

Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Masterarbeit

Im Studiengang Physik

vorgelegt von

Stepan Dobrodey

geboren in Wladiwostok

2014

**Untersuchung von K-LL-Resonanzen dielektronischer
Rekombination und simultaner
Innerschalen-Vakuum-Ultraviolet Übergänge in
hochgeladenem Eisen mit einer Elektronenstrahl-
Ionenfalle**

Die Masterarbeit wurde von Stepan Dobrodey

ausgeführt am

Max-Planck-Institut für Kernphysik

unter der Betreuung von

Herrn Priv.-Doz. Dr. José Ramón Crespo López-Urrutia

Untersuchung von K-LL-Resonanzen dielektronischer Rekombination und simultaner Innerschalen-Vakuum-Ultraviolett Übergänge in hochgeladenem Eisen mit einer Elektronenstrahl- Ionenfalle:

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Messungen von dielektronischer Rekombination (DR) an hochgeladenem Eisen unter Verwendung einer Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT) durch Variation der Elektronenstrahlenergie und Detektion von Fluoreszenzphotonen präsentiert. K-LL-Resonanzen werden normalerweise durch Detektion von K-L Röntgen-Übergängen untersucht. Mit dem vorgestellten Aufbau ist es möglich simultane Innerschalen-Übergänge im Vakuum-Ultraviolett-Bereich (VUV) zu untersuchen. Die Röntgenspektren werden mithilfe eines Siliziumdriftdetektors erfasst. Die VUV-Spektren werden simultan mithilfe eines Gitterspektrometers, ausgestattet mit einer Mikrokanalplatte und einer Delay-Line-Anode, aufgenommen. Dadurch ist sowohl eine zeitaufgelöste als auch eine wellenlängenaufgelöste Detektion der VUV-Photonen möglich. Die Intensität der Spektrallinien kann als Funktion der Elektronenstrahlenergie aufgezeichnet und somit zu den K-LL-Resonanzen in Korrelation gebracht werden. Erste Messungen wurden an hochgeladenem Eisen durchgeführt. VUV-Spektren wurden für die indirekte Beobachtung von Ladungszustandsänderungen verwendet. Somit konnte gezeigt werden, dass es möglich ist, mithilfe von DR-Resonanzen die Besetzungszahl im Ladungszustand Fe^{23+} um einen Faktor von 3,37(5) und Fe^{22+} um einen Faktor 2,8(2) zu erhöhen. Für zukünftige Experimente wird dieser Aufbau zur Messung von Ladungszustandsverteilungen und Untersuchung der photonischen Abregung nach resonanter Rekombination verwendet werden.

Studies of K-LL resonances and simultaneous inner-shell vacuum ultraviolet transitions in highly charged iron using an electron beam ion trap:

In the framework of this master thesis measurements of dielectronic recombination (DR) on highly charged iron are presented using an electron beam ion trap (EBIT) measured by varying the electron beam energy and detecting fluorescence. K-LL resonances have usually been studied by observing the K-L X-ray transitions. With the setup presented observations of simultaneous inner-shell transitions in the VUV range become possible. The X-ray spectra of resonant recombination are acquired with a silicon drift detector (SDD). The VUV spectra are simultaneously obtained using a grating spectrometer equipped with a microchannel plate (MCP) and a delay line anode. This allows a time-resolved, as well as a wavelength-resolved detection of the VUV photons. The intensity of the spectral lines can be recorded as a function of the electron beam energy and thus related to the K-LL resonances. First measurements were performed with highly charged iron VUV spectra were used for the indirect observation of changes in charge state. In such a way it was demonstrated that it is possible to use DR resonances to increase the population in the charge state Fe^{23+} by a factor of 3,37(5) and in Fe^{22+} by a factor of 2,8(2). For future experiments this setup will be used to measure charge state distributions and to study photonic relaxation after resonant recombination in more detail.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	9
2	Theoretische Grundlagen	13
2.1	Struktur der Atome	13
2.1.1	Das Wasserstoffatom	14
2.1.2	Mehrelektronensysteme	16
2.2	Hochgeladene Ionen	18
2.2.1	Anregungs- und Abregungsprozesse	18
2.2.2	Ionisationsprozesse	20
2.2.3	Rekombinationsprozesse	21
2.3	Die Elektronenstrahl-Ionenfalle	23
2.4	Eigenschaften des Elektronenstrahls	25
2.4.1	Strahldurchmesser	25
2.4.2	Raumladungseffekte	25
2.5	Ladungszustandsverteilungen	25
2.5.1	Thermisches Gleichgewicht	25
2.5.2	Modell des lokalen thermischen Gleichgewichtes	27
2.5.3	Korona-Modell	28
3	Experimenteller Aufbau	30
3.1	FLASH-EBIT	30
3.1.1	Die Elektronenkanone	30
3.1.2	Der Kollektor	32
3.1.3	Die Driftröhren	33
3.1.4	Die Magnetkammer	35
3.1.5	Das Injektionssystem	35
3.2	Photonen Detektoren	36
3.2.1	Siliziumdrift-detektor	36
3.2.2	EUV-Spektrometer	38

3.3	Das Datenaufnahmesystem	43
4	Datenauswertung	45
4.1	MCP-Detektor-Datenauswertung	45
4.1.1	Rotation und Projektion der Spektren	45
4.2	Gewinnung von Rekombinationsspektren	48
4.2.1	Projektion der Spektren	52
4.2.2	Kalibration des DR-Spektrums	54
4.3	Kalibration des VUV-Spektrums	54
4.4	Elektronenstrahlenergieabhängige VUV-Spektren	63
5	Ergebnisse	67
5.1	Rekombinationsspektren	67
5.2	VUV-Spektren	67
5.2.1	Elektronenstrahlenergieabhängige VUV-Spektren	69
6	Diskussion der Ergebnisse und Ausblick	86
6.1	Siliziumdrift-detektor	86
6.2	Gitterspektrometer	87
6.3	Messmethode	87
6.4	Ausblick	89
7	Literatur	90

1 Einleitung

Bereits im 13. Jahrhundert n. Chr. beobachtete der englische Philosoph Roger Bacon, dass das Sonnenlicht beim Durchqueren eines Wasserglases in einzelne Farben aufgespalten wird.

Im Jahre 1666 entdeckte Isaac Newton, dass sich weißes Licht mithilfe eines Prismas in einzelne Farbbestandteile zerlegen lässt. Er führte somit den Begriff des Spektrums (lateinisch für Erscheinung) ein.

Anfang des 19. Jahrhunderts untersuchte William Herschel die Wärmestrahlung der Sonne. Dabei zerlegte er das Sonnenlicht mittels eines Prismas und platzierte ein Thermometer jeweils im Strahlengang von Licht unterschiedlicher Farbe. Er beobachtete ein Maximum der Temperatur in einem Bereich, der außerhalb des roten, sichtbaren Bereiches liegt und entdeckte somit das Infrarotlicht.

Ein Jahr später untersuchte Johann Wilhelm Ritter den Effekt der Spektralfarben des Sonnenlichts auf verschiedene Chemikalien. In einem Bereich außerhalb des violetten, sichtbaren Lichtes konnte er ein Schwärzen von Silberchlorid beobachten. Dieser als „chemische Strahlung“ bezeichnete Spektralbereich ist heute als Ultraviolett bekannt.

Im Jahre 1859 entwickelten Gustav Kirchhoff und Robert Bunsen das erste Spektrometer, bestehend aus einem Prisma, einem Eintrittsspalt und einem Kollimator und führten damit eine neue Technik zur Untersuchung chemischer Elemente, die sogenannte Spektralanalyse, ein. Dabei wurden chemische Elemente verbrannt und für diese Elemente charakteristische Spektrallinien beobachtet. Durch das Leiten von Sonnenlicht durch eine Natriumflamme in das Spektrometer stellten sie fest, dass der Bereich der gelben Natriumlinie im beobachteten Spektrum dunkel blieb. Sie folgerten daraus, dass das Licht gewisser chemischer Elemente durch Gase in der Sonnenatmosphäre absorbiert wird. Später untersuchte Kirchhoff einen großen Spektralbereich des Sonnenspektrums [27].

Am 7. August 1869 beobachteten Harkness und Young während der totalen Sonnenfinsternis eine Emissionslinie schwacher Intensität im grünen Bereich des Spektrums der Sonnenkorona [16]. Die Korona ist der Bereich oberhalb der Chromosphäre der Sonne, der eine geringere Dichte und eine höhere Temperatur als die tieferen Sonnenschichten besitzt. 1879 identifizierte Young diese Linie als Kirchhoffs „Fe-Linie Nr. 1474“ Diese

Linie mit einer Wellenlänge von 5303 \AA konnte allerdings keinem bekannten Element zugeordnet werden. In den darauffolgenden Sonnenfinsternissen wurden einige weitere Gruppen solcher Linien entdeckt, die eine bestimmte Beziehung zu der entdeckten grünen Koronalinie hatten. Die Vermutung, dass diese Linien dem Element Eisen zugeordnet werden könnte, wurde durch eine genaue Wellenlängenmessung verworfen. Diese Linien wurden somit einem hypothetischen Element, welches als Coronium [16] bezeichnet wurde, zugeordnet. Bereits 1937 existierten 18 potentielle Linien, bei denen vergeblich versucht wurde, sie Coronium zuzuordnen. Erst 1941 konnte von B. Edlén die Wellenlänge der grünen Linie dem $3s^2 3p^2 \ ^1P_{3/2} - \ ^2P_{1/2}$ -Übergang von dreizehnfach hochgeladenem Eisen zugeordnet werden.

Ionen werden als hochgeladen bezeichnet, wenn dem entsprechenden Atom im Verhältnis zu seiner Kernladung Z relativ viele Elektronen fehlen [23]. Allerdings existiert hierfür keine eindeutige Definition. Annähernd die gesamte sichtbare baryonische Materie im Universum liegt in ionisierter Form vor, weshalb eine genaue Kenntnis über die Struktur dieser Ionen notwendig zur Beschreibung vieler astrophysikalischer Prozesse ist. Des Weiteren eignen sich hochgeladene Ionen aufgrund ihrer relativ einfachen elektronischen Struktur, der hohen Kernladung Z und der daraus resultierenden starken elektrischen Felder zur Untersuchung von quantenelektrodynamischen Theorien der Atomstruktur. Plasmen, wie sie beispielsweise in der Sonnenkorona auftreten, existieren auf der Erde selten in einer natürlichen Form, da die Ionen schnell mit Elektronen aus der Umgebung rekombinieren, sondern müssen durch experimentelle Apparaturen künstlich hergestellt werden. Dies lässt sich beispielsweise mithilfe von Tokamaks (russisch: *токамак*, Akronym für „Toroidale Kammer in Magnetspulen“), welche mithilfe von Magnetfeldern das Plasma einschließen, oder in Elektronenstrahl-Ionenfallen (EBIT) realisieren. EBITs haben sich in den letzten Jahren als Apparaturen zur Herstellung, Speicherung und spektroskopischen Untersuchungen von hochgeladenen Ionen erfolgreich bewährt. Dabei werden anfangs neutrale Atome oder Moleküle mittels eines monoenergetischen Elektronenstrahls ionisiert und mithilfe von magnetischen und elektrischen Feldern zur spektroskopischen Untersuchung gefangen. Des Weiteren können durch die Wechselwirkung des Elektronenstrahls mit den Ionen Prozesse in astrophysikalischen Plasmen, wie beispielsweise Elektronenstoßanregung, radiative oder resonante Rekombination, im Labor simuliert und experimentell untersucht werden. Eine spezielle Form der resonanten Rekombination, die sogenannte dielektronische Rekombination (DR), bei der ein freies Elektron mit einem hochgeladenen Ion in einen angeregten Zwischenzustand rekombiniert und dabei die gesamte kinetische Energie an das gebundene

Elektron transferiert. Dieser Zustand zerfällt anschließend unter Emission eines Photons, welches spektroskopisch untersucht werden kann. Dielektronische Rekombination stellt in astrophysikalischen und in Laborplasmen einen wichtigen Kühlungsmechanismus dar, da bei der Rekombination thermische Energie der freien Elektronen komplett in Strahlungsenergie konvertiert wird, die das System verlassen kann, was zu Änderungen der Plasmatemperatur und somit zu einer Änderung der Ladungszustandsverteilung führt. Eine genaue Kenntnis der Spektren ist also zur Untersuchung von Plasmeneigenschaften wie Elektronentemperatur -und -dichte sowie Ladungszustandsverteilungen unerlässlich [52, 19, 30].

In unserem Sonnensystem besitzt Eisen von den schwereren Elementen die größte relative Häufigkeit [7] und stellt in stellaren Plasmen in ionisierter Form einen wichtigen Beitrag zum Mechanismus des Energietransports dar [46]. Die K-Schalen-Übergänge von Eisenionen werden in der Astrophysik zur Untersuchung von astrophysikalischen Objekten genutzt, da sie starke Beiträge in Röntgenspektren beitragen [3].

Hochgeladene Eisenionen mit wenig Elektronen wie beispielsweise lithiumartiges oder berylliumartiges Eisen kommen häufig in Hochtemperaturplasmen, wie beispielsweise in unserer Sonne, vor. Die Spektren von Fe^{23+} und Fe^{24+} haben sich als nützliches Mittel für Plasmadiagnostik von heißen Sternen oder Laborplasmen erwiesen und können zur Bestimmung der Elektronentemperatur mithilfe der K-Schalen-Photonen oder der relativen Häufigkeit von lithium und berylliumartigen Eisenionen durch Photonen aus Innerschalenübergängen verwendet werden, wodurch es möglich ist, Aussagen über das Gleichgewicht eines Systems zu treffen [35].

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden hauptsächlich K-Schalen-Übergänge in lithiumartigen Eisen im Röntgenbereich und Innerschalen-Übergänge im VUV-Bereich in einer EBIT spektroskopisch untersucht. Ziel dieser Arbeit war eine gezielte Manipulation der Ladungszustandsverteilung der Ionen durch resonante Rekombination von hochgeladenem Eisen in der Falle und deren Untersuchung. Die Ladungszustandsverteilung in einer EBIT wird durch mehrere Parameter wie beispielsweise die Elektronenstrahlenergie, Elektronendichte, die Verweildauer der Ionen in der Falle sowie die Rate mit dem neutralen Gas in die Falle gelangt bestimmt. Diese Verteilung erstreckt sich über einen breiten Bereich an verschiedenen Ladungszuständen. Durch dielektronische Rekombination lässt sich die Besetzungszahl eines bestimmten Ladungszustandes manipulieren [36]. Damit können bestimmte Ladungszustände effektiv besetzt, andere wiederum unterdrückt werden. Diese Methode der Ladungszustandsoptimierung ist hilfreich für Ladungsbrüten (engl.: charge breeding).

In der vorliegenden Arbeit wurde auf das konventionell verwendete Diagnosemittel der Extraktion von Ionen [12] verzichtet und stattdessen wurden Innerschalenübergänge im VUV-Bereich analysiert. Diese Methode könnte für spätere Experimente, bei denen eine hohe Konzentration eines bestimmten Ladungszustandes benötigt wird, zu einer Optimierung der Ionenausbeute genutzt werden. Außerdem können die untersuchten Energieniveaus bei einer Relaxation eines doppelt angeregten Zustandes bedingt durch resonante Rekombination besetzt werden und anschließend durch Emission eines VUV-Photons in den Grundzustand zerfallen.

Im ersten Teil dieser Arbeit wird ein kurzer Überblick über die theoretischen Grundlagen der Atomstruktur, der An- und Abregungsprozesse von Elektron-Ion-, bzw. Photon-Ion-Wechselwirkungen, den Ladungszustandsverteilungen sowie den physikalischen Grundlagen einer EBIT vorgestellt. Im zweiten Teil wird der experimentelle Aufbau vorgestellt und die einzelnen Bauteile der FLASH-EBIT, sowie die verwendeten Photonendetektoren inklusive Datenaufnahmesystem erklärt. Im dritten Teil werden die Messmethoden sowie die Datenverarbeitung bzw. die Verarbeitung der aufgenommenen Röntgen- und VUV-Spektren präsentiert. Im vierten Teil werden die durchgeführten Messungen an hochgeladenem Eisen vorgestellt, ausgewertet und im Anschluss diskutiert.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Struktur der Atome

Die heutige Kenntnis über die Struktur von Atomen konnte durch Untersuchungen von Emissions- und Absorptionsspektren verschiedener Elemente gewonnen werden. Dabei wird die Wechselwirkung von elektromagnetischen Wellen mit Materie untersucht. Die gemessene Wellenlänge der Spektrallinien gibt die Information über die Energiezustände eines Systems und die Intensität dieser Linien repräsentiert die Kopplungsstärke bzw. die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen verschiedenen Niveaus. Bereits in den 1890er Jahren konnte durch Streuexperimente von einem Elektronenstrahl an Materie gefolgert werden, dass Masse und Ladung in einem Atom nicht gleichmäßig verteilt sind und dass ein Atom im Inneren relativ leer ist [25]. Anfang des 20. Jahrhunderts zeigte Rutherford durch Streuung von ${}^4_2\text{He}$ Heliumkernen an einer dünnen Goldfolie, dass es einen kleinen ($\sim 10^{-15}$ m), positiv geladenen Atomkern gibt, der fast die gesamte Masse des Atoms enthält [47]. Die Dynamik der Elektronen war jedoch unklar. Jede beschleunigte Ladung emittiert elektromagnetische Strahlung [38]. Würden also die Elektronen den Atomkern - ähnlich wie die Planeten die Sonne - umkreisen, so würden sie durch Emission von elektromagnetischer Strahlung stetig Energie verlieren und somit nicht auf einer stabilen Bahn bleiben. 1913 präsentierte Nils Bohr sein semiklassisches Atommodell. Er postulierte, dass sich die Elektronen nur auf bestimmten klassischen Bahnen um den Atomkern ohne Emission von elektromagnetischer Strahlung bewegen können. Strahlung wird nur beim Übergang von einer erlaubten Bahn zu einer anderen emittiert oder absorbiert [15]. Später postulierte er die Quantisierung des Drehimpulses auf ein ganzzahliges Vielfaches des Plank'schen Wirkungsquantums \hbar um einen fließenden Übergang von der klassischen Physik zur Quantenphysik herzustellen.

1926 wurde von Erwin Schrödinger eine Wellenmechanik entwickelt, die auf Louis deBroglies Überlegungen basierte, Teilchen eine Wellenlänge $\lambda = \hbar/h$ zuzuordnen, die von ihrem Impuls abhängt. Der zentrale Bestandteil seiner Theorie stellt die sogenannte zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

dar, bei der die Teilchen durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ beschrieben werden. \hat{H} ist dabei der sogenannte Hamiltonoperator, dessen Eigenwert die „Energiewerte“ sind. Das Resultat dieser Gleichung ist, dass es keine feste Bahnen der Elektronen bzw. keinen festen Ort eines Teilchens gibt, sondern lediglich nur eine Wahrscheinlichkeit $p = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ ein Teilchen am Ort \vec{r} zur Zeit t zu lokalisieren. Für ein punktförmiges Teilchen der Masse m in einem zeit- und ortsabhängigen Potential $V(\vec{r}, t)$ lässt sich der Hamiltonoperator als

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\vec{r}, t) \quad (2.2)$$

schreiben, wobei Δ_r den Laplace-Operator darstellt. Der erste Term beschreibt die kinetische Energie des Systems und der zweite Term das Potential, in dem sich das Teilchen bewegt.

2.1.1 Das Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom besteht aus einem Proton und einem Elektron in dessen Coulomb-Potential $V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|}$, wobei die Kernladung Z eins beträgt. Die Schrödinger-Gleichung für dieses System lässt sich analytisch lösen [17, 25]. Für gebundene Elektronen sind die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators diskret und können die Werte

$$E_n = -R_y \frac{Z^2}{n^2}, \quad \text{mit } R_y = \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2}, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2.3)$$

annehmen, welche den Energien des Bohr'schen Atommodells entsprechen. Z ist dabei die Kernladung, m_e die Elektronenmasse, e die Elektronenladung, h die Plank'sche Konstante und ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante. Der Unterschied zum klassischen Modell liegt allerdings in den Wellenfunktionen. Die Gesamtwellenfunktion für das Wasserstoffsystem lässt sich in einen Winkel- und in einen Radialanteil zerlegen. In Polarkoordinaten können diese als

$$\psi(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Theta, \Phi) \quad \text{mit} \quad (2.4)$$

$$R_{nl}(r) = D_{nl} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right) \quad (2.5)$$

geschrieben werden, wobei Y_{lm} die Kugelflächenfunktionen und L_{n+l}^{2l+1} die Laguerre-Polynome darstellen. D_{nl} ist hierbei eine Normierungskonstante. Die Wellenfunktio-

nen hängen also von der Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, \dots$, von der Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$ und von der magnetischen Quantenzahl $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ ab. Die räumlichen Wellenfunktionen, auch Orbitale genannt, beschreiben keine konkreten Kreisbahnen, wie von Bohr beschrieben, sondern lediglich Aufenthaltswahrscheinlichkeiten. Für große Quantenzahlen n befindet sich das System in einem sogenannten Rydbergzustand, welcher sich nach dem Korrespondenzprinzip der klassischen Beschreibung der kreisförmigen Orbitale nähert.

In erster Näherung liefert die Theorie von Schrödinger eine sehr gute Beschreibung des Wasserstoffatoms, allerdings ist diese im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie nicht Lorentz-invariant. 1928 präsentierte P. Dirac eine Lorentz-invariante Theorie, für die er 1933 den Nobelpreis erhielt. Dabei muss die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad (2.6)$$

sein. Zudem muss die relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad (2.7)$$

erfüllt sein. Der einfachste Ansatz, der diese Anforderungen erfüllt, ist ein Hamiltonoperator \hat{H} mit

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta mc^2, \quad (2.8)$$

wobei $\vec{\alpha}$ und β 4×4 -Matrizen sind, die die Relation $\vec{\alpha}^2 = \mathbb{1}$ und $\beta^2 = \mathbb{1}$ erfüllen. Es ergeben sich die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators \hat{H} mit

$$E = \pm \sqrt{c^2 \vec{p}^2 + m_0^2 c^4}, \quad (2.9)$$

wobei die negativen Energien die Antiteilchen beschreiben.

Fügt man noch ein Kernpotential hinzu, so erhält man sich die Dirac-Gleichung

$$\left(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_e c^2 - \frac{Z\alpha}{|\vec{r}|} \right) \psi = E\psi. \quad (2.10)$$

Entwickelt man die Eigenenergien zu diesem Hamilton-Operator nach Potenzen von $Z\alpha$, so folgt für die Energie zwischen zwei Niveaus

$$E_{nj} = m_e c^2 \left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right]. \quad (2.11)$$

Der Erste Term ist die Ruheenergie des Elektrons, der zweite Term die Bindungsenergie im Kernpotential und der dritte Term Korrekturen, die die relativistische Massenzunahme und die Wechselwirkung zwischen Bahndrehimpuls und Spin des Elektrons berücksichtigen. Das Elektron besitzt aufgrund des Spins ein magnetisches Moment $\vec{\mu}_S$, wodurch auch Wechselwirkungen mit anderen Magnetfeldern bzw. magnetischen Momenten möglich sind. Die Wechselwirkung des durch die Bewegung des Elektrons im Kernpotential verursachten magnetischen Momentes wird als Spin-Bahn-Kopplung (LS-Kopplung) bezeichnet. Dadurch werden die nicht-relativistischen Energieniveaus aufgespalten. Diese Aufspaltung wird als Feinstruktur bezeichnet und ist um einen Faktor $\frac{(Z\alpha)^2}{n}$ kleiner als die Bindungsenergie. Unter Berücksichtigung der Wechselwirkung des Bahndrehimpulses und des Elektronenspins mit dem Kernspin, entsteht eine um einen Faktor 2000 kleinere Aufspaltung als die Feinstruktur, die sogenannte Hyperfeinstruktur.

Durch die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes entstehen weitere quantenfeldtheoretische Effekte, die die Energieniveaus des Systems verschieben:

Selbstenergie: Dabei interagiert das Elektron über Emission und anschließender Absorption eines virtuellen Photons mit sich selbst. Aufgrund von Impulserhaltung wird die Bewegung des Elektrons leicht gestört, wodurch es zu einer Verschiebung der Energieniveaus kommt.

Vakuumpolarisation: Unter Vakuumpolarisation versteht man die kurzzeitige Erzeugung und Vernichtung von Elektron-Positron-Paaren, was zu einer kleinen Abweichung von der Coulomb-Wechselwirkung führt. Dadurch kommt es zu einer Aufhebung der Entartung der $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ Niveaus, was 1947 erstmals von Lamb und Retherford experimentell gezeigt werden konnte.

Diese quantenelektrodynamischen Effekte skalieren mit einem Faktor von $Z\alpha^2/n^3$.

2.1.2 Mehrelektronensysteme

Bei Systemen mit mehreren Elektronen muss nicht nur die Wechselwirkung von jedem einzelnen Elektron mit dem Kern, sondern auch jede Wechselwirkung \hat{W}_{ij} zwischen allen Elektronen berücksichtigt werden. Der Hamiltonoperator für ein Atom mit Kernladung Z und N Elektronen kann als

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i=1}^N \left(\hat{H}_i + \sum_{i<j}^N \hat{W}_{ij} \right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\Delta}_i - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_i|} \right) + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}_{ij}|}\end{aligned}\quad (2.12)$$

geschrieben werden. Die Wellenfunktion, die die Schrödingergleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \quad (2.13)$$

erfüllt, muss nach dem Pauli-Prinzip antisymmetrisch gegen Vertauschung zweier Elektronen sein. Sie setzt sich aus dem Produkt der Wellenfunktionen der einzelnen Teilchen

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \dots \psi_N(\vec{r}_N) \quad (2.14)$$

zusammen. Um diese Voraussetzung zu erfüllen, wird die sogenannte Slater-Determinante

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N(\vec{r}_1) \\ \psi_1(\vec{r}_2) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\vec{r}_N) & \psi_2(\vec{r}_N) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.15)$$

berechnet. Die Schrödinger-Gleichung ist für ein solches System allerdings nicht mehr analytisch lösbar [25, 17] und kann nur noch mit Näherungen und bestimmten Annahmen gelöst werden.

Ein mögliches Verfahren ist dabei die Näherung unabhängiger Teilchen. Dabei befindet sich jedes einzelne Elektron in einem effektiven Potential, welches durch den Kern und die anderen $N - 1$ Elektronen verursacht wird. Diese Näherung ist allerdings sehr grob. Dennoch eignet sich dieses Verfahren um sinnvolle Orbitale als Anfangsbedingungen für selbstkonsistente Theorien zu berechnen.

Hartree-Fock: Ein mögliches selbstkonsistentes Verfahren ist die sogenannte Hartree-Fock-Methode [28]. Dabei handelt es sich um eine Ab-initio-Methode, bei der keine empirischen Parameter benötigt werden, sondern lediglich Naturkonstanten. Auf die Produktwellenfunktion 2.14 der einzelnen Wellenfunktionen wird das sogenannte Rayleigh-Ritz-Prinzip angewandt. Dabei werden die Orbitale variiert, um die Gesamtenergie zu

minimieren. Da das effektive Potential von den einzelnen Elektronen-Wellenfunktionen abhängig ist, sind mehrfache Iterationen notwendig. Ein weiterer möglicher Ansatz ist eine Linearkombination aus Slater-Determinanten

$$\psi = \sum_{k=1}^{N_S} c_k \psi_k. \quad (2.16)$$

Durch Variation der Koeffizienten c_j kann die Lösung ermittelt werden, wobei das Verfahren genauer, aber rechenaufwendiger wird, je mehr Konfigurationen berücksichtigt werden. Diese Methode wird als Configuration-Interaction (CI) bezeichnet. Da die Hartree-Fock-Methode nur Ein-Teilchen-Wellenfunktionen als Lösung hat und CI die Elektronenkorrelationen berücksichtigt, lassen sich beide Verfahren zum Multi-Configuration-Hartree-Fock kombinieren. Verwendet man die Lorentz-invariante Dirac-Gleichung anstelle der Schrödinger-Gleichung, so werden auch relativistische Effekte berücksichtigt. Dieses Verfahren wird auch als Multi-Configuration-Dirac-Fock (MCDF) bezeichnet, womit sich Energieniveaus mit unter 0,1 % Genauigkeit berechnen lassen.

2.2 Hochgeladene Ionen

Konventionell wird ein Ion als hochgeladen bezeichnet, wenn diesem relativ zur Kernladung Z viele der Elektronen fehlen. Allerdings gibt es dafür keine klare Definition [23]. In jedem Fall handelt es sich bei einem solchen Ion um ein gebundenes System aus einem Atomkern mit positiver Ladung und wenigen Elektronen, die diesen umgeben. Die gängige Nomenklatur für ein n -fach positiv geladenes Ion A richtet sich nach der absoluten Anzahl n der fehlenden Elektronen. Dieses wird dann als A^{n+} bezeichnet. Alternativ wird das Ion in der isoelektronischen Sequenz mit einem neutralen Atom mit gleicher Anzahl an Elektronen verglichen. So wird beispielsweise heliumartiges Eisen als Fe^{24+} , oder in spektroskopischer Notation als Fe XV bezeichnet, bei der das neutrale Element mit Fe I und ein n -fach geladenes Ion mit römisch $(n + 1)$ bezeichnet wird.

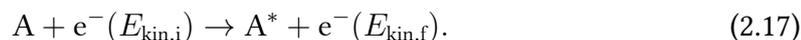
2.2.1 Anregungs- und Abregungsprozesse

Wird einem Ion von Außen genügend Energie zugeführt um mindestens ein Hüllenelektron auf ein höheres Niveau anzuheben, so bezeichnet man diesen Prozess als Anregung. Geht dieser Zustand in einen energetisch günstigeren Zustand über, so bezeichnet man dies als Abregung, die entweder strahlungslos oder unter Emission von einem oder

mehreren Photonen erfolgen kann.

Elektronenstoßanregung

Erfolgt diese Anregung mithilfe von Stößen mit Elektronen, so bezeichnet man dies als Elektronenstoßanregung:



Dabei wird ein Ion A durch ein Elektron mit einer kinetischen Energie $E_{\text{kin},i}$ angeregt, wobei das Elektron nach dem Stoß die verringerte kinetische Energie $E_{\text{kin},f}$ besitzt. Der Wirkungsquerschnitt kann näherungsweise durch die sogenannte Bethe-Approximation [44] beschrieben werden:

$$\sigma_{\text{EA}} = \frac{8\pi^2}{\sqrt{3}} \frac{I_{\text{H}} a_0^2}{E_e (E_k - E_i)} \cdot g f_{ij}, \quad (2.18)$$

wobei I_{H} die Ionisationsenergie des Wasserstoffatoms (16,6 eV), a_0 dem klassischen Bohrradius, E_e der Energie des freien Elektrons und E_k bzw. E_i den Energien im angeregten bzw. im Ausgangszustand entspricht. Weiter ist der Wirkungsquerschnitt proportional zur Oszillatorstärke f_{ij} und zum Gauntfaktor g , der eine Korrektur zum Absorptionsquerschnitt quantenmechanischer Natur darstellt.

Photoanregung

Dieser Anregungsprozess kann auch durch Wechselwirkung mit Photonen erfolgen:



Im Gegensatz zur Elektronenstoßanregung ist dieser Prozess resonant, da er nur erfolgen kann, wenn das Photon genau die Energie besitzt, die dem Abstand zweier Energieniveaus entspricht. Zerfällt dieser Zustand zu einem energetisch günstigerem Zustand, so erfolgt dies durch Emission eines oder mehrerer Photonen:



Ein weiterer möglicher Abregungsprozess ist die Energieumverteilung innerhalb des Ions. Die beim Übergang eines Elektrons in ein tieferes Energieniveau freiwerdende Energie kann dabei strahlungslos auf ein schwächer gebundenes Elektron übertragen werden.

Ist diese Energie größer als die Bindungsenergie des Elektrons, so kann dieses ionisiert werden:



Dieser Prozess wird als Auger-Meitner-Prozess [8] oder als Autoionisation bezeichnet und ist in Abbildung 2.1 illustriert.

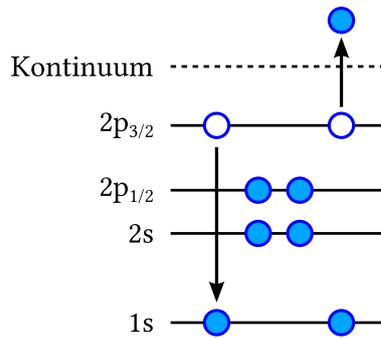
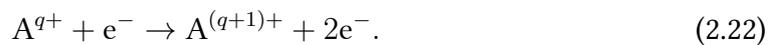


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Auger-Meitner-Prozesses am Beispiel eines Stickstoffartigen Ions vor der Autoionisation: Die Energie des Elektrons im $2p_{3/2}$ -Orbital wird beim Übergang in das $1s$ -Orbital strahlungslos auf ein Elektron im $2p_{3/2}$ -Orbital übertragen, wobei dieses ins Kontinuum befördert wird.

2.2.2 Ionisationsprozesse

Elektronenstoßionisation

Ist die kinetische Energie des freien Elektrons größer als das Ionisationspotential eines gebundenen Elektrons, so kann dieses direkt durch den Stoß oder durch Autoionisation ins Kontinuum befördert werden:



Der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozess kann approximativ durch die empirische Lotz-Formel [37] beschrieben werden:

$$\sigma = \sum_{i=1}^N a_i q_i \frac{\ln(E_e/E_B)}{E_e E_B} \left\{ 1 - b_i \exp \left[-c_i \left(\frac{E_e}{E_B} - 1 \right) \right] \right\}. \quad (2.23)$$

Dabei ist E_e die kinetische Energie des freien Elektrons, E_B die Bindungsenergie des gebundenen Elektrons und a_i , q_i und c_i sind elementabhängige Parameter darstellt,

die zunächst experimentell ermittelt werden müssen. Es wird über alle Unterschalen summiert, wobei q_i die Anzahl an Elektronen in der Schale i angibt.

Photoionisation

Die Ionisation eines gebundenen Elektrons kann auch durch die Wechselwirkung mit einem Photon erfolgen, sofern dessen Energie größer ist als die Bindungsenergie des Elektrons. Dieser Prozess wird als Photoionisation bezeichnet:



Bei hochgeladenen Ionen benötigt man hohe Energien im UV- bzw. Röntgenbereich um ein Elektron durch Wechselwirkung mit den Photonen ins Kontinuum versetzen zu können. Solche Messungen wurden bereits an ultrabillanten Strahlungsquellen wie z.B. an Synchrotronen erfolgreich durchgeführt [50].

2.2.3 Rekombinationsprozesse

Im Folgenden werden nichtresonante und resonante Prozesse der Rekombination von Ionen mit Elektronen beschrieben. Hierbei wird von einem Ion A im Ladungszustand $q+$ ein freies Elektron eingefangen, wobei das Ion in einen niedrigeren Ladungszustand $(q-1)+$ übergeht.

Radiative Rekombination

Bei der radiativen Rekombination handelt es sich um den zeitinversen Prozess der Photoionisation. Dabei wird ein freies Elektron eingefangen und ein Photon mit der Energie $h\nu$, welche der Summe der kinetischen Energie des freien Elektrons und der Bindungsenergie des Elektrons nach dem Einfang entspricht:



Der Wirkungsquerschnitt kann näherungsweise mit

$$\sigma_{RR} = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{\alpha^5}{n^3} \frac{Z_{\text{eff}}^4}{E_e E_\gamma} \quad (2.26)$$

nach Kim und Pratt [33] bestimmt werden, wobei α die Feinstrukturkonstante, n die Hauptquantenzahl, Z_{eff} die effektive Kernladung des jeweiligen Ions, E_e die kinetische

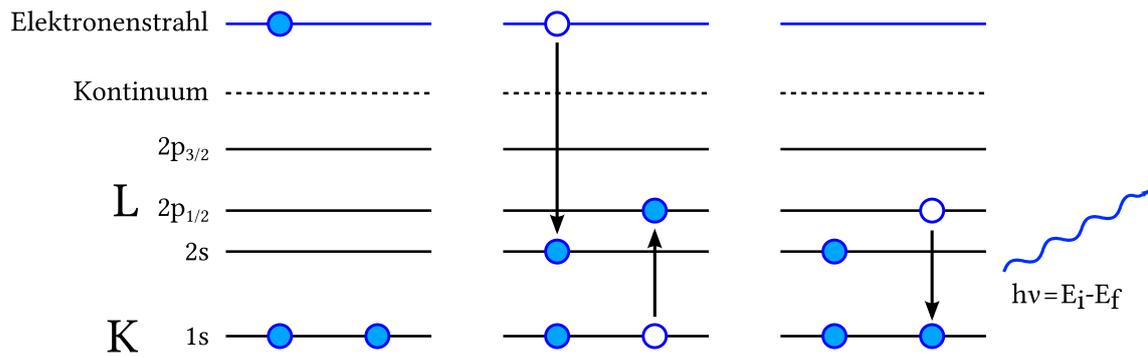
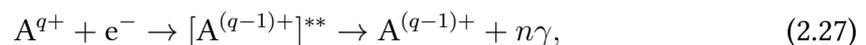


Abbildung 2.2: Prozess der K-LL-DR. Links: Heliumartiges Ion im Grundzustand. Mitte: Ein Elektron aus der K-Schale wird durch Einfangen eines freien Elektrons in die L-Schale angeregt. Rechts: Instabiler Zustand, nach dem Zerfall in den Grundzustand wird ein Photon mit der charakteristischen Energie $h\nu$ emittiert.

Energie der freien Elektronen und E_γ die Summe aus kinetischer Energie der Elektronen und der Bindungsenergie des Niveaus, auf welches das Elektron eingefangen wird, darstellen.

Dielektronische Rekombination

Spezielle Fälle des Elektroneneinfangs stellen die resonanten Rekombinationsprozesse dar. Dabei wird die durch den Elektroneneinfang freiwerdende Energie strahlungslos auf ein gebundenes Elektron übertragen, wodurch dieses angeregt wird. Zu diesen Prozessen gehört unter anderem die dielektronische Rekombination (DR), welche Hauptgegenstand dieser Arbeit ist. Bei der DR wird ein Elektron auf einer inneren Schale resonant durch Einfangen eines freien Elektrons in eine höhere Schale angeregt. Dieser doppelt angeregte Zustand ist instabil und zerfällt unter Emission eines Photons mit einer für diesen Übergang charakteristischen Energie in den Grundzustand. In der gängigen Notation wird zuerst die Schale des Anfangszustands, dann die Schale des Endzustandes des angeregten Elektrons und schließlich die Schale, in die das freie Elektron eingefangen wird, genannt. Wird beispielsweise ein gebundenes Elektron durch Einfangen eines freien Elektrons in die L-Schale aus der K in die L-Schale angeregt, so wird dieser Prozess als K-LL-DR bezeichnet (vgl. Abbildung 2.2). Dieser Prozess verläuft nach dem Schema



wobei A^{q+} das q -fach geladene Ion im Anfangszustand und $A^{(q-1)+}$ das selbe $(q-1)$ -fach geladene Ion nach Elektroneneinfang, wobei $**$ einen doppelt angeregten Zustand anzeigt.

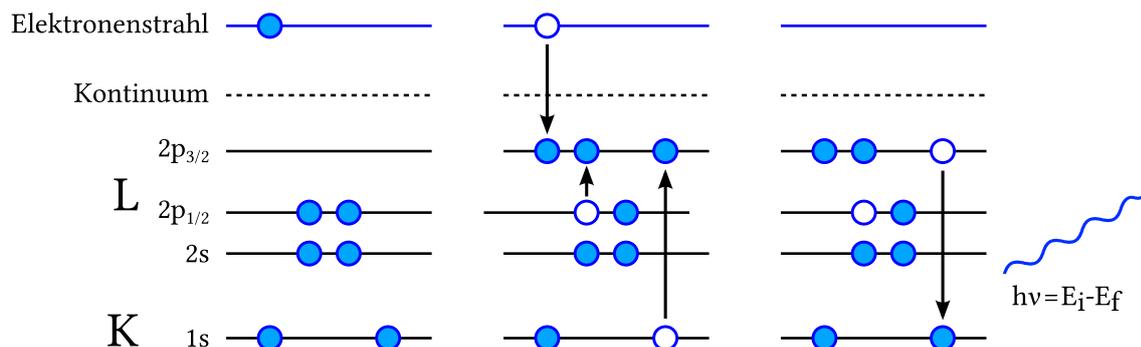


Abbildung 2.3: Beispielprozess der KL-LLL-TR. Links: Borartiges Ion im Grundzustand. Mitte: Ein Elektron aus der K-Schale und aus der L-Schale wird durch Einfangen eines freien Elektrons in die L-Schale angeregt. Rechts: Instabiler Zustand, nach dem Zerfall in den Grundzustand wird ein Photon mit der charakteristischen Energie $h\nu$ emittiert.

Rekombinationsprozesse höherer Ordnung

Neben der DR existieren noch weitere resonante Rekombinationsprozesse höherer Ordnung [10, 2]. In in dieser Arbeit untersuchten Element Eisen spielen diese jedoch nur eine untergeordnete Rolle und seien hier nur der Vollständigkeit halber erwähnt. Beispielsweise gibt es die trielektronische Rekombination (TR). Dabei werden zwei Elektronen resonant durch Einfangen eines freien Elektrons angeregt (vgl. Abbildung 2.3). Bei der quadruelektronischen Rekombination werden drei Elektronen angeregt usw.

2.3 Die Elektronenstrahl-Ionenfalle

In einer EBIT können hochgeladene Ionen effizient erzeugt und gefangen werden. Dabei werden neutrale Atome durch Stöße mit Elektronen eines Elektronenstrahls sequenziell ionisiert und gefangen. Das Prinzip wurde erstmals 1968 von E.D. Donets [20] in Dubna, Russland, als Electron Beam Ion Source (EBIS) entwickelt, wobei das Primärziel nicht die Speicherung, sondern die Entwicklung eines Aufbaus als Ionenquelle darstellte. Die Inbetriebnahme der ersten EBIT zur Erzeugung und Speicherung hochgeladener Ionen gelang erstmals einer Gruppe am Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) 1986 unter der Leitung von M.A. Levine [4]. Mit Hilfe von EBITs ist es möglich die elektronische Struktur hochgeladener Ionen spektroskopisch zu untersuchen, wozu verschiedene physikalische Mechanismen wie z.B. Elektronenstoßanregung, Rekombinationsprozesse und Photoionisation benutzt werden.

Das Funktionsprinzip einer EBIT ist in Abbildung 2.4 schematisch dargestellt. Es wer-

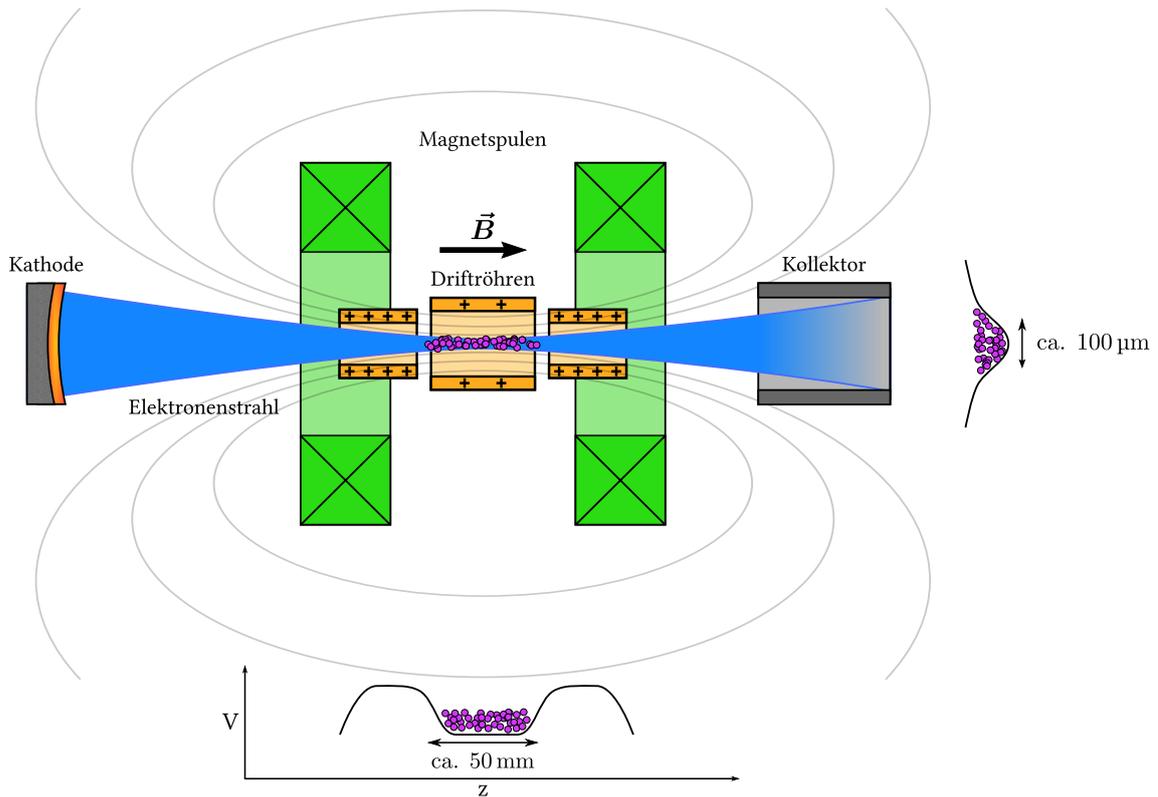


Abbildung 2.4: Schematischer Aufbau einer EBIT: Ein von der Kathode emittierter Elektronenstrahl (links) wird durch ein Magnetfeld stark komprimiert und nach Durchlaufen des Fallenzentrums in der mittleren Driftröhre Kollektor (rechts) verbreitert und absorbiert. Der Skizze liegt eine Rotationssymmetrie um die z-Achse zugrunde.

den zunächst durch Glühemission an der Kathode Elektronen freigesetzt, die durch die Potentialdifferenz zwischen dieser und der mittleren Ringelektrode, der sogenannten Driftröhre (DT), zum Fallenzentrum hin beschleunigt werden. Die in das Fallenzentrum injizierten Atome werden sequentiell durch Stöße mit den Elektronen ionisiert und durch das negative Raumladungspotential des Elektronenstrahls in radialer Richtung gefangen. Ein durch ein Helmholtzspulenpaar erzeugtes Magnetfeld von mehreren Tesla im Fallenzentrum führt zu einer starken Kompression des Elektronenstrahls auf wenige 100 μm , wodurch eine hohe Elektronendichte und somit eine höhere Stoßrate mit den Ionen entsteht. Für die Speicherung in axialer Richtung wird die mittlere Driftröhre auf ein weniger positives Potential als die umgebenden Driftröhren gelegt, wodurch ein Kastenpotential entsteht, in dem die Ionen gefangen sind. Nach dem Passieren des Fallenzentrums wird der Elektronenstrahl durch ein elektrisches Feld abgebremst, im Kollektor durch ein Magnetfeld verbreitert und aufgefangen.

2.4 Eigenschaften des Elektronenstrahls

2.4.1 Strahldurchmesser

Die Theorie zur Beschreibung des Elektronenstrahls wurde bereits 1958 als „optische Theorie“ von G. Hermann entwickelt [29]. Diese Theorie berücksichtigt ein fokussierendes Magnetfeld B , einen Kathodenradius r_K und die Kathodentemperatur T_K . Des Weiteren werden Effekte wie Magnetfelder am Ort der Kathode, die zu einer schwächeren Kompression des Elektronenstrahls führen, berücksichtigt. Der Radius, in dem 80 % der Elektronen beinhaltet sind, wird als sogenannter Herrmann-Radius bezeichnet [5, 18]:

$$r_H = \sqrt{\frac{m_e I_e}{\pi \epsilon_0 e v B^2} + \sqrt{\left(\frac{m_e I_e}{\pi \epsilon_0 e v B^2}\right)^2 + \frac{8kT_K m_e}{e^2 B^2} r_K^2 + \frac{B_K^2}{B^2} r_K^4}}, \quad (2.28)$$

mit Elektronenstrom I_e und dem Restmagnetfeld an der Kathode B_K .

2.4.2 Raumladungseffekte

Durch die negative Raumladung des Elektronenstrahls werden die positiv geladenen Ionen angezogen und somit in radialer Richtung eingeschlossen. Unter der Betrachtung des Elektronenstrahls als einen in axialer Richtung unendlich ausgedehnten Zylinders mit Radius r_H , lässt sich eine Ladungsdichte von

$$\rho = \frac{I}{\pi r_H v_e} \quad (2.29)$$

bestimmen. Dabei ist v_e die Geschwindigkeit der Elektronen und I der Elektronenstrom. Durch Lösen der Poisson-Gleichung lässt sich das charakteristische Potential herleiten:

$$\Phi_0 = \frac{I}{4\pi \epsilon_0} \sqrt{\frac{m_e}{2E_e}}, \quad (2.30)$$

wobei E_e die kinetische Energie der Elektronen darstellt.

2.5 Ladungszustandsverteilungen

2.5.1 Thermisches Gleichgewicht

Vom thermischen Gleichgewicht eines physikalischen Systems spricht man, wenn sich dieses durch wenige thermodynamische Zustandsgrößen beschreiben lässt und diese zeitlich

konstant bleiben. Dabei stehen die Prozesse und ihre inversen Prozesse im Gleichgewicht. Die Raten von den Prozessen und ihren Zeitinversen sind gleich groß. Ein Plasma im thermischen Gleichgewicht kann spektroskopisch also nicht untersucht werden, da keine Photonen aus dem System entweichen würden. Tatsächlich befinden sich Plasmen nur selten in einem thermischen Gleichgewicht. Dennoch lässt sich aus der Annahme eines Gleichgewichtes durch gewisse Korrekturen ein Modell eines realen Plasmas ableiten.

Im thermischen Gleichgewicht kann die Energieverteilung der Elektronen durch eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung

$$p(v)dv = 4\pi \left(\frac{m_e}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp \left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T} \right) dv \quad (2.31)$$

beschrieben werden. Diese kann auch als Energieverteilung geschrieben werden:

$$p(E)dE = \frac{2}{k_B T} \left(\frac{E}{\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{E}{k_B T} \right) dE. \quad (2.32)$$

Das Verhältnis der Besetzungsdichten $n_i(q)$ bzw. $n_k(q)$ eines angeregten Ions des Ladungszustandes q im Zustand i bzw. k und den entsprechenden Energien $E_i(q)$ bzw. $E_k(q)$ kann durch die Boltzmann-Verteilung

$$\frac{n_i(q)}{n_k(q)} = \frac{g_i}{g_k} \exp \left(\frac{E_k(q) - E_i(q)}{k_B T} \right) \quad (2.33)$$

beschrieben werden, wobei $g_i = 2J_i + 1$ bzw. $g_k = 2J_k + 1$ die statistischen Gewichte des jeweiligen Niveaus mit dem Gesamtdrehimpuls J_i bzw. J_k darstellen. Verwendet man die Definition der Zustandssumme

$$Z(q, T) = \sum_k g_k \exp \left(-\frac{E_k}{k_B T} \right), \quad (2.34)$$

und summiert über alle Niveaus k , so lässt sich Gleichung 2.33 umschreiben zu:

$$\frac{n_i(q)}{n(q)} = \frac{g_i(q)}{Z(q, T)} \exp \left(-\frac{E_i(q)}{k_B T} \right), \quad (2.35)$$

wobei $n(q)$ die Gesamtzahl der Teilchen eines Ionisationszustandes darstellt. Es wird über alle Zustände bis zur Ionisationsgrenze χ summiert. Allerdings können die Energieniveaus der Zustände nahe der Ionisationsschwelle durch Stöße ins Kontinuum verschoben werden, sodass nur Zustände bis

$$E_I = \chi - \Delta\chi, \quad (2.36)$$

berücksichtigt werden, wobei $\Delta\chi$ die Energiedifferenz zwischen dem letzten berücksichtigten Zustand und dem Kontinuum ist.

Ziel ist es eine Gleichung zu finden, die das Verhältnis der Besetzungszahlen zweier aufeinanderfolgender Ionisationsgrade angibt. Das statistische Gewicht g für den Ladungszustand $n + 1$ beträgt¹

$$g = \frac{2g_0(q)(2\pi m_e k_B T)^{3/2}}{n_e h^3} \quad (2.37)$$

mit dem statistischen Gewicht $g_0(q)$ des Ions des Ladungszustandes q im Grundzustand und der Elektronendichte n_e . Setzt man g nun in Gleichung 2.35 ein, so erhält man die sogenannte Saha-Gleichung [48]

$$n_e \frac{n(q+1)}{n(q)} = \frac{Z(q+1, T)}{Z(q, T)} \frac{2(2\pi m_e k_B T)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{\chi_q - \Delta\chi_q}{k_B T}\right). \quad (2.38)$$

Dabei wurde $E_i(q)$ durch $E_i(q) = \chi_q - \Delta\chi_q$ aus Gleichung 2.36 ersetzt.

2.5.2 Modell des lokalen thermischen Gleichgewichtes

In astrophysikalischen Plasmen ist die optische Dichte relativ gering, sodass das Strahlungsfeld deutlich schwächer ist, als im kompletten thermischen Gleichgewicht. Dadurch finden mehr Emissions- als Absorptionsprozesse statt, wodurch ein Teil der Strahlung aus dem System austreten kann. Das thermodynamische Gleichgewicht ist nicht mehr gegeben, weshalb die Planck'sche Strahlungsformel ihre Gültigkeit verliert. Um dennoch ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht herzustellen, wird im Modell des lokalen thermischen Gleichgewichtes (LTE) angenommen, dass elektronische Anregungen ausschließlich durch Elektronenstöße hervorgerufen werden. Dieser Prozess muss dominant gegen Photoemission und Rekombination sein [40]. In diesem Modell sind Photoemission und Photoabsorption also nicht mehr im Gleichgewicht, ebenso wie Photoionisation und radiative Rekombination aufgrund der verringerten Strahlungsdichte. Daraus folgt, dass die Elektronendichte hinreichend groß sein muss um ein lokales thermisches Gleichgewicht zu gewährleisten. Zudem wird ein zumindest in einem kleinen Volumen dV homogenes Plasma angenommen, sodass dennoch genügend Wechselwirkungen mit

¹Eine ausführliche Herleitung für g ist in [45] zu finden.

Elektronen stattfinden können um das Gleichgewicht aufrecht zu halten. Es kann eine untere Grenze für diese benötigte Elektronendichte abgeschätzt werden [40]:

$$n_e \geq 1,6 \cdot 10^{12} T_e^{3/2} \chi(i, j)^3 \text{ cm}^{-3} \quad (2.39)$$

mit der Elektronentemperatur in Einheiten von K, die über $E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} k_B T_e$ definiert ist und dem Anregungspotential $\chi(i, j) = E_j - E_i$ vom Zustand i in den Zustand j in Einheiten von eV. Bei Messungen der dielektronischen Rekombination in einer EBIT erreicht man Elektronentemperaturen von mehreren Millionen Kelvin und Energieunterschiede zwischen zwei Niveaus von $\chi(i, j) \approx 6 \text{ keV}$, was zu einer Mindestelektronendichte in der Größenordnung von

$$n_e \approx 10^{27} \text{ cm}^{-3}$$

führt. Bei einem Durchmesser des Elektronenstrahls von $d \approx 200 \mu\text{m}$ und einem Strahlstrom von $I \approx 100 \text{ mA}$ ergibt sich eine Elektronendichte in einer EBIT von $n_{\text{EBIT}} \approx 6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, was einige Größenordnungen unter der benötigten Mindestelektronendichte liegt. Damit kann das Modell nicht zur Beschreibung der Plasmen in EBITs verwendet werden. Es befindet sich also nicht in einem lokalen thermischen Gleichgewicht.

2.5.3 Korona-Modell

Um Nicht-Gleichgewichtssysteme dennoch zu beschreiben, wird das sogenannte Korona-Modell verwendet, welches ursprünglich bestimmte Eigenschaften des Spektrums der Sonnenkorona erklären sollte.

Es wird zunächst angenommen, dass die Elektronen eine Geschwindigkeitsverteilung nach Maxwell besitzen. Ion-Ion-Stöße werden dabei vernachlässigt, da ihre Geschwindigkeiten viel kleiner als die der Elektronen sind. Im Vergleich zum Grundzustand g befinden sich nur wenige Ionen der Ladung q in angeregten Zuständen, sodass eine Balance zwischen Ionisation und Rekombination als

$$n_e n(q, g) \alpha^{\text{EI}}(T_e, q, g) = n_e n(q+1, g) \alpha^{\text{R}}(T_e, q+1, g) \quad (2.40)$$

geschrieben werden kann [40] und das Verhältnis der Besetzungszahlen zweier aufeinanderfolgenden Ionisationszuständen

$$\frac{n(q, g)}{n(q+1, g)} = \frac{\alpha^{\text{R}}(T_e, q+1, g)}{\alpha^{\text{EI}}(T_e, q, g)} \quad (2.41)$$

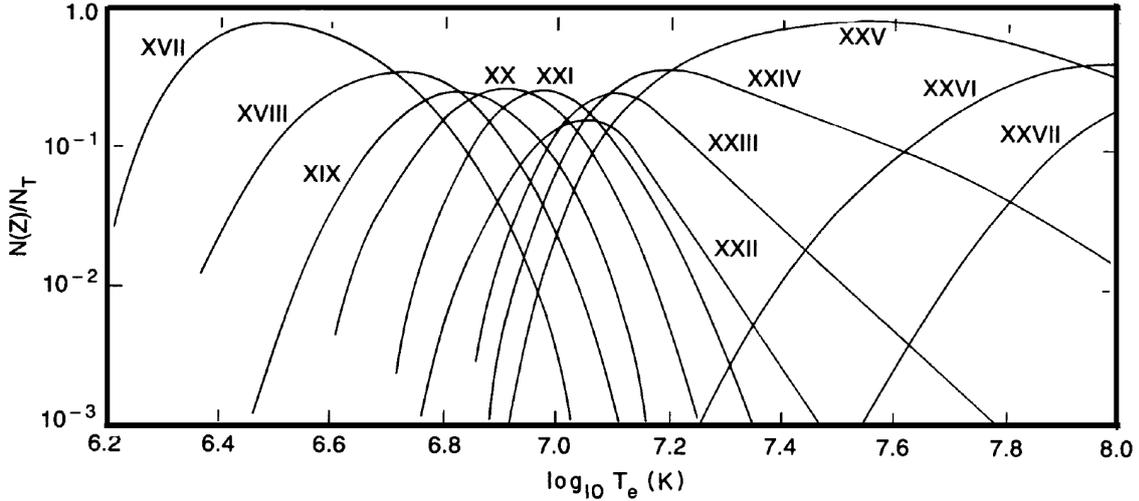


Abbildung 2.5: Gleichgewicht der Ladungszustandsverteilungen zwischen Ionisation und Rekombination nach dem Korona-Modell. Es ist die relative Häufigkeit $N(Z)$ der einzelnen Ladungszustände von Eisen zur Gesamtanzahl an Eisenionen aller Ladungszustände N_T gegen die Elektronentemperatur aufgetragen (aus [30] entnommen).

beträgt. Hierbei ist T_e wieder die Elektronentemperatur, n_e die Elektronendichte, $\alpha^{\text{EII}}(T_e, q, g)$ der Koeffizient der Elektronenstoßionisation und $\alpha^{\text{R}}(T_e, q+1, g)$ den Koeffizienten der Rekombination. Der Koeffizient der Rekombination α^{R} kann auch als Summe von radiativer und dielektronischer Rekombination $\alpha^{\text{R}} = \alpha^{\text{DR}} + \alpha^{\text{RR}}$.

Die Besetzungsdichten der angeregten Zustände p können durch ein Gleichgewicht zwischen Stoßanregung aus dem Grundzustand in den angeregten Zustand und spontaner Emission berechnet werden:

$$n_e n(q, g) \alpha^{\text{EIE}}(T_e, g, p) = n(q, p) \sum_{i < k} A_{i,k}, \quad (2.42)$$

wobei $\alpha^{\text{EIE}}(T_e, g, p)$ den Koeffizienten der Elektronenstoßanregung und $A_{i,k}$ den Einstein-Koeffizienten für die spontane Emission darstellt. Ein Beispiel für eine Berechnung der Ladungszustandsverteilungen in hochgeladenem Eisen ist in Abbildung 2.5 illustriert.

3 Experimenteller Aufbau

3.1 FLASH-EBIT

Die in dieser Arbeit beschriebenen Messungen wurden an der von S. W. Epp im Jahr 2006 konstruierten FLASH-EBIT [22] durchgeführt, die in Abbildung 3.1 zu sehen ist. Ursprünglich wurde diese als TESLA-EBIT bezeichnet, benannt nach dem TeV-Energy Superconducting Linear Accelerator (TESLA) in Hamburg. Nach der erfolgreichen Inbetriebnahme und dem Ausbau der TESLA-Testanlage zum Freie-Elektronen-Laser FLASH (Freier Elektronen Laser in Hamburg), wurde sie in FLASH-EBIT umbenannt. Die kryogene FLASH-EBIT bietet neben relativ hohen Emissionsströmen und Elektronenenergien gegenüber konventionellen EBITs den Vorteil, dass sie transportabel ist und somit an Strahlungsquellen wie z.B. Synchrotrone und Freie-Elektronen-Laser für Messungen eingesetzt werden kann. Eine Schnittansicht der FLASH-EBIT ist in Abb. 3.2 dargestellt. Die farblich hervorgehobenen Komponenten werden im Folgenden detaillierter beschrieben.

3.1.1 Die Elektronenkanone

Die zentrale Funktion in einer EBIT erfüllt der Elektronenstrahl, der seinen Ursprung in der Kathode der Elektronenkanone findet. In Abb. 3.3 ist eine axiale Schnittansicht der Elektronenkanone dargestellt. Bei der in der FLASH-EBIT verwendeten Elektronenkanone handelt es sich um eine Elektronenkanone in Pierce-Geometrie[43]. Diese besteht aus einigen elektrostatischen Elektroden und magnetostatischen Komponenten, die für einen geradlinigen Elektronenstrahl sorgen. Zu den Elektroden gehört die Kathode inklusive Kathodenhalter, die hohlzylinderförmige Anode und die Fokus-Elektrode. Die Kathode besteht aus einer mit Bariumoxid durchsetzten, porösen Wolframmatrix mit ca. 3 mm Durchmesser, die auf ca. 1300 K erhitzt wird und durch Glühemission Elektronen freisetzt. Die Kathode inklusive Halter sitzt auf einem bis zu -2 kV negativem Potential gegenüber dem Erdpotential. Durch die Spannungsdifferenz zwischen der Kathode und der Anode werden die Elektronen zu dieser hin beschleunigt. Zwischen Kathode und Anode befindet sich eine weitere Elektrode, die sogenannte Fokus-Elektrode, die die Funktion eines

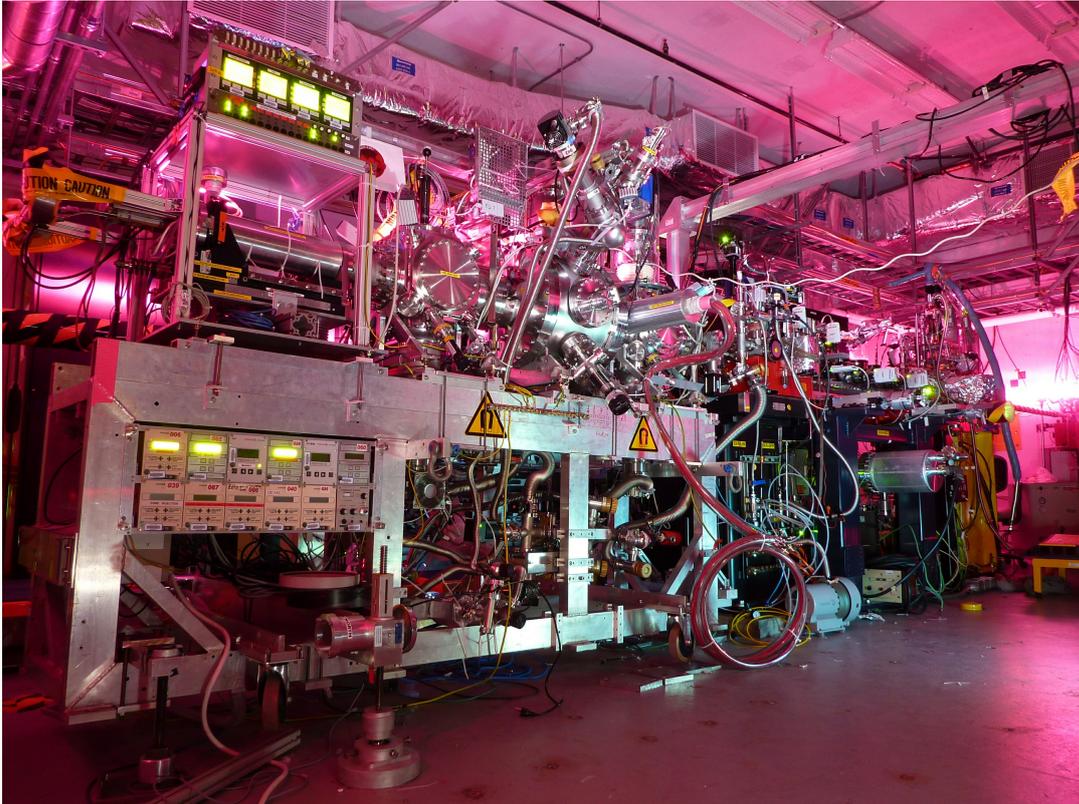


Abbildung 3.1: Fotografie der FLASH-EBIT bei einer Strahlzeit bei LCLS (Linac Coherent Light Source) in Stanford 2011. Foto: J. R. Crespo López-Urrutia.

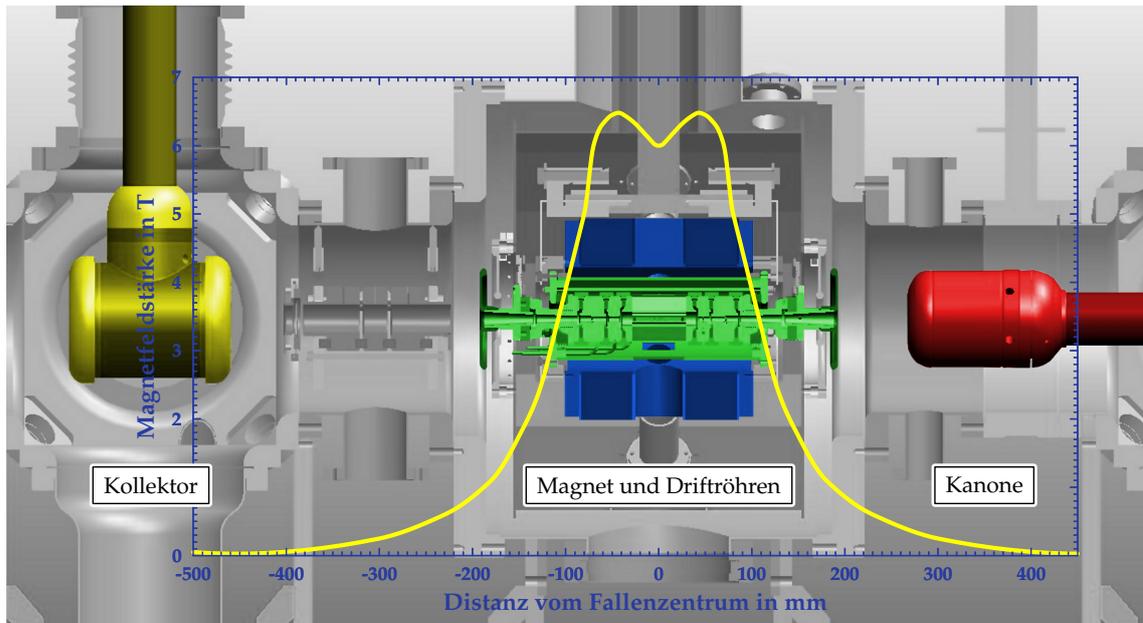


Abbildung 3.2: Axiale Schnittansicht der FLASH-EBIT. In Gelb ist der Kollektor, in Grün die Driftröhren, in Blau die Magnetkammer und in Rot die Elektronenkanone hervorgehoben. Des Weiteren ist die Magnetfeldstärke gegen den axialen Abstand zur Fallmitte aufgetragen. Entnommen aus [13].

Wehnelt-Zylinders erfüllt um den Elektronenstrahl zu steuern.

Um einen Transport des Elektronenstrahls von der Kathode zum Kollektor zu bewerkstelligen und zusätzliche um eine hohe Elektronendichte durch Kompression im Fallenzentrum zu erreichen, wird ein Magnetfeld von mehreren Tesla Stärke benötigt. Dieses fällt zwar mit dem axialen Abstand zur Falle ab, jedoch ist es nicht verschwindend am Ort der Kathode. Zur effektiven Kompression des Elektronenstrahls ist es notwendig am Emissionsort der Elektronen das Restmagnetfeld des supraleitenden Magneten zu minimieren. Dazu dienen die magnetostatischen Komponenten Bucking-Spule, Trim-Spule und Eisenjoch. Da durch diese Spulen Ströme von bis zu 30 A fließen, ist es notwendig diesen Hitzeeintrag mittels einer Wasserkühlung abzuführen und die Spulen somit vor einem Überhitzen zu schützen.

3.1.2 Der Kollektor

Der Kollektor dient zum Einfang des Elektronenstrahls. Dieser besteht, wie in Abb. 3.4 dargestellt, aus mehreren Elektroden, dem Front- und Back-Shield, dem Suppressor und dem Extraktor zur optimalen Führung des Elektronenstrahls und einer Magnetspule, die ein Feld erzeugt, das das Restmagnetfeld des supraleitenden Magneten minimiert und

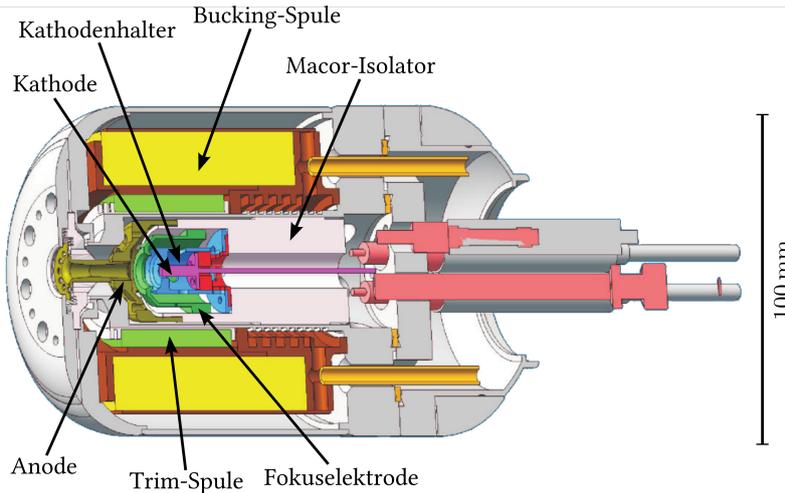


Abbildung 3.3: Axiale Schnittansicht der Elektronenkanone in Pierce-Geometrie. Zu sehen sind die elektro- und magnetostatischen Elemente, die für einen geradlinigen Elektronenstrahl sorgen [22].

den Elektronenstrahl auffächert. Der Kollektor liegt auf Erdpotential relativ zur Kathode, sodass die kinetische Energie der Elektronen maximal $E_{\text{kin}} = eU_{\text{Cath}} = -2 \text{ kV}$ betragen kann, wobei U_{Cath} die an der Kathode angelegte Spannung darstellt. Der Extraktor liegt auf einem negativeren Potential gegenüber der Kathode, wodurch die Elektronen abgebremst und auf die Innenseite des Kollektors geleitet werden können. Der Kollektor ist rohrförmig aufgebaut, was zum einen die Extraktion von Ionen und zum anderen die Einkopplung einer Strahlungsquelle wie z.B. Laser- oder Synchrotronstrahlung für weitere spektroskopische Messungen ermöglicht.

3.1.3 Die Driftröhren

Für einen axialen Einschluss der Ionen besitzt die FLASH-EBIT neun rotationssymmetrische Ringelektroden, die sogenannten Driftröhren (Abb. 3.5). Diese liegen alle gegenüber der Erde auf dem gleichen Potential, das mit Hilfe eines Hochspannungsnetztes der Firma TREK (Modell Trek 30/20) auf bis zu 30 kV betrieben werden kann. Jede einzelne Driftröhre kann auf ein separates Potential bis zu 5 kV gegenüber dem gemeinsamen Potential gelegt werden, was die Modellierung einer für die Bedingungen im Fallenzentrum angepasster Potentialform ermöglicht. Die mittlere Driftröhre besitzt acht Schlitze in axialer Richtung für einen radialen, äußeren Sichtzugang zur Fallenmitte, was spektroskopische Messungen ermöglicht.

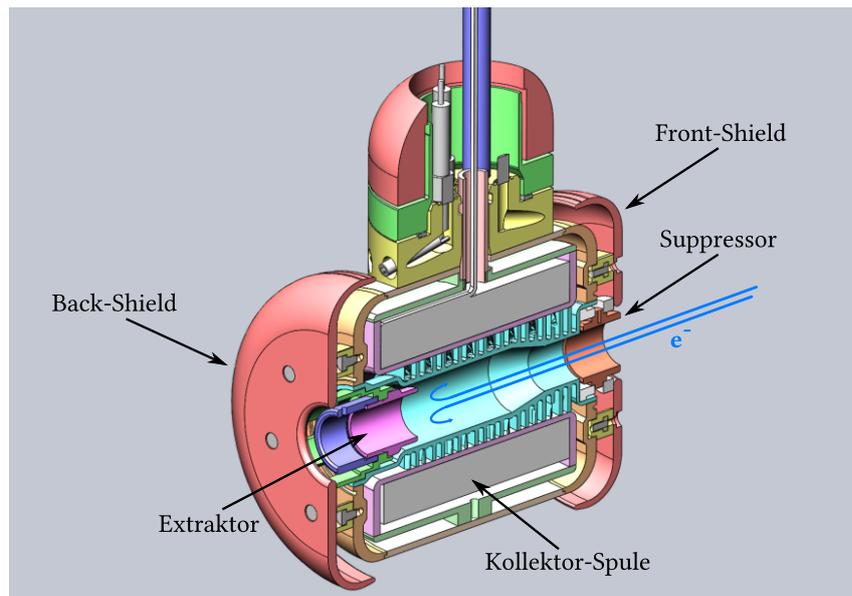


Abbildung 3.4: Axiale Schnittansicht des Kollektors. Zu sehen sind die einzelnen Elektroden und die Kollektorspule. Der Elektronenstrahl wird durch den Extraktor abgebremst und durch Stromdurchführungen abgeleitet [11].

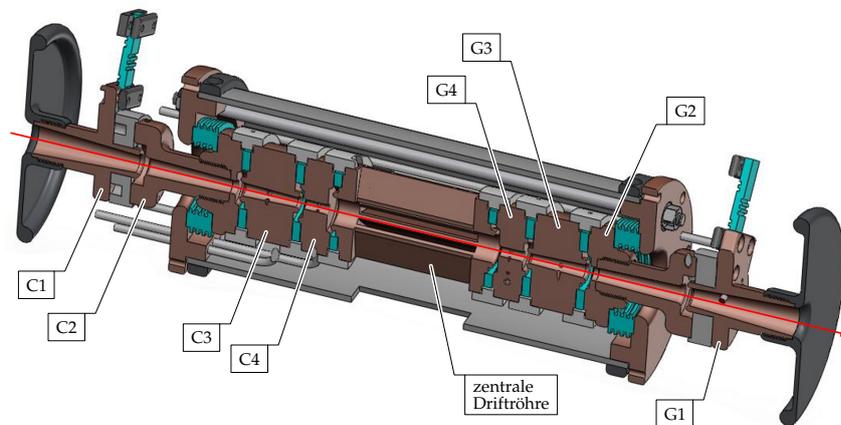


Abbildung 3.5: Axiale Schnittansicht der neun rotationssymmetrischen Elektroden der FLASH-EBIT, die sogenannten Driftröhren. Es sind auf der Kollektorseite vier Elektroden mit C1 bis C4 und auf der Kanonenseite ebenfalls vier Elektroden mit G1 bis G4 dargestellt. Der Elektronenstrahl verläuft in dieser Abbildung von rechts nach links. Entnommen aus [13].

3.1.4 Die Magnetkammer

Um eine Kompression des Elektronenstrahls und die damit einhergehenden hohe Elektrodendichte zu erreichen, benötigt man ein starkes Magnetfeld. Der Magnet an der FLASH-EBIT besteht aus einem supraleitenden Helmholtz-Spulen-Paar der Firma Cryogenics und bewirkt im Fallenzentrum ein lokal homogenes Magnetfeld mit einer Feldstärke von ca. 6 T, welches durch einen Strom von ca. 114 A in den Spulen erreicht wird.

Der Magnet besteht aus Nb₃Sn, welches eine Sprungtemperatur von 17 K hat [22]. Um das Unterschreiten der Sprungtemperatur und somit den supraleitenden Betrieb zu gewährleisten, wird der Magnet mit Hilfe eines auf Kompressionstechnologie basierenden Kältekopfes gekühlt, durch den in einem geschlossenen Kreislauf flüssiges Helium gepumpt wird. Der Vorteil gegenüber anderen EBITs, die ein Bad aus flüssigem Helium verwenden in dem die supraleitenden Spulen versenkt sind, ist, dass ein nahezu wartungsfreier Betrieb des Magneten möglich wird. Der Kältekopf ist thermisch an zwei Kältestufen, der 30-K- bzw. der 4-K-Stufe, angekoppelt. Zusätzlich werden die Driftröhren ebenfalls an das kryogenische System angekoppelt um eine optimale Produktion und Speicherung hochgeladener Ionen zu ermöglichen. Um eine Abschirmung gegen Wärmestrahlung von Außen zu gewährleisten, sind die Driftröhren und die 4-K-Stufe von einem an die 30-K-Stufe gekoppelten Hitzeschild umgeben. Durch die kryogenischen Temperaturen wird der Wirkungsquerschnitt von Stößen der Ionen mit den Restgasatomen minimiert, da Stickstoff und Sauerstoff bei diesen Temperaturen fest werden und der von den Elementen Helium und Wasserstoff dominierende Dampfdruck deutlich abnimmt [22].

Für spektroskopische Anwendungen sind insgesamt sieben radial liegende Bohrungen in den Magnetformer eingebracht, die einen Sichtzugang senkrecht zum Elektronenstrahl ermöglichen.

3.1.5 Das Injektionssystem

Für die Erzeugung von hochgeladenen Ionen muss zunächst das zu spektroskopierende Element bereitgestellt werden. Dies erfolgt durch das Injektionssystem, welches an der FLASH-EBIT üblicherweise am 45°-Fallenzugang montiert ist. Dieses System besteht aus einem Nadelventil, welches das Gas fein dosieren kann und aus zwei differentiell gepumpten Druckstufen, die durch eine Blende getrennt sind. Zwischen der zweiten Druckstufe und der EBIT und vor dem optischen Zugang zur mittleren Fallenelektrode befinden sich weitere Blenden, die für einen Gasstrahl sorgen. Vor dem Nadelventil ist

eine Flasche, gefüllt mit Eisenpentacarbonyl $\text{Fe}(\text{CO})_5$, welches sich bei Raumtemperatur in flüssiger Phase befindet, angeschlossen. Eisenpentacarbonyl besitzt einen Dampfdruck von ca. 30 mbar [13], sodass stets genügend Moleküle im gasförmigen Zustand vorliegen. Der Injektionsdruck in der zweiten Druckstufe wird normalerweise auf einen Druck von etwa $10 \cdot 10^{-8}$ mbar reguliert. Diese Moleküle gelangen als Gasstrahl in die Fallmitte, werden in ihre einzelnen chemischen Komponenten durch den hochenergetischen Elektronenstrahl zerlegt und schließlich ionisiert, sodass letztendlich Eisenionen hohen Ladungszustandes erzeugt und gefangen werden können.

3.2 Photonen Detektoren

3.2.1 Siliziumdrift-detektor

Zur Detektion von Röntgenphotonen wird ein fensterloser Siliziumdrift-detektor (SDD) der Firma KETEK [32] mit einer effektiven Fläche von 80 mm^2 verwendet. Dieser Detektor kann Röntgenphotonen in einem Energiebereich zwischen 0,2 keV und 30 keV nachweisen. Die Energie der Röntgenphotonen bei resonanter Rekombination von hochgeladenem Eisen liegt in einem Bereich zwischen 6 keV und 9 keV und liegt somit im Bereich der maximalen Effizienz des verwendeten Detektors (vgl. Abbildung 3.6). Die Detektionseffizienz liegt hier bei annähernd 100 % und ist über den untersuchten Bereich konstant. Das Funktionsprinzip basiert auf dem einer Halbleiterdiode, der aus einem tetravalenten Element der IV. Hauptgruppe, wie in diesem Fall Silizium, besteht. Ein in das Halbleitermaterial eindringende Photon hebt, sofern dessen Energie ausreichend groß ist um die Bandlücke zu überwinden, ein Elektron aus dem Valenzband in ein unbesetztes Niveau des Leitungsbandes an. Dieses Primärelektron kann weitere Elektron-Loch-Paare erzeugen, wobei es zu einem kaskadenartigen Prozess kommt. Die Anzahl der Elektron-Loch-Paare ist dabei proportional zur Energie des einfallenden Photons. Durch Anlegen eines elektrischen Feldes können diese Paare getrennt werden bevor sie rekombinieren und die Elektronen können an der Anode detektiert werden. Zusätzlich wird bei einem SDD ein Feld parallel zur Oberfläche, das sogenannte Driftfeld, angelegt (Abb. 3.7). Dabei befindet sich der äußere Driftring auf einem negativerem Potential U_{OR} als der innere Driftring mit U_{IR} , wodurch ein Feldgradient entsteht und die Elektronen zur Anode und die Löcher zur Rückseitenelektrode bzw. zu den Driftringen transportiert werden. Die relativ kleine Fläche der Anode bewirkt eine Reduzierung der Kapazität und somit eine Minimierung des Rauschens [53].

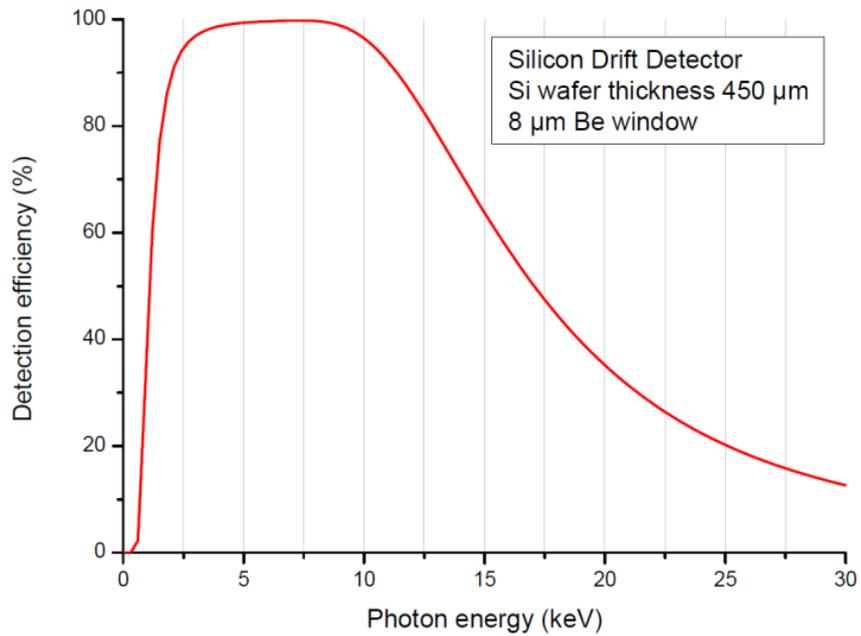


Abbildung 3.6: Effizienzkurve des verwendeten SDD-Detektors [32]. Die maximale Effizienz liegt bei einer Photonenenergie zwischen 5 keV und 10 keV in dem sich die Energie der Röntgenphotonen bei der resonanten Rekombination von hochgeladenem Eisen befinden.

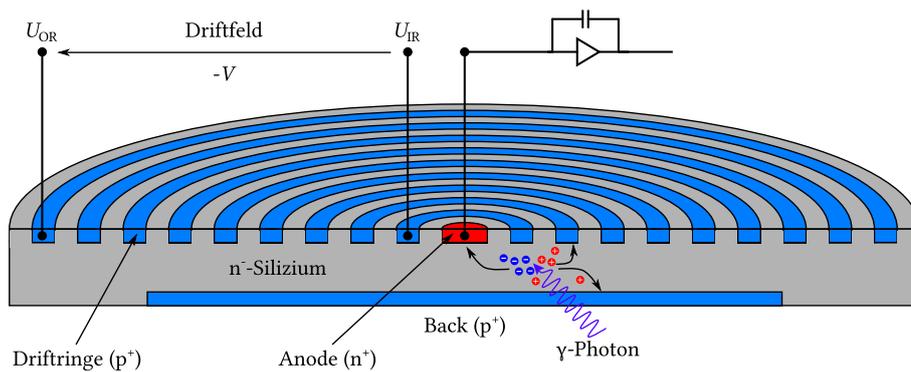


Abbildung 3.7: Siliziumdrift-detektor, schematisch. Die hochgestellten + bzw. – deuten eine starke bzw. eine schwache Dotierung an.

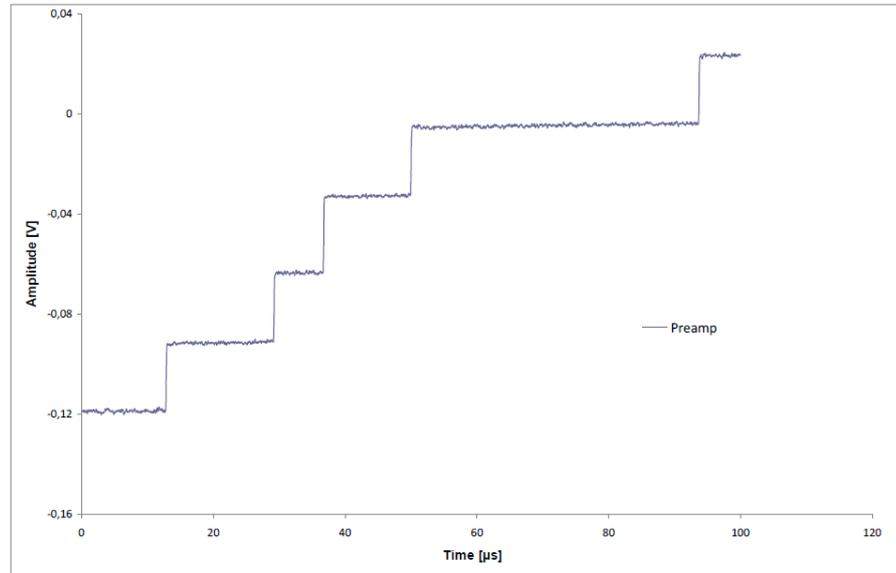


Abbildung 3.8: Typisches Signal vom Vorverstärker des SDD-Detektors. Die Aufladerampe ist von Pulsen, die von detektierten Photonen erzeugt wurden, überlagert [32].

Zunächst wird durch Aufladen eines Kondensators ein Ladungsgleichgewicht geschaffen. Der Detektor wird ähnlich wie eine Diode in Sperrichtung betrieben und langsam entladen. Durch Auftreffen eines Photons werden Leitungsladenträger erzeugt und die Entladung des Kondensators verläuft für eine kurze Zeitspanne schneller. Dieser Prozess ist in Abbildung 3.8 dargestellt. Durch Messung der Spannung und Differenzierung nach der Zeit entstehen stufenartige Resonanzen, deren Höhe proportional zur Anzahl der Ladungsträger und somit zur Photonenenergie ist.

3.2.2 EUV-Spektrometer

Überblick

Für die Detektion von Photonen in einem Wellenlängenbereich von 5 nm bis 30 nm wurde das im Rahmen der Diplomarbeit von T. Baumann im Jahr 2008 entwickelte Vakuum-Ultraviolett-Spektrometer (VUV-Spektrometer) [9] verwendet. Der Aufbau ist schematisch in Abbildung 3.9 dargestellt.

Da UV-Strahlung in Luft stark absorbiert wird, wird der gesamte Aufbau unter einem Druck $p < 1 \cdot 10^{-9}$ mbar betrieben. Das aus der EBIT kommende Licht wird unter streifendem Einfall an einem konkaven Beugungsgitter mit 1200 Linien/mm gebeugt und auf eine Ebene fokussiert. Die ursprünglich verwendete CCD-Kamera mit einem CCD-Chip von Andor mit einer Auflösung von 2048×2048 Pixel auf einer Chipgröße von

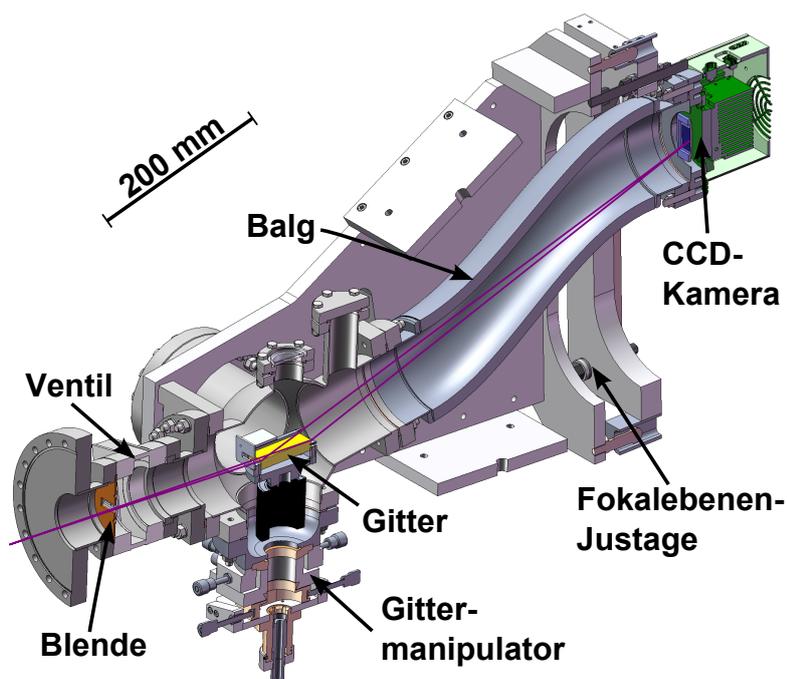


Abbildung 3.9: Schematischer Aufbau des EUV-Spektrometers. Die CCD-Kamera wurde bei den Messungen durch einen positionsempfindlichen MCP-Detektor ersetzt. Von rechts treffen die Fluoreszenzphotonen auf das Gitter und werden vom positionsempfindlichen MCP detektiert. Bild: T. Baumann.

$27,6 \times 27,6 \text{ mm}^2$ wurde durch einen positionsempfindlichen Photonendetektor ersetzt.

Das Gitter

Für die vorliegenden Messungen wurde ein konkaves Gitter der Firma Hitachi mit 1200 Linien/mm verwendet. Dieses Gitter besteht aus einem goldbeschichteten Glassubstrat, in das filigranen Furchen mit einem Diamanten eingeritzt worden sind. Die Goldbeschichtung dient zur Erhöhung der Reflektivität bei streifendem Einfall des VUV-Lichtes. Das Gitter hat eine hohe Reflexionseffizienz in einem Wellenlängenbereich zwischen 5 nm und 25 nm [9, 31].

Der Positionsempfindliche Detektor

Der Positionsempfindliche Detektor besteht aus einer Mikrokanalplatte (engl.: microchannel plate, im Folgenden als MCP bezeichnet) der Firma RoentDek, Modell DLD40 [39], ausgestattet mit einer Delay-Line-Anode, die eine positionsaufgelöste Detektion der Photonen ermöglicht. Ein MCP (vgl. Abbildung 3.11) besteht aus einer Bleiglasplatte

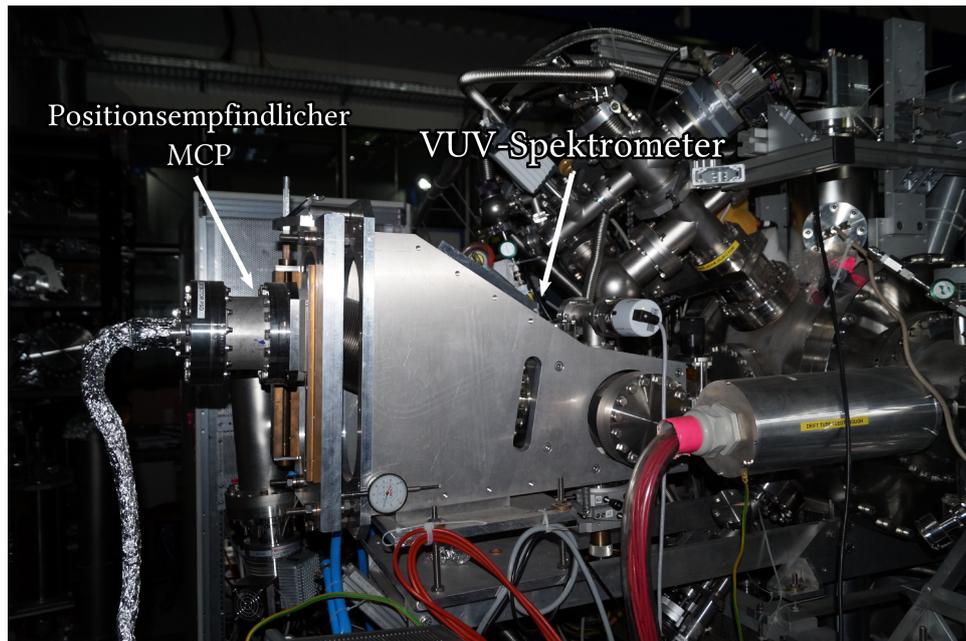
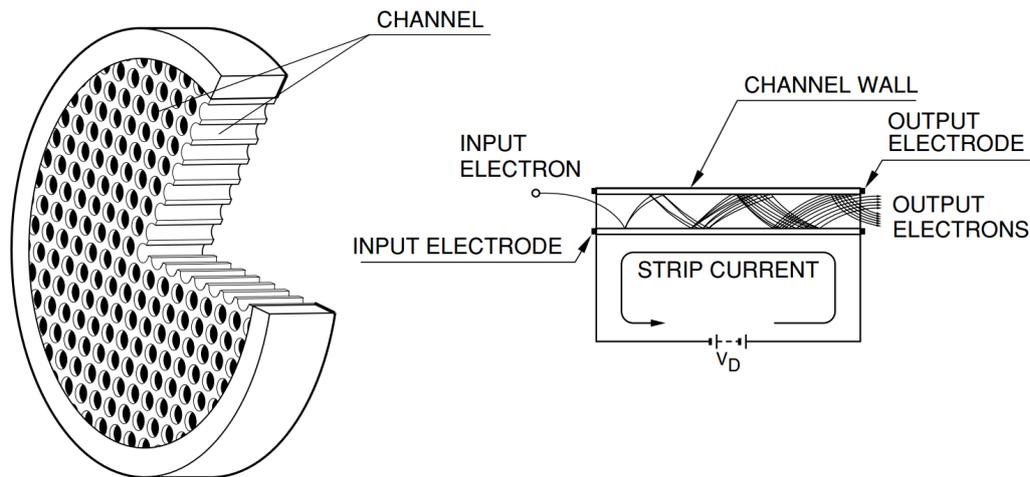


Abbildung 3.10: Fotografie des aktuellen Aufbaus des EUV-Spektrometers. Die CCD-Kamera wurde hier durch einen positionsempfindlichen MCP-Detektor ersetzt.

mit einem hohen Widerstand von ca. $500 \text{ M}\Omega$, in die dünne Kanäle mit einem Durchmesser von ca. $25 \mu\text{m}$ in einem regelmäßigen Muster eingebracht sind. Zwischen der Vorder- und der Rückseite ist eine Spannungsdifferenz von ca. 2400 V angelegt. Trifft ein Teilchen oder ein Photon mit ausreichender Energie auf der Vorderseite (Front) auf eines der Kanäle, so werden Primärelektronen aus dem Plattenmaterial herausgeschlagen, die durch die angelegte Spannungsdifferenz Richtung Rückseite (Back) hin beschleunigt werden. Es findet ein kaskadenartiger Prozess statt, bei dem bei jeder Kollision eines Elektrons sukzessiv die Anzahl an Elektronen erhöht wird. Somit wirkt jeder einzelne Kanal wirkt als ein miniaturisierter Elektronenvervielfältiger. Der an der Rückseite daraus resultierende Elektronenschauer wird auf eine auf einem positiveren Potential liegende Anode gelenkt und schließlich detektiert. Bei dem verwendeten MCP-Stack handelt es sich um eine Chevron-Konfiguration, bei der ein Stapel von zwei Platten verwendet wird, wobei die Kanäle in den Platten jeweils in gegensätzliche Richtungen zur Normalen geneigt sind. Dadurch werden zum einen Impulsartefakte reduziert und zum anderen die Elektronenausbeute um mehrere Größenordnungen erhöht [54].

Für eine positionssensitive Detektion der Photonen wird als Anode eine sogenannte delay-line Anode verwendet. Dabei handelt es sich um zwei senkrecht zu einander stehenden Drähten mit parallel verlaufenden, engen Windungen (vgl. Abbildung 3.12). Trifft nun



THBV3_1001EA

Abbildung 3.11: Links: Mikrokanalplatte mit dünnen Kanälen. Rechts: Ein Elektron wird durch die Potentialdifferenz zwischen Vorder- und Rückseite beschleunigt und schlägt weitere Elektronen auf dem Weg zur Rückseite hin aus. Es entsteht ein Kaskadenartiger Prozess und eine daraus resultierende Verstärkung des Signals auf der Rückseite des MCPs. Entnommen heraus [42].

ein Elektronenschauer auf den Draht, so wird ein Impuls in beide Drahtrichtungen mit einer Gruppengeschwindigkeit nahe der Lichtgeschwindigkeit ausgesendet. Es lässt sich eine zu den Drähten senkrecht verlaufende Ausbreitungsgeschwindigkeit v_{\perp} des Signals definieren, wobei dieses ca. 0,73 ns für eine Windung (ca. 1 mm) benötigt. Durch eine Messung der Zeitdifferenz in der Auftreffzeit an beiden Drahtenden x- und in y-Richtung kann auf den Auftreffort der Elektronen geschlossen werden. Die Signale der x- bzw. y-Position am MCP werden dann vom DLA-TR6 Modul der Firma RoentDek verarbeitet. Dieses Modul dient als Differentialverstärker und als Constant-Fraction Discriminator (CFD). Ein CFD erzeugt Zeitmarken zur exakten Laufzeitmessung. Dabei werden zwei Signalpfade erstellt, wobei ein Pfad gegen den anderen leicht verzögert, invertiert und um einen Faktor zwischen Null und Eins multipliziert ist. Die beiden Pfade werden schließlich addiert und der erste Nulldurchgang dient als Zeitmarke. Diese ist unabhängig von der Höhe der Pulse, was eine Messung einer Zeitspanne erlaubt, die kürzer als die Pulsbreite ist. Insgesamt werden jeweils für die x- und y-Richtung ein Start- und ein Stoppsignal verarbeitet.

Die wichtigsten Eigenschaften des verwendeten MCP Detektors sind in Tabelle 3.1 dargestellt.

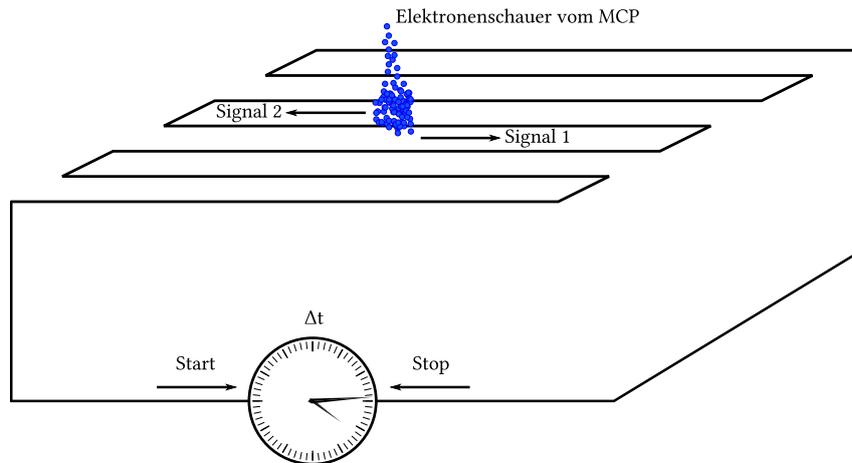


Abbildung 3.12: Funktionsprinzip einer Delay-Line-Anode. Die auf den Draht auftreffende Elektronenwolke bewirkt eine Ausbreitung eines elektrischen Impulses in beide Drahtrichtungen. Durch die Messung der Zeitdifferenz in x- und in y-Richtung, kann auf den Auftreffpunkt geschlossen werden.

Tabelle 3.1: Charakteristik des DLD40-MCP der Firma RoentDek [39].

Positionsauflösung:	< 0,1 mm
Gesamte Linearität:	0,2 mm
Nachweisbare Zählrate:	< 1 MHz
Multi-hit Totzeit:	10 ns bis 20 ns
Anzahl der Platten:	2, Chevron-Stack
Außendurchmesser:	50 mm
Durchmesser der aktiven Fläche:	47 mm
Durchmesser der Kanäle:	25 μm
Abstand der Kanalmitten:	32 μm
Neigungswinkel der Kanäle:	(7 \pm 2) $^\circ$
L/D:	60 : 1
Gain:	1 \cdot 10 ⁷

3.3 Das Datenaufnahmesystem

Für die Verarbeitung der Signale wird ein MPA3-Datenaufnahmesystem (engl. Multi-parameter Data Acquisition System) der Firma FAST ComTec verwendet [41]. Dieses kommerzielle System besitzt 16 Kanäle, die jeweils eine Digitalisierungsauflösung von 13 Bit besitzen, was 8192 Kanälen entspricht. Jeder Kanal kann in drei verschiedenen Modi betrieben werden. Der erste Modus ist der sogenannte SVA (engl. Sampling Voltage Analyzer). Dabei wird eine anliegende Spannung zwischen 0 und 10 V digitalisiert. Der PHA-Modus (Pulse Height Analyzer) digitalisiert die Höhe eines Pulses. Der dritte Modus, der sogenannte TDC (engl. Time-to-Digital Converter) digitalisiert die Zeitdifferenz zwischen einem Start- und einem Stoppuls in einem Bereich zwischen 50 ns und 20 μ s mit einer Zeitauflösung von 0,025 ns. Die aufgenommenen Daten können in Echtzeit im Programm MPANT verarbeitet werden. Dabei können Koinzidenzbedingungen definiert und ein- bzw. zweidimensionale Spektren dargestellt werden. Zusätzlich wird eine Datei, die sogenannte Listfile, im Binärformat gespeichert, die alle relevanten Informationen über die registrierten Rohsignale enthält.

Das Schema des Datenaufnahmesystems ist in Abbildung 3.13 illustriert. Dabei können die aufgenommenen VUV- bzw. Röntgenspektren des MCP bzw. des SDD parallel in Abhängigkeit von der Elektronenstrahlenergie dargestellt werden.

Die Signale der x- bzw. y-Position am MCP werden zunächst vom DLA-TR6 Modul diskriminiert und verstärkt, sodass eine amplitudenunabhängige Zeitmarke für eine exakte Laufzeitmessung definiert wird. Diese Signale werden mit Hilfe des GG8020 Gate and Delay Generator der Firma Ortec verzögert, sodass der Stoppuls nach dem Startpuls erfolgt. Die x- bzw. y-Position wird schließlich mit einem TDC verarbeitet und an das Datenaufnahmesystem MPA3 weitergeleitet.

Parallel dazu werden die Pulse vom SDD mit Hilfe eines Ortec 672 Spectroscopy Amplifier verarbeitet. Dieses Modul dient ebenfalls als Verstärker und als CFD. Die Pulse werden schließlich mit einem PHA analysiert und in das MPA3-System geleitet. Zusätzlich wird ein Monitor Signal vom PHA in einen N454 Logic FAN-IN/FAN-OUT der Firma CAEN gespeist, in das parallel das Startsignal für die x-Richtung am MPC gespeist wird. Dadurch ist es in der Datenaufnahme möglich, beide Signale gegeneinander in einen zweidimensionalen Graphen aufzutragen. Die aktuelle Spannung an der Plattform der Driftröhre wird als digitalisierte Spannung in ein SVA-Modul gespeist und in das MPA3-System

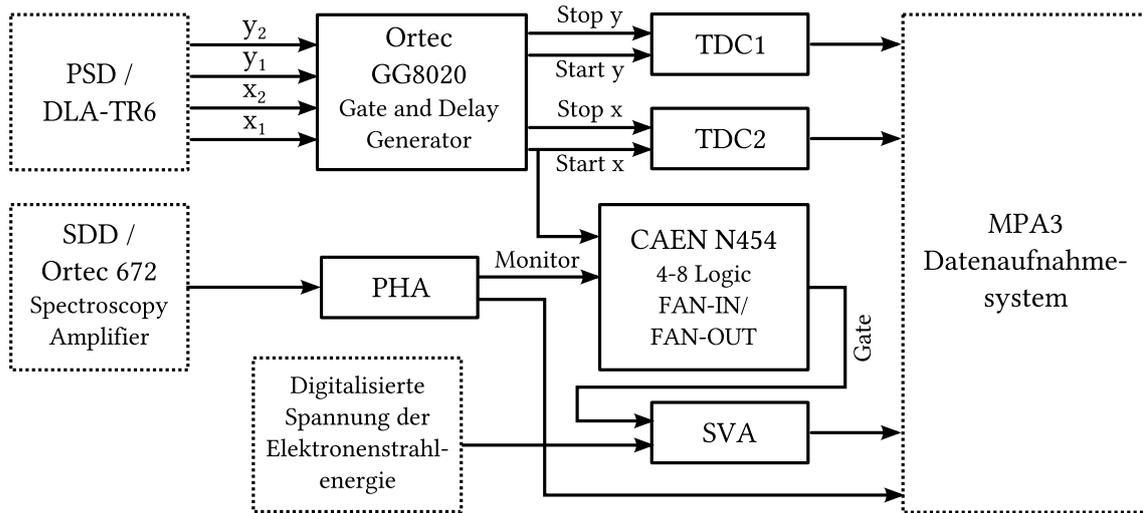


Abbildung 3.13: Flußdiagramm des Datenaufnahmesystems. Die Signale vom MCP werden diskriminiert, verstärkt und so verzögert, dass der Stoppuls nach dem Startpuls erfolgt und schließlich in zwei separaten TDCs eingelesen. Parallel dazu werden die Signale vom Röntgendetektor in in PHA-Modul gespeist. Zusätzlich erhält man die Information über die an der Driftröhrenplattform aktuell anliegende Spannung. Die verarbeiteten Signale werden schließlich in das MPA3-System eingelesen und vom Benutzer verarbeitet.

geleitet. Zusätzlich bekommt der SVA ein Gate-Signal vom Logic FAN-IN/FAN-OUT Modul, was eine Darstellung der Abhängigkeit der VUV- bzw. Röntgenspektren von der Elektronenstrahlenergie erlaubt.

4 Datenauswertung

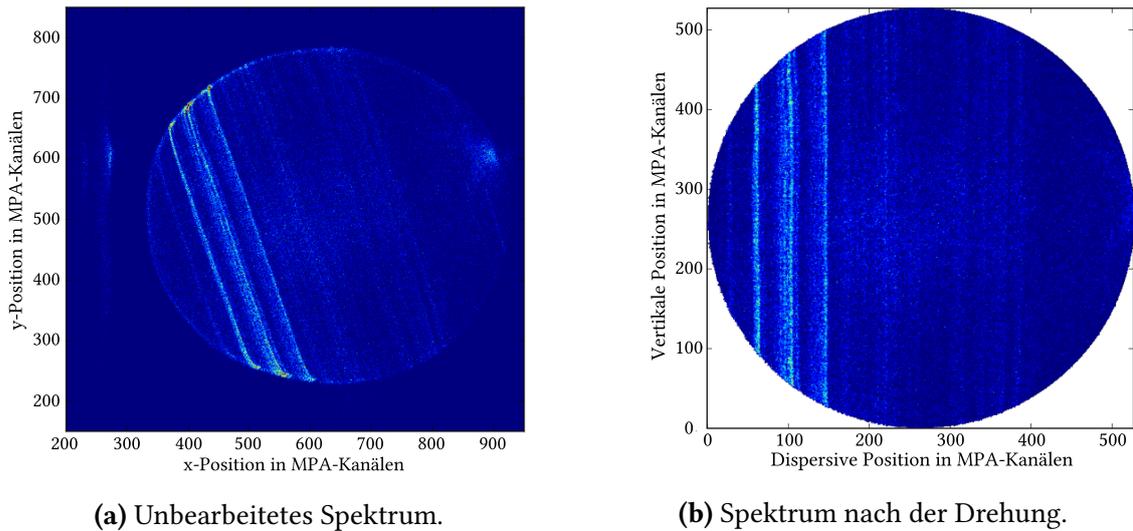
4.1 MCP-Detektor-Datenauswertung

Für eine Zuordnung der Spektrallinien der aufgenommenen VUV-Spektren wird eine Projektion auf die dispersive Achse benötigt. Da es nicht möglich ist den MCP mit seiner delay-line exakt parallel zur dispersiven Achse auszurichten, bedarf es einer Nachbearbeitung der Daten mittels einer Software, die in Zusammenarbeit mit M. Blessenohl [14] entwickelt wurde. Ein Beispiel für ein unbearbeitetes Spektrum ist in Abbildung 4.1a dargestellt. Auf der x- bzw. y-Achse sind die Zeitdifferenzen der gegenläufigen Signale im x- bzw. y-Draht der Delay-Line in beliebigen Einheiten aufgetragen. Die ellipsenförmige Abbildung des kreisrunden MCP resultiert vermutlich aus leicht verschiedenen Drahtlängen in der Delay-Line oder an den Signaleingängen im MPA System. Es ist eine deutliche Neigung der Spektrallinien gegenüber der dispersiven Achse zu erkennen. Des Weiteren finden sich Verzerrungen am Rand, die aus der Datenauswertung ausgeschlossen werden müssten.

4.1.1 Rotation und Projektion der Spektren

In Abbildung 4.2 ist der Prozess der Drehung des Spektrums illustriert. Zunächst wird aus der vom MPA-System aufgezeichneten Listfile ein zweidimensionales Histogramm mit allen detektierten Ereignissen erstellt. Das daraus resultierende Spektrum ist in Abbildung 4.1a zu sehen. Vom Benutzer wird graphisch eine elliptischer Bereich, eine sogenannte region of interest (ROI) mit einem Mittelpunkt, einer Höhe und einer Breite definiert, die möglichst die gesamten Detektorfläche abzüglich des verzerrten Randes beinhaltet. In diese Ellipse wird eine rechteckige ROI gelegt und die Ereignisse der einzelnen Zeilen werden auf die x-Achse projiziert.

Für die Bestimmung der Verdrehung φ des MCPs gegenüber der dispersiven Achse wird ein Autokorrelationsverfahren angewandt. Sei $h = h_2 - h_1$, $h \in \mathbb{N}$, die Höhe der rechteckigen ROI in der Ellipse und h_i die i -te Zeile in der ROI. Für die Bestimmung der Verschiebung j der schematisch dargestellten Spektrallinien wird die Zeile h_i fixiert



(a) Unbearbeitetes Spektrum.

(b) Spektrum nach der Drehung.

Abbildung 4.1: Rotation des VUV-Spektrums von hochgeladenem Eisen bei einer Beschleunigungsspannung von 360 V. Auf der horizontalen Achse ist die dispersive Position am MCP in MPA-Kanälen, auf der vertikalen Achse die Position senkrecht zur dispersiven Achse aufgetragen.

und die Zeile $h_i + h/2$ verschoben, dass die Peaks auf der gleichen Position x liegen. Dabei wird das Produkt der Spektren $h_i(x)$ und $h_{i+h/2}(x + j)$ in Abhängigkeit eines Verschiebungsparameters j gebildet und über x integriert. Liegen die Spektrallinien übereinander, so wird dieses Integral maximal und es lässt sich somit die Verschiebung j bestimmen.

$$j = \max_j \int h_i(x) \cdot h_{i+h/2}(x + j) dx, \quad j \in \mathbb{N} \quad (4.1)$$

Dieser Vergleich wird für alle Zeilenpaare h_i und $h_{i+h/2}$ durchgeführt. Da ein Spektrum aus mehreren nahe beieinander liegenden Linien besteht, kann es zu falschen Werten von j kommen. Deshalb wird über alle Zeilenpaare ein Histogramm mit den errechneten Verschiebungen j erstellt (vgl. Abbildung 4.3). Durch Auswahl des passenden Bereiches wird der Mittelwert für die mittlere Verschiebung \bar{j} berechnet. Daraus lässt sich schließlich mit

$$\varphi = \arctan \frac{\bar{j}}{h/2} \quad (4.2)$$

die Verdrehung φ gegenüber der dispersiven Achse bestimmen. Der Winkel für die vertikale Position des MCP bei $z = 155$ mm wurde auf $\varphi = 18,16^\circ$ bestimmt.

Im nächsten Schritt wird der ausgewählte elliptische Bereich zu einem Kreis gestreckt

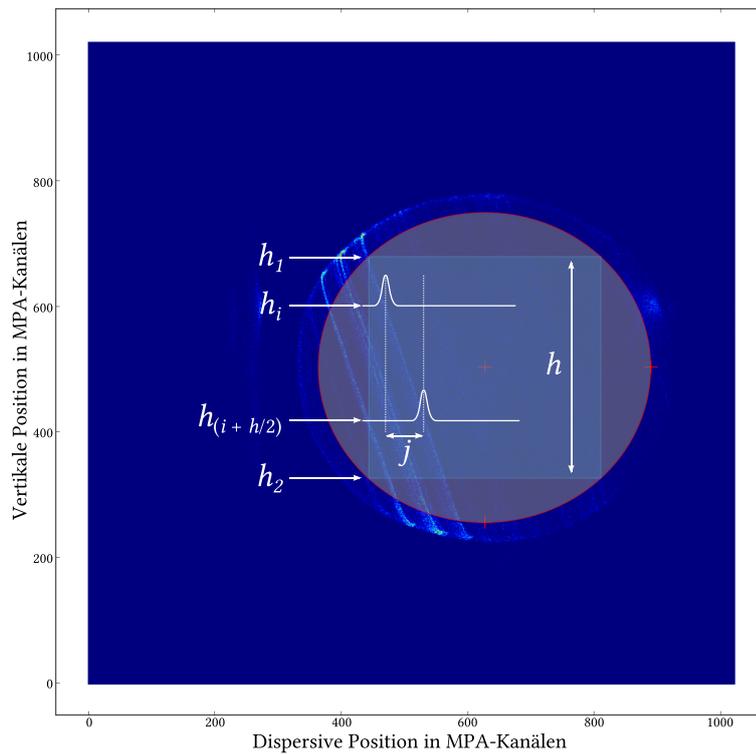


Abbildung 4.2: Prinzip der Autokorrelation zur Bestimmung des Drehwinkels φ gegen die dispersiven Achse. Rot: Elliptische ROI. Hellblau: Rechteckige ROI.

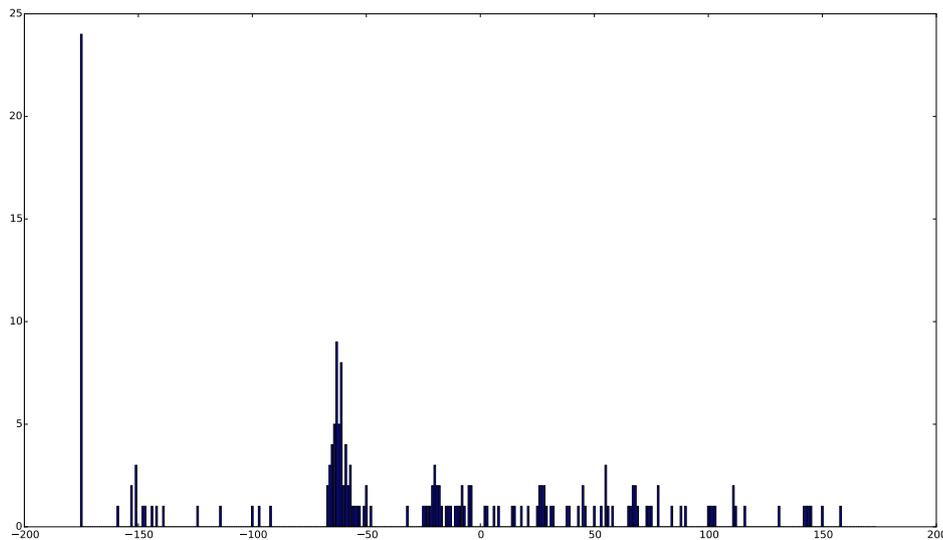


Abbildung 4.3: Histogramm über die Verschiebung j der einzelnen Zeilenpaare h_i und $h_{i+h/2}$. Auf der x-Achse sind die Verschiebungen der Zeilen aufgetragen. Es ist eine klare Anhäufung um $j = -61$ zu erkennen, was bei der Position des MCPs einem Winkel von $\varphi = 18,16^\circ$ entspricht.

und um den ermittelten Winkel φ gedreht, sodass die Linien schließlich senkrecht zur dispersiven Achse stehen. Damit lässt sich nun das Spektrum auf diese Achse mit einer minimal erreichbaren Linienbreite projizieren (vgl. Abbildung 4.4). Da bei einer Projektion über alle Zeilen summiert wird, sind im resultierenden eindimensionalen Spektrum die Linien am Rand der kreisförmigen Region weniger intensiv als die Linien in der Kreismitte, weshalb diese noch entsprechend gewichtet werden müssen. Dabei wird die Anzahl der Zeilen in der Mitte der Kreisregion durch die Anzahl der Zeilen für jede Position x dividiert und somit der Gewichtungsfaktor berechnet. Ein Beispiel für ein gewichtetes Spektrum ist in Abbildung 4.5 zu sehen.

4.2 Gewinnung von Rekombinationsspektren

Für eine ladungszustandsselektive Diagnostik werden resonante Rekombinationsspektren aufgenommen. Dabei wird die Elektronenstrahlenergie variiert, indem die Spannung an der Driftröhrenplattform kontinuierlich erhöht oder erniedrigt wird. Dazu wird ein Dreieckssignal mit einer Rampe mit abwechselnder positiver und negativer Steigung angelegt. Die Spannung an der Kathode bleibt dabei konstant auf -2 kV. Die Plattformspannung

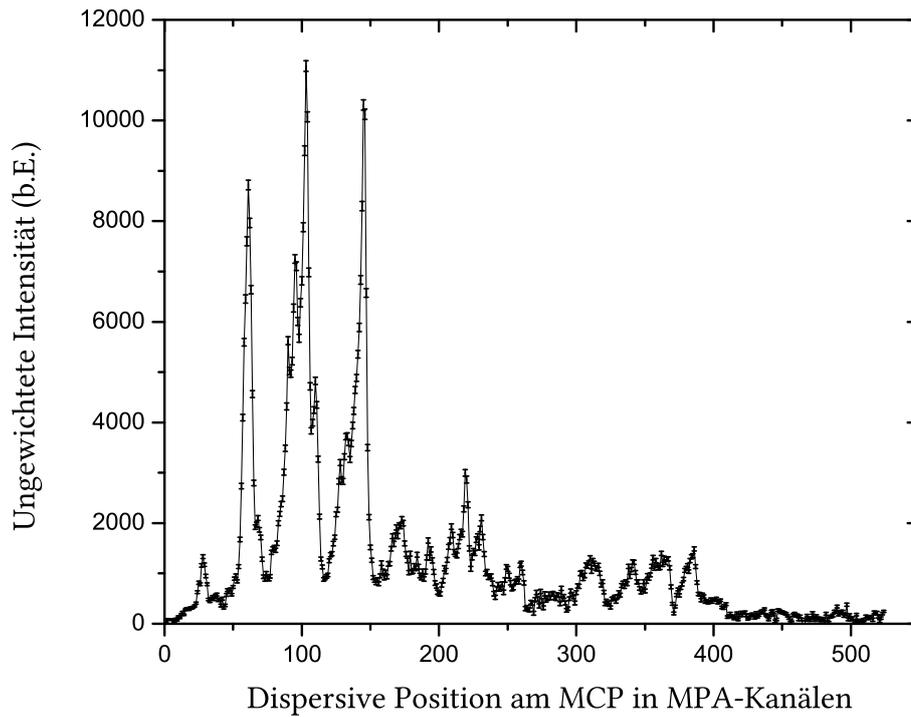


Abbildung 4.4: Eindimensionale, ungewichtete Projektion des Spektrums auf die disperse Achse. Zu sehen ist ein VUV-Spektrum von hochgeladenen Eisen bei einer unkorrigierten Beschleunigungsspannung von 360 V

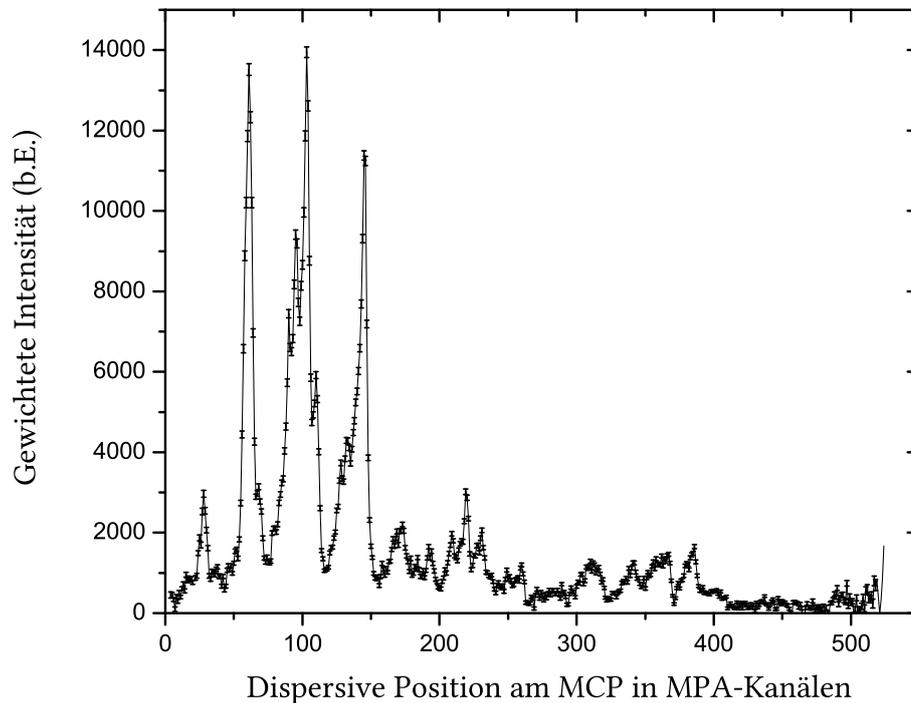


Abbildung 4.5: Gewichtete Projektion des Spektrums. Gleicher Datensatz wie in Abbildung 4.4.

wird ausgelesen und in das MPA3-System eingelesen. Im Verarbeitungsprogramm MPANT wird nun eine Koinzidenzbedingung definiert, sodass schließlich ein zweidimensionaler Graph mit der Elektronenstrahlenergie auf der horizontalen Achse und der Energie der Röntgenphotonen auf der vertikalen Achse entsteht. Dies lässt sich realisieren, indem für jede Elektronenstrahlenergie abgefragt wird, ob der ADC, der die Signale des SDD verarbeitet, aktiv war und welche Energie die detektierten Photonen besitzen. Ein aufgenommenes Beispielspektrum ist in Abbildung 4.6 zu sehen.

Aus diesem zweidimensionalen Spektrum lassen sich folgende Informationen extrahieren: Die horizontalen Streifen mit konstanter Photonenenergie können den K_{α} -, K_{β} - und K_{γ} -Photonen zugeordnet werden, die bei K-L-, K-M- bzw. K-N-Übergängen emittiert werden. Die diagonalen Streifen, die mit RR $n = 3$ bzw. RR $n = 2$ beschriftet sind, resultieren aus der radiativen Rekombination in die M- bzw. in die L-Schale. Diese Bänder sind strukturlos, da die Photonenenergie E_{γ} aus der Summe der kinetischen Energie der freien Elektronen E_e und der Ionisationsenergie E_I zusammensetzt:

$$E_{\gamma} = E_e + E_I.$$

Die Regionen erhöhter Intensität stellen die dielektronischen Resonanzen dar. Diese Prozesse sind resonant und treten somit nur bei bestimmten Elektronenstrahlenergien auf. Die KLL-Resonanzen entstehen, wenn ein freies Elektron in die L-Schale eingefangen wird und dabei ein Elektron aus der K-Schale in die L-Schale anregt. Bei den KLM-Resonanzen, die um den Bereich von ca. 6 keV auftreten, wird das freie Elektron in die L-Schale eingefangen und regt ein Elektron aus der K- in die M-Schale an. Beim Zerfall existiert ein Übergang von der M- in die K-Schale, der einer Photonenenergie von etwa 7880 eV entspricht, ein Übergang von der L- in die K-Schale mit einer Energie, die wieder einem K_{α} -Photon entspricht und einem niederenergetischen Übergang von der M- in die L-Schale mit einer Photonenenergie von ca. 1,7 keV, der nicht mehr detektiert werden konnte, da im unteren Bereich der Photonenenergie andere Prozesse von anderen Elementen dominant sind. Aus den selben Gründen kann bei der KLN-Resonanz nur der Übergang von der N- in die K-Schale, der der Energie eines K_{γ} -Photons entspricht und ein Übergang von der L- in die K-Schale detektiert werden. Die niederenergetischen Photonen wurden nicht beobachtet.

Die vertikalen Streifen auf den Positionen der Resonanzen sind elektronische Artefakte und resultieren vermutlich aus „pile-up“ Effekten, bei denen viele Ereignisse zur gleichen Zeit verarbeitet werden, was zu falschen Pulshöhenmessungen im PHA-Modul des

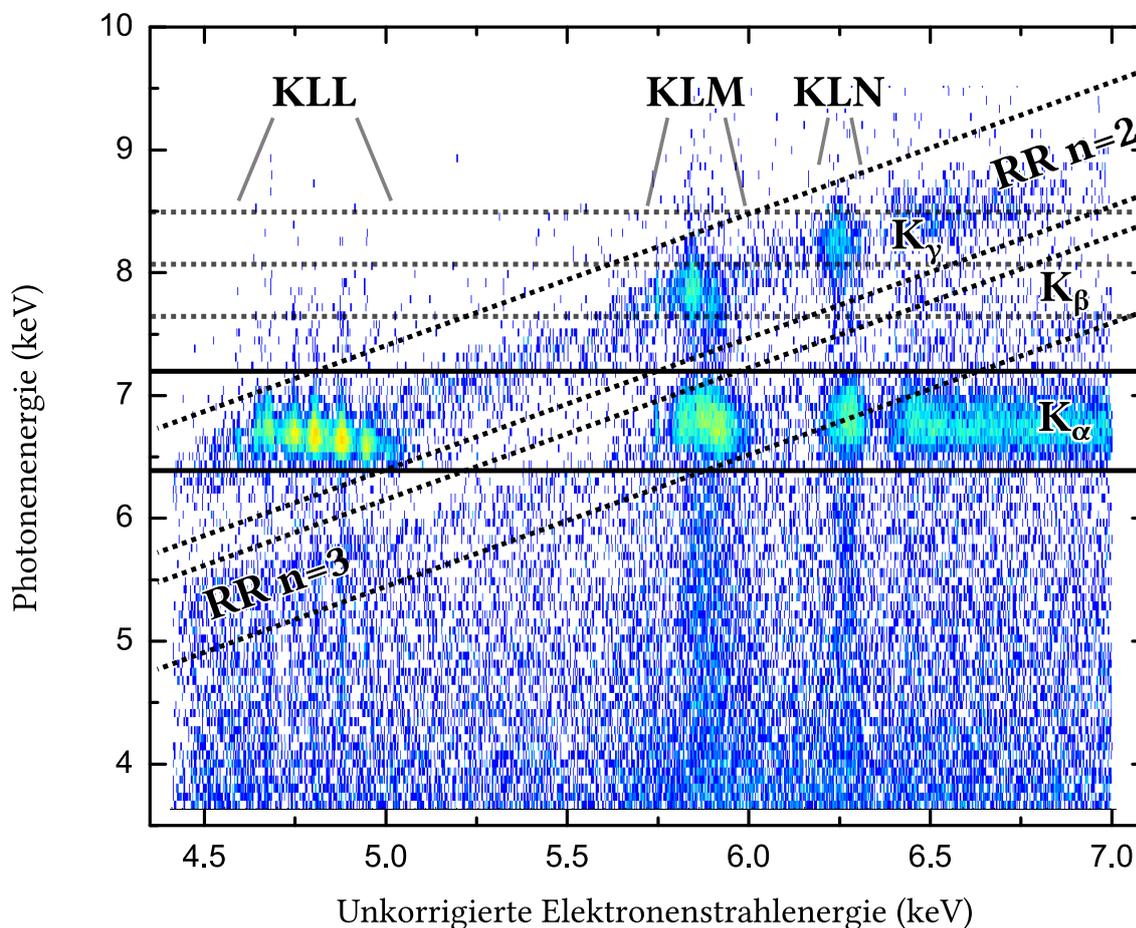


Abbildung 4.6: Beispielspektrum der resonanten Rekombination von hochgeladenem Eisen. Auf der horizontalen Achse ist die Elektronenstrahlenergie ohne Raumladungskorrektur und auf der vertikalen Achse die Energie der detektierten Röntgenphotonen dargestellt. Die horizontalen Bänder zeigen die K_α -, K_β - und K_γ -Übergänge, die diagonalen Bänder von unten links nach oben rechts die radiative Rekombination in die $n = 3$ bzw. $n = 2$ Schale. Weiterhin sind Strukturen erhöhter Intensität mit wohldefinierten Energien zu erkennen, die sogenannten dielektronischen Resonanzen (K-LL, K-LM und K-LN).

MPA3-Systems führt. Ein weiterer Grund könnte die Detektion von Pulsen innerhalb eines Reset-Pulses des SDD sein, die den Schwellenwert zur Detektion im PHA-Modul überschreiten. Eine Möglichkeit dies in Zukunft zu verhindern, wäre die Einführung eines Zeitfensters während des Reset-Pulses in das MPA3-System, in dem kein Signal mehr verarbeitet wird.

Die Photonenenergie wurde mithilfe von theoretischen Werten für die K_α , K_β - und K_γ -Linie für heliumartiges Eisen mit der Energie von $E_\alpha = 6700,490$ eV, $E_\beta = 7881,154$ eV und $E_\gamma = 8295,485$ eV kalibriert [3, 1]. Die Auflösung des Detektors wurde auf

$$\text{FWHM} = 234(4) \text{ eV}$$

bestimmt, indem die Projektion der lithiumartigen KLL-Resonanz auf die vertikale Achse und anschließender Anpassung einer Gaußkurve an diese Linie durchgeführt wurde.

Die Elektronenstrahlenergie wird zunächst ohne Raumladungskorrektur durch die Potentialdifferenz zwischen Kathode und der aktuell anliegenden Spannung an der Driftrohrenplattform berechnet. Diese Energie kann später entweder durch Messungen der Positionen der Resonanzen mit verschiedenen Strömen und anschließender Extrapolation zum Strahlstrom $I = 0$ mA oder mit theoretischen Werten für die DR-Resonanzen kalibriert werden.

4.2.1 Projektion der Spektren

Für eine quantitative Auswertung der vorliegenden Messungen werden die zweidimensionalen Spektren auf die Achse der Elektronenstrahlenergie projiziert. Dabei wird zunächst eine rechteckige ROI definiert, die den Bereich der Resonanzen beinhaltet (vgl. Abbildung 4.7). Es werden alle Ereignisse gleicher Elektronenstrahlenergie zeilenweise innerhalb der definierten ROI aufsummiert. Es entsteht dabei ein eindimensionales Spektrum mit der Summe der Ereignisse aufgetragen gegen die Elektronenstrahlenergie. Bei diesem Spektrum handelt es sich um den selben Ausschnitt der K-LL-Resonanzen wie in Abbildung 4.6. Es wurde lediglich ein kleinerer Scanbereich mit längerer Rampendauer und anderen Fallenparametern gewählt, woraus eine bessere Auflösung von ca. 18 eV als in Abbildung 4.6 resultiert. Die schrägen Streifen stellen wieder die radiative Rekombination in die L- bzw. in die M-Schale dar.

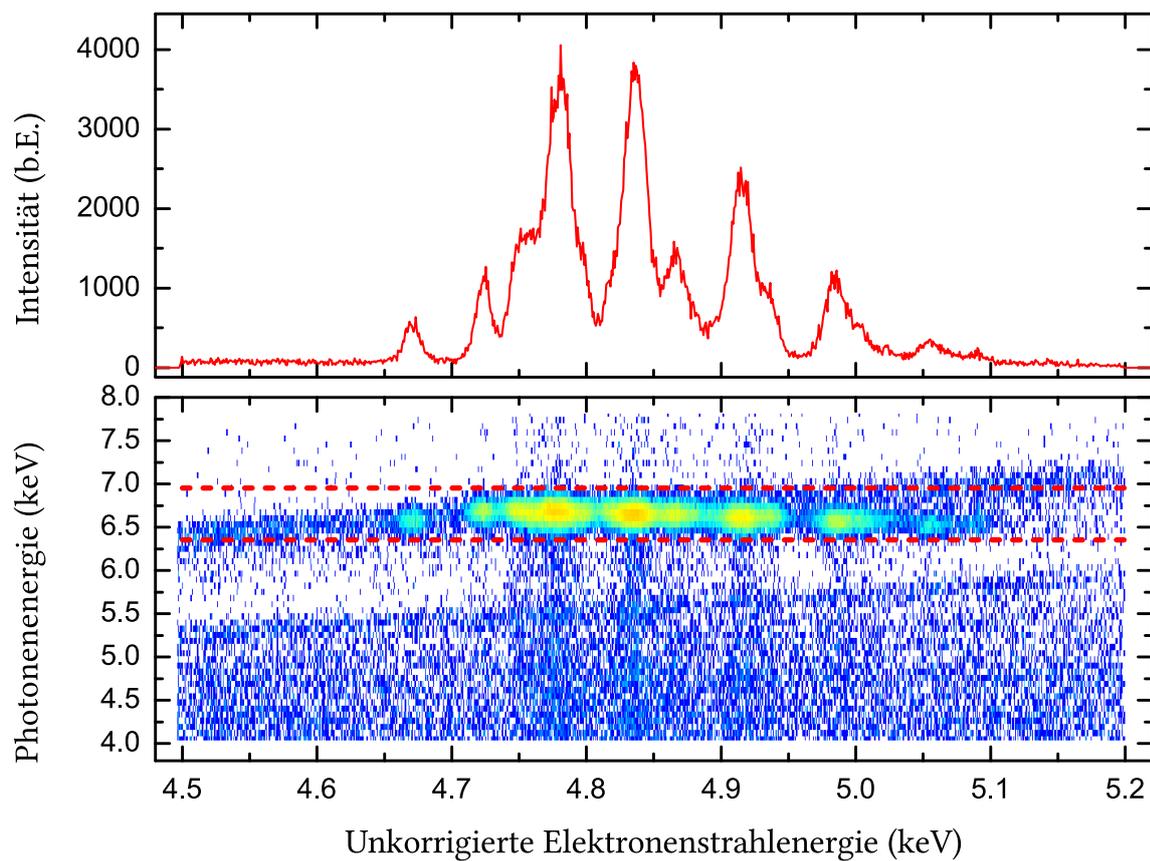


Abbildung 4.7: Unten: Zweidimensionales Röntgenspektrum der K-LL-Resonanzen von hochgeladenem Eisen. Zwischen den rot gestrichelten Linien wurde eine ROI definiert. **Oben:** Projektion des Spektrums auf die Achse der Elektronenstrahlenergie durch Summieren von Ereignissen gleicher Elektronenstrahlenergie innerhalb der definierten ROI.

4.2.2 Kalibration des DR-Spektrums

Die Kalibration der Elektronenstrahlenergie erfolgt mithilfe von theoretischen Werten [26]. Diese wurden von Z. Harman mit einem MCDF-Code (Multi-Configuration Dirac-Fock) berechnet. Dabei werden die theoretischen Resonanzen gegen die experimentell ermittelten Linien aufgetragen und daraus eine Kalibrationskurve erstellt. In Abbildung 4.9 sind oben die anhand der Theorie ermittelten Linien gefaltet mit einer Gaußkurve mit 10 eV Breite und unten das bereits kalibrierte, aufgenommene Rekombinationsspektrum dargestellt. Das Spektrum wurde in einem Energiebereich (ohne Raumladungskorrektur) von 4,5 eV bis 5,2 eV und einem Strahlstrom von 60 mA aufgenommen. In Abbildung 4.8 sind die Falleneinstellungen für die Messungen aufgetragen. Es musste ein Kompromiss zwischen der Zählrate und der Falltiefe getroffen werden. Je tiefer die Falle, desto höher ist die Zählrate, allerdings auf Kosten der Auflösung, da durch die heißen Ionen die Dopplerverbreiterung steigt. Eine flachere Falle würde für ein evaporatives Kühlen der Ionen sorgen. Die Falleneinstellungen wurden im Rahmen dieser Arbeit allerdings nicht auf eine hohe Auflösung optimiert, da die Rekombinationsspektren als reine Diagnostik und nicht als hochaufgelöstes spektroskopisches Mittel dienen.

4.3 Kalibration des VUV-Spektrums

Die mit dem MCP aufgenommenen VUV-Spektren wurden mithilfe von bekannten Spektrallinien von hochgeladenem Eisen kalibriert [31, 49, 6]. Dazu wird für jede angelegte Elektronenstrahlenergie (ohne Raumladungskorrektur) zwischen 320 eV und 420 eV in Schritten von 10 eV ein Spektrum für 300 s aufgenommen und wie in Kapitel 4.1.1 beschrieben rotiert und auf die dispersive Achse projiziert. Des Weiteren wird für jede Energie ein Untergrundspektrum mit der gleichen Integrationszeit aufgenommen, auf gleiche Weise verarbeitet und bei der Datenauswertung vom aufgenommenen Signal subtrahiert.

Die Fehler der Zählraten des Signals N_{Sig} und des Untergrundes N_{BG} werden unter Annahme von Poisson-Verteilungen mit

$$\Delta N_{\text{Sig}} = \sqrt{N_{\text{Sig}}}$$

und

$$\Delta N_{\text{BG}} = \sqrt{N_{\text{BG}}}$$

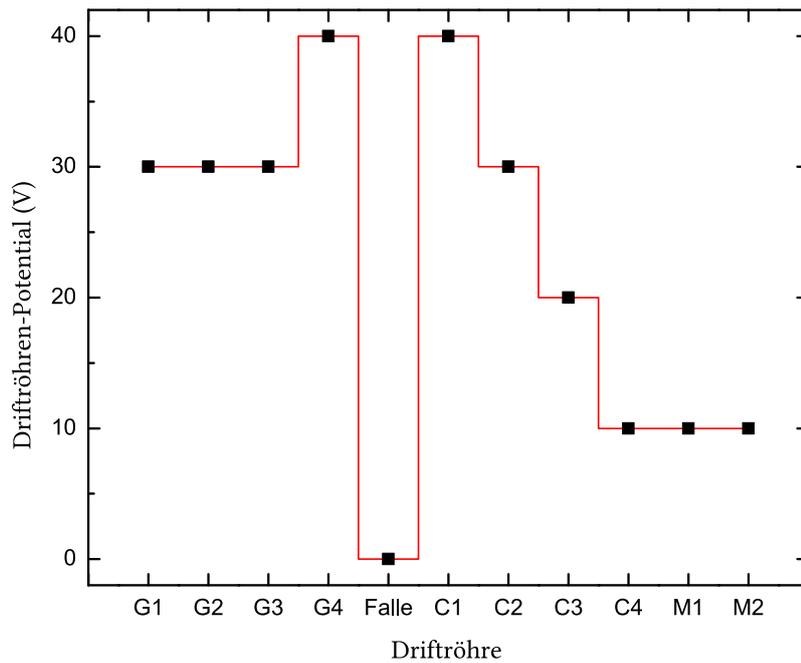


Abbildung 4.8: Angelegtes Potential an den einzelnen Driftröhren. Die mit C1-C4 bzw. G1-G4 bezeichneten Elektroden stellen die Driftröhren auf der Kollektor- bzw. auf der Kanonenseite dar. Die zentrale Driftröhre wird als Falle bezeichnet, die „Magics“ als M1 und M2. Letztere befinden sich zwischen der Trumpet (C4) auf der Kollektorseite und dem Kollektor.

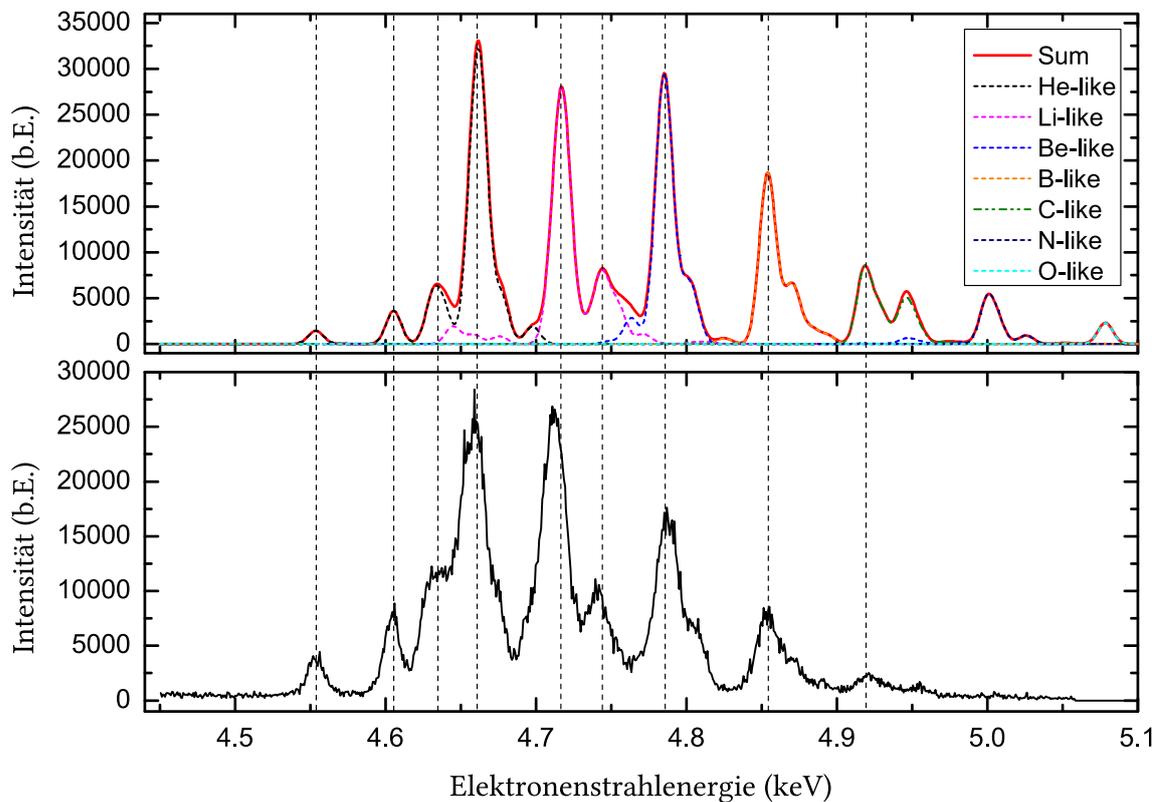


Abbildung 4.9: Oben: Mit MCDF berechneten Linien der K-LL-DR-Resonanzen gefaltet mit einer Gaußfunktion mit 10 eV Breite. **Unten:** Aufgenommenes DR-Spektrum bei einem Strahlstrom von 60 mA. Die experimentell bestimmten Resonanzen wurden mit den theoretischen Werten [26] kalibriert. Die stickstoffartigen und sauerstoffartigen Resonanzen sind im aufgenommenen Spektrum nicht mehr zu sehen, da sich aufgrund des relativ hohen Strahlstroms die Verteilung der Ionen Richtung höherer Ladungszustände verschiebt.

angesetzt. Da wie in Kapitel 4.1.1 beschrieben eine geometrisch bedingte Gewichtung mit Faktor $g(x)$, wobei x die Position am MCP darstellt, durchgeführt werden muss, werden auch die Fehler an den Randbereichen des MCPs stärker gewichtet als die Fehler in der Mitte der ROI. Daraus resultiert ein positionsabhängiger Fehler für die Signal- bzw. Untergrundzählrate

$$\Delta N_{\text{Sig}}(x) = g(x)\sqrt{N_{\text{Sig}}} \quad (4.3)$$

bzw.

$$\Delta N_{\text{BG}}(x) = g(x)\sqrt{N_{\text{BG}}}. \quad (4.4)$$

Durch quadratische Addition der jeweiligen Fehler lässt sich ein Gesamtfehler auf die untergrundkorrigierte Zählrate von $N_{\text{Sig,corr}}(x) = g(x) (N_{\text{Sig}}(x) - N_{\text{BG}}(x))$ von

$$\begin{aligned} \Delta N_{\text{Sig,corr}} &= \sqrt{(\Delta N_{\text{Sig}})^2 + (\Delta N_{\text{BG}})^2} \\ &= g(x)\sqrt{N_{\text{Sig}} + N_{\text{BG}}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

berechnen.

Für eine qualitative Analyse der Entwicklung der Ladungszustandsverteilungen bei Variation der Elektronenstrahlenergie wurden die einzelnen Spektren gegen die Elektronenstrahlenergie aufzutragen. Daraus resultiert ein zweidimensionales Spektrum wie in Abbildung 4.10, mit einer zur Wellenlänge der Spektrallinien proportionalen Größe auf der horizontalen Achse, der Elektronenstrahlenergie auf der vertikalen Achse und der Intensität als Farbskala dargestellt. Durch Interpolation in der Datenauswertung entsteht ein glatter Verlauf über die Elektronenstrahlenergie. An diesem Diagramm lässt sich die Entwicklung der Ladungszustandsverteilung in Abhängigkeit von der Elektronenstrahlenergie qualitativ beobachten, wodurch die Linien bereits wohlbekannten Linien einfacher zugeordnet werden können. Es ist zu erkennen, dass einige Linien mit steigender Elektronenstrahlenergie intensiver, andere wiederum schwächer werden. Bei einer unkorrigierten Elektronenstrahlenergie von 340 eV wird die Linie bei ca. 18 nm, die bei 320 eV sehr intensiv ist, wieder schwächer. Andererseits zeigen sich neue Linien bei 19,0 nm, die mit steigender Energie schwächer werden. Diese neuen Linien gehören deshalb zum gleichen Ladungszustand und können durch Vergleich mit theoretischen Ionisationsenergien und bereits vorhandenen Arbeiten [49, 31] dem Spektrum von Fe^{11+} zugeordnet werden. Die nächste Gruppe aus drei überlagerten Linien taucht bei 380 eV auf und gehört zum nächsthöheren Ladungszustand, also zu Fe^{12+} . Durch diese Methode

konnten die identifizierten Linien durch Vergleich mit wohlbekanntem Wellenlängen [1] kalibriert werden.

An die experimentell ermittelten Linien wurden Gaußkurven angepasst, wodurch die Position des Schwerpunktes x_c , deren Fehler Δx_c und die Halbwertsbreite FWHM bestimmt werden kann.

In Tabelle 4.1 sind die experimentell ermittelten Positionen der Spektrallinien, deren Ladungszustände und deren zugeordnete Wellenlängen mithilfe von Werten aus der Datenbank von NIST (National Institute of Standards and Technology) [1] aufgeführt. Die identifizierten Wellenlängen von NIST werden nun gegen die experimentell bestimmte Position am MCP aufgetragen (vgl. Abbildung 4.13). Es wurde eine Anpassung eines Dispersionspolynoms zweiten Grades der Form

$$\lambda(x) = ax + bx^2 + c \quad (4.6)$$

an die Daten durchgeführt. Aufgrund von Binningartefakten bei der Rotation der Spektren und der daraus resultierend abweichenden Positionen der Resonanzschwerpunkte x_c wird ein zusätzlicher Fehler von 0,5 MPA-Kanälen abgeschätzt und quadratisch zum Schwerpunktsfehler Δx_c des Fits addiert.

$$\Delta x'_c = \sqrt{\Delta x_c^2 + 0,5^2} \quad (4.7)$$

Der Fehler der Wellenlänge wird mit dem Produkt aus $\Delta x'_c$ und dem linearen Koeffizienten a des Fits abgeschätzt:

$$\Delta \lambda = a \Delta x'_c. \quad (4.8)$$

Der quadratische Term b wurde hierbei vernachlässigt, da er mehr als drei Größenordnungen kleiner ist als der lineare Term a . Der Fehler auf a wird bei der Berechnung von $\Delta \lambda$ ebenfalls vernachlässigt, da die Gleichung lediglich eine Abschätzung darstellt.

In Tabelle 4.2 sind die Ergebnisse der Anpassung der quadratischen Funktion dargestellt. Ein $\chi^2_{\text{red}} = 1,37$ deutet auf eine leichte Unterschätzung der Fehler hin. In Abbildung 4.11 ist ein solches Spektrum präsentiert. Zu höheren Wellenlängen bzw. Kanälen werden die Linien scheinbar breiter, was auf einen nicht perfekt in der Fokalebene des Gitters liegenden MCP hindeutet. Eine Überlagerung von Linien lässt sich hier ausschließen. Die Linien bei MPA-Kanal 416 und MPA-Kanal 455 treten bei einer unkorrigierten Elektronenstrahlenergie von ca. 400 eV auf und können deshalb Fe^{13+} zugeordnet werden, da sie im Spektrum von Fe^{12+} bei einer Energie von ca. 380 eV nicht vorhanden sind. Vergleicht man diese Linien mit der Datenbank von NIST [1], so kommen nur die letzten

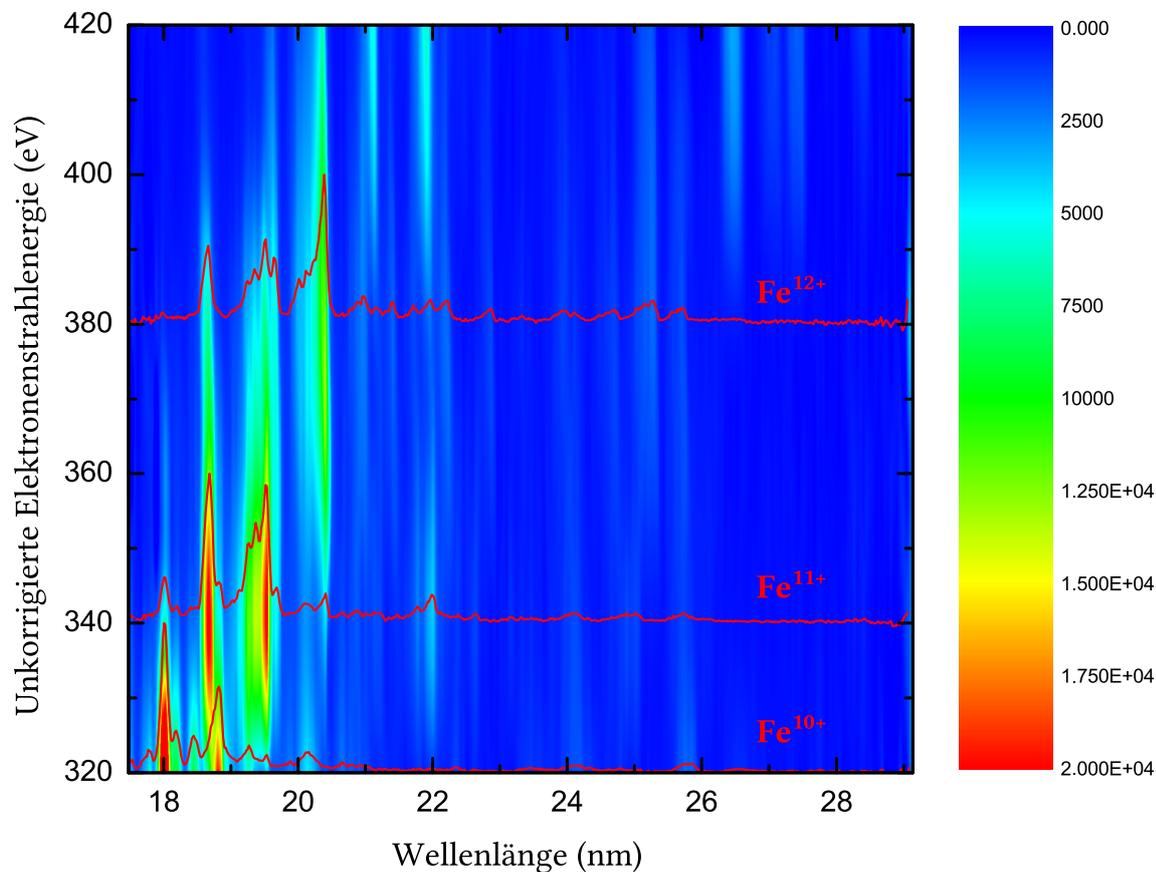


Abbildung 4.10: Zweidimensionales VUV-Spektrum von hochgeladenem Eisen. Die aufgenommenen Spektren sind gegen die unkorrigierte Elektronenstrahlenergie auf der vertikalen Achse aufgetragen. Die Farbskala repräsentiert die Intensität der Linien, die horizontale Achse wurde mit bekannten Wellenlängen von NIST kalibriert. Der glatte Verlauf auf der Achse der Elektronenstrahlenergie resultiert aus einer Interpolation der verwendeten Software (Origin 8.1). Die in rot dargestellten Projektionen sind Repräsentanten der einzelnen aufgenommenen Spektren. Es ist eine Entwicklung der Ladungszustandsverteilung in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie zu sehen, wobei die Linien höherer Wellenlänge mit steigender Energie intensiver werden.

Tabelle 4.1: Kalibrationstabelle mit den identifizierten Spektrellinien und deren Zuordnung zu bekannten Wellenlängen aus der Datenbank von NIST [1].

MCP Position (MPA-Kanäle)	NIST Wellenlänge (nm)	$\Delta\lambda$ (nm)	Ladungszustand
27,42(6)	18,0407(4)	$9,6 \cdot 10^{-3}$	Fe XI
36,06(20)	18,2173(4)	$1,0 \cdot 10^{-2}$	Fe XII
49,71(25)	18,4542(4)	$1,1 \cdot 10^{-2}$	Fe X
60,4(3)	18,6880(4)	$1,1 \cdot 10^{-2}$	Fe XII
67,57(14)	18,8219(4)	$9,9 \cdot 10^{-3}$	Fe XI
88,90(16)	19,2394(4)	$1,0 \cdot 10^{-2}$	Fe XII
94,82(22)	19,3509(4)	$1,0 \cdot 10^{-2}$	Fe XII
101,89(9)	19,5119(4)	$9,7 \cdot 10^{-3}$	Fe XII
144,38(15)	20,3826(4)	$9,9 \cdot 10^{-3}$	Fe XIII
179,16(10)	21,1331(4)	$9,7 \cdot 10^{-3}$	Fe XIV
216,0(6)	21,9136(4)	$1,5 \cdot 10^{-2}$	Fe XIV
416(2)	26,4785(4)	$1,3 \cdot 10^{-2}$	Fe XIV
455(2)	27,4203(4)	$1,3 \cdot 10^{-2}$	Fe XIV

zwei Wellenlängen in Tabelle 4.1 in Frage, da es in der Nähe dieser Linien laut [1] keine weiteren Linien gibt, die dem Ladungszustand Fe^{13+} zugeordnet werden können.

Abbildung 4.14b zeigt die Residuen des Fits, also die Abweichung der Messwerte von der Kalibrationskurve. Es ist eine symmetrische Streuung um die angepasste Kurve zu sehen, wobei die einzelnen Werte bis zu $\pm 0,02$ nm von dieser abweichen. In Abbildung 4.14a ist die Differenz des 1σ -Vertrauensbereiches zum Fit dargestellt, wodurch die Güte des Dispersionspolynoms in Abhängigkeit von der Linienposition sichtbar wird. Im Wellenlängenbereich von 18 nm bis 20 nm befindet sich ein globales Minimum der Abweichung zum Fit, was durch verhältnismäßig viele Messwerte in diesem Bereich erklären lässt. Dieses Konfidenzlevel wird bei der Berechnung des Fehlers der späteren Bestimmung der gemessenen Wellenlängen verwendet.

Für die Bestimmung der Auflösung der Spektrometerkonfiguration wird die Halbwertsbreite einer möglichst alleinstehenden Linie (vgl. Abbildung 4.12) ermittelt. Der Fit ergab eine Halbwertsbreite FWHM von 0,05 nm. Typischerweise beträgt die Auflösung dieses Spektrometers unter Verwendung einer CCD-Kamera ca. 0,02 nm [49, 9]. Die um einen Faktor zwei schlechtere Auflösung lässt sich durch eventuelle Nichtlinearität bzw. Inhomogenitäten der Mikrokanalplatte oder der Delay-Line erklären. Dies könnte zukünftig überprüft werden, indem die dispersive Position am MCP einer bestimmten Linie in

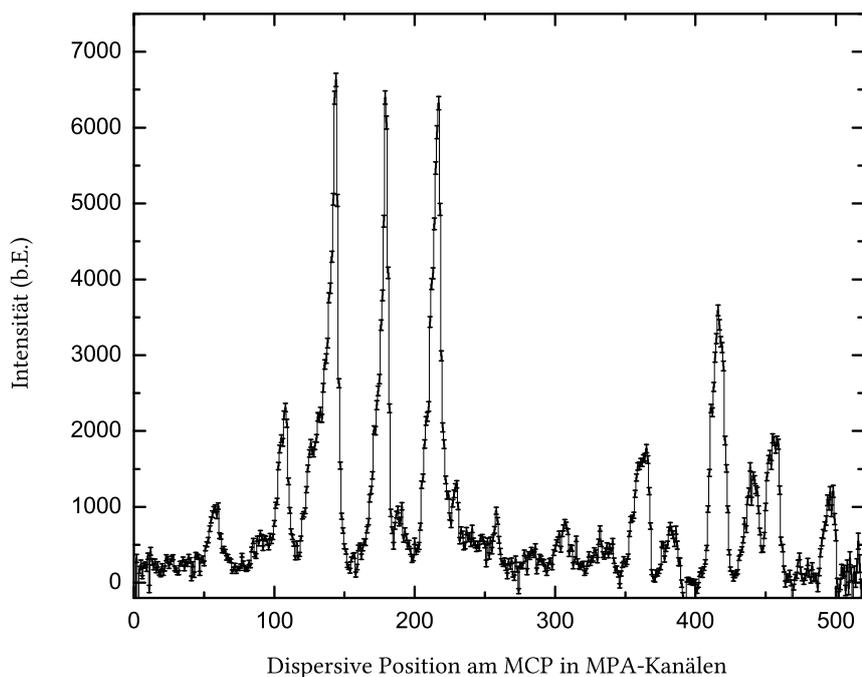


Abbildung 4.11: Spektrum von Fe^{13+} . Es ist zu erkennen, dass die Linienbreite zu höheren Wellenlängen vermutlich aufgrund einer Defokussierung des MCPs zunimmt.

Tabelle 4.2: Fitergebnisse der Anpassung eines Dispersionspolynoms zweiten Grades an die Daten aus Tabelle 4.1.

b (nm/MPA-Kanäle ²)	a (nm/MPA-Kanäle)	c (nm)
$5,97(0,25) \cdot 10^{-6}$	0,019 08(12)	17,507 21(900)

Abhängigkeit der vertikalen Verschiebung des gesamten Detektors aufgetragen wird. Daraus ließe sich zudem eine exaktere Kalibrationskurve extrahieren und die Problematik der Zunahme der Linienbreiten zu höheren Wellenlängen lösen. Dies war allerdings bis zum Zeitpunkt der Fertigstellung der vorliegenden Arbeit nicht mehr möglich.

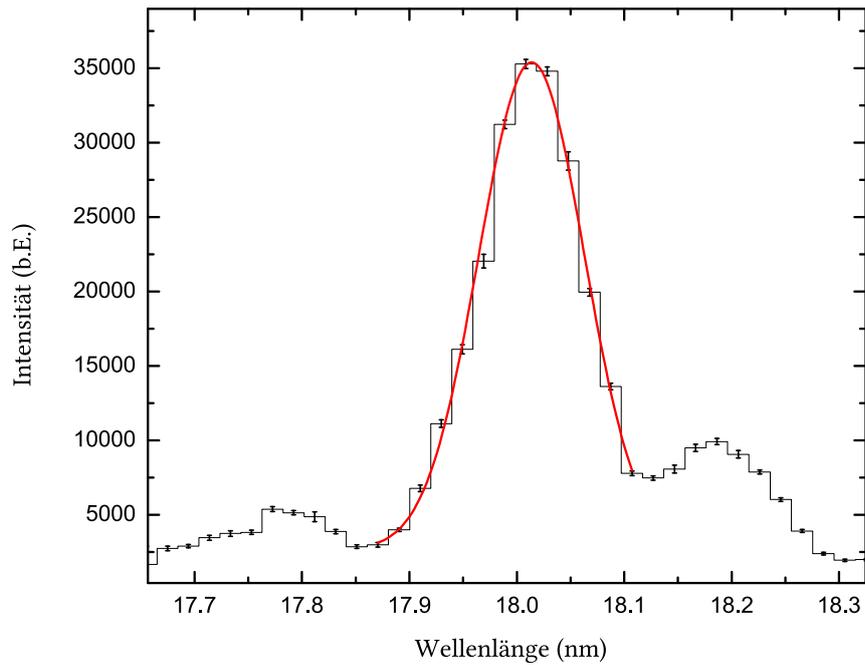


Abbildung 4.12: Anpassung einer Gaußkurven an eine möglichst allein stehende Linie im Spektrum von Fe^{10+} . Die Halbwertsbreite und damit auch die Auflösung wurde auf $\text{FWHM} = 0,05 \text{ nm}$ bestimmt.

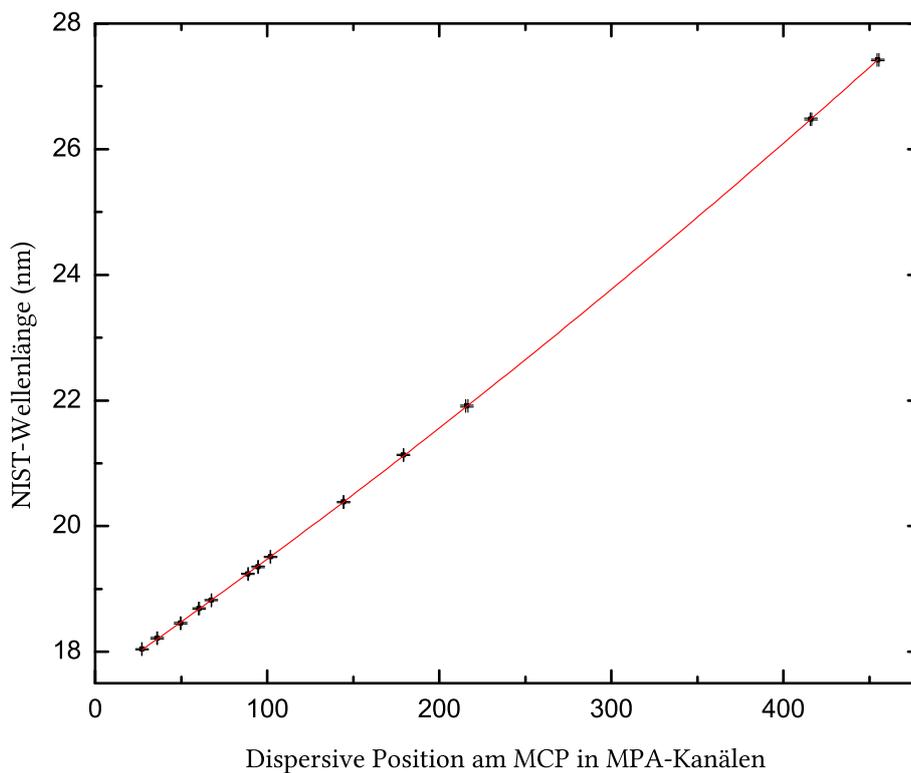


Abbildung 4.13: Auftragung der identifizierten Linien von NIST gegen die experimentelle ermittelte Position am MCP. Die Anpassung eines Dispersionspolynoms zweiten Grades lieferte ein $\chi_{\text{red}}^2 = 1,37$, was auf eine leichte Unterschätzung der Fehler hindeutet.

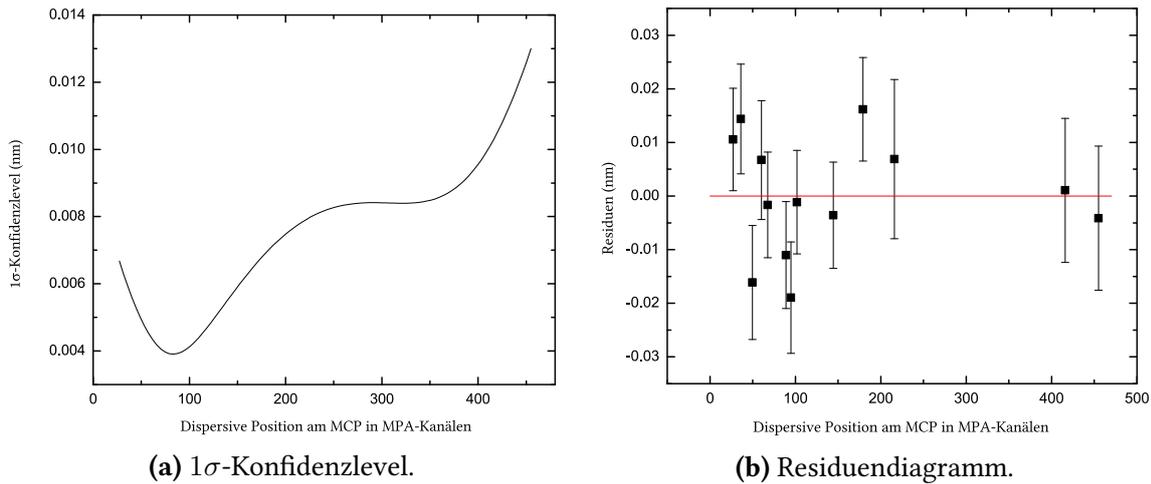


Abbildung 4.14: a) Differenz des 1σ -Konfidenzbandes zum Fit, aufgetragen gegen die Wellenlänge. b) Residuendiagramm des Fits des quadratischen Dispersionspolynoms.

4.4 Elektronenstrahlenergieabhängige VUV-Spektren

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf der Elektronenstrahlenergieabhängigkeit der VUV-Spektren von hochgeladenem Eisen beim Durchfahren der Energie über K-LL-DR-Resonanzen. Zunächst wurde ein zeitlich integriertes Spektrum zur Identifizierung von Spektrallinien hoher Ladungszustände aufgenommen. Dabei wurde bei Variation der Elektronenstrahlenergie und geöffneter Injektion von Eisen ein Röntgenspektrum und simultan dazu ein VUV-Spektrum am MCP aufgenommen. Für die Aufnahme des Untergrundspektrums wurde die Injektion geschlossen, alle anderen Einstellungen blieben unverändert.

In Abbildung 4.15a, 4.15b und 4.16 ist der Prozess des Untergrundabzuges anhand eines Beispielspektrums dargestellt. Die Strukturen in der Mitte und am rechten Rand resultieren aus dem Streulicht aus der EBIT, da diese beim Schließen des Handventils zwischen EBIT und Spektrometer verschwinden und der MCP homogen ausgeleuchtet ist.

In Abbildung 4.17a, 4.17b und 4.18 sind die Projektionen der zweidimensionalen Spektren 4.15a, 4.15b und 4.16 auf die dispersive Achse zu sehen. Die drei Linien bei etwa 82 Kanälen, 364 Kanälen und 416 Kanälen können Eisen zugeordnet werden. Die Restgaslinie bei Kanal 300 verschwindet nach dem Untergrundabzug und kann der Spektrallinie von O IV mit $\lambda = 23,836 \text{ nm}$ [21] zugeordnet werden.

Für die Aufnahme der Röntgen- und VUV-Spektren wurde die Kathode auf einem Potential von -2 kV konstant gehalten und die gemeinsame Spannung an den Driftröhren von

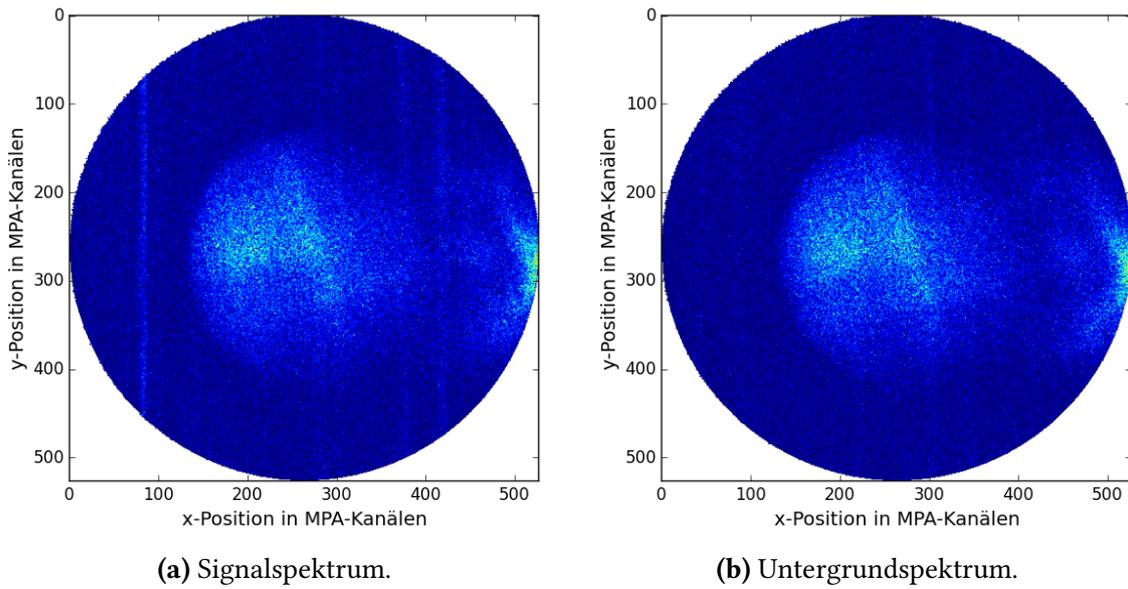


Abbildung 4.15: **a)** Beispielspektrum von hochgeladenem Eisen beim Durchfahren der Elektronenstrahlenergie über die DR-Resonanzen. **b)** Untergrundspektrum mit geschlossener Eiseninjektion und ansonsten unveränderten Einstellungen.

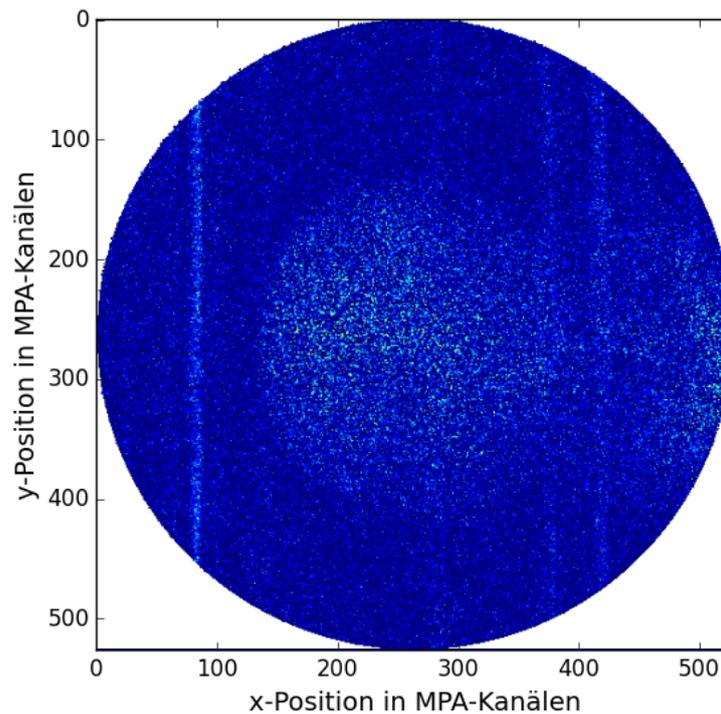
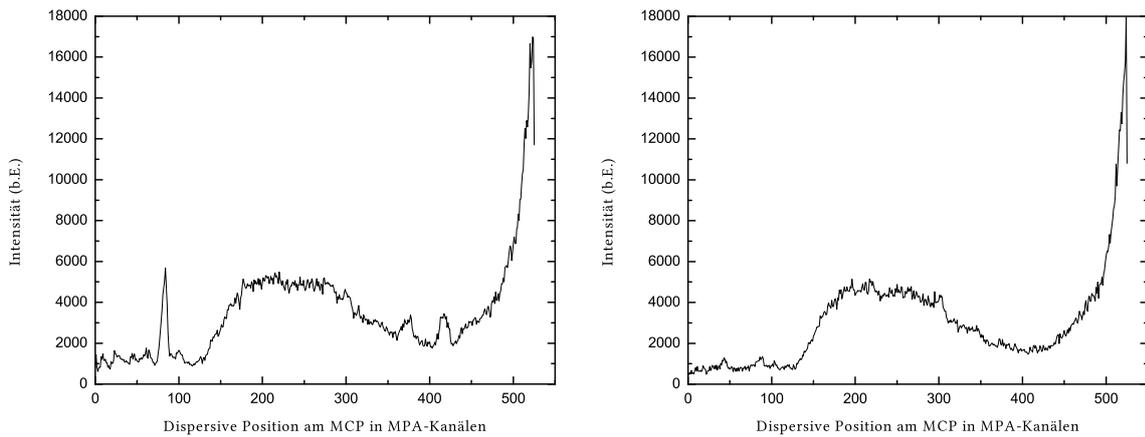


Abbildung 4.16: Untergrundbereinigtes Spektrum. Es sind drei Linien zu erkennen, die hochgeladenem Eisen zugeordnet werden konnten.



(a) Projektion des Signalspektrums 4.15a.

(b) Projektion des Untergrundspektrums 4.15b.

Abbildung 4.17: a) Beispielspektrum von hochgeladenem Eisen beim Durchfahren der Elektronenstrahlenergie über die DR-Resonanzen. b) Untergrundspektrum mit geschlossener Eiseninjektion und ansonsten unveränderten Einstellungen.

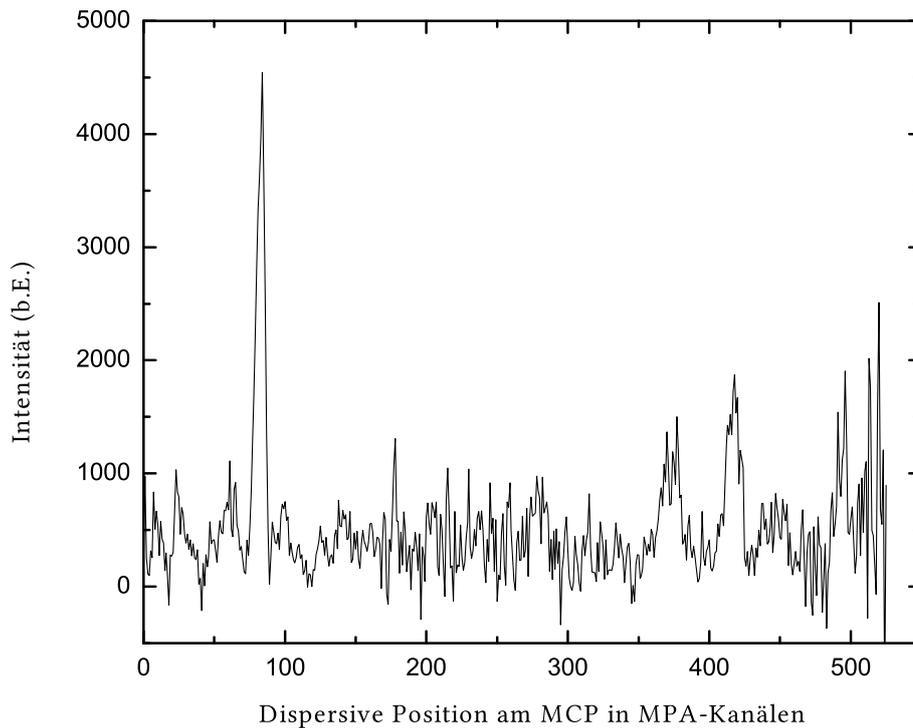
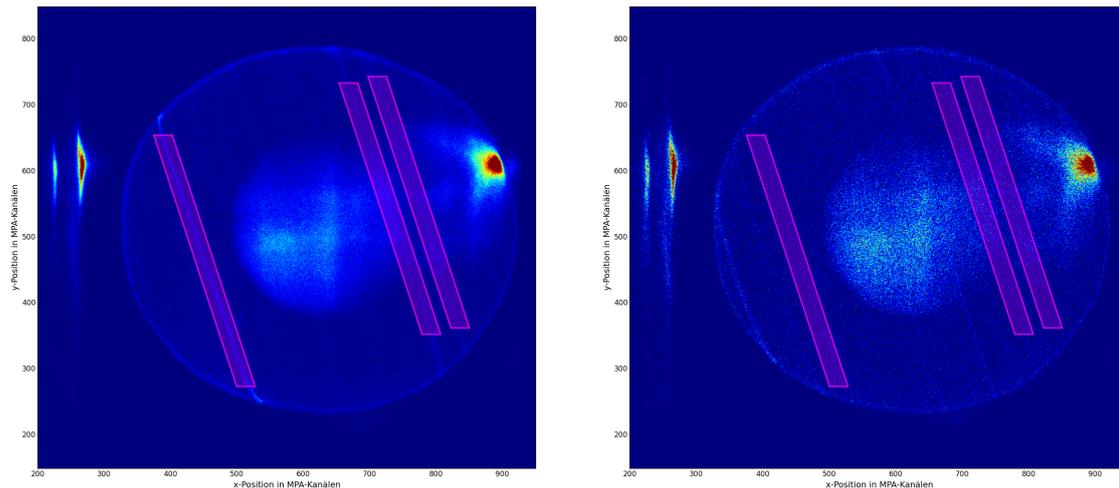


Abbildung 4.18: Projektion des untergrundbereinigten Spektrums 4.16.

Tabelle 4.3: Falleneinstellungen an den Driftröhren in Volt. Die mit G1-G4 bzw. C1-C4 gekennzeichneten Driftröhren sind die Elektroden auf der Kanonen- bzw. Kollektorseite. CDT ist die zentrale Fallenelektrode.

G1 (V)	G2 (V)	G3 (V)	G4 (V)	CDT (V)	C1 (V)	C2 (V)	C3 (V)	C4 (V)
30	30	50	40	0	40	50	30	10



(a) Signalspektrum mit ROIs.

(b) Untergrundspektrum mit ROIs.

Abbildung 4.19: Polygonförmige ROIs (rot) gleicher Form und gleichem Flächeninhalt um die Position der Linien.

2,55 kV bis 3,2 kV abwechselnd mit einer steigenden und einer fallenden Rampe variiert. Die Rampendauer betrug dabei 110 s bei einem am Kollektor gemessenen Strahlstrom von 120 mA. Die Falleneinstellungen an den Driftröhren sind in Tabelle 4.3 aufgeführt. Nach Identifizierung der Spektrallinien der hohen Ladungszustände von Eisen im VUV-Spektrum wurden polygonförmige ROIs gleicher Form und gleichem Flächeninhalt um die Position dieser drei Linien gelegt (rote Markierungen in Abbildung 4.19). Es wurden drei separate Histogramme zu den ROIs erstellt, bei denen jedes Ereignis, welches innerhalb der jeweiligen ROI stattgefunden hat, gegen die zugehörige Elektronenstrahlenergie aufgetragen wurde. Die gleiche Prozedur wurde für den Untergrund durchgeführt und gegebenenfalls auf die Aufnahmezeit des Signalspektrums normiert. Die Histogramme wurden anschließend subtrahiert. Es entstand jeweils ein Spektrum, bei dem die Intensität der ausgewählten Linie gegen die Elektronenstrahlenergie aufgetragen ist.

5 Ergebnisse

5.1 Rekombinationsspektren

Die Projektion des aufgenommenen Röntgenspektrums ist in Abbildung 5.1 zu sehen. Es ist zu erkennen, dass nur einige K-LL-Resonanzen identifizierbar sind. Die schlechte Auflösung resultiert aus einem hohen Strahlstrom von 120 mA und einer relativ tiefen Falle von ca. 40 V. Diese Einstellungen wurden bewusst so gewählt, um die Zählrate am SDD zu erhöhen und eine möglichst hohe Statistik zu erreichen. Die Auflösung ist dabei zweitrangig, da das DR-Spektrum nur ein Mittel zur Diagnostik ist. Zur genaueren Identifizierung der Resonanzen kann ein Spektrum höherer Auflösung als Referenz verwendet werden.

5.2 VUV-Spektren

Zunächst wird zur Identifizierung der simultan zum Röntgenspektrum aufgenommenen VUV-Spektrallinien eine Projektion der zeitlich integrierten Spektren, wie sie in Abbildung 5.2 zu sehen ist, exemplarisch erstellt.

Es wurde ein Untergrundspektrum mit den selben Einstellungen auf die Gesamtdauer der Signalmessung normiert und vom Signal subtrahiert. Da beide Messungen in einem zeitlichen Abstand von ca. zwei Tagen entstanden sind, könnten sich einige Parameter durch äußere Einflüsse geändert haben, weshalb die Position und Ausdehnung der Ionenwolke nicht reproduzierbar war. Dadurch war ein sauberer Untergrundabzug wie in Abbildung 4.18 nicht möglich.

Das Spektrum in Abbildung 5.1 wurde mit der Kalibrationskurve aus Abbildung 4.13 kalibriert. Durch Anpassung von Gaußkurven an die Resonanzlinien wurden die Schwerpunkte der Resonanzen bestimmt, die in Tabelle 5.1 zusammengefasst sind.

Die Wellenlängen der ermittelten Linien wurden mit elektrisch dipol-erlaubten, beobachteten Linien aus der Datenbank von NIST [1] in einem Bereich von ± 1 nm verglichen. Diese Werte sind in Tabelle 5.2 dargestellt.

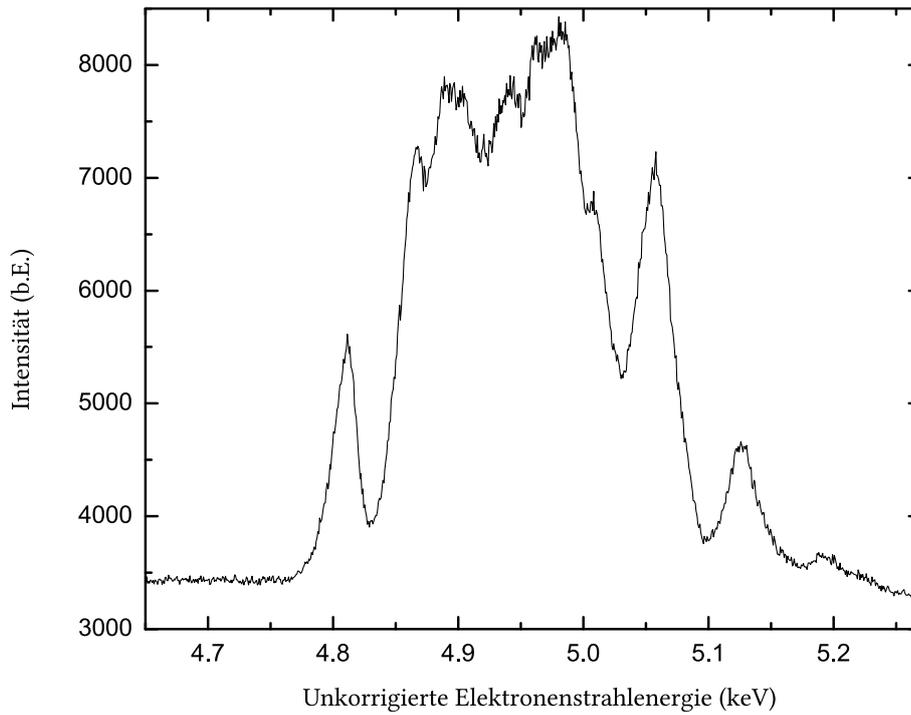


Abbildung 5.1: Projektion des KLL-DR-Spektrums von hochgeladenem Eisen bei einem Strahlstrom von 120 mA.

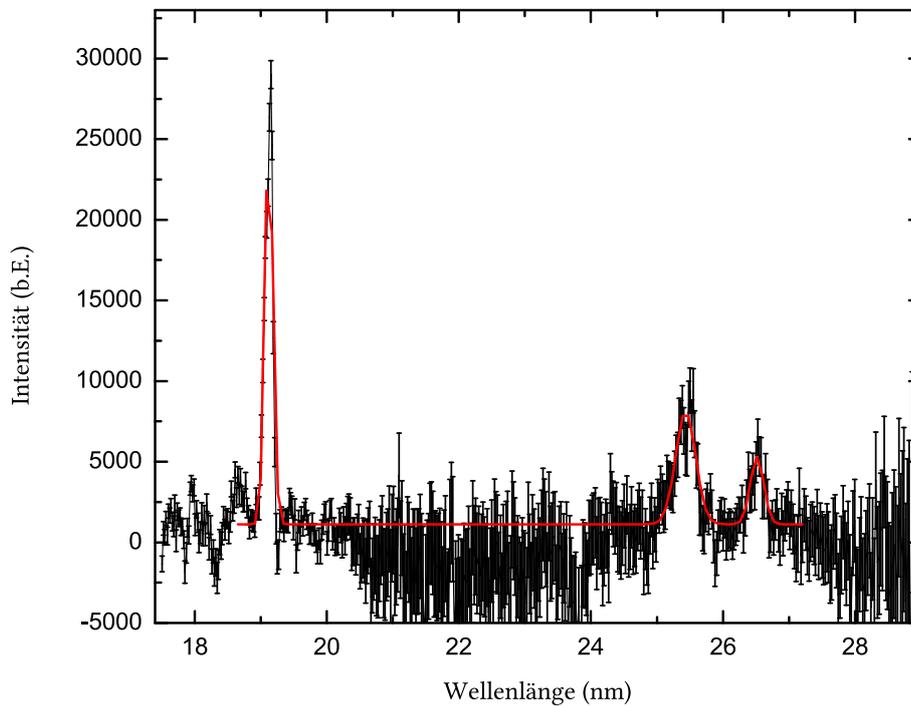


Abbildung 5.2: Projektion des zeitlich integrierten VUV-Spektrums, welches simultan zum Röntgenspektrum in Abbildung 5.1 aufgenommen wurde.

Tabelle 5.1: Ermittelte Wellenlängen aus Spektrum 5.2. Dieses wurde mithilfe der Kalibrationskurve aus 4.13 kalibriert.

Nr.	Wellenlänge (nm)	FWHM (nm)	λ (NIST) (nm)	$\lambda_{\text{NIST}} - \lambda$ (nm)
<i>L1</i>	19,123(4)	0,14	19,2028(4)	$0,080 \pm 0,004$
<i>L2</i>	25,44(2)	0,36	25,5113(4)	$0,07 \pm 0,02$
<i>L3</i>	26,51(2)	0,25	26,3765(4)	$-0,13 \pm 0,02$

Linie *L2* von Fe^{23+} aus Tabelle 5.1 wurde bereits von S. W. Epp bei einem Laserspektroskopie-Experiment an FLASH [22] untersucht und auf $\lambda_{L2} = (25,5045 \pm 0,0006_{\text{stat.}})$ nm bestimmt, die mit Linie 9) in Tabelle 5.2 identifiziert werden konnte. Vergleicht man die experimentell ermittelten Werte mit den aus einer Datenbank, so stellt man für alle Linien signifikante Abweichungen fest. Die Zuordnung der Linien und die Abweichung soll im Folgenden Unterkapitel diskutiert werden.

5.2.1 Elektronenstrahlenergieabhängige VUV-Spektren

Die Intensität der Linien *L1* bis *L3* wurde, wie in Kapitel 4.4 beschrieben, gegen die Elektronenstrahlenergie aufgetragen. Es entsteht nun ein Spektrum bei dem eine Abhängigkeit der Intensität der Linien von der Elektronenstrahlenergie zu beobachten ist (vgl. Abbildung 5.3). Die Erhöhung der Intensität der Linien *L1* und *L2* steigt bei einer (unkorrigierten) Elektronenstrahlenergie an, bei der sich heliumartige DR-Resonanzen befinden, die mit dem SDD beobachtet wurden (vgl. Abbildung 4.9). Beim unteren Spektrum befindet sich die Intensitätserhöhung an der Position der lithiumartigen DR-Resonanzen. Es ist insgesamt zu erkennen, dass diese drei Linien im VUV-Spektrum jederzeit vorhanden sind, aber bei gewissen Elektronenstrahlenergien intensiver erscheinen. Der energieunabhängige Untergrund wird durch Elektronenstoßanregung, der stark energieabhängige Teil hingegen durch resonante Rekombination.

An die Datensätze wurden mehrere Gaußkurven mit der gleichen Breite wie im Röntgenspektrum von ca. $\text{FWHM} = 25$ eV angepasst, wobei als Startwert der Iteration der Anpassung die theoretischen Positionen der jeweiligen DR-Resonanzen verwendet wurden. Beim Spektrum von *L3* konnte aufgrund der geringen Ereigniszahl keine Anpassung durchgeführt werden. Dennoch ist eine eindeutige Intensitätssteigerung an der Position der lithiumartigen DR-Resonanzen zu erkennen. Beim Durchfahren der Elektronenstrahlenergie über eine heliumartige Resonanz rekombiniert ein heliumartiges- zu einem

Tabelle 5.2: Wellenlängen der Spektrallinien von hohen Ladungszuständen von Eisen in der Nähe der experimentell ermittelten Linien aus einer Datenbank [1]. Die beobachteten Linien können Linie 3), 9) und 10) zugeordnet werden. Diese Übergänge sind im Vergleich zu den anderen aufgelisteten relativ wahrscheinlich, da sie in den Grundzustand erfolgen. Der Fehler auf die Wellenlängen der Linien der Datenbank beträgt 0,0004 nm.

Nr.	Wellenlänge (nm)	A_{ki} (s^{-1})	E_i (eV)	E_k (eV)	Unteres Level Config.	J_{unten}	Oberes Level Config.	J_{oben}	Ladungs- zustand
1)	18,010	$4,46 \cdot 10^9$	58,4933	127,357	$1s^2 2s^2 2p$	2	$1s^2 2p^2$	1	Fe XXIII
2)	18,157	$6,8 \cdot 10^9$	135,8458	204,115	$2s^2 p^3$	1	$2p^4$	2	Fe XXI
3)	19,2028	$4,32 \cdot 10^9$	0	64,5656	$1s^2 2s$	1/2	$1s^2 2p$	3/2	Fe XXIV
4)	21,730	k.A.	0	57,0563	$2s^2 2p$	1/2	$2s^2 p^2$	3/2	Fe XXII
5)	22,133	$4,61 \cdot 10^9$	93,2869	149,302	$1s^2 2s^2 2p$	1	$1s^2 2p^2$	2	Fe XXIII
6)	24,207	$3,6 \cdot 10^7$	9,1564	60,3741	$2s^2 2p^2$	1	$2s^2 p^3$	2	Fe XXI
7)	24,719	$8,7 \cdot 10^7$	0	50,1578	$2s^2 2p$	1/2	$2s^2 p^2$	1/2	Fe XXII
8)	25,317	$7,0 \cdot 10^7$	14,6631	63,6361	$2s^2 2p$	3/2	$2s^2 p^2$	5/2	Fe XXII
9)	25,5113	$1,81 \cdot 10^9$	0	48,5997	$1s^2 2s$	1/2	$1s^2 2p$	1/2	Fe XXIV
10)	26,3765	$4,8 \cdot 10^7$	0	47,0055	$1s^2 2s^2$	0	$1s^2 2s^2 p$	1	Fe XXIII
11)	27,052	$3,5 \cdot 10^7$	14,5500	60,3741	$2s^2 2p^2$	2	$2s^2 p^3$	2	Fe XXII

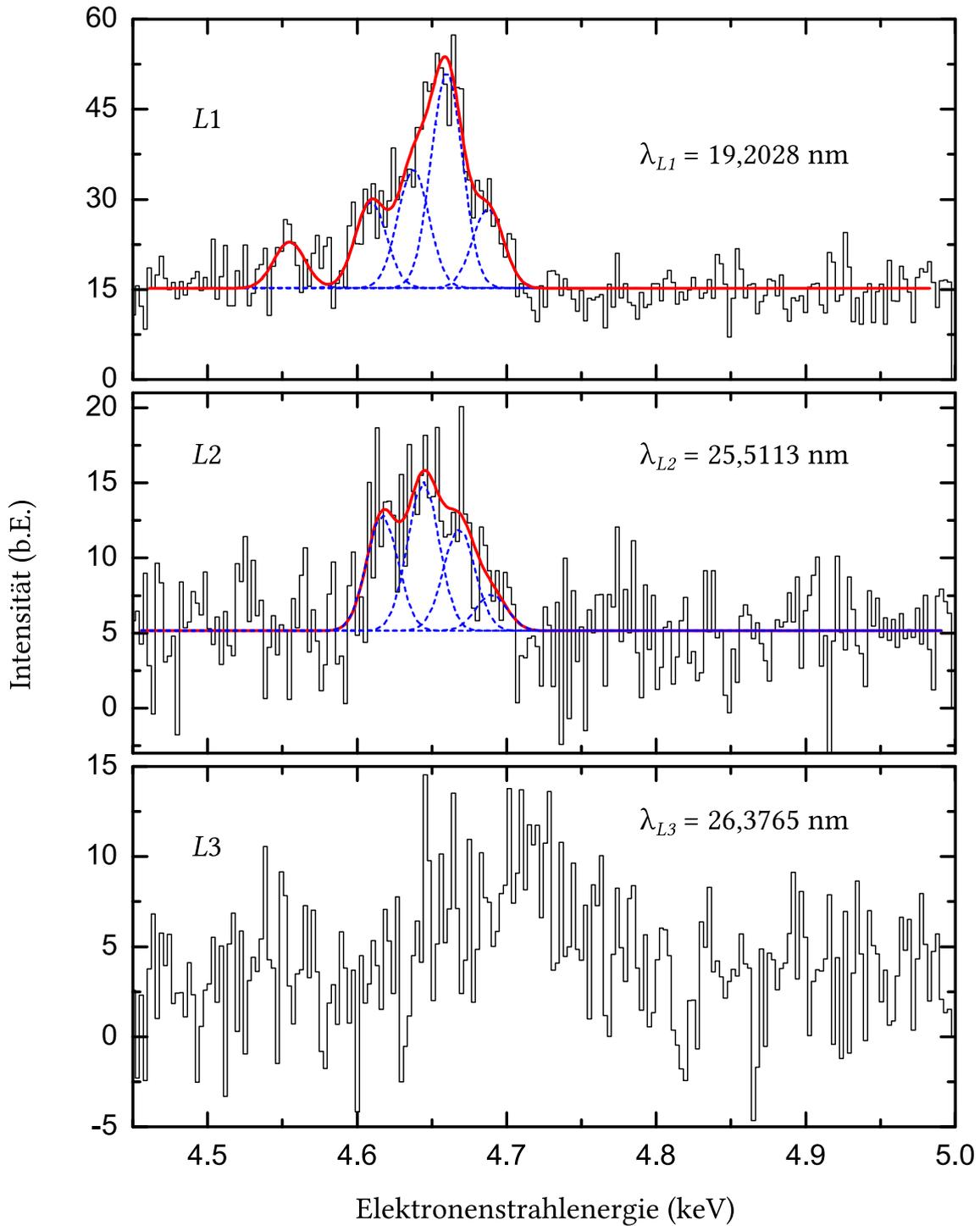


Abbildung 5.3: Abhängigkeit der Intensität der drei Spektrallinien von hochgeladenem Eisen am MCP aus Abbildung 5.1 von der Elektronenstrahlenergie. Die Spektren sind dabei vierfach durch Mittelwertbildung gruppiert. Die Resonanzen in den oberen zwei Spektren entwickeln sich beim Durchfahren der Elektronenstrahlenergie über eine heliumartige DR-Resonanz. Die Linie im unteren Spektrum taucht bei einer lithiumartigen DR-Resonanz auf. Die blauen, gestrichelten Kurven sind Anpassungen von Gaußkurven gleicher Breite von 25 eV an die Datensätze, die rote durchgezogene Kurve deren Überlagerung.

lithiumartigen Ion. Das würde dem Ladungszustand Fe^{23+} der Linien 3) und 9) aus Tabelle 5.2 entsprechen. Zudem handelt es sich dabei um Übergänge von einem angeregten- in den Grundzustand mit einem relativ großen Einstein-Koeffizienten A_{ki} . In der Nähe dieser Linien befinden sich keine in Frage kommende Spektrallinien hoher Ladungszustände. Linien niedriger Ladungszustände können ausgeschlossen werden, da aufgrund der relativ hohen Elektronenstrahlenergie die Ladungszustandsverteilung in Richtung hoher Ladungszustände verschoben wird. Dafür ist die Intensität der detektierten Linien zu hoch. Restgaslinien von beispielsweise Barium und Wolfram von der Kathode, oder Stickstoff, Kohlenstoff und Sauerstoff können ebenfalls ausgeschlossen werden, da die beobachteten drei Linien bei geschlossener Injektion verschwinden. Die gleichen Argumente sind für Linie 10) aus Tabelle 5.2 gültig, bei der ein lithiumartiges Ion zu einem berylliumartigen Ion auf der lithiumartigen DR-Resonanz rekombiniert.

Problematisch ist allerdings die signifikante Abweichung der ermittelten Wellenlängen von den Literaturwerten, bei Annahme der Korrektheit der diskutierten Zuordnung der Spektrallinien. Dies ist durch eine große zeitliche Differenz zwischen Kalibrations- und Signalmessung erklärbar. Zwischen den beiden Messungen wurde der Elektronenstrahl ausgeschaltet. Zudem wurden Wartungsarbeiten am Injektionssystem durchgeführt, die eventuell zu einer mechanischen Verschiebungen des VUV-Detektors geführt haben könnte.

Mit den oben genannten Argumenten ist also die Zuordnung wahrscheinlich korrekt. Allerdings würde dies bedeuten, dass die durchgeführte Kalibrationsmessung nicht verwertbar ist und deshalb wiederholt werden müsste, was aus zeitlichen Gründen nicht mehr möglich war.

Für eine bessere Übersicht der Ergebnisse sind in Abbildung 5.4 die aufgenommenen Röntgenspektren inklusive Theorie und die simultan aufgenommenen Intensitäten der Linien $L1$ bis $L3$ im VUV-Spektrum in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie zusammenfassend aufgetragen.

Die Röntgenspektren wurden mithilfe von Berechnungen der Positionen der resonanten Rekombination [26] kalibriert. Dabei wurde aus der MCDF-Rechnung die Resonanzstärke der einzelnen DR-Resonanzen gegen die kinetische Energie der Elektronen aufgetragen, bei der diese Rekombinationen resonant stattfinden können. Diese Linien wurden jeweils mit einer Gaußkurve mit einer Breite von $\text{FWHM} = 10 \text{ eV}$ gefaltet um ein synthetisches Spektrum zu generieren. Dabei sind die Rekombinationen verschiedener Ladungszustände farblich kodiert. Die unteren drei Spektren entnommen aus den Datensätze aus 5.3. Da diese simultan zum Röntgenspektrum aufgenommen wurden, konnten die

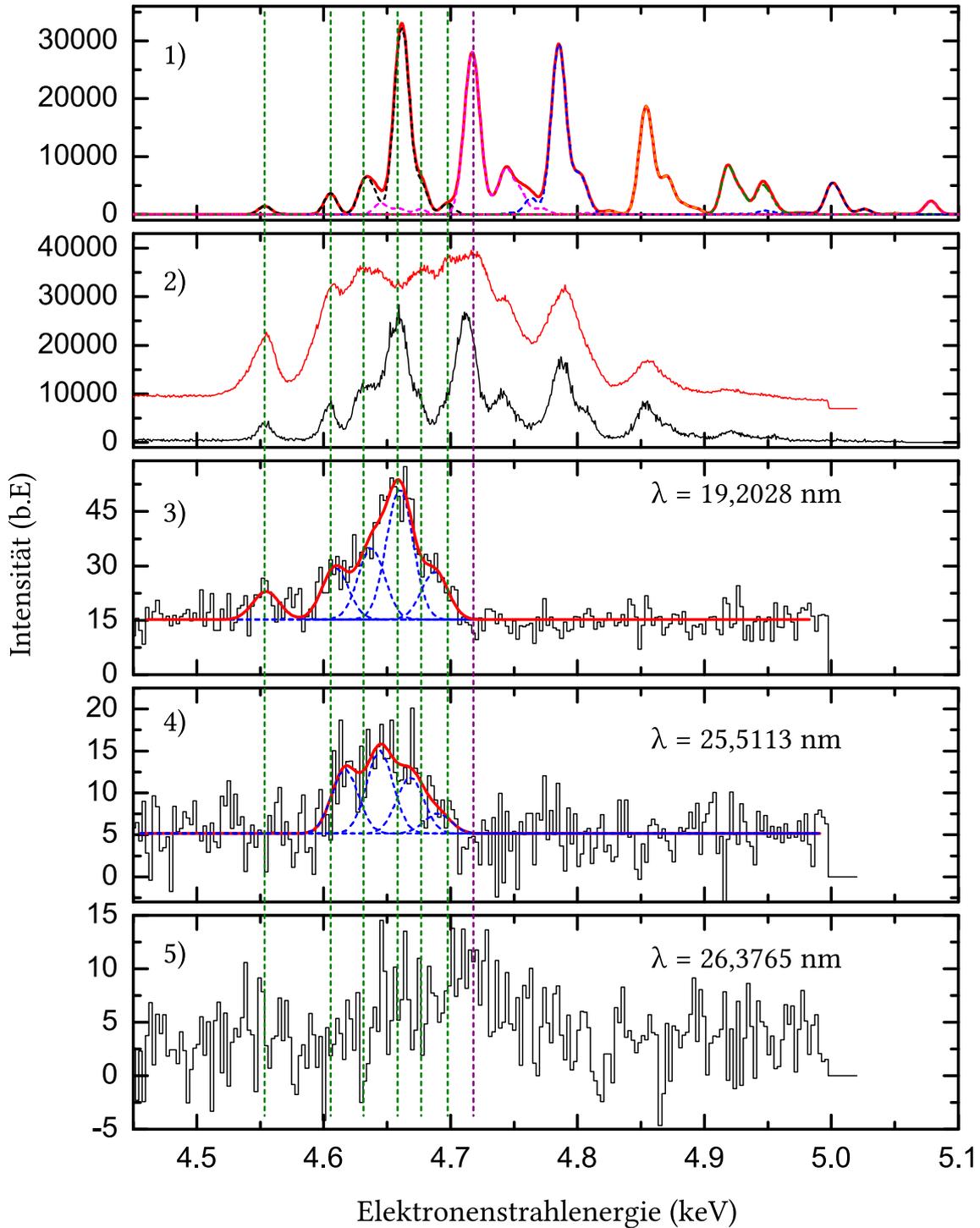


Abbildung 5.4: Spektrum 1: Theoretisches Rekombinationsspektrum von hochgeladenem Eisen im Röntgenbereich, berechnet mit MCDF [26]. 2) Gemessenen Röntgenspektren. In rot mit schlechter Auflösung, aber hoher Statistik. In schwarz mit guter Auflösung als Referenz. 3-4: Simultan gemessene Intensität von drei verschiedenen Linien $L1$, $L2$ und $L3$ im VUV-Bereich. Die vertikalen, gestrichelten grünen (violetten) Linien deuten die Position der theoretischen heliumartigen (lithiumartigen) DR-Resonanzen an.

Elektronenstrahlenergien mit den theoretischen Rekombinationsspektren kalibriert werden. Es ist der Intensitätsverlauf als Funktion der Elektronenstrahlenergie der Linien $\lambda_{L1,NIST} = 19,2028 \text{ nm}$, $\lambda_{L2,NIST} = 25,5113 \text{ nm}$ und $\lambda_{L3,NIST} = 26,3765 \text{ nm}$ zu sehen. Diese Spektren sind durch Mittelwertbildung vierfach gruppiert („gebinnt“). Dabei muss eine Vorgabe an den Fit gemacht werden, dass die Breite jeder einzelnen Kurve der Breite der Resonanzen im Röntgenspektrum entspricht. Aus den Anpassungen konnten die Positionen der Resonanzen x_c und deren Fehler Δx_c extrahiert werden. In Tabelle 5.3 sind die Positionen aller ermittelten Resonanzen dieser drei Spektren präsentiert. Die Halbwertsbreite der Resonanzen beträgt $\text{FWHM} = 25 \text{ eV}$. Die Position dieser Resonanzen wurde mit den theoretischen Positionen verglichen. Beim Durchfahren der Elektronenstrahlenergie über die heliumartigen DR-Resonanzen steigt die Intensität der Spektrallinien des lithiumartigen Ladungszustandes. Bei den lithiumartigen Resonanzen steigt die Intensität der berylliumartigen Spektrallinie. Diese theoretischen Resonanzpositionen sind mit vertikalen, gestrichelten Linien angedeutet. Der Übersicht halber wird auf die graphische Darstellung der Positionen der einzelnen ermittelten Resonanzen und deren Fehlerbereich verzichtet und nur tabellarisch in Tabelle 5.3 dargestellt.

Die relativ großen Fehler bei Linie 6) bis 10) resultieren aus der geringen Anzahl Ereignisse. Die fehlenden Werte bei den lithiumartigen Resonanzen konnten nicht ermittelt werden, da der Fit aufgrund der geringen Zählrate nicht konvergierte. Eine eindeutige Korrelation der Intensität der Linie $L3$ von Fe^{22+} mit der Elektronenstrahlenergie an der Position der lithiumartigen DR-Resonanzen ist dennoch zu erkennen.

Die Erhöhung der Intensität der Spektrallinien resultiert zum einen aus der Rekombination der heliumartigen Eisenionen auf der DR-Resonanz und der damit zusammenhängenden Erhöhung der Anzahl an lithiumartigen Ionen, die durch Elektronenstoßanregung fluoreszieren. Zum anderen könnte es sein, dass ein doppelt angeregter Zustand nicht direkt in den Grundzustand zerfällt, sondern einen Zwischenzustand besetzt, der wiederum durch Zerfall in den Grundzustand ein VUV-Photon emittiert.

Zunächst sei in Abbildung 5.5a ein Grotrian-Diagramm von Fe^{23+} mit einigen exemplarischen dipol-erlaubten Übergängen dargestellt. Der Übersicht halber wurden nur einige ausgewählte Übergänge mit Pfeilen angedeutet. Die Niveaus entsprechen den theoretischen Werten aus einer Datenbank [1]. In Abbildung 5.5b ist der Bereich der VUV-Übergänge vergrößert dargestellt, die Achse nach dem Achsenbruch ist logarithmisch aufgetragen. Dabei ist die Energie der Niveaus gegen die Gesamtdrehimpulsquantenzahl aufgetragen. Die Spektrallinien im VUV-Bereich, die Fe^{23+} zugeordnet werden konnten, sind die Übergänge von $1s^2 2p$ mit einem Gesamtdrehimpuls von $J = 1/2$ in den Grund-

Tabelle 5.3: Resonanzenergien der Linien $L1$ bis $L3$ aus Abbildung 5.3 und Vergleich zu den stärksten theoretischen Positionen [26] der korrespondierenden DR-Resonanzen im Röntgenbereich.

Nr.	DR-Resonanz	Rekombiniertes Ion	Ermittelte Resonanzenergie (eV)	Theorie (MCDF) (eV)
1)	He-artig	Fe^{23+}	4555(3)	4553, 66
2)	He-artig	Fe^{23+}	4609(2)	4605, 36
3)	He-artig	Fe^{23+}	4638(2)	4638, 82
4)	He-artig	Fe^{23+}	4660(1)	4658, 09
5)	He-artig	Fe^{23+}	4688(2)	k.A. ¹
6)	He-artig	Fe^{23+}	4617(3)	4605, 36
7)	He-artig	Fe^{23+}	4644(4)	4638, 82
8)	He-artig	Fe^{23+}	4668(7)	4663, 94 ¹
9)	He-artig	Fe^{23+}	4690(13)	4697, 64 ¹
10)	Li-artig	Fe^{22+}	k.A. ²	4718, 09

¹ Diese Linie ist vermutlich eine Überlagerung von mehreren, nahe beieinander liegenden theoretischen Resonanzen, was bei dieser Messung nicht aufgelöst werden konnte.

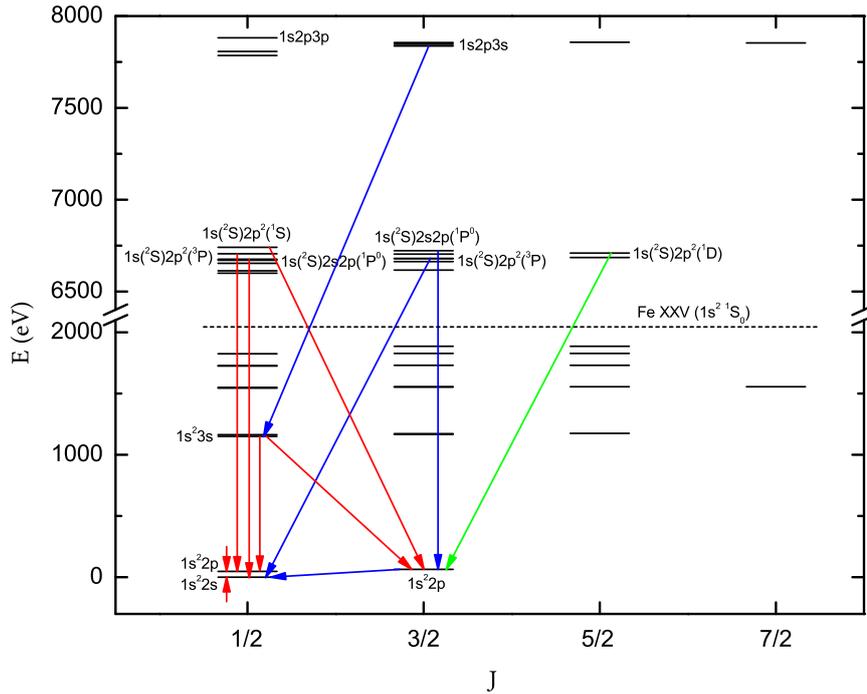
² Eine Anpassung an den Datensatz war aufgrund der geringen Ereigniszahl nicht möglich. Allerdings ist eine deutliche Erhöhung der Intensität an der Position der lithiumartigen DR-Resonanzen zu erkennen.

zustand $1s^22s$ mit einer Wellenlänge von $\lambda = 19,2028$ nm und von $1s^22p$ mit $J = 3/2$ nach $1s^22s$ mit einer Wellenlänge von $\lambda = 25,5113$ nm. Die Übergänge oberhalb der Ionisationsschwelle des betrachteten Ions (gestrichelte Linie) sind doppelt angeregte und somit auch autoionisierende Zustände. Die Übergänge können hierbei direkt oder über Zwischenzustände unter Emission eines Röntgenphotons in den Grundzustand erfolgen. Aufgrund der relativ schlechten Auflösung der Photonenenergie von $\text{FWHM} = 234(4)$ eV des Röntgendetektors können diese K-L-Übergänge nicht eindeutig voneinander unterschieden werden.

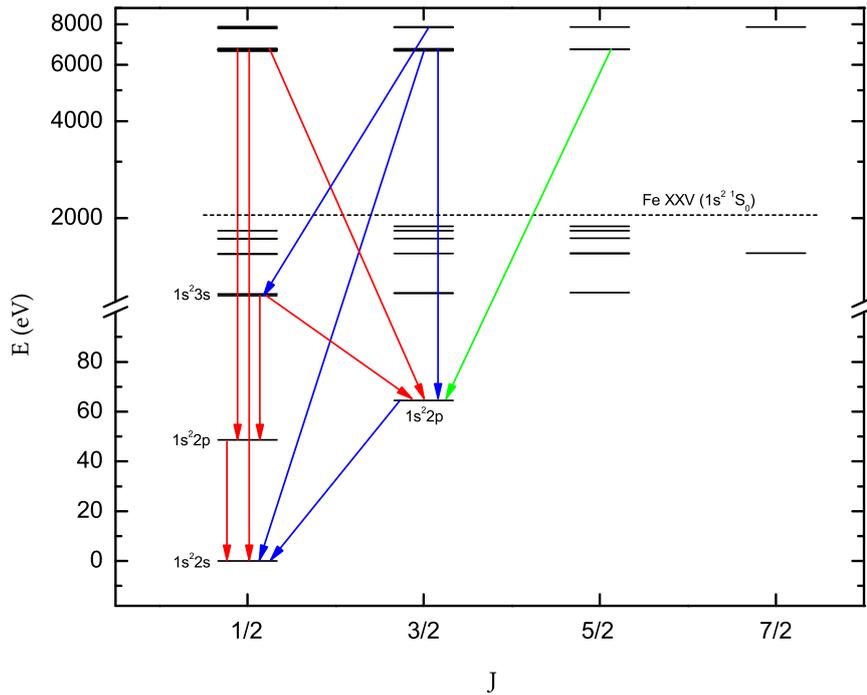
Die Übergänge aus den Niveaus zwischen 7500 eV und 8000 eV konnten nicht beobachtet werden, da der Abtastungsbereich der Elektronenstrahlenergie auf die KLL-Resonanzen ausgelegt wurde. Um diese Zustände dennoch anzuregen, müsste die Elektronenstrahlenergie erhöht werden.

Der Bereich, der für die vorliegenden Messungen interessant ist, sind die doppelt angeregten und autoionisierenden Zustände. In Abbildung 5.6 sind die theoretisch berechneten [11], doppelt angeregten Zustände von Fe^{23+} , nummeriert von 4) bis 11) (nicht maßstabsgetreu) dargestellt. Diese wurden den theoretischen, vertikal aufgetragenen heliumartigen DR-Resonanzen [26] zugeordnet. Level 2) und 3) ist der Zwischenzustand, der unter Emission eines VUV-Photons in den Grundzustand (Level 1)) zerfällt. Diese drei Niveaus haben allerdings keine Relation zur vertikalen Achse des Diagramms und sind hier nur zur besseren, aber dennoch vollständigen Übersicht dargestellt. Des Weiteren sind die mit FAC (Abkürzung für: flexible atomic code) berechneten [24] Verzweungsverhältnisse (engl.: branching ratios) der einzelnen Niveaus aufgezeigt, die die Wahrscheinlichkeit eines Zerfalls in ein anderes Niveau beschreiben. Es ist zu erkennen, dass von den doppelt angeregten Zuständen lediglich Level 5) und 6) direkt in den Grundzustand zerfallen können. Diese beiden als r und t bezeichneten Übergänge wurden bereits eingehend experimentell untersucht [46, 34]. Die anderen Niveaus müssten somit über Zwischenzustände in den Grundzustand zerfallen. Die Wellenlängen der Übergänge aus den Zwischenzuständen in den Grundzustand liegen im VUV-Bereich und betragen nach der Theorie [1] $\lambda_{L1} = 19,203$ nm und $\lambda_{L2} = 25,511$ nm, was den zugeordneten Spektrallinien $L1$ bis $L3$ aus Abbildung 5.1 entspricht.

Betrachtet man das zweidimensionale Spektrum der K-LL-Resonanzen in Abbildung 4.7, so erkennt man, dass die Region erhöhter Intensität bei einer (unkorrigierten) Elektronenstrahlenergie von etwa 4,5 keV energetisch etwas tiefer liegt, als die benachbarten Resonanzen. Diese Region entspricht den Übergängen aus Level 4) in Level 3) bzw. Level 2) in Abbildung 5.6. Ein Übergang in den Grundzustand ist aufgrund von $\Delta L = 0$



(a) Levelschema von Fe^{23+} .



(b) Levelschema von Fe^{23+} in logarithmischer Darstellung.

Abbildung 5.5: **a)** Grotrian-Diagramm für Fe^{23+} in normaler Darstellung. Dabei ist die Energie der Niveaus gegen die Gesamtdrehimpulsquantenzahl aufgetragen. Es sind einige exemplarische elektrische Dipolübergänge mit Pfeilen angedeutet. **b)** Grotrian-Diagramm für Fe^{23+} in logarithmischer Darstellung nach dem Achsenbruch. Der Bereich der VUV-Übergänge ist hierbei vergrößert dargestellt.

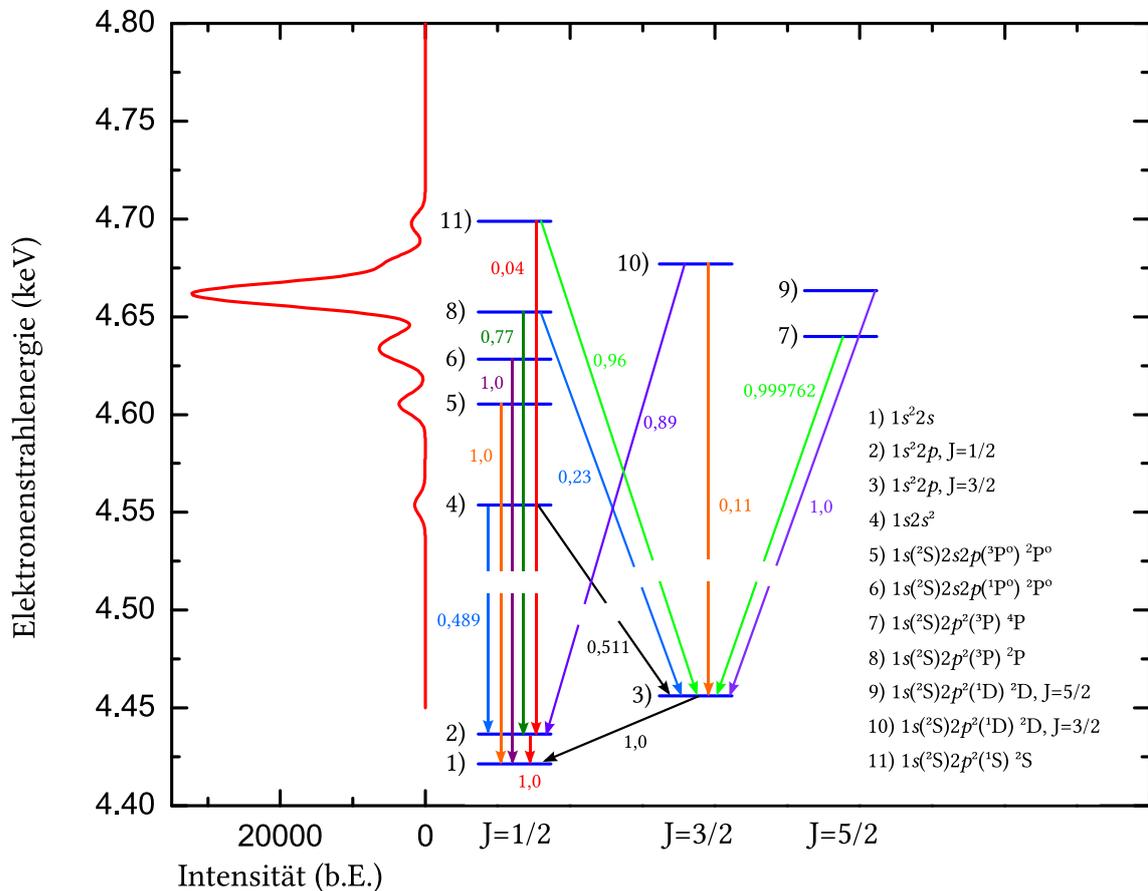


Abbildung 5.6: In rot sind die theoretischen heliumartigen DR-Resonanzen als Funktion der Elektronenstrahlenergie dargestellt. Den stärksten Resonanzen wurden die doppelt angeregten Zustände 4) bis 11) von Fe $^{23+}$ zugeordnet, die gegen die Gesamtdrehimpulsquantenzahl J aufgetragen sind. Zustand 1) ist der Grundzustand und Zustände 3) und 4) die angeregten Zwischenzustände, die unter Emission eines VUV-Photons in den Grundzustand zerfallen können. Diese drei Zustände haben keine Relation zur vertikalen Achse, was mit einem Bruch der Pfeile dargestellt ist.

Tabelle 5.4: Zusammenfassung der Resonanzenergien und der Energie der Niveaus 1) bis 11) aus Abbildung 5.6 relativ zum Grundzustand. Das erste Niveau ist der Grundzustand, die nächsten zwei Niveaus sind Zwischenzustände, die nicht resonant besetzt werden.

Level	Energie rel. zum Grundzustand (eV)	Resonanzenergie (eV)
$1s^2 2s$	0	-
$1s^2 2p, J = 1/2$	48,92	-
$1s^2 2p, J = 3/2$	64,83	-
$1s 2s^2$	6599,27	4553,7
$1s(^2S) 2s 2p(^3P^o) ^2P^o$	6651,85	4605,4
$1s(^2S) 2s 2p(^1P^o) ^2P^o$	6675,38	4631,2
$1s(^2S) 2p^2(^3P^o) ^4P$	6684,18	4638,8
$1s(^2S) 2p^2(^3P^o) ^2P$	6704,48	4658,6
$1s(^2S) 2p^2(^1D) ^2D, J = 5/2$	6709,06	4663,9
$1s(^2S) 2p^2(^1D) ^2D, J = 3/2$	6703,24	4676,9
$1s(^2S) 2p^2(^1S) ^2S$	6742,83	4697,6

elektrisch dipol-verboden. Diese Übergangsenergien liegen mit $E_{4,3} = 6534,44$ eV bzw. $E_{4,2} = 6550,35$ eV etwa 100 eV tiefer als die Übergänge der Niveaus 5) und 6) in den Grundzustand 1).

Nun bleibt es noch zu untersuchen zu welchem Anteil die Fluoreszenzausbeute aus der dielektronischen Rekombination resultiert und zu welchen aus Elektronenstoßanregung der rekombinierten lithiumartigen Ionen resultiert. Dazu müssen die einzelnen Prozesse, die den Zwischenzustand $1s^2 2p$ bevölkern können, betrachtet werden. Die Prozesse der Rekombination (RR bzw. DR), Elektronenstoßionisation (EII) und Elektronenstoßanregung (EIE) sind in Abbildung 5.7 illustriert. Ausgangspunkt ist das lithiumartige Eisen im Grundzustand in Schritt 0). Die mit arabischen Zahlen nummerierten Schritte zeigen den Kreislauf (schwarzen Pfeile) der Elektronenstoßionisation (Schritt 1) \rightarrow 2)) von Fe^{23+} zu heliumartigen Eisen (3)) und anschließender radiativer Rekombination zu lithiumartigen Eisen (4) \rightarrow 5a)) im angeregten Zustand, der wiederum durch Kaskaden in den Grundzustand (6) \rightarrow 0)) zerfällt. Der Kreislauf, der mit römischen Ziffern nummeriert ist, zeigt die radiative Rekombination von Fe^{23+} zu berylliumartigen Eisen im angeregten Zustand (I) \rightarrow II)), der über Kaskaden in den Grundzustand zerfällt ((II) \rightarrow III))). Aus diesem heraus kann wiederum durch Elektronenstoßionisation zu Fe^{23+} ionisiert werden. Durch Elektronenstoßanregung kann der untersuchte Zwischenzustand auch direkt

von 0) zu 6) angeregt werden. Auf der heliumartigen Resonanz entsteht ein weiterer zusätzlicher Zweig (violette Pfeile), der den Zwischenzustand bevölkern kann. Dabei wird von 4) auf 5b) ein Innerschalenelektron resonant durch Einfang eines freien Elektrons in einen doppelt angeregten Zwischenzustand angeregt und zerfällt anschließend in den untersuchten Zwischenzustand 6).

Es ist also zu erkennen, dass relativ viele Prozesse zur Besetzung des Zustandes $1s^2sp$ führen, der unter Aussendung eines VUV-Photons in den Grundzustand zerfällt. Zunächst wird lithiumartiges Eisen durch Elektronenstoßionisation zu Fe^{24+} ionisiert. Dieses recombiniert im nicht-resonanten Fall radiativ. Dabei gibt es einige Zerfallskanäle, die letztendlich den Zustand $1s^22p$ bevölkern. Weiter kann dieser Zustand durch Elektronenstoßanregung von lithiumartigen Eisen besetzt werden. Die Fluoreszenz dieses Zustandes hängt des Weiteren von der Anzahl vorhandener lithiumartiger Eisenionen ab, die durch Rekombination von Fe^{24+} und durch Ionisation von berylliumartigen Eisen beeinflusst werden. Im resonanten Fall auf einer heliumartigen DR-Resonanz kommt ein weiterer Zweig hinzu, der über eine Kaskade aus einem doppelt angeregten Zustand das Niveau $1s^22p$ besetzt. Die einzige Möglichkeit der Unterscheidung der Intensitätserhöhung durch Fluoreszenz oder durch resonante Rekombination ist der Vergleich der beiden Übergänge $1s^22p, J = 1/2 \rightarrow 1s^22s$ und $1s^22p, J = 3/2 \rightarrow 1s^22s$, die in Abbildung 5.3 zu sehen sind. Die nicht-resonanten Prozesse wie die Elektronenstoßanregung (vgl. Gleichung 2.18), die radiative Rekombination (Gleichung 2.26) oder die Elektronenstoßionisation (Gleichung 2.23) unterscheiden sich für beide Übergänge nicht. Der einzige Unterschied in der Intensität beider Linien $L1$ und $L2$ kann also nur durch resonante Rekombination und den Kaskaden in $1s^22p$ entstehen.

Vergleicht man beide Spektren von $L1$ und $L2$ aus Abbildung 5.3, so stellt man einen Unterschied in der Anpassung der Gaußkurven fest. Der Schwerpunkt der Überlagerung der Gaußkurven befindet sich bei $L2$ weiter links als bei $L1$. Schaut man sich Abbildung 5.6 an, so stellt man fest, dass die Zustände 7), 9) und 11) bevorzugt in den Zustand $1s^22p, J = 3/2$ (Level 3) zerfallen, der in den Grundzustand übergeht, was der Linie $L1$ entspricht, wodurch sich der Schwerpunkt tendenziell rechts befindet. Zustand 8) und 10) zerfällt dagegen bevorzugt in $1s^22p, J = 1/2$ (Level 2). Der Übergang in den Grundzustand entspricht Linie $L2$. Deshalb befindet sich der Schwerpunkt weiter links als bei $L1$. Die Levels 4) bis 6) zerfallen zu einem annähernd gleichen Verhältnis in 2) und 1). Allerdings ist die Intensitätserhöhung von $L2$ an Position der Resonanz 4) aufgrund der geringen Ereigniszahl nicht erkennbar.

Vergleicht man die Spektren der beiden lithiumartigen Linien $L1$ und $L2$, so stellt man

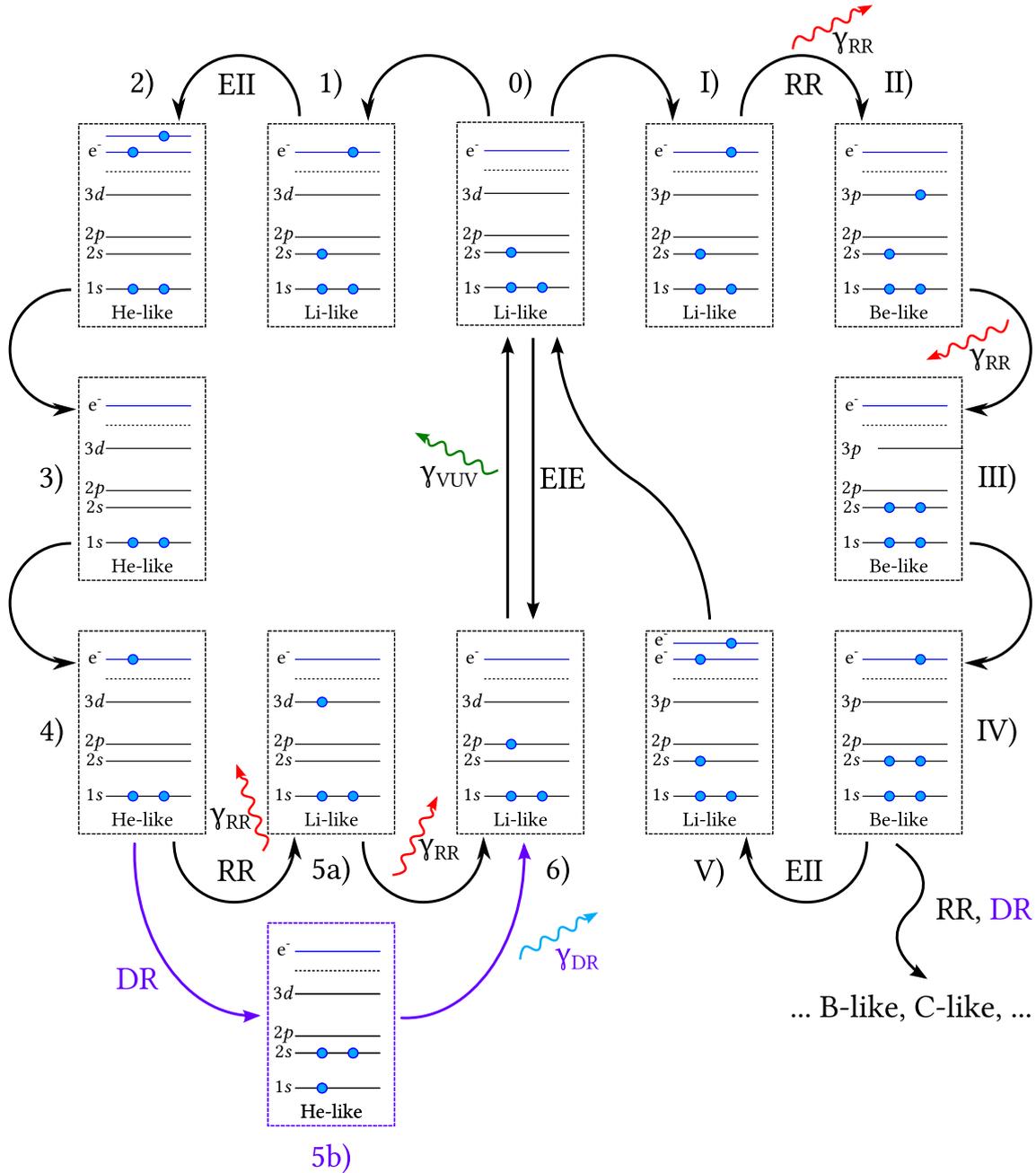


Abbildung 5.7: Schematische Darstellung der Prozesse der Elektronenstoßanregung (EIE), Elektronenstoßionisation (EII) und Rekombination (RR bzw. DR), die den betrachteten Zwischenzustand $1s2p$ bevölkern, der unter Emission eines VUV-Photons in den Grundzustand (Schritt 0)) zerfällt. Mit schwarzen Pfeilen ist der Kreislauf im nicht-resonanten Fall illustriert. Dabei ist der Ionisationsprozess von Fe^{23+} und anschließender Rekombinationsprozess zu sehen. Mit römischen Ziffern ist die Rekombination von Fe^{23+} zu Fe^{22+} und anschließender Ionisation dargestellt. Im Resonanten Fall entsteht ein weiterer Zweig der heliumartigen DR.

eine qualitative Ähnlichkeit der Spektren fest, obwohl sich die Fits unterscheiden. Um zu zeigen, dass die Spektren ununterscheidbar sind, muss überprüft werden ob die Differenz der normierten Spektren einem Rauschen entspricht. Es wird zunächst das Spektrum von $L2$ durch das Spektrum von $L1$ dividiert um einen Streckungsfaktor a zu ermitteln. Der Grund der Reihenfolge der Division ist, dass Spektrum Nr. 3) weniger Nullwerte besitzt. Durch das neu entstandene Spektrum wird eine Konstante angepasst um daraus a zu extrahieren. Es ergibt sich ein Faktor von

$$a = \frac{1}{0,347}$$

mit dem das zweite Spektrum gestreckt wird. Die Fehler auf die Intensität werden ebenfalls mit diesem Faktor multipliziert. Nun werden beide Spektren voneinander subtrahiert und die jeweiligen Fehler quadratisch addiert. Das Differenzspektrum ist in Abbildung 5.8 zu sehen.

Nun wird für jeden Wert x_j des Differenzspektrums die quadratische Abweichung zum Erwartungswert, in diesem Fall $\mu = 0$, berechnet und durch die Varianz σ_i^2 dividiert. Die summe über alle Werte j liefert nun das χ^2 für die Hypothese, dass beiden Spektren identische Prozesse zugrunde liegen mit

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^n \left(\frac{x_j - \mu}{\sigma_j} \right)^2, \quad (5.1)$$

wobei die Varianz in diesem Fall der quadratische Fehler auf die Intensität des Differenzspektrums ist. Es ergibt sich ein $\chi^2 = 665$. Teilt man dieses durch die Anzahl der Freiheitsgrade f , so ergibt sich ein reduziertes χ^2 von

$$\chi_{\text{red}}^2 = \frac{\chi^2}{f} = \frac{665}{891} = 0,75. \quad (5.2)$$

Damit sind beide Spektren nicht signifikant voneinander verschieden. Das $\chi_{\text{red}}^2 < 1$ deutet auf eine leichte Überschätzung der Fehler hin, was mit einer geringen Statistik und der Fehlerfortpflanzung durch den Untergrundabzug zu erklären ist.

Es lässt sich zusammenfassend feststellen, dass die Spektren von $L1$ und $L2$ zwar qualitativ unterschiedlich erscheinen, aber dennoch aufgrund der relativ großen statistischen Fehler nicht signifikant voneinander abweichen. Dadurch lässt sich nicht zweifelsfrei feststellen, ob die Fluoreszenz von der erhöhten Anzahl an lithiumartigen Eisenionen oder von den Kaskaden der heliumartigen DR-Resonanzen kommt.

Das Spektrum der Linie $L3$ der berylliumartigen Ionen aus Abbildung 5.3, die aus den

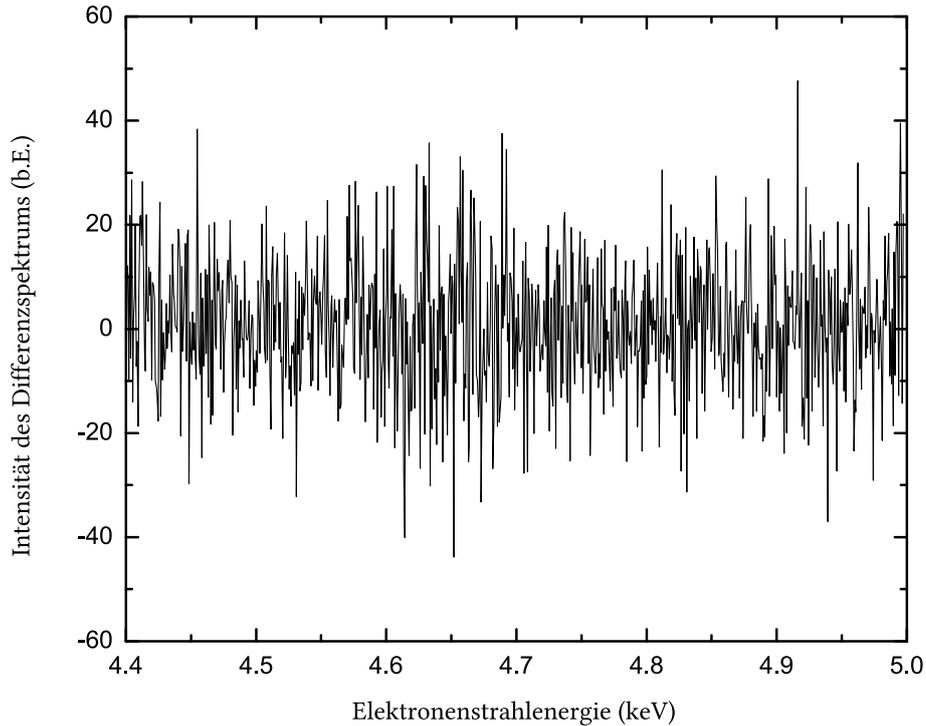


Abbildung 5.8: Differenzsignal von den Spektren 3) und 4) (um Faktor a gestreckt) aus 5.4

lithiumartigen DR-Resonanzen resultieren, konnten aufgrund der geringen Ereignisrate nicht quantitativ untersucht werden. Dennoch wird der Vollständigkeit halber in Abbildung 5.9a bzw. 5.9b das Levelschema von Fe^{22+} gezeigt.

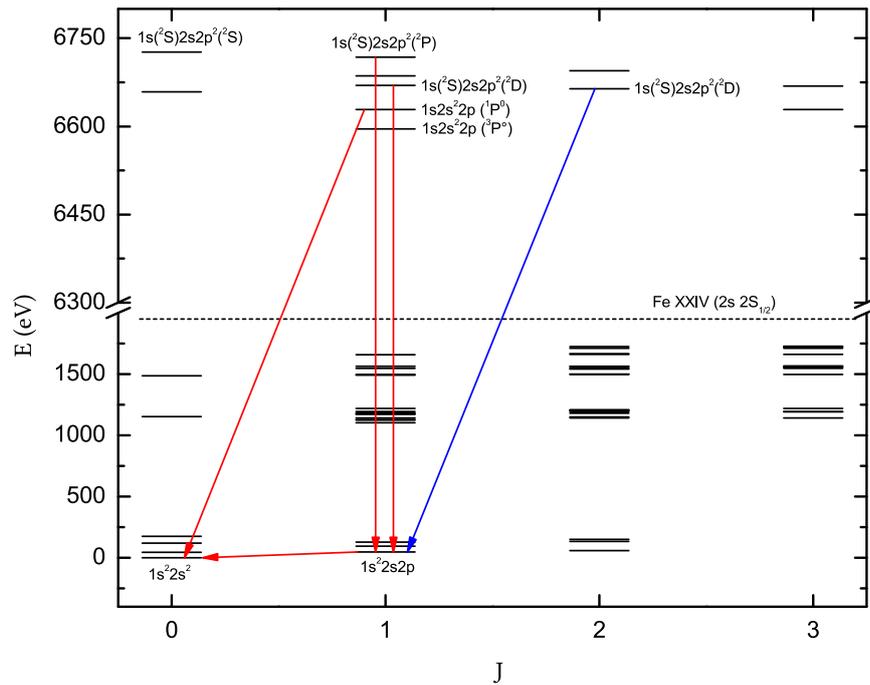
Mit den Ergebnissen der Anpassung der Gaußkurven an die Datensätze aus Abbildung 5.3 lässt sich das Verhältnis der Intensitäten, also das Verhältnis der Anzahl der Ionen im jeweiligen Ladungszustand, der Linien auf der Resonanz und außerhalb der Resonanz ermittelt. Das Verhältnis R wird jeweils auf der stärksten Resonanz mit

$$R = \frac{H_{\text{Gauss}} + Y_0}{Y_0}$$

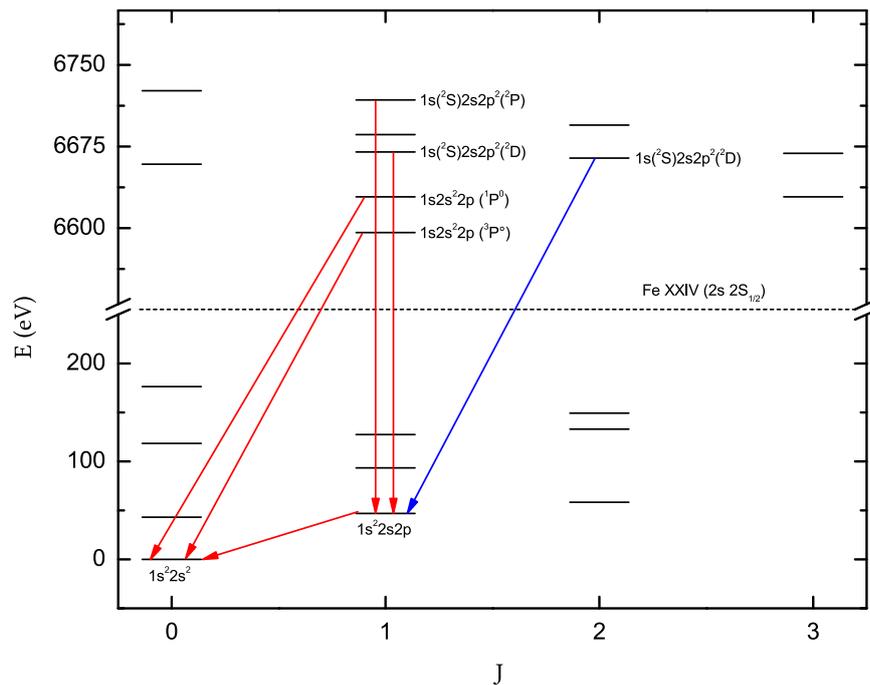
berechnet, wobei H_{Gauss} = die Amplitude der Gaußkurve und Y_0 der ermittelte Untergrund ist. Für die lithiumartige Linie $L1$ auf den heliumartigen Resonanzen ergibt sich ein Verhältnis von

$$R_{\text{Li}} = 3,37(5).$$

Für die berylliumartige Linie $L3$ auf der lithiumartigen Resonanz lässt sich durch Anpassung einer einzelnen Gaußkurve ohne bestimmte Vorgaben an das untere Spektrum in



(a) Levelschema von Fe^{22+} . Vergrößerter VUV-Bereich durch Achsenbruch.



(b) Levelschema von Fe^{22+} in logarithmischer Darstellung.

Abbildung 5.9: a) Grotrian-Diagramm für Fe^{22+} in normaler Darstellung. Dabei ist die Energie der Niveaus gegen die Gesamtdrehimpulsquantenzahl aufgetragen. Es sind einige exemplarische elektrische Dipolübergänge mit Pfeilen angedeutet. b) Der Bereich zwischen 1000 eV und 2000 eV wurde durch einen Achsenbruch entfernt, da er für diese Arbeit irrelevant ist. Der Bereich der VUV-Übergänge ist hierbei vergrößert dargestellt.

Abbildung 5.3 abschätzen. Es ergibt sich ein ungefähres Verhältnis von

$$R_{\text{Be}} \approx 2,8(2).$$

Damit konnte die Ausbeute an lithiumartigen Eisenionen auf einer heliumartigen DR-Resonanz und bei berylliumartigen Ionen auf der lithiumartigen DR-Resonanz um ungefähr einen Faktor drei erhöht werden.

6 Diskussion der Ergebnisse und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Abhängigkeit der Intensität von Spektrallinien von Eisen in hohen Ladungszuständen im VUV-Bereich von 18 nm bis 28 nm in Abhängigkeit von der Elektronenstrahlenergie der FLASH-EBIT vermessen. Ein Einfluss dielektronischer Resonanzen und die gemessenen Linienintensitäten konnte erfolgreich gezeigt werden. Dabei wurden insgesamt drei Linien detektiert und quantitativ untersucht. Es konnte eine Erhöhung der Intensität zweier Spektrallinien von Fe^{23+} um einen Faktor von 3,37(5) beim Durchfahren der Elektronenstrahlenergie über die heliumartigen DR-Resonanzen beobachtet werden. Bei den lithiumartigen DR-Resonanzen konnte eine Erhöhung der Intensität einer Fe^{22+} um einen Faktor von etwa 2,8(2) beobachtet werden. Es konnten also erfolgreich Innerschalen-Übergänge im VUV-Bereich zu den simultan stattfindenden K-L-Übergängen bei der dielektronischen Rekombination detektiert und somit eine Erhöhung der Besetzungszahl von lithiumartigem- bzw. berylliumartigem Eisen quantitativ ermittelt werden. Der Vorteil dieser Methode gegenüber der konventionellen Extraktion der Ionen, Separation nach Masse und Ladung mittels eines Wienfilters und anschließender Detektion unter Verwendung eines positionsempfindlichen Detektors ist, dass sie nicht-destruktiv ist und indirekt durch Aufnahme von Spektren auf Änderung der Ladungszustandsverteilungen geschlossen werden kann. Es bleibt allerdings noch die ungeklärte Frage, ob die Erhöhung der Intensität der VUV-Linien durch die Fluoreszenz durch Elektronenstoßanregung, verursacht durch die vermehrte Zahl der Ionen des Ladungszustandes durch Rekombination des niedrigeren Ladungszustandes, oder durch Kaskaden der doppelt angeregten Zustände in die Zwischenzustände und anschließendem Zerfall in den Grundzustand unter Emission eines VUV-Photons verursacht wird.

6.1 Siliziumdriftdetektor

Zur Erfassung der Röntgenspektren wurde erstmals ein neuer Siliziumdriftdetektor der Firma KETEK zur Erfassung der Röntgenspektren in Betrieb genommen und getestet. Dieser Detektor eignet sich zur Detektion von Photonen in einem Energiebereich von 0,2 keV bis 30 keV und besitzt seine maximale Effizienz im Bereich zwischen 5 keV und

9 keV. Er eignet sich somit sehr gut für die Detektion von K-L-Übergängen zwischen 6 keV und 7 keV, die bei der dielektronischen Rekombination von Eisen stattfinden. Die vom Hersteller garantierte Auflösung liegt bei $\text{FWHM} \leq 160$ eV. Gemessen wurde allerdings eine Auflösung von $\text{FWHM} = 234(4)$ eV. Dies könnte allerdings auch durch die Verarbeitung der Signale durch die verwendete Ausleseelektronik verursacht worden sein. Eine neue Ausleseelektronik könnte die Auflösung in Zukunft eventuell verbessern. Dennoch konnte die Funktionstüchtigkeit dieses Detektors zur Detektion von Röntgenphotonen erfolgreich gezeigt werden.

6.2 Gitterspektrometer

Für die Aufnahme der VUV-Spektren wurde ein T. Baumann entwickeltes Gitterspektrometer mit einem konkaven Gitter für streifenden Einfall [9] modifiziert. Dabei wurde die bis dahin verwendete CCD-Kamera durch einen positionsempfindlichen Mikrokanalplatten-Detektor ersetzt. Dieser bietet gegenüber dem zeitlich integrierten Spektrum des CCD-Chips den Vorteil einer zeitaufgelösten Detektion der Photonen. Damit kann eine Korrelation zwischen Elektronenstrahlenergie der EBIT und den Ereignissen am MCP hergestellt werden. Da der MCP mit seiner Delay-Line nicht mit erforderlicher Präzision zur dispersiven Achse des Gitters ausgerichtet werden konnte, mussten die aufgenommenen Spektren mithilfe eines im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programms durch Zuhilfenahme eines Autokorrelationsverfahrens rotiert werden, sodass die Spektrallinien auf die dispersive Achse mit geringstmöglicher Breite projizierbar sind. Durch dieses Verfahren erhält man allerdings einen Fehler auf die Position des Schwerpunktes der Linien, der mit 0,5 MPA – Kanälen abgeschätzt wird. Der MCP wurde vertikal in den Bereich verschoben, in dem die Spektrallinien von hochgeladenem Eisen erwartet wurden und mithilfe bekannter Spektrallinien kalibriert. Der Fit eines Dispersionspolynoms zweiten Grades ergab ein $\chi_{\text{red}}^2 = 1,37$, was auf eine leichte Unterschätzung der Fehler hindeutet.

6.3 Messmethode

In früheren Messungen konnte gezeigt werden, dass die dielektronische Rekombination einen starken Einfluss auf die Ladungszustandsverteilung hochgeladener Ionen in einer EBIT ausübt [12, 36, 51]. Durch die Variation der Elektronenstrahlenergie wurde der Bereich der dielektronischen KLL-Resonanzen abgetastet. Es wurde mit dem SDD (siehe Kapitel 3.2.1) ein Röntgenspektrum und simultan dazu ein Spektrum im VUV-Bereich mit

dem Gitterspektrometer aufgenommen. Dabei konnte für beide Detektoren eine Zuordnung der Ereignisse zu Elektronenstrahlenergien ermittelt werden. Im VUV-Spektrum konnten drei Linien beobachtet werden, deren Intensität sich in Abhängigkeit von der Elektronenstrahlenergie änderte. Die Linien konnten lithiumartigen Eisen Fe^{23+} mit $\lambda_{L1,\text{exp}} = 19,123(2)$ nm und $\lambda_{L2,\text{exp}} = 25,44(2)$ nm bzw. berylliumartigen Eisen Fe^{22+} mit $\lambda_{L3,\text{exp}} = 26,51(2)$ nm zugeordnet werden. Die theoretischen und die gemessenen Werte aus der NIST-Datenbank mit $\lambda_{L1,\text{theo}} = 19,2028(4)$ nm, $\lambda_{L2,\text{theo}} = 25,5113(4)$ nm und $\lambda_{L3,\text{theo}} = 26,3765(4)$ nm weichen signifikant von den in diesem Experiment ermittelten Werten ab. Zwischen den Kalibrationsmessungen und der eigentlichen Signalmessung musste der Elektronenstrahl aufgrund von Strahlinstabilitäten ausgeschaltet werden und es mussten Wartungsarbeiten am Aufbau durchgeführt, sodass mechanische Verschiebungen des Gitterspektrometers nicht auszuschließen sind, was die Abweichung erklären könnte. Durch eine erneute Kalibrationsmessung und anschließender Aufnahme der Spektren könnten die Messungen in Zukunft verbessert werden. Durch den Vergleich mit anderen Eisenlinien in dem betrachteten Spektralbereich konnten die genannten Wellenlängen dennoch den gemessenen Linien vermutlich korrekt zugeordnet werden.

Durch Auftragen der Intensitäten der drei beobachteten Linien gegen die Elektronenstrahlenergie konnte die Besetzungszahl von Fe^{23+} beim Abtasten der heliumartigen DR-Resonanzen um einen Faktor von $3,37(5)$, bei Fe^{22+} bei lithiumartigen DR-Resonanzen um einen Faktor $2,8 \pm 0,2$ erhöht werden. Dabei ist die Genauigkeit von letzterem Wert nicht aussagekräftig, da bei dieser Linienintensität keine hohe Statistik erreicht werden konnte und die Höhe des Untergrundes bzw. die der Resonanz mittels einer Anpassung einer einzigen Gaußkurve ohne besonderen Vorgaben an deren Breite abgeschätzt wurde. Dennoch ist eine eindeutige Änderung der Intensität der berylliumartigen Linie auf der lithiumartigen DR-Resonanz und außerhalb der Resonanz sichtbar. Die Dauer dieser Messung betrug ca. 3,5 Stunden. Um eine höhere Statistik mit einem relativen Fehler von 1% auf die Zählrate zu erreichen, müsste das Spektrum über mehrere Wochen aufgenommen werden. Diese Methode eignet sich also nicht für eine präzise Messung, sondern dient lediglich der Diagnostik. Die in vorherigen Experimenten maximal erreichte Erhöhung der Ausbeute von lithiumartigem Eisen betrug $2,12(9)$ und von berylliumartigem Eisen $2,93(13)$ [12]. Hierbei wurde die Ladungszustandsoptimierung mithilfe von Extraktion und ladungszustandsselektiver Detektion mit einem positionsempfindlichen Detektor durchgeführt. Damit wurde diesem Experiment die Ausbeute lithiumartiger Ionen übertroffen. Ein wichtiger Vorteil dieser Methode liegt in der nicht-destruktiven Beobachtung von Änderungen in der Besetzungszahl der Ladungszustände und einer

damit einhergehenden genaueren Optimierung der Ionenausbeute.

6.4 Ausblick

Die erfolgreich erprobte Methode der indirekten Messung von Änderungen in der Besetzungszahl bestimmter Ladungszustände kann Verwendung in der Plasmadiagnostik niedrig geladener Ionen finden, insbesondere in Anlagen zur Erzeugung seltener radioaktiver Isotope. Bei solchen Beschleunigern werden zunächst seltene Isotope durch Beschuss eines Targets mit hochenergetischen Protonen erzeugt, beschleunigt und in eine EBIT extrahiert. Dort werden die Ionen zu hohen Ladungszuständen weiterionisiert, aus der EBIT ausgeleitet und für Massenspektroskopie verwendet. Dabei liegt das Hauptaugenmerk auf dem Brüten eines bestimmten Ladungszustandes. Die konventionell verwendete Methode ist die Extraktion und Bestimmung des Ladungs-zu-Masse-Verhältnisses mithilfe eines positionsempfindlichen MCPs. Nach einer gewissen Zeit setzt sich dieses radioaktive Isotop am MCP ab. Mit der erprobten Methode kann indirekt und nicht-destruktiv die optimale Ausbeute der erforderlichen Isotope erreicht werden.

In dieser Arbeit wurden exemplarisch VUV-Linien von zwei Ladungszuständen untersucht. Durch Messungen von Spektrallinien anderer Ladungszustände unter Ausnutzung des gesamten, erfassbaren Wellenlängenbereiches des Gitterspektrometers könnte die tatsächliche Ladungszustandsverteilung beim Abtasten der DR-Resonanzen in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie ermittelt werden. Dadurch könnten Prozesse in astrophysikalischen Objekten besser untersucht werden. Die Kenntnis der Ladungszustandsverteilung könnte die Genauigkeit unterschiedlicher Experimente erhöhen, bei denen eine hohe Besetzung bestimmter Ladungszustände benötigt wird.

Spektrallinien lassen sich durch physikalische Größen wie Wellenlänge, Intensität sowie natürlicher Linienbreite, die sich aus der Lebensdauer des Ausgangszustandes ergibt. Der MCP besitzt eine zeitliche Auflösung von etwa einer Nanosekunde, womit Lebensdauermessungen an metastabilen Zuständen hochgeladener Ionen durchgeführt werden könnten.

7 Literatur

- [1] A. Kramida u. a. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.2), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2014, October 27]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2014.
- [2] C. Beilmann et al. „Higher-order resonant electronic recombination as a manifestation of configuration interaction“. *Physica Scripta* T156 (2013).
- [3] J. Rudolph et al. „X-Ray Resonant Photoexcitation: Linewidths and Energies of $K\alpha$ Transitions in Highly Charged Fe Ions“. *Phys. Rev. Lett.* 111.103002 (2013).
- [4] M. A. Levine et al. „The Electron Beam Ion Trap: A New Instrument for Atomic Physics Measurements“. *Physica Scripta* T22 (1988), S. 157–163.
- [5] M. A. Levine et al. „The use of an electron beam ion trap in the study of highly charged ions“. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 43.3 (1989), S. 431–440.
- [6] T. Shirai et al. „Spectral Data for Highly Ionized Atoms: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Kr, and Mo“. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* (2000).
- [7] E. Anders. „Abundances of the elements: Meteoritic and solar“. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 53 (1988), S. 197–214.
- [8] P. Auger. „Sur l’effet photoélectrique composé“. *Journale de Physique et Radium* 6 (1925), S. 205.
- [9] T. Baumann. „Entwicklung eines Gitterspektrometers zur Untersuchung vakuumultravioletter Strahlung von hochgeladenen Ionen“. Diplomarbeit. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2008.
- [10] C. Beilmann. „Über die Stärke mehrelektronischer Resonanzen bei der Photorekombination und -ionisation“. Dissertation. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2012.
- [11] S. Bernitt. Persönliche Kommunikation am 11.08.2014 und am 24.11.2014.

-
- [12] S. Bernitt. „Optimierung der Ladungszustandsverteilung in einer EBIT durch resonante Photorekombination“. Diplomarbeit. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2009.
- [13] S. Bernitt. „Resonante Anregung astrophysikalischer Röntgen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit dem Freie-Elektronen-Laser LCLS“. Dissertation. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2013.
- [14] M. Blessohl. Persönliche Kommunikation. 2014.
- [15] N. Bohr. „On the Constitution of Atoms and Molecules“. *Philosophical Magazine* 26 (1913).
- [16] G. C. Claridge. „Coronium“. *Journal of the Royal Astronomical Society of Canada* 31 (1937), S. 337.
- [17] C. Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics*. Bd. 1. Wiley-Interscience, 1977, S. 773–803.
- [18] F. J. Currell. *The Physics of Multiply and Highly Charged Ions*. Springer Verlag, 2003.
- [19] B. Denne. „Spectral Lines of Highly-ionized Atoms for the Diagnostics of Fusion Plasmas“. *Physica Scripta* 35 (1987), S. 811–818.
- [20] V. A. Alpert E. D. Donets V. I. Ilyushchenko. *Proceedings of the first international conference on ion sources* (Saclay, Frankreich, 1969), S. 635.
- [21] B. Edlén. „Die Deutung der Emissionslinien im Spektrum der Sonnenkorona“. *Zeitschrift für Astrophysik* 22 (1943), S. 30.
- [22] S. Epp. „Röntgen-Laserspektroskopie hochgeladener Ionen in einer EBIT am Freie-Elektronen-Laser FLASH“. Dissertation. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2007.
- [23] J. D. Gillaspay. „Highly charged ions“. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34 (2001), R93–R130.
- [24] M. F. Gu. „The flexible atomic code“. *Canadian Journal of Physics* 86.5 (2008), S. 675–689.
- [25] H. Haken und H. C. Wolf. *Atom- und Quantenphysik*. 5. Aufl. Springer-Verlag, 1993.
- [26] Zoltán Harman. „Dielectronic recombination: Calculations of KLL resonances for charge breeding applications“ (2008).
- [27] J. Hartmann. „On the Scale of Kirchhoff’s Solar Spectrum“. *Astrophysical Journal* 9 (1899), S. 69.

- [28] D. R. Hartree. „Approximate Wave Functions and Atomic Field for Mercury“. *Physical Review* 46 (1934), S. 738.
- [29] G. Herrmann. „Optical theory of thermal velocity effects in cylindrical electron beams“. *Journal of Applied Physics* 29 (1958).
- [30] V. L. Jacobs. „Effects of initial-state population variations on the $2p \rightarrow 1s$ K α dielectronic satellite spectra of highly ionized iron ions in high-temperature astrophysical and laboratory plasmas“. *Physical Review A* 39.5 (1989).
- [31] J. Jeanperrin. „Extreme ultraviolet spectroscopy of charged W ions relevant to fusion plasmas: The W XIV-W XVI transitions“. Masterarbeit. Imperial College London, 2014.
- [32] *KETEK VITUS SDD Manual*. KETEK. 2013.
- [33] Y. S. Kim und R. H. Pratt. „Direct radiative recombination of electrons with atomic ions: Cross sections and rate coefficients“. *Physical Review A* 27.6 (1983), S. 2913–2924.
- [34] K. Kubiček. „Absolut- und Relativbestimmungen der Energien von $2p-1s$ -Übergängen in wasserstoff-, helium- sowie lithiumartigen Schwefel-, Argon- und Eisenionen“. Dissertation. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2010.
- [35] J. R. Lemen. „Inner-Shell transitions of Fe XXIII and Fe XXIV in the X-ray spectra of solar flares“. *Astronomy and Astrophysics* 135 (1984), S. 313–324.
- [36] J. R. Crespo López-Urrutia. „Optimization of the charge state distribution of the ion beam extracted from an EBIT by dielectronic recombination“. *Review of Scientific Instruments* 75.5 (2004).
- [37] W. Lotz. „An Empirical Formula for the Electron-Impact Ionization Cross-Section“. *Zeitschrift für Physik* 206 (1967), S. 205–211.
- [38] J. C. Maxwell. „A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field“. *Royal Society Transactions* 155 (1865), S. 459–512.
- [39] *MCP Delay Line Detector Manual*. 6.2.90.12. RoentDek Handels GmbH.
- [40] R. W. P. McWirther. *Spectral Intensities*. Hrsg. von R. H. Huddlestone und S. L. Leonard. Publication: Plasma Diagnostic Techniques. Academic Press, New York, 1965.
- [41] *MPA-3 - Multiparameter Data Acquisition System*. 1.71. FAST ComTec. Aug. 2007.
- [42] *Photomultiplier Tubes - Basics and Applications*. 3a. Hamamatsu.

-
- [43] J. R. Pierce. „Rectilinear Electron Flow in Beams“. *Journal of Applied Physics* 11 (1940), S. 548–554.
- [44] H. van Regemorter. „Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres“. *Astrophysical Journal* 136 (1962), S. 906.
- [45] A. Rohr. „Auswirkungen Maxwell’scher und nicht-Maxwell’scher Elektronenenergieverteilungen auf dünne Hochtemperaturplasmen“. Diplomarbeit. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2005.
- [46] J. Rudolph. „Fluoreszenzspektroskopie an K-Schalen-Übergängen hochgeladener Eisenionen“. Dissertation. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2013, S. 76.
- [47] E. Rutherford. „Scattering of Alpha and Beta Particles of Matter and the Structure of the Atom“. *Philosophical Magazine* 21 (1911), S. 669.
- [48] M. N. Saha. „Ionization in the solar chromosphere“. *Philosophical Magazine* 6.40:238 (1920), S. 472–488.
- [49] R. Schupp. „Spektroskopische Untersuchung von Ir¹⁷⁺“. Bachelorarbeit. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2013.
- [50] M. C. Simon. „Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle“. Dissertation. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2010.
- [51] R. Steinbrügge. „Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung ladungsändernder Prozesse hochgeladener Ionen“. Diplomarbeit. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2010.
- [52] S. Sudkewer. „Spectroscopic Diagnostics of Tokamak Plasmas“. *Physica Scripta* 23 (1981), S. 72–86.
- [53] *Versuchsanleitung Fortgeschrittenenpraktikum: Röntgenfluoreszenzanalyse mit einem Silizium-Driftdetektor*. Halbleiterlabor der Max-Planck-Institute für Physik und für extraterrestrische Physik. Dezember 2002.
- [54] Joseph Ladislav Wiza. „Microchannel Plate Detectors“. *Nuclear Instruments and Methods* 162 (1979), S. 587–601.

Danksagung

Ich bedanke mich zunächst bei PD Dr. José Ramón Crespo-López-Urrutia, bei dem ich viel über Experimentalphysik und über EBITs gelernt habe, für die Betreuung der Masterarbeit und für die Möglichkeit bei der netten Arbeitsgruppe mitarbeiten zu dürfen.

Weiter gilt ein großer Dank an Dr. Sven Bernitt für seine Unterstützung, Hilfestellungen und vor allem für die vielen nützlichen Ratschläge sowie die gute Begleitung durch meine Masterarbeit. Ein weiterer Dank gilt an René Steinbrügge für allgemeine Ratschläge und Hinweise zur FLASH-EBIT und zur allgemeinen Physik. Des Weiteren möchte ich mich bei Michael Blessenohl für Hilfestellungen bezüglich der Programmiersprache Python bedanken, sowie bei den Korrekturlesern Stefanie Feuchtenbeiner, Julian Stark, Baptist Piest, Hendrik Bekker und Alexander Windberger. Selbstverständlich gilt schließlich ein großer Dank an alle Leute aus der Arbeitsgruppe und vom Institut, die zum erfolgreichen Gelingen dieser Masterarbeit beigetragen haben.

Zu guter Letzt möchte ich einen großen Dank an meine Familie und Freunde richten, die mich sowohl finanziell als auch seelisch unterstützt haben und natürlich danke ich meiner Freundin Linda, die mich in den letzten Zügen meiner Arbeit begleitet, unterstützt und motiviert hat.

Erklärung:

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst habe und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den (Datum)

.....