

# Bericht

## Quantenelektrodynamische Effekte in inter-Partiklen Coulombischen Einfangprozessen

Elena Jahr, Elke Faßhauer

21. Juni 2024

Im Rahmen meines Aufenthaltes an der Sorbonne Universität in Paris untersuchten wir (Jan Šenk, Nicolas Sisourat, Elke Faßhauer und ich) den interatomaren Coulombischen Elektroneneinfang (ICEC) des positiv geladenen Helium-Neon-Dimers ( $\text{HeNe}^+$ ) unter Berücksichtigung der Schwingungsfreiheitsgrade. ICEC ist ein Elektroneneinfangprozess, bei dem die überschüssige Energie der Elektronenlagerung (hier an  $\text{He}^+$ ) simultan an eine benachbarte Einheit (Ne) übertragen wird, welche ionisiert wird [1]. Die Effektivität des ICEC Prozesses wird durch den Querschnitt charakterisiert, den wir mit unterschiedlichen Methoden berechneten. Die Pariser Gruppe nutzten die numerische R-Matrix-Methode [2], während wir in Tübingen ein asymptotisches Modell anwendeten [1].

In unseren Untersuchungen haben wir überdies erstmals die in der quantenelektrodynamischen Beschreibung des interatomaren Coulomb-Zerfalls [3] entwickelte Berücksichtigung des Überlapps der atomaren Wellenfunktionen auf das schwingungsaufgelöste asymptotische Modell angewendet.

Wir analysierten hierfür unter anderem den Prozess, bei dem Neon das Elektron aus dem parallel zur interatomaren Achse ausgerichteten  $2p_z$ -Orbital abgibt. Das asymptotische Modell ohne Überlapp lieferte einen deutlich kleineren Querschnitt als die numerische R-Matrix-Methode (siehe Abb. 1). Mit Berücksichtigung des Überlapps konnte das asymptotischen Modell die Größenordnung des numerischen Querschnitts jedoch reproduzieren und wurde somit erfolgreich verbessert.

Im Rahmen dieser Kollaboration sind weitere interessante Fragestellungen aufgetreten, die es zukünftig zu untersuchen gilt. Insbesondere liegen uns noch keine endgültigen Ergebnisse für den Fall vor, dass Neon das Elektron aus dem  $2p_x$ - oder  $2p_y$ -Orbital abgibt. Zudem haben wir bislang nur gebundene Schwingungszustände berücksichtigt, da diese analytisch beschreibbar sind. Es spricht jedoch nichts dagegen, dass das Dimer im Endzustand dissoziert.

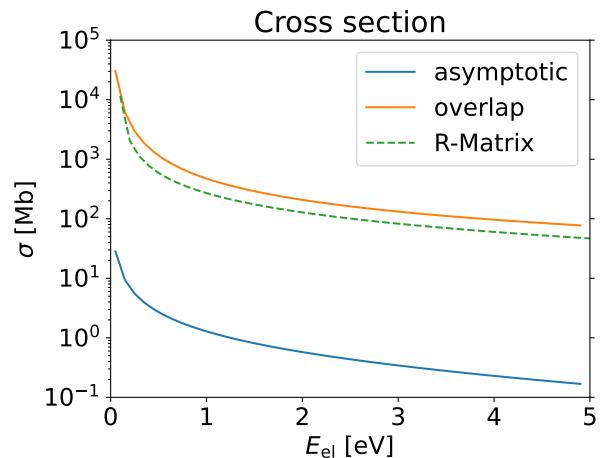


Abb. 1: Der Querschnitt des schwingungsaufgelösten ICEC von  $\text{He}^+\text{Ne}$  in Abhängigkeit von der Energie des eingehenden Elektrons. Hierbei wird das ausgehende Elektron aus dem  $2p_z$ -Orbital des Neons abgegeben.

[1] K. Gohberg and L. S. Cederbaum *Phys. Rev. A.* **82**, 052707, 2010.

[2] J. Tennyson *Phys. Rep.* **491**, 29-76, 2010.

[3] A. Niggas, S. Creutzburg, J. Schwestka, B. Wöckinger, T. Gupta, P. L. Grande, D. Eder, J. P. Marques, B. C. Bayer, F. Aumayr, R. Bennett, and R. A. Wilhelm *Commun Phys* **4**, 1–9, 2021.