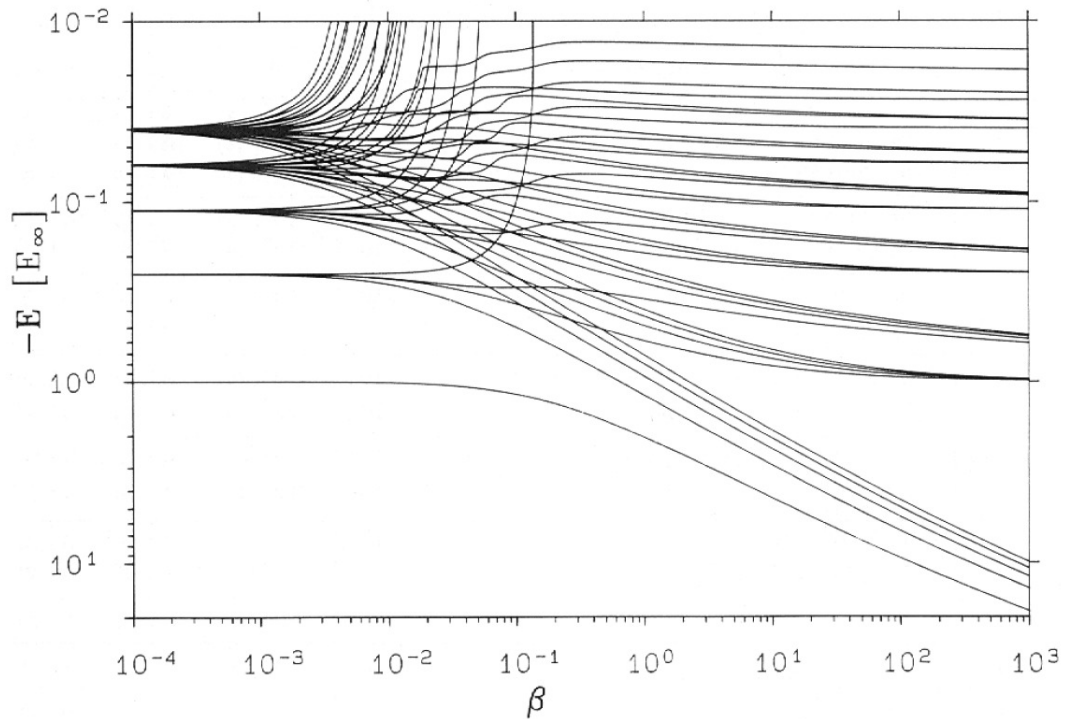


Abb. 2.1.: Bindungsenergien beim Wasserstoffatom für die fünf niedrigsten Hauptquantenzahlen über dem Magnetfeldparameter β aufgetragen. Quelle: [11].

Man erkennt, dass von jeder Hauptquantenzahl ein Zustand bei hohen Magnetfeldern energetisch besonders günstig wird, nämlich jeweils derjenige Zustand mit der kleinsten Drehimpulsquantenzahl. Diese stellen die am stärksten gebundenen Zustände dar und haben alle die Quantenzahl $\nu = 0$. Darüber finden sich mit bereits deutlich höherer Energie Zustände mit $\nu = 1$, nach einer kleinen Lücke dann diejenigen mit $\nu = 2$ und so weiter.

Zustände mit positiver Quantenzahl m steigen in der Energie sehr stark an, da bei diesen ein Landau-Niveau $n > 0$ besetzt ist, siehe [12]. Solche Zustände werden in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Das Energiespektrum des Wasserstoffatoms ist der Übersichtlichkeit halber nochmal in Abbildung 2.2 bei fünf verschiedenen Magnetfeldstärken zu sehen. Eingezeichnet sind hier für die Knotenzahlen $\nu = 0$ bis $\nu = 3$ jeweils nur die niedrigsten Energieniveaus. Wie schon in der vorigen Abbildung erkennt man, dass sich bei den verschiedenen Ma-

gnetfeldstärken vor allem die Zustände mit $\nu = 0$ besonders stark ändern (sie streben logarithmisch gegen $-\infty$ für $\beta \rightarrow \infty$), während diejenigen mit höherem ν geringere Energieänderungen aufweisen und asymptotisch gegen ein Rydbergspektrum konvergieren („wasserstoffähnliche Zustände“).

Außer den Energien erfahren natürlich auch die Wellenfunktionen und somit die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen eine deutliche Änderung: die Ausdehnung der Landau-Wellenfunktionen in transversaler Richtung wird mit steigendem Magnetfeld immer kleiner, während sich die Ausdehnung in z -Richtung nur geringfügig ändert. Die Atome werden also gestaucht und haben für hohe Magnetfelder Zigarrenform, siehe Abbildung 2.3.

2.3.2. Energieniveaus bei Mehrelektronensystemen

Da die Zusammensetzung der Neutronensternatmosphäre unbekannt ist und von Wasserstoff bis Eisen sämtliche Elemente in verschiedensten Ionisierungsstufen vorliegen könnten, enthalten die erforderlichen Rechnungen bis zu 26 Elektronen. Für Atome und Ionen mit vielen Elektronen sind die Termschemata kompliziert und es ist a priori nicht klar, welche Elektronenkonfiguration den Grundzustand darstellt. Dabei kann man sich jedoch gut an den Termschemata von Wasserstoff beziehungsweise wasserstoffähnlichen Ionen orientieren. Verwenden wir die Elektronenkonfigurationen der energetisch niedrigsten Zustände des Einelektronensystems für die Einteilchen-Wellenfunktionen des Mehrelektronensystems, so erhalten wir üblicherweise den Grundzustand, da die Wechselwirkung der Elektronen untereinander meist nicht allzu groß ist. Die Grundzustandssuche wird in Abschnitt 5.1 genauer behandelt.

2. Atome und Ionen in Neutronensternmagnetfeldern

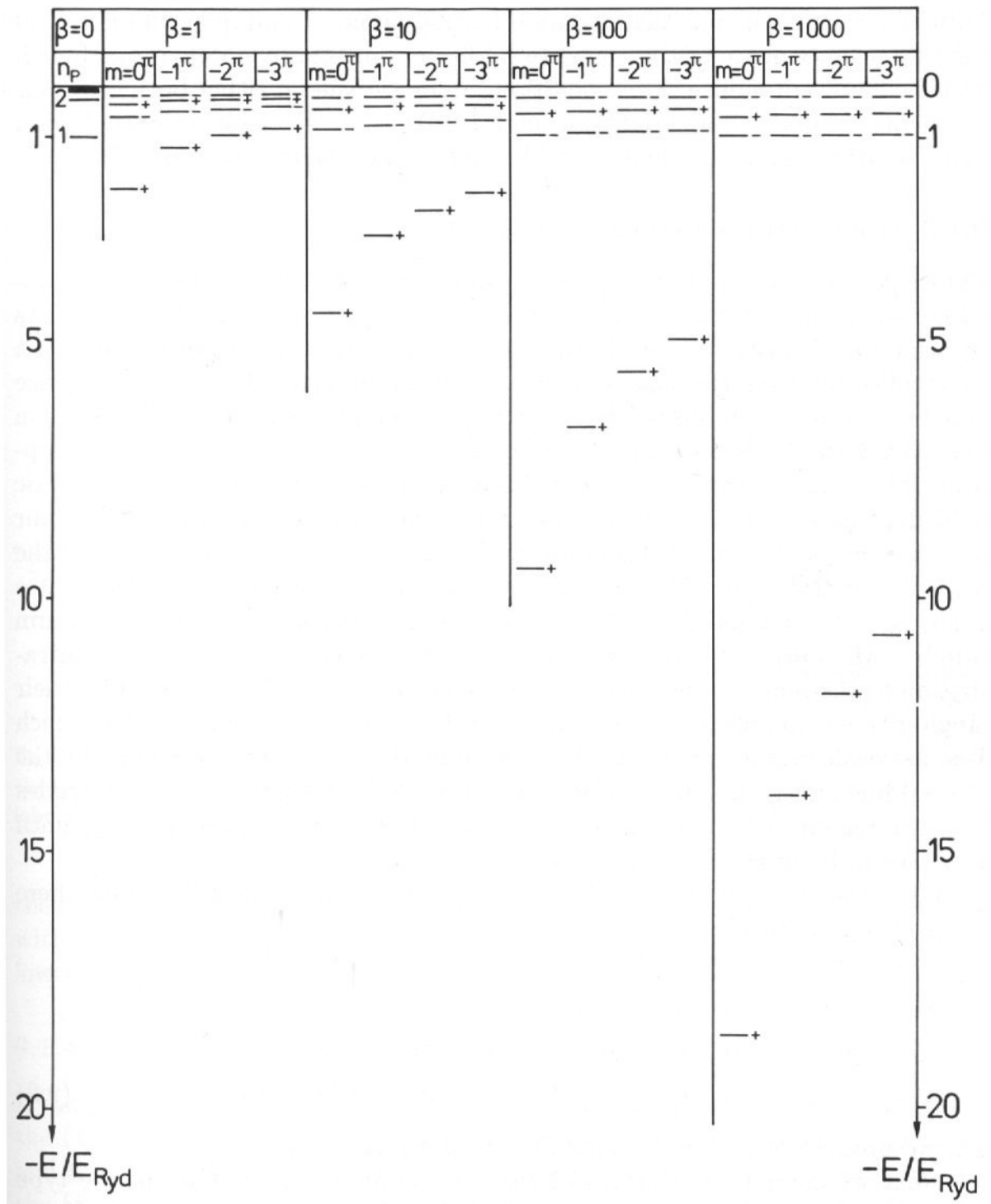


Abb. 2.2.: Energiespektrum des Wasserstoffatoms bei fünf verschiedenen Magnetfeldstärken. Quelle: [11].

2.3. Quantenzahlen und Energieniveaus gebundener Zustände

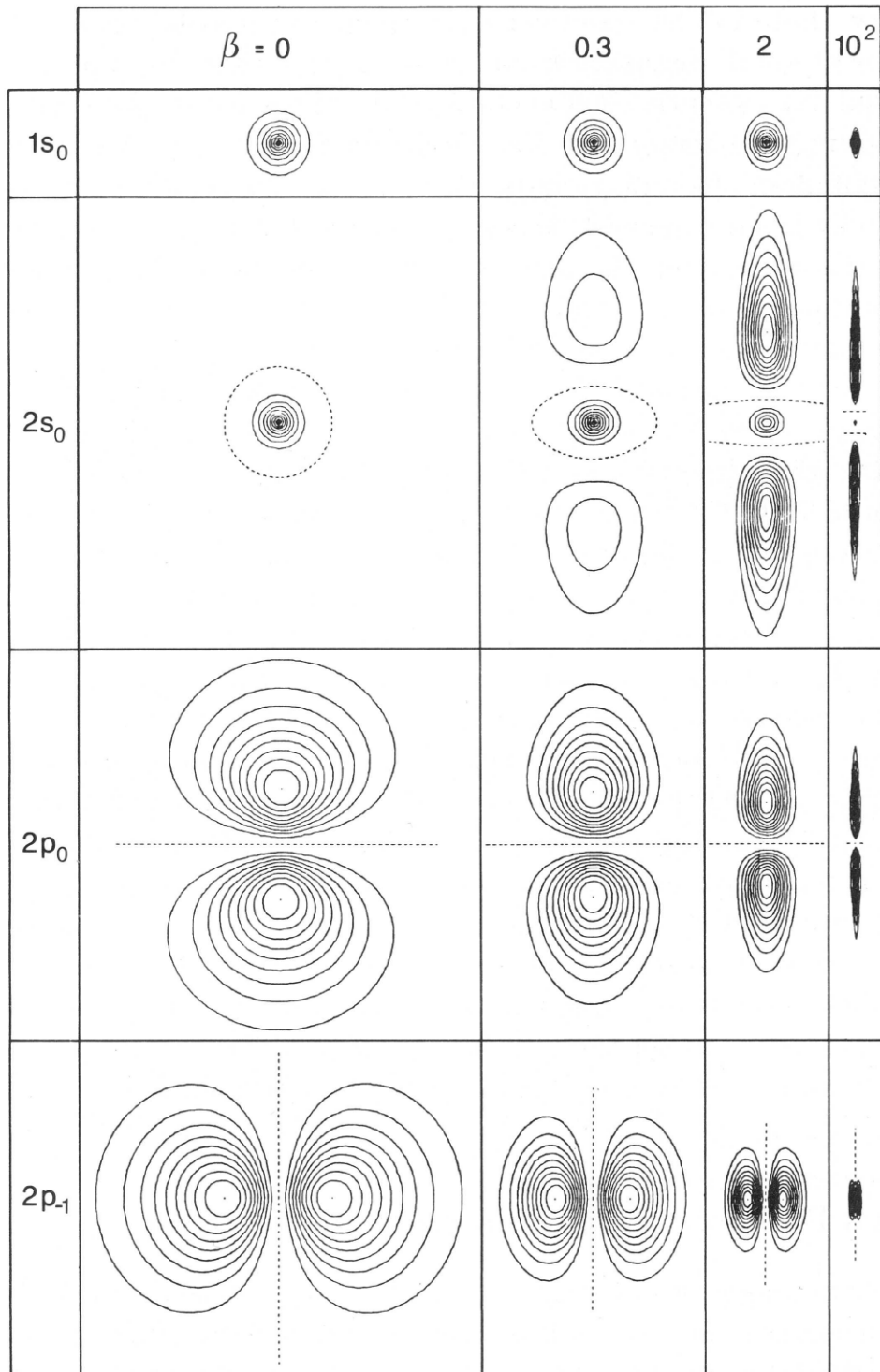


Abb. 2.3.: In der xz -Ebene aufgetragene Höhenlinien der Wahrscheinlichkeitsdichte für vier exemplarische Wasserstoff-Zustände bei verschiedenen Magnetfeldstärken. Quelle: [11].

3. Vielteilchensysteme

Für Mehrelektronensysteme ist die Bestimmung der benötigten Gesamtwellenfunktion und der zugehörigen Energie nicht exakt möglich. Mithilfe von Quanten-Monte-Carlo-Simulationen lassen sich zwar sehr genaue Ergebnisse erhalten, siehe [13], die Berechnung einzelner Zustände benötigt jedoch bereits Stunden oder gar Tage. Eine andere Möglichkeit der näherungsweise Berechnung stellt das Hartree-Fock-Verfahren dar, welches bei sehr kurzer Rechendauer dennoch relativ genaue selbstkonsistente Ergebnisse für Wellenfunktion und Energie liefert. Diese werden zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte benötigt, siehe Abschnitt 4.2. Daher werden wir die Grundlagen des Hartree-Fock-Verfahrens behandeln, die Zusammensetzung der Wellenfunktion in unserem speziellen System erörtern und die Hartree-Fock-Roothaan-Methode besprechen, welche zur Berechnung der gebundenen Zustände dient. Dabei werden wir auch kurz auf die hierzu verwendete Methode der finiten Elemente in B-Spline Basis eingehen. Eine detailliertere Beschreibung findet sich in [14].

3.1. Ritzsches Variationsprinzip

Sämtliche in diesem Kapitel vorgestellten Methoden zur Berechnung atomarer Zustände basieren auf dem Ritzschen Variationsprinzip. Wir gehen aus vom Schrödingerschen Extremalprinzip

$$\delta_{\Psi}\langle\hat{H}\rangle \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.1)$$

welches besagt, dass jede Wellenfunktion Ψ , für die der Erwartungswert des Hamiltonoperators \hat{H} extremal wird, Eigenfunktion des Hamiltonoperators ist. Da der Hamiltonoperator ein nach unten beschränktes Eigenwertspektrum und somit einen Grundzustand besitzt, so lautet das Ritzsche Variationsprinzip

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \geq E_0. \quad (3.2)$$

Hierbei kann Ψ beliebig gewählt werden, so dass man mit einer Testfunktion den Grundzustand annähern kann und dadurch eine Obergrenze für die Grundzustandsenergie erhält.

3.2. Hartree-Verfahren

Die einfachste Möglichkeit, sich das Ritzsche Variationsprinzip zur Berechnung der Wellenfunktionen und Energien zunutze zu machen ist das Hartree-Verfahren. Es beruht auf einem Produktansatz

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)\dots\psi_N(\mathbf{r}_N) \quad (3.3)$$

für die Gesamtwellenfunktion. Der Hamiltonoperator wird aufgeteilt in Einteilchen- und Wechselwirkungsterm:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ j>i}}^N \hat{w}_{i,j}. \quad (3.4)$$

Außerdem wird die Normierung der Einteilchenwellenfunktionen

$$\int d^3\mathbf{r}_i |\psi_i(\mathbf{r}_i)|^2 = 1 \quad (3.5)$$

als Nebenbedingung in Form eines Lagrangeparameters in die Variation eingebunden:

$$\langle \tilde{H} \rangle = \langle \hat{H} \rangle - \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \left(\int d\mathbf{r}_i |\psi_i(\mathbf{r}_i)|^2 - 1 \right). \quad (3.6)$$

Mit dem Extremalprinzip (3.1) und aus der Beliebigkeit der Wellenfunktion beim Ritzschen Variationsprinzip (3.2) lassen sich daraus die Hartree-Gleichungen

$$\left[\hat{h}_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \int d\mathbf{r}_j |\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2 \hat{w}_{i,j} - \varepsilon_i \right] \psi_i(\mathbf{r}_i) = 0 \quad (3.7)$$

herleiten. Die Lagrangeparameter ε_i können als Energieeigenwerte der Einteilchenwellenfunktionen ψ_i interpretiert werden.

Die Hartree-Gleichungen liefern bei der Berechnung von Mehrteilchensystemen (insbesondere bei bosonischen Systemen) bereits eine gute Näherung. Beginnend mit einer Startwellenfunktion werden sie meist iterativ selbstkonsistent gelöst.

3.3. Hartree-Fock-Methode

Das Hartree-Verfahren eignet sich weniger gut für fermionische Systeme, da der Produktansatz keine antisymmetrische Gesamtwellenfunktion liefert. Um dies zu erreichen setzt man für Hartree-Fock-Rechnungen die Gesamtwellenfunktion des Atoms als Slaterdeterminante der Eielektronen-Wellenfunktionen an:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_1(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (3.8)$$

Statt über die Slaterdeterminante kann man dieselbe Gesamtwellenfunktion auch mithilfe des Antisymmetrisierungsoperators ausdrücken und erhält die Form

$$|\Psi\rangle = \sqrt{N!} \hat{A} |\tilde{\Psi}\rangle, \quad (3.9)$$

wobei der Antisymmetrisierungsoperator definiert ist als

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\hat{P}} (-1)^p \hat{P}. \quad (3.10)$$

Hierbei wird über alle Permutationen mit den zugehörigen Permutationsoperatoren \hat{P} summiert, p bezeichnet die Anzahl der Transpositionen, aus welchen sich \hat{P} zusammensetzt. Die Erwartungswerte der Einteilchen- beziehungsweise Wechselwirkungsoperatoren lassen sich mit diesem Antisymmetrisierungsoperator umschreiben zu

$$\sum_{i=1}^N \langle \Psi | \hat{h}_i | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r}_i \psi_i(\mathbf{r}_i) \hat{h}_i \psi_i(\mathbf{r}_i) \quad (3.11)$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^N \langle \Psi | \hat{w}_{i,j} | \Psi \rangle &= \sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^N \int d\mathbf{r}_i \left(\int d\mathbf{r}_j \psi_i(\mathbf{r}_i) \psi_j(\mathbf{r}_j) \hat{w}_{i,j} \psi_i(\mathbf{r}_i) \psi_j(\mathbf{r}_j) \right. \\ &\quad \left. - \int d\mathbf{r}_j \psi_i(\mathbf{r}_i) \psi_j(\mathbf{r}_j) \hat{w}_{i,j} \psi_j(\mathbf{r}_j) \psi_i(\mathbf{r}_i) \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Aus der Variation dieser Erwartungswerte sowie der Normierung der Einteilchenwellenfunktionen als Nebenbedingung erhält man analog zur Vorgehensweise beim Hartree-Verfahren die bekannten Hartree-Fock-Gleichungen

$$\left[\hat{h}_i + \sum_{j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_j |\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2 \hat{w}_{i,j} \right] \psi_i(\mathbf{r}_i) - \sum_{j \neq i}^N \int d\mathbf{r}_j \psi_j(\mathbf{r}_j) \hat{w}_{i,j} \psi_i(\mathbf{r}_j) \psi_j(\mathbf{r}_i) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}_i) \quad (3.13)$$

Durch die vorgenommene Antisymmetrisierung wird die bei fermionischen Systemen auftretende Austauschwechselwirkung mit berücksichtigt, welche im Hartree-Verfahren nicht enthalten ist.

3.4. Anwendung des Hartree-Fock-Verfahrens auf Mehrelektronensysteme in Neutronenstern-Magnetfeldern

Nun wollen wir die allgemeinen Ergebnisse aus dem vorigen Kapitel auf unser System anwenden, also beispielsweise die Form der Wellenfunktionen konkretisieren. Bei $\psi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}_\perp)g(z)$ handelt es sich um die Einelektronen-Wellenfunktionen, welche sich aus transversalem Anteil $\Phi(\mathbf{r}_\perp)$ und longitudinalem Anteil $g(z)$ zusammensetzen, wobei $\Phi(\mathbf{r}_\perp)$ die Landau-Wellenfunktionen darstellen, welche in Anhang B näher beschrieben werden. In der adiabatischen Näherung geht beim transversalen Anteil als bestimmender Parameter nur die magnetische Quantenzahl m ein.

Die eindimensionalen Wellenfunktionen $g(z)$ sind auch abhängig von m (der Abstand der Elektronen vom Kern steht im Zusammenhang mit dem besetzten Landau-Niveau) und von der Anzahl der Knoten in z -Richtung, welche außerdem die z -Parität der Wellenfunktion festlegt. Wellenfunktionen mit Knotenzahl 0 haben die maximale Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe des Atomkerns (bei $z = 0$) und werden deswegen auch als „tightly-bound“ bezeichnet. Gerade bei Mehrelektronensystemen sind jedoch nicht immer alle Elektronen in einem tightly-bound-Zustand, was an der geringeren Bindung bei niedrigeren Quantenzahlen m liegt.

Die Hartree-Fock-Lösung stellt nur eine Annäherung an die tatsächliche Gesamtwellenfunktion dar. Die Zusammensetzung aus Einelektronen-Wellenfunktionen ist eine Näherung, welche nicht auf die exakte Gesamtwellenfunktion führen kann, da bei diesem Ansatz Korrelationen zwischen den Teilchen nicht berücksichtigt werden. Die Hartree-Fock-Methode ist jedoch deutlich weniger zeitintensiv als beispielsweise Quanten-Monte-Carlo-Simulationen (man benötigt einige Sekunden zur Berechnung der Wellenfunktionen statt Stunden oder gar Tage). Außerdem besitzt sie gegenüber anderen Näherungsverfahren wie MCPH³ (siehe [1]) den Vorteil, dass gefundene Grundzustände in jedem Fall energetisch oberhalb der tatsächlichen Grundzustände liegen (siehe Abschnitt 3.1).

Die für einen Übergang benötigte Energie ergibt sich aus der Energiedifferenz von Ausgangs- und Endzustand. Der Fehler für der Übergangsenergie ergibt sich aus der Differenz der Fehler von Ausgangs- und Endzustand, welche bei unserem Verfahren immer positiv sind. Dadurch ist der absolute Fehler bei den Übergangsenergien deutlich geringer als bei den Energieniveaus.

3.5. Hartree-Fock-Roothaan-Methode

Das Hartree-Fock-Roothaan-Verfahren stellt keine weitere Verbesserung der Hartree-Fock-Ergebnisse dar, sondern beschreibt eine Möglichkeit, diese zu lösen indem die Einteilchenwellenfunktionen $|\varphi_i\rangle$ in einer finiten Basis geschrieben werden:

$$|\varphi_i\rangle = \sum_{\mu} c_{i\mu} |\chi_{\mu}\rangle. \quad (3.14)$$

Das Eigenwertproblem (3.13) lässt sich formal einfacher darstellen mithilfe des Fockoperators \hat{F}

$$\hat{F}_i |\varphi_i\rangle = \varepsilon_i |\varphi_i\rangle, \quad (3.15)$$

wobei sämtliche Operatoren sowie Integrale in den Fockoperator hineingezogen wurden, was die Gleichung einfacher erscheinen lässt, jedoch mathematisch genau der ursprünglichen Relation entspricht. Der Fockoperator hängt selbst immer noch von den zu berechnenden Wellenfunktionen φ_i ab. In der verwendeten finiten Basis lässt sich Gleichung (3.15) umschreiben zu

$$\sum_{\mu} c_{i\mu} \langle \chi_{\nu} | \hat{F}_i | \chi_{\mu} \rangle = \varepsilon_i \sum_{\mu} c_{i\mu} \langle \chi_{\nu} | \chi_{\mu} \rangle. \quad (3.16)$$

Die dabei auftauchenden Matrixelemente beschreiben die Fockmatrix

$$F_{i\nu\mu} := \langle \chi_{\nu} | \hat{F}_i | \chi_{\mu} \rangle \quad (3.17)$$

beziehungsweise die Überlappmatrix

$$S_{\nu\mu} := \langle \chi_{\nu} | \chi_{\mu} \rangle. \quad (3.18)$$

Wir können also Gleichung (3.16) in der Form

$$\sum_{\mu} F_{i\nu\mu} c_{i\mu} = \varepsilon_i \sum_{\mu} S_{\nu\mu} c_{i\mu}, \quad (3.19)$$

darstellen. Ist die gewählte Basis orthonormiert, so handelt es sich bei der Überlappmatrix ganz einfach um die Einheitsmatrix. Die Hartree-Fock-Roothaan-Gleichungen lauten nun

$$\mathbf{F}_i \mathbf{c}_i = \varepsilon_i \mathbf{S} \mathbf{c}_i. \quad (3.20)$$

Mit dieser Gleichung werden die Koeffizienten $c_{i\mu}$ bestimmt, wobei die Fockmatrix \mathbf{F}_i selbst von diesen Koeffizienten abhängt. Aus der Symmetrie des Wechselwirkungsoperators folgt, dass auch die Fockmatrix symmetrisch sein muss und somit reelle Eigenwerte und Eigenvektoren besitzt.

3.6. Finite Elemente und B-Splines

Zur Berechnung der gebundenen Ausgangs- und Endzustände (ohne das photoionisierte Elektron) wird die Methode der finiten Elemente verwendet. Sie stellt ein Näherungsverfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen dar. Der Bereich, in dem die Differentialgleichung gelöst werden soll, wird in einzelne Segmente aufgeteilt, welche als finite Elemente bezeichnet werden. Deren Anzahl ist beliebig, jedoch endlich. Je größer die Anzahl der finiten Elemente, desto genauer die Ergebnisse.

Zudem versucht man, durch geschickte Wahl der Aufweitung (Aufteilung der Elemente) die Genauigkeit zu erhöhen. In den Bereichen, in denen sich die Lösungsfunktion kaum ändert werden weniger beziehungsweise breitere finite Elemente benötigt als in den Bereichen starker Schwankung.

Bei den tightly-bound-Wellenfunktionen ist für die Rechnungen vor allem der Bereich um $z = 0$ wichtig, wo die Wellenfunktion ihr Maximum hat. Dort sollte die Zahl der finiten Elemente also möglichst groß sein, ihre Breite dementsprechend klein. Ist die Wellenfunktion dann um zwei Größenordnungen abgefallen, ist der weitere Verlauf für die Berechnung der Wirkungsquerschnitte eher unwichtig, für diesen Bereich genügt eine deutlich kleinere Anzahl finiter Elemente, die entsprechend breiter sind als bei $z = 0$.

Wählen wir als Beispiel das Einheitsintervall als Bereich sowie zehn finite Elemente, so erhalten wir bei linearer Aufweitung die Grenzen $0, \frac{1}{10}, \frac{2}{10}, \frac{3}{10}, \dots, 1$. Mit quadratischer Aufweitung wären die Grenzen $0, \frac{1}{100}, \frac{4}{100}, \frac{9}{100}, \dots, 1$.

Für jeden Zustand wird eine individuelle Aufweitung der finiten Elemente gewählt, je nach Form und Ausdehnung der Wellenfunktion. Für tightly-bound-Zustände ist die Aufweitung quadratisch, für alle anderen linear-quadratisch, also mit linearer Aufweitung bis zum letzten Extremum und ab dort mit quadratischer Aufweitung. Dieses Extremum hat üblicherweise auch den größten Wert, danach fällt die Wellenfunktion exponentiell ab, weswegen sich ab dort eine quadratische Aufweitung anbietet. Im Bereich bis zum letzten Extremum hängt die Form der Wellenfunktion stark von der Knotenzahl sowie der Wechselwirkung mit den anderen Elektronen ab, weswegen dort eine lineare Aufweitung gewählt wurde. Eine genauere Erklärung findet sich in [14].

Als Basis-Funktionen dienen B-Splines. In jedem finiten Element ist nur eine bestimmte Anzahl an Splines ungleich Null. Diese Anzahl hängt von der gewählten Ordnung ab. Auch hier kann man durch eine höhere Ordnung, also mehr Splines, die Genauigkeit erhöhen. An den Grenzen der finiten Elemente müssen Anschlussbedingungen gelten (Stetigkeit der Funktion und der Ableitung).

Die longitudinale Wellenfunktion hat in B-Spline-Basis die Form

$$g(z) = \sum_{\mu=1}^X \alpha_{\mu} B_{\mu}(z), \quad (3.21)$$

wobei $B_{\mu}(z)$ die ortsabhängigen Splines sind und α_{μ} die zu bestimmenden ortsunabhängigen Koeffizienten.

Die Verwendung von B-Splines als Basis ist besonders geeignet, wenn die Lösung durch ein Polynom gut genähert werden kann. Periodische Funktionen, wie etwa die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons (siehe 4.1), eignen sich nicht für eine Darstellung in B-Spline-Basis, aber sämtliche gebundene Zustände wurden in B-Spline-Basis gerechnet.

Ein Vorteil der B-Spline-Basis besteht darin, dass die Überlappintegrale der Einteilchenwellenfunktionen besonders schnell und effektiv berechnet werden können. Man muss lediglich einmal die Integrale über die Splines bestimmen und berechnet dann das Integral über die Wellenfunktionen, indem man die ortsunabhängigen Koeffizienten α_μ der Wellenfunktionen mit den jeweiligen Integralen multipliziert. Man muss also bei iterativen Verfahren nur im ersten Schritt eine Integration durchführen.

Auch hier sei für eine detailliertere Behandlung des Themas auf [14] oder [12] verwiesen.

4. Photoionisation

In diesem Kapitel leiten wir den Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation von Atomen und Ionen her. Dazu benötigen wir jedoch die Einteilchen-Wellenfunktionen des Anfangs- und Endzustandes. Deswegen erörtern wir zuerst die Berechnung der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons, die gebundenen Zustände wurden bereits im vorigen Kapitel behandelt. Die Herleitung des Wirkungsquerschnitts erfolgt zunächst für das Wasserstoffatom und wird dann auf Mehrelektronensysteme verallgemeinert. Danach gehen wir noch darauf ein, welche Rolle die Photonendichte bei der Berechnung des Gesamtwirkungsquerschnitts spielt.

4.1. Ungebundenes Elektron, Anfangs- und Endzustand

Bei der Photoionisation absorbiert ein an den Kern gebundenes Elektron ein Photon mit ausreichender Energie um dem Potential des Kerns zu entkommen. Es kann sich frei in der z -Richtung bewegen und ist somit nicht mehr gebunden. Dennoch bleibt das ungebundene Elektron in transversaler Richtung im Landau-Niveau $n = 0$ gebunden und wird in longitudinaler Richtung vom Kernpotential beeinflusst. Genau wie bei den gebundenen Zuständen verwenden wir einen Hartree-Fock-Ansatz, wobei angenommen wird, dass der Einfluss des ungebundenen Elektrons auf die gebundenen vernachlässigbar ist, weil es sich überall zwischen $z = -\infty$ und $z = +\infty$ befinden kann. Zur Notation der ungebundenen Wellenfunktion verwenden wir außer der m -Quantenzahl die Energie des ungebundenen Elektrons E' . Die z -Parität der Wellenfunktion ist festgelegt, da zu einem Übergang immer nur entweder der symmetrische oder der antisymmetrische Anteil der Wellenfunktion einen Wirkungsquerschnitt ungleich null hat. Die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons mit Energie E' wird im Gesamtpotential des Kerns und aller Elektronen berechnet:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_m(z) + \sum_{j=1}^{N-1} \int dz' |g_{m_j \nu_j}(z')|^2 U_{m_j m}(z, z') - E' \right] g_{mE'}(z) \\ & = \sum_{j=1}^{N-1} \int dz' g_{mE'}(z') g_{m_j \nu_j}(z') A_{m_j m}(z, z') g_{m_j \nu_j}(z). \end{aligned} \quad (4.1)$$

Dabei steht V_m für das Kernpotential, $U_{mm'}$ und $A_{mm'}$ für die Elektron-Elektron- beziehungsweise Austauschwechselwirkung. Diese Potentialterme haben die Form

$$V_m(z) = -2Z \int d\mathbf{r}_\perp \frac{|\Phi_m(\mathbf{r}_\perp)|^2}{|\mathbf{r}|} \quad (4.2)$$

$$U_{mm'}(z, z') = 2 \iint d\mathbf{r}_\perp d\mathbf{r}'_\perp \frac{|\Phi_m(\mathbf{r}_\perp)|^2 |\Phi_{m'}(\mathbf{r}'_\perp)|^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \quad (4.3)$$

$$A_{mm'}(z, z') = 2 \iint d\mathbf{r}_\perp d\mathbf{r}'_\perp \frac{\Phi_{m'}^*(\mathbf{r}_\perp) \Phi_m(\mathbf{r}_\perp) \Phi_m^*(\mathbf{r}'_\perp) \Phi_{m'}(\mathbf{r}'_\perp)}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \quad (4.4)$$

mit den Landau-Wellenfunktionen Φ im niedrigsten Landau-Niveau, welche von der magnetischen Quantenzahl m abhängen. Die explizite Form der Landau-Wellenfunktionen findet sich in Anhang B. Der Vektor \mathbf{r}_\perp bezeichnet den zum Magnetfeldvektor orthogonalen Anteil des Ortsvektors. Wie die Berechnung dieser drei Potentialterme im Programm umgesetzt wird, ist in Anhang C nachzulesen.

Die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons kann nicht über das gesamte Volumen normiert werden, da es sich überall zwischen $z = -\infty$ und $z = +\infty$ aufhalten kann und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für große z nicht null wird (dort ist es quasi ein in z -Richtung freies Elektron). Man muss die Integration also in z -Richtung sinnvoll beschränken und integriert die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons dann in der z -Komponente nur über die Periodizitätslänge l_z . Diese muss ausreichend groß gewählt werden. Solange die Wellenfunktion noch keine konstante Wellenlänge und Amplitude hat, beeinflusst die Wahl des Endpunktes der Integration die Ergebnisse. Hat die Wellenfunktion jedoch nach etlichen Nulldurchgängen die Form einer ebenen Welle, so macht es keinen Unterschied mehr, ob man den Endpunkt noch größer wählt.

Den Endzustand nach der Photoionisation erhält man, indem man den gebundenen Zustand ohne das ungebundene Elektron berechnet und anschließend die so berechneten Einteilchenwellenfunktionen sowie die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons in die Slaterdeterminante einsetzt. Nun haben wir also die Anfangs- und Endzustände (vor und nach der Photoionisation), welche zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts benötigt werden.

4.2. Wirkungsquerschnitt

Bereits Anfang der 80er Jahre wurden Photoionisations-Wirkungsquerschnitte berechnet (siehe [15] und [16]), wobei in diesen Arbeiten nur Wasserstoff behandelt und in Impulsdarstellung gerechnet wurde (später hierzu mehr). Weitere Arbeiten, wie beispielsweise [17], waren hilfreich, enthielten jedoch auch nicht die für diese Arbeit benötigten Formeln. Somit ist eine Herleitung der verwendeten Formeln nötig, welche in diesem Abschnitt behandelt wird. Als Startpunkt dient das Wasserstoffatom, an dem die Herleitung einfacher nachzuvollziehen ist. Danach folgt eine Erweiterung auf beliebige Atome und Ionen.

4.2.1. Herleitung für das Wasserstoffatom

Ausgehend von Fermis Goldener Regel

$$w(\psi_f, \psi_i) = 2\pi \left| \langle \psi_f | \hat{H}_{\text{int}} | \psi_i \rangle \right|^2 \rho_f \quad (4.5)$$

für die Übergangswahrscheinlichkeit vom Ausgangszustand ψ_i in den Endzustand ψ_f wollen wir den Wirkungsquerschnitt herleiten. Hierbei ist \hat{H}_{int} der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator und ρ_f die Zustandsdichte der Endzustände pro Energieintervall. Der Wirkungsquerschnitt σ hängt mit der Übergangswahrscheinlichkeit über

$$w = j\sigma \quad (4.6)$$

zusammen, wobei j der Photonenstrom (Anzahl Photonen pro Fläche und Zeit) der einfallenden Strahlung ist. Wir definieren nun ein Volumenelement V so, dass sich im Schnitt in jedem Volumenelement exakt ein Photon befindet. In diesem Fall ist

$$j = \frac{c}{V} = \frac{2}{V\alpha} \quad (4.7)$$

in atomaren Einheiten mit der Feinstrukturkonstante α , und wir können Gleichung (4.6) umschreiben zu

$$\sigma = \frac{V\alpha}{2} w. \quad (4.8)$$

Zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit w benötigen wir den Wechselwirkungs-Hamiltonoperator \hat{H}_{int} , welcher durch

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{H} - \hat{H}_0 = 2\beta_r \hat{\sigma} - 2\sqrt{2}\mathbf{A}_r \underbrace{(\mathbf{p} - \sqrt{2}\mathbf{A})}_{\boldsymbol{\pi}} \mathbf{1} \quad (4.9)$$

gegeben ist. Dabei ist $\boldsymbol{\sigma}$ wieder ist der Vektor der Pauli-Matrizen. Die Definition von $\boldsymbol{\pi}$ ist analog zu der in Gleichung (2.3), jedoch in atomaren Einheiten, \mathbf{A}_r stellt das Vektorpotential und $\beta_r = \frac{\mathbf{B}_r}{B_0}$ den zugehörigen Magnetfeldparameter der einfallenden Strahlung dar. \hat{H}_0 ist der Hamiltonoperator ohne Wechselwirkungsterme und \hat{H} der Gesamt-Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = (-i\nabla + \sqrt{2}(\mathbf{A} + \mathbf{A}_r))^2 \mathbf{1} + 2(\beta + \beta_r)\hat{\sigma} - \frac{2Z}{|\mathbf{r}|} \mathbf{1}. \quad (4.10)$$

In Gleichung (4.9) werden die Terme $\propto A_r^2$ in der weiteren Rechnung nicht mitgenommen, da keine Mehr-Photonen-Übergänge berücksichtigt werden (diese sind bei den

vorliegenden Photonendichten sehr unwahrscheinlich). Setzt man Gleichung (4.9) in Gleichung (4.5) ein, so erhält man unter Verwendung der Kommutatorbeziehung (siehe [17])

$$\left[\hat{H}_0, \mathbf{r} \right] = -2i\pi \quad (4.11)$$

und

$$\mathbf{A}_r = \sqrt{\frac{2\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (4.12)$$

folgendes Matrixelement, das es auszuwerten gilt:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_f | \hat{H}_{\text{int}} | \tilde{\psi}_i \rangle &= \left\langle \tilde{\psi}_f \left| 2\boldsymbol{\beta}_r \hat{\boldsymbol{\sigma}} - i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\hat{H}_0, \mathbf{r} \right] \mathbb{1} \right| \tilde{\psi}_i \right\rangle \\ &= \left\langle \tilde{\psi}_f \left| 2\boldsymbol{\beta}_r \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right| \tilde{\psi}_i \right\rangle - \left\langle \tilde{\psi}_f \left| i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\hat{H}_0, \mathbf{r} \right] \mathbb{1} \right| \tilde{\psi}_i \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Bei $\boldsymbol{\varepsilon}$ handelt es sich um den Polarisationsvektor der einfallenden Strahlung und ω bezeichnet die Kreisfrequenz (und in atomaren Einheiten damit auch die Energie) des einfallenden Photons. Der Spin taucht nun wieder in den Termen auf (im Magnetfeld richten sich die Spins alle antiparallel zum Feld aus und wurden deshalb nicht mehr explizit aufgeführt), da die Wechselwirkung des Elektronenspins mit der einfallenden Strahlung berücksichtigt werden muss. Die Gesamtwellenfunktion inklusive Spin lautet jetzt also

$$|\tilde{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} |\psi\rangle. \quad (4.14)$$

Mit Hilfe der Relation (4.11) haben wir den Übergang von der Impuls- zur Ortsdarstellung vollzogen. Dies ist nötig, da Orts- und Impulsdarstellung nur für die quantenmechanisch exakten Wellenfunktionen äquivalent sind, was in der adiabatischen Näherung nicht gegeben ist. Für links- sowie rechtszirkular polarisierte Strahlung, bei welcher sich die magnetische Quantenzahl des Elektrons ändert ($\Delta M = \pm 1$ -Übergänge), erhalten wir für die Matrixelemente in Dipolnäherung bei Impulsdarstellung grundsätzlich den Wert null bei adiabatischen Rechnungen in Dipolnäherung (siehe [17]). Folglich müssen wir die Ortsdarstellung verwenden, um die Wirkungsquerschnitte berechnen zu können. Der Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation von Wasserstoff in Impulsdarstellung ($\Delta M = 0$ -Übergänge) sind in [18] oder auch [16] zu finden.

Für den ersten Term des Matrixelementes (4.13) mit dem Ansatz (4.14) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 & \langle \tilde{\psi}_f | 2\boldsymbol{\beta}_r \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \tilde{\psi}_i \rangle \\
 &= 2 \left\langle \psi_f \left| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 0 & \beta_{r,x} \\ \beta_{r,x} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\beta_{r,y} \\ i\beta_{r,y} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_{r,z} & 0 \\ 0 & -\beta_{r,z} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right| \psi_i \right\rangle \\
 &= 2 \langle \psi_f | -\beta_{r,z} | \psi_i \rangle .
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Dabei ist $\beta_{r,z}$ unter Verwendung von $\sqrt{2}\boldsymbol{\beta}_r = \text{rot}\mathbf{A}_r$ gegeben durch

$$\beta_{r,z} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial A_{r,y}}{\partial x} - \frac{\partial A_{r,x}}{\partial y} \right) = \sqrt{\frac{\pi}{V\omega}} (i k_x \varepsilon_y e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - i k_y \varepsilon_x e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}) . \tag{4.16}$$

In Dipolnäherung ($\mathbf{k}\mathbf{r} \ll 1$, also $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1$) kann man Gleichung (4.15) noch vereinfachen:

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{\psi}_f | 2\boldsymbol{\beta}_r \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \tilde{\psi}_i \rangle &= \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \langle \Phi_{m'}(\mathbf{r}_\perp) g_{m'E'}(z) | i(k_y \varepsilon_x - k_x \varepsilon_y) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Phi_m(\mathbf{r}_\perp) g_{m\nu}(z) \rangle \\
 &= \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \langle \Phi_{m'}(\mathbf{r}_\perp) g_{m'E'}(z) | i(k_y \varepsilon_x - k_x \varepsilon_y) | \Phi_m(\mathbf{r}_\perp) g_{m\nu}(z) \rangle .
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Der Term $i(k_y \varepsilon_x - k_x \varepsilon_y)$ ist lediglich von der Einfalls- und Polarisationsrichtung des Photons abhängig, beinhaltet keinen Operator und kann somit als Faktor vor das Integral gezogen werden.

Da sowohl Anfangs- als auch Endzustand Eigenfunktionen desselben hermiteschen Operators sind, jedoch zu verschiedenen Energien, müssen sie orthogonal aufeinander stehen. Somit erhalten wir für diesen Teil des Matrixelementes exakt null in Dipolnäherung (sonst steht noch der Term $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ im Integral).

Nun wenden wir uns dem zweiten Term des Matrixelementes (4.13) zu, den wir mittels der Relationen

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} [\hat{H}_0, \mathbf{r}] = [e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \hat{H}_0] \mathbf{r} + \hat{H}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{r} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{r} \hat{H}_0 \tag{4.18}$$

und (siehe [17])

$$[\hat{H}_0, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}] = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (k^2 + 2\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}) \tag{4.19}$$

umformen wollen. Mit der Definition $\omega_f = E_f - E_i$, wobei E_f die Energie des End- und

E_i die Energie des Anfangszustandes darstellt, erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_f \left| -i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\hat{H}_0, \mathbf{r} \right] \right| \psi_i \right\rangle = \\ & = -i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \omega_{\text{fi}} \left\langle \Phi_{m'}(\mathbf{r}_{\perp}) g_{m'E'}(z) \left| e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(1 - \frac{k^2}{\omega_{\text{fi}}} - \frac{2\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}}{\omega_{\text{fi}}} \right) \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r} \right| \Phi_m(\mathbf{r}_{\perp}) g_{m\nu}(z) \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.20)$$

In Dipolnaherung ist

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(1 - \frac{k^2}{\omega_{\text{fi}}} - \frac{2\mathbf{k}\boldsymbol{\pi}}{\omega_{\text{fi}}} \right) \mathbf{r} \approx \mathbf{r} \quad (4.21)$$

und wir konnen Gleichung (4.20) vereinfachen:

$$\left\langle \psi_f \left| -i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\hat{H}_0, \mathbf{r} \right] \right| \psi_i \right\rangle = -i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \omega_{\text{fi}} \langle \Phi_{m'}(\mathbf{r}_{\perp}) g_{m'E'}(z) | \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r} | \Phi_m(\mathbf{r}_{\perp}) g_{m\nu}(z) \rangle. \quad (4.22)$$

Um diesen Teil des Matrixelementes in die verschiedenen Arten von Dipolubergangen ($\Delta M = 0, \pm 1$, je nach Polarisierung) aufteilen zu konnen, schreiben wir fur das Skalarprodukt

$$\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon_+ r_- - \varepsilon_- r_+) + \varepsilon_z z \quad (4.23)$$

mit $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon_x \pm i\varepsilon_y$ und

$$r_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp x - i y). \quad (4.24)$$

Die Wirkung der Operatoren r_{\pm} auf die Landau-Wellenfunktionen Φ_m wurde in [10] berechnet. In adiabatischer Naherung ergibt sich

$$r_+ \Phi_m(\mathbf{r}_{\perp}) = -\frac{1}{\sqrt{2\beta}} \sqrt{-m} \Phi_{m+1}(\mathbf{r}_{\perp}) \quad (4.25)$$

$$r_- \Phi_m(\mathbf{r}_{\perp}) = \frac{1}{\sqrt{2\beta}} \sqrt{-m+1} \Phi_{m-1}(\mathbf{r}_{\perp}). \quad (4.26)$$

Nutzen wir noch die Orthogonalität der Landau-Funktionen bezüglich der magnetischen Quantenzahl m aus Gleichung (B.5), erhalten wir mit obigen Relationen für Gleichung (4.22) also

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \psi_f \left| -i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\hat{H}_0, \mathbf{r} \right] \right| \psi_i \right\rangle = \\
 & = -i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \omega_{fi} \left[\delta_{m', m-1} \left\langle g_{m'E'}(z) \left| \varepsilon_+ \sqrt{\frac{-m+1}{4\beta}} \right| g_{m\nu}(z) \right\rangle \right. \\
 & \quad \left. + \delta_{m', m+1} \left\langle g_{m'E'}(z) \left| \varepsilon_- \sqrt{\frac{-m}{4\beta}} \right| g_{m\nu}(z) \right\rangle + \delta_{m', m} \langle g_{m'E'}(z) | \varepsilon_z z | g_{m\nu}(z) \rangle \right]. \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

Somit haben wir das komplette Matrixelement (4.13) auf eine Form gebracht, aus der wir leicht die verschiedenen Übergänge herauslesen können

- $\Delta M = 0$ Übergänge von Strahlung mit linearer Polarisation mit der Komponente ε_z des Polarisationsvektors
- $\Delta M = +1$ Übergänge von Strahlung mit linkszirkularer Polarisation mit ε_-
- $\Delta M = -1$ Übergänge von Strahlung mit rechtszirkularer Polarisation mit ε_+ .

Hierbei haben wir vorausgreifend bereits die Gesamtmagnetquantenzahl

$$M = \sum_i m_i \quad (4.28)$$

verwendet. Für die Einteilung in lineare sowie rechts- und linkszirkulare Polarisation wird jedoch im Folgenden die Änderung der Gesamtmagnetquantenzahl M des Atoms benötigt.

Nachdem wir das Matrixelement auf die gewünschte Form gebracht haben, fehlt uns noch die Zustandsdichte ρ_f aus Gleichung (4.5). Sie ist definiert als

$$\rho_f = \frac{d\tilde{N}}{dE'}, \quad (4.29)$$

wobei in atomaren Einheiten

$$dN = \frac{d\Gamma}{2\pi} = \frac{dq dp}{2\pi} \quad (4.30)$$

gilt. Dabei ist $d\Gamma$ das Volumenelement des Phasenraums, q und p sind die Orts- beziehungsweise Impulskoordinate. In unserem Integrationsintervall mit der Periodizitätslänge l_z (siehe Abschnitt 4.1) ist

$$d\tilde{N} = \frac{l_z dp}{2\pi}. \quad (4.31)$$

Die Größe dp erhalten wir aus der Energie-Impuls-Beziehung in atomaren Einheiten $E' = p^2$:

$$dp = \sqrt{\frac{1}{4E'}} dE'. \quad (4.32)$$

Mit diesen Überlegungen können wir die Zustandsdichte nun angeben:

$$\rho_f = \frac{l_z}{2\pi} \sqrt{\frac{1}{4E'}}. \quad (4.33)$$

Des Weiteren können wir in den Gleichungen (4.15) und (4.27) für die Photonenenergie ω der einfallenden Strahlung ω_{fi} einsetzen, da die Photonenenergie genau der Energiedifferenz aus Anfangs- und Endzustand entspricht (keine Mehr-Photonen-Prozesse) und erhalten damit aus Gleichung (4.8) die gesuchten Wirkungsquerschnitte für die drei Typen des Dipolübergangs in Ortsdarstellung:

$$\sigma_0 = \frac{3}{8} \frac{\sigma_{\text{Th}}}{\alpha^3 \omega_{\text{fi}}} \sqrt{\frac{1}{E'}} l_z \varepsilon_z^2 \left| \langle g_{m'E'}(z) \mid i \omega_{\text{fi}} z \mid g_{m\nu}(z) \rangle \right|^2 \delta_{m',m} \quad (4.34)$$

$$\sigma_- = \frac{3}{8} \frac{\sigma_{\text{Th}}}{\alpha^3 \omega_{\text{fi}}} \sqrt{\frac{1}{E'}} l_z \left| \varepsilon_+ \right|^2 \left| \left\langle g_{m'E'}(z) \mid i \omega_{\text{fi}} \sqrt{\frac{-m+1}{2\beta}} \mid g_{m\nu}(z) \right\rangle \right|^2 \delta_{m',m-1} \quad (4.35)$$

$$\sigma_+ = \frac{3}{8} \frac{\sigma_{\text{Th}}}{\alpha^3 \omega_{\text{fi}}} \sqrt{\frac{1}{E'}} l_z \left| \varepsilon_- \right|^2 \left| \left\langle g_{m'E'}(z) \mid i \omega_{\text{fi}} \sqrt{\frac{-m}{2\beta}} \mid g_{m\nu}(z) \right\rangle \right|^2 \delta_{m',m+1}. \quad (4.36)$$

Der Wirkungsquerschnitt ist hierbei in Abhängigkeit des Thomson-Wirkungsquerschnittes $\sigma_{\text{Th}} = 8\pi r_e^2/3$ angegeben, mit dem klassischen Elektronenradius $r_e = \alpha^2$, also $\sigma_{\text{Th}} = 8\pi\alpha^4/3$. Die Periodizitätslänge l_z muss, wie bereits in Abschnitt 4.1 erläutert, letztendlich herausfallen, da das Ergebnis unabhängig vom Periodizitätswolumen sein muss. Dies ist auch der Fall, in der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons ist durch die Normierung der Faktor $\frac{1}{\sqrt{l_z}}$ enthalten und l_z kürzt sich heraus (siehe Abschnitt 5.4).

4.2.2. Beliebige Atome und Ionen

In diesem Abschnitt erweitern wir das Ergebnis für die Wirkungsquerschnitte aus den Gleichungen (4.34), (4.35) und (4.36) auf Mehrelektronensysteme. Wir verwenden genau wie beim Wasserstoffatom Fermis Goldene Regel (4.5), wobei wir nun den Gesamtwechselwirkungs-Hamiltonoperator $\hat{H}_{\text{int,ges}}$, also die Summe aus den einzelnen Wechselwirkungs-Hamiltonoperatoren $\hat{H}_{\text{int},j}$ verwenden müssen. Für N Elektronen erhält man

$$\hat{H}_{\text{int,ges}} = \sum_{j=1}^N \left(2\beta_{\text{r}} \sigma_j - i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \varepsilon e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \left[\hat{H}_{0,j}, \mathbf{r}_j \right] \mathbf{1} \right). \quad (4.37)$$

Um diesen Term zu vereinfachen verwenden wir zunächst die Dipolnäherung ($e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \approx 1$) und überlegen uns dann, dass die Summe in den Kommutator hineingezogen werden kann:

$$\sum_{i=1}^N [\hat{H}_{0,i}, \mathbf{r}_i] = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \underbrace{[\hat{H}_{0,i}, \mathbf{r}_j]}_{=0} + \sum_{i=1}^N [\hat{H}_{0,i}, \mathbf{r}_i] = \sum_{i,j=1}^N [\hat{H}_{0,i}, \mathbf{r}_j] = \left[\sum_{i=1}^N \hat{H}_{0,i}, \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \right]. \quad (4.38)$$

Damit nimmt Gleichung (4.37) die Form

$$\hat{H}_{\text{int,ges}} = 2\beta_r \sum_{j=1}^N \boldsymbol{\sigma}_j - i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \boldsymbol{\varepsilon} \left[\underbrace{\sum_{j=1}^N \hat{H}_{0,j}}_{\hat{H}_{0,\text{ges}}}, \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j \right] \mathbf{1} \quad (4.39)$$

an. Für $\tilde{\Psi}$, die Gesamtwellenfunktion mit Spinanteil, setzen wir die Slaterdeterminante der Eielektronen-Wellenfunktionen an, was auf das Matrixelement

$$\langle \tilde{\Psi}_f | \hat{H}_{\text{int,ges}} | \tilde{\Psi}_i \rangle = \sum_{k,l=1}^N \left\langle \tilde{\psi}_{f,k} \left| 2\beta_r \boldsymbol{\sigma}_l - i \sqrt{\frac{4\pi}{V\omega}} \omega_{\text{fi}} \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{r}_l \mathbf{1} \right| \tilde{\psi}_{i,l} \right\rangle a_{kl}^{\text{fi}} \quad (4.40)$$

führt, wobei ω_{fi} die Energiedifferenz zwischen Anfangs- und Endzustand darstellt. Die Unterdeterminante wird durch a_{kl}^{fi} abgekürzt und lautet ausgeschrieben

$$a_{kl}^{\text{fi}} = (-1)^{k+l} \begin{vmatrix} S_{1,1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{1,l-1}^{\text{fi}} & S_{1,l+1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{1,N}^{\text{fi}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{k-1,1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{k-1,l-1}^{\text{fi}} & S_{k-1,l+1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{k-1,N}^{\text{fi}} \\ S_{k+1,1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{k+1,l-1}^{\text{fi}} & S_{k+1,l+1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{k+1,N}^{\text{fi}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{N,1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{N,l-1}^{\text{fi}} & S_{N,l+1}^{\text{fi}} & \cdots & S_{N,N}^{\text{fi}} \end{vmatrix}. \quad (4.41)$$

In dieser Unterdeterminante stehen die Überlappmatrixelemente zwischen den Eielektronen-Wellenfunktionen des Anfangs- und Endzustandes, $\psi_{i,l}$ beziehungsweise $\psi_{f,k}$:

$$S_{kl}^{\text{fi}} = \langle \psi_{f,k} | \psi_{i,l} \rangle. \quad (4.42)$$

Der Wirkungsquerschnitt berechnet sich dann analog zum einfacheren Fall des Wasserstoffatoms und man erhält für die Wirkungsquerschnitte:

$$\sigma_0 = \frac{3}{8} \frac{l_z \sigma_{\text{Th}} \omega_{\text{fi}}}{\alpha^3} \sqrt{\frac{1}{E'}} \varepsilon_z^2 \left| \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_k, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \langle g_{m_N E'}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_N, m_l} a_{Nl}^{\text{fi}} \right|^2 \quad (4.43)$$

$$\sigma_- = \frac{3}{8} \frac{l_z \sigma_{\text{Th}} \omega_{\text{fi}}}{\alpha^3} \sqrt{\frac{1}{E'}} |\varepsilon_+|^2 \left| \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l + 1}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_k - 1, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_N E'}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l + 1}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_N - 1, m_l} a_{Nl}^{\text{fi}} \right|^2 \quad (4.44)$$

$$\sigma_+ = \frac{3}{8} \frac{l_z \sigma_{\text{Th}} \omega_{\text{fi}}}{\alpha^3} \sqrt{\frac{1}{E'}} |\varepsilon_-|^2 \left| \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_k + 1, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_N E'}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_N + 1, m_l} a_{Nl}^{\text{fi}} \right|^2. \quad (4.45)$$

Der zweite Term im Betragsquadrat wurde aus zwei Gründen aus der Doppelsumme herausgezogen. Zum einen aus formalen Gründen, die Notation von gebundenen und ungebundenen z -Wellenfunktionen ist verschieden (gebundene Zustände werden durch Angabe von m und ν bestimmt, ungebundene mit m und E'). Zum anderen ist dies jedoch auch für die Auswertung von Vorteil, im einen Fall stehen zwei gebundene Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement ($\langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle$), im anderen eine ungebundene und eine gebundene ($\langle g_{m_N E'}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle$). Je nachdem beinhaltet die Unterdeterminante dann auch ungebundene Wellenfunktionen (a_{kl}^{fi}) oder nur den Überlapp gebundener Wellenfunktionen (a_{Nl}^{fi}). Da sich mit zunehmender Energie des ungebundenen Elektrons nur dessen Wellenfunktion, nicht aber die gebundenen Wellenfunktionen ändern, ist diese Aufteilung vorteilhaft für die Analyse der Einzelwirkungsquerschnitte.

4.3. Photonendichte

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Atom ionisiert wird, hängt nicht nur vom Wirkungsquerschnitt ab, sondern auch vom Vorhandensein eines Photons mit passender Energie. Wir müssen also die Photonendichte für die jeweilige Energie in unsere Betrachtungen miteinbeziehen. In atomaren Einheiten ist die Energie des Photons gleich seiner Kreisfrequenz. Da die Kreisfrequenz ω bereits im Wirkungsquerschnitt auftaucht, schreiben wir das Plancksche Strahlungsgesetz für schwarze Körper direkt in Abhängigkeit von ω :

$$U(\omega, T) d\omega = \frac{\alpha^3 \omega^3}{4\pi} \left(e^{\frac{\omega}{T}} - 1 \right)^{-1} d\omega, \quad (4.46)$$

wobei wir T in Einheiten von E_∞ angeben ($T = 1$ entspricht somit einer Temperatur von $1,58 \times 10^5$ K). Die Temperatur eines Neutronensterns ist, anderen Parametern wie Magnetfeldstärke und Dicke der Atmosphäre ähnlich, nicht a priori bekannt aber typische Werte für die thermische Energie liegen zwischen 80 eV und 300 eV, siehe [19]. Analog zu [7] wählen wir für die meisten Auftragungen 150 eV als thermische Energie, vergleichen jedoch auch in einigen Beispielen mit dem Wirkungsquerschnitt bei 300 eV.

Für den Wirkungsquerschnitt ist nicht die Energiedichte, sondern die Photonendichte für die jeweilige Energie interessant. Diese erhalten wir, indem wir $U(\omega, T)$ durch die Energie, beziehungsweise in atomaren Einheiten durch die Kreisfrequenz, teilen. Die Photonendichte

$$P(\omega, T)d\omega = \frac{U(\omega, T)}{\omega}d\omega = \frac{\alpha^3 \omega^2}{4\pi} \left(e^{\frac{\omega}{T}} - 1 \right)^{-1} d\omega \quad (4.47)$$

muss noch normiert werden, da wir bei der Herleitung des Wirkungsquerschnitts ein Photon pro Volumenelement angenommen haben. Das bei der Berechnung der normierten Photonendichte

$$P_0(\omega, T)d\omega = \frac{P(\omega, T)d\omega}{\int_0^\infty P(\omega, T)d\omega} \quad (4.48)$$

auftretende Integral lösen wir mithilfe der Formel (siehe [20])

$$\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^{\mu x} - 1} dx = \frac{1}{\mu^\nu} \Gamma(\nu) \zeta(\nu). \quad (4.49)$$

Dabei ist $\zeta(\nu)$ die Riemannsche Zetafunktion und $\Gamma(\nu)$ die Gammafunktion. Wir erhalten als normierte Photonendichte der Strahlung

$$P_0(\omega, T)d\omega = \frac{\omega^2}{2\zeta(3)T^3} \left(e^{\frac{\omega}{T}} - 1 \right)^{-1} d\omega. \quad (4.50)$$

Die Wirkungsquerschnitte (4.43), (4.44) und (4.45) multiplizieren wir mit dieser Photonendichte. Durch die Einbeziehung der Photonendichte in die Wirkungsquerschnitte werden Übergänge mit sehr kleinen und sehr großen Frequenzen deutlich unwahrscheinlicher. Eine genauere Betrachtung findet sich dann in der Auswertung in Kapitel 7. Die in dieser Arbeit analysierten Wirkungsquerschnitte $\tilde{\sigma}$ haben nun also die Form

$$\tilde{\sigma} = \sigma P_0(\omega, T). \quad (4.51)$$

5. Implementierung und Aufbau

Bereits für das Wasserstoffatom existieren unendlich viele gebundene Zustände. Da wir nur endlich viele berechnen können, muss man sich für jedes Element überlegen, welche Elektronenkonfigurationen beziehungsweise Übergänge einen besonders großen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern und welche weggelassen werden können. Außerdem ist bei Mehrelektronensystemen zunächst nicht klar, welche Elektronenkonfiguration den Grundzustand darstellt. Diese grundsätzlichen Problemstellungen, die Normierung der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons sowie einige verwendete numerische Verfahren zur Integralberechnung und Lösung von Differentialgleichungen werden in diesem Kapitel besprochen. Zusammen mit dem schematischen Aufbau des Programms sollte sich der Leser somit einen Überblick verschaffen können, wie genau die in den vorigen Kapiteln beschriebene Theorie im Programm letztendlich umgesetzt wurde.

5.1. Grundzustandssuche und Besetzungswahrscheinlichkeiten

Aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen ist es bei beliebigen Atomen nicht so einfach wie beim Wasserstoffatom, den Grundzustand zu finden. Je mehr Elektronen das Atom hat, desto energetisch ungünstiger wird es, alle Elektronen schicht in aufeinanderfolgenden tightly-bound-Zuständen ($\nu = 0$) mit absteigender magnetischer Quantenzahl m zu wählen. Aufgrund der ähnlichen räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit aller Elektronen begünstigt deren Abstoßung andere Elektronenkonfigurationen.

Man muss für jedes Atom erst einmal den Grundzustand suchen, indem man alle in Frage kommende Konfigurationen durchrechnet. Welche bei gegebener Elektronenzahl den Grundzustand darstellt, hängt nicht nur von der Kernladungszahl ab, sondern auch vom Magnetfeld. Letztendlich gibt es zwar keine feste Regel, welche Konfiguration bei gegebener Elektronenzahl den Grundzustand darstellt, jedoch gibt es ausreichend Erfahrungswerte und Tendenzen:

- Erhöht man jeweils die Kernladungszahl um eins und sucht wieder den Grundzustand, so ist er dem des vorigen Atoms meist sehr ähnlich.
- Bei einer schrittweisen Erhöhung des Magnetfeldes treten keine plötzlichen Sprünge in den Energien auf (kontinuierliche Änderung der Energie bei steigendem Magnetfeld).

- Hat man bei steigender Elektronenzahl N erstmalig einen Grundzustand gefunden, der nicht nur aus tightly-bound-Elektronen besteht, so befindet sich ein Elektron in $\nu = 1$, der Rest in $\nu = 0$.
- Bei noch größeren Elektronenzahlen ist dann ein zweites Elektron in $\nu = 1$ vorhanden. Später wird auch $\nu = 2$ besetzt, jedoch werden keine ν -Quantenzahlen übersprungen.
- Auch innerhalb der jeweiligen Knotenzahlen treten keine „Lücken“ auf, es wird immer bei $m = 0$ beginnend in absteigender Reihenfolge aufgefüllt, also bis zu $m = 1 - N$.

Nur wenn diverse Elektronenkonfigurationen getestet wurden, kann man mit ausreichender Sicherheit davon ausgehen, den Grundzustand gefunden zu haben. Eine ausführliche Untersuchung der Grundzustände von Eisen findet sich in [14], in dieser Arbeit wird dies nicht weiter behandelt.

Das Finden des Grundzustandes ist wichtig für die Besetzungswahrscheinlichkeit der zu ionisierenden Ausgangszustände. Diese sind mit dem Boltzmannfaktor

$$e^{-(E-E_0)/T} \tag{5.1}$$

gewichtet (T in Einheiten von E_∞), das heißt je größer die Energiedifferenz $E - E_0$ zwischen angeregtem und Grundzustand, desto geringer der Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt.

Die thermische Energie in der Atmosphäre des Neutronensterns wird analog zu [7] auf 150 eV geschätzt, eine exakte Bestimmung ist nicht möglich, je nach Modell und angenommenem Temperaturgradienten kommt man wie bereits erwähnt auf Werte zwischen 80 und 300 eV.

5.2. Einschränkung der Quantenzahlen

Zustände mit magnetischen Quantenzahlen größer null besitzen sehr hohe Energien, da ein Landauniveau $n > 0$ besetzt ist. Solche Zustände werden aufgrund der adiabatischen Näherung nicht berücksichtigt. Die obere Grenze für m ist also null. Die minimale m -Quantenzahl, die im Programm verwendet wird, beträgt -200 . Ein geringerer Wert wäre möglich, ist jedoch nicht sinnvoll. Zum einen wäre zuerst eine zeitaufwendige Berechnung zusätzlicher Koeffizienten nötig (siehe Anhang C), zum anderen ist es auch aus physikalischer Sicht nicht notwendig: Je niedriger die m -Quantenzahl, desto unwahrscheinlicher ist es, dass ein Zustand besetzt ist. Die sowieso bereits sinkende Besetzung (durch die schwächere Bindung und die damit verbundene Boltzmanngewichtung) wird durch zwei weitere Effekte nochmals reduziert. Zum einen sind aufgrund der großen Anzahl an Ionen in der Neutronensternatmosphäre die elektrischen Mikrofelder zu berücksichtigen,

zum anderen muss der Einfluss einer endlichen Kernmasse bedacht werden. Diese beiden Effekte müssen bei der Modellierung der Neutronensternatmosphäre miteinbezogen werden, sind jedoch in dieser Arbeit, welche die Bereitstellung der benötigten atomaren Daten zum Ziel hat, nicht berücksichtigt. Dennoch wollen wir die Grundzüge kurz umreißen.

Durch die stochastisch verteilten elektrischen Mikrofelder in der Neutronensternatmosphäre wird das Potential je nach Vorzeichen in die eine oder andere Richtung „gekippt“, wodurch die Ionisierungsschwelle sinkt. Genauer gesagt steigt das Potential auf einer Seite stetig, auf der anderen sinkt es nach Erreichen eines Maximums stetig, da der Potentialanstieg ohne Mikrofeld für kleine z zunächst das lineare Abfallen durch das Mikrofeld überwiegt, während für große z das Mikrofeld dominiert. Wie weit die Ionisierungsschwelle hierbei absinkt hängt natürlich von der elektrischen Feldstärke sowie der Form des Potentials ab. Die Verteilung und Stärke der Mikrofelder wird ausführlich in [21] behandelt. Diese kann dann bei der Berechnung der Zustände miteinbezogen werden, was die Besetzung einiger schwach gebundener Zustände nahe der Ionisationsschwelle drastisch verringert. Betragsmäßig höhere Quantenzahlen m und ν bedeuten auch eine geringere Bindungsenergie. Für stark gebundene Zustände haben die vorhandenen Mikrofelder jedoch keinen signifikanten Einfluss.

Der Einfluss der finiten Kernmasse ist von M abhängig. Eine geringere magnetische Quantenzahl bedeutet einen größeren Drehimpuls, welcher mit dem Magnetfeld wechselwirkt. Nimmt man den Kern nicht als fest an, sondern berücksichtigt dessen Mitbewegung aufgrund der finiten Kernmasse, so erhält man einen zusätzlichen Term, die Energieniveaus verschieben sich zu höheren Werten. Diese Energieverschiebung ist proportional zu M , siehe [22]. An den Übergangsenergien ändern diese Korrekturen wiederum wenig, da sämtliche Zustände nach oben verschoben sind. Bei der Frage, ob ein Zustand gebunden ist oder energetisch bereits oberhalb der Ionisationsschwelle liegt kann dies jedoch entscheidend sein. Somit sind Zustände mit niedrigeren magnetischen Quantenzahlen als -200 in den allermeisten Fällen nicht besetzt und werden in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Knotenzahlen größer als $\nu = 2$ werden nicht berücksichtigt. Diese Zustände sind aufgrund ihrer schwachen Bindung durch die bereits erwähnten elektrischen Mikrofelder in der Neutronensternatmosphäre kaum besetzt, hinzu kommen noch Stoßionisation und die mit ν drastisch steigende Größe der Atome und Ionen:

Je nach vorherrschender Dichte sind Zustände ab gewissen Quantenzahlen nicht mehr besetzt, Zustände mit Knotenzahl drei sind bei Helium bereits bei geringen Dichten von 1 g/cm^3 zu groß. Näheres hierzu, beispielsweise die Abschätzung der Größe der Atome sowie mögliche Dichten der Neutronensternatmosphäre, findet sich in [23] und [24].

Viele der angeregten Zustände mit zwei Elektronen haben eine geringere Bindungsenergie als der am stärksten gebundene Zustand mit einem Elektron. Bei diesen „autoionisierenden“ Zuständen ist die Ionisierung also mit der Abgabe von Energie verbunden. Im Vakuum könnten die meisten solcher Übergänge aufgrund der Auswahlregeln für Dipolübergänge und der unterschiedlichen Drehimpulse von Anfangs- und Endzustand

jedoch nicht stattfinden. In der Neutronensternatmosphäre können jedoch durch Stöße mit anderen Teilchen Drehimpulse übertragen werden und die Lebensdauer der „autoionisierenden“ Zustände ist nur sehr kurz.

Für Wasserstoff und Helium ist es aufgrund der geringen Elektronenzahl noch möglich, alle Elektronenkonfigurationen bis $m = -200$ und $\nu = 2$ für die Zustände zu berücksichtigen und sämtliche Übergänge zu berechnen. Bei mehr als zwei Elektronen gibt es derart viele Zustände, dass man sich auf ein gewisses Schema beschränken muss.

Um ein Schema zu finden, welches qualitativ und quantitativ möglichst nahe an den exakten Wirkungsquerschnitt (alle möglichen Quantenzahlen) herankommt, wird in dieser Arbeit vor allem Helium ausführlich untersucht. Dafür werden mehrere hunderttausend Einzelwirkungsquerschnitte berechnet und verschiedene mögliche Schemata analysiert, um zu sehen, welche Peaks von welchen Übergängen herrühren. Damit lässt sich herausfinden, welche Quantenzahlen für die Ausgangs- und Endzustände berücksichtigt werden müssen und welche keinen signifikanten Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern.

Anhand der dadurch gewonnenen Erkenntnisse kann dann ein passendes Schema für Mehrelektronensysteme gefunden werden, wobei es nur bedingt möglich ist, einen direkten Schluss vom Wirkungsquerschnitt für Helium auf den von Eisen mit 26 Elektronen zu ziehen.

5.3. Aufteilung der ungebundenen Wellenfunktion in symmetrischen und antisymmetrischen Anteil

Die Einelektronen-Wellenfunktionen der gebundenen Elektronen haben entweder eine gerade oder ungerade z -Parität, genauer gesagt sind die Wellenfunktionen mit gerader Quantenzahl ν in z -Richtung symmetrisch zum Ursprung, diejenigen mit ungeradem ν antisymmetrisch. Für die durchzuführenden Berechnungen des Wirkungsquerschnittes bietet es sich daher an, die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons auch in einen symmetrischen und antisymmetrischen Anteil aufzuteilen.

Dies hat den Vorteil, dass beim Auswerten der Matrixelemente grundsätzlich nur einer der beiden Anteile einen Beitrag liefert (der andere muss null sein, da der Integrand antisymmetrisch ist und von $-\infty$ bis $+\infty$ integriert wird). Somit kann man Rechenzeit sparen und verringert numerische Fehler (numerisch ist das Matrixelement je nach verwendeter Methode und Genauigkeit eben nur bis auf eine bestimmte Anzahl Stellen null). Außerdem bietet sich dadurch die Möglichkeit, die programmierten Routinen auf Richtigkeit und Genauigkeit zu testen, indem wir prüfen, ob sich als Wert tatsächlich null ergibt.

Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass viele Rechnungen, wie zum Beispiel die Berechnung der Unterdeterminante (4.41), rein reell durchgeführt werden können, was nicht nur die Programmierung vereinfacht, sondern wiederum Rechenzeit spart.

5.4. Normierung der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons

Das Elektron, welches durch die Photoionisation nicht mehr an den Kern gebunden ist, kann in longitudinaler Richtung für $z \rightarrow \infty$ durch eine ebene Welle $e^{ik_z z}$ beschrieben werden. Bei der Normierung dieser Wellenfunktion über die Periodizitätslänge l_z (siehe Abschnitt 4.1) erhalten wir also mit

$$\int_a^b e^{ik_z z} e^{-ik_z z} dz = b - a \quad (5.2)$$

den Normierungsfaktor $\frac{1}{\sqrt{l_z}}$.

Bei der Berechnung des Wirkungsquerschnitts, Gleichungen (4.43), (4.44) und (4.45), geht die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons jeweils quadratisch ein. Damit kürzt sich die Periodizitätslänge heraus und tritt somit bei der Berechnung der Wellenfunktion und des Wirkungsquerschnitts nicht auf. Deswegen werden symmetrischer und antisymmetrischer Anteil der Wellenfunktion jeweils bei sehr großem z , wo das Potential hinreichend klein ist, auf maximale Amplitude eins normiert.

5.5. Gauß-Quadratur

Die Gauß-Quadratur ist ein Verfahren zur numerischen Berechnung von Integralen. Der Integrand wird dabei aufgeteilt in eine Gewichtungsfunktion $w(x)$ und die Funktion $\chi(x)$, welche durch ein Polynom genähert wird. Dann wird das Integral durch eine endliche Summe approximiert:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b w(x) \chi(x) dx \approx \sum_{i=1}^N w_i \chi(x_i). \quad (5.3)$$

Je nach Anzahl der Stützstellen erhält man verschiedene Punkte, an denen das Polynom zu bestimmen ist, und die zugehörigen Gewichtungen. Je exakter die Funktion durch ein Polynom genähert werden kann und je mehr Stützstellen man wählt, desto genauer sind die Ergebnisse für die Integration.

In dieser Arbeit verwenden wir Legendre-Polynome zur Näherung der Funktion χ . Die Überlappe der Wellenfunktionen werden mittels Gauß-Legendre-Integration berechnet, bei der die Gewichtungsfunktion $w(x) = 1$ ist. Bei der Gauß-Legendre-Integration wird das Integrationsintervall $[-1, 1]$ verwendet, man kann jedoch durch Koordinatentransformation von jedem beliebigen endlichen Intervall $[a, b]$ zum Intervall $[-1, 1]$ gelangen.

Für die Berechnung der adiabatischen Potentialterme in Anhang C bietet sich aufgrund des Integrationsintervalls $[0, \infty]$ eine Gauß-Laguerre-Integration an, also mit den

Laguerre-Polynomen zur Approximation des Integranden.

Weitere Details, wie etwa die Berechnung der Stützpunkte und Gewichte, Koordinatentransformation auf das passende Intervall und Konvergenzverhalten finden sich in der Standard-Literatur der numerischen Mathematik, wie etwa [25].

5.6. Schematischer Aufbau des Programms

Das Fortran-Programm mit sämtlichen verwendeten Modulen sowie Skripten für die Parallelisierung und Rechnung auf Clustern des bwGRiD [26] soll hier nicht bis ins Detail beschrieben werden. Es wird jedoch außer den theoretischen Grundlagen und verwendeten Formeln auch ein schematischer Überblick über den Programmablauf gegeben, schließlich stellt die Numerik einen beträchtlichen Anteil dieser Arbeit dar.

Zunächst wenden wir uns den gebundenen Zuständen zu, deren Bestimmung für verschiedene Landau-Niveaus und Magnetfelder zwar schon in [14] und [12] skizziert ist, hier aber nochmal speziell für das zur Berechnung der Ausgangs- und Endzustände verwendete adiabatische Hartree-Fock-Roothaan-Verfahren aufgezeigt werden soll. Abbildung 5.1 zeigt das Programmschema.

Alle benötigten Daten zur Berechnung eines Zustandes werden in eine Parameterdatei geschrieben. Diese beinhaltet Quantenzahlen, Magnetfeldstärke, Kernladung sowie Quellpfad für die vorberechneten Potentiale und Koeffizienten (siehe Anhang C). Da für die durchgeführten Rechnungen teilweise hunderttausende von Zuständen benötigt werden, erfolgt die Erstellung dieser Dateien automatisch mithilfe eines Skripts, welches basierend auf Angaben der minimalen m - und maximalen ν -Quantenzahl alle denkbaren Zustände erstellt.

Aufgrund der Quantenzahlen wird dann für jedes Elektron eine effektive Kernladungszahl bestimmt. Hierbei schirmen andere Elektronen mit größerer Knotenzahl den Kern näherungsweise gar nicht ab, solche mit niedrigerer Knotenzahl verringern die effektive Kernladungszahl um eins und bei Elektronen mit gleicher Knotenzahl wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons im jeweiligen Landau-Niveau ausgewertet. Diese verringern die effektive Kernladungszahl also um einen Wert zwischen null und eins.

Mit diesen effektiven Kernladungszahlen können nun die Startwellenfunktionen für das iterative Hartree-Fock-Roothaan Verfahren berechnet werden. Dabei wird die Wechselwirkung der Elektronen untereinander zunächst vernachlässigt und nur die Wellenfunktion für ein wasserstoffähnliches System mit der Kernladung q_{eff} bestimmt. Dieses Verfahren zum Erlangen der Startwellenfunktionen mag etwas kompliziert erscheinen, ist jedoch unbedingt notwendig, da die Wahl der Startwellenfunktion von entscheidender Bedeutung für die Konvergenz der Rechnung ist.

Für jedes Elektron wird eine individuelle B-Spline-Basis mit entsprechender z -Ausdehnung sowie Aufteilung der finiten Elemente verwendet, um zu gewährleisten, dass man mit möglichst wenigen B-Spline-Koeffizienten eine möglichst präzise Wellenfunktion erhält.

Nach jedem Iterationsschritt wird geprüft, ob der Zustand konvergiert ist. Das Krite-

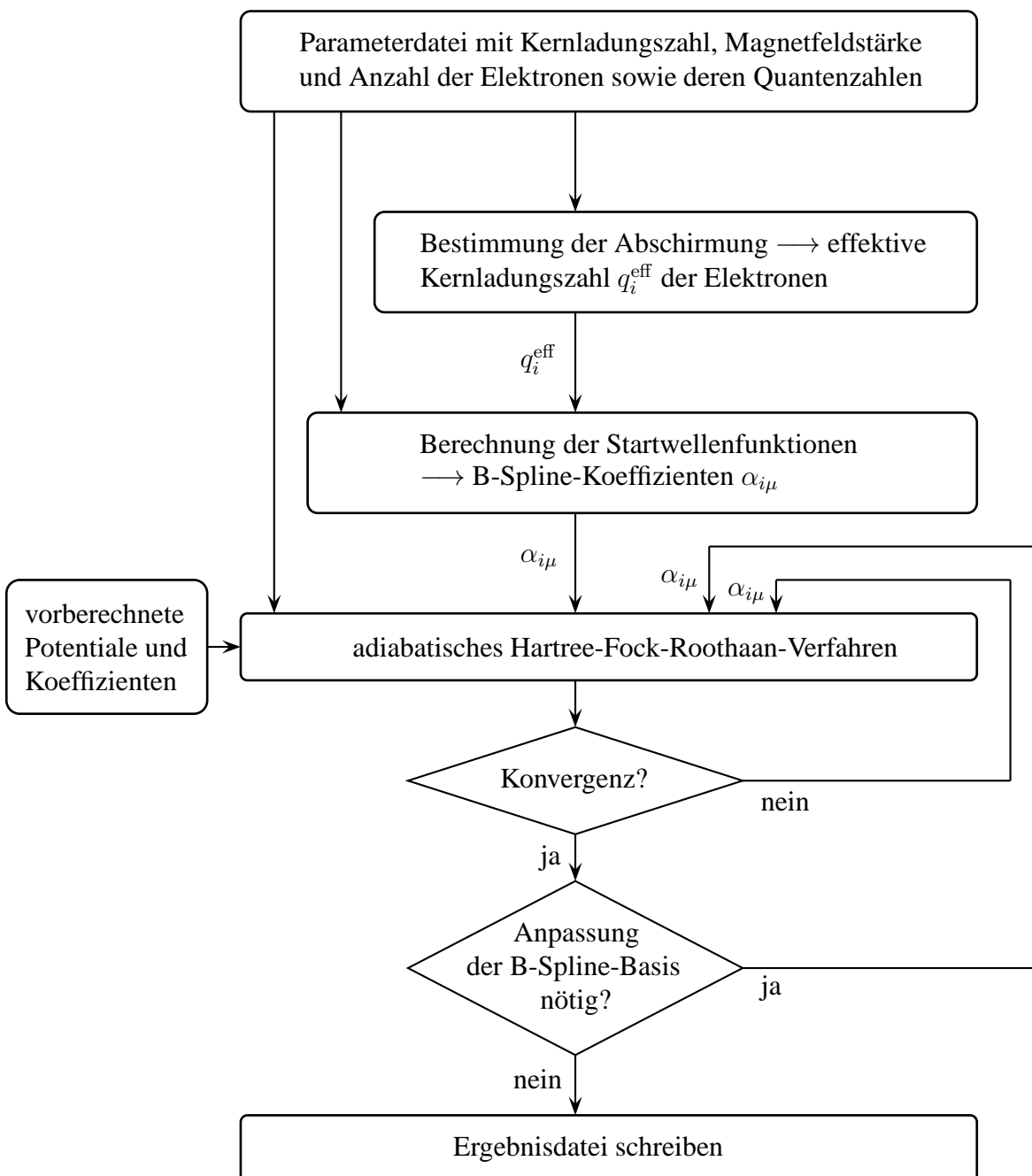


Abb. 5.1.: Programmschema für die Berechnung der gebundenen Zustände in adiabatischer Näherung.

rium hierfür ist ein Energieunterschied von weniger als 10^{-3} eV gegenüber der vorigen Iteration. Danach wird gegebenenfalls die B-Spline-Basis noch einmal angepasst, da sich die Ausdehnung der Einelektronen-Wellenfunktionen gegenüber den Startwellenfunktionen teilweise erheblich ändert, woraufhin in der neuen Basis wieder der Zustand mit dem Hartree-Fock-Roothaan-Verfahren berechnet wird, bis der Zustand bei passender B-Spline-Basis konvergiert. Dann werden die Bindungsenergie des Zustandes, die gewählte B-Spline-Basis, die zugehörigen Koeffizienten der Wellenfunktion, Magnetfeldstärke, Kernladungszahl und Quantenzahlen in die Ergebnisdatei geschrieben, welche zum Berechnen des Wirkungsquerschnitts benötigt wird.

Dies führt uns dann direkt zum Schema des eigentlich in dieser Arbeit behandelten Programms, welches den Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation berechnet, siehe Abbildung 5.2.

Außer den Quellpfaden für die Ergebnisdatei des gebundenen Anfangs- und Endzustandes (Endzustand ohne das photoionisierte Elektron) und der vorberechneten Potentiale müssen wir noch die m -Quantenzahl des ungebundenen Elektrons vorgeben.

Der Wirkungsquerschnitt wird für verschiedene Energien des ungebundenen Elektrons berechnet. Die Photonenenergie setzt sich aus der Energiedifferenz des Ausgangs- und Endzustandes sowie der Energie des ungebundenen Elektrons zusammen.

Mithilfe der Wellenfunktionen der gebundenen Elektronen sowie der Kernladung können wir das Potential berechnen, in welchem sich das ungebundene Elektron befindet. Die Austauschwechselwirkung wird dabei zunächst vernachlässigt, da hierfür bereits eine Wellenfunktion für das ungebundene Elektron vorliegen müsste.

Im nächsten Schritt kann dann die Austauschwechselwirkung mit berücksichtigt werden und die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons wird in einem iterativen Verfahren berechnet, wobei für die Austauschwechselwirkung jeweils noch die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons aus dem vorigen Schritt benötigt wird.

Das Konvergenzkriterium kann sich hier nicht wie bei den gebundenen Zuständen auf die Energie beziehen. Die Energie des ungebundenen Elektrons muss vor der Berechnung von dessen Wellenfunktion fest gewählt werden. Stattdessen wird die relative Änderung der Wellenfunktion

$$\left| \frac{\int (g_{mE'}^{\text{neu}}(z) - g_{mE'}^{\text{alt}}(z)) dz}{\int g_{mE'}^{\text{neu}}(z) dz} \right| \quad (5.4)$$

als Konvergenzkriterium herangezogen. Dieser Wert muss kleiner als 10^{-3} sein, damit die Rechnung als konvergiert angesehen wird. Danach wird mit dieser Wellenfunktion der Wirkungsquerschnitt berechnet und in eine Ergebnisdatei geschrieben.

Die Anzahl der möglichen Kombinationen aus Anfangs- und Endzuständen, welche der Zahl der zu berechnenden Wirkungsquerschnitte entspricht, ist noch größer als die Anzahl der vorher gerechneten gebundenen Zustände. Auch hier wird ein Skript verwendet, welches alle denkbaren Kombinationen aus Anfangs- und Endzuständen überprüft, wobei sich die Summe der magnetischen Quantenzahlen nur um $0, \pm 1$ ändern

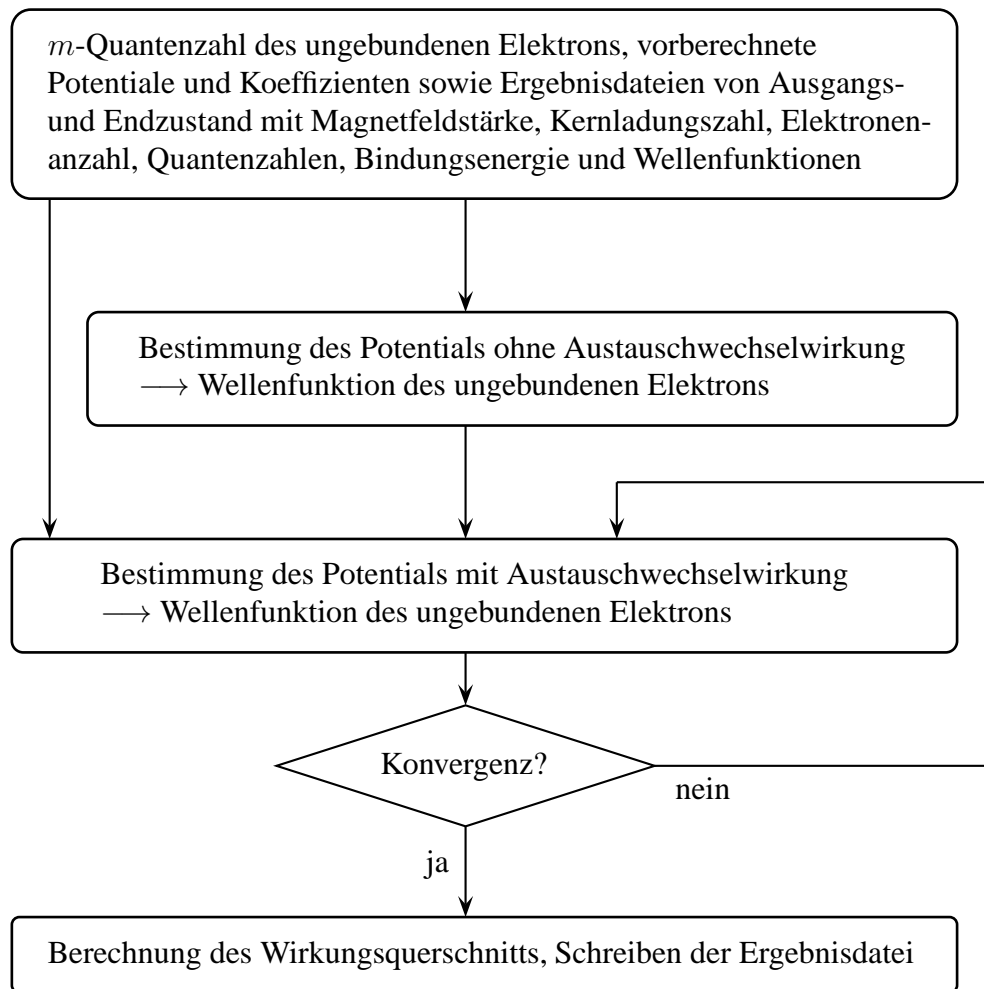


Abb. 5.2.: Programmschema zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte für die Photoionisation aus den adiabatischen Zuständen.

darf. Außerdem ergeben viele Wirkungsquerschnitte null aufgrund der Orthogonalität der Landau-Niveaus verschiedener m -Quantenzahlen beziehungsweise der Orthogonalität der Wellenfunktionen mit unterschiedlicher z -Parität und werden direkt aussortiert.

Die Zahl der damit noch zu berechnenden Einzelwirkungsquerschnitte liegt für Helium bei über einer Million. Um diese große Zahl an Übergängen zu verwalten wurde statt der im Programmschema erwähnten Ergebnisdateien eine SQL Datenbank verwendet. Am Programmablauf ändert dies nichts, die Datenbank bietet lediglich eine komfortable Verwaltung der immensen Datenmengen. Für die Berechnung einzelner Übergänge lohnt sich die Erstellung einer Datenbank jedoch nicht.

5.7. Runge-Kutta-Verfahren

Zur Berechnung der Wellenfunktion des photoionisierten Elektrons im Potential, welches sich aus Elektron-Kern-, direkter Elektron-Elektron- und Austauschwechselwirkung zusammensetzt, verwenden wir das klassische Runge-Kutta-Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen erster Ordnung. Die eigentlich zu lösende Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - E\right)g(z) = 0 \quad (5.5)$$

wird dabei in zwei Differentialgleichungen erster Ordnung aufgeteilt:

$$\frac{\partial}{\partial z}g(z) = f(z) \quad (5.6a)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}f(z) = (V(z) - E)g(z) =: a(z, g). \quad (5.6b)$$

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren löst gewöhnliche Differentialgleichungen in vier Stufen, wobei man die Anfangswerte (in unserem Fall $g(z_0) = g_0$ beziehungsweise $f(z_0) = f_0$) vorgeben muss:

$$k_1 = a(z_n, g_n) \quad (5.7a)$$

$$k_2 = a\left(z_n + \frac{1}{2}h, g_n + \frac{1}{2}hk_1\right) \quad (5.7b)$$

$$k_3 = a\left(z_n + \frac{1}{2}h, g_n + \frac{1}{2}hk_2\right) \quad (5.7c)$$

$$k_4 = a(z_n + h, g_n + hk_3). \quad (5.7d)$$

Hierbei ist z_n der n -te Punkt, an dem die Differentialgleichung gelöst wird und g_n die zugehörige Lösung. Die Genauigkeit der Rechnung hängt von der gewählten Schrittweite h ab ($z_{n+1} = z_n + h$), wobei diese nach jedem Schritt neu gewählt werden kann. Die Lösung der Differentialgleichung an der $(n + 1)$ -ten Stelle lässt sich aus Lösung und z -Wert der vorigen Stelle berechnen und lautet

$$g_{n+1} = g_n + \frac{1}{6}h(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \quad (5.8)$$

Falls die Lösung der Differentialgleichung in manchen Bereichen starke Änderungen erfährt und in anderen nahezu konstant bleibt, lohnt sich die Verwendung einer adaptiven Schrittweite. Dies ist jedoch für das hier vorliegende Problem nicht gegeben. Die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons ist für große z eine sinusförmige Funktion, lediglich in der Nähe des Kerns nimmt die Amplitude ab und die Frequenz zu.

Deswegen verwenden wir äquidistante Schritte. Die Schrittweite hängt von der kinetischen Energie des ungebundenen Elektrons ab. Aus $k^2 = E$ und $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ folgt, dass

die Wellenlänge umgekehrt proportional zur Wurzel der Energie ist und wir wählen die Schrittweite dementsprechend als

$$h = \frac{1}{20} \sqrt{\frac{1}{E'}}, \quad (5.9)$$

wobei der Faktor $\frac{1}{20}$ einen Erfahrungswert aus vielen durchgeführten Rechnungen darstellt.

Ist die Energie des ungebundenen Elektrons groß im Vergleich zur Potentialtiefe bei kleinen z , so ist die Abnahme der Amplitude und Zunahme der Frequenz kaum erkennbar. Bei hohen Energien ist die gewählte Schrittweite ausreichend klein, um die Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons auch in Kernnähe mit hinreichender Präzision zu bestimmen.

Elektronen mit sehr kleiner Energie erfahren eine sehr starke Änderung des Potentials in Kernnähe, weswegen wir die Schrittweite nach oben begrenzt haben, um auch in Kernnähe präzise zu rechnen. Dadurch wird für große z mit kleineren Schrittweiten als nötig gerechnet, jedoch sind die Rechnungen bedeutend schneller als diejenigen für Wellenfunktionen mit großer Energie, sodass die Gesamtrechendauer nahezu unbeeinflusst bleibt.

5.8. Adaptive Simpson-Methode

Bei der Simpson-Methode oder auch Keplerschen Fassregel wird das Integral von a bis b über eine Funktion f durch das Integral über die Parabel durch die Punkte $f(a)$, $f(\frac{a+b}{2})$ und $f(b)$ genähert:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) =: S(a,b). \quad (5.10)$$

Je nachdem wie gut die Funktion durch eine quadratische Näherung beschrieben wird, wird auch der Integralwert mehr oder weniger gut genähert. Bei der adaptiven Simpson-Methode wird dieser Fehler abgeschätzt und, sollte er zu groß sein, das Integrationsintervall halbiert. Aus einem Integral von a bis b werden also zwei Integrale, eines von a bis $\frac{a+b}{2}$, das andere von $\frac{a+b}{2}$ bis b .

Anschließend wird bei beiden Integralen wieder überprüft, ob sie noch weiter aufgespalten werden müssen. Die Fehlerabschätzung erfolgt durch den Vergleich der Summe der beiden aufgespaltenen Integrale mit dem unaufgespaltenen:

$$\left| S\left(a, \frac{a+b}{2}\right) + S\left(\frac{a+b}{2}, b\right) - S(a,b) \right| < \varepsilon. \quad (5.11)$$

Dieses Verfahren wird zur Berechnung der Potentiale verwendet. Hierbei entstehen bei sehr kleinen Abständen zwischen den Ladungsträgern sehr kleine Integrationsintervalle,

während bei großen Abständen der Ladungsträger nur ein sehr kleiner Beitrag zum Potential geliefert wird und die Integrationsintervalle dementsprechend groß sind. Dadurch wird das Verhältnis von Genauigkeit zu Rechenzeit optimiert.

5.9. Einfallrichtung und Polarisation der Strahlung

Die Wirkungsquerschnitte für rechts- beziehungsweise linkszirkular polarisierte Strahlung (4.44) und (4.45) sind lediglich über das Betragsquadrat der Komponenten ε_+ oder ε_- des Polarisationsvektors vom Winkel der einfallenden Strahlung abhängig. Der Polarisationsvektor muss senkrecht auf dem Ausbreitungsvektor stehen und Betrag eins haben. Damit befindet er sich auf einem Kreis um den Ursprung mit Radius eins. Er kann, wie aus Abbildung 5.3 ersichtlich, aus den beiden Vektoren

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = (-\cos \vartheta \cos \varphi, -\cos \vartheta \sin \varphi, \sin \vartheta), \quad (5.12)$$

und

$$\boldsymbol{\varepsilon}_2 = (\sin \varphi, -\cos \varphi, 0), \quad (5.13)$$

welche senkrecht aufeinander und auf dem Ausbreitungsvektor

$$\mathbf{k} = |\mathbf{k}|(\sin \vartheta \cos \phi, \sin \vartheta \sin \phi, \cos \vartheta) \quad (5.14)$$

stehen, wie folgt zusammengesetzt werden:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = a \boldsymbol{\varepsilon}_1 \pm \sqrt{1 - a^2} \boldsymbol{\varepsilon}_2, \quad -1 \leq a \leq 1. \quad (5.15)$$

Je nach Polarisationsvektor ergibt sich für die Wirkungsquerschnitte σ_+ und σ_- somit ein Vorfaktor

$$\cos^2 \vartheta \leq |\varepsilon_+|^2 = |\varepsilon_-|^2 \leq 1. \quad (5.16)$$

Der qualitative Energieverlauf der Wirkungsquerschnitte hängt also nicht vom Winkel der einfallenden Strahlung und dem Polarisationsvektor ab, diese ändern lediglich den entsprechenden Vorfaktor. Deswegen verwenden wir im Programm grundsätzlich den Faktor eins (entspricht $\vartheta = 0$), berechnen also immer den maximalen Wirkungsquerschnitt. Dieser kann dann jederzeit noch mit dem passenden Vorfaktor für den jeweiligen Einfallswinkel multipliziert werden.

Ähnlich verhält es sich beim Wirkungsquerschnitt für linear polarisierte Strahlung (4.43), der winkelabhängige Anteil ε_z^2 ist für $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_1$ über den Faktor $\sin^2 \vartheta$ von der Einfallrichtung der Strahlung abhängig, für $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_2$ ist σ_0 gleich null. Wir haben also

$$0 \leq \varepsilon_z^2 \leq \sin^2 \vartheta, \quad (5.17)$$

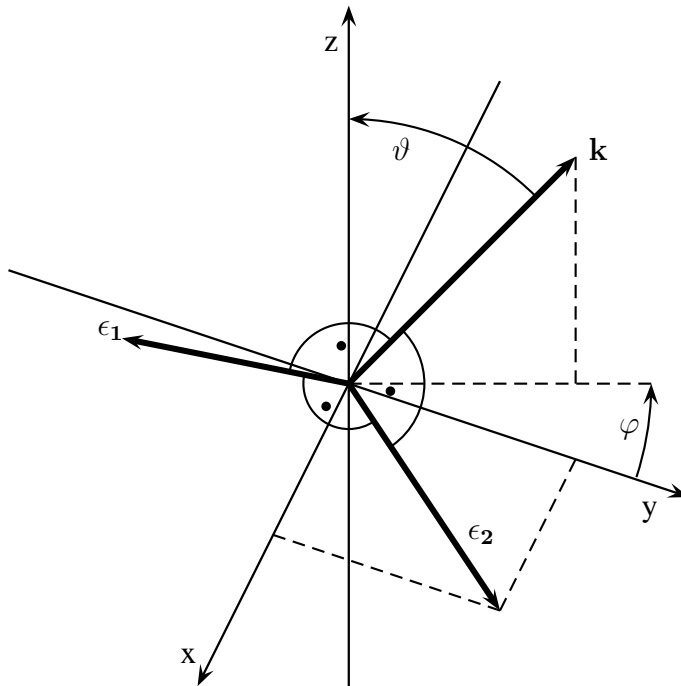


Abb. 5.3.: Winkel des Ausbreitungsvektors der einfallenden Strahlung und Wahl des elektrischen Polarisationsvektors.

je nach Richtung des Polarisationsvektors. Auch hier bestimmen wir im Programm nur das Maximum ($\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $\varepsilon = \varepsilon_1$). Das Ergebnis kann dann abhängig von Einfallswinkel und Polarisationsrichtung mit dem entsprechenden Faktor multipliziert werden.

6. Einzelwirkungsquerschnitt

In diesem Kapitel betrachten wir die Wirkungsquerschnitte einzelner Übergänge für linear polarisierte Strahlung, das heißt die Summe der magnetischen Quantenzahlen ist gleich bei Anfangs- und Endzustand.

Zunächst werden wir zwei verschiedene Helium-Übergänge analysieren und anhand der Formel für den Wirkungsquerschnitt (4.43) herausarbeiten, worin deren grundsätzliche Unterschiede liegen und warum diese zu qualitativ und quantitativ unterschiedlichen Einzelwirkungsquerschnitten führen.

Anschließend folgt eine Betrachtung der Einzelwirkungsquerschnitte bei verschiedenen Energien des ungebundenen Elektrons, um deren Energieverlauf nachzuvollziehen. Dieses Wissen soll es ermöglichen, Größe und Form des Wirkungsquerschnitts bereits vor deren expliziter Berechnung näherungsweise vorhersagen zu können.

Danach testen wir, ob die daraus gewonnenen Erkenntnisse auch auf heliumähnliche Ionen übertragbar sind und welche Rolle die Magnetfeldstärke spielt. Die Untersuchung des Energieverlaufs und die Betrachtung heliumähnlicher Ionen dient dem generellen Verständnis, wie der Wirkungsquerschnitt aussieht und welche Parameter ihn wie verändern.

Ziel der Analyse ist es einerseits diejenigen Übergänge herauszufiltern, die vernachlässigbar sind, sowie andererseits die maßgeblich zum Gesamtwirkungsquerschnitt beitragenden Übergänge zu finden. In Kapitel 7 werden diese Erkenntnisse dann genutzt, um Übergänge nach Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt aufzuteilen.

6.1. Analyse nach Quantenzahlen

Im Folgenden wollen wir zwei Übergänge für verschiedene Kernladungszahlen und Magnetfeldstärken analysieren. Die betrachteten Übergänge sind schematisch dargestellt in den Abbildungen 6.1 und 6.2. Der Ausgangszustand ist für beide Übergänge der gleiche: Beide Elektronen sind in sogenannten tightly-bound Zuständen ($\nu_1 = \nu_2 = 0$) mit den magnetischen Quantenzahlen $m_1 = 0$ und $m_2 = -199$. Der Endzustand ist im ersten Fall $m_3 = -199$, $\nu_3 = 0$, $m_4 = 0$, im zweiten Fall $m_3 = -199$, $\nu_3 = 1$, $m_4 = 0$.

Beim ersten Übergang befinden sich alle gebundenen Elektronen des Ausgangs- und Endzustandes in tightly-bound Zuständen. Diese Art von Übergängen liefert, wie wir in Kapitel 7 sehen werden, den Hauptbeitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt bei hohen Energien. Dabei besitzen diejenigen Übergänge die größte Ionisationsschwelle, bei denen das Elektron mit der magnetischen Quantenzahl null ionisiert wird. Das nicht ionisierte

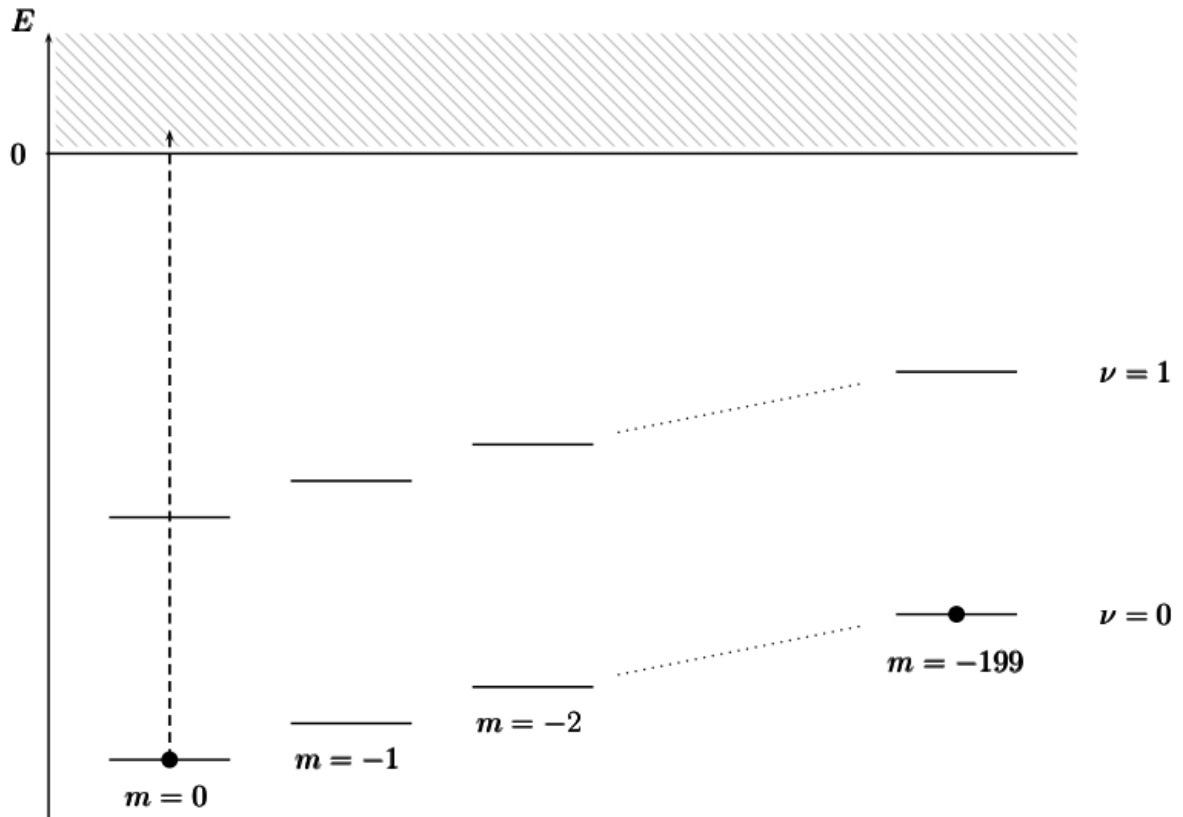


Abb. 6.1.: Schematische Darstellung des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$.

Elektron wird durch das Fehlen dieses inneren Elektrons nach der Ionisierung stärker an den Kern gebunden. Die dabei gewonnene Energie ist umso geringer, je kleiner die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des gebundenen Elektrons in Kernnähe. Der hier betrachtete Übergang in den Endzustand $m_3 = -199$, $\nu_3 = 0$, $m_4 = 0$ stellt somit von den Übergängen mit rein knotenlosen gebundenen Zuständen denjenigen mit der größten Ionisationsschwelle dar.

Ähnliche Übergänge, die sich lediglich in der magnetischen Quantenzahl m_3 von diesem unterscheiden, haben auch ähnliche Ionisationsschwellen und Einzelwirkungsquerschnitte, wobei die Änderung mit steigendem m_3 zunächst sehr gering ist, da die entsprechenden Energieniveaus sehr dicht beieinander liegen. Erst für betragsmäßig kleine magnetische Quantenzahlen nahe null ist der Energieunterschied mit steigendem m_3 deutlich sichtbar. Im Energiebereich des betrachteten Übergangs liegen die Einzelwirkungsquerschnitte der Übergänge mit knotenlosen gebundenen Zuständen also sehr dicht und summieren sich zu einem Peak im Gesamtwirkungsquerschnitt auf, wobei die Ionisationsschwelle des betrachteten Übergangs am Maximum dieses Peaks liegt. Dies wird

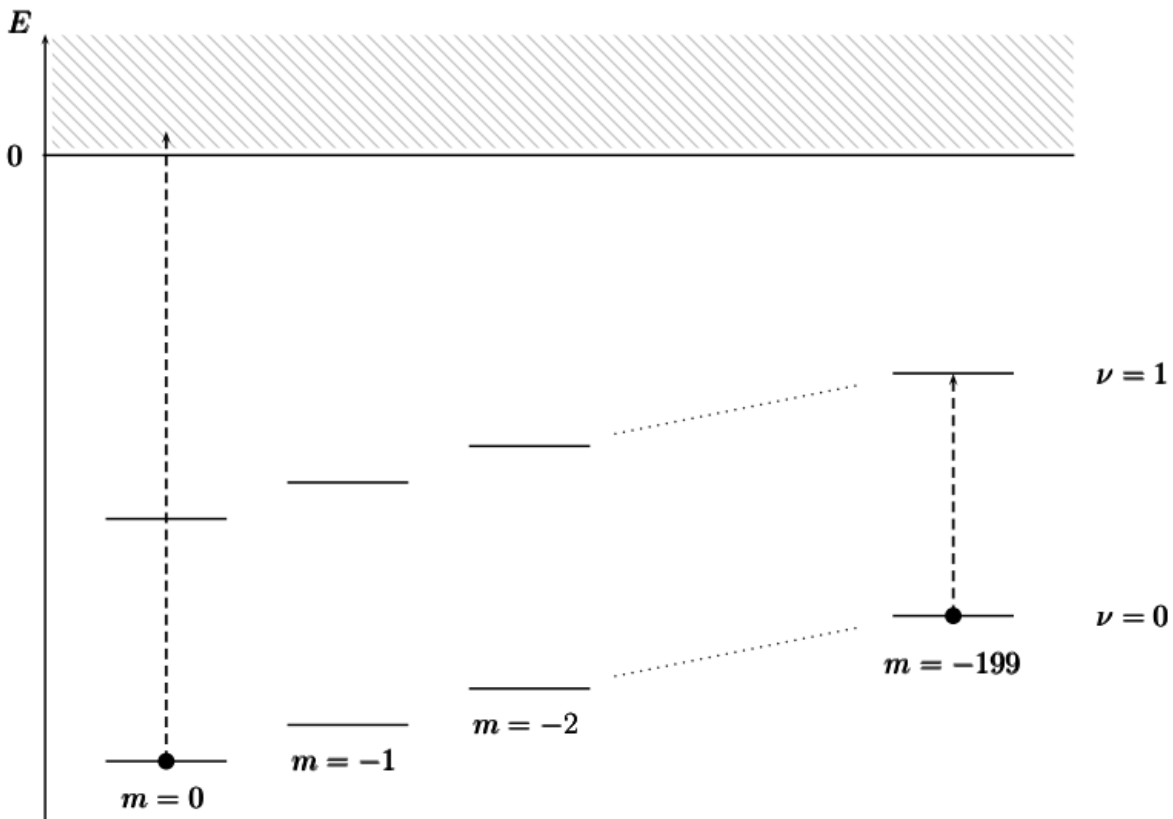


Abb. 6.2.: Schematische Darstellung des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$.

in Abschnitt 7.5.1 des folgenden Kapitels gezeigt.

Das ungebundene Elektron ist definiert über die magnetische Quantenzahl und Energie. Dabei ist m_4 bereits durch die Angabe der Quantenzahlen der gebundenen Elektronen festgelegt. Bei der Berechnung der Einzelwirkungsquerschnitte benötigen wir für die Auftragung über der Photonenenergie die ungebundene Wellenfunktion für verschiedene Energien, weswegen E' nicht angegeben werden kann. Die beiden Übergänge unterscheiden sich auch darin, welche z -Parität das ungebundene Elektron hat.

Da wir in diesem und dem folgenden Kapitel noch häufiger verschiedene Übergänge betrachten, führen wir an dieser Stelle eine vereinfachte Schreibweise ein: Jedes gebundene Elektron wird durch eine Klammer dargestellt, in der zuerst die m -Quantenzahl und danach, durch ein Komma getrennt, die ν -Quantenzahl steht. Der Index i oder f gibt an, ob es sich um ein Elektron im Anfangs- oder Endzustand handelt. Anfangs- und Endzustand werden durch einen Doppelpunkt getrennt. Der Übergang in Abbildung 6.1 wird somit als $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ geschrieben.

6.1.1. Helium

In diesem Abschnitt untersuchen wir für die beiden Übergänge aus dem vorigen Abschnitt Einzelwirkungsquerschnitte von Helium sowie deren Zustandekommen aus den Wellenfunktionen. Die Wahl dieser Übergänge erfolgte selbstverständlich nicht willkürlich. Beim Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ liefert die antisymmetrische ungebundene Wellenfunktion einen Wirkungsquerschnitt ungleich null, bei $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ die symmetrische. Außerdem steht die ungebundene Wellenfunktion beim ersten Übergang im Dipolmatrixelement, beim zweiten im Minor. Um dies zu zeigen betrachten wir die Formel für den Wirkungsquerschnitt, Gleichung (4.43). Im Betragquadrat stehen das Dipolmatrixelement mit dem Operator z_l und der Minor a^{fi} . Für Helium und heliumähnliche Ionen ist der Minor lediglich das Überlappintegral zweier Wellenfunktionen.

Die Aufspaltung der Doppelsumme

$$\sum_{k=N+1}^{2N-1} \sum_{l=1}^N \langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_k, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \langle g_{m_{2N} E'}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_{2N}, m_l} a_{2N l}^{\text{fi}} \quad (6.1)$$

danach, ob die ungebundene Wellenfunktion $g_{m_N E'}^{\text{f}}$ im Minor oder im Dipolmatrixelement steht, erleichtert die folgende Betrachtung. Dabei haben wir bei der Summe über k den Index um N verschoben, damit der Index von m und ν nicht wieder bei 1 beginnt und die Quantenzahlen des Endzustandes von denen des Ausgangszustandes unterscheidbar sind. Bei zwei Elektronen ergeben sich aus der Doppelsumme vier mögliche Terme, zwei mit ungebundener Wellenfunktion im Dipolmatrixelement und zwei mit ungebundener Wellenfunktion im Minor:

$$\begin{aligned} & \langle g_{m_3 \nu_3}^{\text{f}} | z_1 | g_{m_1 \nu_1}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_3, m_1} a_{31}^{\text{fi}} + \langle g_{m_3 \nu_3}^{\text{f}} | z_2 | g_{m_2 \nu_2}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_3, m_2} a_{32}^{\text{fi}} \\ & + \langle g_{m_4 E'}^{\text{f}} | z_1 | g_{m_1 \nu_1}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_4, m_1} a_{41}^{\text{fi}} + \langle g_{m_4 E'}^{\text{f}} | z_2 | g_{m_2 \nu_2}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_4, m_2} a_{42}^{\text{fi}} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Bei den betrachteten Übergängen sind beide Einteilchen-Wellenfunktionen des Ausgangszustandes aufgrund der Knotenzahl symmetrisch. Steht die ungebundene Wellenfunktion wie bei den ersten beiden Termen in (6.2) im Minor, hat dieser nur für den symmetrischen Teil einen Wert ungleich null. Taucht die ungebundene Wellenfunktion wie bei den letzten beiden Termen in (6.2) jedoch im Dipolmatrixelement auf, so liefert aufgrund des Operators z nur der antisymmetrische Teil einen Beitrag.

Das können wir für unsere Betrachtungen ausnutzen: Wir wissen, dass sich bei $\Delta M = 0$ -Übergängen die z -Parität ändern muss. Beim Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ muss die ungebundene Wellenfunktion also antisymmetrisch sein und somit im Dipolmatrixelement stehen. Bei $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ hingegen ist die gebundene Wellenfunktion des Endzustandes antisymmetrisch, die ungebundene Wellenfunktion muss

also symmetrisch sein und steht im Minor. Die Anzahl der Terme reduziert sich damit jeweils von vier auf zwei.

Außerdem ergeben sowohl das Überlappintegral als auch das Dipolmatrixelement null, falls die beiden Einteilchen-Wellenfunktionen verschiedene magnetische Quantenzahlen aufweisen, siehe Gleichung (6.2). Bei den beiden Übergängen hat jeweils ein Elektron die Quantenzahl $m = 0$, das andere $m = -199$, es bleibt also letztendlich nur ein Term übrig. Bei $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ jener mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion sowie $(0,0)_i$ im Dipolmatrixelement und den beiden Zuständen $(-199,0)$ im Überlappintegral ($\langle g_0^f \text{ }_{E'} | z | g_0^i \text{ }_0 \rangle \langle g_{-199}^f \text{ }_0 | g_{-199}^i \text{ }_0 \rangle$), bei $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ stehen die gebundenen Zustände $(-199,0)_i$ und $(-199,1)_f$ im Dipolmatrixelement und die symmetrische ungebundene Wellenfunktion neben $(0,0)_i$ im Minor ($\langle g_{-199}^f \text{ }_1 | z | g_{-199}^i \text{ }_0 \rangle \langle g_0^f \text{ }_{E'} | g_0^i \text{ }_0 \rangle$).

Ein wichtiger Unterschied der Übergänge liegt also in der Parität der ungebundenen Wellenfunktion. An dieser Stelle wollen wir als Beispiel die symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ betrachten, siehe Abbildung 6.3. Die zugehörigen Potentiale sind in Abbildung 6.4 gezeigt.

Das Gesamtpotential, in dem sich das Elektron bewegt, entsteht durch Kern-, direkte Elektron-Elektron- und Austauschwechselwirkung. Je größer die magnetische Quantenzahl des Elektrons, desto größer ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe und desto stärker ist damit auch der Einfluss der Kernwechselwirkung. Im Fall unseres Übergangs, bei dem das ungebundene Elektron die magnetische Quantenzahl $m = 0$ hat, ist das Kernpotential also vergleichsweise groß. Die beiden anderen Wechselwirkungen sind eher klein, da das gebundene Elektron die magnetische Quantenzahl $m = -199$ besitzt. Dementsprechend ist das Gesamtpotential für symmetrische und antisymmetrische ungebundene Wellenfunktion sehr ähnlich.

Die Wellenfunktionen unterscheiden sich jedoch deutlich. Die symmetrische Wellenfunktion hat bereits bei ungefähr $z = 0,2$ einen Nulldurchgang, während die antisymmetrische erst bei circa $z = 1,5$ negativ wird. Dies liegt an dem sehr tiefen Kernpotential für kleine z , welches aber sehr steil ansteigt. Die ungebundene Wellenfunktion hat keine feste Wellenlänge, erst für große z geht das Potential gegen null und die Wellenfunktion nähert sich der einer ebenen Welle ($e^{ik_z z}$).

Die Potentiale und Wellenfunktionen des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ unterscheiden sich nur geringfügig von den hier gezeigten, da in beiden Fällen das gebundene Elektron durch die geringe magnetische Quantenzahl in Kernnähe keinen großen Einfluss auf das ungebundene Elektron hat.

Nun wollen wir den jeweiligen Wirkungsquerschnitt genauer analysieren. Die Unterschiede im Einzelwirkungsquerschnitt der beiden Übergänge $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ und $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ ergeben sich aus den unterschiedlichen Werten von Dipolmatrixelement und Minor. Deswegen betrachten wir die Wellenfunktionen über die beim Minor integriert wird sowie die Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement, wobei wir beim Dipolmatrixelement eine davon bereits mit z multiplizieren.

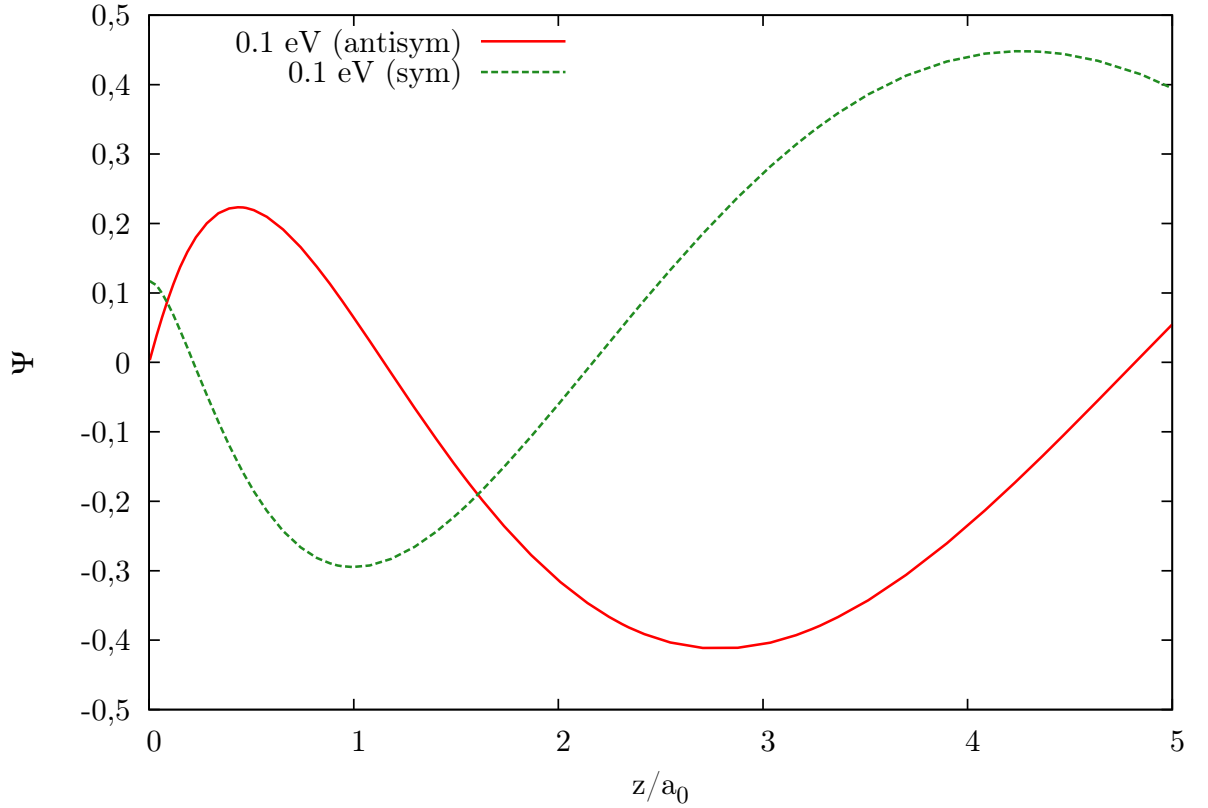


Abb. 6.3.: Ungebundene Wellenfunktion in der Nähe des Kerns und knapp oberhalb der Ionisierungsschwelle, Endzustand $(m_1 = -199, \nu = 0)(m_2 = 0, E' = 0,1 \text{ eV})$, $B = 10^8 \text{ T}$.

In Abbildung 6.5 sind diese Wellenfunktionen sowie der sich aus den Integralen ergebende Wirkungsquerschnitt für den Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ aufgetragen, in Abbildung 6.6 für den Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$.

In beiden Fällen ist das Dipolmatrixelement relativ groß wohingegen der Minor, bei Helium ein einzelnes Überlappintegral, sich stark unterscheidet. Die symmetrische Wellenfunktion hat, wie bereits erwähnt, einen deutlich früheren Nulldurchgang, das Überlappintegral des zweiten Übergangs enthält also ähnlich große positive und negative Anteile und ist deswegen deutlich kleiner als das des ersten Übergangs. Bei diesem erfolgt der Nulldurchgang erst bei höheren z -Werten, wo die gebundene Wellenfunktion im Dipolmatrixelement bereits fast auf null abgefallen ist. Dementsprechend liegt der Einzelwirkungsquerschnitt beim ersten Übergang um circa vier Größenordnungen über dem des zweiten Übergangs.

Gemeinsam haben die beiden Wirkungsquerschnitte lediglich die generelle Tendenz mit steigender Energie geringere Werte aufzuweisen sowie einen starken Abfall zu Be-

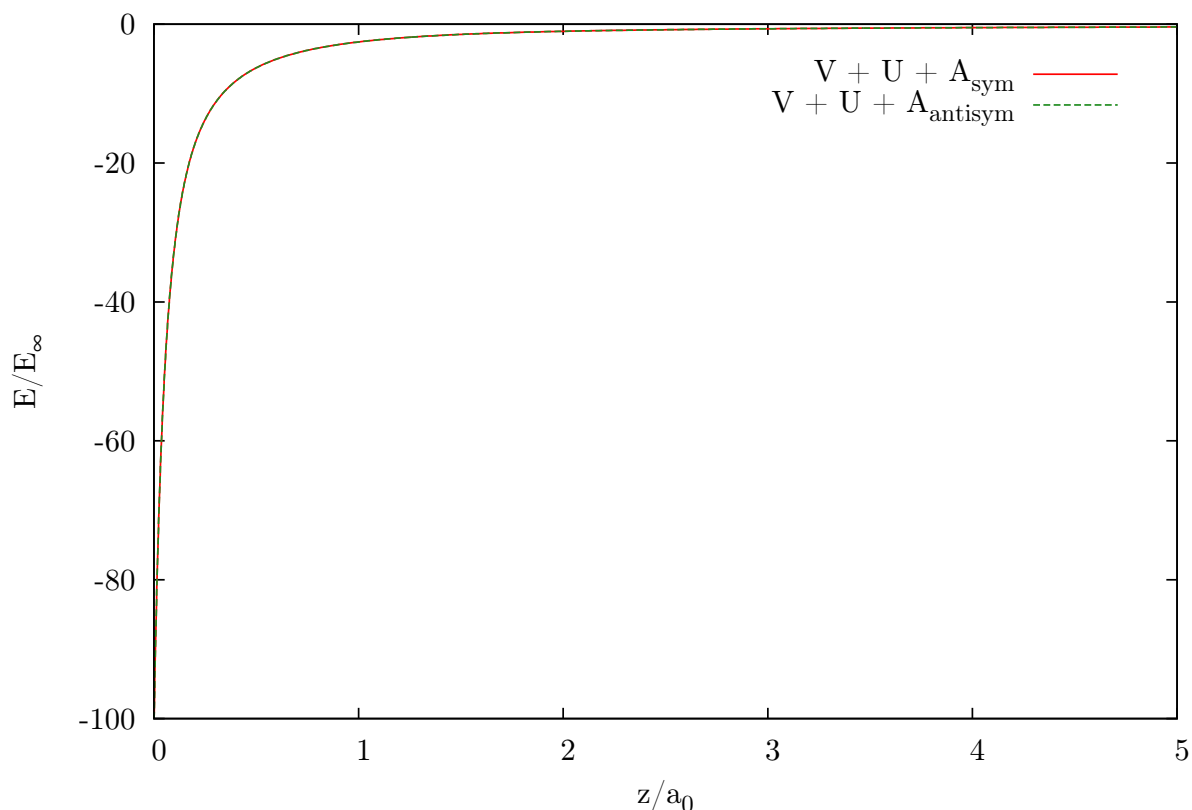


Abb. 6.4.: Helium, Endzustand $(m_1 = 199, \nu = 0)(m_2 = 0)$, $B = 10^8$ T: Gesamtpotentiale für die symmetrische (rot) und antisymmetrische (grün) ungebundene Wellenfunktion.

ginn bedingt durch den Term $1/\sqrt{E'}$ in (4.43). Der Beginn des Einzelwirkungsquerschnitts liegt jeweils bei einer Energie 0,1 eV oberhalb der Energiedifferenz zwischen dem Anfangszustand und dem gebundenen Anteil des Endzustands. Die 0,1 eV stellen die geringste betrachtete Energie E' des ungebundenen Elektrons dar.

Beim Einzelwirkungsquerschnitts des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ sind leichte Schwankungen im Bereich um 500 eV zu erkennen. Diese sind auf numerische Fehler zurückzuführen, die sich vor allem beim Berechnen sehr kleiner Integrale, in diesem Fall des Überlappintegrals, bemerkbar machen.

Für den Gesamtwirkungsquerschnitt kann man Übergänge wie $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ getrost vernachlässigen. Die Frage ist nun, ob dies nur für Helium bei $B = 10^8$ T der Fall ist oder auch für andere Atome und Ionen sowie bei verschiedenen Magnetfeldstärken. Dies wird in den Abschnitten 6.1.3 und 6.1.4 behandelt.

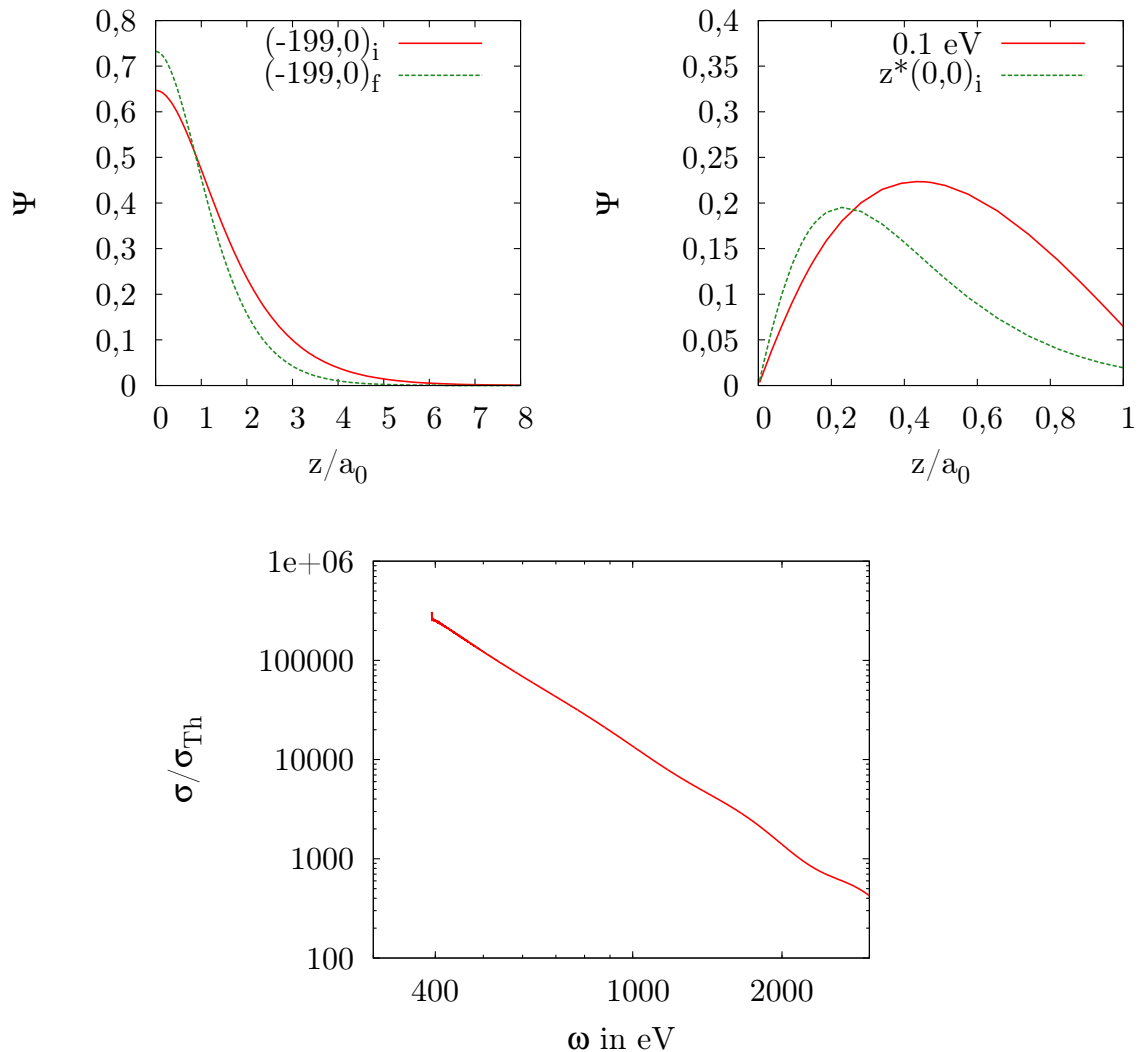


Abb. 6.5.: Helium: Wellenfunktionen des $\Delta M = 0$ -Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ und resultierender Wirkungsquerschnitt für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, die Ionisationsschwelle beträgt $393,4 \text{ eV}$, $B = 10^8 \text{ T}$ ($\beta \approx 212$).

6.1.2. Einfluss der Energie des ungebundenen Elektrons

Bislang haben wir die Wellenfunktion des freien Elektrons nur für $0,1 \text{ eV}$ betrachtet, nun wollen wir den Energieverlauf der Wirkungsquerschnitte analysieren. Wie man sieht fällt der Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ mehrfach auf null ab, steigt dann aber wieder auf ähnliche Größe wie vor dem Abfall. Ganz anders verhält es sich beim Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$. Hier sinkt der Wirkungsquerschnitt mit steigender Energie, jedoch ohne größere Schwankungen. Betrachten wir jedoch den Energieverlauf über die in Abbildung 6.5 aufgetragene Energie hinaus, so sehen wir, dass

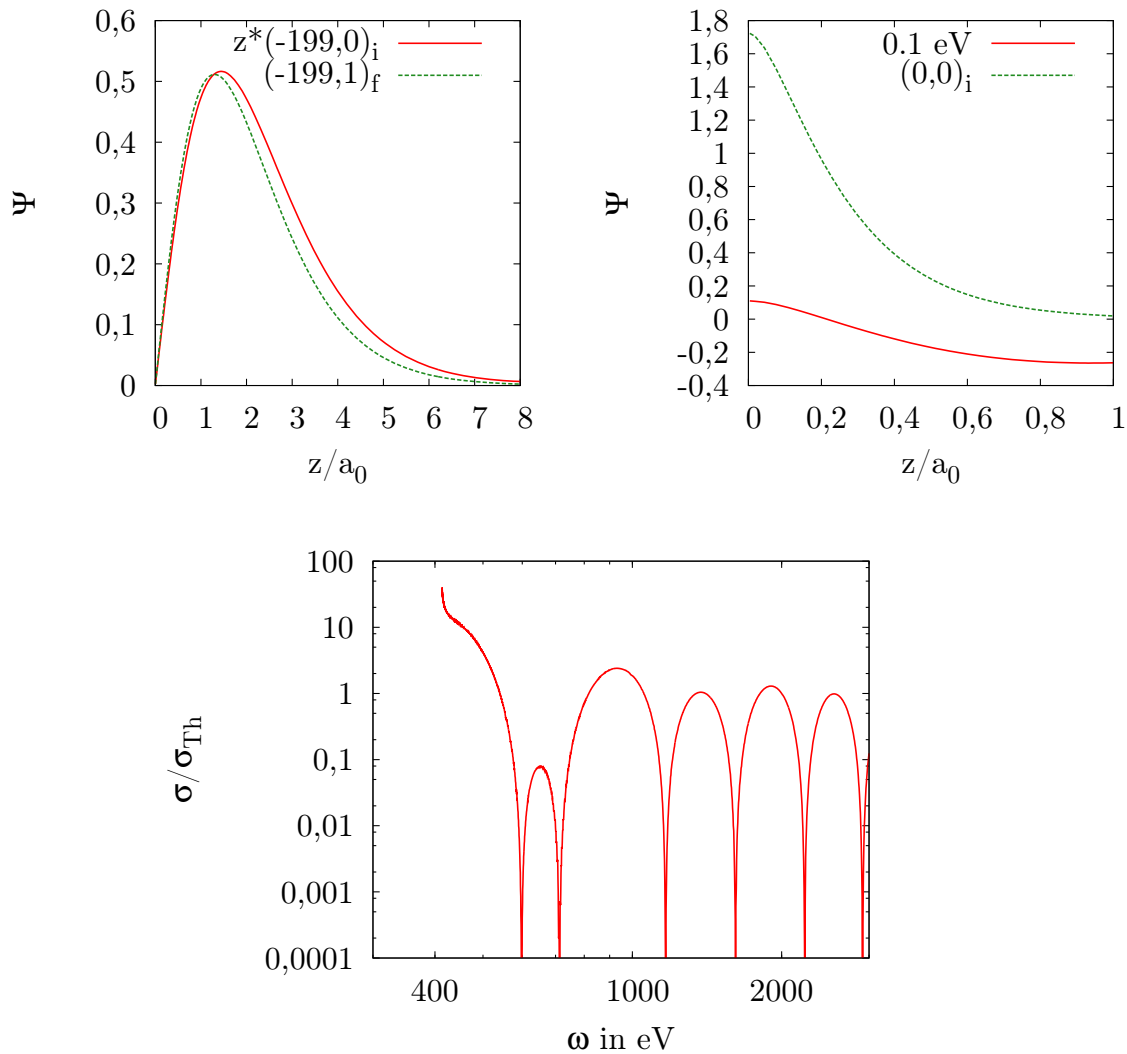


Abb. 6.6.: Helium: Wellenfunktionen des $\Delta M = 0$ -Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ und resultierender Wirkungsquerschnitt für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, die Ionisationsschwelle beträgt 413,5 eV, $B = 10^8 \text{ T}$ ($\beta \approx 212$).

auch dieser Wirkungsquerschnitt mehrfach auf null absinkt, allerdings erst für sehr große Energien, siehe Abbildung 6.7.

Die Ursache dieses unterschiedlichen Verhaltens wollen wir nun ergründen. Die gebundenen Wellenfunktionen bleiben jeweils unverändert, da diese in unserer Näherung nicht vom ungebundenen Elektron beeinflusst werden, siehe Abschnitt 4.1. Nur die ungebundene Wellenfunktion ändert sich mit steigender Energie und zwar wie folgt: Je größer wir die Energie des ungebundenen Elektrons wählen, desto früher hat die Wellenfunktion ihren ersten Nulldurchgang und desto größer ist die Amplitude für kleine z , siehe Abbildung 6.8. Der frühere Nulldurchgang rührt natürlich von der steigenden

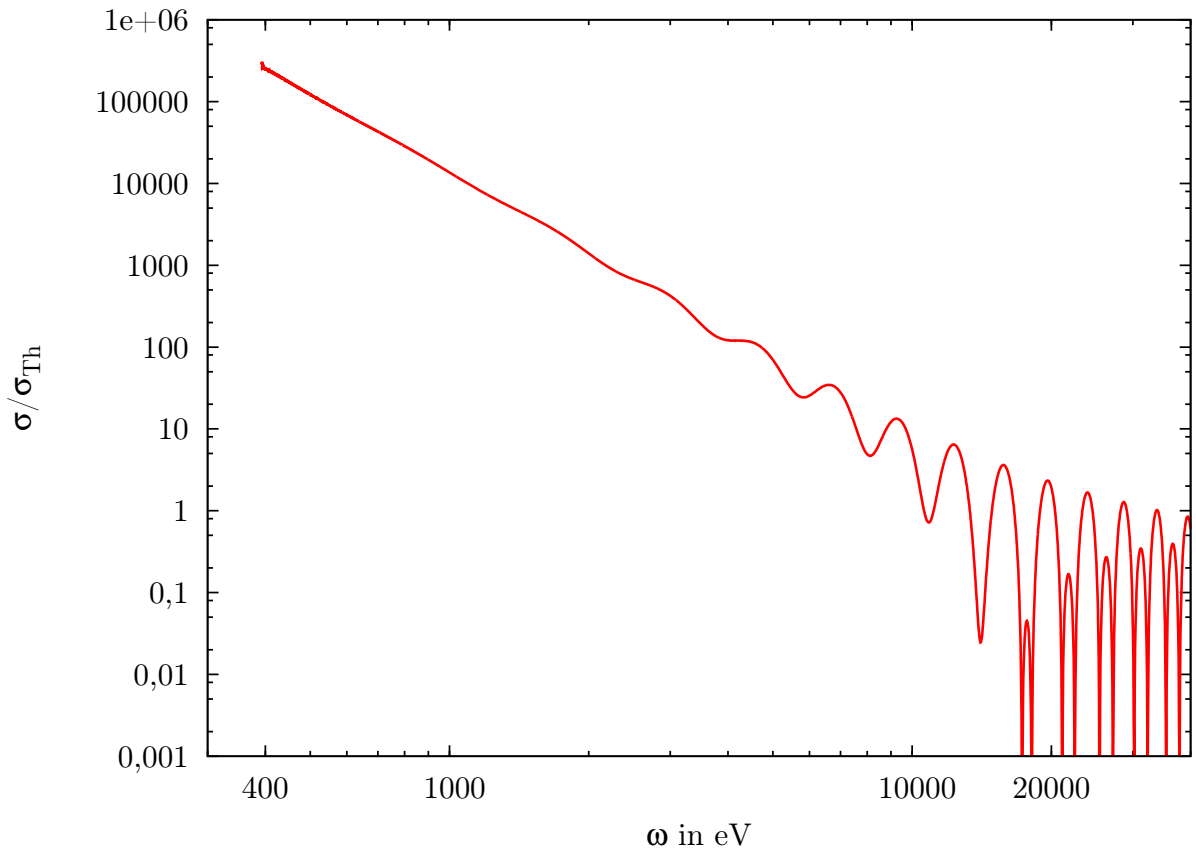


Abb. 6.7.: Helium: Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ aufgetragen bis 40000 eV, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Differenz zwischen der Energie des ungebundenen Elektrons und dem Potential her. Die größere Amplitude wird verursacht vom geringer werdenden Quotienten der Differenz von Energie des ungebundenen Elektrons und Tiefe des Potentials für kleine und für große z .

Darüber hinaus erkennen wir, dass sich im aufgetragenen Bereich die Wellenlänge bei kleinen Energien kaum verändert, genauer gesagt findet der erste Nulldurchgang nach dem Ursprung bei ähnlichen z -Werten statt. Die Wellenlänge ist hier auf den Bereich zwischen Ursprung und Nulldurchgang bezogen, also für kleine z . Die drei Wellenfunktionen mit 0,1 eV, 1 eV beziehungsweise 10 eV unterscheiden sich zwar in der Amplitude, jedoch kaum in der Wellenlänge. Der Grund liegt in der Tiefe des Kernpotentials für kleine z . Die Energie des ungebundenen Elektrons spielt dort kaum eine Rolle. Für große z nimmt dann das Kernpotential stark ab und die Wellenfunktionen unterscheiden sich in der Wellenlänge immer deutlicher, dafür immer weniger in der Amplitude, siehe Abbildung 6.9.

Beim Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ stehen nur gebundene Wellenfunktionen

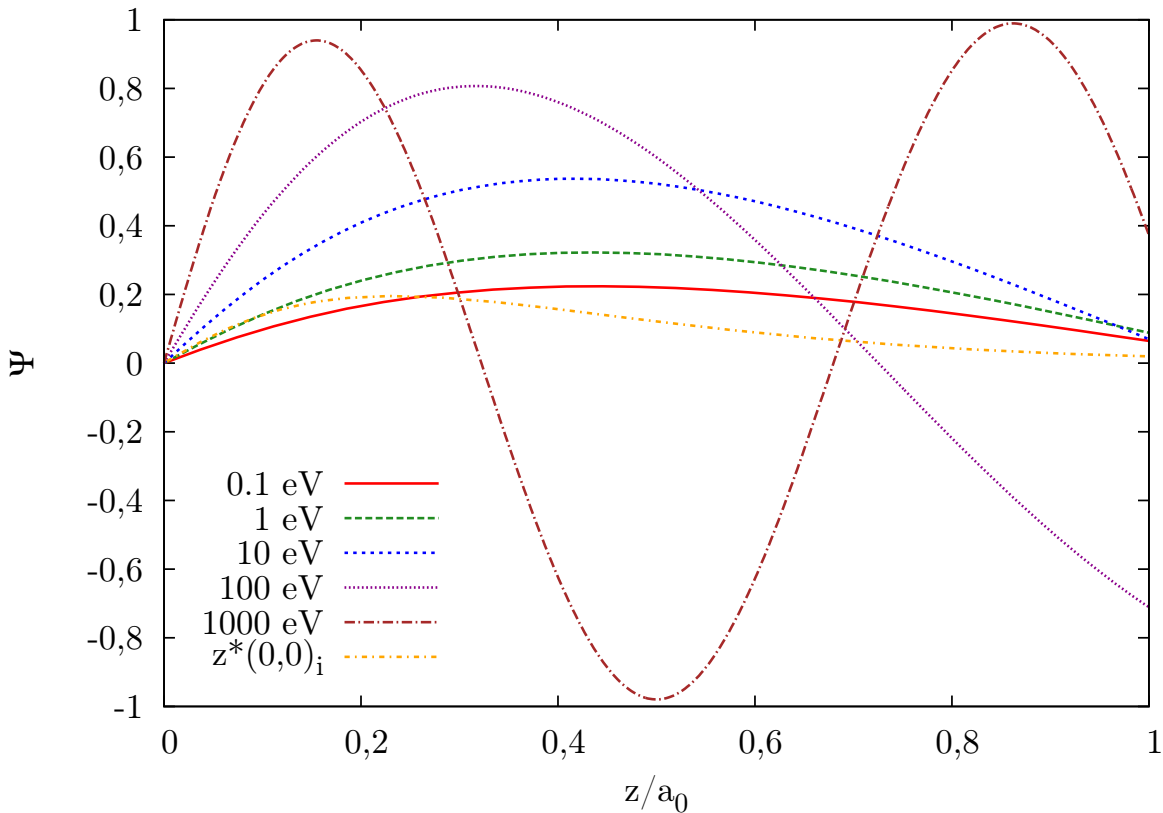


Abb. 6.8.: Ungebundene Wellenfunktionen verschiedener Energie für den Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ bei $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$) für kleine z .

im Dipolmatrixelement, daher ändert sich dessen Wert mit steigender Energie nicht. Wir müssen somit lediglich das Überlappintegral betrachten. Wie wir in Abschnitt 6.1.1 gesehen haben, ist dessen Wert klein, was den um Größenordnungen kleineren Wirkungsquerschnitt erklärt. Positiver und negativer Anteil des Integrals sind also ähnlich groß. Bereits eine geringe Änderung der Wellenlänge kann somit zu einem Vorzeichenwechsel führen. Das Überlappintegral steht im Betragsquadrat, der sichtbare Effekt für den Wirkungsquerschnitt ist also ein Absinken auf null und dann ein erneuter Anstieg. Diese Nulldurchgänge des Überlappintegrals sind im Wirkungsquerschnitt (Abbildung 6.6) deutlich zu sehen, der erste bereits bei circa 600 eV.

Der Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ fällt bei weit über 10000 eV erstmals auf null ab, beginnt jedoch davor schon um Größenordnungen zu schwanken. Hier bleibt das Überlappintegral konstant während sich das Dipolmatrixelement mit steigender Energie ändert. Der Nulldurchgang der ungebundenen Wellenfunktion verschiebt sich zu immer kleineren z -Werten, das Dipolmatrixelement bleibt jedoch über einen großen Energiebereich hinweg deutlich über null.

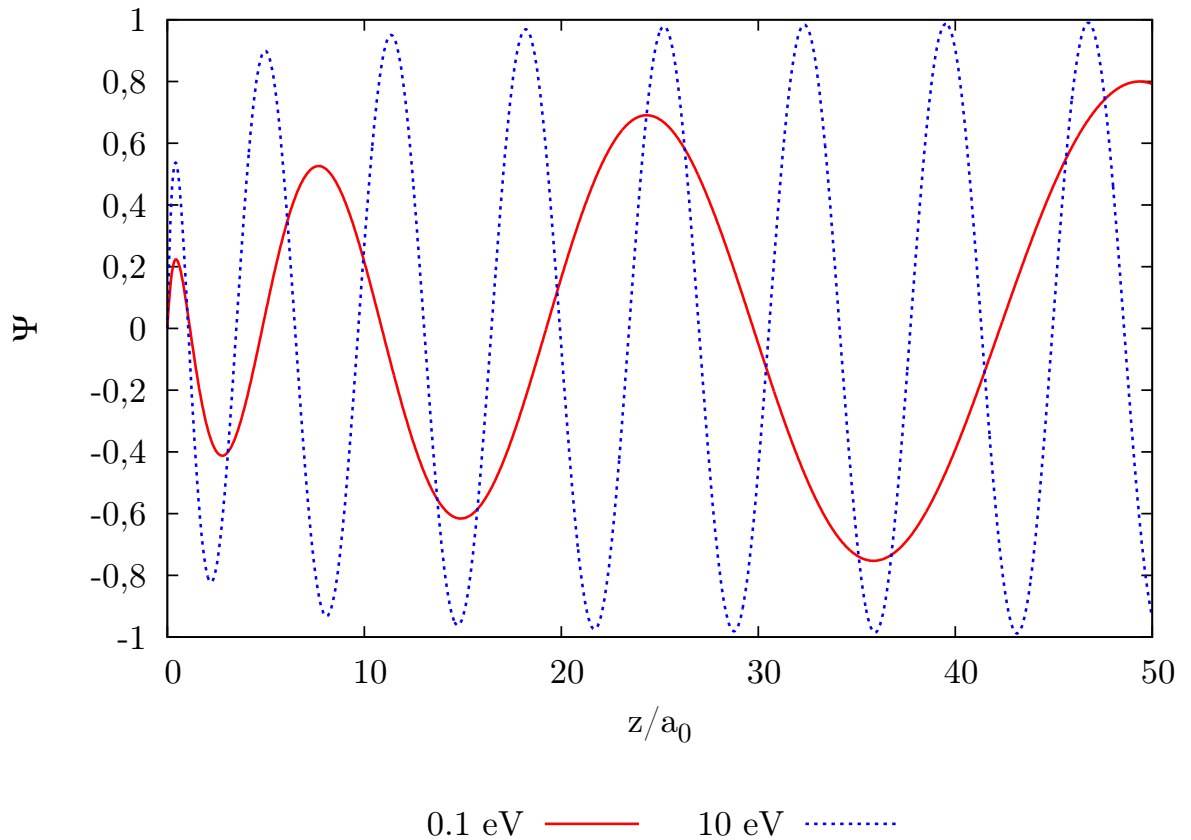


Abb. 6.9.: Ungebundene Wellenfunktionen mit 0,1 eV und 10 eV für den Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ bei $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$) bis $z = 50$.

Erst bei einigen Tausend eV beginnen die immer größer werdenden Schwankungen. Den Energiebereich von 8000 eV bis 20000 eV haben wir für die folgende Analyse genauer aufgelöst, siehe Abbildung 6.10. In diesem Bereich haben wir das Dipolmatrixelement genauer betrachtet. Bedingt durch die Form der gebundenen Wellenfunktion ergeben sich für das Integral zunächst immer positive Werte. Dies ist exemplarisch für die Energie 8581 eV in Abbildung 6.11 gezeigt. Als Integrationsbereiche wurden jeweils die Abschnitte zwischen den Nullstellen gewählt. Dadurch liegen nur Abschnitte mit rein positiven oder rein negativen Beiträgen vor. Die Breite der Integrationsbereiche steigt aufgrund des abnehmenden Potentials mit z , bei der gezeigten Aufteilung ist die Differenz aufgrund der hohen Energie des ungebundenen Elektrons jedoch minimal. In der Tabelle darunter sind die zu summierenden Integrale der einzelnen Bereiche sowie die Summe aller Integrale aufgelistet.

Das Dipolmatrixelement schwankt zwar teilweise um mehr als eine Größenordnung zwischen einem Minimum und einem Maximum, wird aber zunächst nicht null. Erst im Bereich um das sehr kleine Maximum bei knapp 18000 eV ist das Dipolmatrixelement

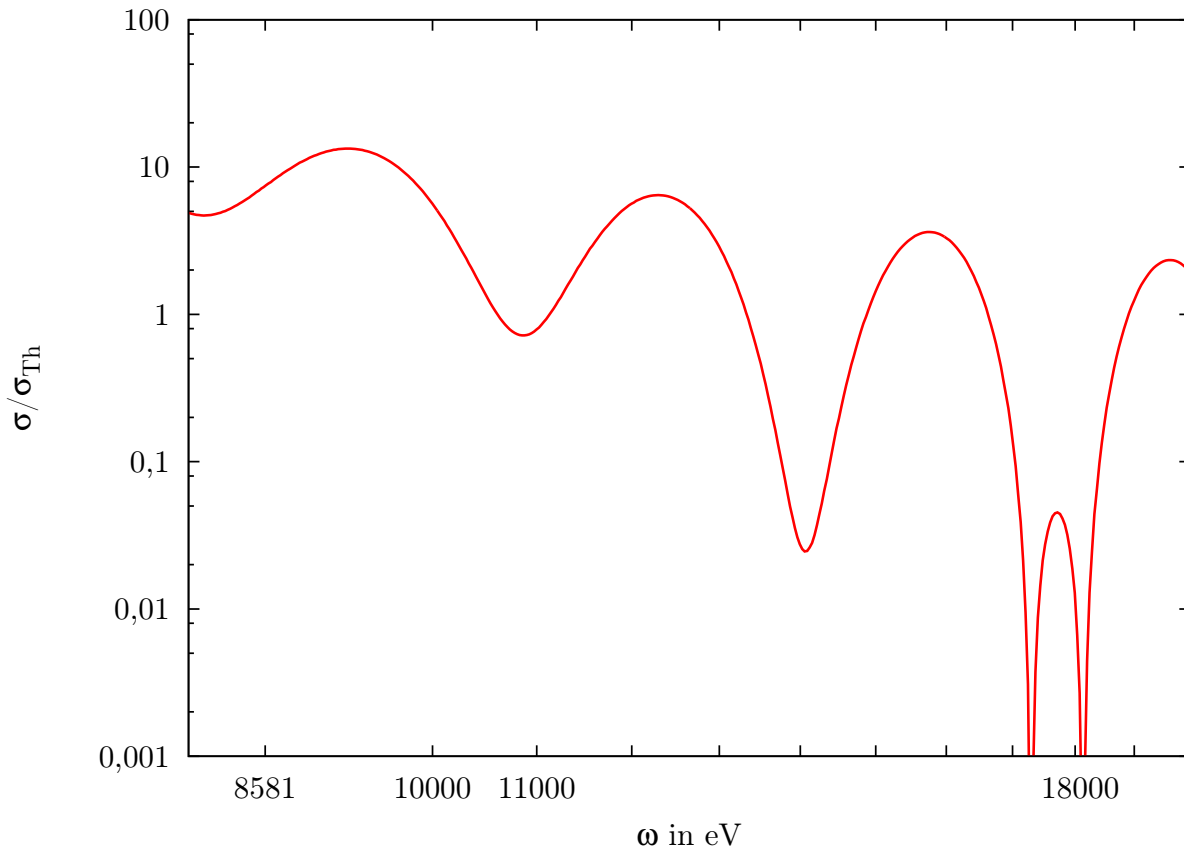


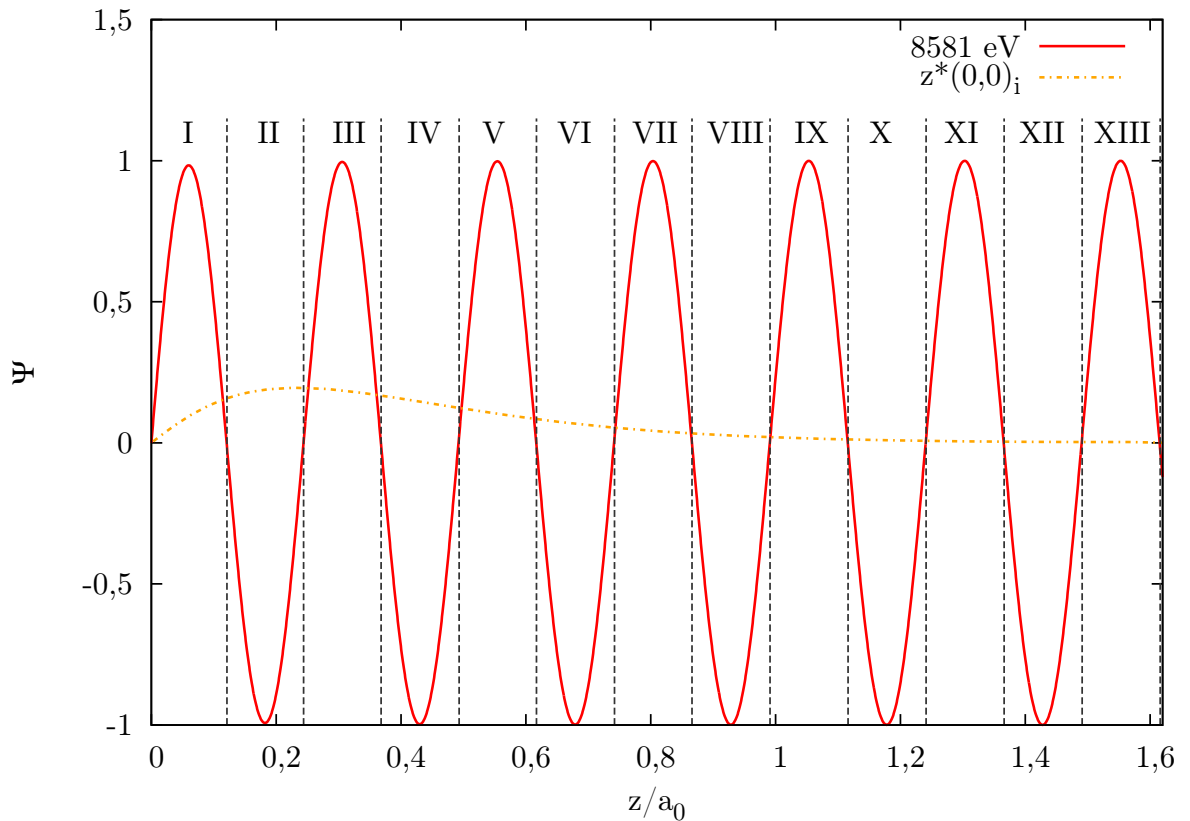
Abb. 6.10.: Helium: Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ aufgetragen von 8000 bis 20000 eV, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

kleiner null, beim darauf folgenden deutlich höheren Maximum ist es wieder größer null. Die Maxima mit negativem Dipolmatrixelement nehmen mit steigender Energie zunächst immer höhere Werte, diejenigen mit positivem Dipolmatrixelement immer geringere Werte an, beide gleichen sich jedoch einem gemeinsamen Wert an.

6.1.3. Heliumähnliche Ionen

Die bereits in Abschnitt 6.1.1 betrachteten Übergänge wollen wir nun für heliumähnliche Sauerstoff- und Eisenionen analysieren, um zu sehen, ob auch hier der Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ gegenüber $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ vernachlässigbar ist. Wie zuvor zeigen wir hierzu die Wellenfunktionen und den resultierenden Einzelwirkungsquerschnitt, für Sauerstoffionen siehe Abbildungen 6.12 und 6.13, für Eisenionen siehe Abbildungen 6.14 und 6.15.

Man erkennt, dass auch bei Sauerstoff- und Eisenionen der Wirkungsquerschnitt des



Bereich	I	II	III	IV	V	VI	VII	
Integralwert/ 10^{-4}	69,1	-145,1	145,4	-115,5	81,7	-54,0	34,1	
Bereich	VIII	IX	X	XI	XII	XIII	Summe	
Integralwert/ 10^{-4}	-20,8	12,5	-7,4	4,4	-2,9	1,9	3,5	

Abb. 6.11.: Aufteilung des Dipolmatrixelementes in Bereiche mit positivem und negativem Beitrag sowie zugehörige Integrale über die einzelnen Bereiche.

Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ mit der antisymmetrischen ungebundenen Wellenfunktion den anderen um drei bis vier Größenordnungen überragt. Genau wie bei Helium beginnt der Wirkungsquerschnitt nach anfänglich kontinuierlichem Abfall zu schwanken. Der Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ ist wie bei Helium um Größenordnungen kleiner und fällt im aufgetragenen Bereich mehrmals auf null ab. Die aus der Heliumanalyse gewonnenen Erkenntnisse sind also auch für andere Elemente zutreffend.

Es sind jedoch auch Unterschiede zwischen den verschiedenen Elementen erkennbar. Betrachten wir dazu zunächst den Minor. Die Wellenfunktionen $(-199,0)_i$ und $(-199,0)_f$

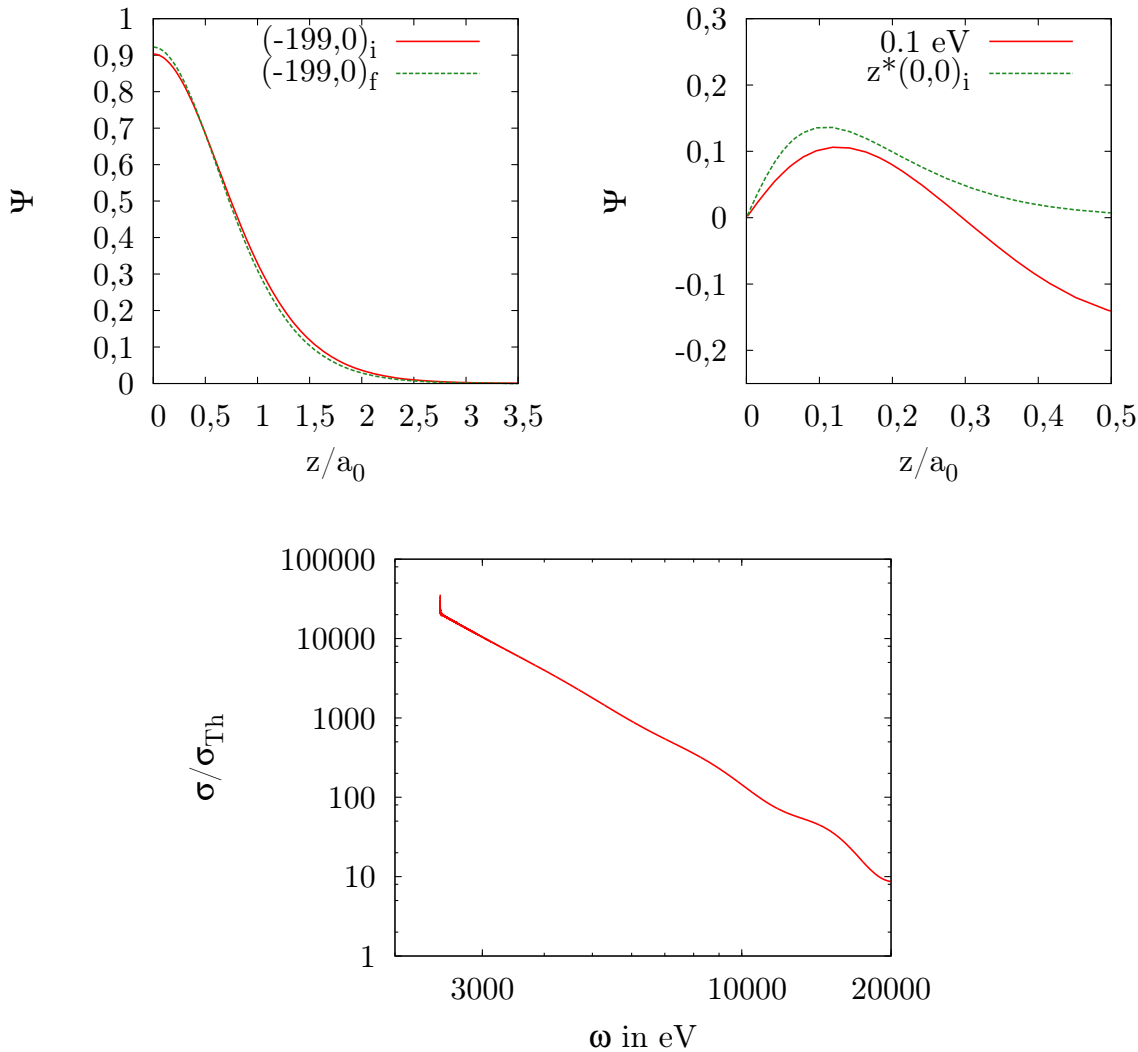


Abb. 6.12.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Wellenfunktionen und resultierender Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, die Ionisationsschwelle liegt bei 2467,2 eV, $B = 10^8 \text{ T}$ ($\beta \approx 212$).

sind sich umso ähnlicher, je höher die Kernladung, also je stärker die Bindung des Elektrons ist. Daher ist beim Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ das Überlappintegral bei höherer Kernladung etwas größer.

Das Dipolmatrixelement nimmt bei steigender Kernladung generell kleinere Werte an. Dies hat mehrere Gründe: Zum einen ist der Maximalwert der ungebundenen Wellenfunktion für kleine z umso geringer, je tiefer das Potential ist, siehe Abschnitt 6.1.2. Dies ist am Beispiel des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für die verschiedenen Elemente besonders gut zu erkennen. Bei den gebundenen Wellenfunktionen steigt hin-

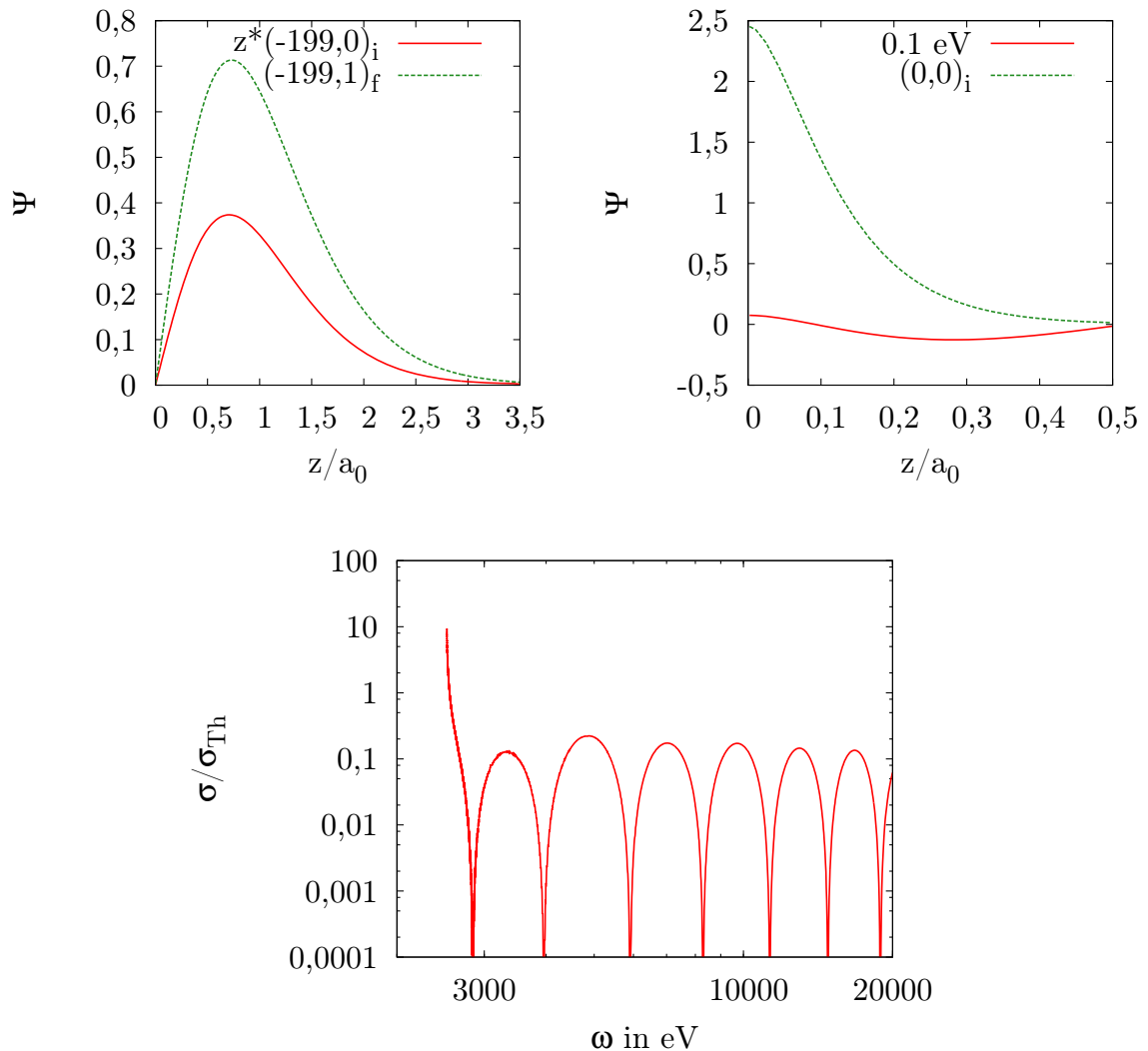


Abb. 6.13.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Wellenfunktionen und resultierender Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, die Ionisationsschwelle liegt bei 2523,0 eV, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

gegen der Maximalwert bei tieferem Potential, während die Ausdehnung aufgrund der höheren Kernladung wie bei den ungebundenen geringer ist. Zum anderen ist das Dipolmatrixelement durch die Multiplikation mit dem Operator z umso kleiner, je geringer die Ausdehnung der Zustände.

Ein weiterer Unterschied ergibt sich, wenn man im Dipolmatrixelement des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ die Lage der Maxima der beiden Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement vergleicht: Bei Helium liegt das erste Maximum der ungebundenen Wellenfunktion rechts vom Maximum der mit z multiplizierten gebundenen Wellenfunktion

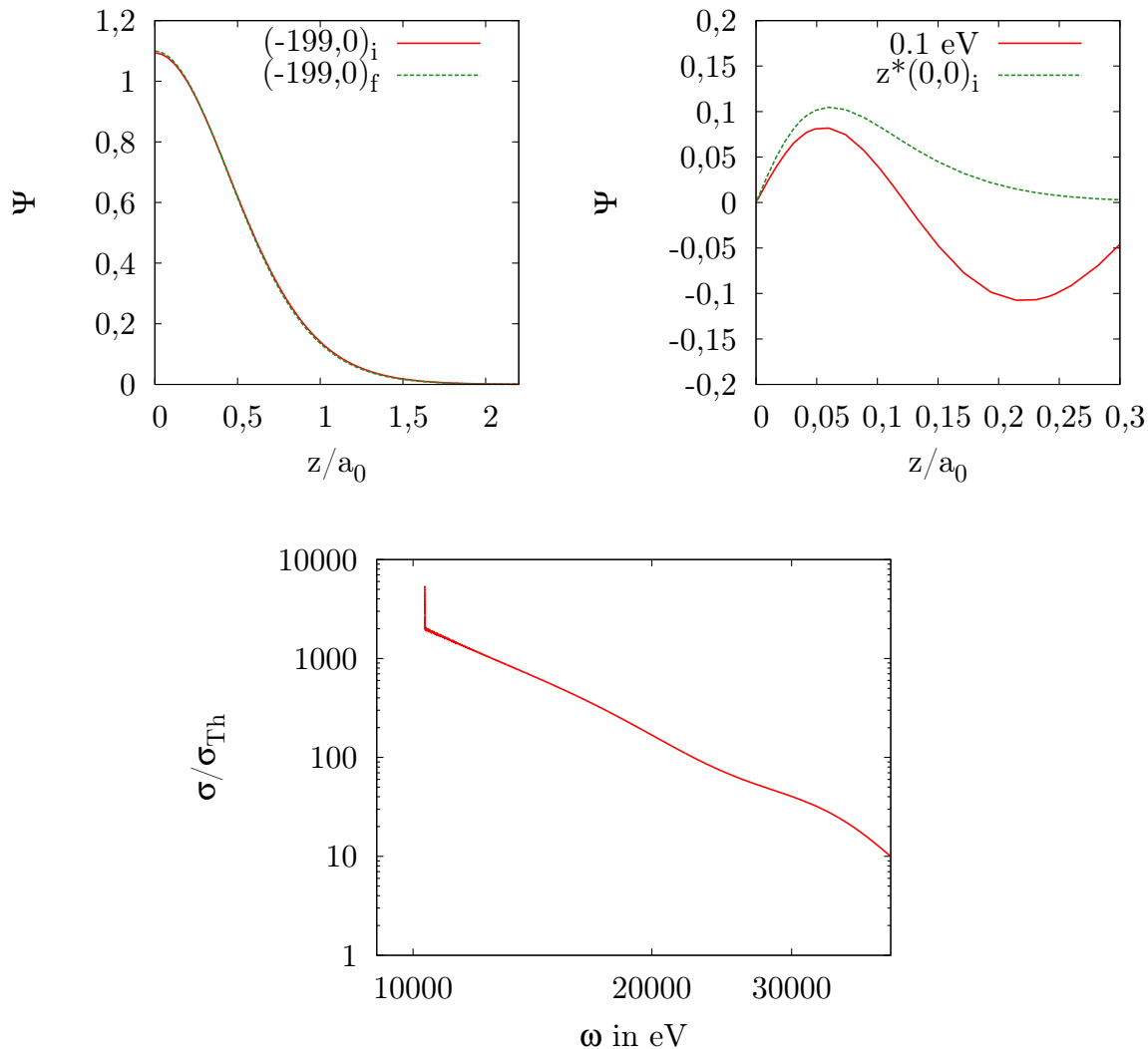


Abb. 6.14.: Heliumähnliche Eisenionen: Wellenfunktionen und resultierender Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, die Ionisationsschwelle liegt bei 10347 eV, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

$(0,0)_i$. Bei heliumähnlichen Sauerstoffionen rücken diese Maxima deutlich zusammen und bei Eisenionen liegt das erste Maximum der ungebundenen Wellenfunktion links davon. Dementsprechend liegt der Nulldurchgang der ungebundenen Wellenfunktion hier an einem Punkt, wo die gebundene Wellenfunktion noch nicht stark abgefallen ist, das Dipolmatrixelement enthält auch negative Anteile. Bei Helium sind diese negativen Anteile vernachlässigbar klein, dort erfolgt der erste Nulldurchgang der ungebundenen Wellenfunktion erst als die gebundene Wellenfunktion schon fast auf null abgefallen ist. Auch dies trägt dazu bei, dass bei Eisenionen der Unterschied zwischen den beiden betrachteten Übergängen nur rund drei Größenordnungen beträgt während es bei Helium vier

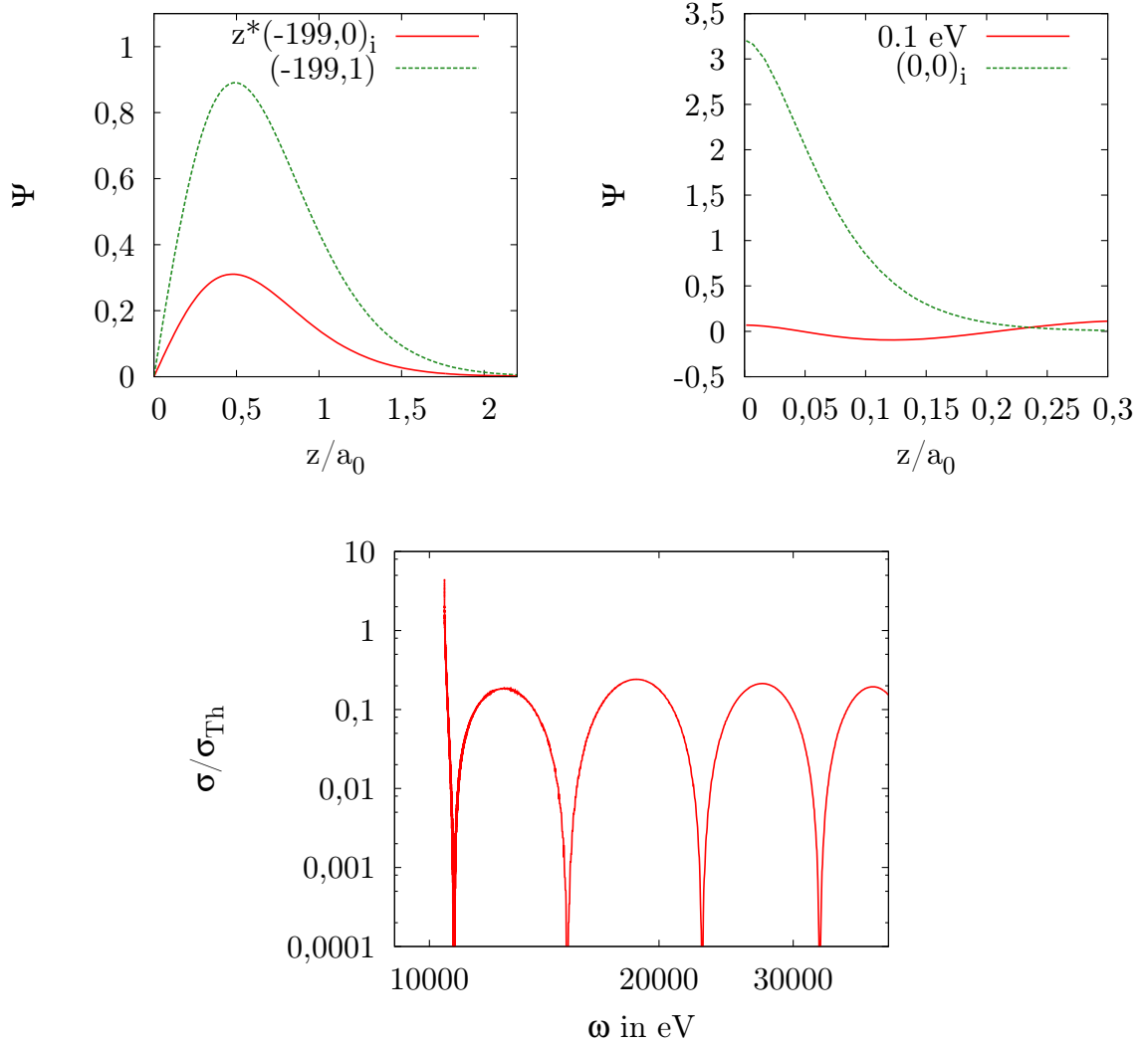


Abb. 6.15.: Heliumähnliche Eisenionen: Wellenfunktionen und resultierender Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, die Ionisationsschwelle liegt bei 10464 eV, $B = 10^8 \text{ T}$ ($\beta \approx 212$).

Größenordnungen sind.

Zu den Eisenzuständen sei angemerkt, dass hier der ladungsskalierte Magnetfeldparameter $\beta_Z = \beta/Z^2$ bereits unter eins liegt. Die adiabatische Näherung ist also in diesem Fall eigentlich nicht gerechtfertigt. Um jedoch den Einfluss der Kernladung unabhängig von dem der Magnetfeldstärke untersuchen zu können, wurden alle drei Elemente bei gleicher Magnetfeldstärke betrachtet, da das Ziel die Suche nach generellen Tendenzen und Mustern ist. Die Energien und Wellenfunktionen der gebundenen Zustände wurden zur Kontrolle auch ohne adiabatische Näherung gerechnet, genauer gesagt wurden die Wellenfunktionen in den Landauniveaus bis $n = 7$ entwickelt, siehe [14]. Gebundene Wel-

lenfunktionen in adiabatischer Näherung sind umso exakter, je größer die Knotenzahl beziehungsweise je kleiner die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe. Daher wird die ungebundene Wellenfunktion, welche in Kernnähe eine geringere Aufenthaltswahrscheinlichkeit als für große z besitzt, in adiabatischer Näherung sehr genau bestimmt.

Die nicht adiabatische Rechnung hat ergeben, dass der Wirkungsquerschnitt aufgrund der Verteilung auf die verschiedenen Landau-Niveaus insgesamt etwas niedriger ist als hier gezeigt und wegen der größeren Bindungsenergie des Elektrons $(0,0)_i$ bei leicht höheren Energien liegt. Diese Abweichungen liegen jedoch jeweils bei unter 20 Prozent. Daher stellen die gezeigten Wellenfunktionen und Einzelwirkungsquerschnitte für Eisen zwar nur eine Näherung dar, reichen aber auf jeden Fall aus, um die Tendenzen aus der Analyse von Helium und heliumähnlichen Sauerstoffionen zu bestätigen.

6.1.4. Verschiedene Magnetfeldstärken

In diesem Abschnitt untersuchen wir den Einfluss der Magnetfeldstärke auf die Einzelwirkungsquerschnitte. Dabei betrachten wir zunächst die Terme, in denen nur gebundene Elektronen auftauchen. Die Änderung der gebundenen Wellenfunktionen mit steigendem Magnetfeld verläuft bei Anfangs- und Endzustand mehr oder minder analog. Deren Überlapp wird somit nur geringfügig von der Magnetfeldstärke beeinflusst, weswegen wir für den Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ den Minor nicht näher untersuchen. Dies ist auf jeden Fall gerechtfertigt, wenn es hauptsächlich um die Frage geht, ob der Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ um Größenordnungen kleiner bleibt und nicht um dessen exakte Berechnung.

Wie wir bereits im vorigen Abschnitt gesehen haben wirkt sich eine Änderung des Potentials auf die ungebundene Wellenfunktion anders aus als auf die gebundenen. Beim Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ interessiert uns also vor allem die Änderung des Dipolmatrixelementes mit steigender Magnetfeldstärke. Die Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement sind für Helium bei vier verschiedenen Magnetfeldstärken in Abbildung 6.16 aufgetragen. Generell kann man feststellen, dass das Dipolmatrixelement für alle vier Magnetfeldstärken große Werte annimmt, der Übergang behält also über einen weiten Magnetfeldbereich hinweg hohe Wirkungsquerschnitte.

Gleiches gilt für heliumähnliche Eisenionen, die ebenfalls für vier verschiedene Magnetfeldstärken betrachtet werden, siehe Abbildung 6.17. Auch hier ergibt sich durchweg ein großer Überlapp, also ein hoher Wirkungsquerschnitt. Untersuchen wir jedoch das Verhalten der ungebundenen Wellenfunktion mit steigendem Magnetfeld genauer, so stellen wir fest, dass diese von der Kernladungszahl abhängt: Bei Helium wird die Amplitude der ungebundenen Wellenfunktion mit zunehmender Magnetfeldstärke immer größer, während sich der Nulldurchgang zu immer größeren z -Werten hin verschiebt.

Anders liegt der Fall bei heliumähnlichen Eisenionen: Dort nimmt die Amplitude mit steigendem Magnetfeld ab und der Nulldurchgang findet bei immer kleinerem z statt, Um dieses unterschiedliche Verhalten verstehen zu können überlegen wir uns, wie sich die jeweiligen Potentiale mit der Magnetfeldstärke ändern. Den größten Beitrag liefert

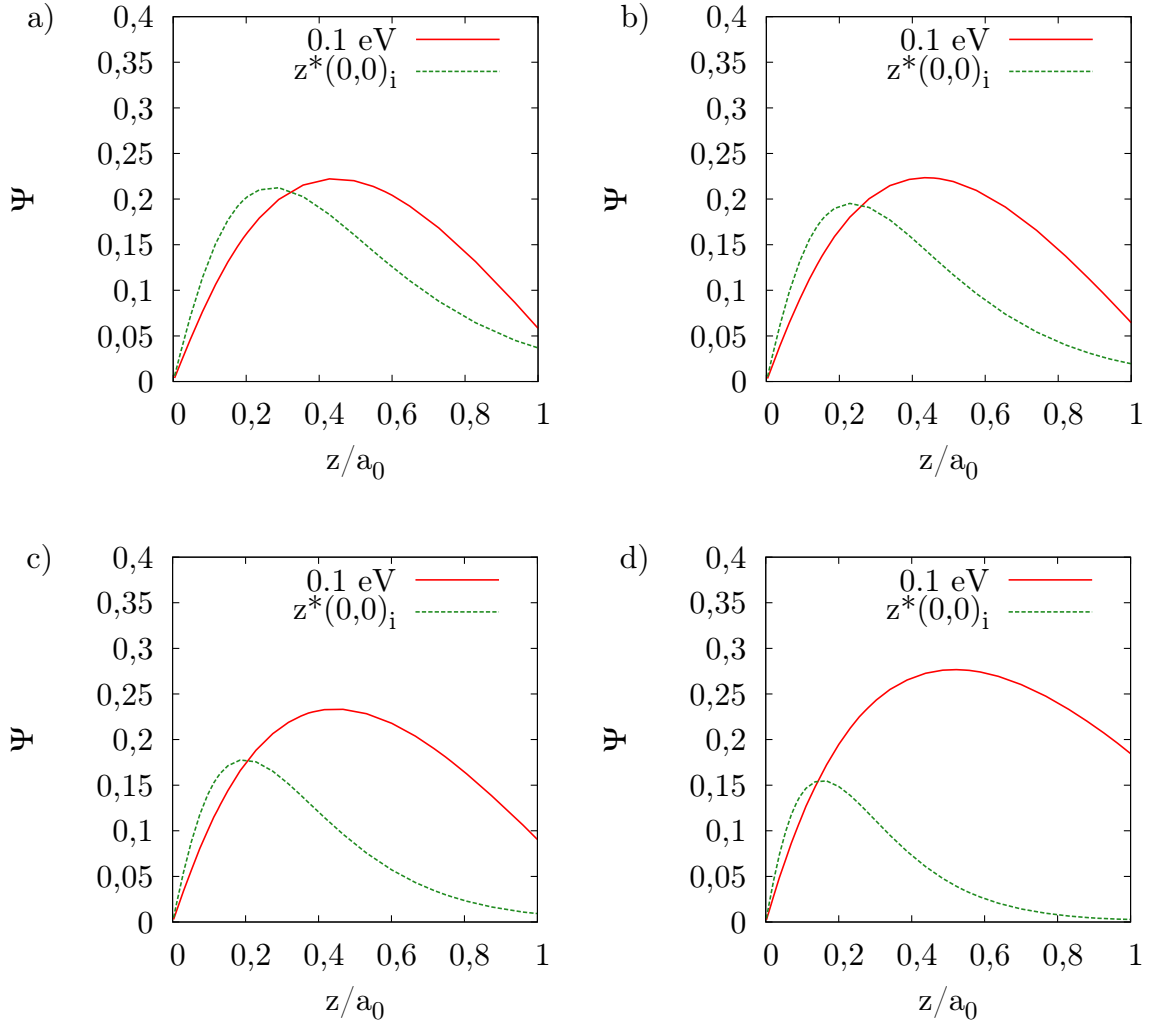


Abb. 6.16.: Helium: Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ bei a) $\beta = 100$, b) $\beta \approx 212$, c) $\beta = 500$, und d) $\beta = 2000$.

das Kernpotential. Dieses skaliert in folgender Weise mit β (siehe [12]):

$$V_m = \sqrt{\beta} \tilde{V}_m \left(\sqrt{\beta} z \right). \quad (6.3)$$

Bei \tilde{V}_m handelt es sich um das Kernpotential für $\beta = 1$. Die Änderung des Potentials hängt damit stark von seiner Form ab, genauer gesagt davon wie steil der Anstieg des Potentials im jeweiligen Bereich ist. Durch diese Skalierungseigenschaft haben wir mit zunehmendem Magnetfeld für kleine z ein tieferes Kernpotential, für große z hingegen ein flacheres. Für Eisenionen resultiert dies in einem tieferen Potential im Bereich bis

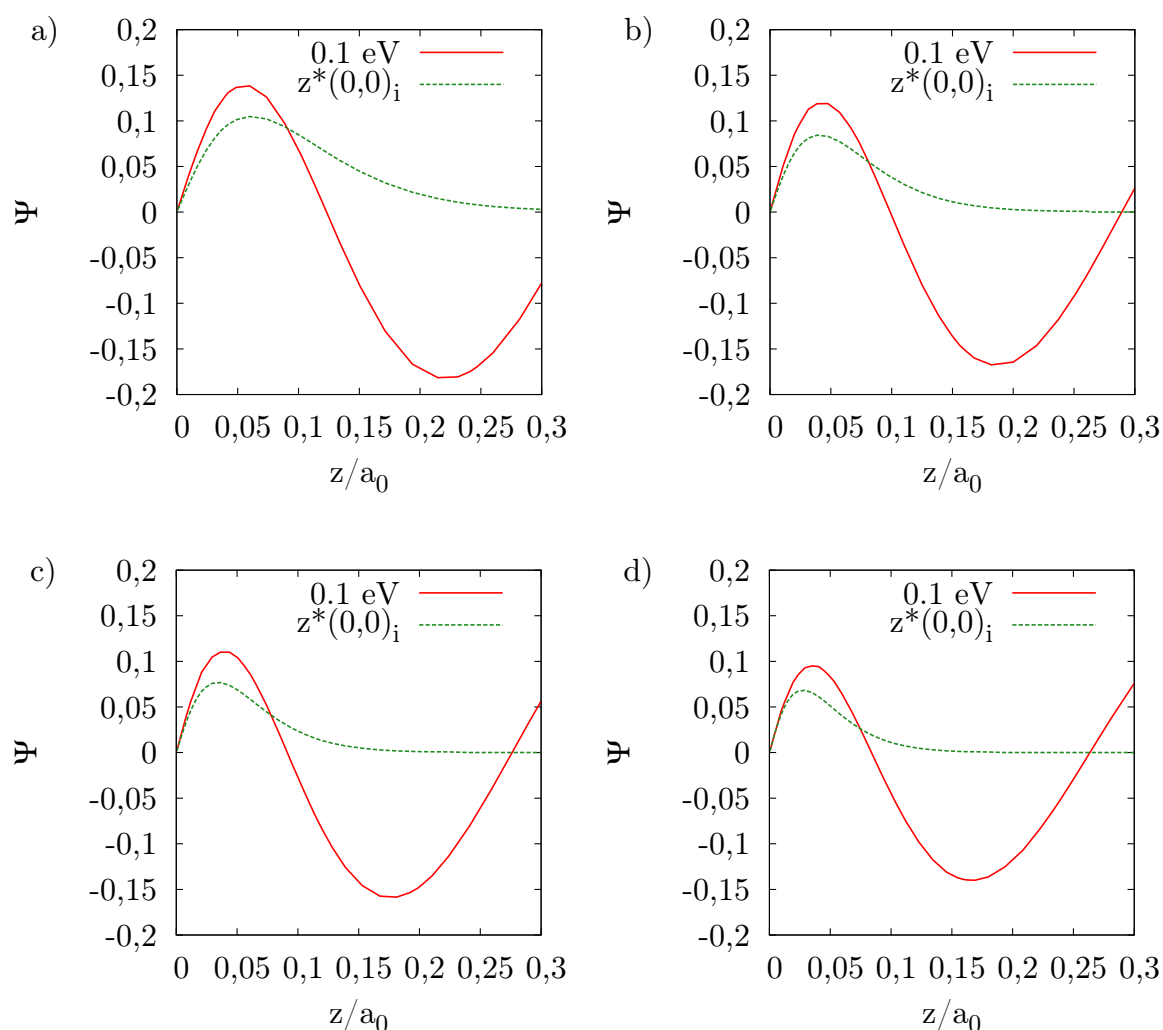


Abb. 6.17.: Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für heliumähnliche Eisenionen bei a) $\beta \approx 212$, b) $\beta = 1000$, c) $\beta = 2000$, und d) $\beta = 5000$.

zum ersten Nulldurchgang, dieser verschiebt sich also zu kleinerem z . Bei Helium liegt der erste Nulldurchgang bei vergleichsweise hohem z , das Potential wird dort durch die Erhöhung der Magnetfeldstärke flacher und der Nulldurchgang verschiebt sich mit zunehmender Magnetfeldstärke zu größerem z .

Die Änderung der ungebundenen Wellenfunktion mit dem Magnetfeld hängt also stark vom ursprünglichen Potential ab. Außerdem spielt die Energie der ungebundenen Wellenfunktion eine wichtige Rolle, da diese Einfluss auf die Wellenlänge beziehungsweise den z -Wert des ersten Nulldurchgangs hat. Insgesamt ergibt sich je nach Kernladungszahl und Energie des ungebundenen Elektrons ein anderes Verhalten.

Dieses Verhalten hat jedoch keinen drastischen Einfluss auf die Größe des Dipolmatrixelementes. Sowohl für Helium als auch für Eisenionen bleibt der Wirkungsquerschnitt ähnlich groß für die verschiedenen Magnetfeldstärken, siehe Abbildungen 6.18 und 6.19. In beiden Fällen verschieben sich die Wirkungsquerschnitte mit steigendem β zu höheren Energien, der Anfangswert sinkt leicht. Es bleibt also festzuhalten, dass der Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ auch für einen großen Magnetfeldbereich hohe Wirkungsquerschnitte aufweist.

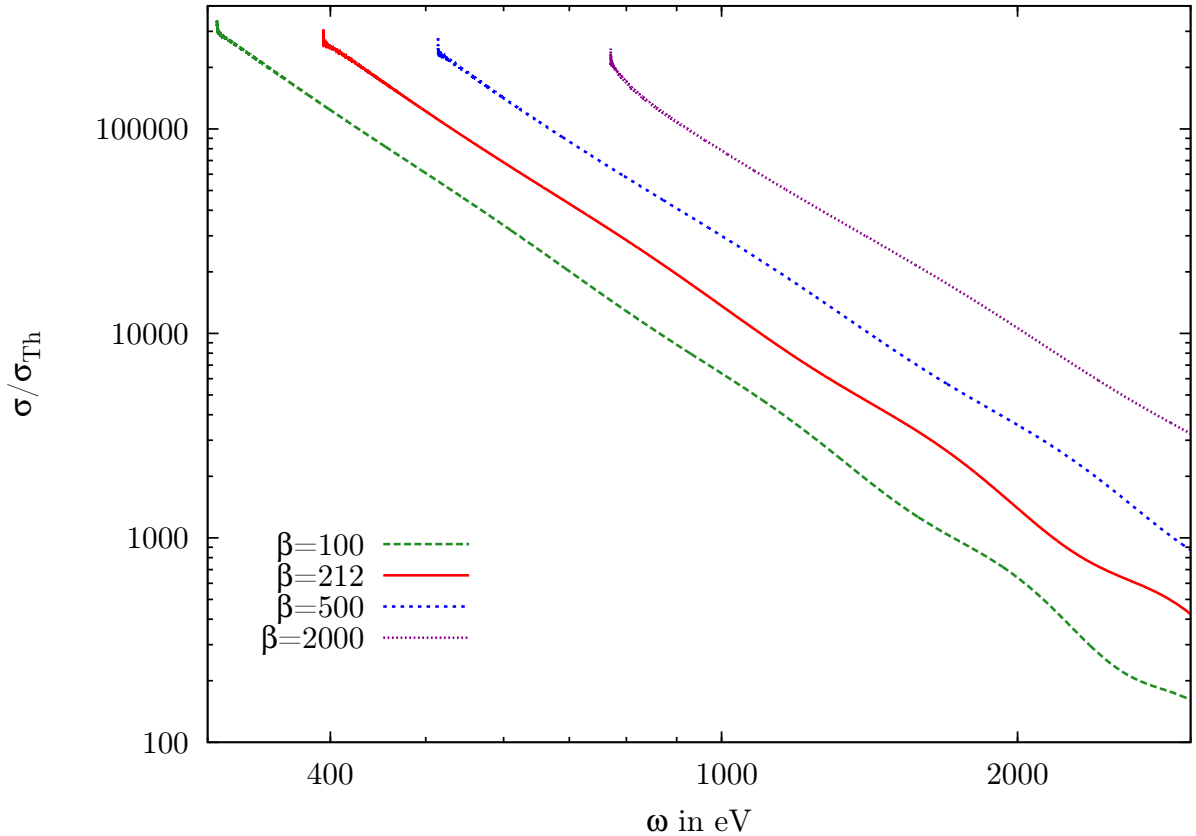


Abb. 6.18.: Helium: Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ bei vier verschiedenen Magnetfeldstärken, die Ionisationsschwellen betragen 306,6 eV, 393,4 eV, 512,6 eV beziehungsweise 771,3 eV.

Für den Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ nehmen wir genauso an, dass sich beim Überlapp der gebundenen Wellenfunktionen keine große Änderungen ergeben. Dementsprechend ändert sich das Dipolmatrixelement mit den gebundenen Wellenfunktionen nur geringfügig und wir müssten nur das Überlappintegral betrachten. Auch bei diesem Übergang bestätigt sich die bisherige Tendenz: Die Wirkungsquerschnitte starten bei ähnlich hohen Werten und fallen dann schnell auf null ab. Sie verschieben sich jedoch

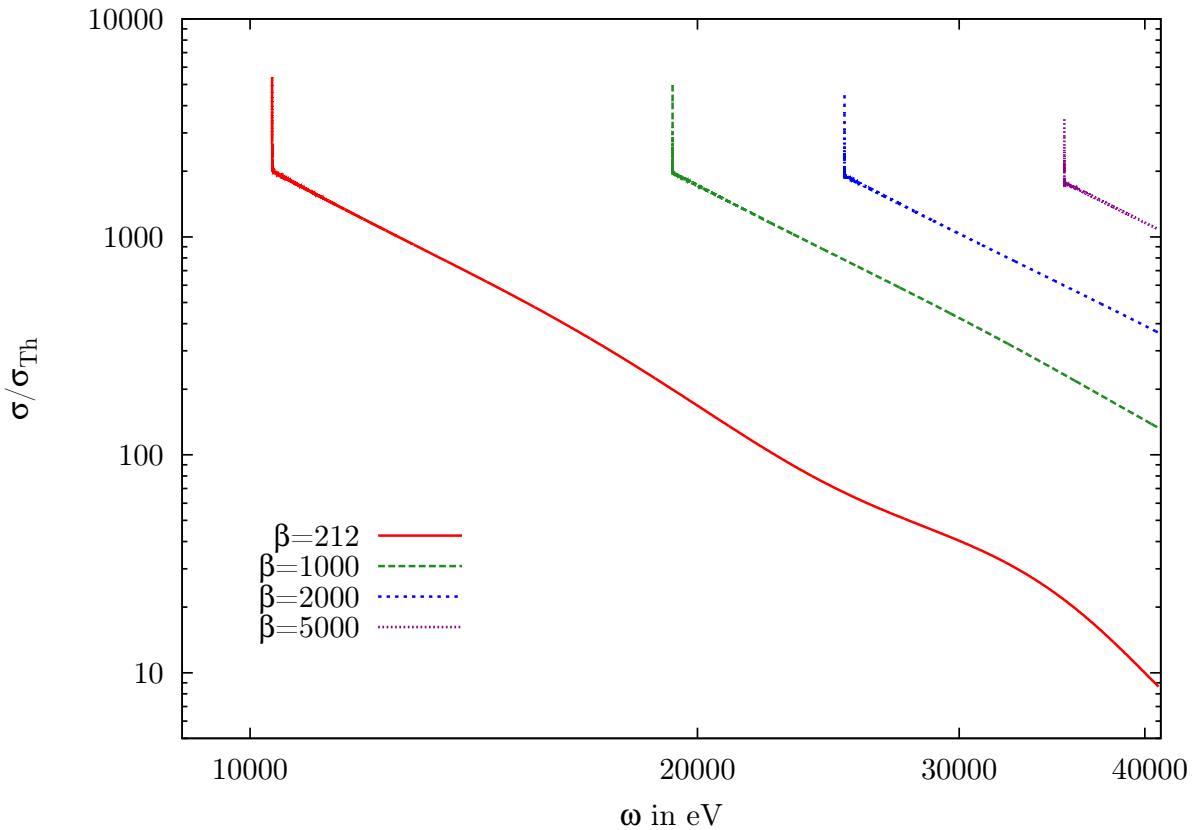


Abb. 6.19.: Heliumähnliche Eisenionen: Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ bei vier verschiedenen Magnetfeldstärken, die Ionisationsschwellen betragen 10347 eV, 19240 eV, 25116 eV beziehungsweise 35311 eV.

mit steigender Magnetfeldstärke zu größeren Energien hin. Eine ausführliche Analyse der Wellenfunktionen und Wirkungsquerschnitte bringt dabei keine grundlegend neuen Erkenntnisse, weswegen wir hier nur exemplarisch die Wirkungsquerschnitte bei verschiedenen Magnetfeldstärken für heliumähnliche Eisenionen in Abbildung 6.20 zeigen.

Abschließend können wir konstatieren, dass der Übergang $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ für die in Frage kommenden Magnetfeldstärken und Kernladungszahlen vernachlässigbar gegenüber $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ ist. Diese Relation wollen wir für die Berechnung der Gesamtwirkungsquerschnitte in Kapitel 7 nutzen und auf größere Gruppen von Übergängen ausweiten. Dabei muss natürlich überprüft werden, ob die Relation auch für diese Gruppen unabhängig von Kernladung und Magnetfeldstärke gültig ist. Die Tatsache, dass dies bei Einzelwirkungsquerschnitten der Fall ist, kann jedoch als Indiz dafür gewertet werden.

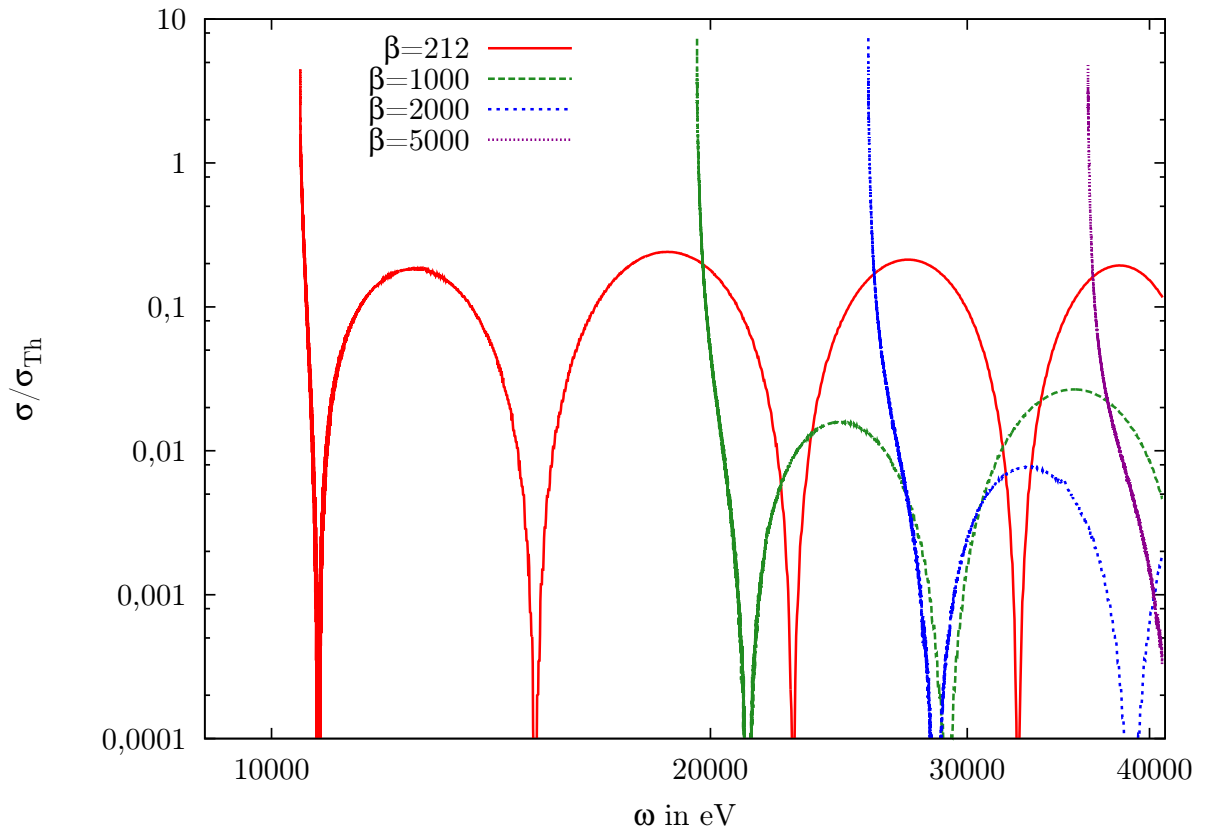


Abb. 6.20.: Heliumähnliche Eisenionen: Wirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ für den Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ bei vier verschiedenen Magnetfeldstärken, die Ionisationsschwellen betragen 10464 eV, 19583 eV, 25662 eV beziehungsweise 36312 eV.

7. Gesamtwirkungsquerschnitt

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf der Analyse der gebunden-frei-Übergänge von neutralem Helium und heliumähnlichen Ionen. In Kapitel 6 wurde untersucht, welchen Einfluss die Neutronensternparameter wie Temperatur oder Magnetfeldstärke auf Einzelwirkungsquerschnitte haben, welche Formen der Wellenfunktionen in den zugrunde liegenden Potentialen zustande kommen und wie sich aus diesen Wellenfunktionen wiederum der letztendlich vorliegende Wirkungsquerschnitt ergibt. Des Weiteren wurden exemplarisch die Einzelwirkungsquerschnitte zweier $\Delta M = 0$ -Übergänge mit verschiedener Symmetrie der ungebundenen Wellenfunktion verglichen, wobei sich der eine als vernachlässigbar klein herausgestellt hat.

In diesem Kapitel wollen wir darauf basierend die Übergänge nach ihrem Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt sortieren. Die aus Kapitel 6 gewonnenen Erkenntnisse sollen genutzt werden, um die Berechnung der Gesamtwirkungsquerschnitte von Mehrelektronensystemen zu vereinfachen beziehungsweise überhaupt erst zu ermöglichen, indem die Anzahl der zu berechnenden Einzelwirkungsquerschnitte deutlich reduziert wird. Dazu werden der Gesamtwirkungsquerschnitt von Helium und heliumähnlichen Sauerstoffionen analysiert und miteinander verglichen.

Beide Gesamtwirkungsquerschnitte werden separat untersucht, und die Übergänge nach Quantenzahlen aufgeteilt, um den Beitrag der einzelnen Anteile zum Gesamtwirkungsquerschnitt zu bestimmen. Dies klärt zum einen die Frage, ob die Ergebnisse aus Kapitel 6 auf ganze Gruppen von Übergängen übertragbar sind, zum anderen können weitere Erkenntnisse darüber gewonnen werden, in welchen Energiebereichen welche Übergänge dominieren.

Der Gesamtwirkungsquerschnitt von heliumähnlichen Eisenionen wird nicht betrachtet. Für einen großen Teil der Übergänge beginnt der Wirkungsquerschnitt erst bei einigen keV, also energetisch oberhalb der uns interessierenden Strukturen in Emissionsspektren. Außerdem ist so stark ionisiertes Eisen nur mit äußerst geringer Wahrscheinlichkeit in der Atmosphäre vorzufinden, hierzu ist die Temperatur zu gering. Auch in [7] wurde eine Eisenatmosphäre für den Neutronenstern 1E 1207 ausgeschlossen.

Die temperaturabhängige Auswirkung von Photonendichte und Besetzung der Ausgangszustände auf den Gesamtwirkungsquerschnitt wird in den Abschnitten 7.3 und 7.4 behandelt. Zunächst wollen wir jedoch in Abschnitt 7.1 auf die Anzahl der zu berechnenden Einzelwirkungsquerschnitte beziehungsweise die möglichen Übergänge je nach Elektronenzahl eingehen. Anschließend behandeln wir in Abschnitt 7.2 kurz die bei der Berechnung der ungebundenen Wellenfunktion auftretenden Konvergenzprobleme. Nach

diesen Betrachtungen folgt die ausführliche Analyse der Wirkungsquerschnitte von Helium und heliumähnlichen Sauerstoffionen in den Abschnitten 7.5 und 7.6.

7.1. Anzahl der Zustände

Um eine grobe Übersicht über die Größenordnung der zu berechnenden Übergänge zu vermitteln betrachten wir den Wirkungsquerschnitt von Helium. Für die Summe der magnetischen Quantenzahlen $M = \sum_i m_i = 0$ und $M = -1$ der Anfangszustände sind die Übergänge für linear polarisierte Strahlung in Abbildung 7.1 aufgetragen.

Für $M = 0$ besitzen beide Elektronen die magnetische Quantenzahl $m_1 = m_2 = 0$ und es gibt jeweils drei mögliche Ausgangs- und Endzustände, also neun Übergänge. Für $M = -1$ hat ein Elektron die Quantenzahl $m = 0$, das andere $m = -1$ und es gibt neun mögliche Anfangs- und sechs Endzustände, also 54 Übergänge. Es müssen jedoch nicht alle Übergänge berücksichtigt werden: Diejenigen mit negativer Ionisationsschwelle können unter Emission eines Photons stattfinden und werden bei der Berechnung des Gesamtwirkungsquerschnitts nicht berücksichtigt. In Abbildung 7.1 sind solche Übergänge gepunktet statt mit durchgezogener Linie dargestellt.

Die Anzahl der Übergänge für andere M lassen sich leicht berechnen. Für $M = -2$ beispielsweise können die magnetischen Quantenzahlen der Elektronen $m = 0$ und $m = -2$ betragen oder $m_1 = m_2 = -1$. Im ersten Fall gibt es wieder 54 Übergänge, im zweiten neun, also zusammen 63. Nach diesem Schema können wir die Anzahl der Übergänge für ein beliebiges M berechnen, indem wir die möglichen Kombinationen der Quantenzahlen m_1 und m_2 bestimmen.

Mit den bereits erwähnten Einschränkungen der Quantenzahlen ($m \leq 200$, $\nu \leq 2$) liegt die Gesamtzahl der Ausgangszustände bei etwa 180000, die der Endzustände bei rund 600. Die Zahl der zum Gesamtwirkungsquerschnitt beitragenden Übergänge lässt sich mit dem oben erwähnten Schema berechnen und liegt für linear polarisierte Strahlung bei etwas mehr als einer Million.

Die Anzahl der Ausgangszustände und damit auch der Übergänge wird natürlich deutlich reduziert, wenn wir den Einfluss der finiten Kernmasse oder der Stoßionisation berücksichtigen, siehe Abschnitt 5.2. Allerdings muss die Auswirkung der finiten Kernmasse erst noch genau untersucht und in die Berechnung der Energieniveaus einbezogen werden. Bei den „autoionisierenden“ Zuständen müsste man außerdem untersuchen, wie sich die Energieniveaus bei der adiabatischen Näherung gegenüber der Entwicklung in den Landauniveaus verschieben. Ein Zustand, der in adiabatischer Näherung knapp oberhalb der Autoionisationsschwelle liegt, könnte bei nicht adiabatischer Rechnung knapp unterhalb dieser Schwelle liegen und umgekehrt. Da wir das Ziel verfolgen, atomare Rohdaten zur Verfügung zu stellen, berücksichtigen wir alle denkbaren Ausgangszustände unabhängig von ihrer Energie. Dies hat außerdem den Vorteil, dass der Vergleich zwischen Helium und heliumähnlichen Sauerstoffionen bei gleicher Anzahl an Übergängen getroffen wird und nicht zusätzlich noch von der Zahl der „autoionisierenden“ Zustände

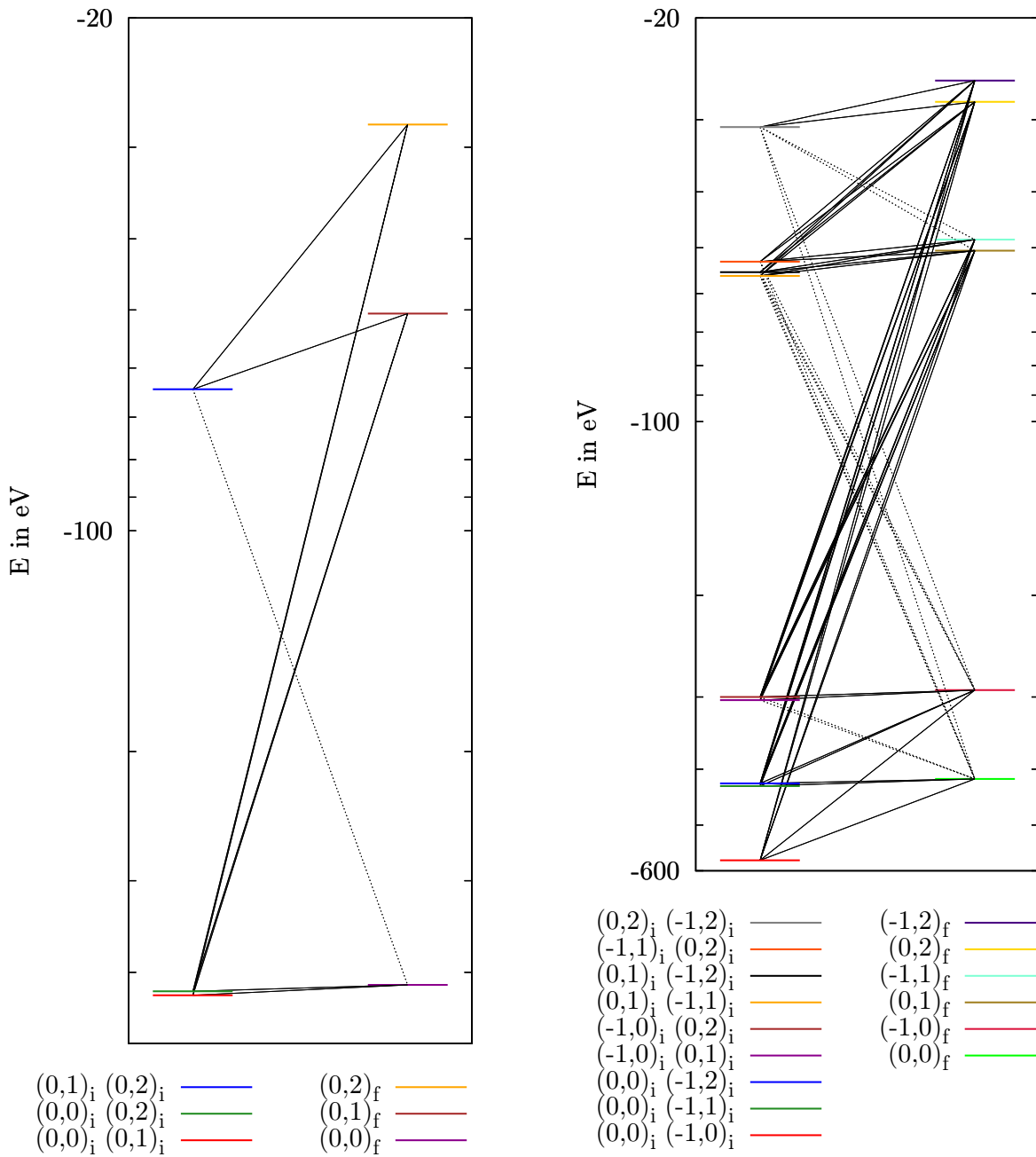


Abb. 7.1.: Helium: Termschema der Ausgangs- und Endzustände sowie sämtliche Übergänge für $M = 0$ (links) und $M = -1$ (rechts) für linear polarisierte Strahlung, gestrichelte Linien stehen für Übergänge mit negativer Ionisationsschwelle, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

abhängt.

Bei der Photoionisation von Atomen und Ionen mit drei Elektronen erhöht sich die Zahl der Ausgangs- und Endzustände drastisch. Hier stellt bereits die Zusammenstellung aller möglichen Übergänge aus diesen Zuständen eine numerische Herausforderung dar. Deren Berechnung ist selbst mit Hilfe von Rechenclustern zur Zeit nicht möglich.

Ohne ein sinnvolles Schema zum Herausfiltern der vernachlässigbaren Übergänge ist also eine Berechnung von Wirkungsquerschnitten für Atome und Ionen mit drei und mehr Elektronen nicht möglich. Vorgreifend sei hier bereits erwähnt, dass die folgenden Analysen zur Lösung dieses Problems beitragen: Zum einen kann man die Zahl der Ausgangszustände reduzieren, indem man jene mit zu geringer Besetzung vernachlässigt. Zum anderen verringern die aus den Zweielektronensystemen gewonnenen Erkenntnisse die Anzahl der benötigten Übergänge weiter, da gewisse Kombinationen von Quantenzahlen zu großen, andere zu um Größenordnungen kleineren Wirkungsquerschnitten führen. Bei sechsfach ionisiertem Sauerstoff beispielsweise ist unabhängig von der Polarisation eine dreistellige Anzahl Übergänge ausreichend, um den Gesamtwirkungsquerschnitt abzubilden, der sich mit den gewählten Einschränkungen der Quantenzahlen sonst aus über einer Million Übergängen zusammensetzt. Darin sind im Übrigen auch keine Übergänge aus „autoionisierenden“ Anfangszuständen mehr enthalten.

7.2. Konvergenz der ungebundenen Wellenfunktion

Bei einigen Endzuständen traten bei der Berechnung der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons für niedrige Energien Konvergenzprobleme auf. Die Ursache liegt nicht ausschließlich in der Numerik sondern hat auch einen physikalischen Grund. Bei hoch angeregten Zuständen ist das gebundene Elektron im Vergleich zu tightly-bound Zuständen weit entfernt vom Kern und erzeugt dort ein größeres abstoßendes Potential als das bindende Kernpotential. Damit ragt deren Summe in den positiven Energiebereich hinein, was zu erheblichen Problemen bei der Berechnung der ungebundenen Wellenfunktion führt, solange die Energie des ungebundenen Elektrons nicht oberhalb des Potentialbergs liegt.

Das Potential ist abgesehen von der Austauschwechselwirkung fest, da das gebundene Elektron in unserer Näherung unbeeinflusst vom ungebundenen ist, siehe Abschnitt 4.1. Die veränderliche Austauschwechselwirkung reicht zwar meist aus, um entweder das Potential der symmetrischen oder der antisymmetrischen Wellenfunktion wieder in den negativen Energiebereich zu bringen, aber nicht beide.

Somit müssen einige Zustände mit positiver Energie zunächst durch den Potentialberg hindurchtunneln, um ungebunden zu werden. Dies zu berechnen ist numerisch höchst anspruchsvoll. Hinzu kommt die Frage der Normierung, da gebundene und ungebundene Zustände anders normiert sind.

Ein Potential wollen wir beispielhaft zeigen, an dem dieses Phänomen gut zu sehen ist (siehe Abbildung 7.2). Das Gesamtpotential setzt sich zusammen aus der Summe von

Kern- und direkter Elektron-Elektron-Wechselwirkung (rote Kurve) und der jeweiligen Austauschwechselwirkung (grüne beziehungsweise blaue Kurve). Die Gesamtpotentiale sind in Abbildung 7.3 dargestellt.

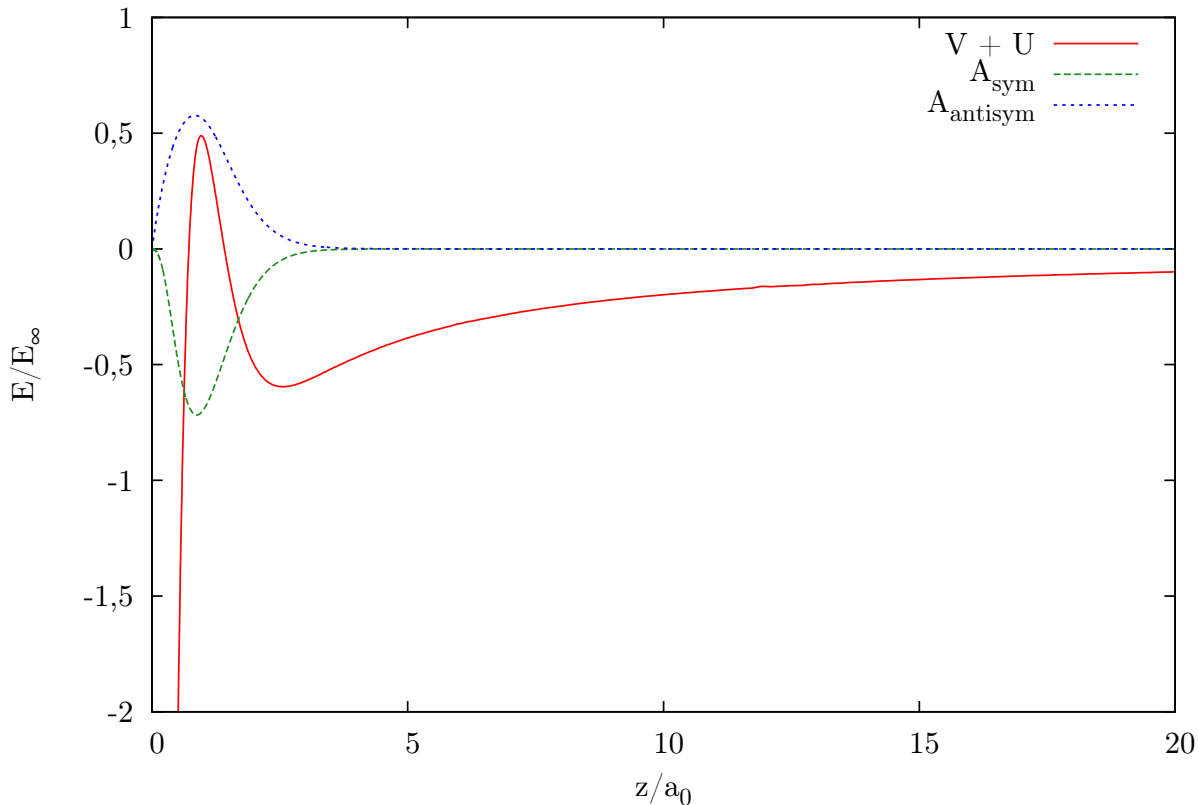


Abb. 7.2.: Helium, Endzustand $(m_1 = 0, \nu = 1)(m_2 = 0)$, $B = 10^8$ T: Potentiale der Austauschwechselwirkung für die symmetrische (A_{sym}) und antisymmetrische (A_{antisym}) ungebundene Wellenfunktion sowie das Potential der Summe von Kern- (V) und direkter Elektron-Elektron-Wechselwirkung (U).

Man sieht, dass das Gesamtpotential für die symmetrische ungebundene Wellenfunktion komplett im negativen Bereich liegt. Diese kann somit problemlos berechnet werden. Anders sieht es beim Potential für die antisymmetrische Wellenfunktion aus, dieses ragt in den positiven Energiebereich hinein. Für z -Werte, bei denen das Potential über der Energie des ungebundenen Elektrons liegt, fällt die Wellenfunktion exponentiell ab. Die größte Aufenthaltswahrscheinlichkeit hat das Elektron damit in Kernnähe, was über das Austauschpotential eine starke Rückwirkung auf das Gesamtpotential zur Folge hat. Deswegen stellt sich keine Konvergenz ein und die Wellenfunktion kann für kleine Energien vom Programm nicht berechnet werden.

Bei Helium trat dieses Konvergenzproblem bei einigen hundert Übergängen auf, bei

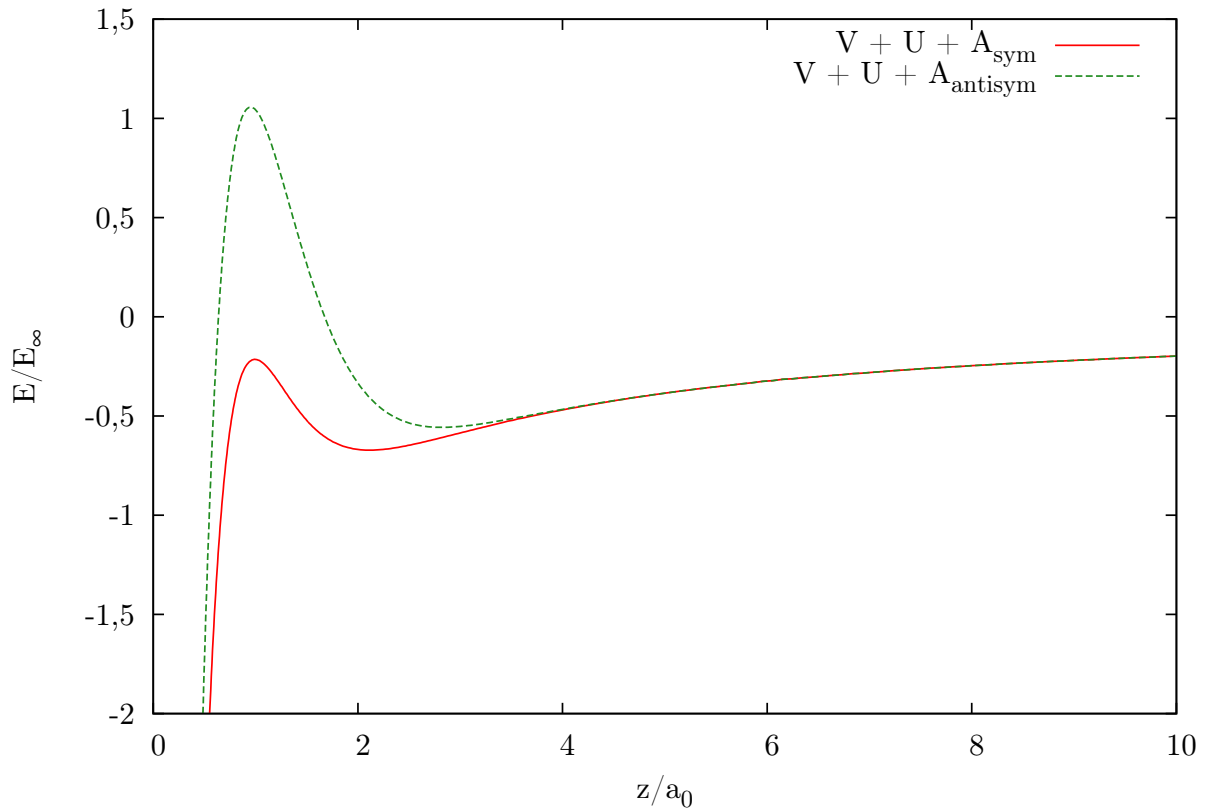


Abb. 7.3.: Helium, Endzustand $(m_1 = 0, \nu = 1)(m_2 = 0)$, $B = 10^8$ T: Gesamtpotentiale für die symmetrische (rot) und antisymmetrische (grün) ungebundene Wellenfunktion.

heliumähnlichem Sauerstoff nur vereinzelt bei sehr wenigen Übergängen. Der Grund für die unterschiedliche Anzahl an Konvergenzproblemen bei den beiden Elementen ist leicht zu finden: Das Kernpotential ist beim Sauerstoff aufgrund der viermal größeren Kernladung auch viermal so tief. Zusätzlich ist auch die Ausdehnung der hochangeregten gebundenen Zustände geringer. Wir haben bei den Sauerstoffionen also generell ein tieferes Kernpotential, und das Maximum der Elektron-Elektron-Wechselwirkung befindet sich bei kleineren z -Werten, bei denen das Kernpotential nochmal entsprechend tiefer ist. Dadurch stellt ein lokaler Anstieg des Gesamtpotentials ins Positive die absolute Ausnahme dar.

Da der größte Teil der Endzustände konvergiert und selbst bei den „Problemfällen“ ab einer gewissen Energie Konvergenz erreicht wird, werden hierdurch keine Endzustände komplett ausgeschlossen. Der Potentialberg ist üblicherweise nicht allzu hoch, wodurch die Wellenfunktionen nur für einen sehr kleinen Energiebereich fehlen, maximal im zweistelligen eV-Bereich. Beim oben gezeigten Übergang hat dieser Potentialberg

eine Höhe von etwas mehr als einem Rydberg, also etwa 15 eV. Ungebundene Wellenfunktionen oberhalb dieser Energie können ohne Probleme berechnet werden. Der Einfluss beschränkt sich also darauf, dass bei wenigen Einzelwirkungsquerschnitten ein sehr kleiner Teil nicht berechnet werden kann. Somit haben die Konvergenzprobleme keine nennenswerte Auswirkung auf den Gesamtwirkungsquerschnitt.

Auch bei Mehrelektronensystemen dürften diese Konvergenzprobleme nicht in großer Zahl auftreten, da hauptsächlich Zustände betroffen sind, bei denen das ungebundene Elektron die gleiche magnetische Quantenzahl wie ein gebundenes mit Knotenzahl $\nu > 0$ besitzt. Selbst wenn im Endzustand zwei solche Elektronen auftreten, stellt dies bei hohen Kernladungszahlen kein Problem dar.

7.3. Einbeziehung der Besetzungswahrscheinlichkeit

Die Besetzung der Ausgangszustände hat erhebliche Auswirkungen auf den Gesamtwirkungsquerschnitt. Je nach Temperatur in der Neutronensternatmosphäre ergibt sich ein quantitativ aber auch qualitativ unterschiedliches Bild. Die Einzelwirkungsquerschnitte der Übergänge werden, wie bereits in Abschnitt 5.1 erwähnt, mit dem Boltzmannfaktor des Anfangszustandes multipliziert. Dieser hängt von der Temperatur der Neutronensternatmosphäre ab. Wir haben analog zu [7] die thermische Energie $k_B T$ als 150 eV angenommen, jedoch zusätzlich sämtliche Wirkungsquerschnitte bei 300 eV berechnet, was die obere Grenze des möglichen Temperaturbereichs darstellt. Dies entspricht Temperaturen von $1,74 \times 10^6$ K beziehungsweise $3,48 \times 10^6$ K.

Um den Einfluss der Temperatur auf den Gesamtwirkungsquerschnitt zu untersuchen ist außerdem noch der ungewichtete Wirkungsquerschnitt interessant, welcher dem bei unendlicher thermischer Energie entspricht und somit die Obergrenze darstellt. Der Wirkungsquerschnitt ohne thermische Energie dient als Untergrenze. Abbildung 7.4 zeigt den Gesamtwirkungsquerschnitt von Helium ohne thermische Gewichtung, mit 300 eV, 150 eV und 0 eV thermischer Energie.

Für den Gesamtwirkungsquerschnitt mit 0 eV thermischer Energie wurde selbstverständlich kein Boltzmannfaktor berechnet, als Ausgangszustand kommt lediglich der Grundzustand in Frage. Sowohl für Helium als auch für heliumähnliche Sauerstoffionen ist der Grundzustand derjenige mit den Quantenzahlen $m_1 = 0$, $\nu_1 = 0$, $m_2 = 1$, $\nu_2 = 0$.

Abgesehen vom Gesamtwirkungsquerschnitt mit 0 eV thermischer Energie ähneln sich die Kurven, mit sinkender thermischer Energie nimmt der Wirkungsquerschnitt unterhalb der Übergangsenergie 100 eV am stärksten ab, während der Peak bei gut 400 eV Übergangsenergie immer stärker ausgeprägt wird. Es sind jedoch bei allen drei Kurven ähnliche Muster zu erkennen. Der Wirkungsquerschnitt mit 0 eV thermischer Energie besitzt zwei Peaks, von denen sich nur einer auch bei den anderen drei Kurven abzeichnet. Die thermische Energie ist bei diesen also groß genug, dass auch viele angeregte Zustände besetzt sind, die dann den Gesamtwirkungsquerschnitt maßgeblich beeinflussen. Eine genauere Analyse folgt in Abschnitt 7.5.

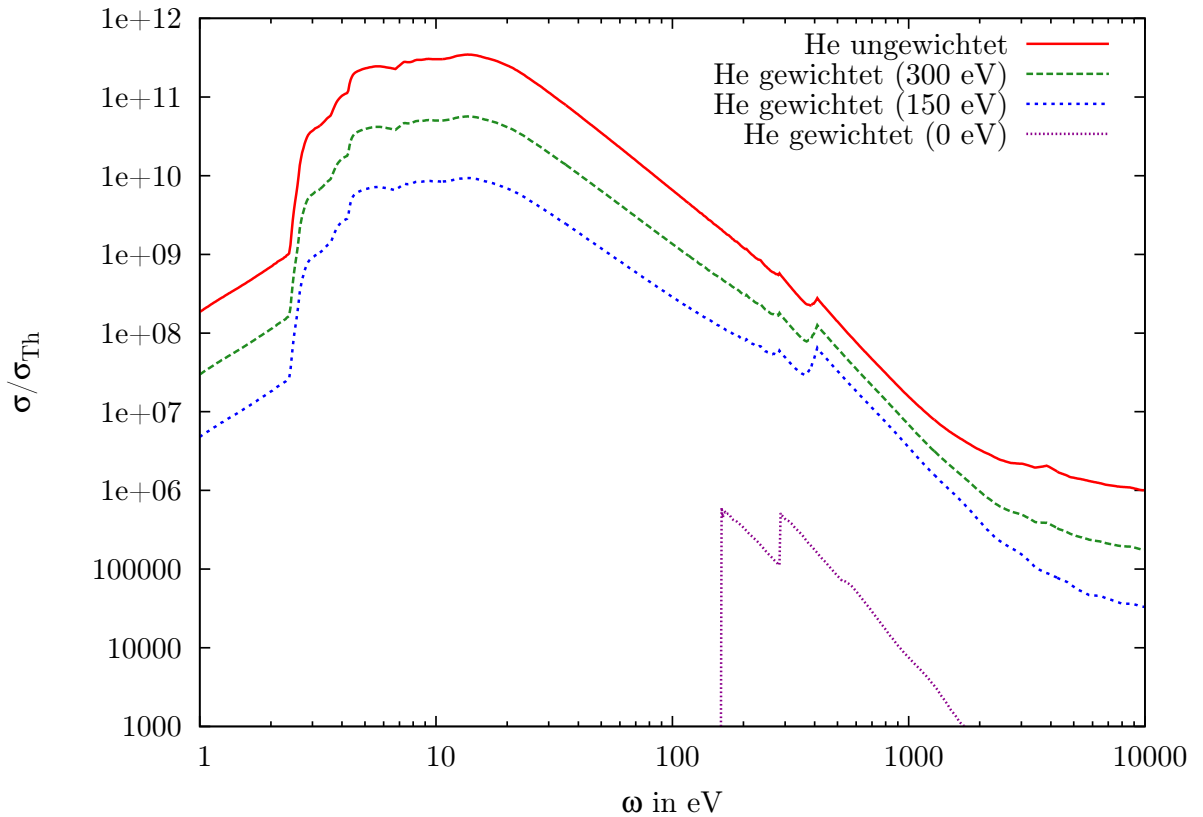


Abb. 7.4.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt mit Besetzungswahrscheinlichkeit für verschiedene thermische Energien bei linear polarisierter Strahlung mit Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Nach dem gleichen Muster wie bei Helium ist in Abbildung 7.5 der Gesamtwirkungsquerschnitt von heliumähnlichen Sauerstoffionen aufgetragen. Hier unterscheidet sich der Wirkungsquerschnitt ohne Gewichtung um Größenordnungen von den anderen dreien. Aufgrund der höheren Kernladungszahl sind die Elektronen stärker gebunden als bei Helium, die Anregungsenergien größer und die Besetzungswahrscheinlichkeiten angeregter Zustände damit geringer. Im Gegensatz zu Helium reicht die thermische Energie nicht aus, um angeregte Zustände in großem Maß zu besetzen, so dass beispielsweise für hohe Übergangsenergien der Gesamtwirkungsquerschnitt von Übergängen aus dem Grundzustand dominiert wird. Bei heliumähnlichen Sauerstoffionen ist also aufgrund der Besetzung der Ausgangszustände ein großer Teil der Übergänge vernachlässigbar, eine ausführliche Untersuchung des Gesamtwirkungsquerschnitts folgt in Abschnitt 7.6.

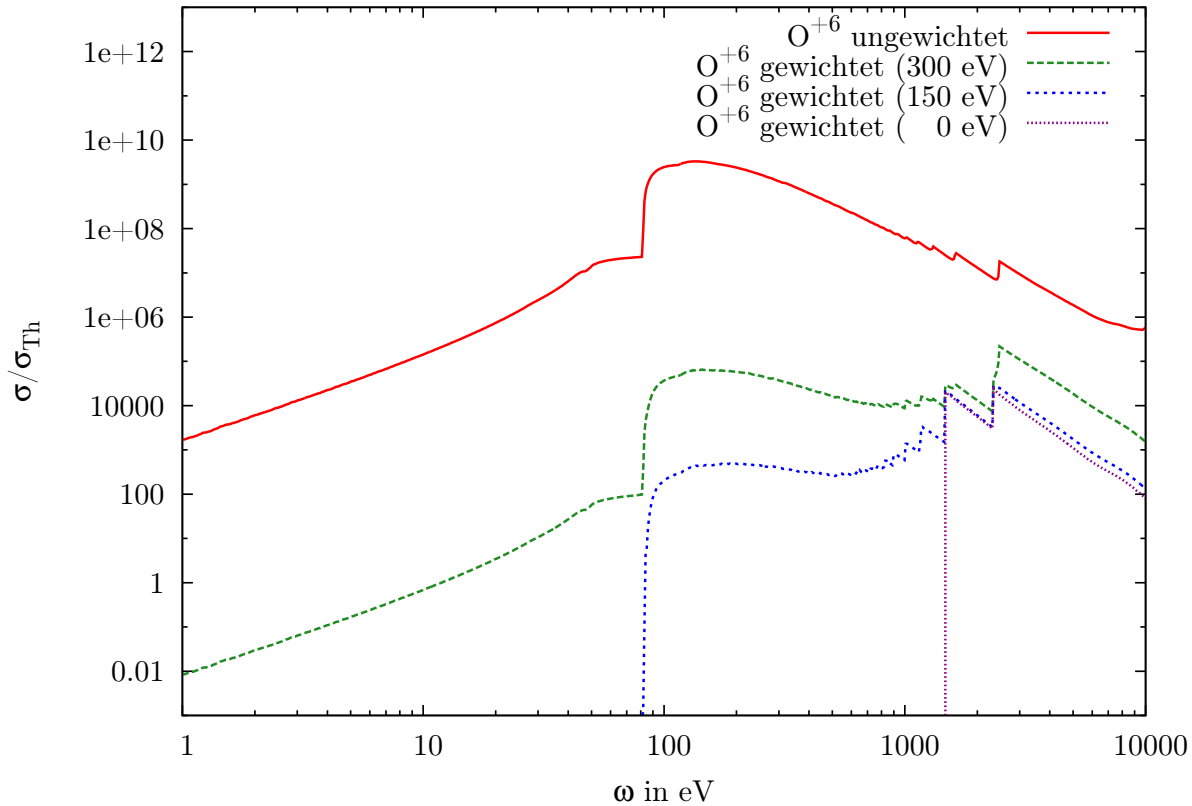


Abb. 7.5.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt mit Besetzungswahrscheinlichkeit für verschiedene thermische Energien bei linear polarisierter Strahlung mit Einfallswinkel $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

7.4. Einfluss der Photonendichte

Die Temperatur spielt nicht nur bei der Besetzung der Anfangszustände eine wichtige Rolle, sondern auch bei der Frage, ob ein Photon der benötigten Energie in der Neutronensternatmosphäre vorhanden ist. Die Einbeziehung der Photonendichte in unsere Rechnungen gestaltet sich sehr einfach, da diese nur von der Übergangsenergie und nicht wie bei der Besetzungswahrscheinlichkeit von der Energie einzelner Zustände abhängt. Der Gesamtwirkungsquerschnitt wird mit der Photonendichte multipliziert, welche in Abschnitt 4.3 hergeleitet wurde. In Abbildung 7.6 ist die Photonendichte aus Formel (4.50) für die zwei betrachteten Energien aufgezeichnet. Diese normierte Photonendichte stellt die Wahrscheinlichkeit dar, dass sich ein Photon mit der Energie ω im Volumenelement befindet.

Die Photonendichte bei 150 eV thermischer Energie hat bei einer Übergangsenergie von 300 eV ihr Maximum und fällt dann ab einer Übergangsenergie von circa 1000 eV exponentiell ab. Übergänge deutlich oberhalb dieser Übergangsenergie sind also eher

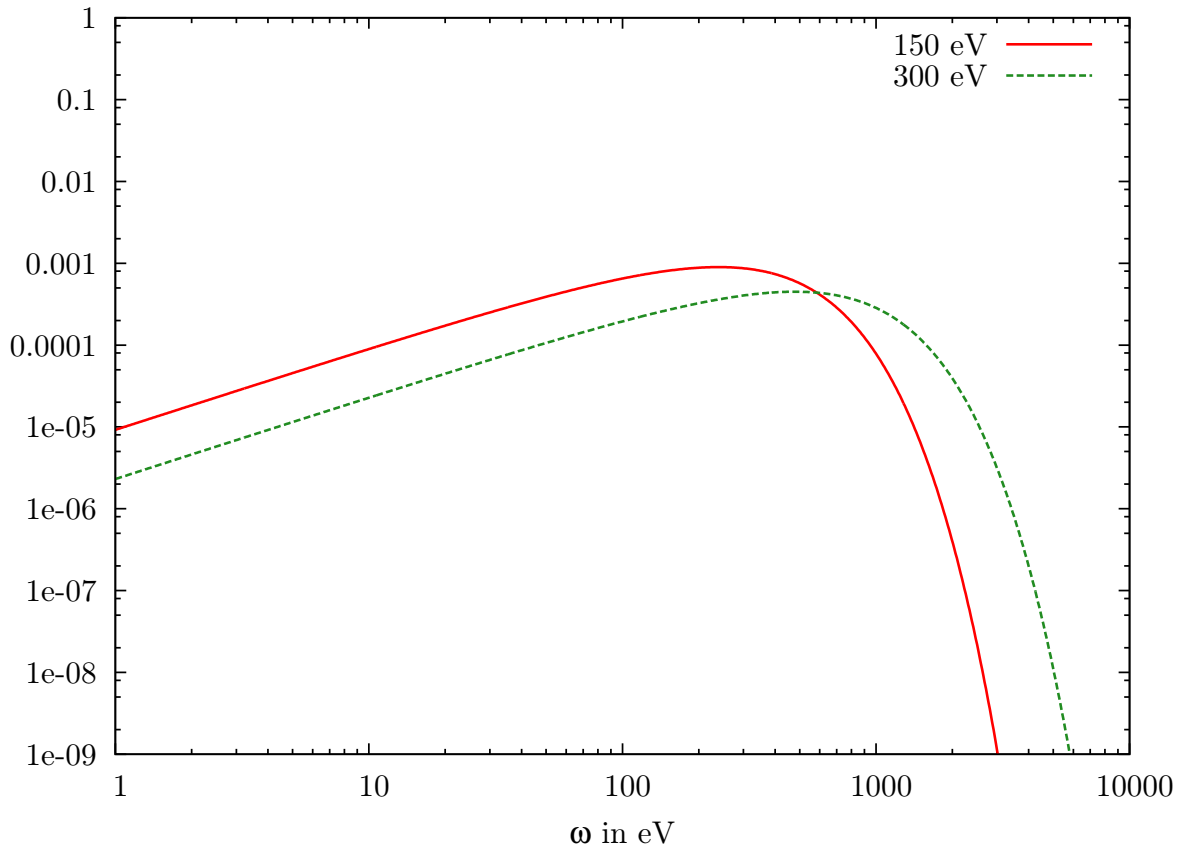


Abb. 7.6.: Photonendichte für zwei verschiedene thermische Energien.

unwahrscheinlich. Eine höhere Temperatur bedeutet natürlich auch eine größere Anzahl an energiereichen Photonen. Dementsprechend ist das Maximum der Photonendichte bei 300 eV thermischer Energie deutlich nach rechts verschoben und der starke exponentielle Abfall beginnt erst bei einer Übergangsenergie von rund 2000 eV.

Im Folgenden werden wir untersuchen, wie die Photonendichte den Wirkungsquerschnitt von Helium sowie von heliumähnlichen Sauerstoffionen beeinflusst. Zusätzlich ist in den Abbildungen nochmals die Änderung durch die Einbeziehung der Besetzung der Ausgangszustände aufgetragen. Damit ist die gesamte Auswirkung der Temperatur auf den Wirkungsquerschnitt besser nachvollziehbar. Den Einfluss von Besetzung und Photonendichte auf den Gesamtwirkungsquerschnitt von Helium ist für 150 eV in Abbildung 7.7 zu sehen, für 300 eV in Abbildung 7.8. Um die Auswirkung der verschiedenen Temperaturen besser zu sehen, ist beim Gesamtwirkungsquerschnitt für 300 eV thermische Energie zusätzlich noch der für 150 eV zum Vergleich eingezeichnet.

Bei Helium unterscheiden sich der Gesamtwirkungsquerschnitt bei 150 eV und bei 300 eV thermischer Energie nur geringfügig. Im Bereich kleiner Übergangsenergien bis 100 eV tragen viele Übergänge aus angeregten Zuständen zum Gesamtwirkungsquerschnitt

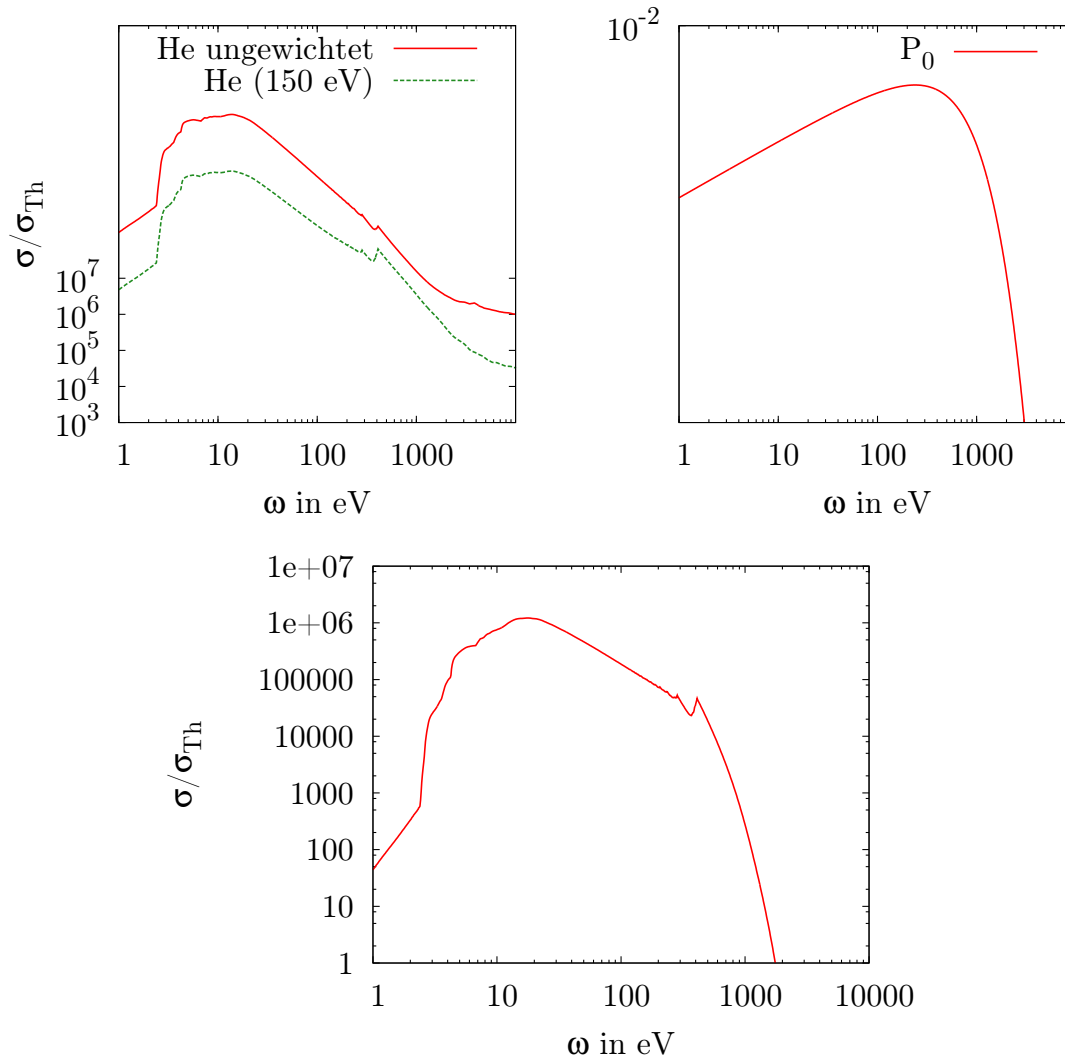


Abb. 7.7.: Helium: Auswirkung der Besetzungswahrscheinlichkeit auf den Wirkungsquerschnitt, Photonendichte P_0 , sowie resultierender Gesamtwirkungsquerschnitt bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

bei, eine höhere thermische Energie führt also zu größeren Wirkungsquerschnitten. Die Photonendichte ist in diesem Bereich jedoch bei 150 eV thermischer Energie größer als bei 300 eV. Diese beiden Effekte gleichen sich beinahe aus und wir erhalten dadurch einen sehr ähnlichen Gesamtwirkungsquerschnitt. Der einzige deutlich sichtbare Unterschied liegt darin, wie stark der Wirkungsquerschnitt nach dem letzten Peak bei gut 400 eV Übergangsenergie abfällt.

Deutlich größer ist die Auswirkung von Besetzung und Photonendichte auf den Gesamtwirkungsquerschnitt heliumähnlicher Sauerstoffionen, siehe Abbildungen 7.9 und

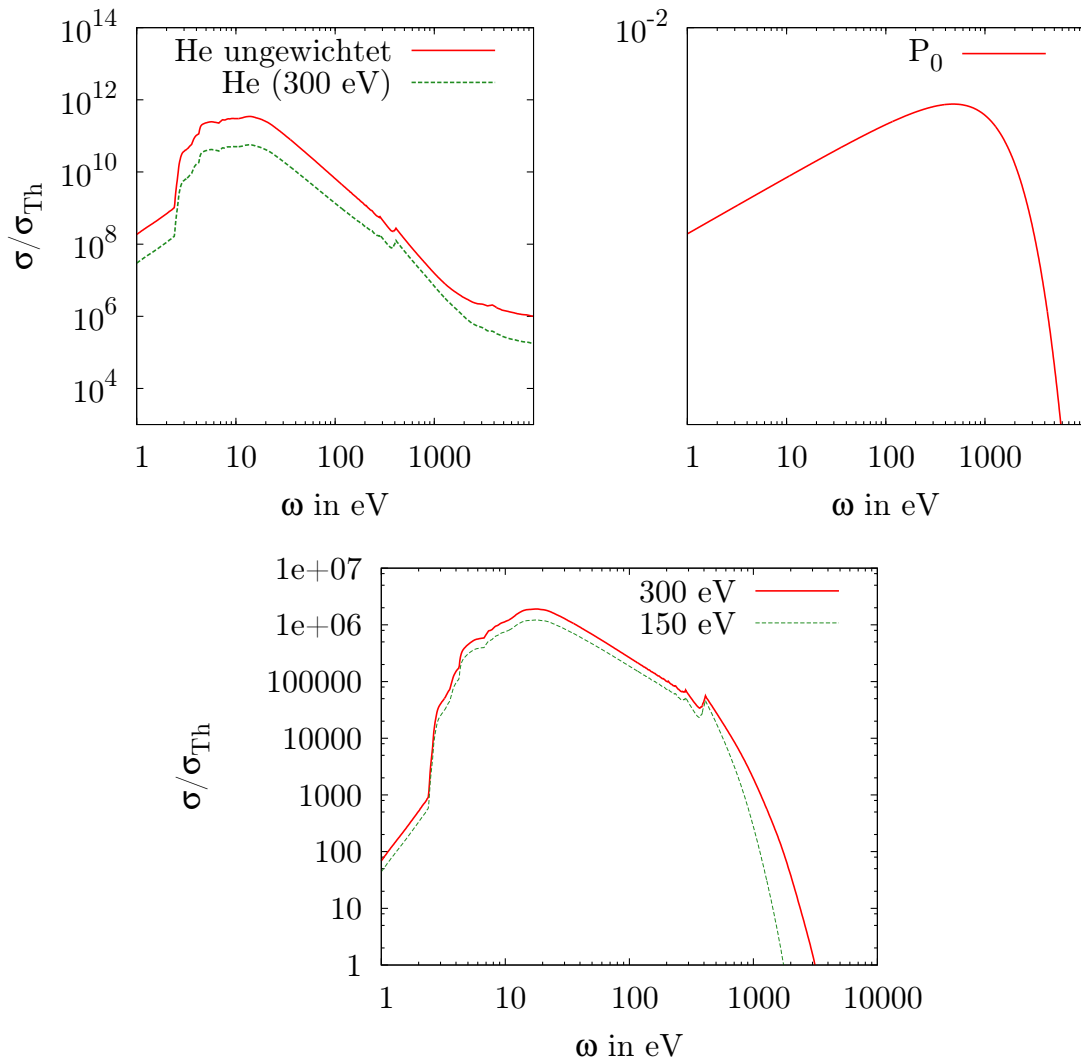


Abb. 7.8.: Helium: Auswirkung der Besetzungswahrscheinlichkeit auf den Wirkungsquerschnitt, Photonendichte P_0 , sowie resultierender Gesamtwirkungsquerschnitt bei 300 eV thermischer Energie (mit Gesamtwirkungsquerschnitt bei 150 eV zum Vergleich) für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

7.10. Auch die Wirkungsquerschnitte für die beiden Temperaturen unterscheiden sich stark. Bei 150 eV thermischer Energie ist der Wirkungsquerschnitt im Bereich unter 80 eV Übergangsenergie verschwindend gering. Grund ist die geringere Besetzung der Ausgangszustände bei kleinerer thermischer Energie.

Bei Übergangsenergien ab 1000 eV sorgt die Photonendichte für einen deutlich geringeren Wirkungsquerschnitt bei 150 eV thermischer Energie. Besonders deutlich ist dies am Beispiel des letzten Peaks bei der Übergangsenergie um 2500 eV zu sehen, der gegenüber dem vorletzten Peak um zwei Größenordnungen tiefer liegt. Bei 300 eV thermischer

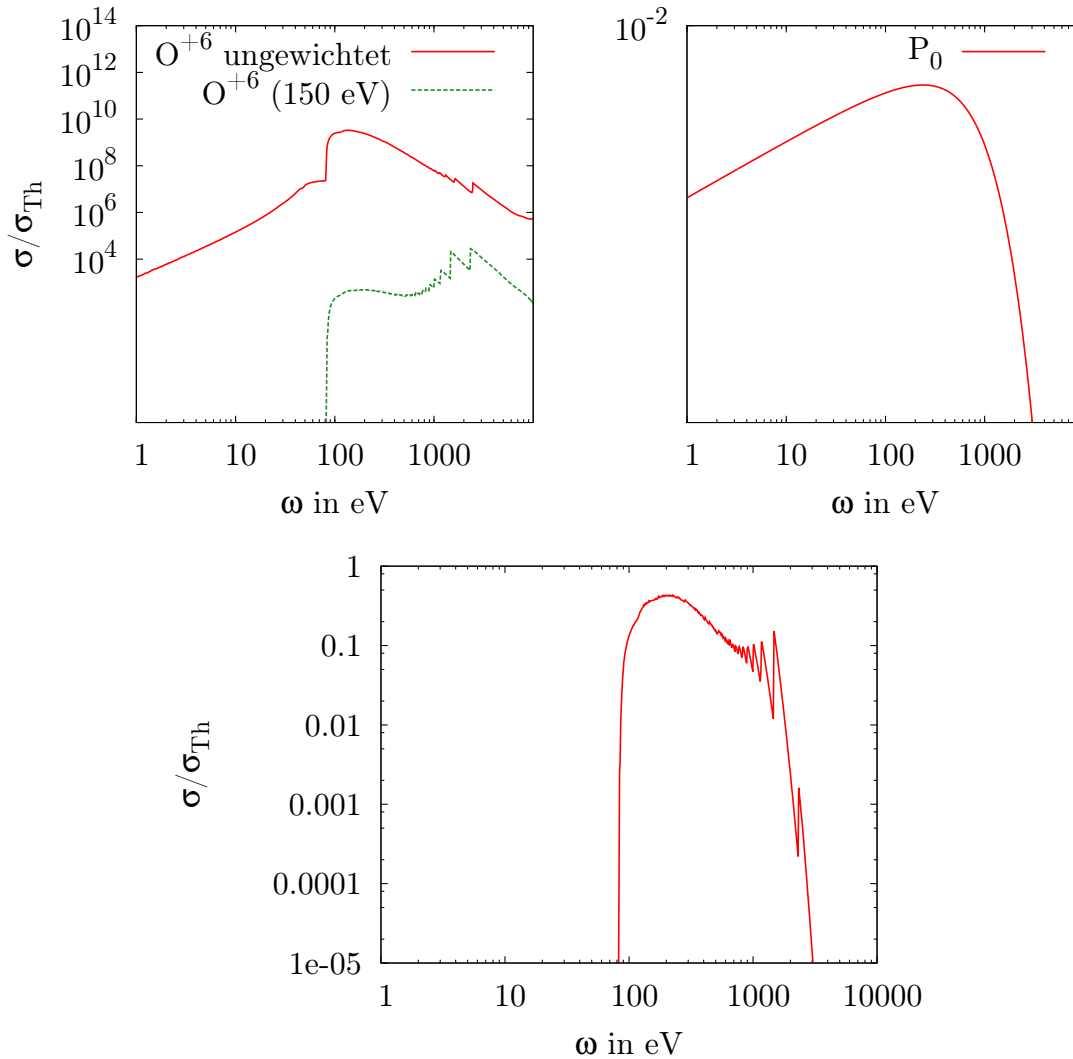


Abb. 7.9.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Auswirkung der Besetzungswahrscheinlichkeit auf den Wirkungsquerschnitt, Photonendichte P_0 , sowie resultierender Gesamtwirkungsquerschnitt bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Energie ist der Abfall der Photonendichte dort noch nicht so stark und die beiden Peaks sind ähnlich hoch. Dass der Wirkungsquerschnitt bei 150 eV thermischer Energie insgesamt deutlich kleiner ist, liegt für kleine Übergangsenergien an der geringeren Besetzung, für große Übergangsenergien an der geringeren Photonendichte.

Generell sind für beide Temperaturen gegenüber Helium deutlich kantigere Strukturen mit einigen größeren Peaks im Wirkungsquerschnitt zu erkennen. Dies deutet darauf hin, dass bei heliumähnlichen Sauerstoffionen deutlich weniger Übergänge einen signifikanten Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern. Durch die geringere Zahl der

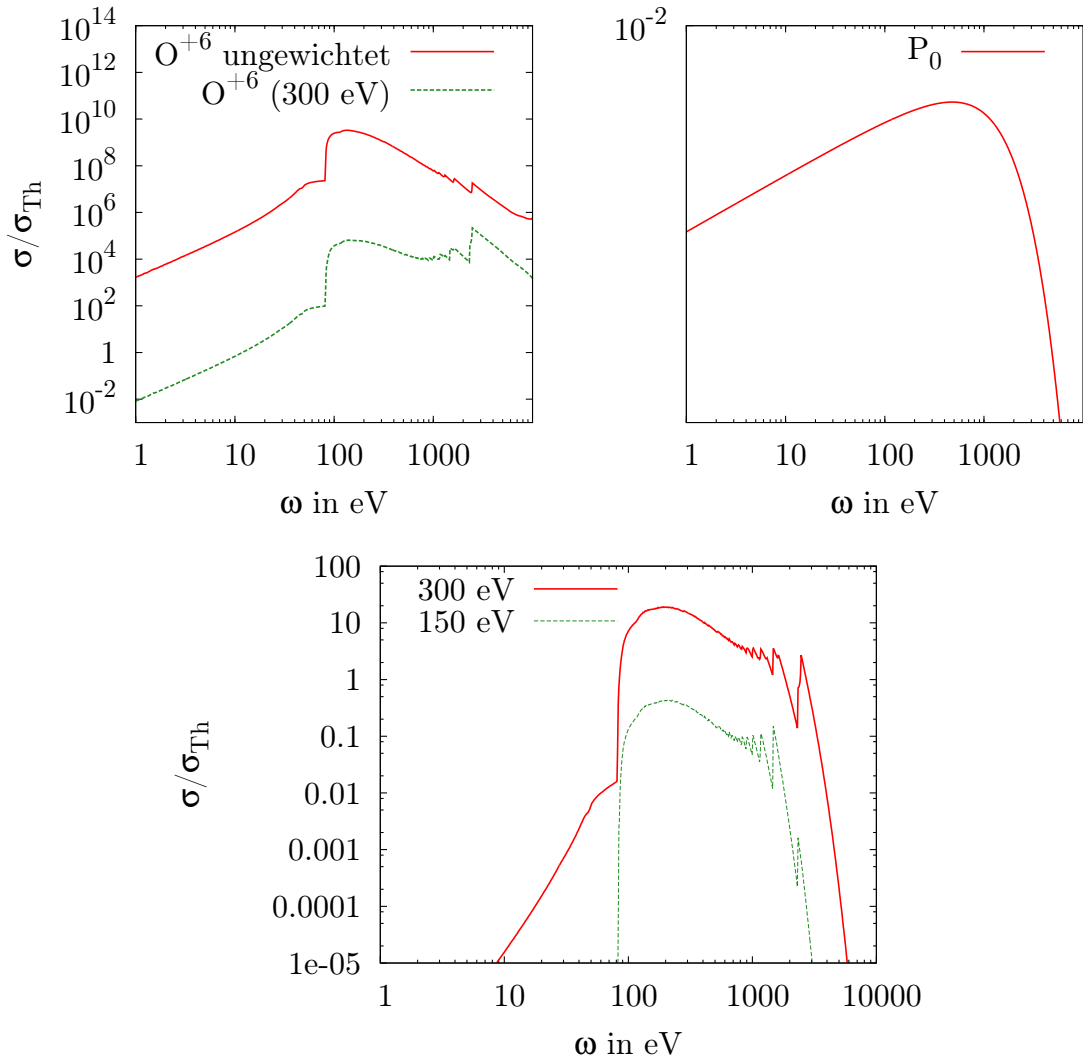


Abb. 7.10.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Auswirkung der Besetzungswahrscheinlichkeit auf den Wirkungsquerschnitt, Photonendichte P_0 , sowie resultierender Gesamtwirkungsquerschnitt bei 300 eV thermischer Energie (mit Gesamtwirkungsquerschnitt bei 150 eV zum Vergleich) für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

zu berücksichtigenden Übergänge wird der Gesamtwirkungsquerschnitt wie zu sehen ist insgesamt kleiner und einzelne Übergänge stechen deutlicher heraus. Tatsächlich kann bei 150 eV thermischer Energie der Gesamtwirkungsquerschnitt mit einer dreistelligen Anzahl an Übergängen abgebildet werden. Außerdem zeigen wir, dass die meisten Peaks von einzelnen Übergängen herrühren. Beides findet sich in der detaillierten Analyse des Wirkungsquerschnitts in Abschnitt 7.6.

7.5. Helium

In diesem Abschnitt untersuchen wir den Gesamtwirkungsquerschnitt von Helium. Dabei sollen einerseits die vernachlässigbaren Zustände herausgefiltert werden, andererseits wollen wir auch herausfinden, welche Übergänge in bestimmten Energiebereichen den Hauptbeitrag liefern. Sämtliche Wirkungsquerschnitte wurden unter Berücksichtigung der thermischen Besetzung und der Photonendichte berechnet, wobei als thermische Energie 150 eV angenommen wurden. Das Hauptaugenmerk liegt wieder auf linear polarisierter Strahlung, also $\Delta M = 0$ -Übergängen.

Der Gesamtwirkungsquerschnitts ist für sehr kleine Energien natürlich stark abhängig von der maximalen Knotenzahl und magnetischen Quantenzahl der Zustände. Der tatsächliche Verlauf des Wirkungsquerschnitts kann daher nur erhalten werden, wenn genau bekannt ist, welche Ausgangszustände berücksichtigt werden müssen. Insofern ist etwa der starke Anstieg bei 3 eV (siehe Abbildung 7.11) ein Resultat der Begrenzung der Quantenzahlen und keine aussagekräftige Erkenntnis für die Berechnung der Atmosphärenzusammensetzung. Für die Erklärung der Absorptionsmerkmale ist dieser Energiebereich außerdem völlig irrelevant.

Bei der Analyse von Helium betrachten wir zuerst die Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt in Abhängigkeit der Knotenzahlen der gebundenen Zustände, welche auch die Parität der ungebundenen Wellenfunktion festlegt. Danach untersuchen wir, wie sich verschiedene obere beziehungsweise untere Grenzen für die magnetische Quantenzahl auf den Wirkungsquerschnitt auswirken und damit in welchem Energiebereich der Einfluss hoher beziehungsweise niedriger magnetischer Quantenzahlen am größten ist. Anschließend wollen wir herausfinden, ob wir Übergänge vernachlässigen können, deren Ausgangszustände eine gewisse Besetzungswahrscheinlichkeit unterschreiten. Zum Schluss folgt noch eine kurze Analyse der $\Delta M = \pm 1$ -Übergänge (zirkular polarisierte Strahlung) und des Gesamtwirkungsquerschnitts von ionisiertem Helium. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse wollen wir dann nutzen, um die Zahl der für den Gesamtwirkungsquerschnitt benötigten Übergänge zu reduzieren.

7.5.1. Analyse nach Knotenzahlen der gebundenen Zustände

In Kapitel 6 wurden zwei verschiedene Übergänge untersucht, welche sich in der Knotenzahl der gebundenen Zustände und in der Symmetrie der ungebundenen Wellenfunktion unterscheiden. Nun wollen wir einen Schritt weiter gehen und zeigen, dass die dortigen Erkenntnisse nicht nur für einzelne Übergänge, sondern für ganze Gruppen von Übergängen Anwendung finden.

Die Knotenzahlen ν bestimmen die Symmetrie der gebundenen Einteilchenwellenfunktionen. Bei linearer Polarisation muss sich wegen des Operators z im Dipolmatrixelement in Gleichung (4.43) die Symmetrie von Ausgangs- und Endzustand unterscheiden. Da die Symmetrie der gebundenen Wellenfunktionen bekannt ist, können wir damit für jeden Übergang die Symmetrie der Wellenfunktion des ungebundenen Elektrons bestimmen.

7. Gesamtwirkungsquerschnitt

Bevor wir jedoch die Übergänge nach der Symmetrie der ungebundenen Wellenfunktion aufteilen, wollen wir zunächst wieder auf die in Kapitel 6 betrachteten Übergänge zurückkommen. Der Einzelwirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ ist gegenüber $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ vernachlässigbar klein. Ob dies auch für beliebige andere magnetische Quantenzahlen der Fall ist wollen wir nun untersuchen. Dazu summieren wir alle Einzelwirkungsquerschnitte mit $\nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 0$ und vergleichen mit der Summe aller Einzelwirkungsquerschnitte mit den Quantenzahlen $\nu_1 = \nu_2 = 0, \nu_3 = 1$, siehe Abbildung 7.11.

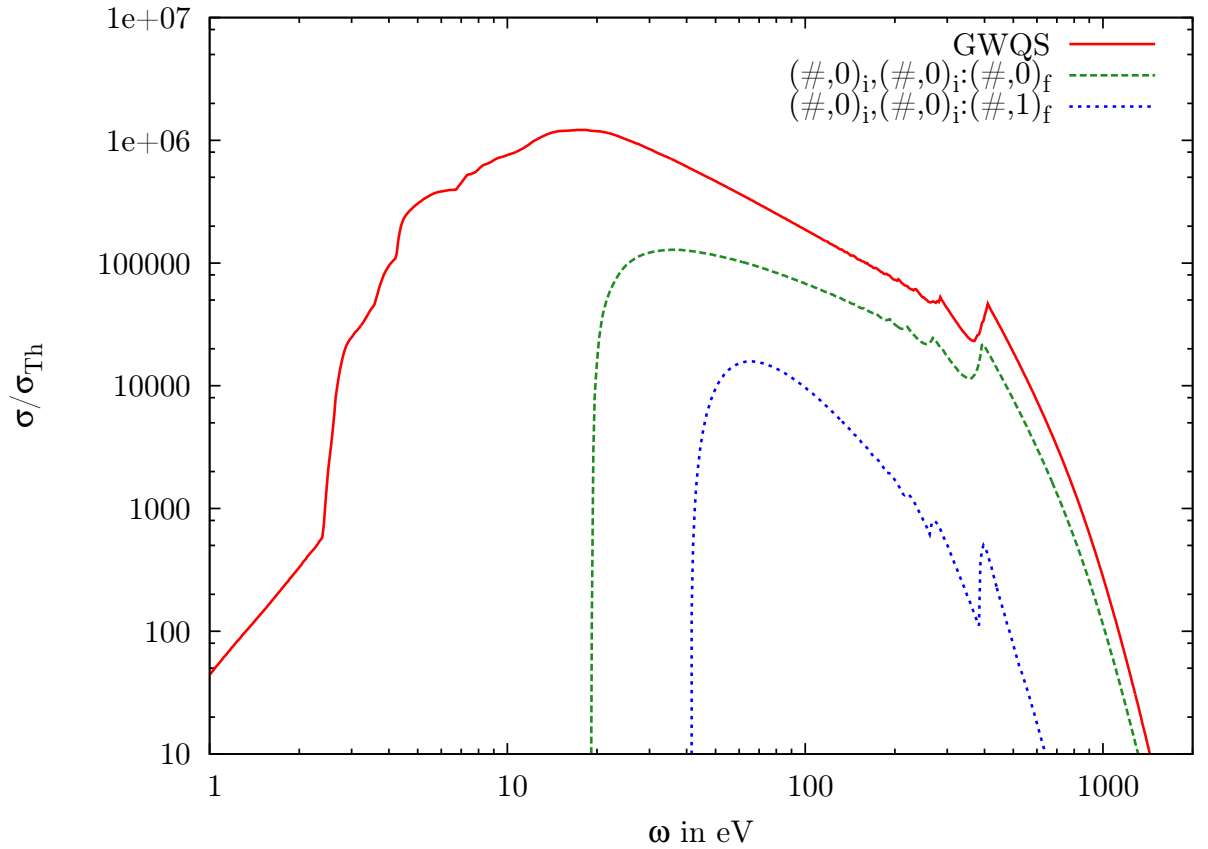


Abb. 7.11.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt, Wirkungsquerschnitt aller Übergänge mit knotenlosen gebundenen Zuständen $((\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f)$ sowie aller Übergänge mit knotenlosem Ausgangszustand und $\nu_3 = 1$ $((\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,1)_f)$ bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Der aufsummierte Wirkungsquerschnitt aus knotenlosen Zuständen $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$ liegt im gesamten Energiebereich deutlich oberhalb des aufsummierten Wirkungsquerschnitts $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,1)_f$. Die Ergebnisse aus Kapitel 6 sind also auf beliebige m -Quantenzahlen übertragbar.

Die Kurzschreibweise der Summen dieser Übergänge ist analog zu der von Einzelübergängen: $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$ stellt die Summe aller Übergänge mit den Quantenzahlen $\nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 0$ dar, $\#$ steht für beliebige Zahlen zwischen 0 und -199 . Es werden alle möglichen Kombinationen von Quantenzahlen m_1, m_2, m_3 berechnet und aufsummiert, die zu einem $\Delta M = 0$ -Übergang führen.

Im nächsten Schritt erweitern wir die Analyse auf andere Gruppen von Übergängen. Statt nach bestimmten ν -Quantenzahlen zu sortieren betrachten wir Übergänge mit symmetrischer beziehungsweise antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion. Ausgenommen davon sind Übergänge aus hochangeregten Zuständen ohne tightly-bound Elektronen (also $\nu_1 > 0, \nu_2 > 0$), welche wir getrennt behandeln. Diese sind bei Einbeziehung der Massendichte, Stoßionisation und elektrischen Mikrofelder (siehe 5.2) wahrscheinlich nicht besetzt, und wir sehen somit direkt, welche Anteile am Gesamtwirkungsquerschnitt durch diese Effekte wegfallen könnten. Abbildung 7.12 zeigt den Gesamtwirkungsquerschnitt, den Anteil von hochangeregten Anfangszuständen (479000 Einzelübergänge), sowie die Anteile mit symmetrischer (279000) beziehungsweise antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion (319000) jeweils ohne hochangeregte Zustände.

Man sieht, dass die Übergänge mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion einen deutlich größeren Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern als diejenigen mit symmetrischer. Lediglich im Bereich zwischen 10 und 20 eV sind beide gleich groß. Dort dominiert allerdings der Anteil der Übergänge aus hochangeregten Anfangszuständen, die ihr Maximum aufgrund der geringen Ionisierungsenergien dieser Zustände bei etwa 20 eV haben. Diese Übergänge liefern also den Hauptanteil am Gesamtwirkungsquerschnitt für kleine Energien, jedoch sinkt deren Wirkungsquerschnitt mit steigender Energie drastisch, so dass sie ab einer Energie von rund 100 eV keine Rolle mehr spielen.

Die Übergänge mit symmetrischer und antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion gliedern wir nun noch weiter auf nach den Knotenzahlen von Anfangs- und Endzuständen. Dadurch sind wir nicht nur in der Lage herauszufinden, welche Anteile vernachlässigbar klein sind, sondern auch in welchem Energiebereich die einzelnen Anteile wichtige Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern. Falls durch die elektrischen Mikrofelder oder die Massendichte Ausgangszustände mit bestimmten Knotenzahlen auszuschließen sind, können wir damit direkt sehen, welche Anteile dadurch wegfallen und welche übrig bleiben.

Die Aufgliederung für symmetrische ungebundene Wellenfunktionen sehen wir in Abbildung 7.13. Abgesehen von den Übergängen der Art $(\#,0)_i(\#,1)_i : (\#,0)_f$, die bei Energien um 10 eV einen kleinen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern, sind Übergänge mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion vernachlässigbar. Die Anzahl dieser für den Gesamtwirkungsquerschnitt unerheblichen Zustände beträgt knapp 200000.

Abbildung 7.14 zeigt die Aufgliederung für antisymmetrische ungebundene Wellenfunktionen. Auch hier gibt es vernachlässigbar kleine Anteile, wenn auch deutlich weniger an der Zahl als bei symmetrischer ungebundener Wellenfunktion. Nur die knapp 40000

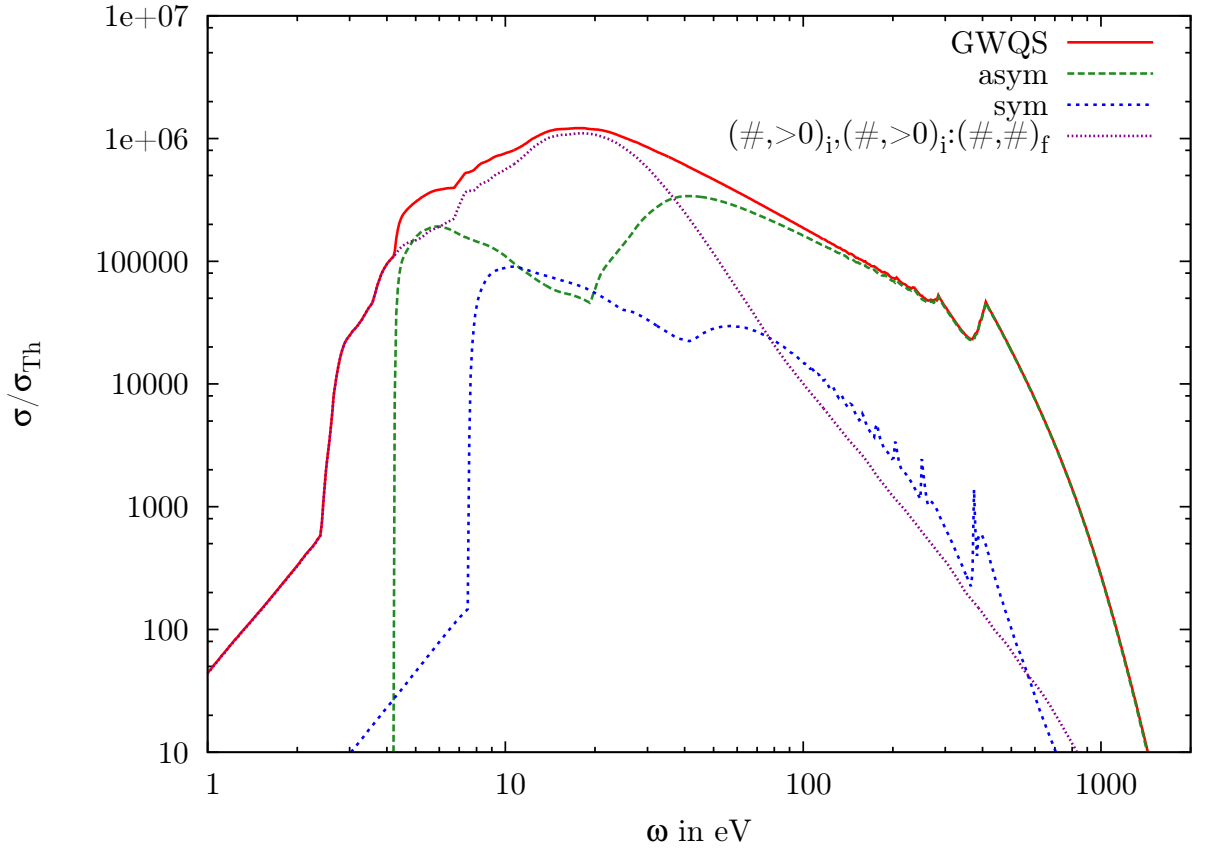


Abb. 7.12.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt, aufsummierte Beiträge von Übergängen mit symmetrischer beziehungsweise antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion sowie Übergänge ohne tightly-bound Elektronen im Ausgangszustand (alle Knotenzahlen ≥ 1) bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Übergänge der Art $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,2)_f$ müssen nicht berücksichtigt werden. Die Übergänge $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,0)_f$ tragen einen großen Teil zum Wirkungsquerschnitt um 5 eV bei. Die drei restlichen Übergänge, bei denen jeweils ein tightly-bound Elektron ionisiert wird, liefern den Hauptbeitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt für große Energien. Wie erwartet liefern davon die Übergänge $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$ mit zwei knotenlosen Elektronen im Anfangszustand aufgrund der höheren Besetzungswahrscheinlichkeit den größten Beitrag. Die Anzahl dieser Übergänge ist im Übrigen nur circa halb so groß wie die der beiden anderen. Der Grund ist die geringere Anzahl an Kombinationsmöglichkeiten für den Ausgangszustand, wenn beide Elektronen dieselbe Knotenzahl besitzen.

Von den neun untersuchten Arten an Übergängen sind also drei wichtig für den Bereich großer Energien, zwei für kleine Energien und vier sind komplett vernachlässigbar. Analog wollen wir nun noch die Übergänge aus hochangeregten Zuständen aufgliedern,

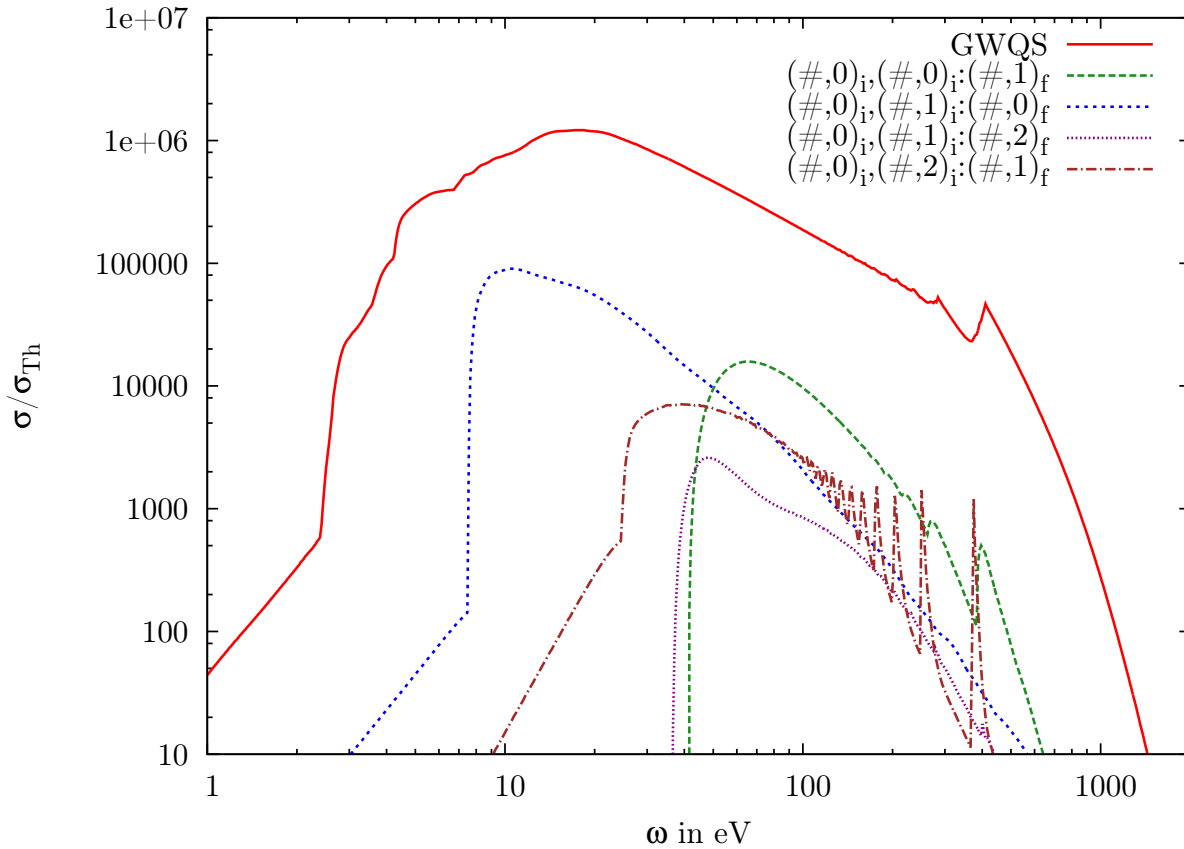


Abb. 7.13.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt und Beiträge von Übergängen mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion, nach Knotenzahl der gebundenen Zustände aufgeteilt bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

siehe Abbildung 7.15.

Ebenso wie bei den vorigen Aufgliederungen gibt es auch hier einige vernachlässigbare Anteile, insgesamt 160000 Einzelwirkungsquerschnitte aus den Übergängen $(\#,1)_i(\#,1)_i : (\#,0)_f$, $(\#,1)_i(\#,2)_i : (\#,0)_f$ und $(\#,2)_i(\#,2)_i : (\#,0)_f$, wovon zwei aufgrund ihrer geringen Größe im Schaubild gar nicht zu sehen sind. Diese drei Arten von Übergängen haben eines gemeinsam: Der Ausgangszustand ist hoch angeregt und im Endzustand ist ein tightly-bound Elektron. Dadurch ergibt sich für viele dieser Übergänge eine negative Übergangsenergie, weil der Endzustand energetisch tiefer liegt als der Anfangszustand. Ein solcher Anfangszustand ist hochgradig instabil und der Übergang würde unter Emission eines Photons stattfinden. Solche Übergänge wurden bei der Berechnung des Wirkungsquerschnitts nicht berücksichtigt. Es ist also nicht verwunderlich, dass gerade diese drei Arten von Übergängen vernachlässigbar sind.

Bei den restlichen Übergängen erkennt man, dass oftmals einer der Anteile den Wir-

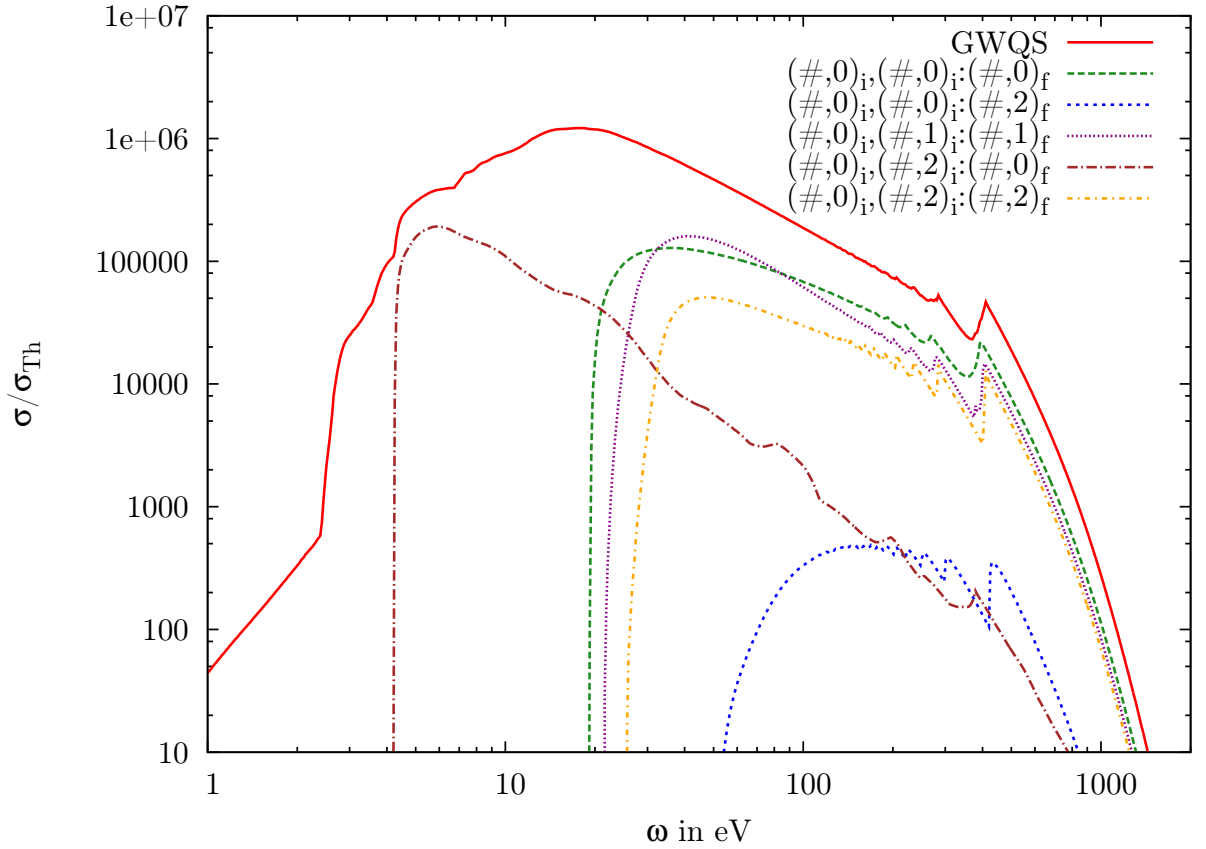


Abb. 7.14.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt und Beiträge von Übergängen mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion, nach Knotenzahl der gebundenen Zustände aufgeteilt bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

kungsquerschnitt in bestimmten Energiebereichen maßgeblich formt, wie beispielsweise die Übergänge $(\#,1)_i(\#,2)_i : (\#,1)_f$ bis 2,5 eV oder die Übergänge $(\#,2)_i(\#,2)_i : (\#,2)_f$ im Bereich von 2,5 bis 3,5 eV. Drei weitere Anteile haben ihr Maximum um 20 eV, für größere Energien fallen die Wirkungsquerschnitte aller Anteile jedoch stark ab.

Nach der Analyse nach Knotenzahlen können wir konstatieren, dass fast 400000 Zustände bei der Berechnung des Gesamtwirkungsquerschnitts nicht berücksichtigt werden müssen, die Zahl der zu berechnenden Zustände beträgt jedoch immer noch circa 678000. Durch die weitere Aufgliederung der Anteile lassen sich zwar noch mehr vernachlässigbare Zustände finden, die Zahl der übrig bleibenden Zustände lässt sich dadurch jedoch nicht um Größenordnungen reduzieren, sondern bleibt bei mehreren hunderttausend. Die aufwendige weitere Aufteilung jedes einzelnen Anteils ist durch den geringen Nutzen nicht gerechtfertigt.

Am Beispiel des Peaks bei rund 400 eV wollen wir jedoch zeigen, dass einzelne Struktu-

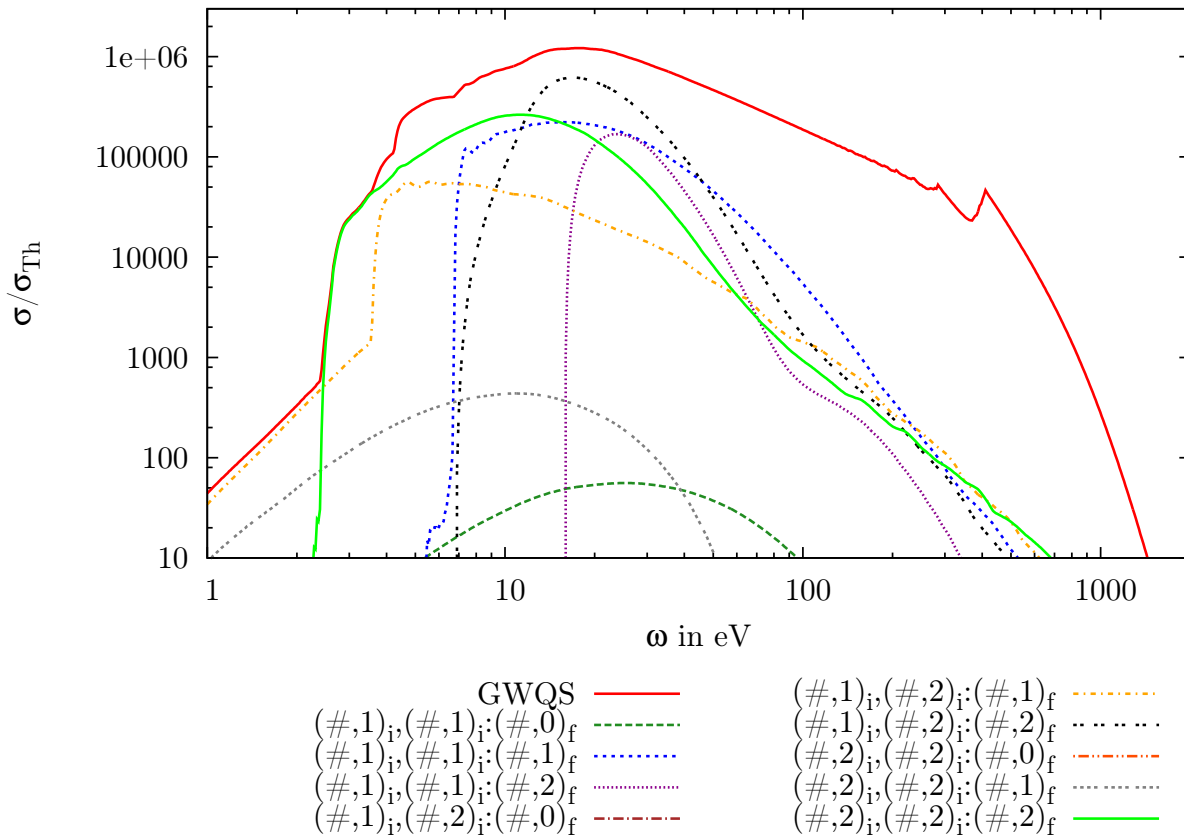


Abb. 7.15.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt und Beiträge von Übergängen aus hochangeregten Zuständen, nach Knotenzahl der gebundenen Zustände aufgeteilt bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

ren im Gesamtwirkungsquerschnitt von einer überschaubaren Anzahl an Einzelwirkungsquerschnitten herrühren und Detailanalysen durchaus sinnvoll sind, wenn es darum geht, den Verlauf des Wirkungsquerschnitts in einem ganz bestimmten Energiebereich zu untersuchen. Zunächst einmal wissen wir, dass wir bei 400 eV nur die drei Übergänge $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$, $(\#,0)_i(\#,1)_i : (\#,1)_f$ und $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,2)_f$ betrachten müssen, alle anderen sind bei dieser Energie vernachlässigbar. Da es sich um den Peak mit der größten Energie handelt und der Wirkungsquerschnitt danach deutlich abfällt ist anzunehmen, dass bei den zugehörigen Übergängen das am stärksten gebundene Elektron, also $(0,0)_i$, seinen Zustand ändert. Aus Kapitel 6 wissen wir, dass das Dipolmatrixelement mit $(0,0)_i$ und der antisymmetrischen ungebundenen Wellenfunktion groß ist. Das legt die Vermutung nahe, dass Übergänge mit genau diesen Wellenfunktionen im Dipolmatrixelement für den Peak verantwortlich sind. Damit kommen wir auf insgesamt 599 Einzelübergänge des Typs $(0,0)_i(m_2,\nu_2)_i : (m_2,\nu_2)_f$. Dass tatsächlich zum größten Teil

7. Gesamtwirkungsquerschnitt

diese Übergänge für den Peak verantwortlich sind, sehen wir in Abbildung 7.16.

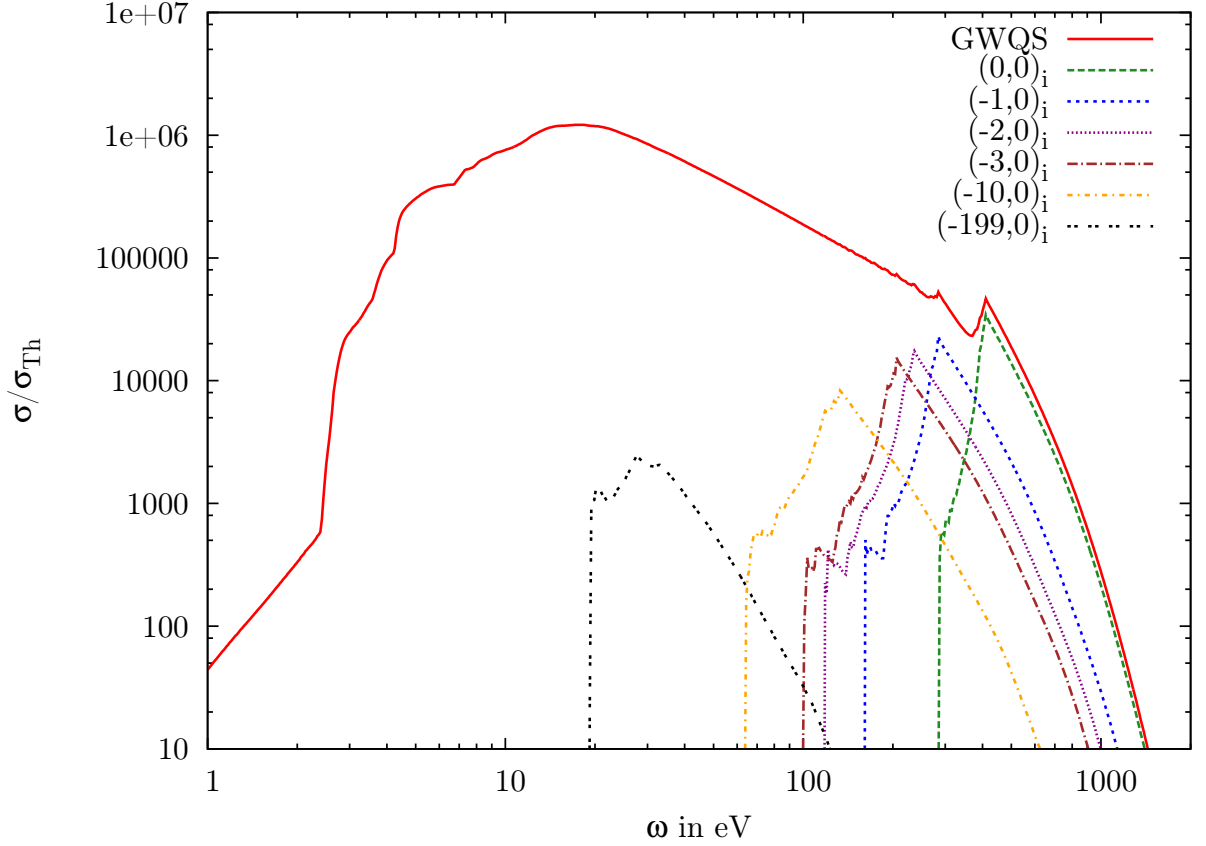


Abb. 7.16.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt und Summe der beschriebenen 599 Einzelwirkungsquerschnitte für die Ionisierung verschiedener tightly-bound Elektronen bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Der folgende Peak bei circa 300 eV stammt von der Ionisierung des tightly-bound Elektrons mit $m = -1$. Die darauf folgenden Peaks bei niedrigeren Energien stammen dementsprechend von der Ionisierung der tightly-bound Elektronen mit nächstniedriger magnetischer Quantenzahl. Die Bindungsenergien dieser benachbarten tightly-bound Elektronen liegen mit steigendem m energetisch immer näher zusammen und die Besetzungswahrscheinlichkeit der Ausgangszustände nimmt ab.

Daher sind die Peaks mit steigendem m immer schwächer ausgeprägt und überlappen sich, so dass es schwer wird die einzelnen Peaks auseinanderzuhalten.

7.5.2. Analyse nach magnetischen Quantenzahlen

Im vorigen Abschnitt haben wir die Übergänge nach den Knotenzahlen von Anfangs- und Endzustand aufgeteilt und die jeweiligen Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt untersucht. Das gleiche wollen wir nun für die magnetischen Quantenzahlen tun. Da m in unserem Programm Werte zwischen 0 und -199 annehmen kann, können wir natürlich nicht jede Kombination einzeln analysieren, sondern betrachten den Wirkungsquerschnitt für verschiedene obere oder untere Grenzen für beide oder eines der Elektronen.

Durch die bereits in Abschnitt 5.2 erwähnte finite Kernmasse werden Zustände mit niedriger magnetischer Quantenzahl energetisch ungünstiger und reichen unterhalb eines bestimmten m in den Ionisierungsbereich hinein, sind also nicht mehr gebunden. Deswegen betrachten wir den Wirkungsquerschnitt für verschiedene minimale magnetische Quantenzahlen. Anschließend untersuchen wir den Beitrag von Zuständen mit mindestens einem m oberhalb einer bestimmten Grenze sowie Übergänge mit unterschiedlichen maximalen m -Quantenzahlen für beide Elektronen. Dies dient dazu, sich einen Überblick zu verschaffen, in welchen Energiebereichen welche magnetischen Quantenzahlen den Hauptbeitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern.

Abbildung 7.17 zeigt den Wirkungsquerschnitt bei verschiedenen minimalen Quantenzahlen, genauer gesagt bei $m_{\min} = -200$, $m_{\min} = -100$, $m_{\min} = -50$, $m_{\min} = -25$ und $m_{\min} = -10$.

Da mit steigendem m_{\min} die Anzahl der Übergänge abnimmt, wird natürlich der Wirkungsquerschnitt insgesamt kleiner. Dies betrifft jedoch manche Energiebereiche stärker als andere: Zustände mit niedrigen magnetischen Quantenzahlen sind schwach gebunden und die zugehörigen Übergangsenergien dementsprechend klein, daher nimmt der Wirkungsquerschnitt bei niedrigen Energien deutlich ab. Im Bereich großer Energien sind grundsätzlich tightly-bound Elektronen mit hohen magnetischen Quantenzahlen beteiligt, dort ist die Auswirkung geringer. Dennoch verschwindet der Peak bei 400 eV zusehends, da immer mehr der rund 600 verantwortlichen Einzelwirkungsquerschnitte wegfallen.

Außerdem ist die Ionisationsschwelle der tightly-bound Elektronen mit steigendem m_{\min} immer besser zu erkennen, besonders deutlich für $m_{\min} = -10$. Das Maximum um 30 eV stammt noch von der Ionisierung eines Elektrons mit Knotenzahl $\nu > 0$. Danach fällt der Wirkungsquerschnitt stark ab. Das tightly-bound Elektron, dessen Ionisierung am wenigsten Energie benötigt, hat die Quantenzahl $m = -10$. Die geringste Übergangsenergie zur Photoionisation des Elektrons $(-10,0)_i$ besitzt der Übergang $(0,0)_i(-10,0)_i : (0,0)_f$. Diese liegt bei 62 eV, also genau dort, wo der Wirkungsquerschnitt wieder zu steigen beginnt.

Je niedriger m_{\min} gewählt wird, desto niedriger werden auch die Energien der Übergänge, bei denen ein tightly-bound Elektron ionisiert wird, für $(-199,0)_i$ liegt diese unter 20 eV, siehe Abbildung 7.16. Dieser Wirkungsquerschnitt überlappt dann deutlich mit dem aus der Ionisierung eines Elektrons mit $\nu = 1$, weshalb erst ab $m_{\min} = -25$ eine deutliche Abgrenzung zu sehen ist.

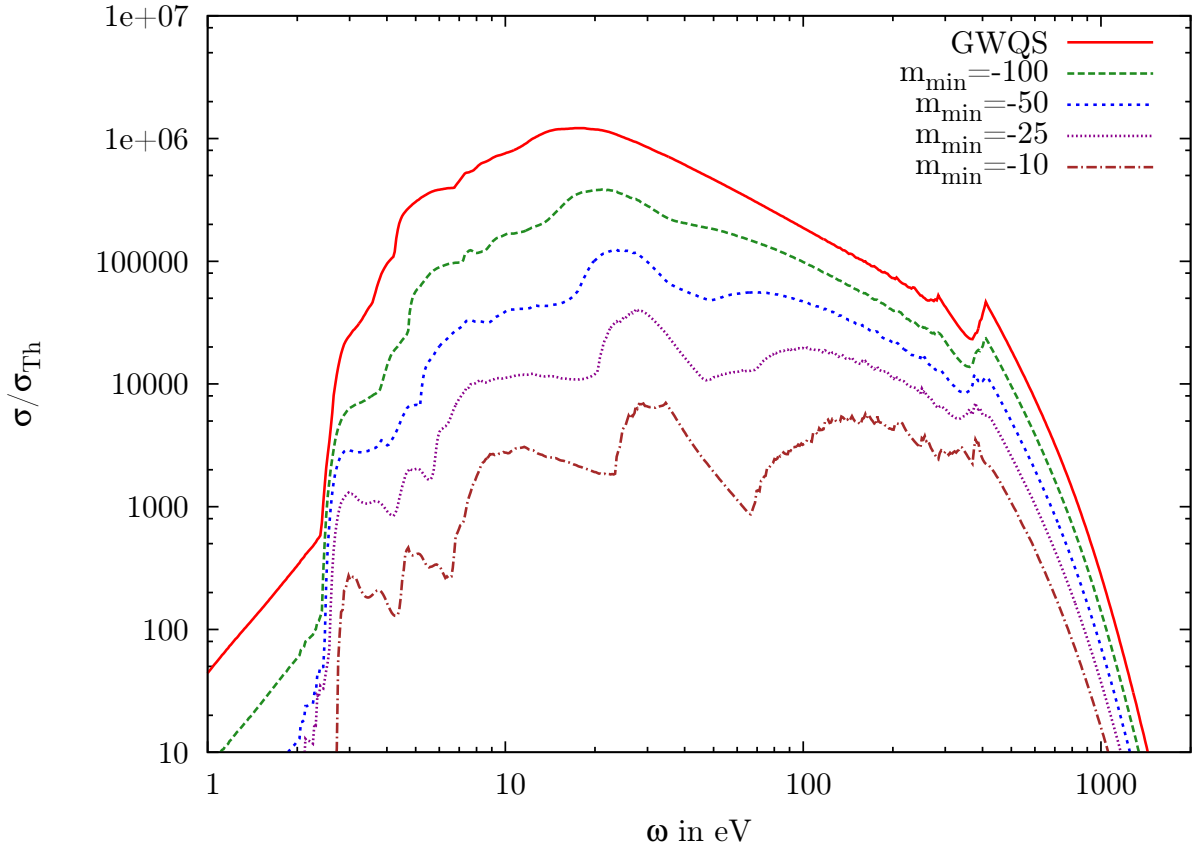


Abb. 7.17.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt für verschiedene minimale magnetische Quantenzahlen bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Für das Verständnis des Zustandekommens eines Gesamtwirkungsquerschnitts ist es natürlich auch interessant, welchen Beitrag Zustände mit sehr niedrigen m -Quantenzahlen liefern. Hierzu betrachten wir den Wirkungsquerschnitt für unterschiedliche maximale magnetische Quantenzahlen, siehe Abbildung 7.18.

Niedrigere magnetische Quantenzahlen bedeuten eine geringere Bindung und damit auch kleinere Übergangsenergien. Die Beschränkung auf immer kleinere maximale Quantenzahlen hat daher die größte Auswirkung auf den Bereich hoher Energien, dort nimmt der Wirkungsquerschnitt drastisch ab. Bei niedrigen Energien bis 50 eV ist der Effekt deutlich geringer. Wir haben in Abschnitt 7.5.1 bereits herausgefunden, dass die Peaks bei hohen Energien von der Ionisierung der knotenlosen inneren Elektronen mit $m = 0, -1, -2, \dots$ stammen. Dies ist hier deutlich zu sehen, für hohe Energien über 200 eV spielen selbst Zustände mit $m_{\max} = -10$ kaum noch eine Rolle. Für diesen Energiebereich sind also nur Übergänge zu berücksichtigen, bei denen mindestens eine m -Quantenzahl größer als -10 ist. Der zugehörige Wirkungsquerschnitt für die Grenzen

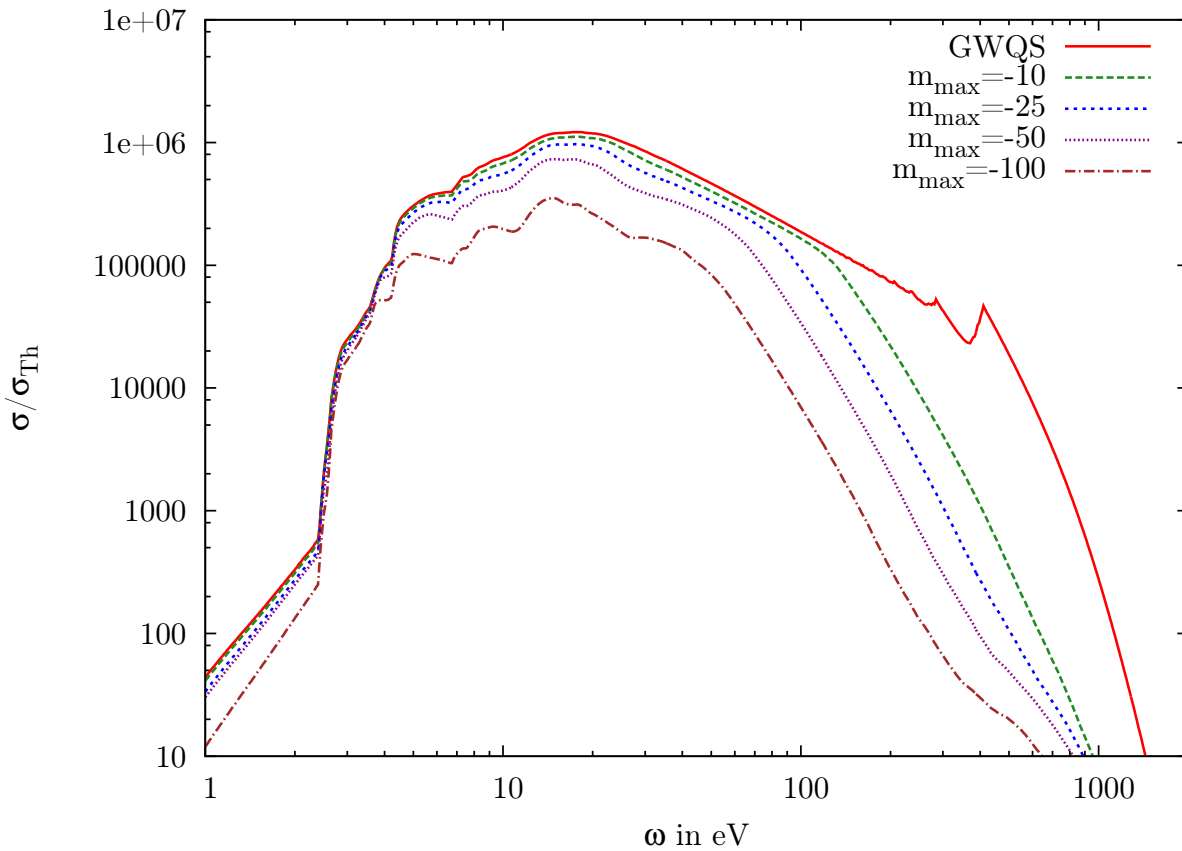


Abb. 7.18.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt für verschiedene maximale magnetische Quantenzahlen bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

–10, –25 und –50 ist in Abbildung 7.19 zu sehen.

Hat mindestens ein Elektron eine magnetische Quantenzahl größer –50, so entspricht der aus diesen Übergängen resultierende Wirkungsquerschnitt für Übergangsenergien ab 100 eV relativ genau dem Gesamtwirkungsquerschnitt. Die beiden Peaks bei 300 und 400 eV werden bei allen drei Einschränkungen von m gut abgebildet.

Je nachdem welcher Energiebereich genauer untersucht werden soll, müssen also nur Übergänge berücksichtigt werden, deren magnetische Quantenzahlen in einem gewissen Bereich liegen.

7.5.3. Analyse nach Besetzung des Ausgangszustandes

Im Folgenden wollen wir die Frage klären, bis zu welcher unteren Grenze der Besetzungswahrscheinlichkeit ein Ausgangszustand berücksichtigt werden muss beziehungsweise ob eine solche Grenze für Helium existiert. Mit diesem Wissen können wir nicht nur die

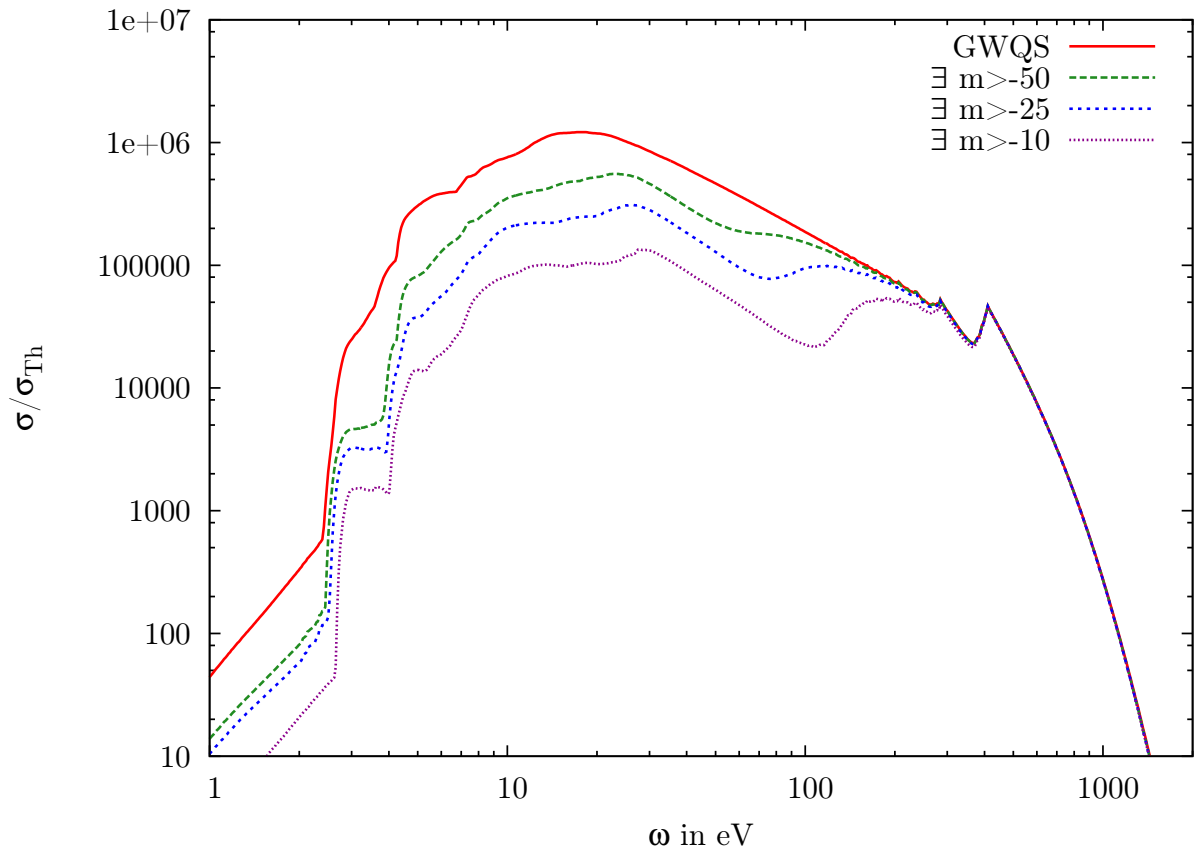


Abb. 7.19.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt sowie Wirkungsquerschnitte bei denen die magnetische Quantenzahl mindestens eines Elektrons größer als -10 , -25 respektive -50 ist bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Anzahl der zu berechnenden Übergänge reduzieren, sondern es vereinfacht aufgrund der geringeren Zahl an Anfangszuständen auch die Ermittlung der möglichen Übergänge. In Abbildung 7.20 sind die Wirkungsquerschnitte für verschiedene minimale Besetzung der Ausgangszustände aufgetragen.

Die 180000 Ausgangszustände besitzen alle eine Besetzungswahrscheinlichkeit größer als 10^{-2} , diese Kurve beinhaltet also alle Übergänge und ist identisch mit dem Gesamtwirkungsquerschnitt. Bei der unteren Grenze 10^{-1} bleiben nicht einmal 13000 Übergänge, der Wirkungsquerschnitt ist dementsprechend klein. Dass der letzte Peak dennoch gut abgebildet wird, ist nicht weiter verwunderlich: In Abschnitt 7.5.1 hatten wir festgestellt, dass dieser durch die Ionisierung des Elektrons $(0,0)_i$ entsteht, der Ausgangszustand ist also stark gebunden und die Besetzungswahrscheinlichkeit somit hoch. Weiterhin fällt auf, dass der Wirkungsquerschnitt erst bei gut 4 eV beginnt, bei allen Übergängen mit kleinerer Energie ist die Besetzung des Ausgangszustandes also kleiner als 10^{-1} .

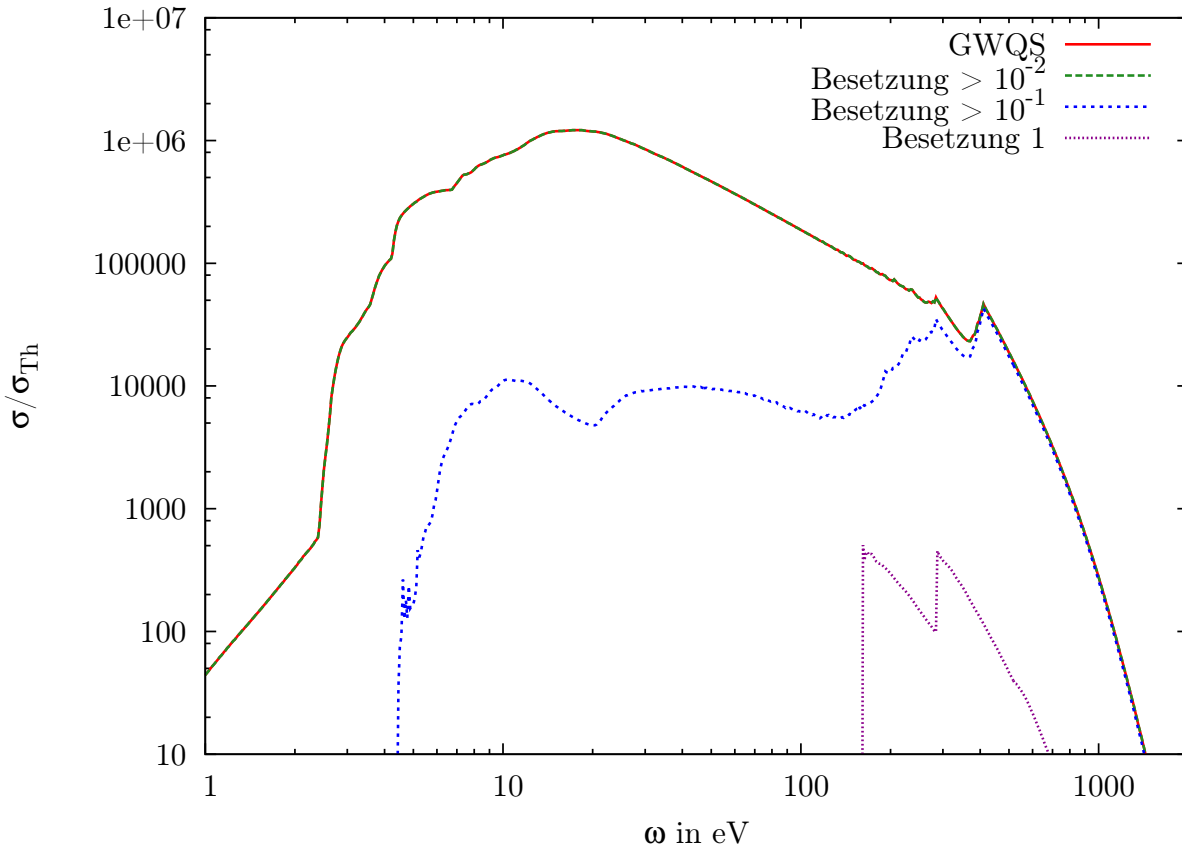


Abb. 7.20.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt und Wirkungsquerschnitte, bei denen nur Anfangszustände bis zu einer bestimmten minimalen Besetzungswahrscheinlichkeit berücksichtigt werden bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Zuletzt sind noch Übergänge aus dem Grundzustand $(0,0)_i(-1,0)_i$ aufgetragen (Besetzung 1), hiervon gibt es lediglich zwei mit nicht vernachlässigbarem Wirkungsquerschnitt, nämlich $(0,0)_i(-1,0)_i : (0,0)_f$ und $(0,0)_i(-1,0)_i : (-1,0)_f$. Die beiden Maxima sind energetisch weit entfernt vom jeweiligen Peak im Gesamtwirkungsquerschnitt, den wir der Ionisierung des Elektrons $(0,0)_i$ beziehungsweise $(-1,0)_i$ zuordnen konnten. Der Grund ist die starke Bindung beider Elektronen: Wird eines der Elektronen ionisiert, so wird das jeweils andere stärker an den Kern gebunden. Die zusätzliche Bindungsenergie ist dabei umso größer, je niedriger die Knotenzahl und magnetische Quantenzahl. Die Übergangsenergien rücken mit steigendem m und ν des nicht ionisierten Elektrons immer näher zusammen und addieren sich zu den im Gesamtwirkungsquerschnitt deutlich sichtbaren Peaks. Diese befinden sich dementsprechend bei höherer Energie als die Maxima der beiden Einzelwirkungsquerschnitte, siehe auch Abbildung 7.16.

Die meisten Anfangszustände weisen eine Besetzungswahrscheinlichkeit zwischen 10^{-2}

und 10^{-1} auf, daher können bei Helium keine Übergänge aufgrund der Besetzung vernachlässigt werden, die Unterschiede in den Bindungsenergien der Anfangszustände sind zu gering. Dies muss jedoch für jedes Element und für verschiedene Magnetfeldstärken einzeln untersucht werden, da die Bindungsenergien sich mit der Kernladungszahl stark ändern.

7.5.4. Zirkular polarisierte Strahlung

Bei den Wirkungsquerschnitten zirkular polarisierter Strahlung beschränken wir uns auf wenige Detailanalysen. Wir verschaffen uns einen kurzen Überblick, wie der Gesamtwirkungsquerschnitt für verschiedene minimale magnetische Quantenzahlen aussieht, welcher Anteil von Übergängen mit symmetrischer und antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion herrührt und welche Rolle Übergänge aus hochangeregten Zuständen spielen. Natürlich vergleichen wir auch die Gesamtwirkungsquerschnitte für linkszirkular polarisierte Strahlung ($\Delta M = +1$), rechtszirkular polarisierte Strahlung ($\Delta M = -1$) und linear polarisierte Strahlung ($\Delta M = 0$).

Viele der Erkenntnisse, die wir aus der Untersuchung der Wirkungsquerschnitte für linear polarisierter Strahlung gewonnen haben, sind auf zirkular polarisierte Strahlung übertragbar. Genau wie bei linearer Polarisation hat auch bei links- und rechtszirkularer Polarisation eine Beschränkung auf ein höheres m_{\min} enorme Auswirkung auf den Bereich kleiner Energien, siehe Abbildung 7.21 beziehungsweise 7.22. Während für $m_{\min} = -200$ das Maximum bei 10 eV den Peak bei 300 eV respektive 400 eV noch um fast zwei Größenordnungen überragt, liegen für $m_{\min} = -10$ die Peaks leicht oberhalb dieses Maximums.

Ein grundlegender Unterschied zu linearer Polarisation liegt jedoch im deutlich geringeren Maximalwert, den die Wirkungsquerschnitte für zirkular polarisierte Strahlung erreichen. In Abbildung 7.23 sehen wir die Gesamtwirkungsquerschnitte der verschiedenen Polarisationen im Überblick. Deren Unterschiede und Gemeinsamkeiten werden wir im Folgenden analysieren.

Bei linear polarisierter Strahlung sind Übergänge wie $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ besonders groß, siehe Kapitel 6. Dies liegt an dem großen Überlapp der ungebundenen antisymmetrischen Wellenfunktion und der mit z multiplizierten gebundenen Wellenfunktion $(0,0)_i$. Bei zirkularer Polarisation ändert der Operator die magnetische Quantenzahl und nicht die z -Parität. Daher gibt es keine Übergänge mit knotenloser gebundener und antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion im Dipolmatrixelement. Übergänge mit ebensolchem Dipolmatrixelement sind jedoch für den Bereich hoher Energien entscheidend bei linearer Polarisation. Die Übergänge, welche im Bereich niedriger Energien den Hauptbeitrag liefern, haben bei zirkularer Polarisation durch das geänderte z -Paritätsverhalten ebenfalls geringere Wirkungsquerschnitte. Außerdem kommt bei zirkularer Polarisation der Faktor $\sqrt{(-m_l + 1)/4\beta}$ im Dipolmatrixelement hinzu, siehe Gleichungen 4.45 und 4.44. Somit ist es nicht verwunderlich, dass der Gesamtwirkungsquerschnitt bei linearer Polarisation deutlich größer ist.

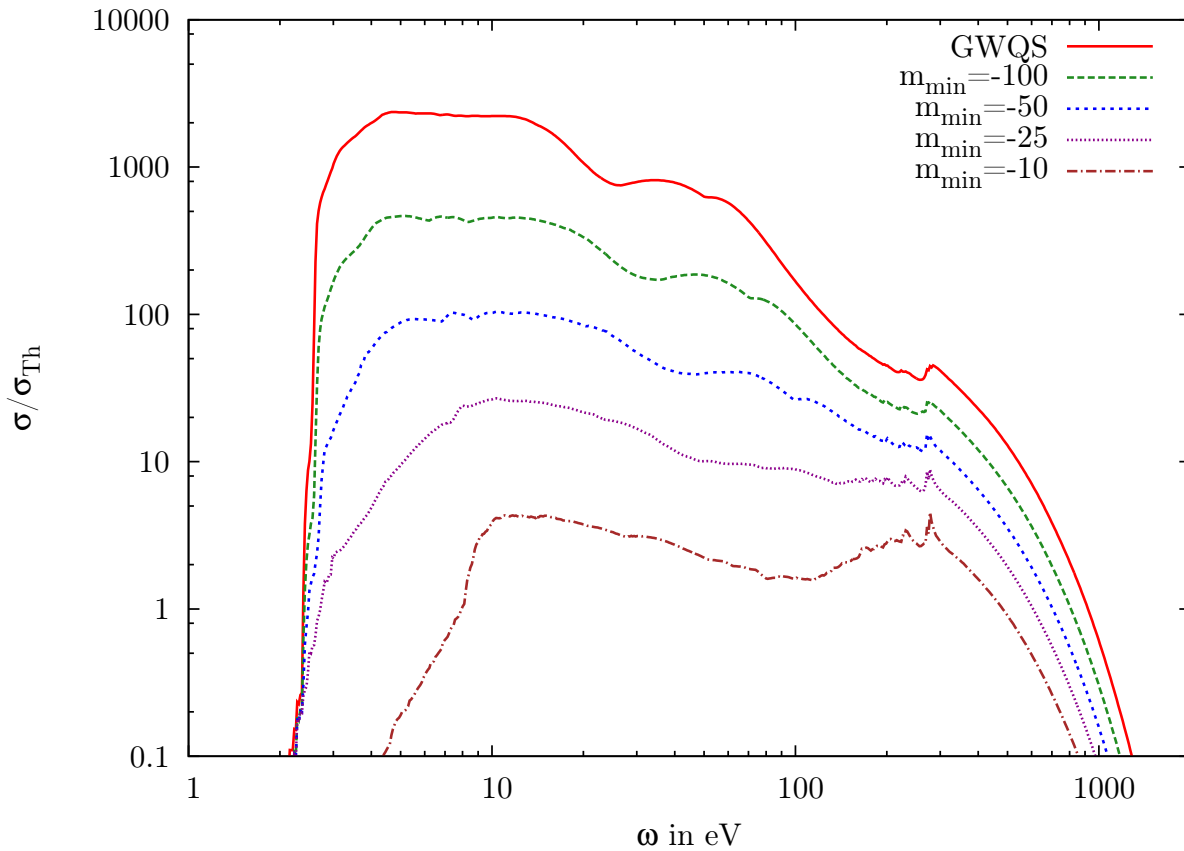


Abb. 7.21.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt ($m_{\min} = -200$) und Wirkungsquerschnitt bei verschiedenen anderen m_{\min} bei 150 eV thermischer Energie für linkszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Bei zirkularer Polarisation gibt es nur Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt, wenn ein Elektron im Anfangs- und Endzustand dieselbe z -Parität besitzt. Dadurch sind beispielsweise Übergänge der Art $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,1)_f$ und $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,1)_f$ gar nicht möglich.

Andererseits gibt es jedoch mehr Übergänge bei anderen Kombinationen von Knotenzahlen, wie etwa $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$. Dies liegt daran, dass sich entweder die magnetische Quantenzahl des gebundenen oder des ungebundenen Elektrons ändern kann. Welches Elektron diese Änderung erfährt, hat im Gegensatz zu linearer Polarisation natürlich keinen Einfluss auf die Knotenzahlen der gebundenen Zustände.

Bei linearer Polarisation hingegen wird die z -Parität eines der beiden Elektronen geändert. Handelt es sich dabei um das gebundene Elektron, so führt dies zu Übergängen der Art $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,1)_f$, die es bei zirkularer Polarisation wie bereits erwähnt nicht gibt.

Die Wirkungsquerschnitte von links- und rechtszirkular polarisierter Strahlung sind

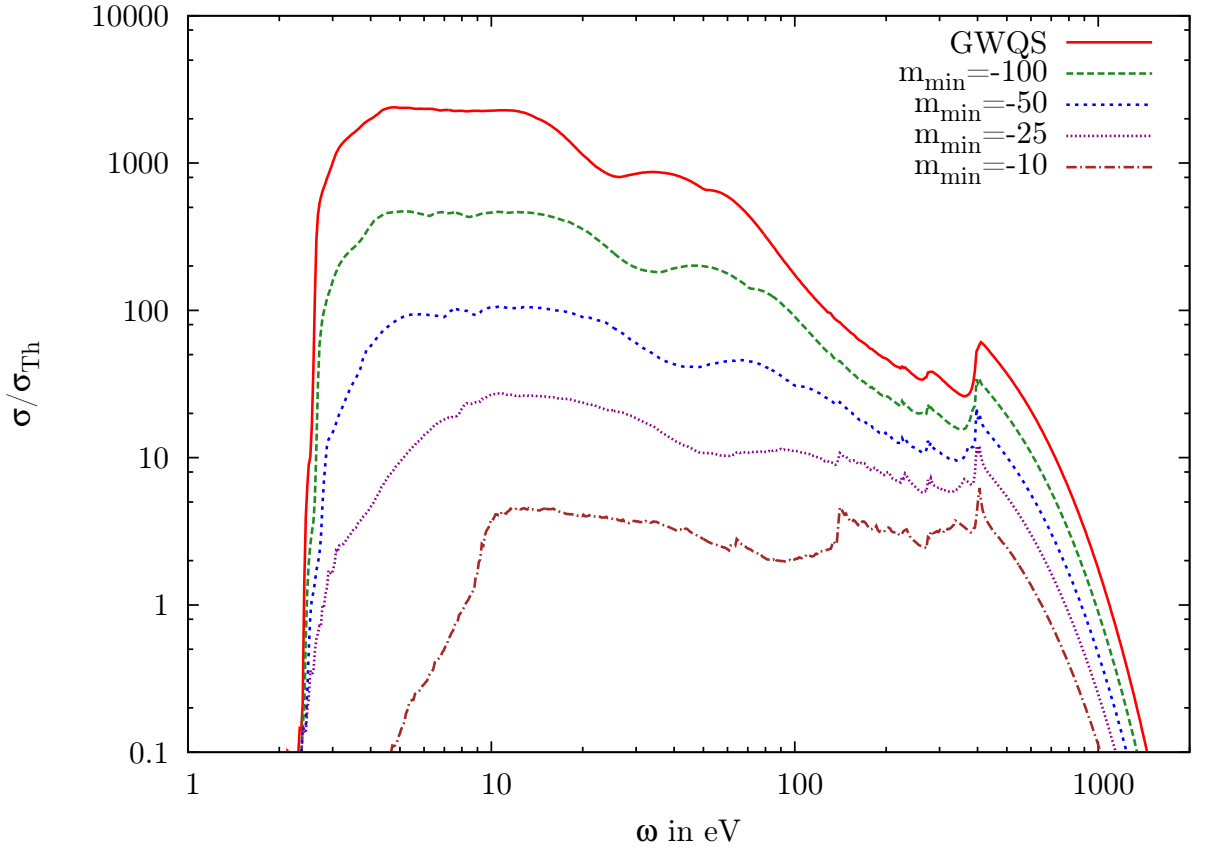


Abb. 7.22.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt ($m_{\min} = -200$) und Wirkungsquerschnitt bei verschiedene anderen m_{\min} bei 150 eV thermischer Energie für rechtszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

sich sehr ähnlich. Für $\Delta M = +1$ -Übergänge fehlt jedoch der Peak bei 400 eV. Verantwortlich für diesen Peak sind bei den anderen beiden Polarisierungen Übergänge der Art $(0,0)_i(m_2,0)_i : (m_2,0)_f$. Dies sind die Übergänge mit maximaler Energie, bei denen das am stärksten gebundene Elektron ionisiert wird. Bei linkszirkularer Polarisation hätte das ungebundene Elektron dabei eine positive magnetische Quantenzahl, nämlich $m = 1$. Zustände mit positiven magnetischen Quantenzahlen haben wir jedoch ausgeschlossen, da diese extrem hoch angeregt sind und ein Landau-Niveau $n > 0$ besetzt ist. In adiabatischer Näherung beschränken wir uns jedoch auf $n = 0$, weshalb es Endzustände dieser Art nicht gibt. Daher werden auch keine entsprechenden Übergänge berechnet.

Allerdings gibt es für zirkulare Polarisation zusätzlich die Übergänge $(0,0)_i(m_2,0)_i : (m_2 \pm 1,0)_f$, welche auch zum Wirkungsquerschnitt bei rund 400 eV beitragen. Der Wirkungsquerschnitt dieser Übergänge ist jedoch vernachlässigbar gering, so dass bei linkszirkular polarisierter Strahlung dieser Peak fehlt.

Um zu verstehen, warum dieser Wirkungsquerschnitt so klein ist, greifen wir auf die

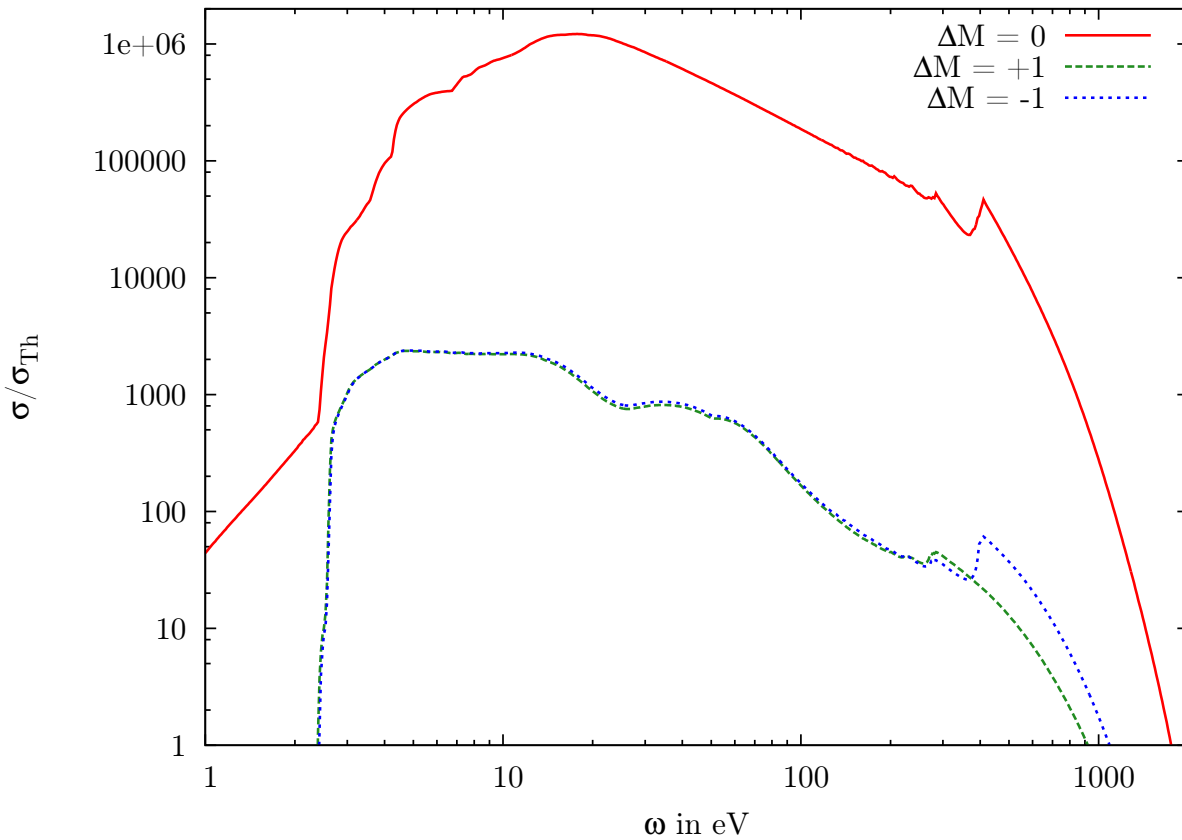


Abb. 7.23.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt für $\Delta M = 0, \pm 1$ bei 150 eV thermischer Energie, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ für lineare Polarisation, $\vartheta = 0$ für zirkuläre Polarisation, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Analyse der Einzelwirkungsquerschnitte in Kapitel 6 zurück. Dort haben wir bereits festgestellt, dass der z -Überlapp der symmetrischen ungebundenen Wellenfunktion mit magnetischer Quantenzahl $m = 0$ und der gebundenen Wellenfunktion $(0,0)_i$ des Anfangszustandes sehr klein ist. Der positive Anteil des Integrals bis zum Nulldurchgang ist beinahe gleich groß wie der negative Anteil nach dem Nulldurchgang. Stehen diese Wellenfunktionen jedoch im Dipolmatrixelement und unterscheiden sich somit in ihrer magnetischen Quantenzahl, so überwiegt einer der beiden Anteile und das Dipolmatrixelement ist betragsmäßig deutlich größer. Der Effekt einer um eins geänderten magnetischen Quantenzahl auf das andere Integral mit den zwei gebundenen Wellenfunktionen ist eher gering. Dieses ist grundsätzlich relativ groß, daher hat die Änderung der magnetischen Quantenzahl um ± 1 keinen starken Einfluss.

Für den Gesamtwirkungsquerschnitt bedeutet dies, dass für alle Polarisationen bei hohen Energien Übergänge der Art $(m_1,0)_i(m_2,0)_i : (m_2,0)_f$ den größten Beitrag liefern, mit $m_4 = m_1$ bei linearer Polarisation beziehungsweise $m_4 = m_1 \pm 1$ bei zirkular polar-

risierter Strahlung. Dies gilt im Übrigen nicht nur für den Fall, dass ungebundenes und gebundenes Elektron im Minor die Quantenzahl $m_1 = 0$ haben, sondern auch für eine beliebige höhere magnetische Quantenzahl dieser beiden Elektronen. Da genau die gleiche Art von Übergängen den Hauptbeitrag liefert, ist der Gesamtwirkungsquerschnitt für linkszirkulare Polarisation dem für rechtszirkulare Polarisation sehr ähnlich, abgesehen vom Fehlen des Peaks bei 400 eV.

Bei der Aufteilung nach Knotenzahlen sind alle Übergänge, die bei linearer Polarisation antisymmetrische ungebundene Wellenfunktionen haben, bei zirkularer Polarisation Übergänge mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion und umgekehrt. Der Grund ist offensichtlich: Bei $\Delta M = 0$ -Übergängen ändert sich die z -Parität, für $\Delta M = \pm 1$ die magnetische Quantenzahl, während die z -Parität erhalten bleibt. Bei festgehaltenen Knotenzahlen kann sich bei linearer Polarisation nur die Parität des ungebundenen Elektrons ändern.

Insgesamt gibt es bei rechts- und linkszirkularer Polarisation je gut 100000 Übergänge mehr als bei linearer Polarisation. Dies liegt an der Begrenzung der Knotenzahl auf $\nu = 2$. Durch diese Beschränkung werden zwei Knotenzahlen mit positiver und nur eine mit negativer z -Parität berücksichtigt. Daher gibt es bei zirkularer Polarisation deutlich mehr Übergänge mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion als mit antisymmetrischer. In den Abbildungen 7.24 und 7.25 ist für links- beziehungsweise rechtszirkular polarisierte Strahlung die Aufteilung nach Übergängen von hochangeregten Ausgangszuständen (beide $\nu > 0$) sowie Übergängen mit symmetrischer und antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion, jeweils ohne hochangeregte Zustände aufgetragen. Die Zahl dieser Übergänge mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion beträgt circa 550000 und nur rund 160000 bei jenen mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion.

Für niedrige Energien bis 20 eV bestimmen Übergänge aus hochangeregten Zuständen den Wirkungsquerschnitt, ab 100 eV liefern die Übergänge mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion den Hauptbeitrag. Übergänge mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion liefern insgesamt nur einen sehr geringen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt. Dieses Verhalten ist also ähnlich wie bei linearer Polarisation jedoch mit vertauschten Rollen: Bei linearer Polarisation dominieren die Übergänge mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion den Wirkungsquerschnitt bei hohen Energien, während die mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion kaum beitragen.

Nun teilen wir den Wirkungsquerschnitt mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion für rechtszirkulare Polarisation noch weiter auf nach Übergängen mit bestimmten Knotenzahlen, siehe Abbildung 7.26. Genau wie bei linearer Polarisation liefern die Übergänge $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$ ab 100 eV den größten Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt. Gemeinsam mit den Übergängen $(\#,0)_i(\#,1)_i : (\#,1)_f$ und $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,2)_f$ sind sie für die Peaks bei 400 eV, 300 eV, ... verantwortlich, bei denen ein tightly-bound Elektron mit der magnetischen Quantenzahl $m = 0, m = 1, \dots$ ionisiert wird.

Eine genauere Aufteilung der Zustände mit antisymmetrischer Wellenfunktion ist nicht notwendig, da diese nur einen sehr geringen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern. Genauso verzichten wir auf die weitere Aufteilung für linkszirkular polarisierte

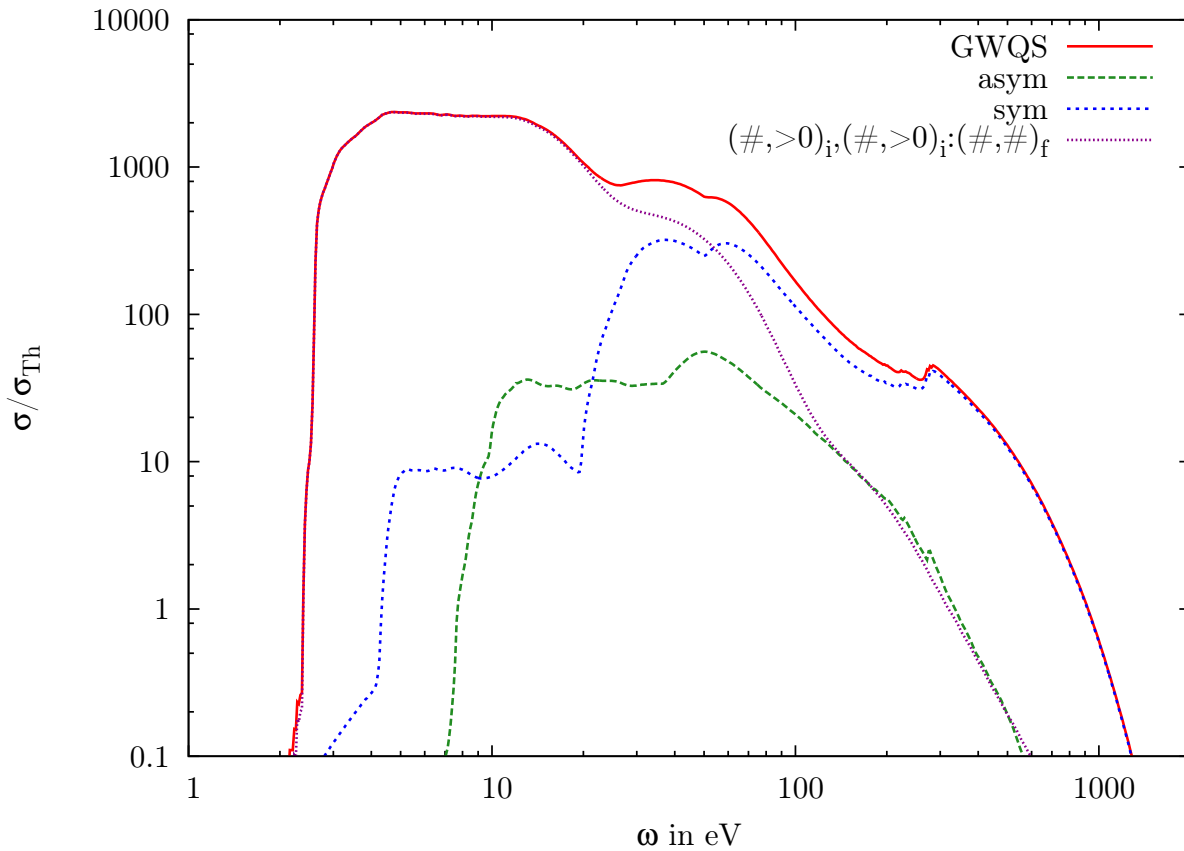


Abb. 7.24.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt aufgeteilt nach Übergängen von hochangeregten Ausgangszuständen, Übergängen mit symmetrischer und antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion (jeweils ohne hochangeregte Zustände) bei 150 eV thermischer Energie für linkszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Strahlung, da die Ergebnisse analog zu denen für rechtszirkular polarisierte Strahlung sind und wir keine zusätzlichen Erkenntnisse daraus gewinnen.

Auch bei zirkularer Polarisation gibt es einige vernachlässigbare Übergänge: Zum Beispiel haben wir bereits festgestellt, dass Übergänge der Art $(0,0)_i(m_2,0)_i : (m_2 \pm 1,0)_f$ nicht berücksichtigt werden müssen. Darüber hinaus sind auch die Übergänge $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,0)_f$ vernachlässigbar, wie wir in Abbildung 7.26 erkennen können. Weitere für den Gesamtwirkungsquerschnitt irrelevante Anteile ließen sich wie bei linearer Polarisation durch eine genauere Aufteilung der Übergänge aus hochangeregten Zuständen sowie der Übergänge mit antisymmetrischer Wellenfunktion finden.

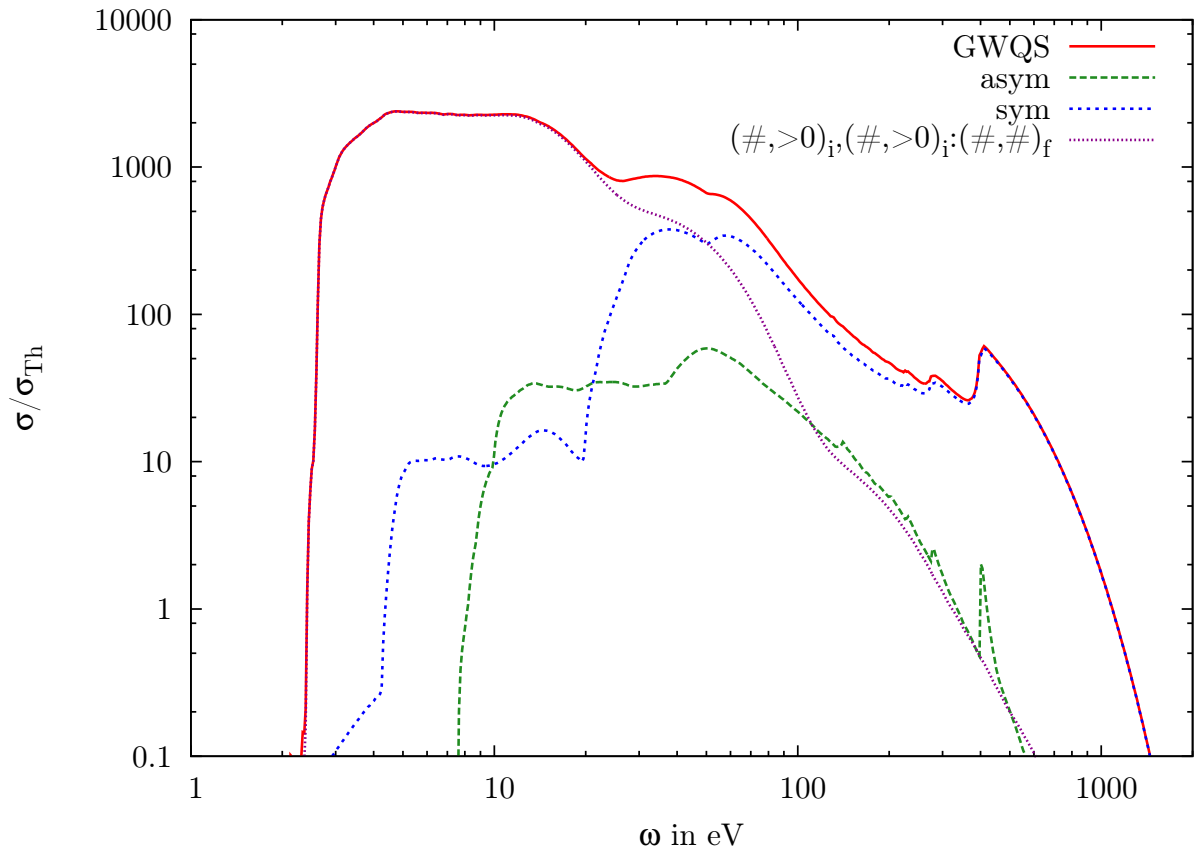


Abb. 7.25.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt aufgeteilt nach Übergängen von hochangeregten Ausgangszuständen, Übergänge mit symmetrischer und antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion (jeweils ohne hochangeregte Zustände) bei 150 eV thermischer Energie für rechtszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

7.5.5. Heliumionen

Den Wirkungsquerschnitt von neutralem Helium haben wir in den vorigen Abschnitten ausführlich untersucht. Nun folgt die Analyse von Übergängen, bei denen ein Heliumion ionisiert wird. Diese gestaltet sich hier deutlich einfacher: Da nur ein Elektron an dem Prozess beteiligt ist, reduziert sich die Doppelsumme in den Formeln für den Gesamtwirkungsquerschnitt 4.43, 4.44 und 4.45 auf einen Term, das Dipolmatrixelement. Die Anzahl der Einzelübergänge beträgt nur etwa 600 je Polarisation. Wir beschränken uns also auf ein paar wenige Analysen, da sich eine Suche nach vernachlässigbaren Zuständen bei dieser geringen Zahl an Übergängen erübrigt.

Zunächst betrachten wir den Gesamtwirkungsquerschnitt für die drei verschiedenen Polarisationen, siehe Abbildung 7.27. Wie schon bei neutralem Helium sind die Wir-

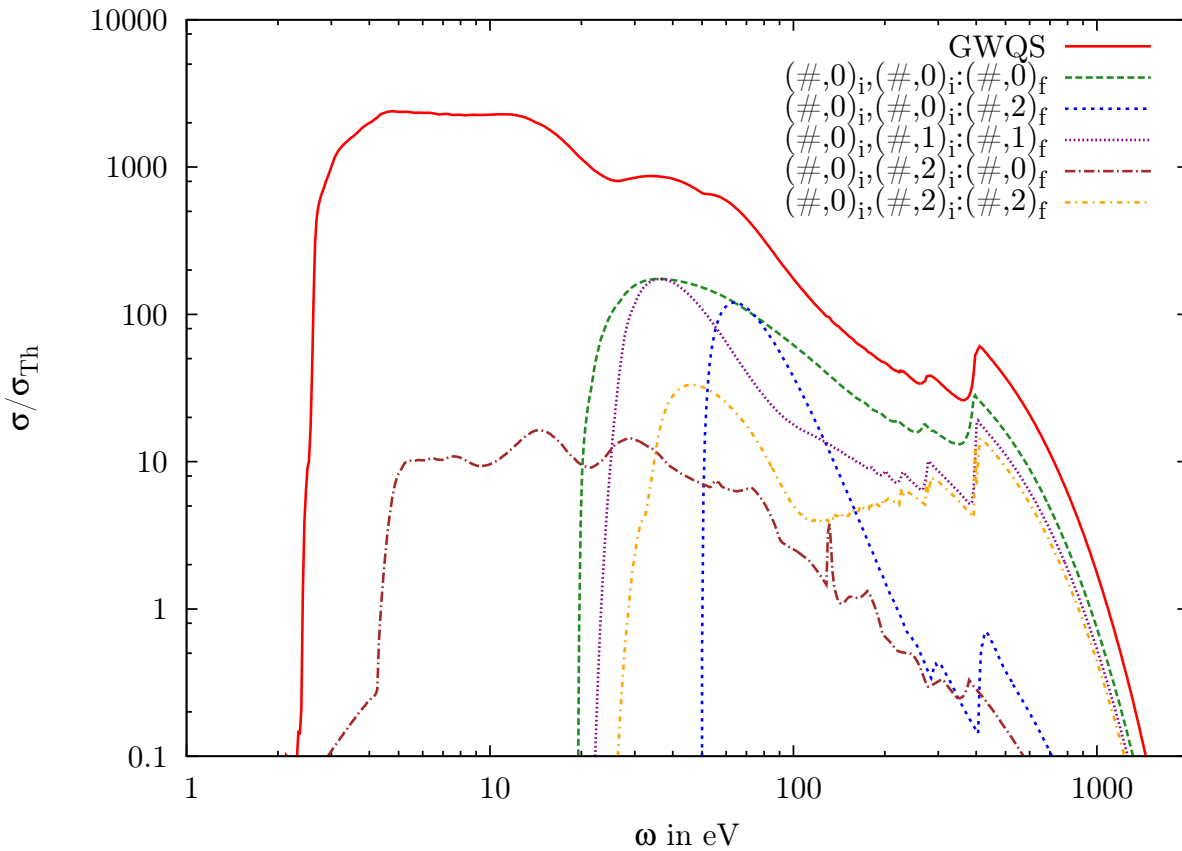


Abb. 7.26.: Helium: Gesamtwirkungsquerschnitt und Beiträge von Übergängen mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion, nach Knotenzahl der gebundenen Zustände aufgeteilt, bei 150 eV thermischer Energie für rechtszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

kungsquerschnitte für zirkular polarisierte Strahlung deutlich kleiner als die für linear polarisierte. Das Dipolmatrixelement mit der antisymmetrischen ungebundenen Wellenfunktion und der gebundenen Wellenfunktion $(m_1,0)_i$ ist wie schon bei neutralem Helium groß, was den vergleichsweise hohen Wirkungsquerschnitt für $\Delta M = 0$ erklärt. Bei $\Delta M = \pm 1$ hingegen steht im Dipolmatrixelement neben der gebundenen Wellenfunktion $(m_1,0)_i$ die symmetrische ungebundene Wellenfunktion mit der magnetischen Quantenzahl $m_1 \pm 1$. Deren z -Überlapp ist, wie wir bereits herausgefunden haben, deutlich geringer.

Eine Aufteilung der Übergänge nach der Knotenzahl der gebundenen Zustände zeigt Abbildung 7.28. Die Beiträge von Übergängen, bei denen ein Elektron mit der Knotenzahl $\nu = 0$, $\nu = 1$ oder $\nu = 2$ ionisiert wird, überlappen zwar, die jeweiligen Ionisationsschwellen sind jedoch im Gesamtwirkungsquerschnitt gut zu erkennen.

Die Peaks bei hohen Energien stammen wieder von der Ionisierung eines tightly-bound

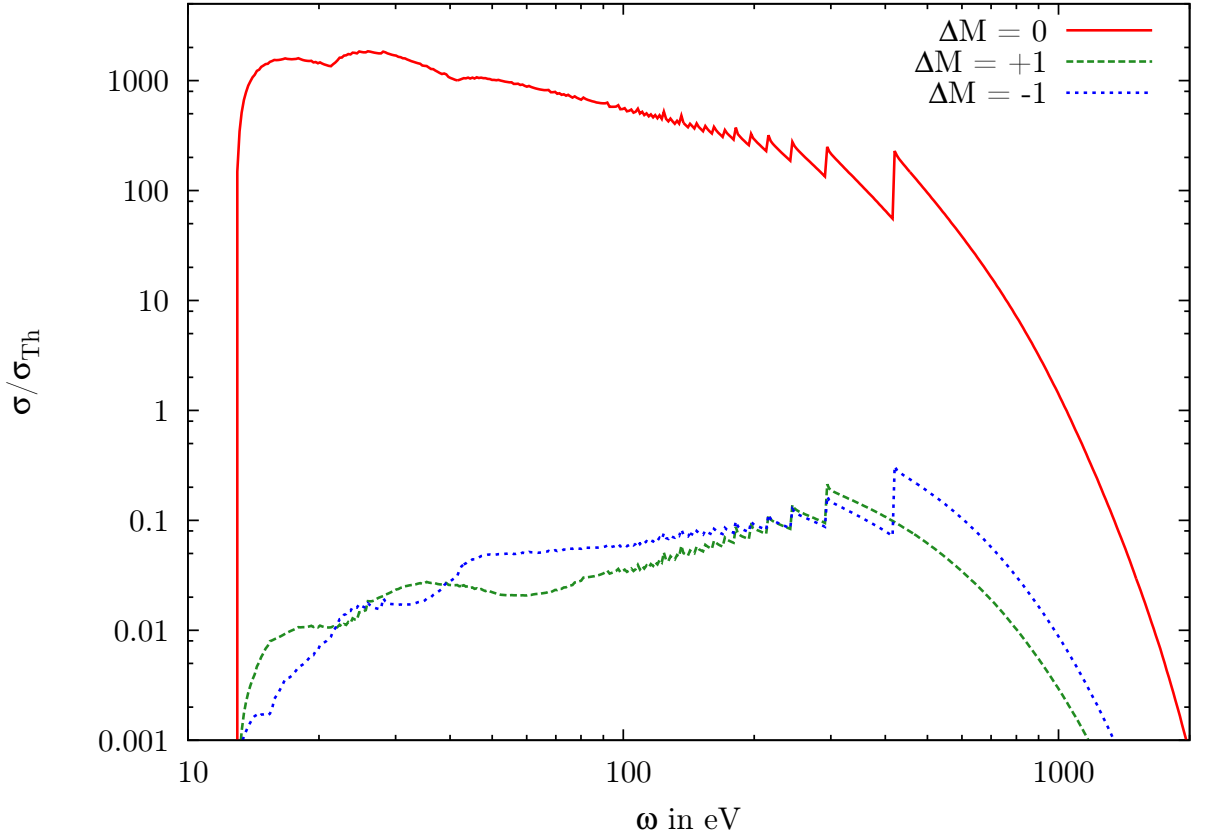


Abb. 7.27.: Gesamtwirkungsquerschnitt von Heliumionen für $\Delta M = 0, \pm 1$ bei 150 eV thermischer Energie, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ für lineare Polarisation, $\vartheta = 0$ für zirkuläre Polarisation, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Elektrons und sind deutlich ausgeprägter als die bei niedrigen Energien, da dort die Zustände und somit auch die Übergänge energetisch dichter beieinander liegen und die Einzelwirkungsquerschnitte stark überlappen. Im Gegensatz zu neutralem Helium, wo es einige Übergänge gibt, bei denen beispielsweise das Elektron $(0,0)_i$ ionisiert wird, gibt es hier für jeden Ausgangszustand exakt einen Übergang für jede Polarisation. Den Peaks bei hohen Energien kann also jeweils ein Einzelwirkungsquerschnitt zugeordnet werden.

Zuletzt betrachten wir noch den Wirkungsquerschnitt für verschiedene minimale magnetische Quantenzahlen, siehe Abbildung 7.29. Mit steigendem m_{\min} verschieben sich die Ionisationsschwellen zu höheren Energien und die Wirkungsquerschnitte der Übergänge aus den drei verschiedenen Knotenzahlen überlappen immer weniger. Dabei fällt der Wirkungsquerschnitt vor der Ionisationsschwelle der tightly-bound Elektronen auf immer geringere Werte ab.

Der im Gegensatz zu neutralem Helium sowieso schon sehr strukturreiche Wirkungsquerschnitt wird dabei nochmals kantiger. Dies liegt an der deutlich geringeren Zahl der

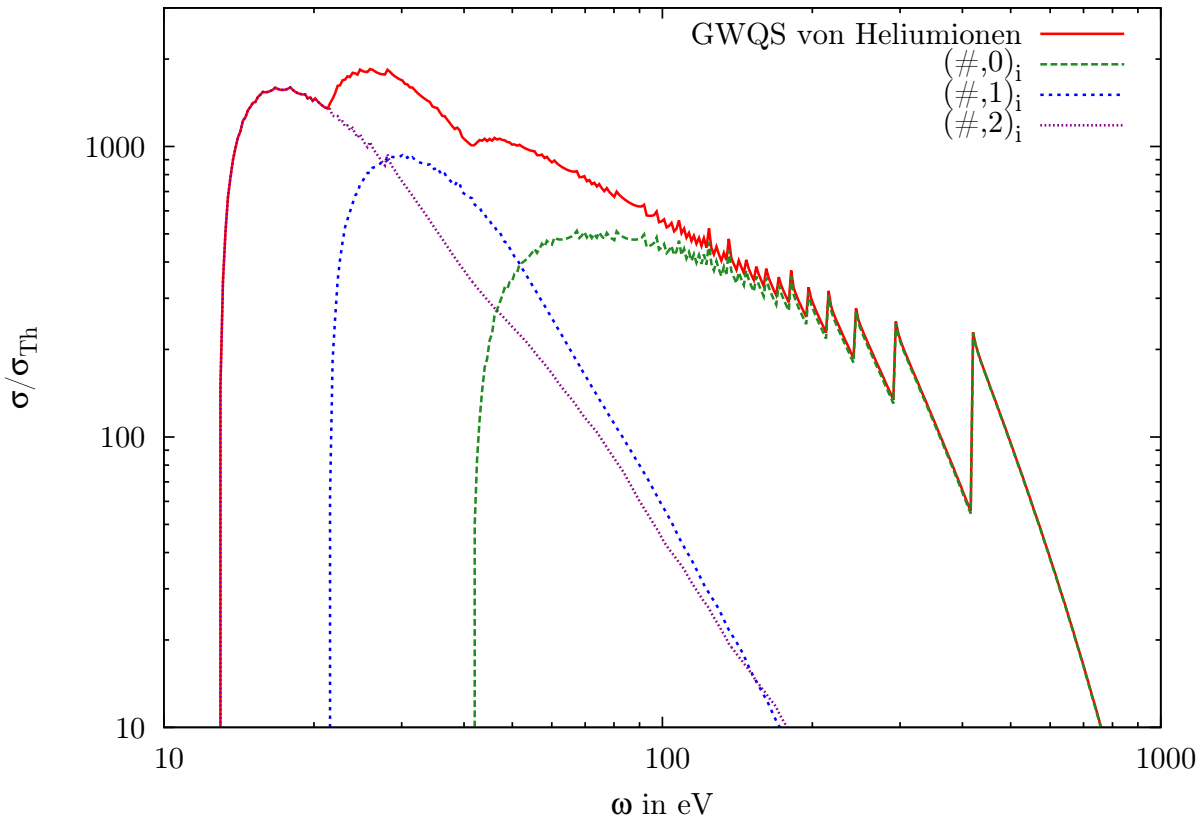


Abb. 7.28.: Heliumionen: Gesamtwirkungsquerschnitt und Anteile von der Ionisation eines gebundenen Elektrons mit Knotenzahl $\nu = 0$, $\nu = 1$ beziehungsweise $\nu = 2$ bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Übergänge.

7.6. Sauerstoffionen

Im Folgenden werden wir den Gesamtwirkungsquerschnitt von heliumartigen Sauerstoffionen nach denselben Aspekten analysieren wie den von Helium, wobei die Analyse nicht so detailliert ausfällt, da wir viele der dortigen Erkenntnisse verwenden können. In Abschnitt 6.1.3 haben wir gezeigt, dass der Einzelwirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,1)_f$ gegenüber $(0,0)_i(-199,0)_i : (-199,0)_f$ für die betrachteten Kernladungen vernachlässigbar klein ist. Nun werden wir untersuchen, ob derartige Verallgemeinerungen auch für den Gesamtwirkungsquerschnitt zutreffen.

Zunächst überlegen wir uns jedoch, welche Auswirkungen eine höhere Kernladung hat: Bei heliumähnlichen Sauerstoffionen sind die Zustände stärker gebunden als bei Helium.

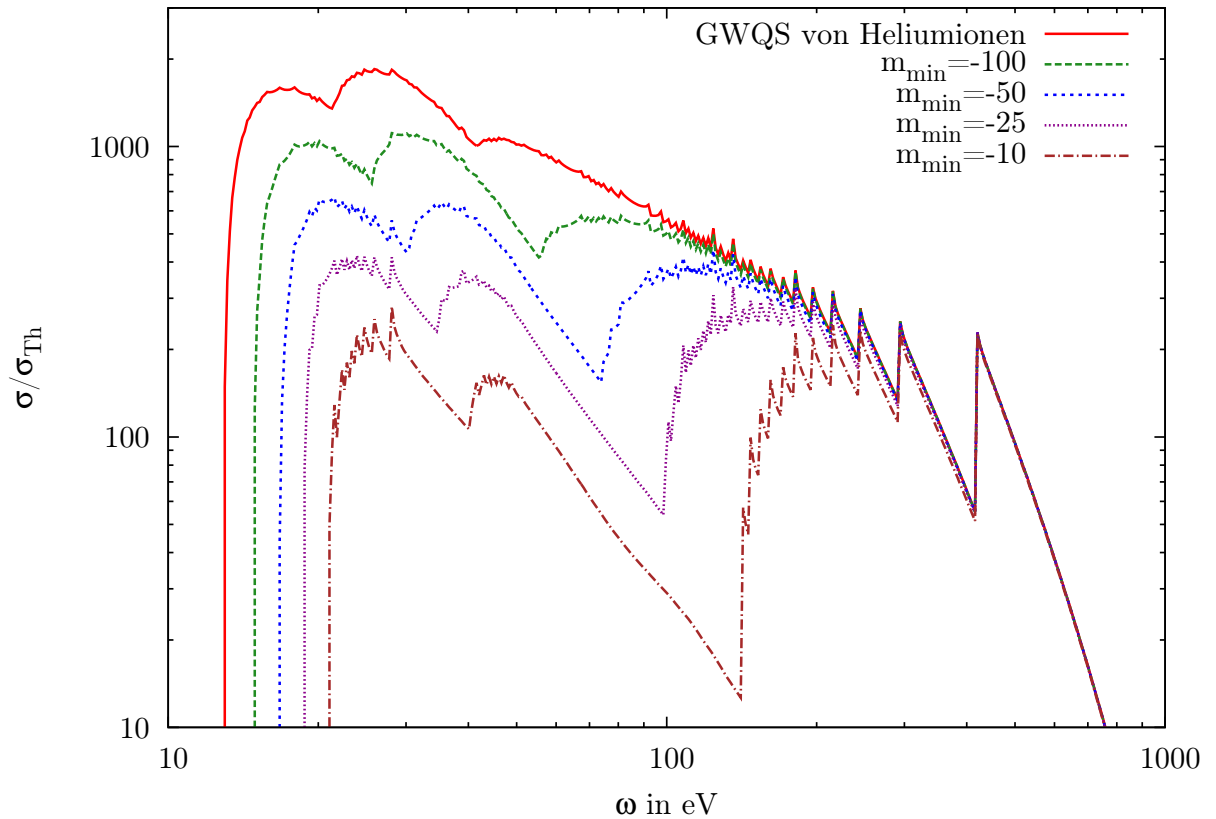


Abb. 7.29.: Heliumionen: Wirkungsquerschnitt bei verschiedenen m_{\min} bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Dadurch werden auch die Energiedifferenzen zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen größer, weswegen die Besetzung angeregter Zustände abnimmt. Außerdem werden höhere Energien für die Übergänge benötigt, wodurch der Wirkungsquerschnitt in anderen Energiebereichen Maxima aufweist. Somit wirkt sich die Einbeziehung der Photonendichte natürlich auch anders auf den Gesamtwirkungsquerschnitt aus.

Weiterhin ist zu untersuchen, wie sich eine höhere Kernladung auf die Wellenfunktionen von gebundenen und ungebundenen Elektronen auswirkt und welchen Effekt dies auf den Wirkungsquerschnitt hat. Die höhere Kernladung sorgt für eine stärkere Bindung der Elektronen, also eine geringere Ausdehnung. Gebundene Elektronen sind auf eins normiert, weswegen die Wellenfunktionen bei geringerer Ausdehnung betragsmäßig größere Werte erreichen, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe nimmt zu. Die ungebundenen Wellenfunktionen jedoch werden innerhalb eines Periodizitätsvolumens normiert. Je tiefer das Kernpotential im Vergleich zur Energie des ungebundenen Elektrons ist, desto geringere Werte nimmt die Wellenfunktion in Kernnähe an, wie wir schon

in Abschnitt 6.1.2 gesehen haben.

Der Überlapp gebundener Wellenfunktionen ändert sich bei höherer Kernladung nicht allzu drastisch, beide Elektronen haben eine geringere Ausdehnung aber größere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe. Da bei den ungebundenen Wellenfunktionen jedoch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe sinkt statt zu steigen, wird der Überlapp zwischen ungebundenen und gebundenen Wellenfunktionen geringer und der Wirkungsquerschnitt sinkt folglich mit steigender Kernladung.

Von diesen Änderungen abgesehen erwarten wir jedoch wie bei den Einzelwirkungsquerschnitten ein sehr ähnliches Verhalten wie bei Helium. Wir beginnen wieder mit der Untersuchung der Beiträge von Übergängen mit bestimmten Knotenzahlen der gebundenen Wellenfunktionen zum Gesamtwirkungsquerschnitt, wobei wir uns zunächst auf linear polarisierte Strahlung ($\Delta M = 0$) beschränken.

7.6.1. Analyse nach Knotenzahlen der gebundenen Zustände

In Abbildung 7.30 ist der Gesamtwirkungsquerschnitt nach Anteilen von Übergängen mit verschiedenen Knotenzahlen der gebundenen Zustände aufgeteilt. Durch die im Vergleich zu Helium großen Unterschiede in der Besetzungswahrscheinlichkeit der Ausgangszustände ist die Zahl der zu berücksichtigenden Übergänge deutlich geringer: Nur die Übergänge $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$, $(\#,0)_i(\#,1)_i : (\#,0)_f$ und $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,0)_f$ tragen maßgeblich zum Gesamtwirkungsquerschnitt bei. Neben diesen drei Anteilen ist auch deren Summe, also alle Übergänge aufgetragen, die den Gesamtwirkungsquerschnitt perfekt abbildet. Alle anderen Arten von Übergängen liefern also vernachlässigbar kleine Beiträge zum Gesamtwirkungsquerschnitt und sind daher gar nicht erst aufgeführt.

Im Bereich bis circa 80 eV bestimmen Übergänge aus hochangeregten Anfangszuständen mit beiden Knotenzahlen größer null den Gesamtwirkungsquerschnitt. Dieser ist jedoch aufgrund der geringen Besetzungswahrscheinlichkeit dieser Zustände um einige Größenordnungen kleiner als der Wirkungsquerschnitt um 100 eV. Daher wurde in Abbildung 7.30 zur besseren Übersichtlichkeit der Wirkungsquerschnitt ab dem Wert $10^{-5} \times \sigma_{\text{Th}}$ beziehungsweise ab einer Energie von 70 eV gezeigt. Der Vollständigkeit halber wollen wir jedoch auch den Energiebereich vor 80 eV sowie den dortigen Wirkungsquerschnitt betrachten. Abbildung 7.31 zeigt den Gesamtwirkungsquerschnitt ab 1 eV sowie den Beitrag von Übergängen mit hochangeregtem Ausgangszustand. Der Gesamtwirkungsquerschnitt in diesem Energiebereich hängt wieder sehr stark von der Begrenzung der Quantenzahlen ab. Würden wir beispielsweise höhere Knotenzahlen als $\nu = 2$ berücksichtigen, so wäre der Wirkungsquerschnitt im Bereich vor 80 eV deutlich größer. Bei der weiteren Analyse werden wir den Energiebereich bis 80 eV aufgrund der verschwindend kleinen Wirkungsquerschnitte nicht berücksichtigen.

Die geringere Besetzung der Ausgangszustände bei heliumähnlichen Sauerstoffionen hat noch weitere Auswirkungen: Bei Helium tragen zu den Peaks bei hohen Energien jeweils rund 600 Übergänge bei, hier liefert ein einzelner Übergang den Hauptbeitrag. Dadurch sind deutlich mehr scharfe Peaks zu erkennen, es findet kaum eine Glättung

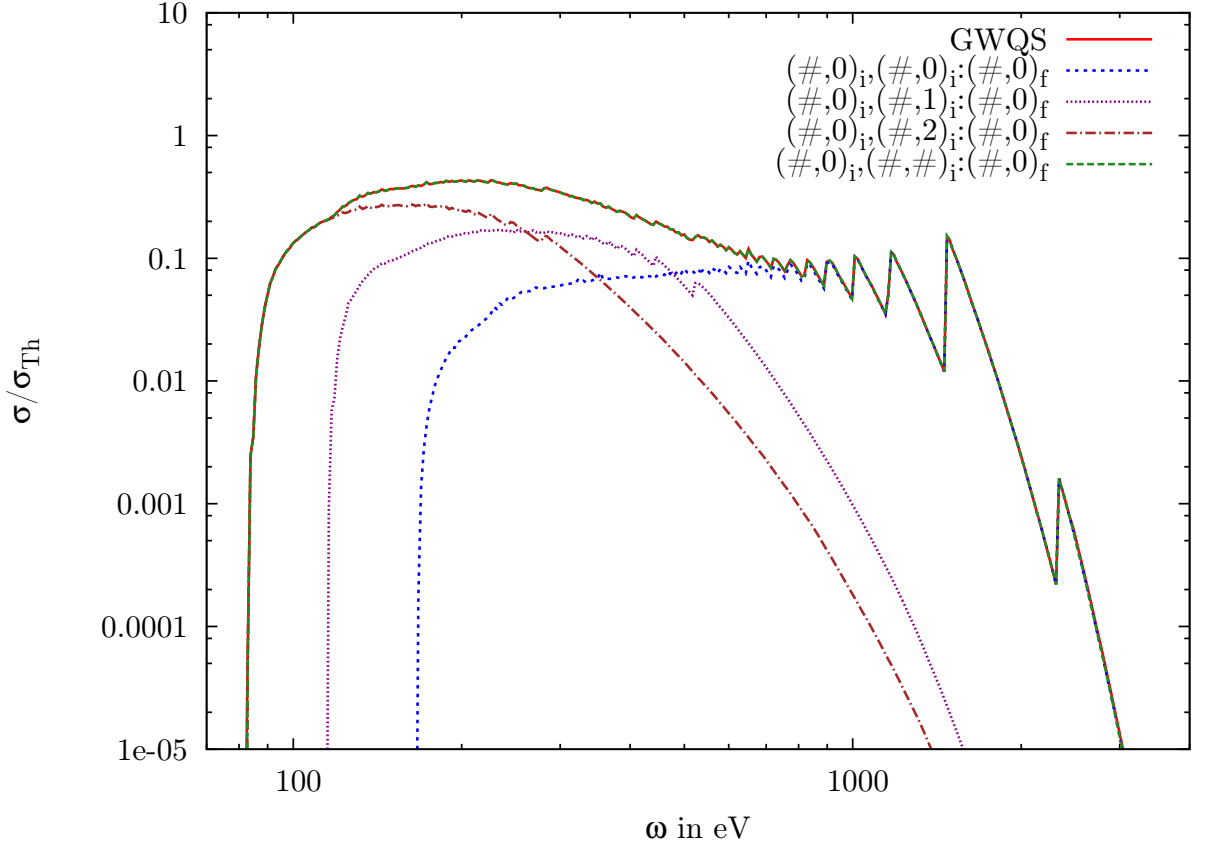


Abb. 7.30.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt aufgeteilt nach Beiträgen von Übergängen mit bestimmten Knotenzahlen bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

durch die Summierung aus mehreren Einzelwirkungsquerschnitten statt. Dass die Peaks deutlich mehr herausstechen und besser zu trennen sind als bei Helium liegt an den höheren Energiedifferenzen, bedingt durch die größeren Bindungsenergien.

Einige der Einzelübergänge, die den Gesamtwirkungsquerschnitt maßgeblich prägen, sind in Abbildung 7.32 zu sehen. Wie erwartet werden die Abstände zwischen den Peaks mit abnehmendem m geringer. Außerdem sind die Peaks umso höher, je größer die Ionisationsschwelle des Übergangs ist, mit einer Ausnahme: Der letzte Peak, welcher bei Helium am stärksten herausragt, liegt hier durch die in diesem Energiebereich stark abfallende Photonendichte deutlich tiefer als die vorigen. Bei den anderen Peaks spielen die größere Übergangsenergie (Faktor ω_{fi} in Formel (4.43)) und vor allem die mit steigendem m höher werdende Besetzung der Ausgangszustände die entscheidende Rolle. Dass der Gesamtwirkungsquerschnitt bei kleinen Energien um 100 eV dennoch größer ist, liegt an der zunehmenden Dichte der Übergänge, die dann in Summe einen größeren Wert ergeben.

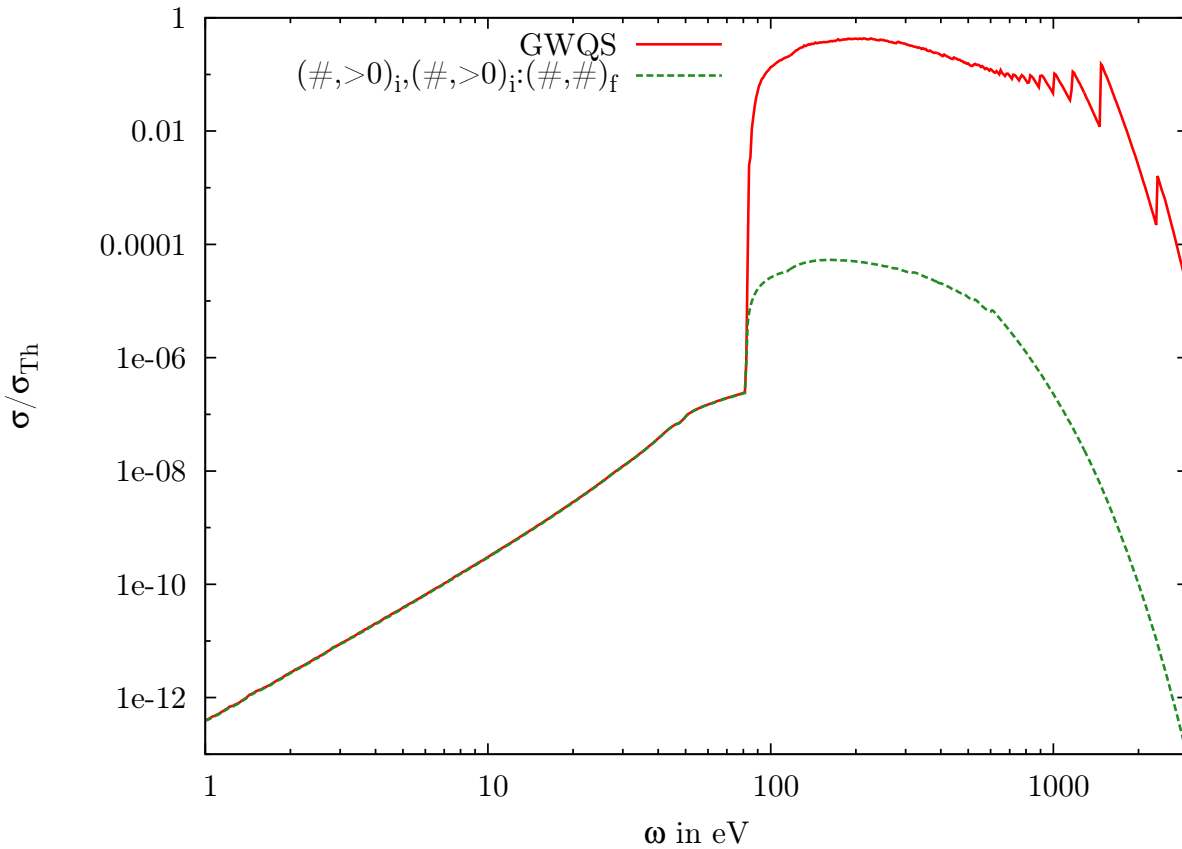


Abb. 7.31.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt sowie Anteil der Übergänge aus hochangeregten Anfangszuständen bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Da bei heliumähnlichen Sauerstoffionen teilweise einzelne Übergänge den Gesamtwirkungsquerschnitt bestimmen, liegt die Vermutung nahe, dass hier deutlich weniger Übergänge als bei Helium berücksichtigt werden müssen, um den Gesamtwirkungsquerschnitt abzubilden. Wir wissen bereits, dass die Besetzung hier eine entscheidende Rolle spielt und betrachten daher nur stark gebundene Anfangszustände, bei denen ein Elektron im energetisch günstigsten Zustand $(0,0)_i$ ist.

Die Analyse nach Knotenzahlen hat gezeigt, dass nur die Übergänge $(\#,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$, $(\#,0)_i(\#,1)_i : (\#,0)_f$ und $(\#,0)_i(\#,2)_i : (\#,0)_f$ berücksichtigt werden müssen. Außerdem ist üblicherweise der Wirkungsquerschnitt kleiner für Übergänge, bei denen sich die Quantenzahlen beider Elektronen ändern, als für Übergänge, bei denen das nicht ionisierte Elektron seine Konfiguration behält.

Filtern wir von den zu berücksichtigenden Übergängen nur diejenigen mit einem Elektron $(0,0)$ in Anfangs- und Endzustand heraus, so bestimmen diese 599 Übergänge den Gesamtwirkungsquerschnitt mit Ausnahme des letzten Peaks, siehe Abbildung 7.33. Neh-

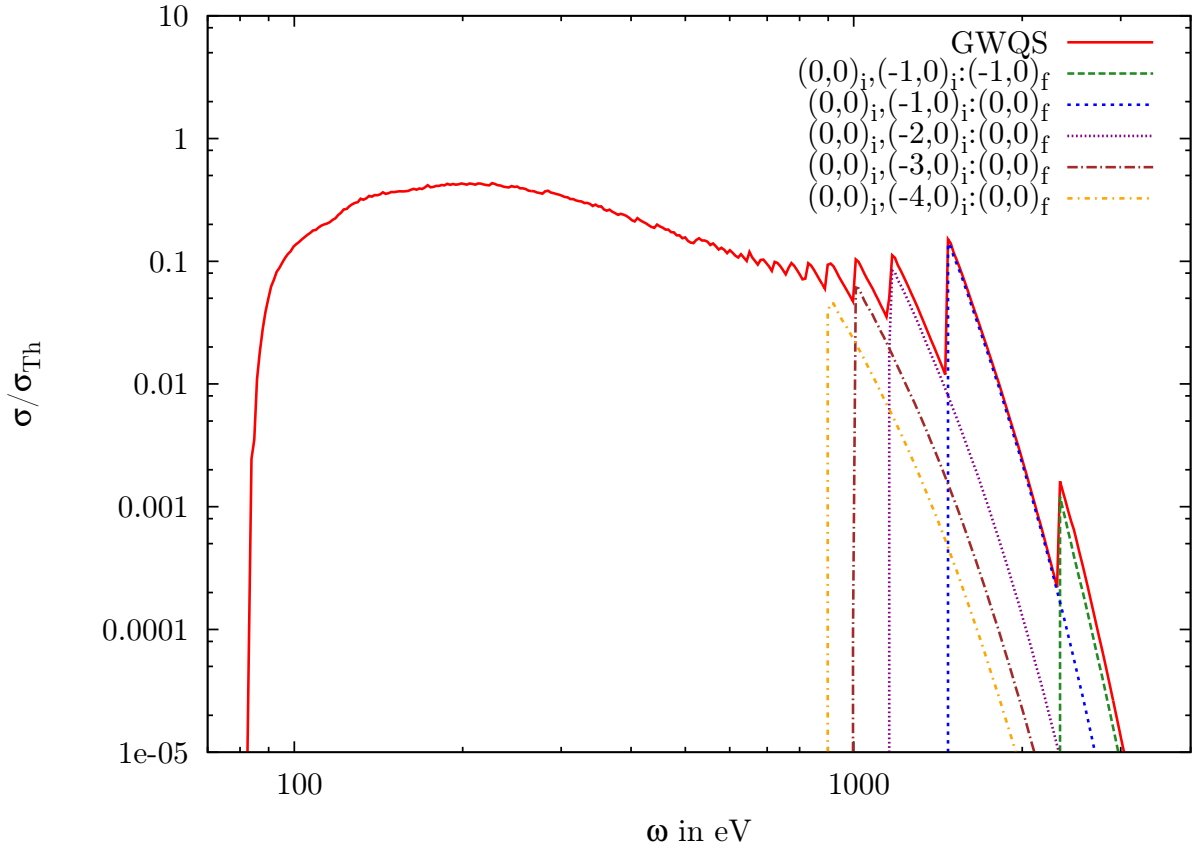


Abb. 7.32.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt und einige Einzelwirkungsquerschnitte bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

men wir nun noch die Übergänge $(0,0)_i(m_2,0)_i : (m_2,0)_f$ hinzu, so erhalten wir den kompletten Gesamtwirkungsquerschnitt, wobei wir uns ohne größere Einbußen in der Genauigkeit auf den Bereich von -1 bis -5 für die Quantenzahl m_2 einschränken können.

Damit haben wir zusammen 604 Übergänge, die den Gesamtwirkungsquerschnitt beschreiben, für den wir ursprünglich über eine Million Übergänge berechnet haben. Ausgenommen hiervon ist wie bereits erwähnt der Energiebereich bis 80 eV, wo der Wirkungsquerschnitt um mehrere Größenordnungen kleiner ist als bei den hier betrachteten Energien.

7.6.2. Analyse nach magnetischen Quantenzahlen

Im vorigen Abschnitt haben wir herausgefunden, dass nur Übergänge mit einem Elektron in $(0,0)_i$ berücksichtigt werden müssen. Eine Betrachtung des Wirkungsquerschnitts

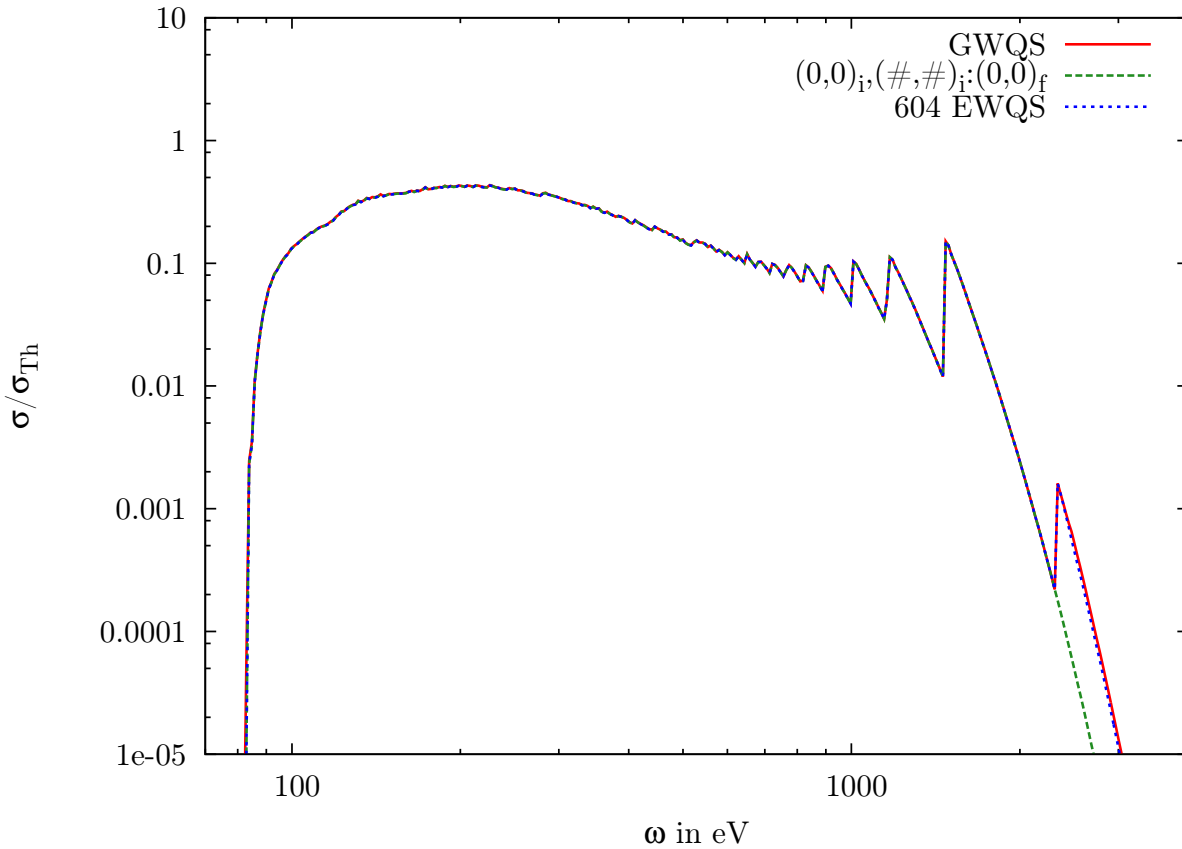


Abb. 7.33.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt, Wirkungsquerschnitt der Übergänge $(0,0)_i(\#, \#)_i : (0,0)_f$ sowie die Summe der 604 beschriebenen Einzelwirkungsquerschnitte (EWQS) bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

für bestimmte maximale magnetische Quantenzahlen oder mit mindestens einer magnetischen Quantenzahl größer als ein bestimmter Wert erübrigt sich somit. Daher untersuchen wir nur den Wirkungsquerschnitt für verschiedene minimale Quantenzahlen, siehe Abbildung 7.34.

Mit zunehmendem m_{\min} verschiebt sich wie erwartet die Ionisationsschwelle zu höheren Energien. Bei $m_{\min} = -10$ sind die fünf letzten Peaks gleich hoch wie beim Gesamtwirkungsquerschnitt mit $m_{\min} = -200$. Die vorausgehenden Peaks bei niedrigeren Energien haben jedoch immer geringere Werte, was für die Kurven mit anderen m_{\min} nicht der Fall ist. Daran sieht man deutlich, dass die Höhe der Peaks aufgrund der geringeren Besetzung der Ausgangszustände stark abnimmt, dies jedoch dadurch kompensiert wird, dass die Maxima immer näher beieinander liegen und in der Summe ähnlich hoch sind wie die Peaks bei höheren Energien.

Außerdem lässt sich bei $m_{\min} = -10$ eine Trennung ausmachen in Energiebereiche, in

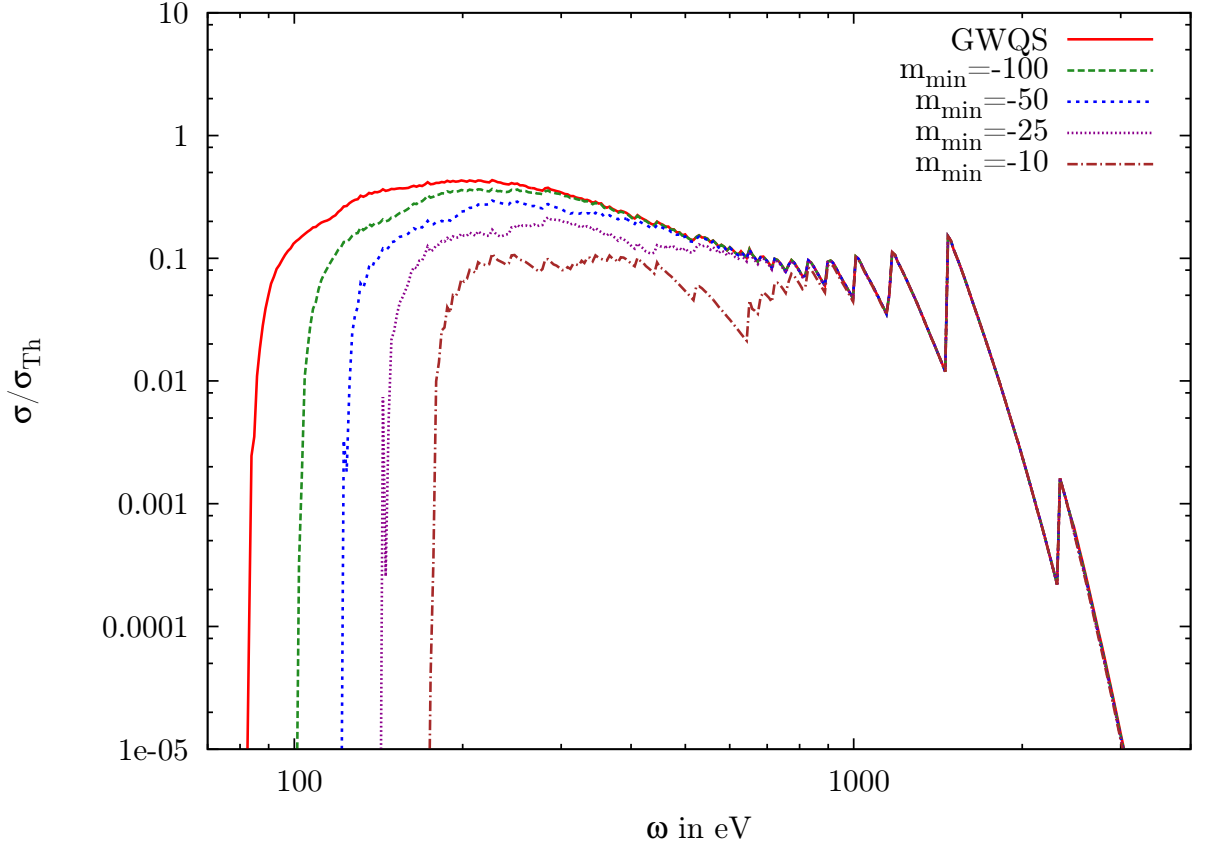


Abb. 7.34.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt bei unterschiedlichen m_{\min} bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

denen jeweils eine Art von Übergängen den Hauptbeitrag liefert: Im Bereich bis etwa 300 eV die Übergänge $(0,0)_i(\#,2)_i : (0,0)_f$, bei denen ein Elektron mit Knotenzahl $\nu = 2$ ionisiert wird, zwischen 300 eV und 600 eV die Übergänge $(0,0)_i(\#,1)_i : (0,0)_f$ und ab 600 eV die Übergänge $(0,0)_i(\#,0)_i : (\#,0)_f$.

7.6.3. Analyse nach Besetzung des Ausgangszustandes

Wir haben schon des Häufigeren von der geringen Besetzung der Ausgangszustände gesprochen, nun wollen wir untersuchen, bis zu welcher unteren Grenze der Besetzungswahrscheinlichkeit der Ausgangszustände wir Übergänge berücksichtigen müssen. Der Gesamtwirkungsquerschnitt für verschiedene minimale Besetzungen ist in Abbildung 7.35 gezeigt.

Im Gegensatz zu Helium, wo es keine Anfangszustände mit geringerer Besetzung als 10^{-2} gibt, sind bei heliumähnlichen Sauerstoffionen die Besetzungswahrscheinlichkeiten

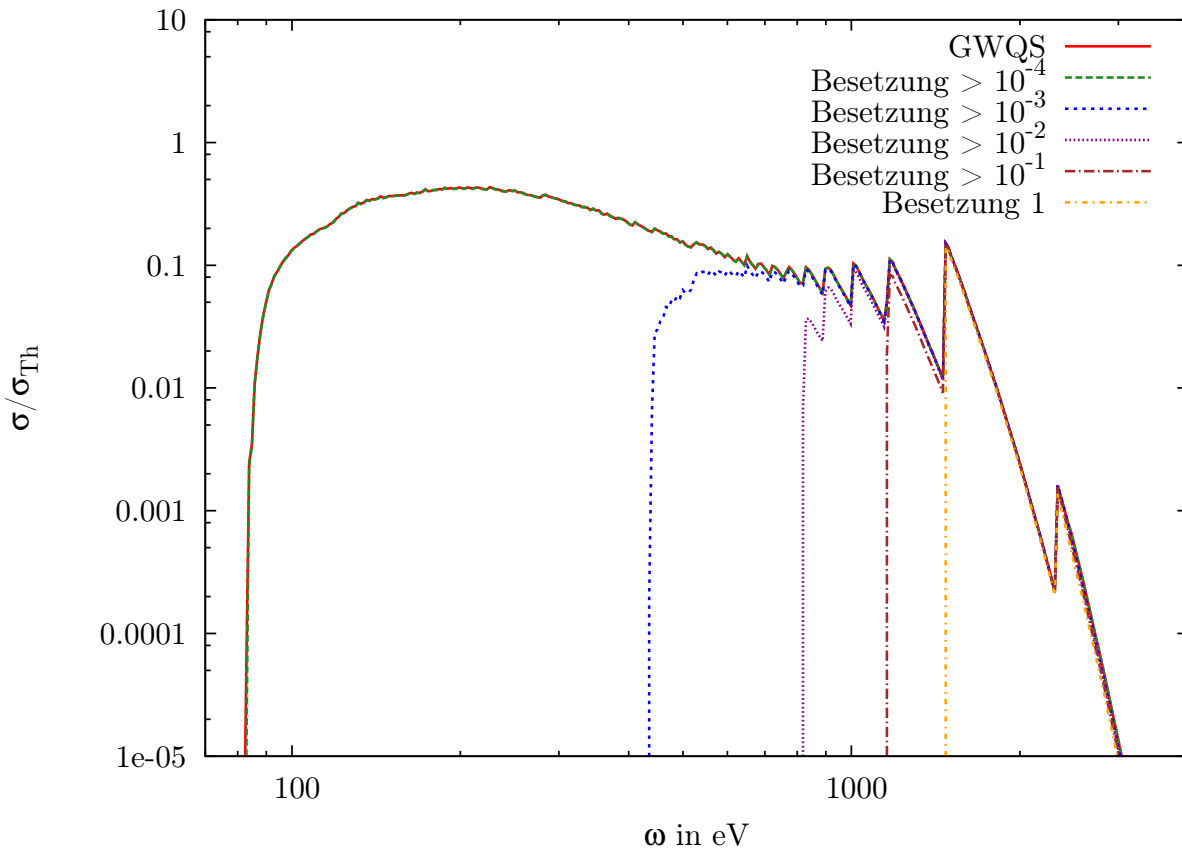


Abb. 7.35.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt und Wirkungsquerschnitte, bei denen nur Ausgangszuständen mit bestimmter minimaler Besetzung berücksichtigt werden bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

angeregter Zustände deutlich geringer. Um den gezeigten Gesamtwirkungsquerschnitt abzubilden, müssen wir 10^{-4} als untere Grenze der Besetzung wählen. Hierin sind jedoch noch nicht alle Übergänge enthalten, lediglich ein kleiner Bruchteil (3600) der insgesamt über eine Million Übergänge hat einen Ausgangszustand mit Besetzungswahrscheinlichkeit 10^{-4} oder höher. Wollen wir auch den Wirkungsquerschnitt aus hochangeregten Ausgangszuständen berücksichtigen, müssen wir als minimale Besetzungswahrscheinlichkeit 10^{-11} wählen. Das erklärt den extrem geringen Wirkungsquerschnitt der Übergänge aus hochangeregten Zuständen.

7.6.4. Zirkular polarisierte Strahlung

Für zirkular polarisierte Strahlung ergibt sich ein ähnliches Bild wie bei Helium. Der Gesamtwirkungsquerschnitt für zirkuläre Polarisation ist im gesamten Energiebereich

7. Gesamtwirkungsquerschnitt

um etwa zwei Größenordnungen kleiner, siehe Abbildung 7.36. Links- und rechtszirkular polarisierte Strahlung haben einen sehr ähnlichen Wirkungsquerschnitt, wobei bei linkszirkularer Polarisation der letzte Peak bei rund 2200 eV fehlt. Dieses Verhalten haben wir bereits in Abschnitt 7.5.4 ausführlich diskutiert: Der deutlich kleinere Wirkungsquerschnitt bei zirkularer Polarisation ist auf den kleineren Wert des Dipolmatrixelementes mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion zurückzuführen. Die Wirkungsquerschnitte bei links- und rechtszirkularer Polarisation werden von sehr ähnlichen Übergängen verursacht, die sich nur darin unterscheiden, ob das ungebundene Elektron im Dipolmatrixelement eine um eins höhere oder geringere magnetische Quantenzahl als das gebundene besitzt. Das Fehlen des letzten Peaks bei linkszirkular polarisierter Strahlung ist dadurch zu erklären, dass das ungebundene Elektron in adiabatischer Näherung keine positiven magnetischen Quantenzahlen annehmen kann.

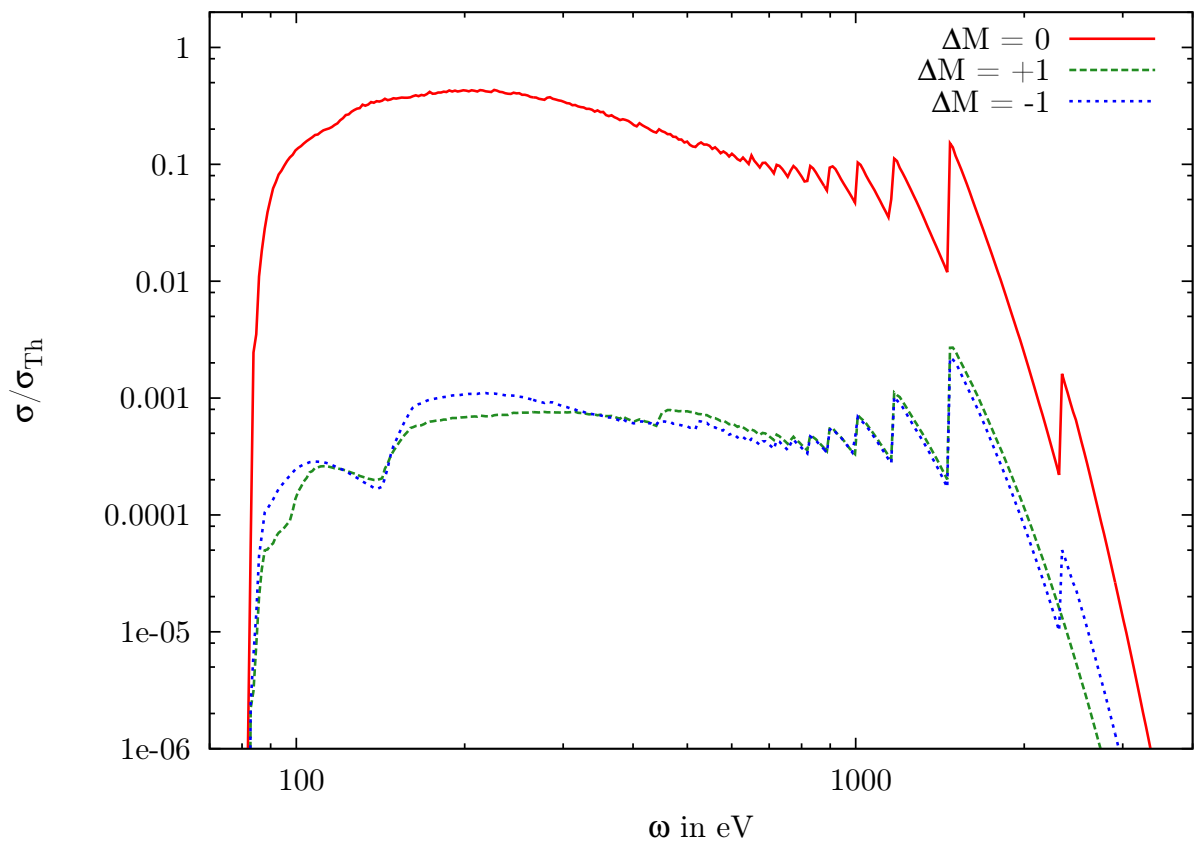


Abb. 7.36.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt für $\Delta M = 0, \pm 1$ bei 150 eV thermischer Energie, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ für lineare Polarisation, $\vartheta = 0$ für zirkulare Polarisation, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Bei der Analyse des Wirkungsquerschnitts von Helium nach Knotenzahlen der gebundenen Zustände haben wir festgestellt, dass bei zirkularer Polarisation die gleichen

Arten von Übergängen wie bei linearer Polarisation den Hauptbeitrag liefern. Für heliumähnliche Sauerstoffionen betrachten wir daher direkt den Wirkungsquerschnitt der 604 Übergänge aus Abschnitt 7.6.1, genauer gesagt Übergänge mit denselben Quantenzahlen der gebundenen Elektronen, siehe Abbildung 7.37.

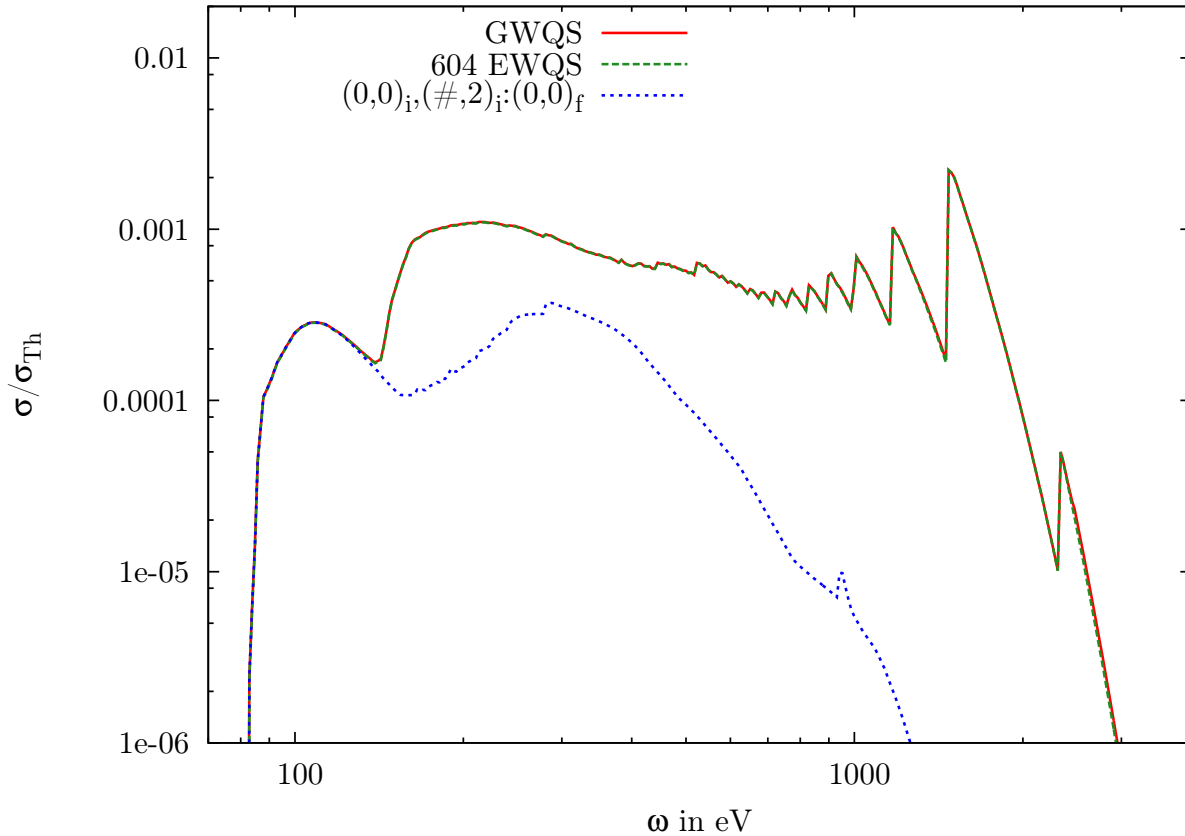


Abb. 7.37.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt, Übergänge der Art $(0,0)_i(\#, \#)_i : (0,0)_f$ sowie Summe der 604 Einzelwirkungsquerschnitte bei 150 eV thermischer Energie für rechtszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Auch hier reicht es, statt der über eine Million Übergänge diese 604 zu berücksichtigen, um den Gesamtwirkungsquerschnitt zu erhalten. Daraus schließen wir, dass auch hier nur die Übergänge der Art $(0,0)_i(\#, 2)_i : (0,0)_f$, $(0,0)_i(\#, 1)_i : (0,0)_f$ und $(0,0)_i(m_2, 0)_i : (m_2, 0)_f$ für $-1 \leq m_2 \leq -5$ für den Gesamtwirkungsquerschnitt relevant sind. Bei linkszirkular polarisierter Strahlung können wir sogar noch auf die Übergänge $(0,0)_i(m_2, 0)_i : (m_2, 0)_f$ verzichten. Da auch hier außer der kompletten Übereinstimmung von Gesamtwirkungsquerschnitt und Summe der 599 Einzelwirkungsquerschnitte ($(0,0)_i(\#, \#)_i : (0,0)_f$) keine weiteren Erkenntnisse folgen, verzichten wir auf ein entsprechendes Schaubild für linkszirkular polarisierte Strahlung.

7. Gesamtwirkungsquerschnitt

Eine weitere Analyse nach Beiträgen von Übergängen mit bestimmten Knotenzahlen beziehungsweise nach Besetzung des Ausgangszustandes erübrigt sich damit eigentlich. Für zirkular polarisierte Strahlung fällt jedoch auf, dass der Gesamtwirkungsquerschnitt ein Maximum um 100 eV aufweist, welches etwas unterhalb des restlichen Wirkungsquerschnitts liegt. Im Energiebereich des Maximums liefern nur Übergänge der Art $(0,0)_i(\#,2)_i : (0,0)_f$ einen Beitrag, weshalb wir den Wirkungsquerschnitt dieser Übergänge zur genaueren Untersuchung in Abbildung 7.37 aufgetragen haben.

Hier ergibt sich ein interessantes Bild: Die Kurve hat zwei Maxima, das eine um 100 eV und ein weiteres bei etwa 300 eV. Die höchste Ionisationsschwelle hat der Übergang $(0,0)_i(0,2)_i : (0,0)_f$ mit etwa 275 eV, die niedrigste $(0,0)_i(-199,2)_i : (0,0)_f$ mit 82 eV. In Abbildung 7.38 sind exemplarisch die Einzelwirkungsquerschnitte dieser beiden sowie eines weiteren Übergangs aufgetragen.

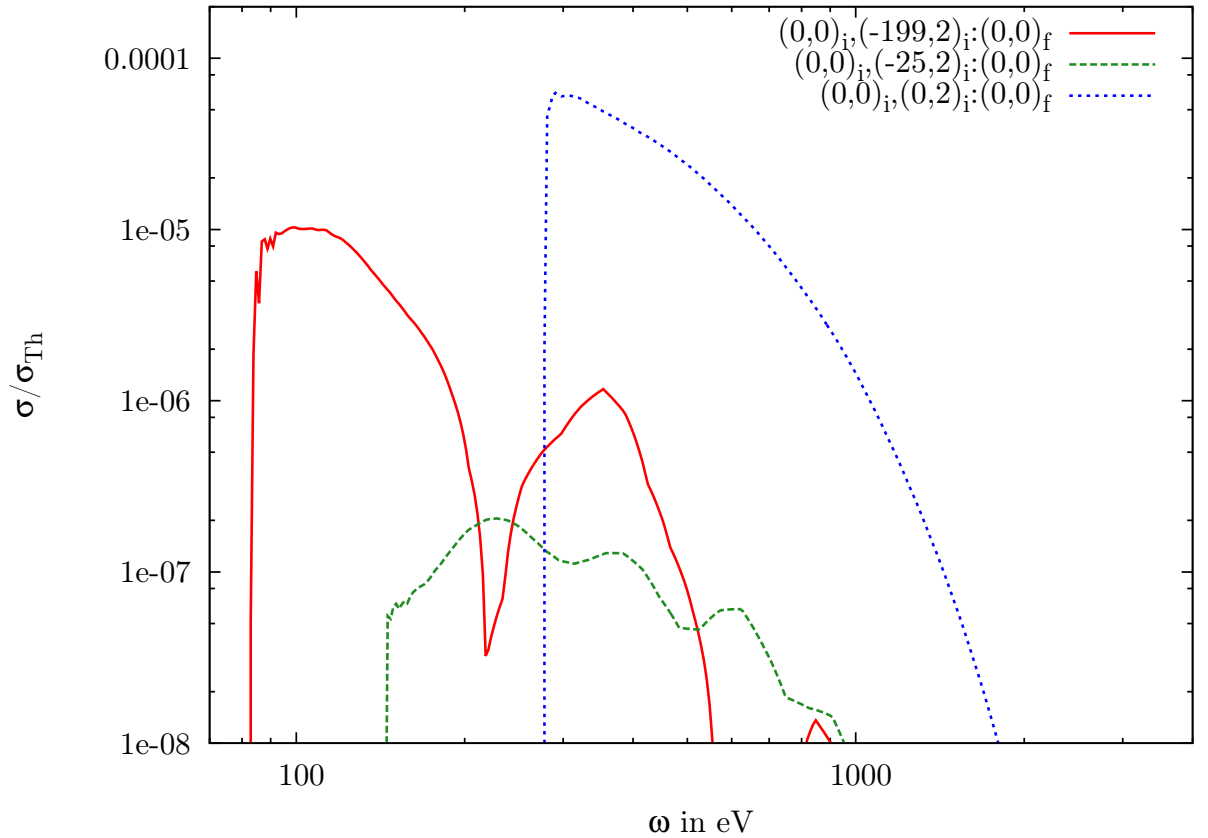


Abb. 7.38.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Einzelwirkungsquerschnitte der Übergänge $(0,0)_i(-199,2)_i : (0,0)_f$, $(0,0)_i(-25,2)_i : (0,0)_f$ und $(0,0)_i(0,2)_i : (0,0)_f$ bei 150 eV thermischer Energie für rechtszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Der Einzelwirkungsquerschnitt des Übergangs $(0,0)_i(-199,2)_i : (0,0)_f$ startet bei ei-

nem relativ hohen Wert, jedoch in der Nähe eines Minimums, genauer gesagt nahe einem Nulldurchgang im Dipolmatrixelement. Mit steigender magnetischer Quantenzahl des ionisierten Elektrons starten die Einzelwirkungsquerschnitte immer näher am Minimum, so dass der Wirkungsquerschnitt beispielsweise bei $m_2 = -25$ sehr klein ist und mit steigender Energie des ungebundenen Elektrons zunimmt. Das erklärt den sinkenden Gesamtwirkungsquerschnitt. Bei hohen magnetischen Quantenzahlen ist der Einzelwirkungsquerschnitt dann vergleichsweise groß und das Dipolmatrixelement hat über einen großen Energiebereich keinen Nulldurchgang. Dies sorgt für den zweiten Peak bei 300 eV.

Im Vergleich mit $\Delta M = 0$ -Übergängen stellen wir also fest, dass das Dipolmatrixelement mit $(m_2, 2)_i$ und der symmetrischen ungebundenen Wellenfunktion mit magnetischer Quantenzahl $m_2 \pm 1$ deutlich geringer ist als das entsprechende Dipolmatrixelement bei linearer Polarisation mit $(m_2, 2)_i$ und der antisymmetrischen ungebundenen Wellenfunktion mit magnetischer Quantenzahl m_2 .

Auch bei Helium ist der Wirkungsquerschnitt der Übergänge $(\#, 0)_i(\#, 2)_i : (\#, 0)_f$ für zirkuläre Polarisation deutlich geringer als für lineare, dort ist es jedoch weniger auffällig, da im entsprechenden Energiebereich Übergänge aus hochangeregten Anfangszuständen einen großen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt liefern. Bei heliumähnlichen Sauerstoffionen sind solche hochangeregten Zustände kaum besetzt. Der Gesamtwirkungsquerschnitt setzt sich aus rund 600 Einzelübergängen zusammen und der geringe Beitrag von 200 dieser Übergänge ist deutlich zu erkennen.

Dass sich der Gesamtwirkungsquerschnitt für rechts- und linkszirkuläre Polarisation deutlicher unterscheidet als bei Helium ist auch durch die geringe Anzahl der zum Gesamtwirkungsquerschnitt beitragenden Übergänge zu begründen. Dies ist auch bei der Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts von der minimalen magnetischen Quantenzahl in den Abbildungen 7.39 und 7.40 zu sehen.

Bei linkszirkulärer Polarisation verhält sich der Wirkungsquerschnitt der Übergänge $(\#, 0)_i(\#, 2)_i : (\#, 0)_f$ sehr ähnlich wie bei rechtszirkulärer. Die magnetische Quantenzahl des ungebundenen Elektrons ist jedoch um eins größer statt um eins kleiner als die des gebundenen mit Knotenzahl $\nu = 2$. Daher sind die Einzelwirkungsquerschnitte nicht beim gleichen Übergang $(\#, 0)_i(m_2, 2)_i : (\#, 0)_f$ minimal, wodurch sich die Begrenzung der magnetischen Quantenzahl auf $m_{\min} = -100$ bei rechtszirkulärer Polarisation deutlich stärker auswirkt als bei linkszirkulärer. Bei Helium kann ein solcher Unterschied nicht beobachtet werden, dort tragen deutlich mehr Übergänge, auch aus hochangeregten Zuständen, zum Gesamtwirkungsquerschnitt bei.

Sowohl für links- als auch für rechtszirkulär polarisierte Strahlung nimmt jedoch das Maximum bei rund 100 eV durch die Begrenzung auf $m_{\min} = -100$ stark ab und ist bei $m_{\min} = -50$ bereits völlig verschwunden. Die Ionisationsschwelle der Übergänge $(0, 0)_i(\#, 0)_i : (0, 0)_f$ ist erst bei $m_{\min} = -10$ grob zu erkennen und liegt hier bei etwa 650 eV.

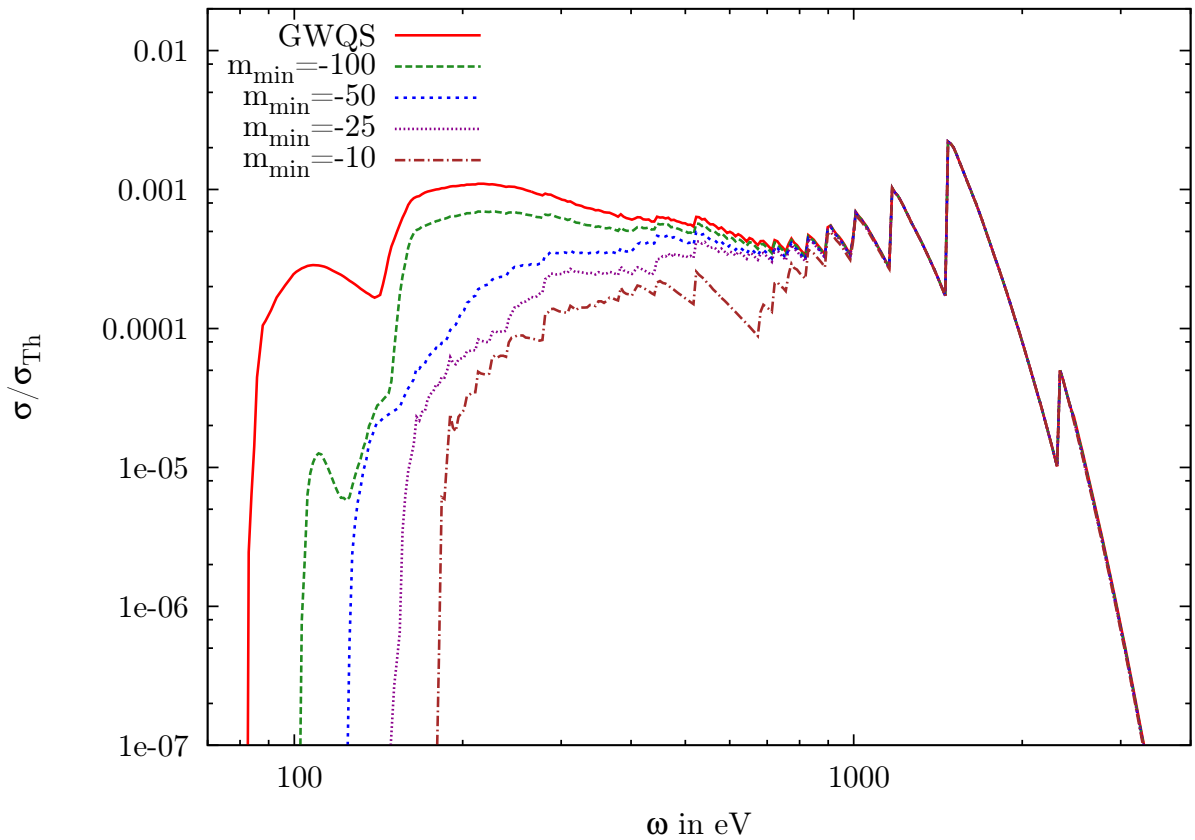


Abb. 7.39.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt bei verschiedenen m_{\min} bei 150 eV thermischer Energie für rechtszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

7.6.5. Wasserstoffähnliche Sauerstoffionen

Zuletzt wollen wir noch den Gesamtwirkungsquerschnitt von wasserstoffähnlichen Sauerstoffionen betrachten. Dieser ist in Abbildung 7.41 für die drei verschiedenen Polarisationen aufgetragen. Auffällig ist die Höhe des letzten Peaks bei 2500 eV für linear und rechtszirkular polarisierte Strahlung. Obwohl die Photonendichte bei dieser Energie schon deutlich abgefallen ist (siehe Abschnitt 7.4) ist dieser Peak sogar höher als diejenigen bei geringerer Energie und deutlich höherer Photonendichte.

Dies ist wieder ein Effekt der geringen Besetzung von angeregten Zuständen bei höherer Kernladung. Der Zustand $(0,0)_i$ ist der Grundzustand, der nächst höhere Zustand $(-1,0)_i$ ist nur noch mit einer Wahrscheinlichkeit von etwa $3,4 \times 10^{-3}$ besetzt. Dadurch ist der letzte Peak von der Ionisierung des Elektrons $(0,0)_i$ höher als der vorletzte Peak von der Ionisierung des Elektrons $(-1,0)_i$, trotz der um rund zwei Größenordnungen kleineren Photonendichte. Bei linkszirkularer fehlt der letzte Peak wieder in adiabatischer

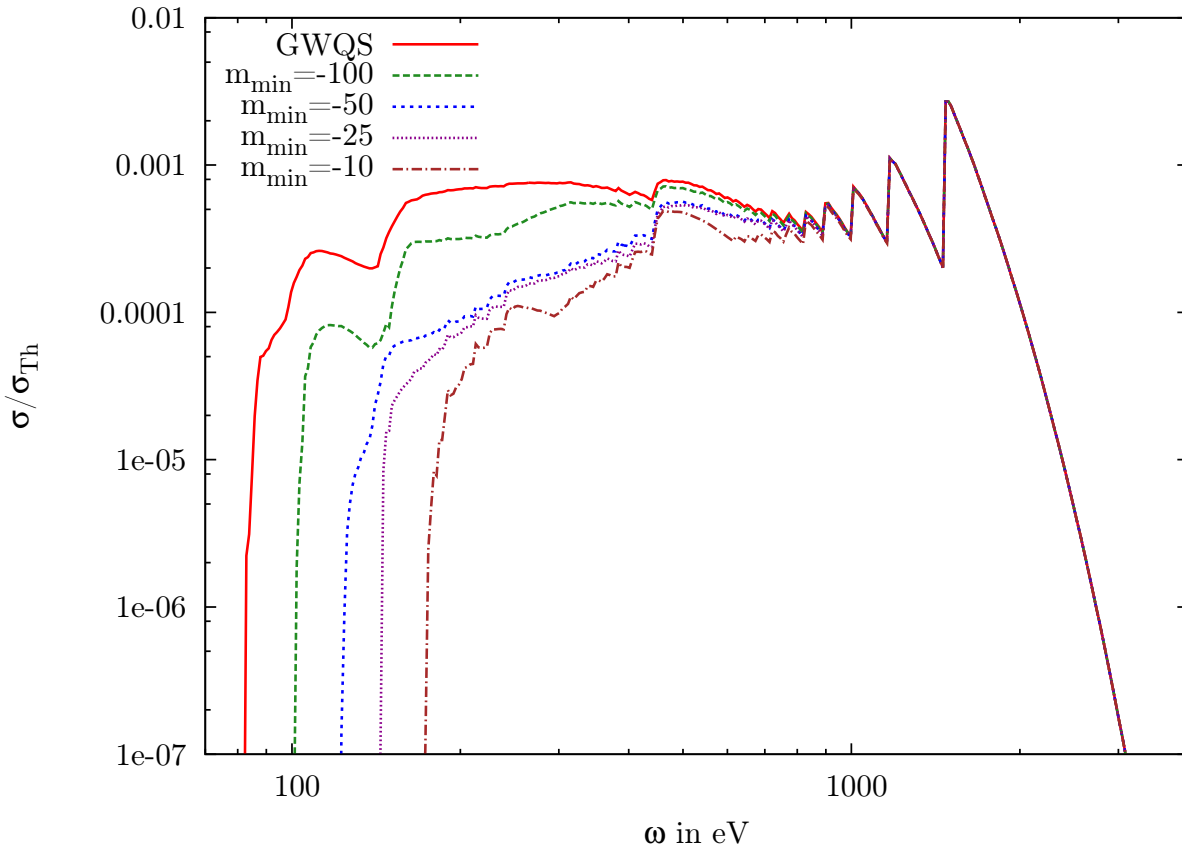


Abb. 7.40.: Heliumähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt bei verschiedenen m_{\min} bei 150 eV thermischer Energie für linkszirkular polarisierte Strahlung, $\vartheta = 0$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Näherung.

Bei kleineren Energien ist der Gesamtwirkungsquerschnitt für lineare Polarisation um gut drei Größenordnungen höher als der für zirkuläre Polarisation. Die unterschiedliche Höhe des letzten Peaks bei rechtszirkularer und linearer Polarisation ist deutlich geringer und entspricht ungefähr dem zusätzlichen Faktor $1/\sqrt{4\beta}$ bei zirkularer Polarisation, siehe Gleichungen (4.44) und (4.45). Das Dipolmatrixelement für lineare Polarisation ist bei diesem Übergang also nur geringfügig größer als das für rechtszirkuläre Polarisation.

Die Gesamtwirkungsquerschnitte für links- und rechtszirkuläre Polarisation sind sich wieder recht ähnlich, durch die wenigen beitragenden Übergänge gibt es jedoch auch abgesehen vom letzten Peak Unterschiede, vor allem im Bereich niedriger Energien, also bei der Ionisierung eines Elektrons mit Knotenzahl $\nu = 2$.

Die Aufteilung des Wirkungsquerschnitts für lineare Polarisation nach Knotenzahl des Anfangszustandes ist in Abbildung 7.42 zu sehen. Obwohl die Ausgangszustände mit Knotenzahlen größer null eine geringe Besetzungswahrscheinlichkeit aufweisen, tra-

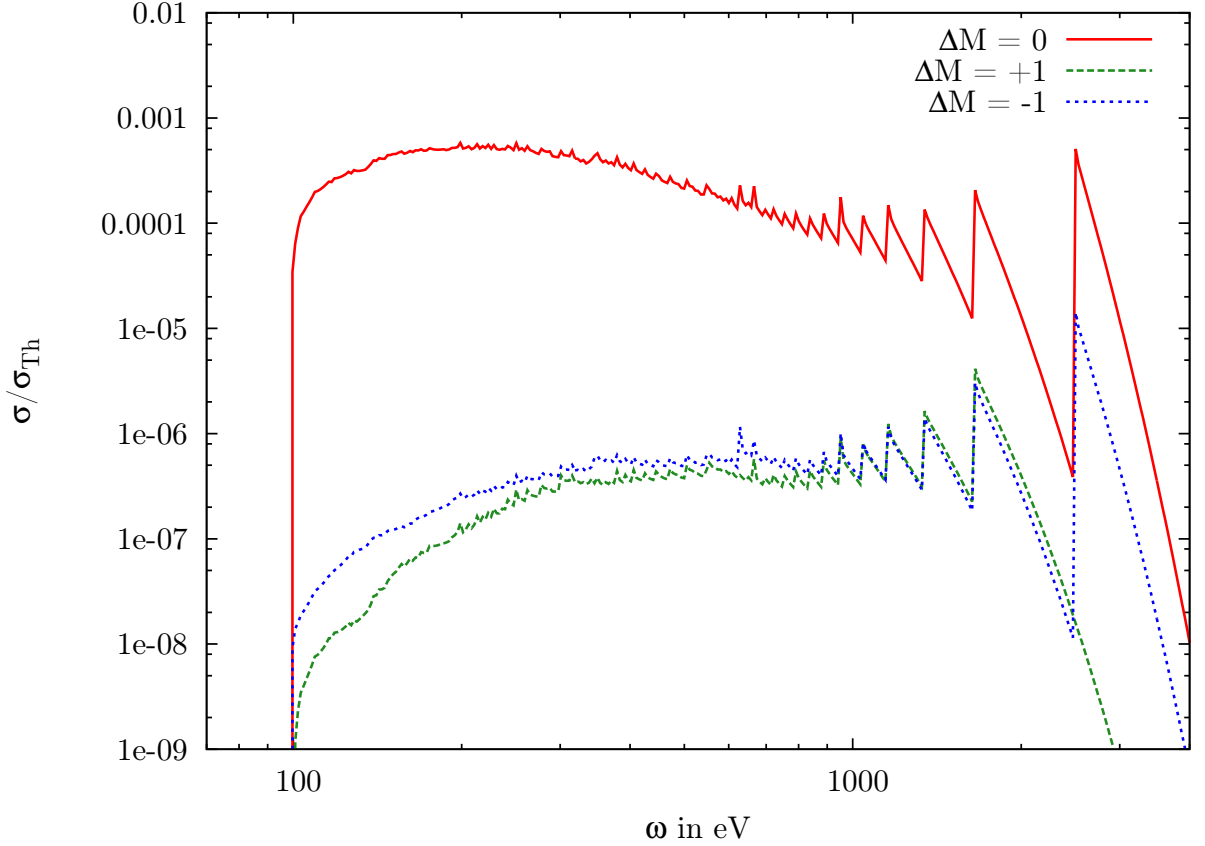


Abb. 7.41.: Wasserstoffähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt für $\Delta M = 0, \pm 1$ bei 150 eV thermischer Energie, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ für lineare Polarisation, $\vartheta = 0$ für zirkuläre Polarisation, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

gen sie doch maßgeblich zum Gesamtwirkungsquerschnitt bei. Der Wirkungsquerschnitt bei 200 eV Übergangsenergie ist genauso groß wie beim höchsten Peak bei 2500 eV. Neben der größeren Photonendichte bei 200 eV ist dies durch die größere Anzahl der Übergänge in diesem Energiebereich begründet. Eine Trennung wie bei Heliumionen in Energiebereiche, in denen ein Elektron mit Knotenzahl 0, 1 beziehungsweise 2 ionisiert wird, ist hier nicht möglich, der Übergang ist fließend.

Zum Schluss betrachten wir natürlich wieder den Wirkungsquerschnitt für verschiedene minimale magnetische Quantenzahlen, siehe Abbildung 7.43. Zustände mit hohen magnetischen Quantenzahlen sind schwach gebunden, daher verschiebt sich die Ionisationsschwelle mit steigendem m_{\min} zu größeren Energien hin. Außerdem ist der Wirkungsquerschnitt bei höherem m_{\min} weniger glatt, Peaks von einzelnen Übergängen sind immer deutlicher zu erkennen.

Bei $m_{\min} = -10$ ist auch wieder die Ionisationsschwelle der Elektronen mit Knotenzahl $\nu = 0$ zu erkennen, nämlich bei etwa 700 eV. Auf den Energiebereich ab 1000 eV haben

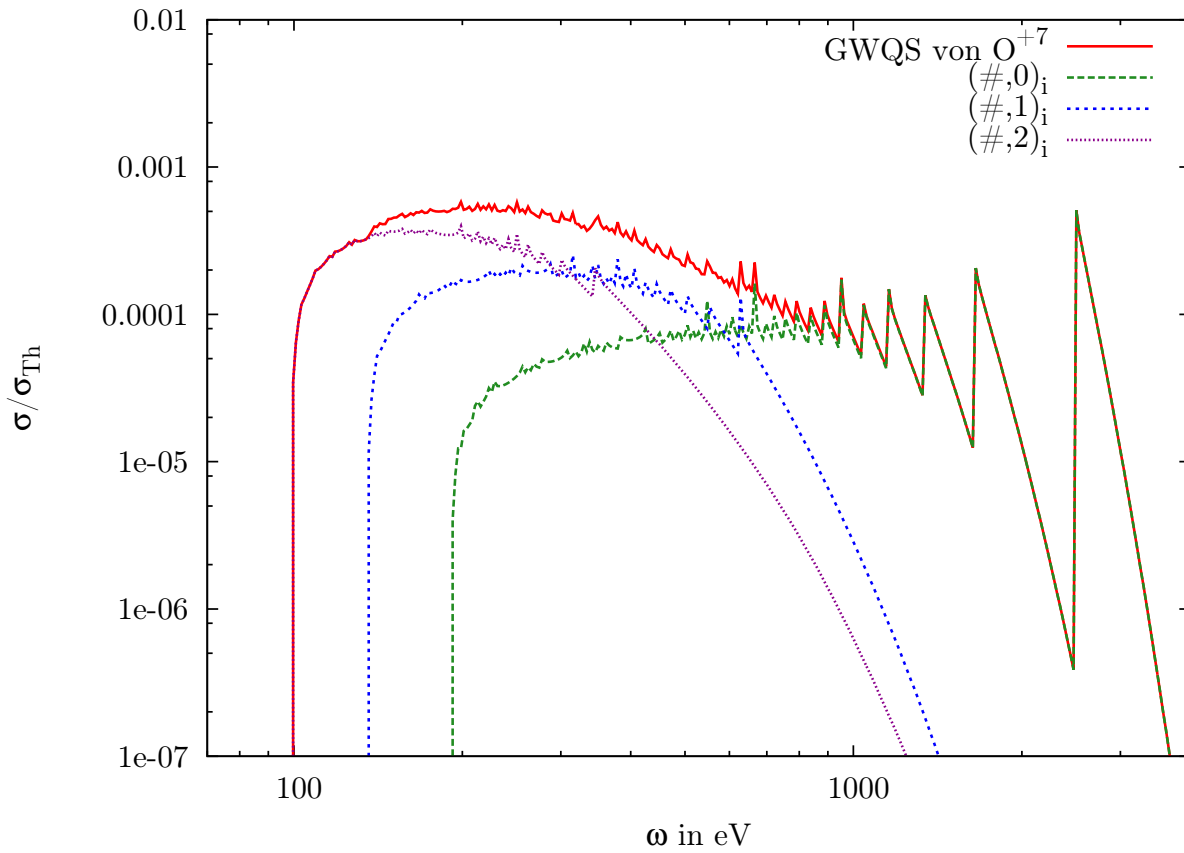


Abb. 7.42.: Wasserstoffähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt aufgeteilt nach Beiträgen von Übergängen mit Knotenzahl $\nu = 0$, $\nu = 1$ und $\nu = 2$ des Anfangszustandes bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

die aufgetragenen Einschränkungen der magnetischen Quantenzahl gar keine Auswirkung, die Peaks entsprechen den Einzelwirkungsquerschnitten der Photoionisation der Elektronen $(0,0)_i$, $(-1,0)_i$, $(-2,0)_i$, ...

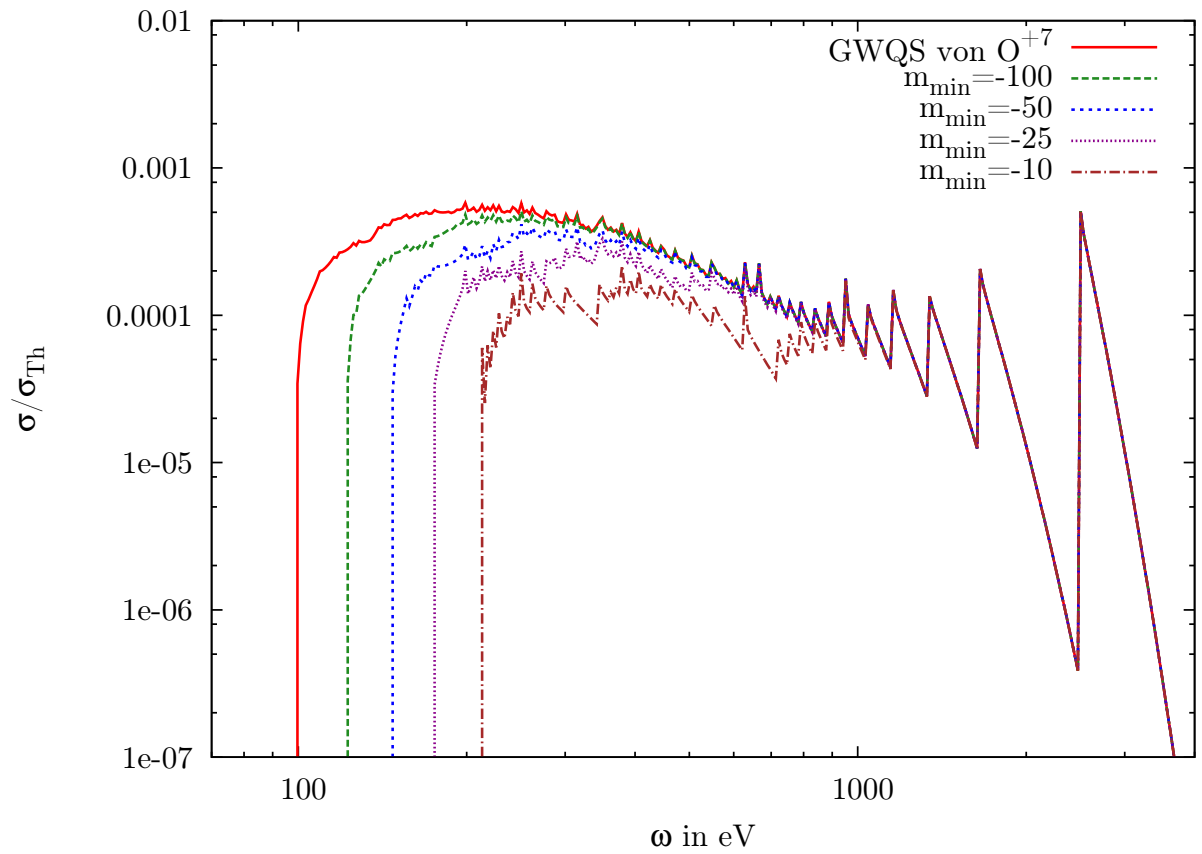


Abb. 7.43.: Wasserstoffähnliche Sauerstoffionen: Gesamtwirkungsquerschnitt bei verschiedenen m_{min} bei 150 eV thermischer Energie für linear polarisierte Strahlung, $\vartheta = \frac{\pi}{2}$, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

8. Zusammenfassung und Ausblick

8.1. Zusammenfassung

Die Modellierung der Atmosphäre von Neutronensternen stellt eine große Herausforderung dar. Sämtliche Elemente von Wasserstoff bis Eisen könnten in verschiedensten Ionisationsstufen vorliegen, daher ist eine immense Menge an atomaren Daten notwendig. In dieser Arbeit wurde die Photoionisation von Atomen und Ionen untersucht. Dazu wurden die Wirkungsquerschnitte für die verschiedenen Polarisierungen der Strahlung hergeleitet und dann ein Programm entwickelt, das innerhalb weniger Tage hunderttausende von Übergängen parallel berechnen kann.

Dennoch reicht dies nicht aus, um die Wirkungsquerschnitte der Elemente bis Eisen in allen Ionisierungsstufen zu erhalten, zumindest nicht ohne gewisse Einschränkungen der Quantenzahlen von Anfangs- und Endzuständen, welche die Anzahl der Übergänge reduzieren. Die Analyse des Gesamtwirkungsquerschnitts von Helium und heliumähnlichen Sauerstoffionen lieferte wichtige Erkenntnisse, welche die Berechnung der Wirkungsquerschnitte anderer Atome und Ionen ermöglichen sollen.

Zuerst wurde jedoch in Kapitel 6 anhand zweier Einzelwirkungsquerschnitte der Einfluss von Magnetfeldstärke und Kernladung untersucht. Dabei konnten wir zeigen, dass der Einzelwirkungsquerschnitt des einen Übergangs in einem breiten Magnetfeldbereich um Größenordnungen über dem des anderen liegt, und zwar für leichte, mittelschwere als auch schwere Atomkerne mit zwei Elektronen.

In Kapitel 7 haben wir zunächst für zwei verschiedene Temperaturen der Neutronensternatmosphäre die Auswirkung der Photonendichte und den Einfluss der Besetzung der Anfangszustände betrachtet. Bei Helium ist der Gesamtwirkungsquerschnitt für beide betrachteten Temperaturen ($k_B T = 150$ eV, 300 eV) sehr ähnlich: Die Besetzung der Ausgangszustände ist jeweils relativ groß, kein Zustand besitzt eine Besetzungswahrscheinlichkeit kleiner als 10^{-2} . Die Maxima des Gesamtwirkungsquerschnitts liegen in Energiebereichen, in denen die Photonendichte für beide Temperaturen noch nicht stark abgefallen ist.

Bei heliumähnlichen Sauerstoffionen liegt der Fall ganz anders: Hier gibt es Ausgangszustände mit Besetzungswahrscheinlichkeit unter 10^{-10} bei 150 eV thermischer Energie. Dementsprechend hat die Temperatur einen größeren Einfluss. Bei 300 eV thermischer Energie sind deutlich mehr Ausgangszustände merklich besetzt und der Gesamtwirkungsquerschnitt liegt insgesamt um mehr als eine Größenordnung höher als bei 150 eV. Außerdem sorgt die für hohe Energien stark abfallende Photonendichte dafür, dass bei 150

eV thermischer Energie der letzte Peak deutlich tiefer liegt als die vorangehenden.

Bei der anschließenden detaillierten Analyse des Wirkungsquerschnitts von Helium für linear polarisierte Strahlung wurden die atomaren Übergänge mithilfe der Erkenntnisse, die wir aus der Betrachtung der Einzelwirkungsquerschnitte gewonnen haben, aufgeteilt und auf den jeweiligen Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt untersucht. Übergänge aus hochangeregten Ausgangszuständen benötigen geringere Ionisierungsenergien und liefern daher im Bereich kleiner Übergangsenergien den größten Beitrag. Die restlichen Übergänge wurden nach der Symmetrie der Wellenfunktion aufgeteilt. Dabei hat sich herausgestellt, dass diejenigen mit symmetrischer ungebundener Wellenfunktion kaum zum Gesamtwirkungsquerschnitt beitragen, während jene mit antisymmetrischer ungebundener Wellenfunktion diesen im Bereich hoher Energien maßgeblich prägen.

Bei zirkularer Polarisierung, bei der sich nicht die z -Parität, sondern die magnetische Quantenzahl zwischen Anfangs- und Endzustand ändert, ist dies genau umgekehrt. Auch hier bestimmen jedoch die Übergänge aus hochangeregten Zuständen den Bereich kleiner Energien. Der Gesamtwirkungsquerschnitt für zirkuläre Polarisierung liegt im gesamten Energiebereich mindestens zwei Größenordnungen unter dem für lineare Polarisierung. Ursache ist das deutlich kleinere Dipolmatrixelement bei anderer z -Parität des ungebundenen Elektrons. Bei linkszirkularer Polarisierung fehlt sowohl bei Helium als auch bei Heliumionen der letzte Peak, da das ungebundene Elektron in adiabatischer Näherung keine magnetische Quantenzahl größer null annehmen kann.

Unabhängig von der Polarisierung liefern im Bereich hoher Energien die Übergänge mit knotenlosen Anfangs- und Endzuständen ($\nu = 0$) den größten Beitrag zum Gesamtwirkungsquerschnitt. Dies ist bereits ohne Einbeziehung der Besetzungswahrscheinlichkeit der Fall und somit unabhängig von der Temperatur, da die zugehörigen Anfangszustände die am stärksten gebundenen sind.

Die Peaks bei hohen Energien werden für alle drei Polarisierungen von den gleichen Übergängen verursacht, die sich lediglich in der jeweiligen magnetischen Quantenzahl beziehungsweise der z -Parität des ungebundenen Elektrons unterscheiden. Die Anzahl dieser Übergänge beträgt rund 600 für jeden der Peaks.

Neben der Analyse nach Knotenzahlen wurde der Gesamtwirkungsquerschnitt auch für verschiedene untere Grenzen der magnetischen Quantenzahl betrachtet. Filtern wir die Übergänge mit sehr kleinen magnetischen Quantenzahlen heraus, so fallen die Einzelwirkungsquerschnitte bei geringen Energien weg. Außerdem überlappen die Anteile am Gesamtwirkungsquerschnitt von der Ionisierung eines Elektrons mit Knotenzahl 0, 1 und 2 nicht mehr so stark. Daher ist die Ionisierungsschwelle für tightly-bound Elektronen ($\nu = 0$) umso deutlicher zu erkennen, je kleiner die Spanne der magnetischen Quantenzahlen.

Bei allen Polarisierungen gibt es eine beträchtliche Anzahl vernachlässigbarer Zustände und die Zahl der zu berücksichtigenden Übergänge reduziert sich deutlich. Eine Verringerung dieser Anzahl um Größenordnungen, wie sie zur Berechnung des Wirkungsquerschnitts anderer neutraler Elemente nötig wäre, ist jedoch nicht ohne Weiteres möglich.

Bei der Analyse des Gesamtwirkungsquerschnitts von heliumähnlichen Sauerstoffionen

gab es durchaus einige Parallelen zu Helium, doch auch große Unterschiede: Ohne Einbeziehung der Besetzungswahrscheinlichkeit und Photonendichte sind der Wirkungsquerschnitt für Helium und der für Sauerstoffionen bei gleicher Elektronenzahl sehr ähnlich. Die gleiche Art von Übergängen liefert im jeweiligen Energiebereich den Hauptbeitrag und die bei Helium vernachlässigbaren Zustände tragen auch bei Sauerstoffionen nicht entscheidend zum Gesamtwirkungsquerschnitt bei. Dies gilt bei Ausgangszuständen mit einem und mit zwei Elektronen.

Bei Einbeziehung der Besetzung und Photonendichte sieht das Bild jedoch anders aus: Durch die höhere Kernladungszahl sind die Zustände stärker gebunden, die Übergangsennergien sind größer. Dadurch verschieben sich die Peaks zu höheren Energien, bei denen auch die Photonendichte einen anderen Wert hat.

Den Hauptunterschied macht allerdings die Besetzungswahrscheinlichkeit aus. Höhere Bindungsenergien bedeuten auch größere Energiedifferenzen zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen. Daher sind angeregte Ausgangszustände bei heliumähnlichen Sauerstoffionen deutlich schwächer besetzt als bei Helium, und nur diejenigen mit hoher Bindungsenergie sind für die Berechnung des Gesamtwirkungsquerschnitts relevant. Die stärkste Bindungsenergie besitzt das tightly-bound Elektron mit magnetischer Quantenzahl $m = 0$. Daher müssen nur Ausgangszustände berücksichtigt werden, bei denen eines der Elektronen die Quantenzahlen $m = 0$ und $\nu = 0$ besitzt, alle anderen Zustände sind zu schwach besetzt.

Insgesamt lässt sich die Zahl der Übergänge, welche zur Abbildung des Wirkungsquerschnitts benötigt werden, von über einer Million auf etwa 600 reduzieren. Der Gesamtwirkungsquerschnitt ist dementsprechend deutlich struktureicher. Bei heliumähnlichen Sauerstoffionen stammen die Peaks im Bereich hoher Energien von einzelnen Übergängen und sind daher kantiger als bei Helium.

Auch bei der Betrachtung des Gesamtwirkungsquerschnitts für verschiedene untere Grenzen der magnetischen Quantenzahl macht sich die geringe Zahl der signifikant beitragenden Übergänge bemerkbar. Je kleiner die Spanne der magnetischen Quantenzahlen, desto mehr Peaks sind im Gesamtwirkungsquerschnitt zu sehen. Auch die steigende Besetzung der knotenlosen Ausgangszustände mit höherer magnetischer Quantenzahl ist in Form von steigenden Peakhöhen der zugehörigen Einzelwirkungsquerschnitte zu erkennen.

Nach dem ausführlichen Vergleich der beiden Elemente können wir festhalten: Bei gleicher Elektronenzahl ist der Gesamtwirkungsquerschnitt grundsätzlich einfacher zu berechnen je höher die Ionisierungsstufe des Elements ist, da die Elektronen stärker gebunden und angeregte Zustände dadurch schwächer besetzt sind.

8.2. Ausblick

Die Ermittlung des Gesamtwirkungsquerschnitts eines neutralen Atoms mit Kernladungszahl größer als zwei ist ohne Weiteres nicht möglich, da selbst Rechencluster eine

solche Menge an Einzelwirkungsquerschnitten nicht berechnen können. Daher müssen die Auswirkungen von finiter Kernmasse, Massendichte, elektrischen Mikrofeldern und Stoßionisation untersucht werden, um die Anzahl der Anfangszustände zu reduzieren und damit eine Bestimmung des Gesamtwirkungsquerschnitts zu ermöglichen.

Zur Berechnung des Gesamtwirkungsquerschnitts von Ionen sind jedoch die Erkenntnisse aus der Analyse heliumähnlicher Sauerstoffionen sehr hilfreich. Nehmen wir als Beispiel lithiumähnliche Sauerstoffionen, also mit drei Elektronen. Unter der Annahme, dass auch hier alle zu berücksichtigenden Anfangszustände wie bei heliumähnlichen Sauerstoffionen ein Elektron mit $m = 0$ und $\nu = 0$ haben, lässt sich ohne größere Probleme der Gesamtwirkungsquerschnitt berechnen. Man „hält das innerste Elektron fest“ und lässt nur die äußeren zwei Elektronen beliebige Quantenzahlen annehmen. Sollte sich dabei wieder ergeben, dass nur stark gebundene Anfangszustände, bei denen ein Elektron die Quantenzahlen $m = -1$ und $\nu = 0$ besitzt, maßgeblich beitragen, lässt sich auch der Gesamtwirkungsquerschnitt von berylliumähnlichen Sauerstoffionen berechnen und so weiter.

Letztlich gilt es, die relative Häufigkeit der verschiedenen Ionisierungsstufen eines Elementes in der Neutronensternatmosphäre zu ermitteln. Dies ist mithilfe der Saha-Gleichung möglich. Ist dann bekannt, welche Ionisierungsstufen jeweils zu berechnen sind, muss die Anzahl der Zustände für jeden Gesamtwirkungsquerschnitt durch die Einbeziehung der Kernmitbewegung, Massendichte, Stoßionisation und elektrischen Mikrofelder reduziert werden. Danach sollte die Berechnung der benötigten Rohdaten dank der hier gewonnenen Kenntnisse eine lösbare Aufgabe darstellen.

Summary

The modelling of a neutron star's atmosphere poses a great challenge. Any chemical element from hydrogen to iron could possibly be found there in different ionisation stages. Therefore, a huge amount of atomic data is necessary. This thesis is devoted to the photoionisation of atoms and ions in neutron star magnetic field strengths in the range of 10^8 to 10^{10} T. At these field strengths the symmetry of the system is dominated by the symmetry of the magnetic field. We make a separation ansatz for the single-particle wave functions:

$$\psi(\mathbf{r}) = g(z)\Phi(\rho,\varphi). \quad (8.1)$$

In transverse direction, the electrons are assumed to occupy the Landau wave functions $\Phi(\rho,\varphi)$ in the lowest Landau level $n = 0$. For our calculations, atomic Rydberg units are used, in which the energy unit is $E_\infty \approx 13.6$ eV and the magnetic field is given in units of $\beta = B/B_0$ where $B_0 \approx 4.7 \times 10^5$ T.

The Hartree-Fock method is an efficient technique used to compute the total wave function. Its advantages are relatively accurate results and very short computing times compared to the more precise quantum Monte Carlo simulations, see [27]. The longitudinal wave functions of the bound electrons are obtained by Hartree-Fock calculations in adiabatic approximation using the finite element method as described in [28].

For our system, the quantum numbers are the magnetic quantum number m and the z -parity of the wave function. The unbound electron is additionally determined by its energy E' . For the bound electrons, the number of nodes implies the z -parity and the wave function $\psi_{m\nu}(r) = g_{m\nu}(z)\Phi_m(\rho,\varphi)$ is defined by m and ν .

The unbound longitudinal wave function $g_{mE'}$ is calculated self-consistently in the potential formed by the nucleus and the bound electrons. Since it can be located anywhere between $-\infty$ and ∞ , its influence on the bound electrons is negligible. The unbound wave function cannot be normalised in the full z -range as the bound one, therefore it is normalised in a chosen range with periodicity length l_z .

Starting with Fermi's Golden Rule, we derived the photoionisation cross sections for the three different kinds of polarisation, linear polarisation ($\Delta M = 0$), left-handed circular polarisation ($\Delta M = +1$), and right-handed circular polarisation ($\Delta M = -1$). The cross sections with transition energy ω_{fi} and polarisation vector $\boldsymbol{\varepsilon}$ are given by

$$\sigma_0 = \frac{3}{8} \frac{l_z \sigma_{\text{Th}} \omega_{\text{fi}}}{\alpha^3} \sqrt{\frac{1}{E'}} \varepsilon_z^2 \left| \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_k, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \langle g_{m_N E'}^{\text{f}} | z_l | g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \rangle \delta_{m_N, m_l} a_{Nl}^{\text{fi}} \right|^2 \quad (8.2)$$

$$\sigma_- = \frac{3}{8} \frac{l_z \sigma_{\text{Th}} \omega_{\text{fi}}}{\alpha^3} \sqrt{\frac{1}{E'}} |\varepsilon_+|^2 \left| \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l + 1}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_k - 1, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_N E'}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l + 1}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_N - 1, m_l} a_{Nl}^{\text{fi}} \right|^2 \quad (8.3)$$

$$\sigma_+ = \frac{3}{8} \frac{l_z \sigma_{\text{Th}} \omega_{\text{fi}}}{\alpha^3} \sqrt{\frac{1}{E'}} |\varepsilon_-|^2 \left| \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_k \nu_k}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_k + 1, m_l} a_{kl}^{\text{fi}} + \sum_{l=1}^N \left\langle g_{m_N E'}^{\text{f}} \left| \sqrt{\frac{-m_l}{4\beta}} \right| g_{m_l \nu_l}^{\text{i}} \right\rangle \delta_{m_N + 1, m_l} a_{Nl}^{\text{fi}} \right|^2, \quad (8.4)$$

with σ_{Th} the Thomson cross section, α the fine structure constant, and N the number of electrons. Electrons of the initial and final state are labelled by the index i and f , respectively. δ_{m_k, m_l} is the well-known Kronecker delta, a^{fi} designates the minor containing the overlaps between the wave functions, and ε_{\pm} is defined by $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon_x \pm i \varepsilon_y$. The factor z_l in the dipole matrix element for linear polarisation simply denotes the z -coordinate of the l -th electron. The periodicity length l_z is eliminated when substituting the normalised unbound wave function $g_{m_N E'}^{\text{f}}$.

In order to obtain the total cross section, the raw cross sections above are multiplied by the photon density P_0 to account for the probability that a photon of the required energy is present at a given temperature T in the atmosphere:

$$P_0(\omega, T) d\omega = \frac{\omega^2}{2 \zeta(3) T^3} (e^{\frac{\omega}{T}} - 1)^{-1} d\omega. \quad (8.5)$$

Since the photon density only depends on the temperature and not on the initial or final state of the transition, the photon density is applied after summing up the single cross sections.

In addition, for every transition the single cross section is weighted with the Boltzmann factor

$$e^{-(E - E_0)/k_{\text{B}} T} \quad (8.6)$$

of the initial state with energy E , where E_0 is the energy of ground the state.

It is the purpose of this thesis to provide a programme that computes the required atomic data. Additional effects like impact ionisation, finite mass of the nucleus, mass density, and electric microfields need to be considered to identify the composition of the neutron star atmosphere. These effects are not discussed in detail, but at least a basic understanding of their influence is necessary for our further investigations.

Many initial states of the helium atom have lower binding energies than the ground state of H-like helium. These states can be ionised by impact ionisation and therefore have a short life span. This affects states with high quantum numbers, which are weakly bound.

A nucleus with finite mass is not fixed and because of its charge interacts with the magnetic field. The additional term leads to higher energies the higher the modulus of the sum of magnetic quantum numbers. Hence, the energy of some states lies above the ionisation edge and they are no longer binding.

Stochastic electric microfields “tilt“ the potential, thereby destabilising highly excited states, which results in lower life spans. Various states with high quantum numbers are loosely bound and can therefore be excluded.

Due to the high mass density some states are too voluminous and do not occur in the atmosphere. Some states with high quantum numbers are too large and need not be accounted for.

Owing to these effects, the quantum numbers can be restricted to certain ranges. Without further investigation, however, we do not exactly know the adequate limits, which is why we have chosen quite large ranges. These are $-199 \leq m \leq 0$ for the magnetic quantum number and $0 \leq \nu \leq 2$ for the number of longitudinal nodes.

Another factor that needs to be considered is the angular dependence. Different angles of incidence lead to different prefactors, but do not change the shape of the total cross section. For this reason, all our results were computed for angles that lead to a maximum value of the cross section and the corresponding angle-dependent factor can be taken into account later on.

With the programme presented in this thesis, millions of transitions can be calculated in a couple of weeks. However, that is not enough if we want to compute total cross sections for elements up to iron in all ionisation stages, at least not without further limitations of the quantum numbers of initial states. We closely analysed the total cross sections of helium-like oxygen ions and helium. The findings of this analysis will allow for the calculation of total cross sections of other atoms and ions.

First, we analysed two single cross sections of helium with initial state $m_1 = 0$, $\nu_1 = 0$, $m_2 = -199$, $\nu_2 = 0$ for linearly polarised radiation. In both cases, the electron with magnetic quantum number $m_1 = 0$ is ionised. However, in the first transition the bound electron stays in the same state, $m_3 = -199$ and $\nu_3 = 0$, while in the second transition to $m_3 = -199$ and $\nu_3 = 1$ the number of nodes and thereby the z -parity is changed. The respective single cross sections are shown in figure 8.1.

The first transition to the nodeless final state leads to a cross section much larger than the second one. The main reason is the parity of the unbound electron resulting in

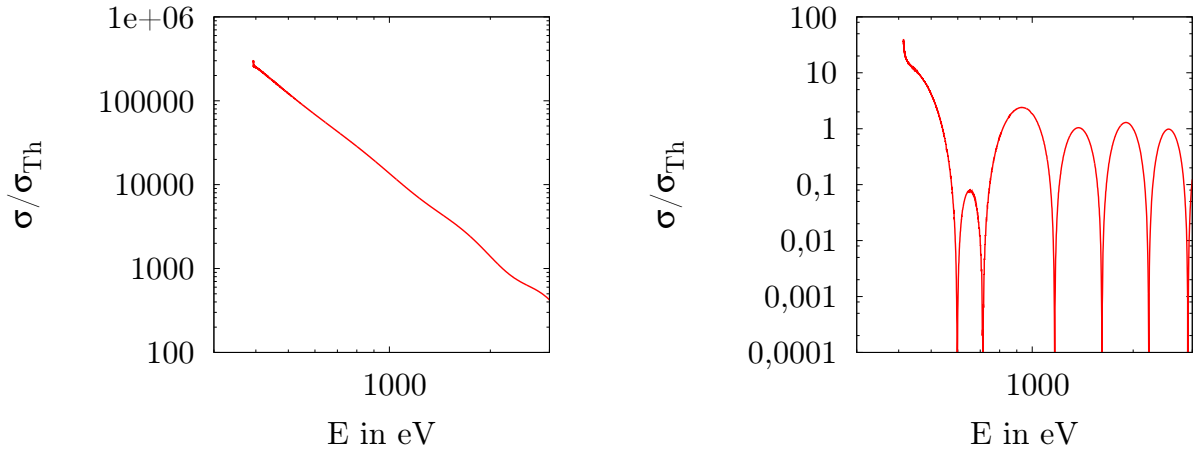


Abb. 8.1.: Helium at $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$): The two single cross sections for the transition to the final state $m_3 = -199$, $\nu_3 = 0$, $m_4 = 0$ and $m_3 = -199$, $\nu_3 = 1$, $m_4 = 0$, respectively.

the dipole matrix element $\langle g_{m_N E'}^f | z_l | g_{m_l \nu_l}^i \rangle$ being large for the first transition and very small for the second one.

The two single cross sections do not only differ quantitatively by orders of magnitudes, but also in shape. The second one drops to zero several times, which is caused by zero crossings of the dipole matrix element.

Further investigations showed that the general behaviour stays the same for other He-like elements up to iron and at different magnetic field strengths. For stronger magnetic fields and higher nuclear charges, the only significant change is that the ionisation barrier is shifted to larger energies.

Thereafter, we made the attempt to generalise these conclusions from single transitions to large groups of transitions in the analysis of the total cross section of helium. As a matter of fact, transitions from nodeless initial to nodeless final bound states mainly influence the cross section at high energies and are in principle much larger than those to final states with one node. Moreover, transitions with an antisymmetric wave function of the unbound electron only make a small contribution to the total cross sections while the ones with symmetric wave function provide the main share at high transition energies.

In the calculation of the total cross section, occupation probability and photon density in the atmosphere were considered. Both effects are temperature-dependent, which is why we analysed their influence at two different thermal energies. The main features of the total cross section of helium are within a range of the transition energy in which the photon density is quite large, see figure 8.2. Furthermore, the occupation probability is larger than 10^{-2} for all initial states. These are the reasons the cross section does not change significantly at 300 eV thermal energy.

On the other hand, the total cross section of He-like oxygen at a thermal energy of 150

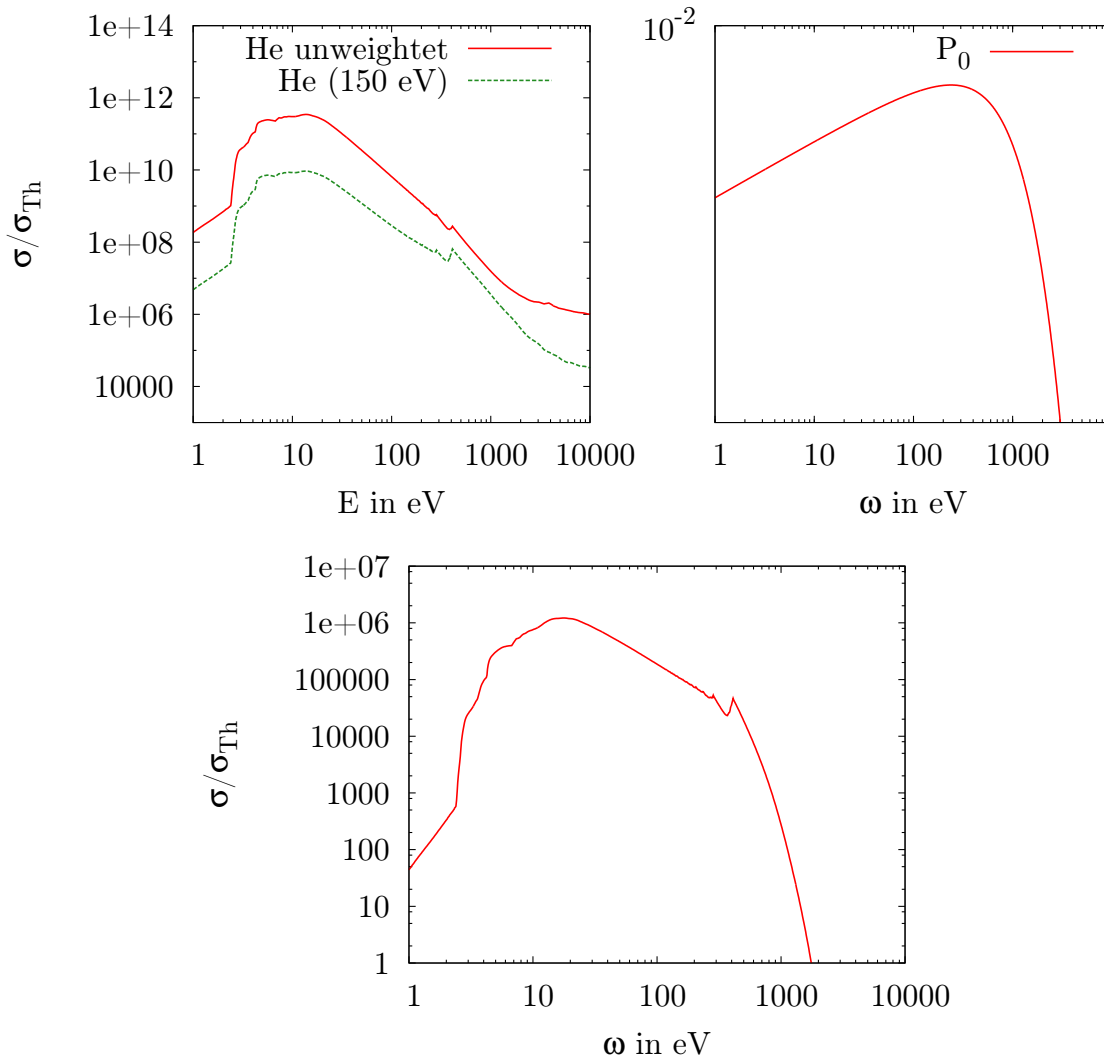


Abb. 8.2.: Helium: Total Cross section with and without thermal occupation probability, photon density P , and resulting total cross section, for 150 eV thermal energy, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

eV differs drastically from the one at 300 eV. This is due to the higher binding energies resulting in higher energy differences between ground state and excited states that lead to smaller occupation probabilities. From this point on, the cross sections shown include both effects and are calculated at 150 eV thermal energy in accordance with [7].

In figure 8.3, the total cross sections of helium for the different polarisations are compared. For transitions induced by circularly polarised radiation, the incident photon changes the magnetic quantum number instead of the z -parity. This results in the cross section being much lower for these transitions and the reason is once more the dipole matrix element, which is much smaller for the different parity of the unbound wave

function. Nevertheless, transitions with only nodeless bound states still make the most contribution to the total cross section at high energies.

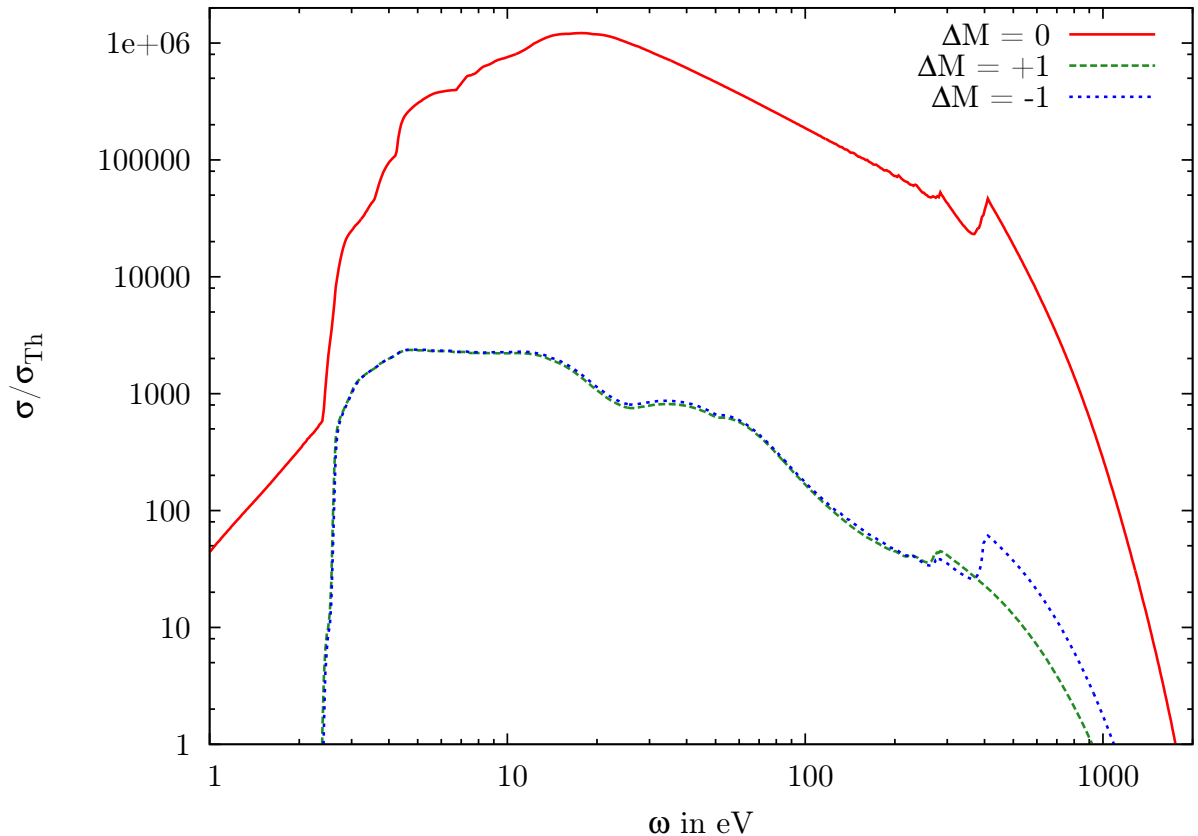


Abb. 8.3.: Helium: total cross section for the three different kinds of polarisation, $k_B T = 150$ eV, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

For all three polarisations, more than half of the one million transitions are negligible, but the number of transitions that have to be considered could not be decreased by orders of magnitudes. When trying to reproduce the peak of the cross section at 400 eV, however, only around 600 transitions are necessary. This shows that certain features of the total cross section originate from a very small fraction of the total number of transitions. For left-handed circular polarisation, this peak is missing, because states with positive magnetic quantum number are very unlikely to be occupied and are not considered in adiabatic approximation.

After that, we analysed the total cross section of He-like oxygen and compared it to the total cross section of helium. When disregarding the temperature-dependent effects, photon density and occupation of the initial states, the total cross sections for the two elements are quite similar. Most of the transitions with symmetric unbound wave function are negligible whereas those with antisymmetric wave function make the dominant

contribution. But if we take the occupation probability into account, the total cross section of He-like oxygen changes drastically, see figure 8.4.

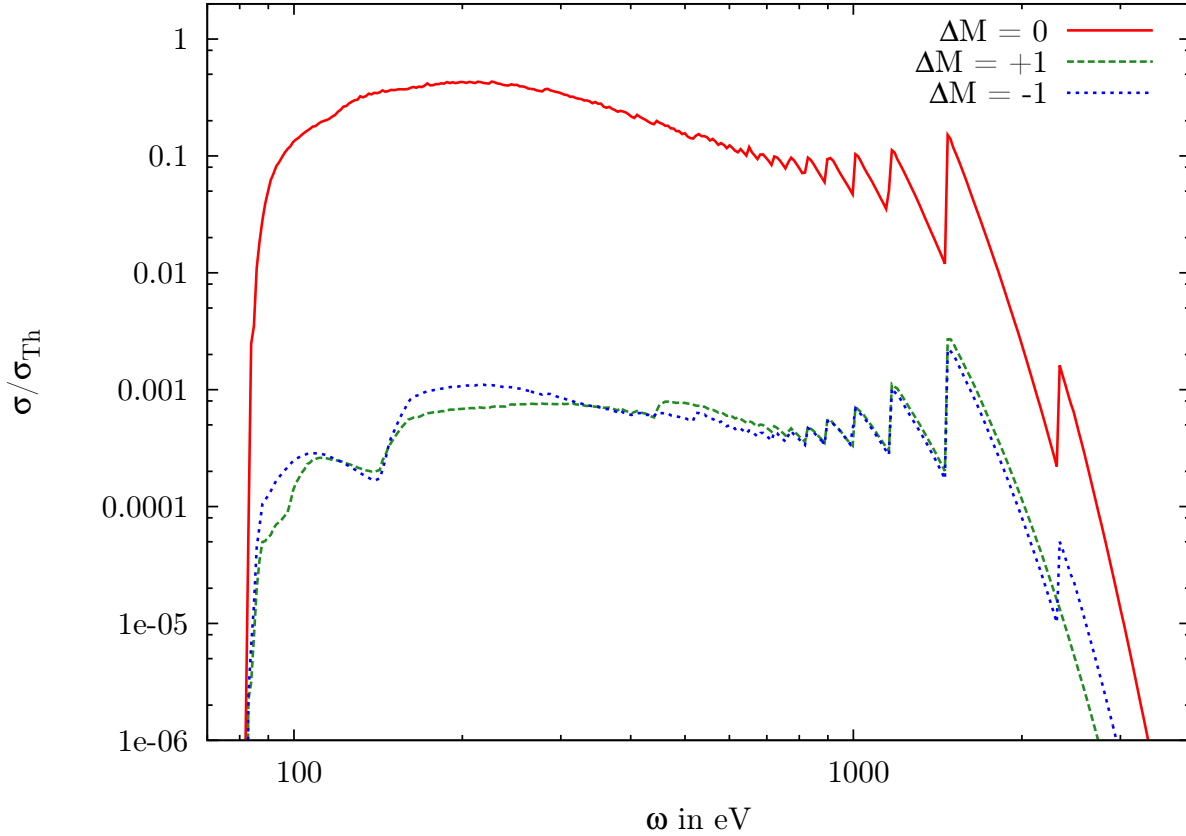


Abb. 8.4.: He-like oxygen: total cross section for the three different kinds of polarisation, $k_B T = 150$ eV, $B = 10^8$ T ($\beta \approx 212$).

Aside from being orders of magnitudes smaller, the total cross section of He-like oxygen and helium differ in shape. Some initial states of He-like oxygen have occupation probabilities less than 10^{-10} , and only strongly bound states with one electron in $m = 0$, $\nu = 0$ contribute noticeably to the total cross section. By additionally disregarding transitions where both electrons change their quantum number and using the results obtained from the helium analysis, we can effectively reduce the number of transitions needed to reproduce the total cross section from over one million to around 600.

Furthermore, the photon density has a greater effect on the total cross section for He-like oxygen than for helium due to the higher transition energies. When regarding the peaks at high energies, which are all caused by single transitions, the last peak turns out to be much smaller due to the decreased photon density at $\omega = 2000$ eV.

We can conclude that computing the total cross section of ions imposes a much easier task than the calculation for neutral atoms with the same number of electrons.

Determining the total cross sections of neutral atoms with more than two electrons is not possible without further ado. Even on computer clusters, the immense amount of transitions cannot be calculated. However, the findings made in this thesis do prove useful when analysing ions. Computing the total cross section of Li-like oxygen is not a problem: Assuming that only initial states with one electron in $m = 0, \nu = 0$ make a contribution to the total cross section, the number of transitions is sufficiently reduced. This assumption seems reasonable, since we have seen that for He-like oxygen all other states are weakly occupied and the corresponding transitions can be neglected.

In the end, the relative abundance of the different ionisation stages of an element at given density and temperature has to be determined using the Saha-equation so that we know which ionisation stages of an element are relevant. When trying to model the neutron star atmosphere, the effects of mass density, impact ionisation, finite mass of the nucleus, and electric microfields have to be taken into account in order to reduce the number of transitions. To summarise, all the necessary data can then be calculated with the programme presented in this thesis.

A. Atomare Rydberg-Einheiten

Die in dieser Arbeit verwendeten atomaren Rydberg-Einheiten (a.u.) sind definiert über die Gleichungen

$$2m_e = 4\pi\epsilon_0 = \hbar = \frac{e^2}{2} = 1 \text{ a.u.} \quad (\text{A.1})$$

Hiervon lassen sich alle anderen Größen ableiten, die Lichtgeschwindigkeit beispielsweise über die Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (\text{A.2})$$

zu $c = \frac{2}{\alpha}$. Die atomaren Einheiten orientieren sich am Wasserstoff-Atom, weshalb $E_\infty \approx 13,6 \text{ eV}$ auch gleich der Ionisierungsenergie eines Wasserstoffatoms im Grundzustand ohne externe Felder ist.

Die Verwendung atomarer Einheiten vereinfacht nicht nur die in dieser Arbeit gezeigten Rechnungen, sondern auch den zugehörigen Programmcode, für welchen dadurch keinerlei Naturkonstanten benötigt werden.

Für die Rechnungen wird immer angenommen, dass sich alle Elektronen im niedrigsten Landau-Niveau befinden (adiabatische Näherung). Als Maß für die Güte dieser Näherung dient die kernladungsskalierte Magnetfeldstärke

$$\beta_Z = \frac{\beta}{Z^2} = \frac{B}{B_0 Z^2}. \quad (\text{A.3})$$

Für $\beta_Z \gg 1$ liefert die adiabatische Näherung sehr genaue Ergebnisse, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Landauniveaus $n > 0$ ist sehr gering.

Die ebenfalls als atomaren Einheiten bezeichneten Hartree-Einheiten sind den Rydberg-Einheiten sehr ähnlich, verwenden jedoch beispielsweise $2E_\infty$ als Energieeinheit und die Formeln unterscheiden sich oftmals um einen Faktor 2 oder $\sqrt{2}$ von denen in Rydberg Einheiten. Beide Einheitensysteme haben die Abkürzung a.u. (atomic units), in dieser Arbeit werden jedoch alle Formeln in Rydberg-Einheiten angegeben, auch wenn oftmals nur von atomaren Einheiten die Rede ist.

A. Atomare Rydberg-Einheiten

Größe	Atomare Rydberg-Einheit	SI-Einheit
Länge	$a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$	$\approx 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Energie	$E_\infty = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2}$	$\approx 2,180 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
Zeit	$\frac{\hbar}{E_\infty} = \frac{2\hbar}{\alpha^2 m_e c^2}$	$\approx 4,838 \cdot 10^{-17} \text{ s}$
Masse	$2m_e$	$\approx 1,822 \cdot 10^{-30} \text{ kg}$
Ladung	$\frac{e}{\sqrt{2}}$	$\approx 1,133 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Drehimpuls	\hbar	$\approx 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$
Konstante	Atomare Rydberg-Einheit	SI-Einheit
Lichtgeschwindigkeit	$c = \frac{2}{\alpha} \text{ a.u.}$	$\approx 2,998 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
Bezugsfeldstärke	$B_0 = \frac{2(\alpha m_e c)^2}{e\hbar} = \sqrt{2} \text{ a.u.}$	$\approx 4,70108 \cdot 10^5 \text{ T}$
Elektronenmasse	$m_e = \frac{1}{2} \text{ a.u.}$	$\approx 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Elementarladung	$e = \sqrt{2} \text{ a.u.}$	$\approx 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Compton-Wellenlänge	$\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} = 2\pi\alpha \text{ a.u.}$	$\approx 2,426 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
Bohrsches Magneton	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = \sqrt{2} \text{ a.u.}$	$\approx 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}}$
El. Feldkonstante	$\varepsilon_0 = \frac{1}{4\pi} \text{ a.u.}$	$\approx 8,854 \cdot 10^{-12} \frac{\text{F}}{\text{m}}$
Mag. Feldkonstante	$\mu_0 = \pi\alpha^2 \text{ a.u.}$	$\approx 1,257 \cdot 10^{-6} \frac{\text{N}}{\text{A}^2}$
Larmor-Radius	$a_L = \sqrt{\frac{2\hbar}{eB}} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \text{ a.u.}$	
Zyklotronfrequenz	$\omega_c = \frac{eB}{m_e} = 4\beta \text{ a.u.}$	

Tab. A.1.: Umrechnungstabelle für einige wichtige Konstanten von atomaren Rydberg- in SI-Einheiten.

B. Landau-Wellenfunktionen

Die Landau-Wellenfunktionen sind die transversalen Wellenfunktionen für sämtliche Einzelelektronen. Deswegen wollen wir hier kurz auf deren Berechnung und Eigenschaften eingehen. Ihre Darstellung erfolgt sinnvollerweise in Polarkoordinaten. Die Landau-Wellenfunktionen haben die Form (siehe [10])

$$\Phi_{ns}(\rho, \varphi) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{i(n-s)\varphi} I_{ns}(\rho^2 \beta), \quad (\text{B.1})$$

wobei wir nur das niedrigste Landau-Niveau $n = 0$ betrachten. Hierbei ist

$$I_{ns}(t) = \sqrt{\frac{s!}{n!}} e^{-t/2} t^{(s-n)/2} \sum_{k=0}^{\min(s,n)} \binom{n}{k} \frac{(-t)^k}{(s-k)!}, \quad (\text{B.2})$$

ρ bezeichnet den Radius in Zylinderkoordinaten ($\rho = |\mathbf{r}_\perp|$). Die magnetische Quantenzahl m hängt mit der Quantenzahl s über die Gleichung

$$m = n - s \quad (\text{B.3})$$

zusammen, in adiabatischer Näherung ($n = 0$) gilt also $m = -s$, woraus sich die Landau-Funktionen

$$\Phi_m(\rho, \varphi) = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{im\varphi} I_{0,-m}(\rho^2 \beta) \quad (\text{B.4})$$

ergeben. Landau-Wellenfunktionen mit unterschiedlicher magnetischer Quantenzahl m stehen aufgrund des Faktors $e^{im\varphi}$ orthogonal aufeinander, was die Berechnung der Überlappintegrale in transversaler Richtung sehr vereinfacht:

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\rho, \varphi) \Phi_{m'}(\rho, \varphi) d\varphi d\rho = \delta_{mm'}. \quad (\text{B.5})$$

C. Effektive Potentiale

Um die eindimensionalen Elektron-Kern- sowie Elektron-Elektron-Potentiale in longitudinaler z -Richtung zu erhalten muss das $\frac{1}{r}$ -Potential, multipliziert mit den Landau-Wellenfunktionen der Elektronen, über die transversale Richtung (ρ, φ) integriert werden. Diese Potentiale werden sowohl zur Berechnung der gebundenen als auch der freien Wellenfunktion benötigt.

Die adiabatischen Elektron-Kern-Potentiale sind in [11] zu finden, ihre Herleitung soll jedoch hier nochmals kurz skizziert werden, da sie auch zur Berechnung der Elektron-Elektron-Potentiale benötigt werden. Die Elektron-Elektron-Potentiale vereinfachen sich in adiabatischer Näherung deutlich und werden deshalb hier besprochen. Die allgemeine (und deutlich kompliziertere) Form kann zum Beispiel in [12] und [2] nachgelesen werden.

C.1. Adiabatisches Elektron-Kern-Potential

Um auf das Potential in z -Richtung zu kommen müssen wir den Ausdruck

$$V_m(z) := \left\langle \Phi_m(\rho, \varphi) \left| \frac{Z}{|\mathbf{r}|} \right| \Phi_m(\rho, \varphi) \right\rangle \quad (\text{C.1})$$

auswerten. Dazu stellt man mit Hilfe der Laplace-Transformation den Coulombterm als ein Integral über die Besselfunktion J_0 dar (siehe [20])

$$\frac{1}{|\mathbf{r}|} = \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} = \int_0^\infty e^{-k|z|} J_0(k\rho) dk \quad (\text{C.2})$$

und erhält letztendlich den Term

$$V_m(z) = \frac{2}{m!} \int_0^\infty \rho^{2m} \frac{e^{(-\rho^2)}}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \rho \, d\rho. \quad (\text{C.3})$$

Führen wir nun noch eine Koordinatentransformation $u = \rho^2$ durch, so lässt sich dies schreiben als

$$V_m(z) = \frac{1}{m!} \int_0^\infty \frac{u^m}{\sqrt{u + z^2}} e^{(-u)} \, du. \quad (\text{C.4})$$

Dieser Ausdruck lässt sich numerisch mittels einer Gauß-Laguerre-Integration berechnen (siehe Abschnitt 5.5):

$$V_m(z) = \int_0^\infty \underbrace{\frac{1}{m!} \frac{u^m}{\sqrt{u+z^2}}}_{f(u)} \underbrace{e^{(-u)}}_{w(u)} du \approx \sum_{i=1}^N w_i f(u_i). \quad (\text{C.5})$$

Für besonders kleine Werte m und z ist die Konvergenzgeschwindigkeit dieses Integrals sehr langsam, das Integral wird statt über die Gauß-Quadratur mittels der exponentiell skalierten komplementären Fehlerfunktion dargestellt (siehe [12]):

$$V_m(z) = \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k m!}{2^{2k} (k!)^2 (m-k)!} \frac{d^{2k}}{dz^{2k}} \operatorname{erfcx}(z). \quad (\text{C.6})$$

Für große Werte von z hingegen lässt sich das Integral aufgrund des asymptotischen Verhaltens für $z \rightarrow \infty$ in eine Taylorreihe um Null bezüglich $\frac{1}{z}$ entwickeln (siehe [2]):

$$V_m(z) = \frac{1}{m!} \frac{1}{|z|} \left(1 - \frac{1}{2} (m+1)! \frac{1}{z^2} + \frac{1}{2} \frac{3}{4} (m+2)! \frac{1}{z^4} - \frac{1}{2} \frac{3}{4} \frac{5}{6} (m+3)! \frac{1}{z^6} \pm \dots \right). \quad (\text{C.7})$$

C.2. Adiabatisches Elektron-Elektron-Potential

Die Elektron-Elektron-Potentiale hängen von den Landau-Wellenfunktionen und somit den magnetischen Quantenzahlen beider beteiligter Elektronen ab und sind deutlich komplizierter zu berechnen:

$$\tilde{U}_{m_1 m_2, m'_1 m'_2}(z_1, z_2) := \left\langle \Phi_{m_2}(\rho_2, \varphi_2) \left| \left\langle \Phi_{m_1}(\rho_1, \varphi_1) \left| \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Phi_{m'_1}(\rho_1, \varphi_1) \right\rangle \right| \Phi_{m'_2}(\rho_2, \varphi_2) \right\rangle. \quad (\text{C.8})$$

Sie können jedoch zurückgeführt werden auf die adiabatischen Elektron-Kern-Potentiale $V_m(z)$ aus Gleichung (C.4), welche nur von einer magnetischen Quantenzahl abhängen. Entwickeln wir die Elektron-Elektron-Potentiale mit den Elektron-Kern-Potentialen als Basis, so erhalten wir

$$\tilde{U}_{m_1 m_2, m'_1 m'_2}(z_1, z_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=0}^{m_1+m_2} c(m_1, m_2, m'_1, m'_2; i) V_i\left(\frac{|z_1 - z_2|}{\sqrt{2}}\right) \quad (\text{C.9})$$

mit den Koeffizienten

$$c(m_1, m_2, m'_1, m'_2; r) = \int_0^\infty I_{rr}(u) I_{m_1 m'_1}\left(\frac{u}{2}\right) I_{m_2 m'_2}\left(\frac{u}{2}\right) du. \quad (\text{C.10})$$

Hierbei ist die Funktion $I_{ns}(u)$ gegeben durch

$$I_{ns}(u) = \sqrt{\frac{s!}{n!}} e^{-u/2} u^{(s-n)/2} \sum_{k=0}^{\min(s,n)} \binom{n}{k} \frac{(-u)^k}{(s-k)!}. \quad (\text{C.11})$$

Die zur Berechnung der direkten Elektron-Elektron-Wechselwirkung und der Austauschwechselwirkung benötigten Terme folgen dann direkt aus dem Potential (C.9)

$$U_{m_1 m_2}(z_1, z_2) = 2 \sqrt{\beta} \tilde{U}_{m_1 m_2, m_1 m_2}(\sqrt{\beta} z_1, \sqrt{\beta} z_2), \quad (\text{C.12})$$

$$A_{m_1 m_2}(z_1, z_2) = 2 \sqrt{\beta} \tilde{U}_{m_1 m_2, m_2 m_1}(\sqrt{\beta} z_1, \sqrt{\beta} z_2), \quad (\text{C.13})$$

wobei der einzige Unterschied darin besteht, dass für die direkte Wechselwirkung $m'_1 = m_1$ und $m'_2 = m_2$ gilt, während für die Austauschwechselwirkung $m'_1 = m_2$ sowie $m'_2 = m_1$ sein muss.

Die adiabatischen Koeffizienten $c(m_1, m_2, m'_1, m'_2; r)$ wurden in [14] bis zur magnetischen Quantenzahl $m = 200$ berechnet und müssen nur einmal beim Programmstart eingelesen werden. Deren Berechnung benötigt deutlich weniger Zeit als die Berechnung der in [12] verwendeten Koeffizienten für Landau-Niveaus bis $n = 7$ und $m = 25$, da in diesem Fall die Potentiale und somit auch die Koeffizienten von acht statt von vier Quantenzahlen abhängig sind.

Darüber hinaus bietet es sich an, auch die Potentiale $V_m(z)$ selbst entweder vorher an hinreichend vielen Stellen zu berechnen, um mit ausreichender Genauigkeit linear interpolieren zu können, oder zumindest für die weiteren Iterationsschritte zwischenspeichern, da $V_m(z)$ immer wieder an der gleichen Stelle benötigt wird.

Literaturverzeichnis

- [1] K. Mori und C. J. Hailey. Atomic Calculation for the Atmospheres of Strongly Magnetized Neutron Stars. *The Astrophysical Journal* 564, 914 (2002).
- [2] P. Pröschel, W. Rösner, G. Wunner, H. Ruder und H. Herold. Hartree-Fock calculations for atoms in strong magnetic fields. I. Energy levels of two-electron systems. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 15, 1959–1976 (1982).
- [3] Dirk Engel und Günter Wunner. Hartree-Fock-Roothaan calculations for many-electron atoms and ions in neutron-star magnetic fields. *Phys. Rev. A* 78, 032515 (2008).
- [4] C. Schimeczek, D. Engel und G. Wunner. A highly optimized code for calculating atomic data at neutron star magnetic field strengths using a doubly self-consistent Hartree-Fock-Roothaan method. *Computer Physics Communications* 183, 1502–1510 (2012).
- [5] T. Kersting. *Hartree-Fock Rechnungen zur Photoionisation von schweren Mehrelektronenatomen in Neutronensternmagnetfeldern*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2011).
- [6] D. Zajec. *Selbstkonsistente Berechnungen von gebunden-frei Übergängen bei leichten bis mittelschweren Mehrelektronenatomen in superstarken Magnetfeldern*. Diplomarbeit.
- [7] K. Mori und C. J. Hailey. Detailed Atmosphere Modeling for the Neutron Star 1E1207.4-5209: Evidence of an Oxygen/Neon Atmosphere. *Astrophysical Journal* 648, 1139–1155 (2006).
- [8] W. C. G. Ho und C. O. Heinke. A Neutron Star with a Carbon Atmosphere in the Cassiopeia A Supernova Remnant. *Nature* (2009).
- [9] L. I. Schiff und H. Snyder. Theory of the Quadratic Zeeman Effect. *Phys. Rev.* 55, 59–63 (1939).
- [10] V. Canuto und J. Ventura. Quantizing Magnetic Fields in Astrophysics. *Fundamentals of Cosmic Physics* 2, 203–353 (1977).

- [11] H. Ruder, G. Wunner, H. Herold und F. Geyer. *Atoms in Strong Magnetic Fields*. Astronomy and Astrophysics Library. Springer-Verlag (1994).
- [12] D. Engel. *Hartree-Fock-Roothaan-Rechnungen für Vielelektronen-Atome in Neutronenstern-Magnetfeldern*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2007).
- [13] Steffen Bücheler. *Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Simulationen für Vielelektronen-Atome in Neutronensternmagnetfeldern*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2007).
- [14] C. Schimeczek. *Startwellenfunktionen für Hartree-Fock-Roothaan-Rechnungen für Mehrelektronenatome in Neutronensternmagnetfeldern*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2010).
- [15] W. Schmitt. *Wirkungsquerschnitt für Photoionisation, Photorekombination und Stoßionisation in Wasserstoffähnlichen Atomen in extrem starken Magnetfeldern*. Doktorarbeit, Universität Erlangen-Nürnberg (1982).
- [16] W. Schmitt, H. Herold, H. Ruder und G. Wunner. The photoionization of the Hydrogen Atom in Strong Magnetic Fields. *Astron. Astrophys.* 94, 194–198 (1981).
- [17] A. Y. Potekhin und G. G. Pavlov. Photoionization of the Hydrogen Atom in Strong Magnetic Fields. *The Astrophysical Journal* 407, 330–341 (1993).
- [18] G. Wunner. Cross sections for photo-ionisation and photo-recombination of hydrogen atoms in strong magnetic fields. *Astronomy and Astrophysics* 117, 156–163 (1983).
- [19] G.F Bignami, A. De Luca, P.A. Caraveo, S.Mereghetti, M.Moroni und R.P Mignani. 1E1207.4-5209 - a Unique Object. *Memorie della Società Astronomica Italiana* 73 (2002).
- [20] I. S. Gradshteyn und I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, 6. Auflage (1965).
- [21] A. Y. Potekhin, Gilles Chabrier und Dominique Gilles. Electric microfield distributions in electron-ion plasmas. *Phys. Rev. E* 65, 036412 (2002).
- [22] G Wunner, H Ruder und H Herold. Comment on the effect of the proton mass on the spectrum of the hydrogen atom in a very strong magnetic field. *Physics Letters A* 79, 159 – 161 (1980).
- [23] Ventura, H. Herold, H. Ruder und F. Geyer. Photoabsorption in magnetic neutron star atmospheres. *Astronomy and Astrophysics* 261, 235–244 (1992).

- [24] P. Diemand, T. Kersting, D. Zajec und G. Wunner. Hartree-Fock calculations for the photoionisation of light to medium atoms and ions in neutron star magnetic fields. *to be published* .
- [25] H.-R. Schwarz und N. Köckler. *Numerische Mathematik*. Teubner Verlag, fünfte Auflage (2004).
- [26] bwGRiD (<http://www.bw-grid.de/>). Member of the German D-Grid initiative, funded by the Ministry of Education and Research (Bundesministerium für Bildung und Forschung) and the Ministry for Science, Research and Arts Baden-Wuerttemberg (Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg). Technischer Bericht, Universities of Baden-Württemberg (2007-2010).
- [27] Steffen Bücheler, Dirk Engel, Jörg Main und Günter Wunner. Quantum Monte Carlo studies of the ground states of heavy atoms in neutron-star magnetic fields. *Phys. Rev. A* 76, 032501 (2007).
- [28] D. Engel, M. Klews und G. Wunner. A fast parallel code for calculating energies and oscillator strengths of many-electron atoms at neutron star magnetic field strengths in adiabatic approximation. *Computer Physics Communications* 180, 302–311 (2009).

Danksagung

Ich möchte mich beim gesamten Institut für die angenehme Arbeitsatmosphäre und die allgemeine Hilfsbereitschaft bedanken. Mein besonderer Dank gilt

- Herrn Prof. Dr. Günter Wunner für die hervorragende Betreuung und die weitreichende Freiheit beim Anfertigen dieser Arbeit,
- Herrn Prof. Dr. Günter Haag für die Übernahme des Mitberichts,
- Herrn Prof. Dr. Clemens Bechinger für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes,
- Thorsten Kersting und Damir Zajec für die Automatisierung des Programms zum Rechnen am bwGRiD und die gute Zusammenarbeit,
- Christoph Schimeczek für die Bereitstellung des HFR-Programms sowie zahlreiche fachliche Diskussionen
- Sebastian Boblest für das Korrekturlesen des Manuskripts und die Hilfe bei \LaTeX -Problemen,
- Claudia Schoder für das Korrekturlesen des Manuskripts und die moralische Unterstützung in den kritischen Wochen vor der Abgabe,
- Dr. Holger Catarius für die gute Systemadministration und sämtliche Aufgaben, die er teils unbemerkt am Institut übernimmt,
- dem bwGRiD für die Bereitstellung der benötigten Rechenkapazität,
- Melanie Buchert, Torsten Schwidder, Dr. Roman Bedau, Dr. Jens Teifel, Rolf Häfner, Kai Marquardt und Pascal Wieland. die dem Unialltag die nötige Würze gaben.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre, daß ich diese Dissertation, abgesehen von den ausdrücklich bezeichneten Hilfsmitteln und den Ratschlägen von den jeweils namentlich aufgeführten Personen, selbständig verfaßt habe.

Stuttgart, 24. Oktober 2012

Peter Diemand

