

**Fakultät für Physik und Astronomie**  
**Ruprecht-Karls Universität Heidelberg**

Bachelorarbeit in Physik  
vorgelegt von

**Kathrin Kromer**

geboren in Freiburg im Breisgau (Deutschland)

**2015**



# Rekombinationsprozesse in hochgeladenem Bismut und Praseodym

Diese Bachelorarbeit wurde durchgeführt von Kathrin Kromer  
am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg  
unter Aufsicht von Priv.-Doz. Dr. José Ramón Crespo López-Urrutia.



## Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Photorekombinationsprozesse hochgeladener Praseodym- und Bismut-Ionen in der Heidelberg Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT) untersucht. Die KLL dielektronische Rekombination (DR) in  $\text{Pr}^{51+\dots 57+}$  Ionen war bei Elektronenstrahlenergien von 24 keV bis 27 keV und Röntgenenergien von 35 keV bis 37 keV zu beobachten. Zur Überprüfung der Kalibration der Elektronenstrahlenergie und Identifizierung der DR-Resonanzen wurden *Multiconfiguration-Dirac-Fock*-Rechnungen herangezogen. Abweichungen von der Theorie betragen im Durchschnitt  $\pm 10$  eV. Bei den Untersuchungen von hochgeladenen Bi-Ionen liegt der Schwerpunkt dieser Arbeit auf einer ersten qualitativen Beschreibung der Rekombinationsprozesse unter Beteiligung der Elektronen aus der L- und M-Schale, die im Bereich der Elektronenstrahlenergie von 5,5 keV bis 8,5 keV und einer Röntgenenergie bis 16 keV zu beobachten sind. Um einen Überblick über die Energien der Anregungen und Zerfälle der vorkommenden Ladungszustände bis  $\text{Bi}^{68+}$  zu erhalten, wurden Rechnungen mit dem *Configuration-Interaction*-Verfahren durchgeführt. Die zahlreichen beobachteten DR-Resonanzen wurden als LMM, LMN, LNM und LMO identifiziert.

## Abstract

In the course of this thesis, recombination processes of highly charged Praseodymium- and Bismuth-ions inside the Heidelberg Electron Beam Ion Trap (EBIT) were investigated. The KLL dielectronic recombination (DR) in  $\text{Pr}^{51+\dots 57+}$  ions were detectable at electron beam energies from 24 keV to 27 keV and at X-ray energies from 35 keV to 37 keV. In order to verify the calibration of the electron beam energy and to identify the DR-resonances *Multiconfiguration-Dirac-Fock*-calculations were consulted. Deviations from theoretical values were at an average of  $\pm 10$  eV. During the investigation of highly charged Bi-ions the main focus was on a first qualitative description of the recombination processes with participation of the L- and M-shell electrons, visible in the electron beam energy range from 5,5 keV to 8,5 keV and a X-ray energy up to 16 keV. To get a general overview on the energies of the excitations and deexcitations of the existing charge states up to  $\text{Bi}^{68+}$ , calculations with the *Configuration-Interaction*-method were carried out. The many observed DR-resonances were identified as LMM, LMN, LNM and LMO.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Quantentheorie . . . . .	7
2.1.1	Schrödinger-Gleichung . . . . .	7
2.1.2	Dirac-Gleichung . . . . .	8
2.1.3	Mehr-Elektronen-Systeme . . . . .	9
2.1.4	Aktuelle Verfahren zur theoretischen Berechnung . . . . .	10
2.2	Photorekombination in hochgeladenen Ionen . . . . .	11
2.2.1	Radiative Rekombination . . . . .	11
2.2.2	Dielektronische Rekombination . . . . .	12
2.2.3	Rekombination höherer Ordnungen . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Versuchsaufbau</b>	<b>14</b>
3.1	Die Heidelberg EBIT . . . . .	14
3.2	Germanium Röntgendetektor . . . . .	16
3.3	Spannungsteiler . . . . .	16
3.4	Eigenschaften des Elektronenstrahls . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Aufnahme der Spektren</b>	<b>20</b>
4.1	Die Injektion . . . . .	20
4.2	Messung und Ansteuerung . . . . .	22
<b>5</b>	<b>Auswertung</b>	<b>24</b>
5.1	Photorekombination in hochgeladenen Praseodym-Ionen . . . . .	24
5.1.1	Kalibration des Röntgendetektors mit einer Americium-241 Quelle . . . . .	24
5.1.2	Kalibration der Elektronenstrahlenergie . . . . .	26
5.1.3	Abschätzung der Raumladung . . . . .	27
5.1.4	KLL DR-Resonanzen . . . . .	29
5.2	Photorekombination in hochgeladenen Bismut-Ionen . . . . .	37

<b>6 Diskussion</b>	<b>42</b>
<b>A Kalibration</b>	<b>44</b>
A.1 Kalibrationsspektrum $^{241}\text{Am}$ . . . . .	44
<b>B Theoretische Berechnungen</b>	<b>45</b>
B.1 MCDF Rechnungen von Z. Harman . . . . .	45
B.2 FAC Rechnung . . . . .	50

# Kapitel 1

## Einleitung

In der aktuellen Forschung ist die Untersuchung von Atomen mit großen Kernmagnetmomenten im Bereich der hohen Kernladungszahlen, aufgrund ihrer im optischen Energiebereich liegenden Hyperfeinstruktur (HFS) des  $1s_{1/2}$  Elektrons, besonders interessant. HFS-Aufspaltungen im optischen Energiebereich sind wegen ihrer genauen Messmöglichkeiten vielversprechend. Unter anderem da wegen ihrer vergleichsweise hohen Energie der Fehler gering gehalten werden kann. Es wurde für diese Arbeit Praseodym gewählt, ein auf dem Gebiet der Rekombinationsspektren hochgeladener Ionen noch unerforschtes Element.

Damit die Hyperfeinstruktur von H-artigem Praseodym in naher Zukunft genau vermessen werden kann, benötigt man Informationen zu den Speicherbedingungen, zur Ladungszustandsverteilung und den optimalen Einstellungen der EBIT wie Stromstärke, Elektronenstrahlenergie, Injektionsdrücke und Kanoneneinstellungen. Um diese Einstellungen besser einschätzen zu können, wurden in den Messungen zur folgenden Arbeit Praseodym-Atome hochgeladen und auf Photorekombinationsprozesse untersucht. Es wurde dabei speziell die KLL dielektronischen Rekombination vermessen, da für die KLL Resonanzen der Ladungszustände  $\text{Pr}^{51+ \dots 57+}$  theoretische, auf der Multikonfigurations-Dirac-Fock-Methode basierende Berechnungen zur Verfügung stehen. Es kann durch Vergleich der abgestrahlten Röntgenspektren mit den Theoriewerten der Resonanzen bei bestimmten Elektronenstrahlenergien eine Ladungszustandsverteilung in Ionenfallen und Quellen abgeschätzt werden. Das wiederum befähigt dazu die Ladungszustandsverteilung in Abhängigkeit der Elektronenströme zu variieren und auf den erwünschten Ladungszustand hin zu optimieren. Diese Methode wurde für die Produktionsoptimierung von  $\text{Kr}^{34+}$  Ionen in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle von J. Crespo et al. bereits angewandt [1].

In einem weiteren Schritt wurde das Element mit der größten Kernladungszahl  $Z$  analysiert, das gerade noch als stabil bezeichnet werden kann: Bismut. Es wurden die bisher wenig untersuchten Rekombinationsprozesse in hochgeladenem Bismut im Bereich von  $5,5 \text{ keV} < E_{\text{Elektronenstrahl}} < 8,5 \text{ keV}$  untersucht. Durch die dem Elektronenstrahl zu Verfügung stehenden Energien werden hierbei Übergänge innerhalb des Bismut-Ions von  $n = 2 \rightarrow 3$  angeregt. Aufgrund einer großen Feinstrukturaufspaltung der L-Schale und vielen verschiedenen Kopplungsmöglichkeiten der Valenzelektronen erwies sich die Untersuchung der bei variierender Elektronenstrahlenergie aufgenommenen Röntgenspektren als komplex. Aktuell lie-

gen keine theoretischen Berechnungen zu diesen Rekombinationsprozessen vor, weswegen experimentelle Messungen einen ersten Einblick schafften.

# Kapitel 2

## Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel behandelt die theoretischen Hintergründe, die zur Beschreibung der in dieser Arbeit untersuchten Rekombinationsprozesse notwendig sind. Zunächst wird auf die Quantentheorie von atomaren Systemen eingegangen, als Grundlage der in dieser Arbeit untersuchten Mehrelektronensysteme. Die theoretischen Grundlagen folgen [2] und [3].

Außerdem werden die zwei Rekombinationsprozesse der radiativen Rekombination und der dielektronischen Rekombination theoretisch beschrieben.

### 2.1 Quantentheorie

#### 2.1.1 Schrödingergleichung

Die Entdeckung der diskreten und charakteristischen Linienspektren von Atomen begründete im 20. Jahrhundert die Quantenmechanik. Als einziges analytisch beschreibbares Atom ist Wasserstoff hierbei von besonderem Interesse. Mit Hilfe einer komplexen Wellengleichung  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , deren Betragsquadrat die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort  $\mathbf{r}$  und zur Zeit  $t$  beschreibt, wurde die zeitabhängige Schrödingergleichung entwickelt [4]:

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

Hierbei beschreibt  $\hat{H}$  den Hamilton Operator. Für den Fall des nicht zeitabhängigen Hamilton-Operators und einer Wellenfunktion der Form  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_n(\mathbf{r}) \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$  sind  $\Psi_n(\mathbf{r})$  Eigenzustände des Operators und  $E_n$  die Energieeigenwerte. Nimmt man ein zeitlich konstantes Potential  $V(\mathbf{r})$  an, ergibt sich in Ortsdarstellung:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

$\mu$  ist die reduzierte Masse des Teilchens, die sich aus der Masse  $M$  des Kerns und der Elektronenmasse  $m_e$  berechnet.

$$\mu = \frac{Mm_e}{M + m_e} \quad (2.3)$$

Als Potential wirkt auf das Elektron das Coulomb-Potential des Atomkerns (im Gaußschen Einheitensystem).

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|} \quad (2.4)$$

Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die Energieeigenwerte  $E_n$  eines Einelektronensystems wie dem Wasserstoffatom zu folgenden Niveaus berechnen:

$$E_n = -\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} \quad (2.5)$$

$\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$  bezeichnet man als Feinstrukturkonstante,  $c$  ist die Lichtgeschwindigkeit und  $n \in \mathbb{N}$  ist die Hauptquantenzahl des Systems.

### 2.1.2 Diracgleichung

Um die Anforderungen der speziellen Relativitätstheorie zu erfüllen, entwickelte Paul Dirac 1928 eine Erweiterung der Schrödingergleichung, die Dirac-Gleichung [5]. Dabei wird von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung  $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$  und einem Teilchen mit Spin 1/2 ausgegangen. Die Dirac-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = (c\alpha \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2 + V(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r}, t) := \hat{H}_{\text{Dirac}} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

mit den Dirac-Spinoren  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  und den Dirac-Matrizen  $\alpha_i$  und  $\beta$

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

mit  $\sigma_i$  als die drei Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Um eine Lösung für Einelektronensysteme (Bsp.: Wasserstoff) zu finden, benötigt man noch eine Kopplung mit dem elektromagnetischen Feld des Kerns. Hierdurch erhält der Ein-Elektron-Dirac-Hamiltonian folgende Form:

$$\hat{H}_{EE}^{\text{Dirac}} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + \beta mc^2 + e\Phi \quad (2.9)$$

mit dem elektrischen Potential  $\Phi$  und dem Vektorpotential  $\mathbf{A}$ . Um die Eigenwerte berechnen zu können, wird außerdem eine Quantenzahl benötigt, die den Spin  $\mathbf{s}$  und den Bahndrehimpuls  $\mathbf{l}$  koppelt:  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ .

Hiermit hat man dann die notwendigen Quantenzahlen  $(n, l, j, m_j)$  mit  $j$  als Gesamtdrehimpulsquantenzahl. Durch die Annahme eines anziehenden Coulomb-Potentials erhält man nun eine analytische Lösung der Dirac-Gleichung :

$$E_{nj} = m_e c^2 \left[ 1 + \left( \frac{Z\alpha}{n - |j + 1/2| + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2}. \quad (2.10)$$

Durch eine Entwicklung in Ordnungen von  $Z\alpha$  folgt:

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

Der erste Term der Gleichung 2.11 entspricht der Ruheenergie des Elektrons. Die Korrekturen an dieser Energie in den darauf folgenden Termen stammen der Reihe nach vom nichtrelativistischen Anteil der Bindungsenergie, der Spin-Bahn-Kopplung und der relativistischen Massenzunahme. Letztere mit  $(Z\alpha)^4$  skalierende Anteile heben die Entartung in  $n$  auf und führen zur Feinstrukturaufspaltung. Was in dieser Entwicklung der Lösung der Dirac-Gleichung noch nicht mit einbezogen ist, ist die Lamb-Verschiebung, eine durch Vakuumfluktuationen entstehende Aufhebung der in Diracs Theorie vorhergesagten Entartung der Energie in  $l$ , entdeckt am Beispiel der Zustände  $2^2s_{1/2}$  und  $2^2p_{1/2}$ . Außerdem ist in Gleichung 2.6 der Kern als punktförmig angenommen, es sind demnach zur exakten Berechnung noch weitere Korrekturen notwendig, wie z.B. die durch die Interaktion des Elektrons mit dem Kernspin entstehende Hyperfeinaufspaltung.

### 2.1.3 Mehr-Elektronen-Systeme

Will man ein System mit mehr als einem Elektron betrachten, ist das im Allgemeinen nicht mehr analytisch berechenbar. Um diese Systeme trotzdem beschreiben zu können, benutzt man zunächst den nichtrelativistischen Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{ME} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V(r_i) \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.12)$$

Die Wechselwirkungsterme (letzte Summe Gleichung 2.12) sind der Grund dafür, dass Mehr-Elektronen-Systeme nicht analytisch berechenbar sind. Eine der Näherungsmethoden, die stattdessen angewandt werden, ist die Hartree-Fock-Methode. Es wird hierbei die Gesamtwellenfunktion aller Elektronen als Produkt von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen dargestellt. Um sicherzustellen, dass das Pauli-Prinzip nicht verletzt wird, nach dem zwei Elektronen nicht im gleichen Quantenzustand koexistieren können, verwendet man die Slater-Determinante

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\mathbf{r}_1) & \psi_2(\mathbf{r}_1) & \dots & \psi_n(\mathbf{r}_1) \\ \psi_1(\mathbf{r}_2) & \psi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \psi_n(\mathbf{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\mathbf{r}_n) & \psi_2(\mathbf{r}_n) & \dots & \psi_n(\mathbf{r}_n) \end{vmatrix} \quad (2.13)$$

mit  $\psi_m(\mathbf{r}_i)$  als orthonormale Ein-Teilchen-Wellenfunktionen. Durch die Eigenschaften einer Determinante wird sichergestellt, dass die Wellenfunktion unter Vertauschung antisymmetrisch ist. Durch das Variationsprinzip erhält man dann die Hartree-Fock-Gleichungen. Das Variationsprinzip besagt, dass man bei der Eigenwertberechnung einer beliebigen Wellenfunktion des Systems über den Hamiltonoperator einen Energieeigenwert größer der Grundzustandsenergie des Systems erhält. Deswegen werden bei der Hartree-Fock-Methode die Wellenfunktionen iterativ so lange verändert, bis sie einen möglichst minimalen Energieeigenwert ergeben. Um die Abschirmung der Kernladung durch die anderen Elektronen zu berücksichtigen, wird hierbei das tiefste Energieniveau zuerst berechnet um dann die Niveaus von unten herauf aufzufüllen.

Weiterhin kann man, um eine relativistische Näherung zu erhalten, die erste Summe von Gleichung 2.12, welche der Summe über die Ein-Elektron-Hamiltonians entspricht, durch die Dirac-Operatoren ersetzen. Der zweite Term, der durch die Wechselwirkung zwischen den Teilchen zustande kommt, muss für die relativistische Berechnung noch mit Korrekturtermen ergänzt werden. Das dazugehörige Näherungsverfahren im relativistischen Fall bezeichnet man als Dirac-Hartree-Fock-Verfahren (DHF). Um die, durch die Wechselwirkungen entstehende, zeitliche Verzögerung und magnetische Wechselwirkungen in erster Ordnung mit einzuberechnen, verwendet man den so genannten Breit-Operator

$$\hat{V}_{ij}^B = -\frac{\alpha_i \cdot \alpha_j}{2r_{ij}} - \frac{(\alpha_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\alpha_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{2r_{ij}^3} \quad (2.14)$$

mit  $\alpha_{i,j}$ , den in 2.7 eingeführten Dirac-Matrizen,  $\mathbf{r}_{ij}$ , dem Abstandsvektor zwischen den Elektronen und  $r_{ij}$ , dem Betrag davon. Der komplette Dirac-Hamilton-Operator für Mehr-Elektronen-Systeme lautet demnach [6]:

$$\hat{H}_{ME}^{Dirac} = \sum_i \hat{H}_{EE,i}^{Dirac} + \sum_{i,j} \left( \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \hat{V}_{ij}^B \right) \quad (2.15)$$

mit dem Dirac-Hamilton-Operator des i-ten Elektrons aus Gleichung 2.9.

### 2.1.4 Aktuelle Verfahren zur theoretischen Berechnung

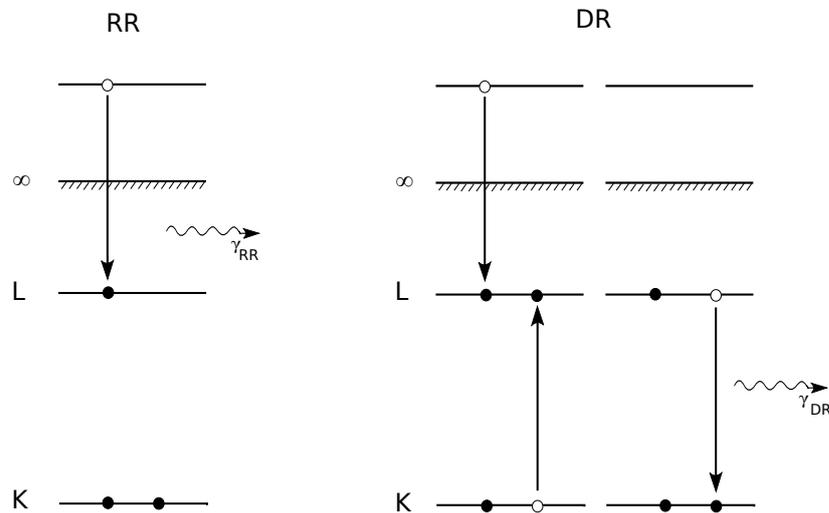
Um eine höhere Genauigkeit der theoretischen Berechnungen zu erreichen, muss man die Wechselwirkung der Elektronen mit nicht besetzten Zuständen einbeziehen. Die Multi-Konfiguration-Hartree-Fock Methode (MCHF) ist ein auf dem Variationsprinzip und der Hartree-Fock Methode basierendes Näherungsverfahren, das relativistische und quantenelektrodynamische Effekte beachtet. Es wird dabei eine lineare Überlagerung von Konfigurationszustandsfunktionen (CSF) gebildet, die eine Mehr-Elektronen-Atomzustandsfunktion (ASF)

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^n c_{\nu} \Phi_{\nu} \quad (2.16)$$

ergibt [7].  $c_{\nu}$  ist ein Mischungskoeffizient, der im Laufe des Verfahrens variiert wird. Auch die Konfigurationen  $\Phi_{\nu}$  als Überlagerungen von Ein-Elektron-Wellenfunktionen werden in der MCDF Methode optimiert, sodass sich am Ende des iterativen Variationsverfahrens ein minimaler Energieeigenwert des

relativistischen Dirac-Hamilton-Operators für Mehr-Elektronen-Systeme in Gleichung 2.15 ergibt. Durch die Variation der Konfigurationen  $\Phi_\nu$  wird außerdem möglich, die Winkelkorrelation zwischen den Elektronen zu berechnen. Die in Kapitel 5.1.4 erwähnten Theoriewerte zur Rekombination in Praseodym wurden mithilfe der MCDF Methode von Z. Harman berechnet [8]. Für mehr Details zur MCDF Methode wird auf folgende Artikel verwiesen: [9–12]. Die Konfigurations-Interaktionsmethode (CI) variiert nur den Mischungskoeffizienten  $c_\nu$ , nicht die Konfigurationen  $\Phi_\nu$ . Diese Methode wird in den in dieser Arbeit erwähnten Rechnungen mit dem von M.F. Gu entwickelten Flexible Atomic Code (FAC) verwendet (Näheres zu FAC siehe [13]).

## 2.2 Photorekombination in hochgeladenen Ionen



**Abbildung 2.1:** Energielevelschema der wichtigsten Photorekombinationsprozesse. Links ist die radiative Rekombination in die L-Schale ( $n = 2$ ) dargestellt. Rechts sieht man eine dielektronische Rekombination bei der ein Elektron in der L-Schale eingefangen wird und mit der frei gewordenen Energie ein Elektron aus der K in die L-Schale angeregt wird (auch genannt KLL DR).

### 2.2.1 Radiative Rekombination

Die in einer EBIT gebildeten, positiv geladenen Ionen können durch Photorekombination den Prozess der Ionisation auch zeitlich umkehren. Dies geschieht durch Einfang eines freien Elektrons des Elektronenstrahls. Bei der radiativen Rekombination wird ein freies Elektron eingefangen und die Energie durch ein Photon abgegeben. Der nicht-resonante Prozess erfolgt nach folgendem Schema:



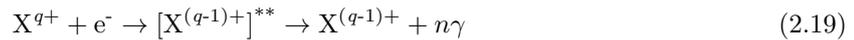
Die abgestrahlten Photonen bei radiativer Rekombination erhalten ihre Energie sowohl von der kinetischen Energie des Elektrons aus dem Elektronenstrahl als auch von der Bindungsenergie des eingefangenen Elektrons. Als oberes Limit der  $E_{\gamma RR}$  gilt demnach die doppelte Elektronenstrahlenergie. Nach Y. S. Kim und R. H. Pratt erhält man den Wirkungsquerschnitt der radiativen Rekombination durch Berechnung von [14]:

$$\sigma_{RR} = \frac{8\pi\alpha^3 Z_{eff}^4}{3\sqrt{3}n^3 E_e E_\gamma} \quad (2.18)$$

mit der kinetischen Energie der Elektronen im Elektronenstrahl  $E_e$  und der Energie der abgestrahlten Photonen  $E_\gamma$ . Die verwendete Hauptquantenzahl  $n$  gehört zum angeregten Zwischenzustand.

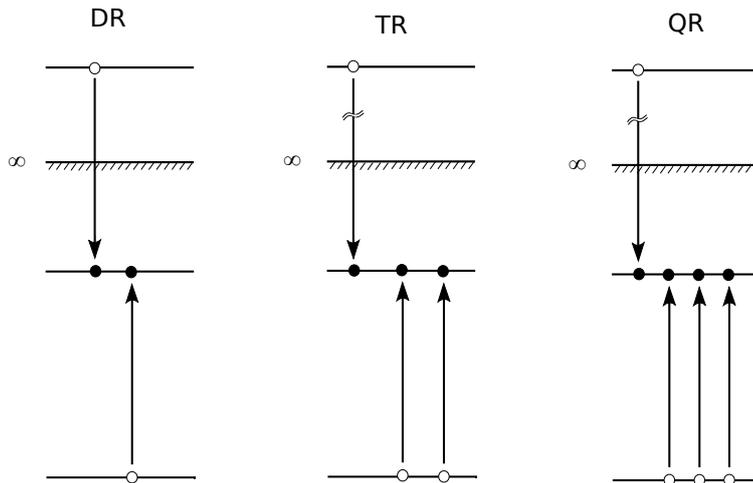
### 2.2.2 Dielektronische Rekombination

Die Zeitumkehr des resonanten Photoionisationsprozesses (Auger-Zerfall) wird als dielektronische Rekombination bezeichnet.



Als Resonanzbedingung gilt, dass die Energie des eingefangenen Elektrons und die Bindungsenergie der Energiedifferenz zwischen Grundzustand und angeregtem Zustand des Ions entspricht. Wie in Abbildung 2.1 (rechts) zu sehen zerfällt dieser angeregte Zustand wieder durch Aussenden eines Photons.

### 2.2.3 Rekombination höherer Ordnungen



**Abbildung 2.2:** Rekombinationsprozesse höherer Ordnungen, vereinfacht dargestellt als zwei-Niveau System. Das untere Energieniveau steht symbolisch für das Niveau aus dem die Elektronen angehoben werden, dieses muss aber bei mehreren Elektronen die angeregt werden nicht das gleiche sein. Der Zerfall des dargestellten angeregten Zustands ist nicht eingezeichnet.

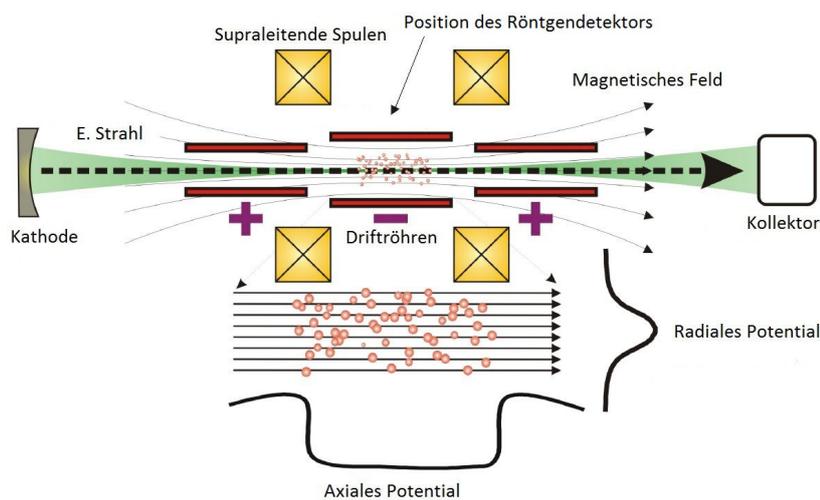
Wie bei der dielektronischen Rekombination wird bei den Rekombinationsprozessen höherer Ordnungen wie der trielektronischen Rekombination (TR) und der quadroelektronischen Rekombination (QR) siehe Abbildung 2.2 ein Elektron aus dem Elektronenstrahl eingefangen. Statt mit der dabei freiwerdenden Energie ein Elektron zu einem höherenergetischen Zustand anzuregen, werden bei TR zwei Elektronen und bei QR drei Elektronen gleichzeitig angehoben. Die in 2.2 dargestellten angeregten Zustände werden unter Aussendung eines oder mehrerer Photonen zerfallen.

# Kapitel 3

## Versuchsaufbau

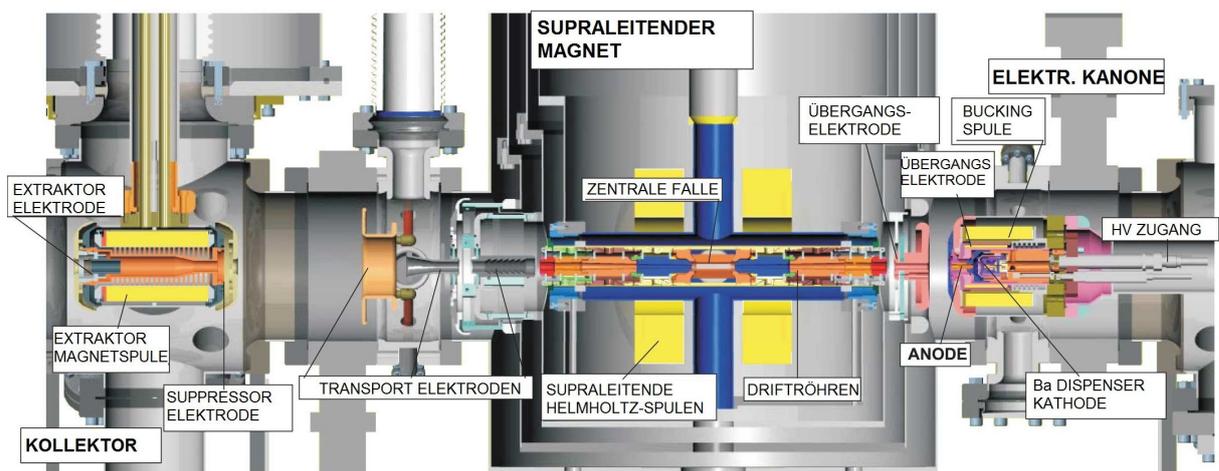
In diesem Kapitel wird der experimentelle Aufbau der Heidelberg Elektronenstrahl-Ionenfalle (HD EBIT) näher beschrieben. Auch die Charakteristiken der zur Messung notwendigen Messinstrumente wie dem Röntgendetektor und den vorhandenen Spannungsteilern werden hier erklärt. Zuletzt wird noch auf die Eigenschaften des Elektronenstrahls und auf die dazugehörige Theorie der Raumladung in einer EBIT eingegangen.

### 3.1 Die Heidelberg EBIT



**Abbildung 3.1:** Schema einer Elektronenstrahl-Ionenfalle. Eingezeichnet ist der Elektronenstrahl, der in der Mitte der Falle Ionen durch das Raumladungspotential radial gefangen hält. Das axiale Potential, dass durch die Potentialdifferenz zwischen den Driftröhren entsteht, ist am unteren Bildbereich angedeutet.

Um hochgeladene Ionen zu produzieren und sie spektroskopisch untersuchen zu können, kann eine Elektronenstrahl-Ionenfalle, kurz EBIT verwendet werden (siehe Abbildung 3.2). In einer EBIT wird von der Elektronenkanone aus ein Elektronenstrahl durch die Driftröhren, in denen die neutralen Atome ionisiert werden, auf den Kollektor geschossen. An der mittleren Driftröhre gibt es eine Öffnung zur Injektion von neutralen Atomen. Um diese Atome möglichst effizient zu ionisieren muss der Elektronenstrahl fokussiert werden. Dies wird durch ein starkes Magnetfeld ermöglicht (bis zu 9 T), das durch supraleitende Helmholtzspulen entsteht. Um in den Helmholtzspulen einen supraleitenden Effekt zu erreichen, werden sie durch flüssiges Helium auf etwa 4 K heruntergekühlt. Um die Ionen auch auf zeitlich verzögerte Prozesse untersuchen zu können, besteht die Möglichkeit die Ionen in der Falle gefangen zu halten. Dies geschieht in radialer Richtung durch die negative Raumladung des Elektronenstrahls. Um die Ionen auch axial zu fangen, kann man an den Driftröhren verschiedene Potentiale anlegen. Nach Öffnen der Falle, z.B. durch Senken des Potentials an der letzten Driftröhre, werden die Ionen in Richtung Kollektor gelenkt. Im Kollektor wird das Magnetfeld der Helmholtzspulen kompensiert, wodurch dem Elektronenstrahl die Möglichkeit gegeben wird, zu expandieren und auf den Kollektor zu treffen. Hierdurch werden die Elektronen von den Ionen getrennt um den Stromkreis zu schließen, die Ionen aber noch weiterführend untersuchen zu können. Hinter dem Kollektor hat man dann die Möglichkeit, die Ionen durch einen Ablenkmagneten und eine Mikrokanalplatte (kurz: MCP) auf verschiedene Ladungszustände zu untersuchen. Für die Messungen der Rekombinationsprozesse wurden Röntgenspektren aufgenommen. Dazu gibt es senkrecht zur Elektronenstrahlrichtung, auf Höhe der mittleren Driftröhre, ein Beryllium-Fenster, vor welchem ein Röntgendetektor angebracht ist.

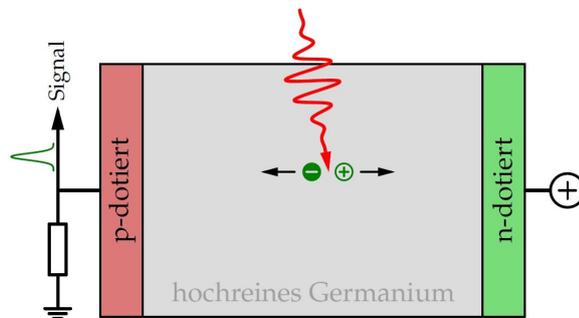


**Abbildung 3.2:** Querschnitt der Heidelberg Elektronenstrahl-Ionenfalle (kurz: HD EBIT). Zu sehen sind im rechten Bildbereich die Elektronenkanone, von der aus der Elektronenstrahl in Richtung zentraler Falle beschleunigt wird. In der Mitte sind die 9 zylinderförmigen Driftröhren eingezeichnet. Am linken Bildrand ist der Kollektor zu sehen. [16]

## 3.2 Germanium Röntgendetektor

Zur Detektion der Röntgenstrahlung aus der zentralen Falle wird ein Germanium Röntgendetektor verwendet. Dieser besteht aus einem in Vakuum vorliegenden, hochreinen Germanium-Kristall, das auf der einen Seite p- und auf der gegenüberliegenden Seite n-dotiert ist (siehe Abbildung 3.3). An die n-dotierte Seite wird eine positive Hochspannung angelegt, wodurch aus dem Kristall eine Halbleiterdiode wird. Trifft nun ein hochenergetisches Photon auf den Kristall, werden freie Ladungsträger aus dem Valenzband in das Leitungsband angehoben und es bilden sich Elektron-Loch-Paare. Durch diese Elektron-Loch-Paare und die an den Kristall angelegte Hochspannung entsteht ein kurzzeitiger Stromfluss. Dieser Stromimpuls wird verstärkt und detektiert. Je höher die Energie des auftreffenden Photons dabei war, desto mehr Elektron-Loch-Paare bilden sich, was sich in der Höhe des detektierten Pulses widerspiegelt. So ist es möglich, die Röntgenphotonen nicht nur zeitlich aufgelöst zu detektieren sondern auch energetisch.

**Abbildung 3.3:** Ein Photon (rot) trifft auf den Germanium-Kristall und bildet dabei Elektron-Loch-Paare. Der kurzzeitig mögliche Stromfluss führt zu einem Signal, das verstärkt, detektiert und je nach Höhe einer Energie zugeordnet werden kann. [17]

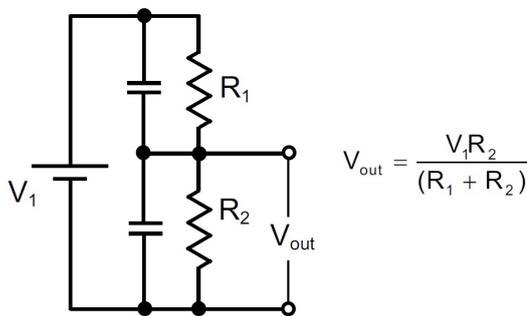


Im Aufbau der Heidelberg EBIT wird ein Germanium Detektor des Modells: ORTEC GLP-36360/13-P verwendet. Das Modell besteht aus einem im Durchmesser 36 mm großen und 13 mm tiefen Kristall. Bei einem Detektionsbereich von 3 bis ca. 300 keV ist die Auflösung nach ORTEC bei 5,9 keV auf  $\pm 360$  eV und bei 122 keV auf  $\pm 585$  eV festgelegt. Durch lange Benutzung erreicht man aktuell allerdings keine derart hohe Auflösung mehr. Der Detektor besteht aus dem bereits beschriebenen Germanium-Kristall, der in Vakuum vorliegt, und um keine thermische Anregung zuzulassen, auf den Siedepunkt von flüssigem Stickstoff heruntergekühlt wird. Bei diesen 77 K liegt die Energie zur Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares bei  $E = 2,96$  eV, sodass kaum noch thermische Anregungen möglich sind [18]. Um den Detektor noch rauscharmer zu bekommen, schützt man ihn außerdem noch mit einem Blei- und einem Messingzylinder, die übereinander angebracht werden. In Richtung zentrale Falle ist der Röntgendetektor mit einem Beryllium-Fenster abgeschlossen, das dem hohen Druckunterschied zwischen Vakuum im Detektor und atmosphärischem Druck standhält aber gleichzeitig durchlässig ist für Röntgenstrahlung, insbesondere für deren niederenergetische Anteile ( $> 2$  keV).

## 3.3 Spannungsteiler

Um die Elektronenstrahlenergie möglichst genau zu berechnen, benötigt man Präzisionsmessungen der Beiträge zum Potential der Elektronen. Das Potential setzt sich zusammen aus der Spannung an der

Kathode, an der Elektronenkanonenplattform und an den Driftröhren. Um die Spannungen an der Plattform und an den Driftröhren möglichst genau messen zu können, verwendet man Spannungsteiler. Ein Spannungsteiler ist darauf ausgerichtet, möglichst genau auch hohe Spannungen auslesen zu können und dabei nur einen geringen Stromfluss über die eigenen Widerstände zuzulassen. Hierfür wird der Widerstand  $R_1$  in Abbildung 3.4 möglichst groß gewählt und der Widerstand  $R_2$  möglichst klein. Im Fall des Spannungsteilers an den Driftröhren bedeutet das:  $R_1$  besteht aus 20 Widerständen mit  $200\text{ M}\Omega$ . Der Plattform-Spannungsteiler besteht aus einem  $R_1$  mit 40 Widerständen zu je  $200\text{ M}\Omega$  und einem  $R_2$  mit wahlweise  $7,998\text{ M}\Omega$ ,  $1,267\text{ M}\Omega$  oder  $406\text{ k}\Omega$ . Die Teilungsverhältnisse der jeweiligen  $R_2$  sind Tabelle 3.1 zu entnehmen. Die Werte dort und ihre jeweiligen Fehler gelten bei geringen Temperaturschwankungen von bis zu  $\pm 0,5\text{ }^\circ\text{C}$ . Der Spannungsteiler der Driftröhren ist von einer Schicht Weicheisen umgeben um ihn vor elektrischem Rauschen abzuschirmen. Ein weiterer verfälschender Faktor ist die Temperaturänderung der Widerstände. Hierzu ist der Spannungsteiler der Plattform so aufgebaut, dass zwischen den zwei konzentrischen, zylinderförmigen Plexiglasschichten, durch vier am Boden fixierte Ventilatoren, ein konstanter, zirkulierender Luftstrom entsteht. Ausgelesen wird die Temperatur über einen Sensor des Typs AD 590. Der innere Zylinder ist zusätzlich mit  $\text{SF}_6$  Gas gefüllt um elektrische Entladungen zwischen den verschiedenen Bauteilen zu verhindern.



**Abbildung 3.4:** Schema eines Spannungsteilers.  $V_1$  stellt die zu messende Spannung dar,  $V_{out}$  ist die durch ein Spannungsmessgerät auszulesende Spannung, die wesentlich kleiner und deswegen genauer messbar ist. [15]

**Tabelle 3.1:** Eigenschaften der an der HD EBIT zur Verfügung stehenden Spannungsteiler. In Klammern ist die Unsicherheit des Teilungsverhältnisses angegeben. Die Werte sind Referenz [15] entnommen.

Spannungsteiler	$R_1$	$R_2$	Teilungsverhältnis	Messbereich (kV)
Driftröhren	20 x $200\text{ M}\Omega$	$1\text{ M}\Omega$	3986,9 (0,4)	<20
		$7,998\text{ M}\Omega$	992,8 (0,3)	2 - 20
Plattform	40 x $200\text{ M}\Omega$	$1,267\text{ M}\Omega$	6335,62 (0,01)	12 - 120
		$406\text{ k}\Omega$	$\approx 20000$	40 - 400

### 3.4 Eigenschaften des Elektronenstrahls

Die Energie des Elektronenstrahls hängt neben der Beschleunigungsenergie auch noch vom negativen Raumladungspotential und damit von einigen Eigenschaften des Elektronenstrahls, wie z.B. dem Radius, ab. Zur Berechnung des bei der HD EBIT vorliegenden Radius des zylindrischen Elektronenstrahls wird das Modell von G. Herrmann verwendet [19]. Bei diesem Modell wird an der Kathode von einer thermischen Geschwindigkeitsverteilung ausgegangen, die von der Kathodentemperatur  $T_k$ , dem Kathodenradius  $r_k$  und dem Magnetfeld an der Kathode  $B_k$  abhängt. Das Magnetfeld  $B_k$  stammt von den Helmholtzspulen um die Fallenmitte, wird allerdings teilweise durch kanoneneigene Spulen kompensiert. Mit  $B$  als an der Fallenmitte anliegendes Magnetfeld, der Elektronenmasse  $m_e$  und der Boltzmannkonstante  $k_b$  erhält man den Herrmann Radius  $r_H$ . Dieser ist definiert als Radius der 80 % der Elektronen einschließt:

$$r_H = r_B \sqrt{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{8m_e k_B T_k r_k^2}{e^2 B^2 r_B^4} + \frac{B_k^2 r_k^4}{B^2 r_B^4}}}. \quad (3.1)$$

Der dort verwendete Brillouin-Radius [20]

$$r_B = \sqrt{\frac{m_e I}{\pi \epsilon_0 v e B^2}} \quad (3.2)$$

stammt aus einem Modell, das von einer laminaren Strömung der Elektronen durch das Magnetfeld ausgeht und keine thermische Energie an der Kathode beachtet.  $\epsilon_0$  ist hier die elektrische Feldkonstante und  $v$  die Geschwindigkeit der Elektronen. Mit einer Berechnung des Radius nach dem Modell von Herrmann erhält man bei der HD EBIT bei einem Strom von 150 mA, einem Beschleunigungspotential von 50 keV und einem Magnetfeld  $B$  von 8 T einen Radius von  $r_H = 23 \mu\text{m}$  [15].

Damit man jetzt das für die Kalibration der Elektronenstrahlenergie wichtige Raumladungspotential abzuschätzen kann, zieht man das Gaußsche Gesetz heran:

$$\oint \mathbf{E}(\mathbf{r}) d\mathbf{A} = \int \nabla \mathbf{E}(\mathbf{r}) d\mathbf{V} = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{V}. \quad (3.3)$$

Hierbei ist  $\rho(\mathbf{r})$  die Ladungsdichte im Elektronenstrahl, die vom Volumen  $V$  umschlossen ist. Durch Integration erhält man ein radiales elektrisches Feld von [7]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{I r}{2\pi \epsilon_0 v r_H^2} \frac{\mathbf{r}}{r} & \text{für } 0 \leq r < r_H \\ \frac{I}{2\pi \epsilon_0 v r} \frac{\mathbf{r}}{r} & \text{für } r_H \leq r \leq r_{DT} \end{cases} \quad (3.4)$$

Dabei entspricht  $r = |\mathbf{r}|$  und  $r_{DT}$  dem Radius der Driftröhre. Geht man nun von  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \Phi(\mathbf{r})$  aus, erreicht man mit den Randbedingungen  $\Phi(r_{DT}) = U_{DT}$  und  $\Phi_<(r_H) = \Phi_>(r_H)$  ein Potential von [7]

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{I}{2\pi \epsilon_0 v} \left( \frac{r^2}{2r_H^2} - \frac{1}{2} + \ln \left( \frac{r_H}{r_{DT}} \right) \right) & \text{für } 0 \leq r < r_H \\ \frac{I}{2\pi \epsilon_0 v} \ln \left( \frac{r_H}{r_{DT}} \right) & \text{für } r_H \leq r \leq r_{DT}. \end{cases} \quad (3.5)$$

Die Geschwindigkeit der Elektronen muss bei Elektronenstrahlenergien von bis zu 50 keV relativistisch betrachtet werden und ist daher wie folgt mit der Beschleunigungsspannung  $U$  zu berechnen:

$$v_{rel.} = c \sqrt{1 - \left( \frac{m_e c^2}{m_e c^2 + eU} \right)^2} . \quad (3.6)$$

Zur Vereinfachung der Berechnung des Raumladungspotentials werden in Kapitel 5.1.3 einige Näherungen angewandt. Man bezieht die  $\mathbf{r}$ -Abhängigkeit der Raumladung in die Verbreitung der Gaußpeaks der Resonanzen ein, sodass man eine lineare Abhängigkeit der Raumladung von der Stromstärke in der Fallenmitte erhält. Außerdem gibt es einen nichtlinearen Anteil der Verschiebung der Elektronenstrahlenergie wegen des Raumladungspotentials durch die Abhängigkeit der Raumladung von der Geschwindigkeit und dadurch von der Beschleunigungsspannung. Die Abhängigkeit der Raumladung von der Spannung kann man vereinfachen, indem man sie nicht relativistisch nähert. Trotz Geschwindigkeiten der Elektronen, die eigentlich relativistisch berechnet werden müssten, kann man im Falle der in Kapitel 5.1.4 betrachteten Messungen aufgrund des kleinen Energiefensters der Resonanzen und der dann nur geringen nichtlinearen Verschiebung der Elektronenstrahlenergie, nichtrelativistisch nähern. Die Geschwindigkeit der Elektronen ist dann

$$v_{n.rel.} = \sqrt{2U \frac{e}{m_e}} \quad (3.7)$$

Der Beitrag an der Elektronenstrahlenergie, der von der Raumladung stammt hat dann die Form:

$$\Delta E_{Raumladung, n.rel.} = const. \cdot \frac{1}{\sqrt{U}} \quad (3.8)$$

Durch die Injektion einer Atomwolke in die Fallenmitte der EBIT erhält man eine durch die Ionenwolke induzierte positive Raumladung. Diese positive Raumladung kompensiert teilweise die negative Raumladung des Elektronenstrahls. Den Beitrag an der Gesamtraumladung durch die hochgeladenen Ionen berechnet man durch den Faktor [7]

$$f = \frac{\sum_q n_q q}{n_e} . \quad (3.9)$$

$n_e$  ist die Elektronendichte. Die vielen Faktoren, die auf die Produktion der Ionen einwirken, wie der Injektionsdruck, die Positionierung des Elektronenstrahls etc., machen eine exakte Bestimmung der Dichte  $n_q$  der Ionen im Ladungszustand  $q$  und hierdurch die Bestimmung des Faktors  $f$  sehr schwer. Nimmt man alle diese Faktoren zusammen, erhält man eine Energie des Elektronenstrahls  $E_e$  von

$$E_e = e(U_{Kath.} + U_{Plattform} + U_{Driftröhren} - (1 - f)\Phi_{<}(0)) \quad (3.10)$$

wobei die Spannungen an Kathode ( $U_{Kath.}$ ), auf der Elektronenkanonenplattform ( $U_{Plattform}$ ) und auf den Driftröhren ( $U_{Driftröhren}$ ) die angelegten Beschleunigungsspannungen ausmachen.

# Kapitel 4

## Aufnahme der Spektren

Das folgende Kapitel wird einen Einblick geben in die Durchführung der Messung und die damit zusammenhängende Ansteuerung der EBIT, die Aufnahme der Daten und die Weiterverarbeitung der Messdaten bis hin zur Speicherung. Bevor die eigentliche Messung der Photorekombinationsspektren gestartet werden kann, muss sichergestellt sein, dass das zu untersuchende Element in genügend großer Quantität in die HD EBIT injiziert wurde.

### 4.1 Die Injektion

Zur Injektion der zu untersuchenden Stoffe wurde im Falle der später beschriebenen Messungen ein differenzielles Pumpsystem verwendet, das in zwei Stufen aufgeheizt und abgepumpt werden kann. Die Quelle ist vor Stufe 1 angeschlossen (Nadelventil). Stufe 1 kann durch eine Vor- und eine Turbopumpe je nach Notwendigkeit auf einen Druck von ca.  $3 \cdot 10^{-10}$  mbar  $< P_{Inj.1} < 1 \cdot 10^{-6}$  mbar abgepumpt werden. Durch ein kleines Loch verbunden folgt danach Stufe 2 des Injektionssystems. Dieser Bereich hat separate Pumpen und ein separates Heizsystem und liegt meist bei einem Druck von  $< 1 \cdot 10^{-7}$  mbar. Durch ein zweites kleines Lock kann dann ein kollimierter Atomstrahl in die Fallenmitte eindringen. Zur Messung der Photorekombination die Praseodym-Verbindung tris(2,2,6,6-tetramethyl-3,5-heptanedionato)-Praseodymium ( $C_{33}H_{60}O_6Pr$ ) verwendet (CAS Nr. 15492485). Durch schrittweises Erhöhen der Temperatur an den beiden Injektionsstufen stellte sich heraus, dass für eine Injektion der Praseodym-Verbindung in die HD EBIT eine Temperatur von 140 °C bei einem Injektionsdruck von  $1,3 \cdot 10^{-8}$  mbar nötig ist. Ab 140 °C war ein plötzlicher Anstieg des Injektionsdrucks sichtbar, was auf eine Sublimation des Stoffes hindeutet. Um sicher zu gehen, dass sich tatsächlich Praseodym in der Falle befindet, wurde das Injektionsventil geöffnet und die Röntgenspektren mit und ohne Injektion verglichen. Im Allgemeinen sieht man mit geschlossener Injektion an der HD EBIT Bremsstrahlung, die charakteristischen Spektren einiger Elemente, darunter Wolfram und Barium und die radiativen Rekombinationslinien derselben Elemente. Da die Linien des Röntgenspektrums von Praseodym leicht höhere Energien besitzen als die von Barium sah man bei Öffnen der Injektion eine Verschiebung der Barium-Linien um etwa ein keV [21].

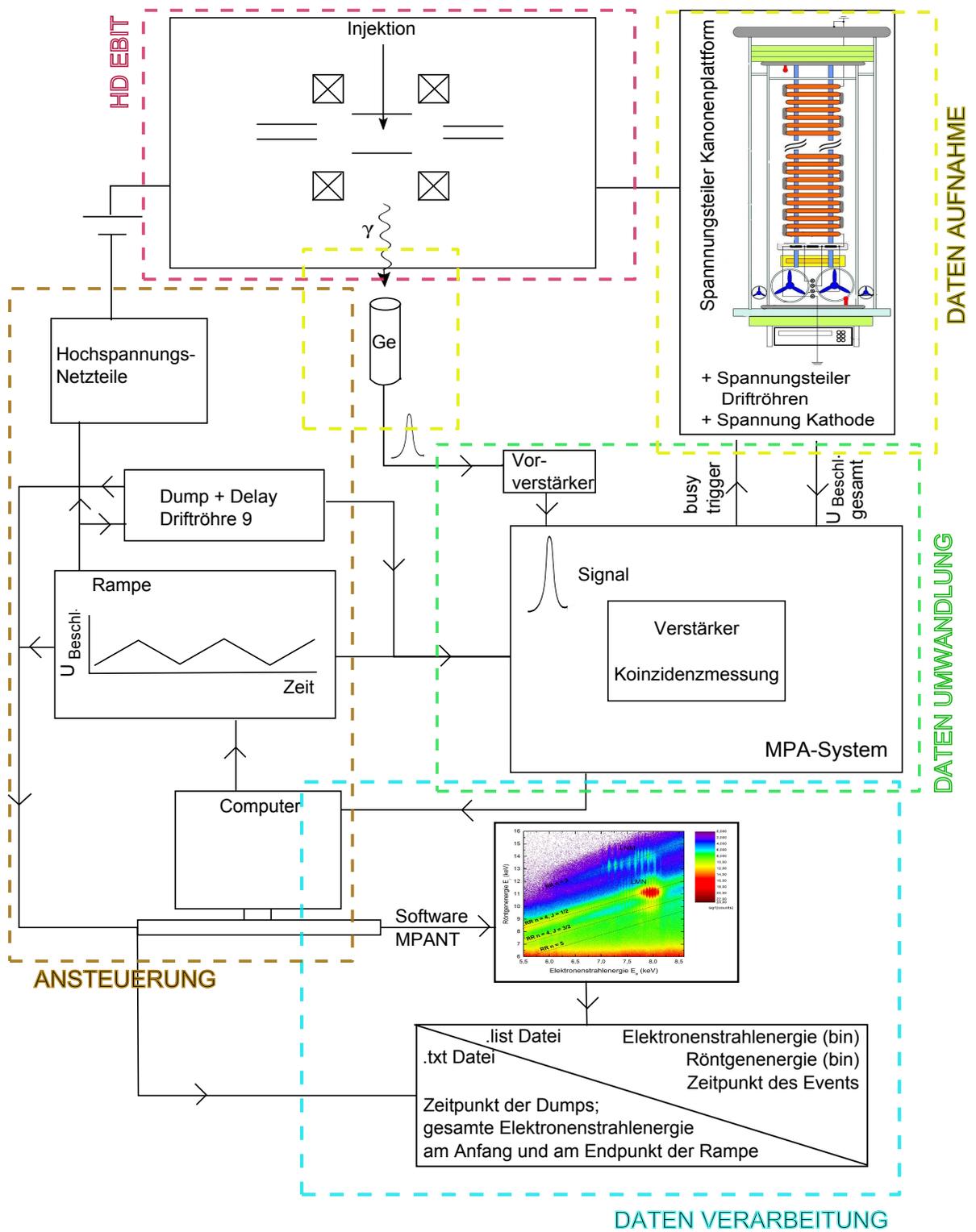


Abbildung 4.1: Gesamtschema des Datenerfassungssystems. Die Messung, die in der Datenverarbeitung als Beispiel eingebunden ist, wird in Kapitel 5.2 näher untersucht.

## 4.2 Messung und Ansteuerung

Die Elektronenstrahlenergie setzt sich wie bereits erwähnt aus den Spannungen, die an der Elektronenkanone und deren Plattform anliegen sowie aus den Spannungen an den Driftröhren zusammen. Die Spannungen, die an der Elektronenkanone anliegen, werden über ein von einem Computer aus verwaltetes Kontrollsystem direkt angesteuert und durch einen Autofokus auf einem bestimmten Wert gehalten. Ebenso läuft die Ansteuerung der Spannungen an den Driftröhren über den PC. Aber nicht nur die Ansteuerung wird über Computer verwaltet sondern auch die Ausgabe der Spektren, die Weiterverarbeitung und die Speicherung der Daten. In Abbildung 4.1 ist schematisch dargestellt, wie die Datenerfassung an der HD EBIT funktioniert.

Die tatsächliche Spannungsdifferenz wird durch den Einsatz von Spannungsteilern genauer ausgelesen. Diese Spannungen werden dann über einen Server addiert und in das MPA-System des Röntgendetektors eingespeist. Auf diese Weise kann man mithilfe der Software des Röntgendetektors direkt die Röntgenenergie gegen die Elektronenstrahlenergie auftragen lassen.

Um DR-Resonanzen zu vermessen ist es notwendig, einen bestimmten Bereich der Elektronenstrahlenergie immer wieder zu durchfahren und währenddessen die Röntgenenergie zu detektieren. Auch ist es wichtig, die Elektronenstrahlenergie sowohl hoch- als auch herunterzufahren, da hierdurch nahe beieinander liegende Resonanzen besser erkennbar werden. Es kann beispielsweise vorkommen, dass durch die Resonanz und dadurch Rekombination eines bestimmten Ladungszustandes eine zweite, energetisch knapp dahinter liegende Resonanz des gleichen Ladungszustandes eine wesentlich geringere Intensität besitzt. Denn durch Rekombination kann die Ladungszustandsverteilung direkt nach einer Resonanz verändert vorliegen. Wenn man sich nun von beiden Seiten an diese Resonanz annähert sollte sich dieses Problem umgehen lassen.

**Tabelle 4.1:** Messparameter der Praseodym Photorekombinationsmessung bei 100 mA

Parameter	Wert
Rampzeit	200 s
Anzahl Schritte	4000
Zeitpunkt der Dumps	alle 83 s
Dumplänge	1 s
Brutzeit	35 s
Rampe	12 - 16 kV

Die Ansteuerung der DR Messung läuft über ein Programm, das zusätzlich zur Rampe der Elektro-

nenstrahlenergie auch dafür sorgt, dass regelmäßig die Fallenmitte entleert wird (ein so genannter Dump), da sich nach etwa 180 s derart viele Wolframionen in der Falle sammeln, dass sie die leichteren Barium- und Praseodym-Ionen aus der Fallenmitte verdrängen. Hierzu noch einige ergänzende Informationen. Die Programme zu einer Photorekombinationsmessung umfassen einige Parameter, wie den Zeitpunkt und die Länge der Dumps, die Brutzeit (Ruhezeit nach einem Dump um wieder die Ladungszustandsverteilung von vor dem Dump zu erreichen), die Parameter der Beschleunigungsspannungsrampe etc.. Als Beispiel sind in Tabelle 4.1 die Werte zur Photorekombinationsmessung von Praseodym bei einem Strom von  $I_e = 100$  mA dargestellt. Damit bei der Messung keine Daten oder Einstellungsparameter verloren gehen, werden, wie in Abbildung 4.1 dargestellt, alle Informationen abgespeichert.

# Kapitel 5

## Auswertung

### 5.1 Photorekombination in hochgeladenen Praseodym-Ionen

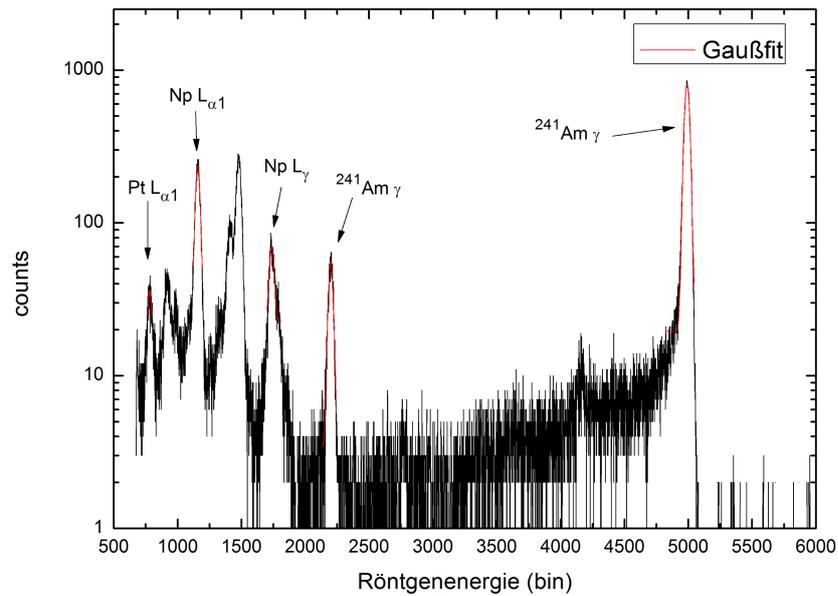
#### 5.1.1 Kalibration des Röntgendetektors mit einer Americium-241 Quelle

Zur Kalibration des Röntgendetektors wurde eine Americium-241 Quelle verwendet, die zwischen EBIT und Röntgendetektor gestellt wurde. Americium eignet sich für die Kalibration, da es im Messbereich (5 bis 60 keV) des verwendeten Röntgendetektors (ORTEC Germaniumdetektor Modell: GLP-36360/13-P) einige deutliche und bereits genau vermessene Peaks aufweist. Tabelle 5.1 fasst die Werte der Linien zusammen und Abbildung 5.1 zeigt das Spektrum der Americium-241 Quelle.

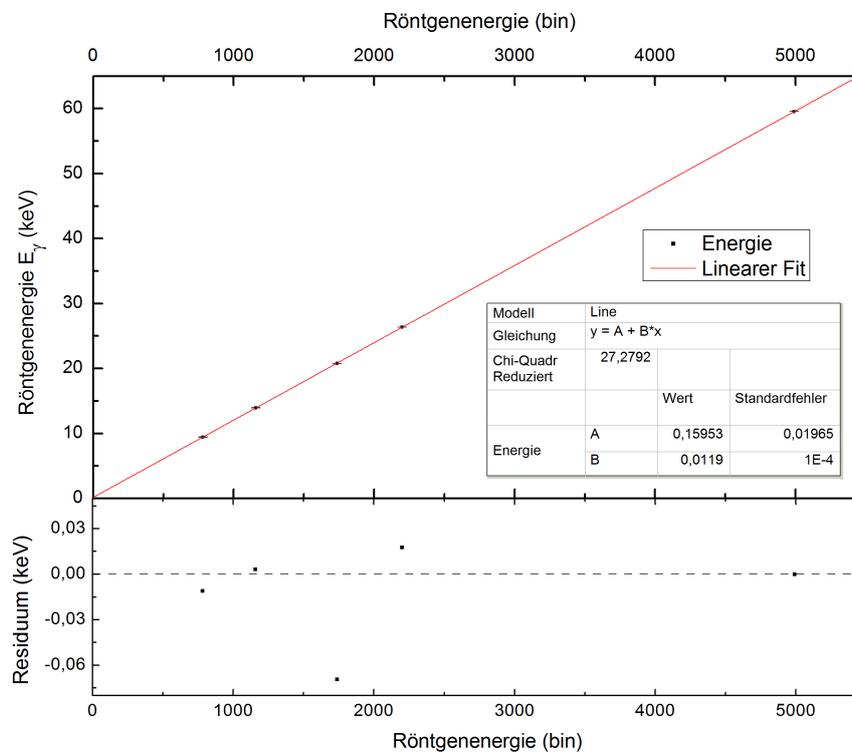
**Tabelle 5.1:** Americium Linien die zur Kalibration des Germanium-Röntgendetektors verwendet wurden.

Linie	Energie (keV)
Pt $L_{\alpha 1}$	9,4423
Np $L_{\alpha 1}$	13,9441
Np $L_{\gamma}$	20,77
$^{241}\text{Am } \gamma$	26,36
$^{241}\text{Am } \gamma$	59,5412

Um die Pixel mit der dazugehörigen Energie identifizieren zu können, wurden die deutlichsten Peaks mit einer Gaußkurve gefittet und mit den Werten aus Tabelle 5.1 eine Kalibrationskurve geplottet (siehe Abbildung 5.2). Die Fitparameter der linearen Kurve ergaben eine Steigung von  $(0,0119 \pm 0,0001) \frac{\text{keV}}{\text{bin}}$  und einen y-Achsenabschnitt von  $(0,16 \pm 0,02) \text{ keV}$ .

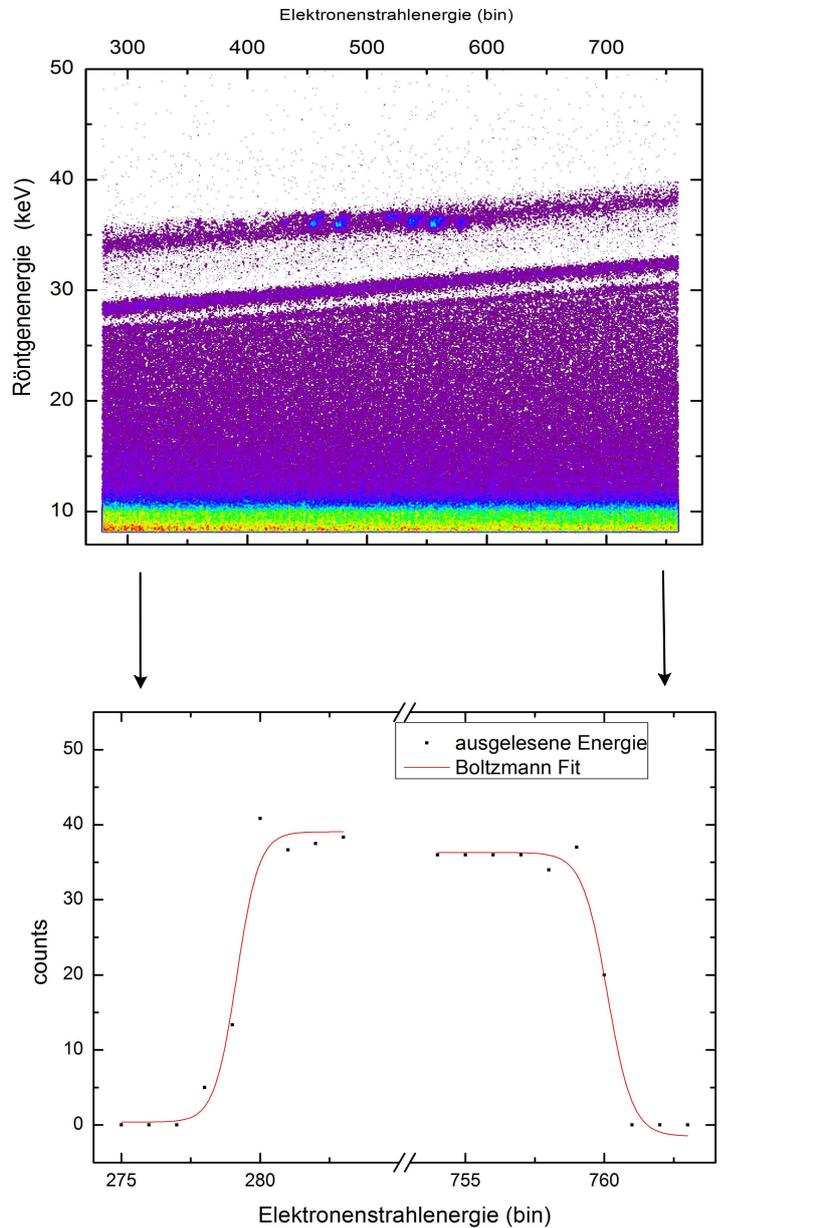


**Abbildung 5.1:** Mit dem Röntgendetektor aufgenommenes, logarithmisch dargestelltes Americium-241 Spektrum zur Kalibration der Röntgenenergie



**Abbildung 5.2:** Kalibrationskurve der gefitteten Americium-241 Peaks und den dazugehörigen Residuen im unteren Diagramm

### 5.1.2 Kalibration der Elektronenstrahlenergie



**Abbildung 5.3:** Der obere Graph stellt die Röntgenenergie bei der jeweiligen Elektronenstrahlenergie als 2D Konturdiagramm der Photorekombination dar. Er gehört zu einer Messung bei 100 mA und injiziertem Praseodym. Die Farbe skaliert mit der Anzahl der counts. Wenn man den oberen Graphen auf die Elektronenstrahlachse projiziert, erhält man das untere Diagramm. Man sieht dort, bei welchen Kanälen der Elektronenstrahlenergie wieviel Ereignisse aufgezeichnet wurden. Um den Start- und Endpunkt der Elektronenstrahlenergie zu bestimmen wurden Boltzmann Kurven an die Daten im unteren Graphen gefittet.

Um die Elektronenstrahlenergie kalibrieren zu können, sind mehrere Schritte notwendig. Zunächst muss der Start- und Endpunkt der Elektronenstrahlenergie-Rampe bestimmt werden. Dazu wurden in Abbildung 5.3 die counts gegen den jeweiligen Kanal der Elektronenstrahlenergie aufgetragen. Die Elektronenstrahlenergie setzt sich aus der Spannung an der Kathode, der Elektronenkanonen-Plattform und den Driftröhren zusammen. Später wird diese noch aufgrund der Raumladung korrigiert werden müssen. Um die Beschleunigungsspannung möglichst genau auszulesen, werden die früher erwähnten Spannungsteiler an der Plattform der Elektronenkanone und an den Driftröhren ausgelesen. Die ausgelesenen Spannungen werden zur Spannung der Kathode addiert und als Elektronenstrahlpotential in Kanälen ausgegeben (siehe Abbildung 5.3).

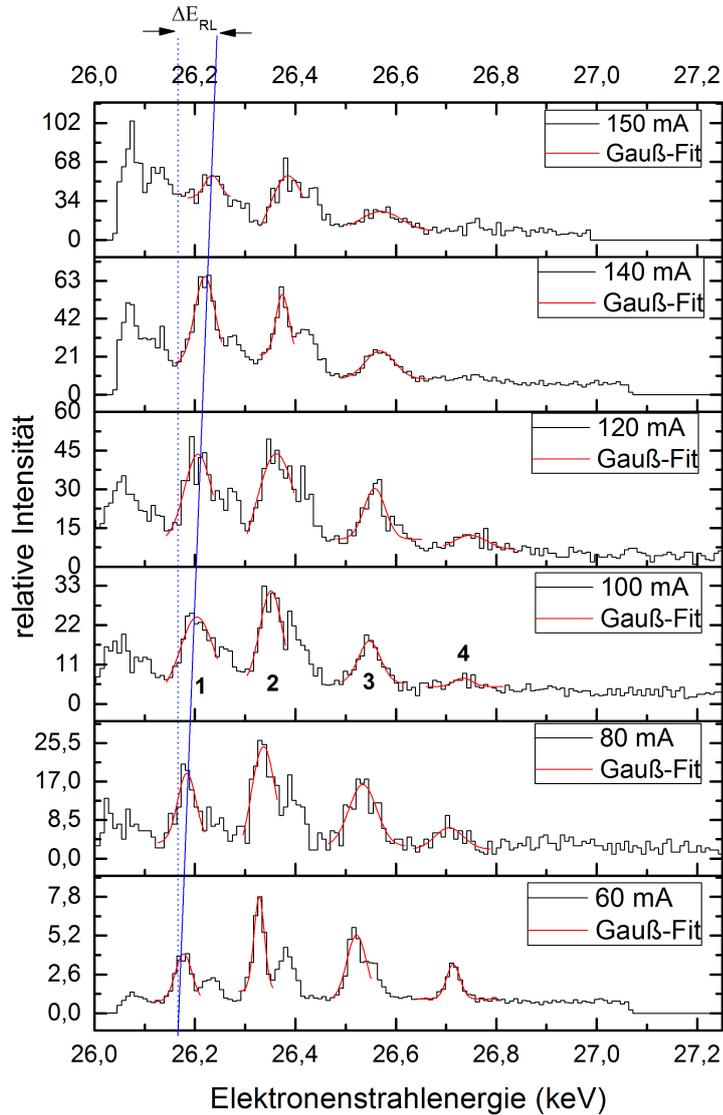
$$E_{\text{Elektronenstrahl}} = (U_{\text{Kathode}} + U_{\text{Plattform}} - U_{\text{Driftröhren}}) \cdot e \quad (5.1)$$

Um Schwankungen des Start- und Endpunktes der Spannungsrampe mit einzubeziehen, werden diese Daten bei jedem Hoch- bzw. Herunterfahren der Spannung in eine Datei geschrieben. Daraus wurden die Mittelwerte zu  $U_{\text{Start}} = (23,997 \pm 0,002)$  keV und  $U_{\text{Ende}} = (28,078 \pm 0,002)$  keV bestimmt. Identifiziert man diese Werte mit dem zentralen x-Wert des Boltzmann-Fits in Abbildung 5.3, erhält man eine erste Kalibration in der allerdings noch keine Raumladung in Betracht gezogen wurde.

### 5.1.3 Abschätzung der Raumladung

Nach Gleichung 3.5 hängt die Raumladung linear mit dem Strom des Elektronenstrahls  $I_e$  zusammen. Um den Beitrag der Raumladung an der Elektronenstrahlenergie zu berechnen, betrachtet man deswegen DR-Resonanzen bei verschiedenen Strömen und extrapoliert diese auf einen Strom  $I_e = 0$  mA. Bei einem Strom von  $I_e = 0$  mA sollte auch der positive Anteil der Raumladung aufgrund der Ionen bei Null liegen, da bei keinem Strom auch keine Ionen produziert werden. In Abbildung 5.4 ist ein Teil der DR-Resonanzen auf die Elektronenstrahlenergieachse projiziert und mit der Laufzeit der Messung normiert. Der projizierte Bereich entspricht nicht dem ganzen Elektronenstrahlenergiebereich in dem DR-Resonanzen auftauchen aber aus Gründen der Messzeit und besserer Auflösung wurde nur ein Teil der DR-Resonanzen bei allen Strömen aufgenommen. Vier deutliche Peaks wurden dann ausgesucht um sie mit Gaußfunktionen zu fitten und den Mittelwert gegen den dazu gehörigen Strom in Abbildung 5.5 zu plotten. Durch die linearen Fits kann man daraus bei einem Strom von 0 mA den Wert der Raumladung erhalten. Durch Mittelwertbildung der vier Kurven erhält man einen Wert von  $(0,593 \pm 0,037) \frac{\text{eV}}{\text{mA}}$  für die Raumladung bei  $E_e = 26,45$  keV.

Zusätzlich zur linearen Abhängigkeit von der Stromstärke hängt die Raumladung noch von der Geschwindigkeit ab (siehe Gleichung 3.5). Die Geschwindigkeit wiederum hängt bei einem festen Strom mit der Wurzel der angelegten Spannung zusammen, wie in Gleichung 3.6 zu sehen ist.

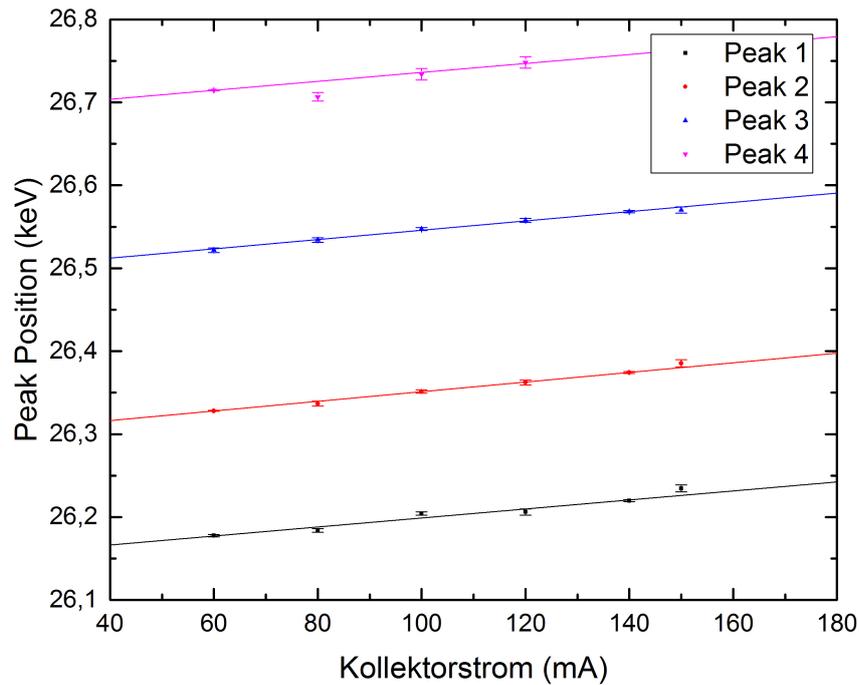


**Abbildung 5.4:** Projektionen der DR-Resonanzen bei verschiedenen Kollektorströmen. Es wird davon ausgegangen, dass der Kollektorstrom dem Strom in der Mitte der Falle entspricht. Einige deutliche Resonanzen sind mit Gaußkurven gefittet, die Mittelwerte davon sind in Abbildung 5.5 zum Extrapolieren auf  $I_e = 0$  mA verwendet wurden. Die counts wurden mit der Laufzeit der Messung zu einer relativen Intensität normiert. In blau ist angedeutet, wie sich die Raumladung in Abhängigkeit der Ströme verschiebt.

Da die nichtlineare Korrektur der Raumladungsverschiebung sehr klein ist (in einem Energiefenster von 2 keV ca. 4 eV), kann man sie in guter Näherung nichtrelativistisch, mit einer Geschwindigkeit wie in Gleichung 3.7, berechnen:

$$\Delta E_{\text{Raumladung}, n. rel.} = const. \cdot \frac{1}{\sqrt{U_{\text{Beschl.}}}} \quad (5.2)$$

wobei  $U_{Beschl.}$  der Spannungsdifferenz zwischen Kathode und Driftröhren entspricht. Korrigiert man die Elektronenstrahlenergie mit der Raumladung erhält man die in Abbildung 5.6 zu sehende Kalibration der x-Achse. Wie man beim Vergleich mit den Theoriewerten sehen wird, entspricht dies allerdings noch immer nicht der korrekten Kalibration.

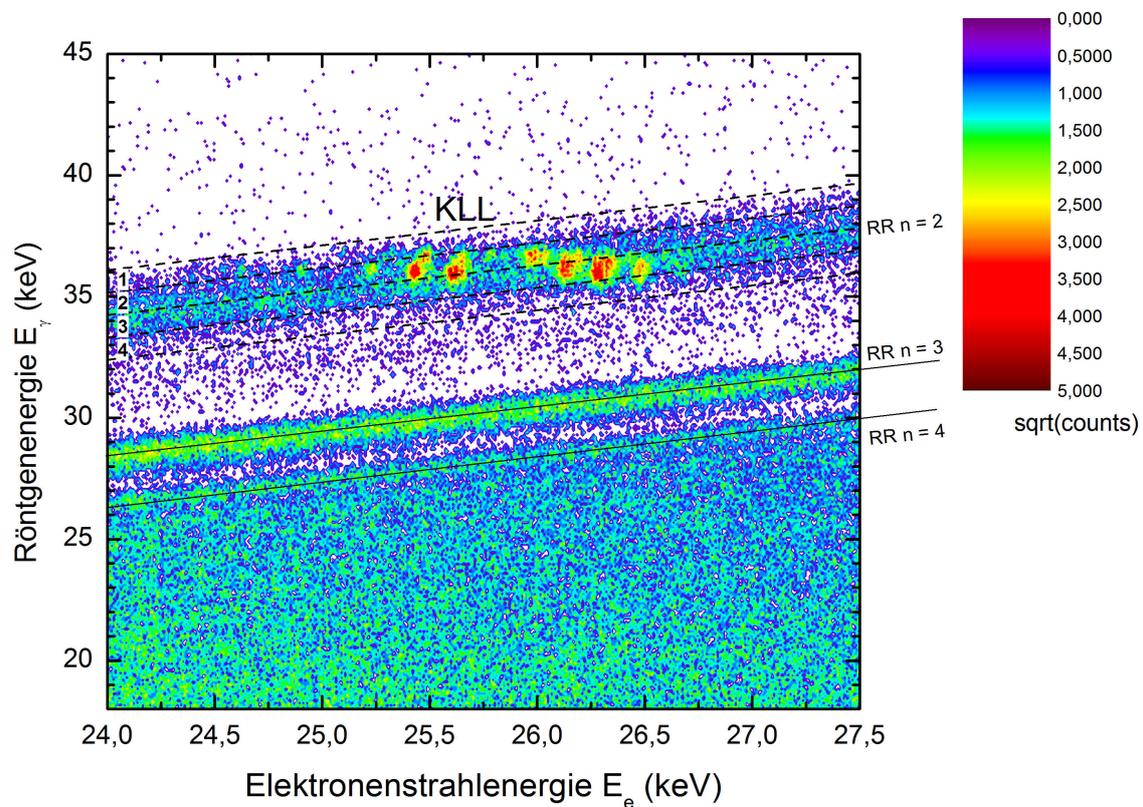


**Abbildung 5.5:** Aufgetragen ist die mittlere Elektronenstrahlenergie der Gaußfits in Abbildung 5.4 (Nummerierung s. Messung bei 100 mA) gegen den Kollektorstrom. Die Positionen der Peaks sind dann linear gefittet worden, um durch eine Extrapolation auf  $I_e = 0$  mA die Raumladung zu bestimmen.

#### 5.1.4 KLL DR-Resonanzen

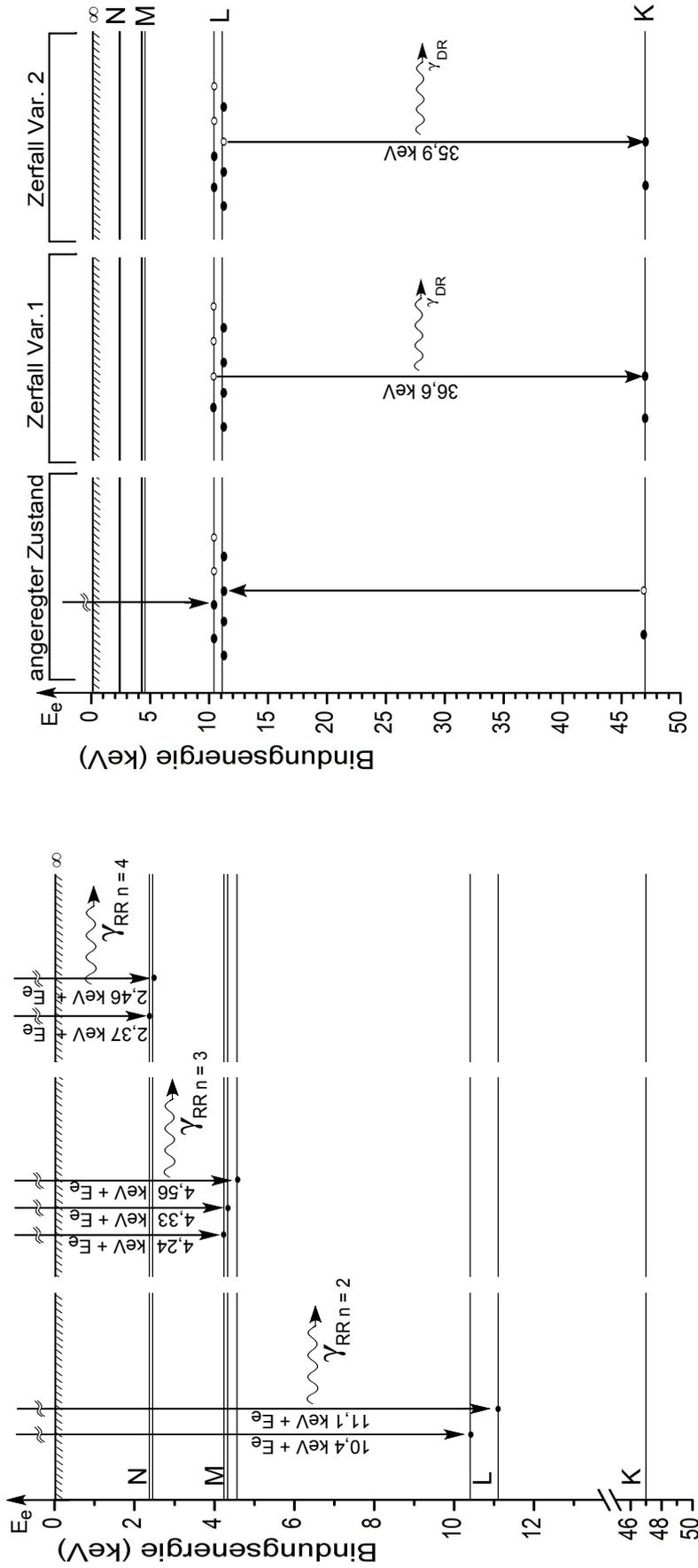
In Abbildung 5.6 ist ein zwei dimensionales Konturdiagramm von Praseodym zu sehen. Mithilfe der bereits beschriebenen Spannungsteiler und dem Röntgendetektor aufgenommen, ist dabei die Elektronenstrahlenergie  $E_e$  auf der x-Achse und die Röntgenenergie der ausgesandten Strahlung aus der Mitte der Falle auf der y-Achse aufgetragen. Farblich dargestellt ist die Häufigkeit der Events, aus der allerdings aus visuellen Gründen vor dem Plotten die Wurzel gezogen wurde. Hierdurch werden auch kleinere Intensitätsunterschiede deutlich sichtbar, wie zum Beispiel die schwache DR-Resonanz bei  $E_e \approx 24,9$  keV. Die diagonalen Streifen im Spektrum stammen von der radiativen Rekombination in die  $n = 2$ , die  $n = 3$  und die  $n = 4$  Schalen (siehe 5.7 links). Dieser in Gleichung 2.17 beschriebene Prozess setzt Energie frei, die sich aus der Energie des Elektrons und der Bindungsenergie des rekombinierenden Elektrons

zusammensetzt. Daher ist die Steigung der Diagonalen etwa 1. Zudem kann man DR-Resonanzen im Bereich  $24,2 \text{ keV} < E_e < 27,0 \text{ keV}$  erkennen. Es handelt sich dabei um KLL DR-Resonanzen bei denen ein Elektron des Elektronenstrahls in der L-Schale eingefangen wird. Mit der freigewordenen Energie wird ein Elektron aus der K- in die L-Schale angehoben (siehe 2.19). Abbildung 5.7 (rechts) zeigt zwei der dabei möglichen Zerfallskanäle. Die bei den verschiedenen Zerfällen freiwerdende Energie unterscheidet sich um  $\Delta E = 0,7 \text{ keV}$ , was die Breite der Resonanzen in Abbildung 5.6 in y-Richtung erklärt (zusätzlich zur Auflösung des Röntgendetektors).



**Abbildung 5.6:** 2D Konturdiagramm der Photorekombination von hochgeladenem Praseodym im Röntgenbereich, das die Wurzel der Intensität zeigt. Die diagonalen Linien markieren die radiative Rekombination in die  $n = 2$  und  $3$  Schalen. Die helleren Flecken stellen Resonanzen der KLL dielektronischen Rekombination dar. Von eins bis vier sind die schrägen Bereiche nummeriert, die separat projiziert wurden (s. Abbildung 5.10). (Die in Abbildung 5.8 begründete Verschiebung um  $65 \text{ eV}$  ist in diesem Diagramm noch nicht angewandt.)

Um die experimentell gewonnenen Daten auf ihre korrekte Kalibrierung und auf Unterschiede zur theoretischen Vorhersage nach Z. Harman [8] zu untersuchen, wurden die theoretischen Peaks geplottet (Abbildung 5.8).

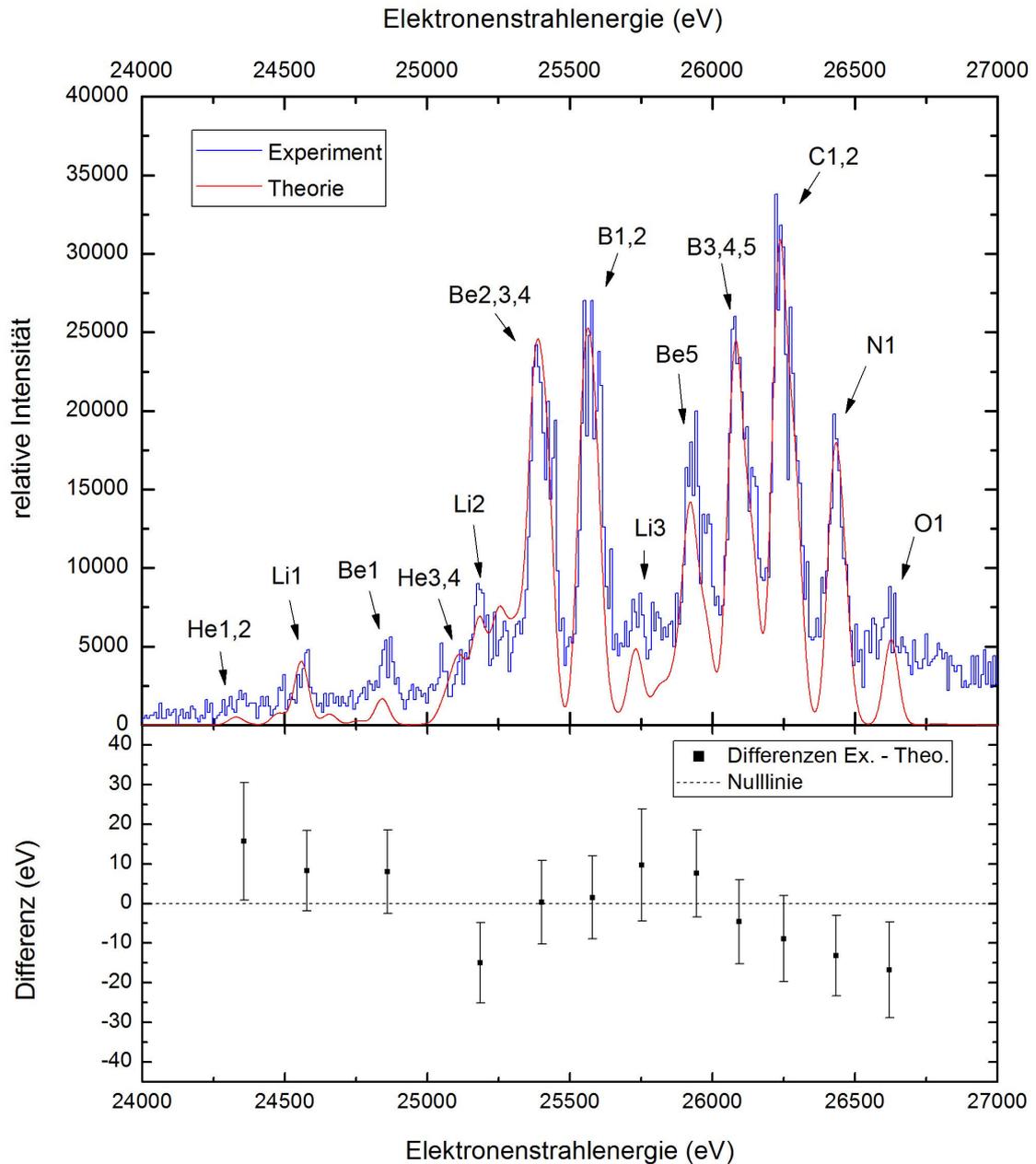


**Abbildung 5.7: Links:** Schema des hochgeladenen Praseodym-Ions im C-artigen Ladungszustand  $\text{Pr}^{+53}$ . Die Aufspaltung der N-Schale ist wegen der geringen Energiedifferenz nur angedeutet. Die Rechnungen zur Röntgenenergie der emittierten Photonen wurden mit FAC durchgeführt [13]. Die Röntgenenergien der eingezeichneten radiativen Rekombination  $n = 2$  bis 4 sind abhängig von der Elektronenstrahlenergie weswegen sie in Abb. 5.6 auf Diagonalen mit Steigung etwa 1 liegen.

**Rechts:** Energieschema der zwei Zerfallskanäle der KLL DR-Resonanz von C-artigem Praseodym. Zur Berechnung der Energieniveaus wurde das FAC Programm hinzugezogen.

**Tabelle 5.2:** Praseodym KLL DR-Resonanzen mit den angeregtem Zwischenzustand, theoretischer Resonanzenergie, experimenteller Energie [8]

Name	angeregter Zustand	Ladungs- zustand	J	P	theo. Resonanz Energie (eV)	ex. Resonanz Energie (eV)
He1	$1s2s^2$	He-artig	1/2	+	2,43290e+04	2,4357e+04
He2	$(1s2s)_1 2p_{1/2}$		1/2	-	2,43671e+04	
Li1	$1s2s^2 2p_{1/2}$	Li-artig	1	-	2,45593e+04	2,45773e+04
Be1	$1s2s^2 2p_{1/2}^2$	Be-artig	1/2	+	2,48427e+04	2,48601e+04
He3	$(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	He-artig	1/2	+	2,51002e+04	2,50526e+04
He4	$(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$		3/2	+	2,51221e+04	
Li2	$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}$	Li-artig	3	+	2,51837e+04	2,51856e+04
Be2	$(1s2s^2 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$		5/2	+	2,53766e+04	
Be3	$(1s2s^2 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	Be-artig	1/2	+	2,53986e+04	2,54018e+04
Be4	$(1s2s^2 2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$		3/2	+	2,54201e+04	
B1	$1s2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	B-artig	2	-	2,55503e+04	2,55791e+04
B2	$1s2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$		1	-	2,55898e+04	
Li3	$(1s2s)_1 (2p_{3/2}^2)_2$	Li-artig	3	+	2,57321e+04	2,57518e+04
Be5	$1s2s^2 (2p_{3/2}^2)_2$	Be-artig	5/2	+	2,59222e+04	2,59448e+04
B3	$(1s2s^2 2p_{1/2})_0 (2p_{3/2}^2)_2$		2	-	2,60700e+04	
B4	$(1s2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2$	B-artig	3	-	2,60858e+04	2,60937e+04
B5	$(1s2s^2 2p_{1/2})_1 (2p_{3/2}^2)_2$		1	-	2,61113e+04	
C1	$1s2s^2 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^2)_2$	C-artig	5/2	+	2,62336e+04	2,62491e+04
C2	$1s2s^2 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^2)_2$		3/2	+	2,62804e+04	
N1	$1s2s^2 2p_{1/2}^2 (2p_{3/2}^3)_{3/2}$	N-artig	2	-	2,64274e+04	2,64333e+04
O1	$1s2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	O-artig	1/2	+	2,66271e+04	2,66203e+04

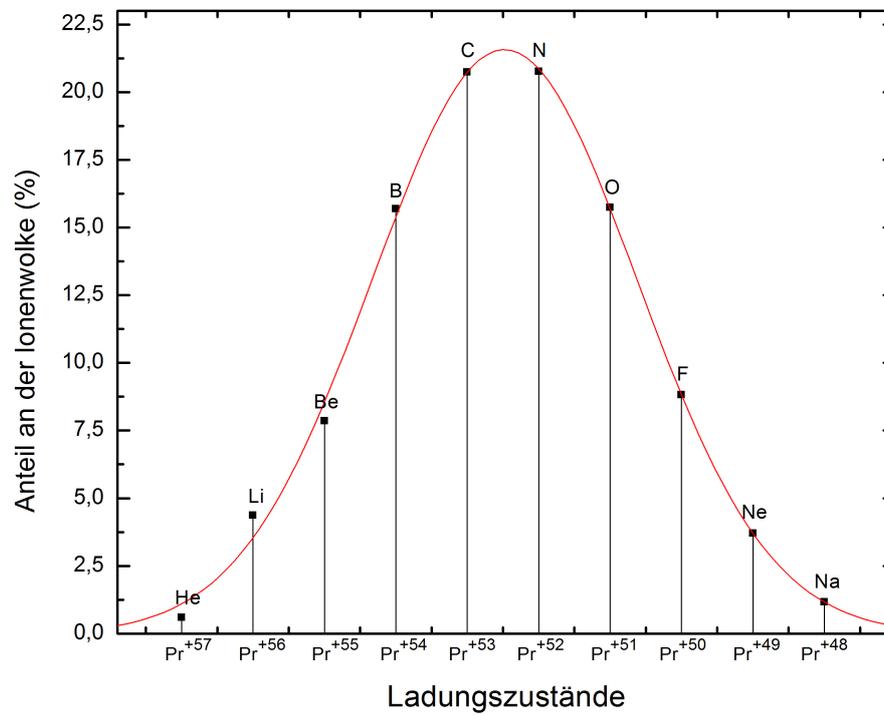


**Abbildung 5.8:** Addition und Projektion des Bereichs der KLL DR-Resonanzen auf die Achse der Elektronenstrahlenergie (100 mA Messung) (blau) mit einem Versatz in negative x-Richtung um 65 eV. Die nach der Theorie zu erwartenden Resonanzen sind in rot eingezeichnet [8]. Die Beschriftungen sind auf den hauptsächlich an der Intensität des Peaks beteiligten Ladungszustand von Praseodym zurückzuführen (siehe Tabelle 5.2). Im unteren Bereich ist die Differenz der Peak-Mitten zwischen Theorie und Experiment aufgezeichnet. Die eingezeichneten Fehlerbalken lassen sich auf die Genauigkeit der theoretischen Werte und die Fehler der Gauß-gefitzten experimentellen Peaks zurückführen.

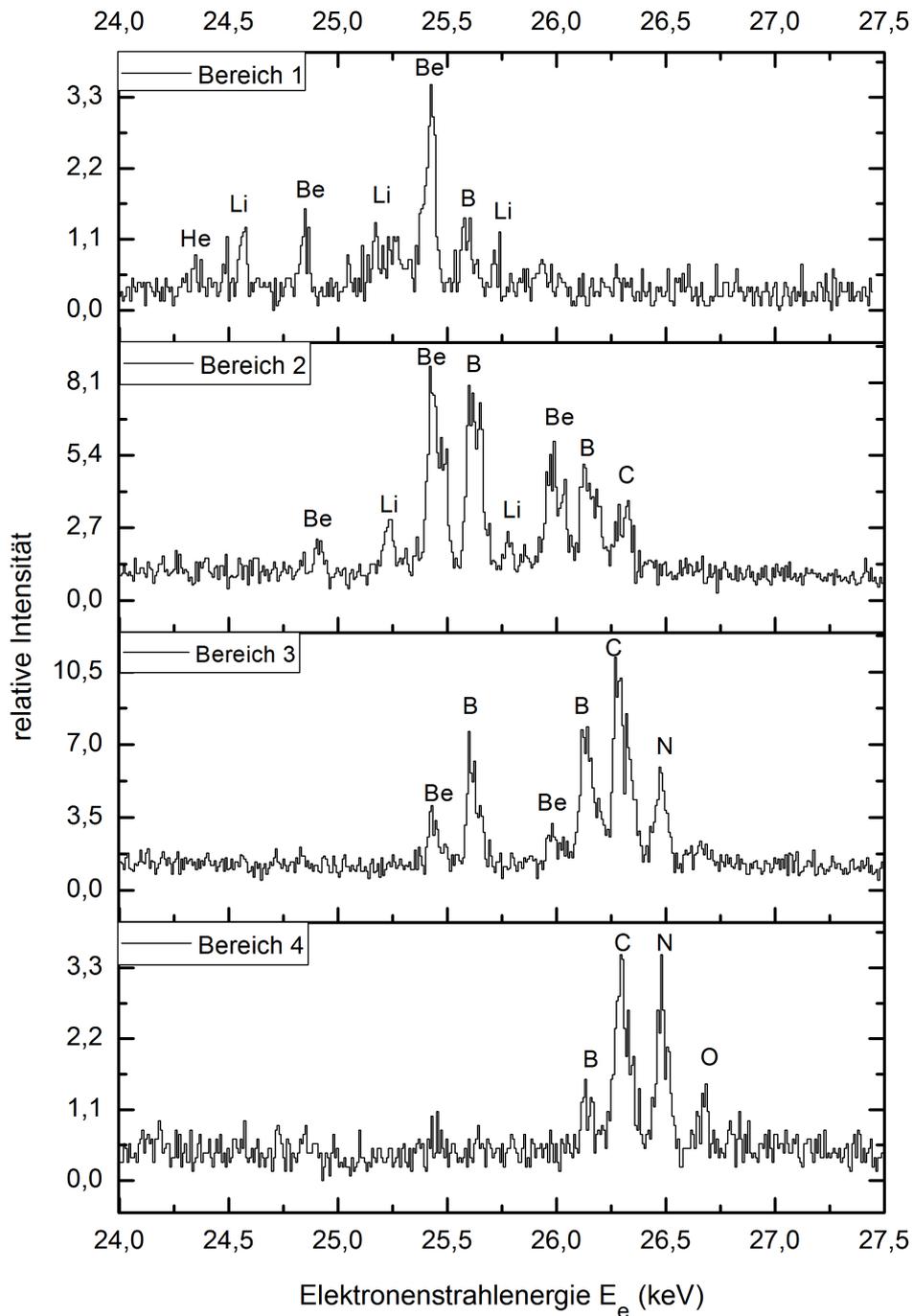
In den gegebenen Theorietabellen stehen neben der Resonanzenergie in eV der jeweiligen Ladungszustände auch noch eine Breite in eV der Peaks und eine Stärke in barn eV zur Verfügung. Auch wenn die angegebenen natürlichen Linienbreiten der Peaks bei  $> 2$  eV liegen, ist es für den Plot der Theoriewerte sinnvoll, eine generelle Breite von etwa 25 eV anzunehmen. Der Grund dafür liegt im dadurch vereinfachten Vergleich mit den experimentellen Werten. Um Resonanzen in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie zu untersuchen wäre es notwendig, dass die Elektronen alle die gleiche Flugbahn und Geschwindigkeit besitzen. Die Eigenschaften der EBIT und mögliche Fluktuationen der Beschleunigungsspannung ermöglichen dies aber nur im Rahmen einer Abweichung von etwa 25 eV. Der Elektronenstrahl beschreibt eine spiralförmige Bahn und durch die unterschiedlichen Raumladungen im Inneren des Strahls und an den Randgebieten weisen die Elektronen unterschiedliche Geschwindigkeiten auf. Auch die Temperatur der Elektronen spielt eine Rolle in der Geschwindigkeitsverteilung innerhalb des Elektronenstrahls. Die thermische Energie der Elektronen, die durch das Heizen der Kathode erreicht wird, wirkt wie die Raumladung gegen die Kompression des Elektronenstrahls durch das Magnetfeld der Helmholtzspulen an der Fallenmitte. Geht man von einer gleichen Breite aller Resonanzen aus, kann man die angegebene Stärke als Intensität übernehmen und erhält durch eine Addition aller Resonanzen das theoretische Spektrum zu sehen in Abbildung 5.8 (rote Linie).

Wenn man das experimentelle Spektrum zum Plot der theoretischen Resonanzen hinzufügt (Abb. 5.8 blau) wird deutlich, dass die experimentellen Werte um 65 eV versetzt zu den theoretischen Werten auftauchen. Da die theoretischen Werte allerdings mit einer Genauigkeit von 5–10 eV angegeben sind, muss es sich hierbei um eine fehlerhafte Kalibration eines Bauteils der EBIT handeln. Die Elektronenstrahlenergie wird hauptsächlich mithilfe der Spannungsteiler und dem Spannungsmessgerät an der Kathode ausgelesen, daher muss der systematische Fehler bei einem dieser Bauteile auftauchen.

Die Ladungszustände von Praseodym liegen in der Umgebung einer Elektronenstrahl-Ionenfalle nicht gleich häufig vor. Ausgegangen wird von einer in etwa gaußförmigen Verteilung der vorhandenen Ladungszustände. Mit dieser Annahme beginnend kann man die Gaußkurve über die Häufigkeit der Ladungszustände in der Fallenmitte so weit verschieben, bis die theoretischen Werte nicht mehr besser auf die experimentellen Werte abstimmbare sind. Diese Einstellung ist in Abbildung 5.9 zu sehen. Die Intensität der theoretischen Resonanzen wurde dabei mit dem Anteil an der Ionenwolke normiert um die in Abbildung 5.8 dargestellten Amplituden der Peaks zu erreichen. Bei einigen Ladungszuständen, beispielweise Be-artigem Praseodym kann man allerdings weiterhin eine Differenz in der Amplitude erkennen. Da die Intensität dabei aber bei einem Be-Peak nach oben und beim anderen Be-Peak nach unten abweicht, wird durch Anpassen der Ladungszustandsverteilung keine Verbesserung mehr zu erreichen sein. Der Grund für diese Abweichung könnten darin liegen, dass das theoretische Spektrum nicht die Überlagerung mit den Events der radiativen Rekombination mit einbezieht, im experimentellen Spektrum diese aber mit aufsummiert werden. Abbildung 5.10 stellt die in Abbildung 5.6 mit eins bis vier nummerierten Bereiche als Projektionen dar. Man kann auf dieser Darstellung die einzelnen Resonanzen der jeweiligen Ladungszustände noch besser voneinander trennen.



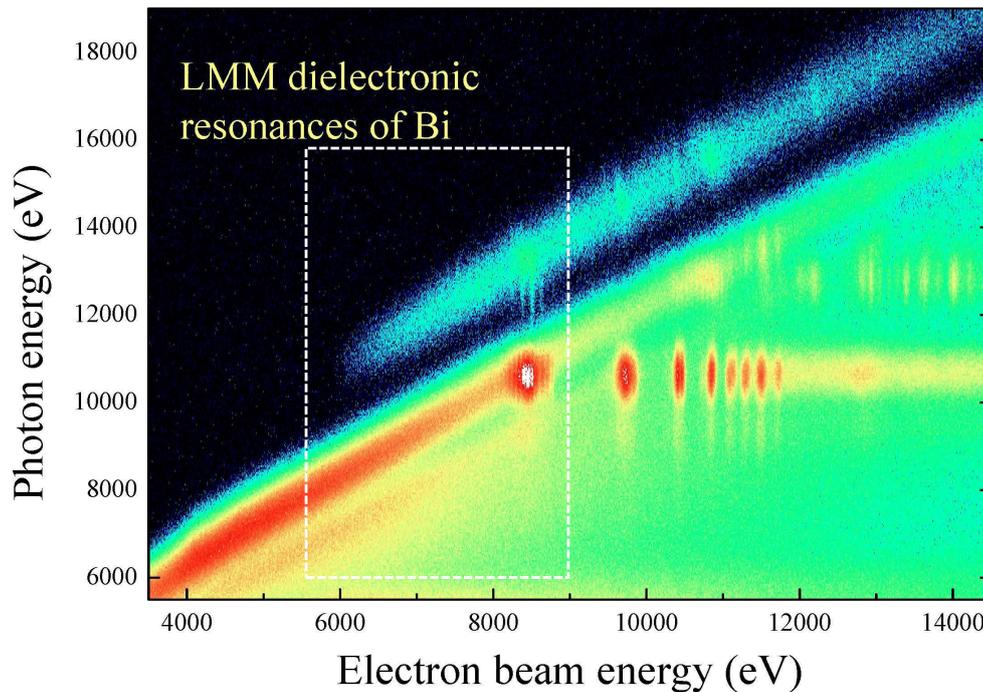
**Abbildung 5.9:** Die Ladungszustandsverteilung von hochgeladenen Praseodym-Ionen in der EBIT entspricht in etwa einer Gaußkurve. Die Werte des Verrechnungsfaktors stammen aus der Optimierung der Intensitäts-Übereinstimmung zwischen theoretischem und experimentellem Spektrum der DR-Resonanzen in Abbildung 5.8.



**Abbildung 5.10:** Projektionen auf die Elektronenstrahlenergieachse der mit eins bis vier markierten Bereiche in Abbildung 5.6. Die counts sind auf die Größe der aufsummierten Bereiche normiert. Die verschiedenen Peaks sind mit den Ladungszuständen von Praseodym gekennzeichnet, die den Hauptanteil an der Resonanz tragen.

## 5.2 Photorekombination in hochgeladenen Bismut-Ionen

Das Röntgenspektrum in Abbildung 5.11 zeigt eine Vielzahl an Resonanzen der dielektronischen Rekombination in hochgeladenen Bismut-Ionen. Um einige dieser dielektronischen Rekombinationen identifizieren zu können, wird im folgenden Kapitel das weiß umrandete Gebiet genauer untersucht.



**Abbildung 5.11:** Übersichtsspektrum der Bismut Photorekombination von J. Crespo aus 2010.

Für die Messung der photoelektronischen Rekombination in Bismut-Ionen wurde die Elektronenstrahlenergie  $E_e$  von 5,5 keV auf 8,6 keV hoch- und wieder heruntergefahren und währenddessen die Röntgenstrahlung detektiert. Die Röntgenenergie wurde wie in Kapitel 5.1.1 mit einer Americium-241 Quelle kalibriert. Da die Messungen mit Bismut hier nur qualitativ betrachtet werden, wurde von einer genauen Kalibration der Elektronenstrahlenergie abgesehen und diese nur über den Start- und Endpunkt der Potentialrampe kalibriert. Es ist demnach keine Raumladung beachtet worden.

In Abbildung 5.14 rechts wurden dann die Einzelmessungen aufsummiert und als 2D Konturdiagramm geplottet. Um auch die Resonanzen mit einer geringen Intensitätsdifferenz gut sichtbar zu machen, wurde vor dem Plotten wieder die Quadratwurzel der Intensität gebildet.

Die diagonalen Linien entstehen, wie schon in Kapitel 5.1.4 für Praseodym beschrieben, durch die radiative Rekombination. Man findet drei diagonale Linien, die zur RR in die M, N und O-Schale gehören ( $n = 3, 4$  und  $5$ ). Die Steigung der RR-Linien liegt bei etwas mehr als 1, was auf eine Verschiebung des Schwerpunkts der Ladungszustandsverteilung hin zu höheren Ladungszuständen zurückzuführen ist. Betrachtet man die RR:  $n = 4$  Linie, dann befindet sich der Schwerpunkt nach Abzug der kinetischen

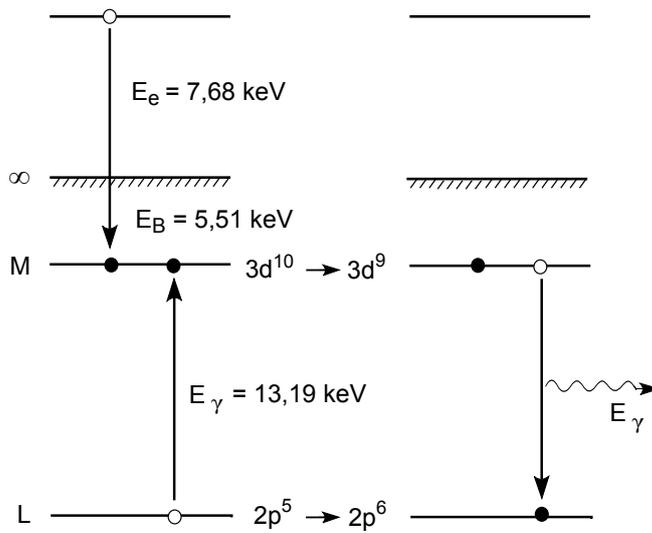
Energie des rekombinierenden Elektrons des Elektronenstrahls von  $E_e = 5,5$  keV bei einer Bindungsenergie von  $E_B = 2,78$  keV, was einem Se-artigen Ladungszustand von  $\text{Bi}^{49+}$  entspricht. Wandert man zu höheren Elektronenstrahlenergien  $E_e = 8,5$  keV erhält man  $E_B = 3,51$  keV. Dies liegt zwischen der Bindungsenergie der Cu-artigen und Ni-artigen Elektronen, demnach einem Schwerpunkt zwischen  $\text{Bi}^{54+}$  und  $\text{Bi}^{55+}$ . Die RR:  $n = 3$  Linie tritt erst oberhalb einer Elektronenstrahlenergie von  $5,8$  keV auf, da bei  $E_e = 5,616$  keV erstmals genug Energie vorliegt um die M-Schale aufzubrechen und einen Ladungszustand höher als Ni-artig zu produzieren. Auch bei der radiativen Rekombination in die M-Schale sieht man eine Verschiebung der Ladungszustandsverteilung hin zu höheren Ladungszuständen je höher die Elektronenstrahlenergie wird. Der Schwerpunkt verschiebt sich hier über die Breite des Spektrums von einem Ni-artigen Ladungszustand  $\text{Bi}^{55+}$  bis hin zu einem Ti-artigen Ladungszustand  $\text{Bi}^{61+}$ . Maximal produzierbar innerhalb des untersuchten Bereichs der Elektronenstrahlenergie ist ein P-artiger Ladungszustand  $\text{Bi}^{68+}$ .

Durch die vielen vorliegenden Ladungszustände und die damit verbundene Verschiebung der Bindungsenergien der noch besetzten Zustände des Ions (durch eine unterschiedlich starke Abschirmung der Kernladung), ergeben sich viele mögliche DR-Resonanzen und eine Identifizierung der einzelnen Resonanzen wird zu einer komplizierten Aufgabe. In diesem Kapitel wird daher nicht auf einzelne Resonanzen eingegangen, sondern qualitativ beschrieben, welche Resonanzen für die verschiedenen Energiebereiche in Frage kommen. Wichtig dabei ist, dass die kinetische Resonanzenergie der Elektronen auch tatsächlich im Bereich der im Spektrum zu sehenden DR-Resonanzen von  $7,0 \text{ keV} < E_e < 8,5 \text{ keV}$  liegt. Weiterhin ist zu beachten, dass für eine Rekombination in die M-Schale ein Loch in derselben von Nöten ist, diese also nur bei Ladungszuständen von  $\text{Bi}^{56+}$  und höher auftauchen kann. Eine LMM DR-Resonanz benötigt sogar  $\text{Bi}^{57+}$  oder noch höhere Ladungszustände.

Um einen Überblick zu erhalten, bei welchen Röntgenenergien die Übergänge der DR-Resonanzen liegen sollte, wurden Berechnungen mit FAC durchgeführt. Um auch die Verschiebung der Energieniveaus bei verschiedenen Ladungszuständen abschätzen zu können wurde zusätzlich zu dem häufig vorliegenden Ni-artigen Bismut-Ion ( $\text{Bi}^{55+}$ ) auch noch der Grenzfall des gerade noch produzierbaren P-artigen Bismut-Ions ( $\text{Bi}^{68+}$ ) berechnet. An diesen beispielhaft gewählten Ladungszuständen wurde deutlich, wie sehr die DR-Resonanzen sich mit dem Ladungszustand verschieben. So liegt zum Beispiel ein Teil LMN Resonanz von  $\text{Bi}^{68+}$  bei den gleichen Energien wie die LMM Resonanz von  $\text{Bi}^{55+}$ . Um besser beschreiben zu können, welche DR-Prozesse im untersuchten Energiebereich auftauchen, wird im Folgenden in 5 Bereiche der Röntgenenergie unterteilt (siehe 5.14 rechts gepunktet umrandete Bereiche).

**Bereich 1:  $13,72 \text{ keV} < E_\gamma < 14,32 \text{ keV}$ :** Die Höhe der Röntgenenergie lässt hier auf einen Zerfall  $N \rightarrow L$  schließen. Diesen Zerfall ermöglicht die LMN DR-Resonanz, wenn das Elektron, das in die N-Schale rekombiniert ist, in das L-Loch fällt. Zusätzlich kann es sich auch um eine LNM DR-Resonanz sein, bei der das Elektron, das von L nach N angehoben wurde, in das L-Loch fällt.

**Bereich 2:  $12,68 \text{ keV} < E_\gamma < 13,42 \text{ keV}$ :** In diesem Bereich der Röntgenenergie liegen mehrere Zerfälle. Bei einem niedrigeren Ladungszustand (Bsp: Fe-artig) liegen sowohl  $N \rightarrow L$  ( $j = 3/2$ ) als auch



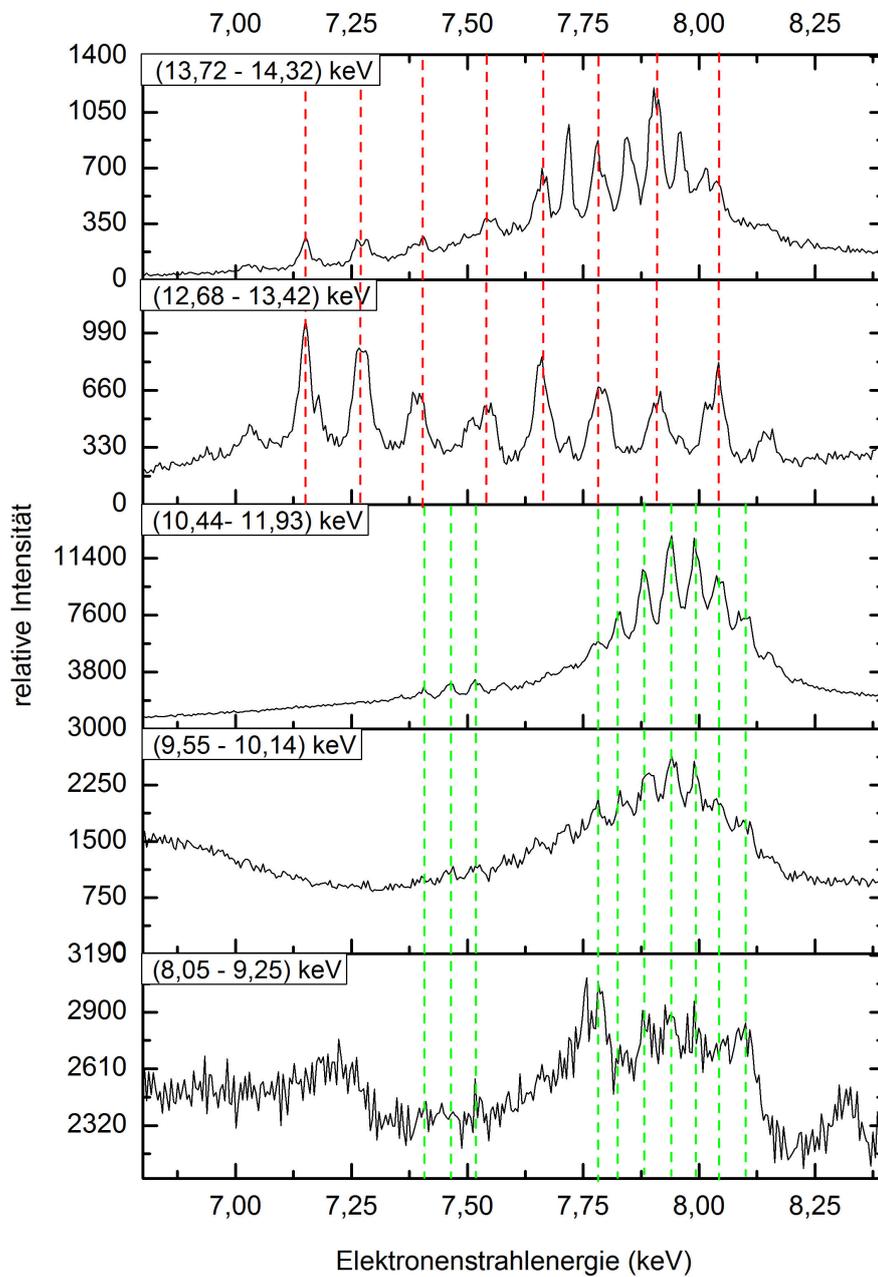
**Abbildung 5.12:** Schematische Darstellung der mit FAC berechneten LMM DR-Resonanz in Fe-artigem Bismut ( $\text{Bi}^{+57}$ ). Zur besseren Übersichtlichkeit sind nur die am Übergang beteiligten Energieniveaus eingezeichnet.

$M \rightarrow L$  ( $j = 1/2$ ) in diesem Bereich der Röntgenenergie. Es liegen hier demnach LMM und LNM DR-Resonanzen vor. Ein Beispiel einer solchen LMM DR-Resonanz ist in Abbildung 5.12 zu sehen. Bei höheren Ladungszuständen (Bsp: P-artig) erreichen  $M \rightarrow L$  ( $j = 1/2$ ) Übergänge die notwendigen Energien durch LMN Resonanzen. Es kann allerdings auch wieder eine LNM Resonanz sein, im Falle dass das Elektron welches rekombiniert ist in das L-Loch fällt.

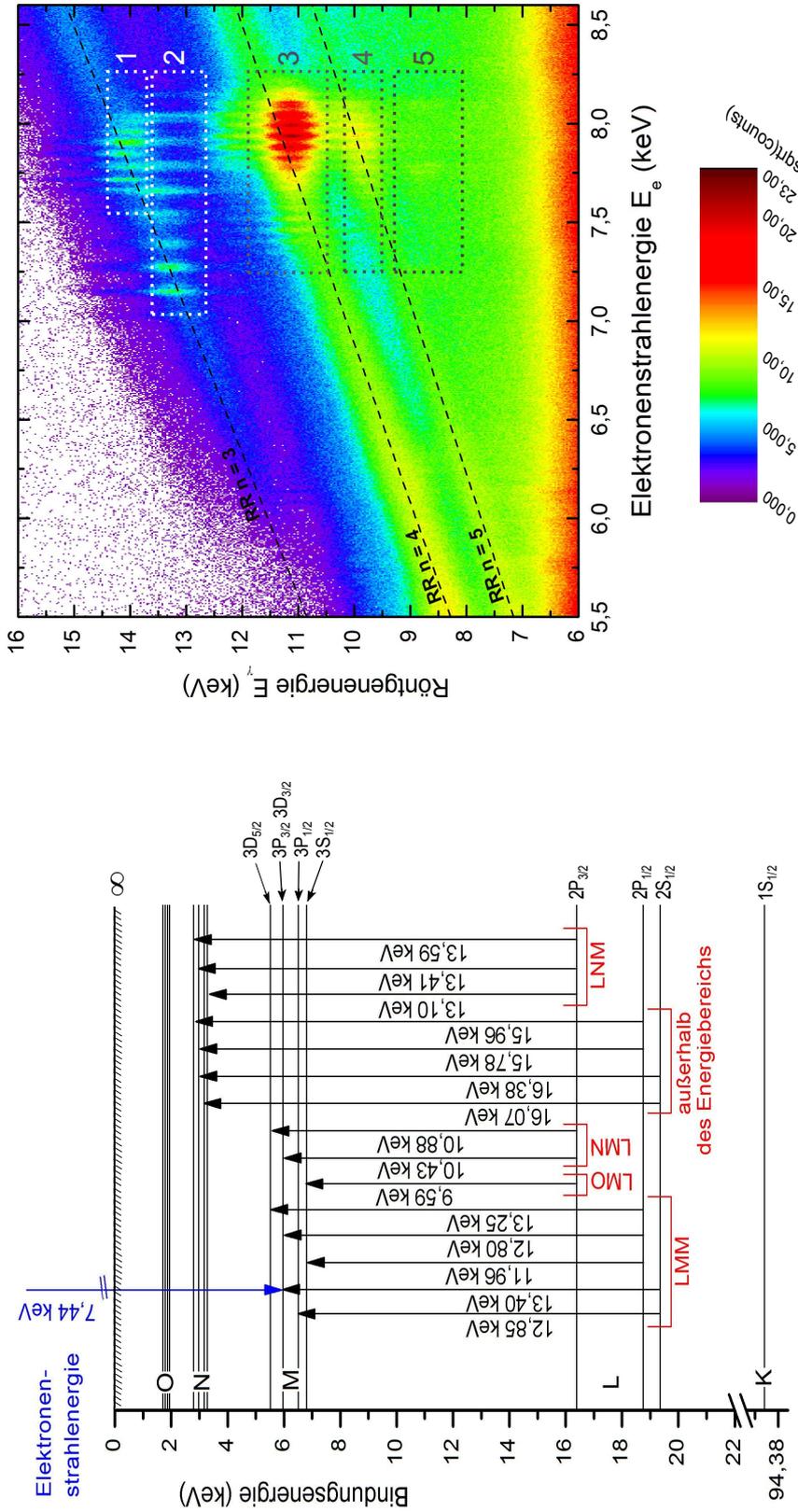
**Bereich 3:  $10,44 \text{ keV} < E_\gamma < 11,93 \text{ keV}$ :** Die Röntgenenergie stammt von  $M \rightarrow L$  ( $j = 3/2$ ). Dem Zerfall geht entweder eine LMN oder eine LNM Resonanz wieder mit dem Kriterium voran, dass eines der M-Elektronen strahlend in das freie tiefere Niveau übergeht.

**Bereich 4:  $9,55 \text{ keV} < E_\gamma < 10,14 \text{ keV}$ :** Diese Resonanzen liegen energetisch in einem Bereich der  $M \rightarrow L$  ( $j = 1/2$ ) Übergänge. Es könnte zu diesen Übergängen kommen, falls hier eine LMO Anregung vorliegt. Die LMO DR-Resonanz der bei dieser Messung häufigsten Ladungszustände müsste im Bereich  $7,5 \text{ keV} < E_e < 7,9 \text{ keV}$  liegen. Allerdings kann man in Abbildung 5.13 sehen (grüne gestrichelte Linien), dass die Resonanzen bei denselben Resonanzenergien liegen wie im energetisch nächsthöheren Bereich. Es ist daher zu vermuten, dass es sich bei diesen Resonanzen um Zerfälle zweiter Ordnung der darüberliegenden, sehr deutlichen LMN und LNM Resonanzen handelt. Mit zweiter Ordnung ist hier gemeint, dass nicht ein einzelnes Elektron in ein tieferes Energieniveau des Ions übergeht, sondern 2 Übergänge gleichzeitig stattfinden, mit einem Übergang im hier untersuchten Röntgenenergiebereich und einem tiefer energetischen Photon, das nicht in der Messung sichtbar wird, da es in den Bereich des charakteristischen Bi-Spektrums bzw. den Bereich der Bremsstrahlung fällt ( $E_\gamma < 7 \text{ keV}$ ).

**Bereich 5:  $8,05 \text{ keV} < E_\gamma < 9,25 \text{ keV}$ :** Schwach zu erkennen sind hier auch LMN und LNM Resonanzen, die in mehreren Zerfällen wieder in den Grundzustand übergehen und dadurch tiefer energetische Photonen aussenden.



**Abbildung 5.13:** Projektion der DR-Resonanzen des Bismut-Spektrums. In den Kästen ist angegeben, welche Bereiche der Röntgenenergie dabei aufsummiert wurden. Die gestrichelten Linien deuten an, welche der Peaks bei denselben Resonanzenergien liegen.



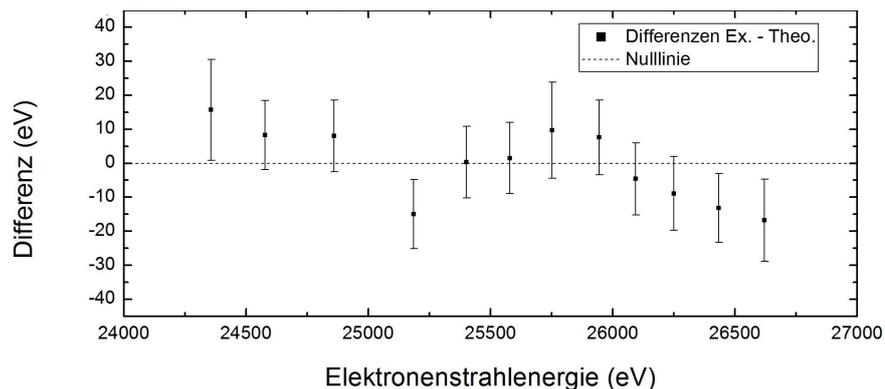
**Abbildung 5.14: Links:** Leveldiagramm der mit FAC berechneten Praseodym-Ionen (Ladungszustand: Ni-artig). Mögliche Übergänge sind als Pfeile mit den jeweiligen Energiedifferenzen angegeben. Die Aufspaltung der M, N und O Schale ist angedeutet, jedoch aufgrund der kleinen Energiedifferenzen nicht vollständig abgebildet. In blau ist beispielhaft ein rekombinierendes Elektron der LMM Resonanz eingezeichnet. Die roten Bezeichnungen sind die DR-Resonanzen, die in den Energiebereich rechts fallen müssten.

**Rechts:** 2D Konturdiagramm der Photorekombination von hochgeladenem Bismut im Röntgenbereich, das die Wurzel der Helligkeit zeigt. Die diagonalen Linien entsprechen den radiativen Rekombination in die  $n = 3, 4$  und  $5$  Schalen.

# Kapitel 6

## Diskussion

In dieser Arbeit wurden KLL DR-Resonanzen von  $\text{Pr}^{51+ \dots 57+}$ -Ionen aufgenommen. Durch den Einsatz von Spannungsteilern wurde eine Auflösung von 50 eV in Richtung der Elektronenstrahlenergie erreicht. Eine Extrapolation der Peakpositionen der DR-Resonanzen bei verschiedenen Strömen auf einen Strom  $I_e = 0$  mA ergab eine Raumladung von  $(0,593 \pm 0,037) \frac{\text{eV}}{\text{mA}}$  bei  $E_e = 26,45$  keV. Es wurde dabei gezeigt, dass die Raumladung in guter Näherung linear mit dem Elektronenstrahlstrom zusammenhängt. Ein Vergleich der experimentellen mit den theoretischen Resonanzenergien zeigte einen systematischen Fehler der Kalibration der Elektronenstrahlenergie von 65 eV. Die Identifizierung der KLL DR-Resonanzen mit den Ladungszustängen von He-artig bis zu O-artig war einwandfrei möglich. Durch die Korrektur des systematischen Fehlers mithilfe der theoretischen auf 5 - 10 eV exakten Resonanzen war eine Präzision von  $\pm 20$  eV der experimentellen Resonanzen zu erreichen.



**Abbildung 6.1:** Differenz der Peak-Mitten zwischen Theorie und Experiment (siehe Abbildung 5.8). Die eingezeichneten Fehlerbalken lassen sich auf die Genauigkeit der theoretischen Werte und die Fehler der Gauß-gefitzten experimentellen Peaks zurückführen.

Die Differenzen in Abbildung 6.1 mit einem leicht fallenden Trend könnten auf die Abschätzung der Raumladung durch die Ionen zurückzuführen sein. Die Kompensation der negativen Raumladung

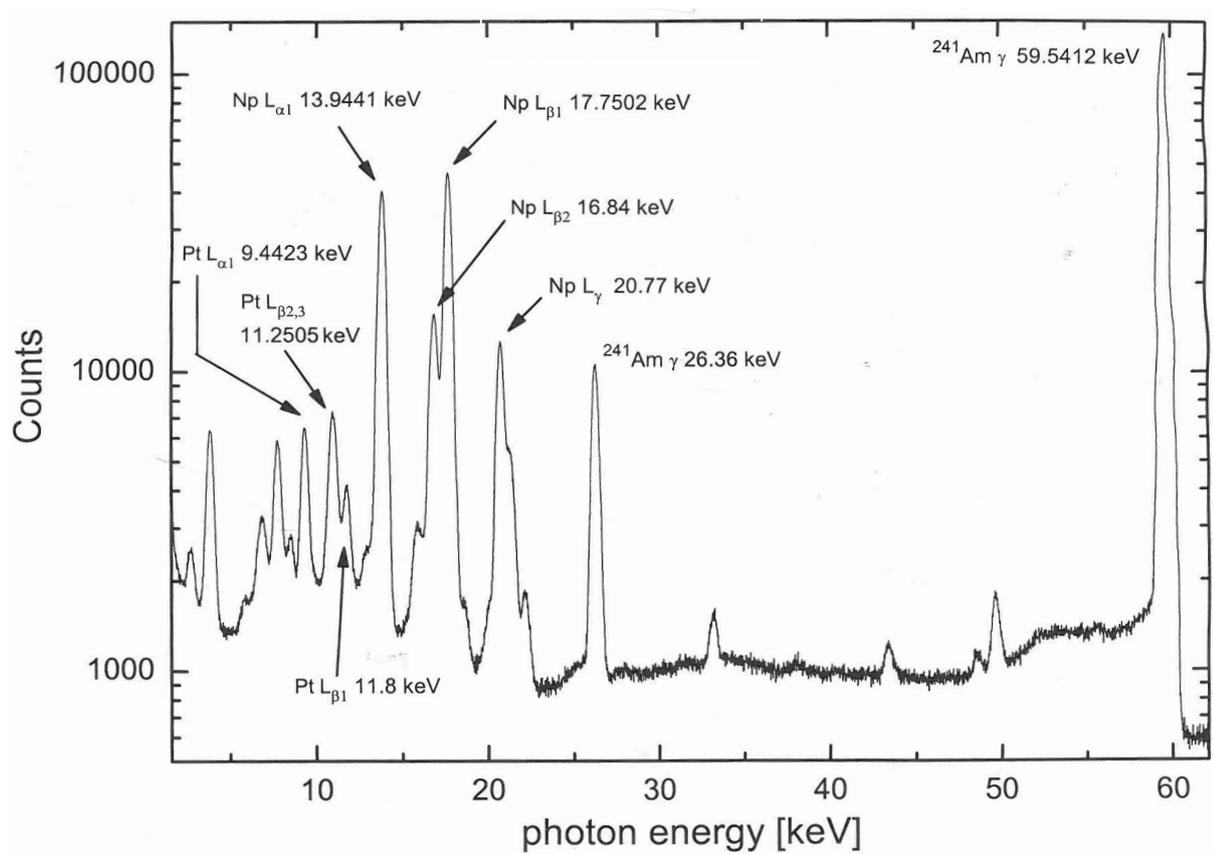
der Elektronen durch die Ionen in der Fallenmitte wurde bei den Betrachtungen in dieser Arbeit als proportional zur Stromstärke angenommen. Was dabei nicht beachtet wurde ist die Verschiebung der Ladungszustandsverteilung innerhalb eines Dump-Zyklus. Denn selbst wenn man bei den Messungen darauf achtet, dass nach jedem Dump eine Brutzeit eingehalten wird, lässt sich nicht verhindern, dass sich während der Datenaufnahmezeit die Verteilung noch leicht zu höheren Ladungszuständen hin verschiebt. Zudem beobachtet man bei der KLL Rekombination Resonanzen, die zu bestimmten Ladungszuständen gehören. Direkt nach einer solchen Resonanz besteht dieser Ladungszustand demnach weniger häufig, dafür wird der Ladungszustand mit einem Elektron mehr extensiviert. Eine Möglichkeit zur genaueren Abschätzung des Beitrags der Ionen an der Raumladung wäre, die Photorekombinationsspektren der Aufwärtsrampe der Beschleunigungsspannung von den Spektren der Abwärtsrampe zu trennen und separate Ladungszustandsverteilungen zu ermitteln. Auch eine Analyse der Auswirkung verschiedener Brutzeiten und Aufnahmezeiten auf die Ladungszustände könnte weiterführende Ergebnisse erzielen. Für zukünftige DR Messungen wäre zudem zu empfehlen, die Spannungsteiler neu zu kalibrieren um dem systematischen Fehler auf den Grund zu gehen und ihn eventuell zu beheben. In diesem Teil der Arbeit wurde erfolgreich Praseodym in der HD EBIT injiziert und durch dielektronische Resonanzen bis zu He-artige Ladungszustände nachgewiesen. Es steht jetzt, sobald höhere Elektronenstrahlenergien erreicht werden, einer optischen Präzisionsmessung der Hyperfeinstruktur von H-artigem Praseodym nichts mehr im Weg.

Der zweite, sich mit Bismut-Ionen beschäftigende Teil der Arbeit behandelte die komplexen  $n = 2 \rightarrow 3$  Übergänge. Durch FAC Rechnungen wurde offensichtlich, dass sich bei Elektronenstrahlenergien von 7,0 keV bis 8,5 keV viele Photorekombinationsprozessen überschneiden. Neben den radiativen Rekombinationen in die  $n = 3, 4$  und  $5$  Schalen wurden auch LMM, LMN, LNM und LMO Resonanzen erfasst. Die Projektionen der Resonanzen offenbarten eine Auflösung der Resonanzenergien von 15 eV, wobei hier, wie in den Praseodym-Messungen zu sehen war, die Kalibration der Elektronenstrahlenergie durch nicht behandelte Raumladung und systematische Fehler um bis zu 125 eV abweichen kann. Ein erster Schritt in Richtung der Beschreibung der Photorekombination in hochgeladene Bismut-Ionen wurde in dieser Arbeit gegangen. Um die Resonanzen noch genauer verstehen und einzelnen Ladungszuständen zuordnen zu können, wird man als Nächstes umfangreiche theoretische Berechnungen benötigen. Diese Rechnungen werden allerdings, wie man in dieser Arbeit erahnen konnte, zahlreiche Übergänge umfassen müssen, sodass man ohne die Übergangsraten zu analysieren kaum einen Überblick erhalten wird.

# Anhang A

## Kalibration

### A.1 Kalibrationspektrum $^{241}\text{Am}$



**Abbildung A.1:** Spektrum von Americium-241. Die eingezeichneten Energiewerte der Linien wurden bei der Kalibration der Röntgenenergie verwendet.

# Anhang B

## Theoretische Berechnungen

### B.1 MCDF Rechnungen von Z. Harman

Data for  $Z=59$ , Pr [8]

Tabelle B.1: KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for He-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^2$	1/2 +	2.43290e+04	4.12e-01	2.97e+04
$(1s2s)_1 2p_{1/2}$	1/2 -	2.43671e+04	1.02e+00	2.77e+03
$(1s2s)_1 2p_{1/2}$	3/2 -	2.43809e+04	2.75e+00	3.32e+02
$(1s2s)_0 2p_{1/2}$	1/2 -	2.44788e+04	2.52e+00	4.47e+04
$1s2p_{1/2}^2$	1/2 +	2.45417e+04	4.15e+00	4.81e+02
$(1s2s)_1 2p_{3/2}$	5/2 -	2.49173e+04	4.13e-03	1.03e+02
$(1s2s)_1 2p_{3/2}$	3/2 -	2.49847e+04	5.36e+00	1.65e+03
$(1s2s)_1 2p_{3/2}$	1/2 -	2.50267e+04	5.73e+00	3.81e+03
$(1s2s)_0 2p_{3/2}$	3/2 -	2.50579e+04	1.06e+00	4.69e+04
$(1s2p_{1/2})_0 2p_{3/2}$	3/2 +	2.50667e+04	1.73e+00	5.90e+02
$(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	5/2 +	2.50775e+04	3.08e+00	6.02e+04
$(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	1/2 +	2.51002e+04	9.33e+00	1.08e+03
$(1s2p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	3/2 +	2.51221e+04	7.24e+00	4.68e+04
$1s \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	5/2 +	2.56431e+04	1.72e+00	3.88e+04
$1s \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	3/2 +	2.56909e+04	9.02e+00	1.20e+04
$1s \left( 2p_{3/2}^2 \right)_0$	1/2 +	2.57169e+04	4.60e+00	6.78e+03

**Tabelle B.2:** KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for Li-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^2 2p_{1/2}$	1 -	2.45593e+04	3.01e+00	2.05e+04
$1s2s^2 2p_{1/2}$	0 -	2.45706e+04	7.35e-02	7.24e+02
$1s2s2p_{1/2}^2$	1 +	2.46581e+04	3.96e+00	3.58e+03
$1s2s2p_{1/2}^2$	0 +	2.47569e+04	5.52e+00	1.35e+03
$1s2s^2 2p_{3/2}$	2 -	2.51106e+04	2.02e-01	1.57e+04
$1s2s^2 2p_{3/2}$	1 -	2.51491e+04	6.17e+00	2.84e+03
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} 2p_{3/2}$	2 +	2.51558e+04	1.22e+00	1.29e+03
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}$	3 +	2.51837e+04	2.83e+00	3.19e+04
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} 2p_{3/2}$	1 +	2.52225e+04	8.23e+00	3.57e+03
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}$	2 +	2.52477e+04	6.80e+00	2.82e+04
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}$	0 +	2.52779e+04	8.40e+00	9.85e+01
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} 2p_{3/2}$	1 +	2.52795e+04	7.67e+00	1.49e+04
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} 2p_{3/2}$	1 +	2.53120e+04	2.17e+00	9.50e+02
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} 2p_{3/2}$	2 +	2.53171e+04	4.23e+00	2.52e+04
$1s2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	2 -	2.54021e+04	4.19e+00	6.55e+02
$1s2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	1 -	2.54418e+04	1.02e+01	8.73e+01
$(1s2s)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	3 +	2.57321e+04	1.89e+00	2.45e+04
$(1s2s)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 +	2.58063e+04	7.60e+00	8.53e+03
$(1s2s)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	1 +	2.58348e+04	4.62e+00	6.23e+03
$(1s2s)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	1 +	2.58650e+04	9.09e+00	3.40e+03
$(1s2s)_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 +	2.58809e+04	2.56e+00	1.32e+04
$(1s2s)_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	0 +	2.59259e+04	4.12e+00	2.17e+03
$(1s2p_{1/2})_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 -	2.59268e+04	3.36e+00	9.34e-01
$(1s2p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	3 -	2.59424e+04	4.60e+00	0.00e+00
$(1s2p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	1 -	2.59679e+04	1.18e+01	6.67e-04
$(1s2p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 -	2.59948e+04	9.96e+00	1.22e-01
$(1s2p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	1 -	2.60055e+04	7.47e+00	4.71e+01
$(1s2p_{1/2})_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	0 -	2.60164e+04	4.33e+00	1.07e+01
$1s \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 -	2.65301e+04	4.69e+00	2.99e+01
$1s \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 -	2.65669e+04	1.03e+01	3.57e+00

**Tabelle B.3:** KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for Be-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^22p_{1/2}^2$	1/2 +	2.48427e+04	4.28e+00	4.85e+03
$(1s2s^22p_{1/2})_0 2p_{3/2}$	3/2 +	2.53657e+04	1.67e+00	5.46e+02
$(1s2s^22p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	5/2 +	2.53766e+04	2.99e+00	5.61e+04
$(1s2s^22p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	1/2 +	2.53986e+04	9.01e+00	1.03e+03
$(1s2s^22p_{1/2})_1 2p_{3/2}$	3/2 +	2.54201e+04	7.01e+00	4.36e+04
$(1s2s)_1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	5/2 -	2.54805e+04	3.89e+00	0.00e+00
$(1s2s)_1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	3/2 -	2.55478e+04	9.05e+00	0.00e+00
$(1s2s)_1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	1/2 -	2.55872e+04	9.39e+00	0.00e+00
$(1s2s)_0 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	3/2 -	2.56250e+04	6.38e+00	0.00e+00
$1s2s^2 \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	5/2 +	2.59222e+04	1.74e+00	3.59e+04
$1s2s^2 \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	3/2 +	2.59690e+04	8.79e+00	1.11e+04
$1s2s^2 \left( 2p_{3/2}^2 \right)_0$	1/2 +	2.59871e+04	4.55e+00	7.92e+03
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	5/2 -	2.59955e+04	3.08e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	7/2 -	2.60273e+04	4.53e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	3/2 -	2.60682e+04	1.02e+01	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	5/2 -	2.60999e+04	8.85e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_0$	1/2 -	2.61022e+04	5.43e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_0$	3/2 -	2.61196e+04	7.32e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	1/2 -	2.61376e+04	1.18e+01	0.00e+00
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	3/2 -	2.61426e+04	9.66e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	3/2 -	2.61680e+04	4.72e+00	0.00e+00
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	5/2 -	2.61742e+04	5.73e+00	0.00e+00
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} \left( 2p_{3/2}^2 \right)_0$	1/2 -	2.62147e+04	6.21e+00	0.00e+00
$1s2p_{1/2}^2 \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	5/2 +	2.62867e+04	5.82e+00	6.07e+02
$1s2p_{1/2}^2 \left( 2p_{3/2}^2 \right)_2$	3/2 +	2.63346e+04	1.29e+01	2.00e+02
$1s2p_{1/2}^2 \left( 2p_{3/2}^2 \right)_0$	1/2 +	2.63568e+04	8.59e+00	2.22e+02
$(1s2s)_1 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	5/2 -	2.66124e+04	4.94e+00	0.00e+00
$(1s2s)_1 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	3/2 -	2.66722e+04	8.86e+00	0.00e+00
$(1s2s)_1 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	1/2 -	2.67159e+04	1.07e+01	0.00e+00
$(1s2s)_0 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	3/2 -	2.67458e+04	5.05e+00	0.00e+00
$(1s2p_{1/2})_0 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	3/2 +	2.68380e+04	6.41e+00	1.94e-01
$(1s2p_{1/2})_1 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	5/2 +	2.68500e+04	7.55e+00	7.63e+01
$(1s2p_{1/2})_1 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	1/2 +	2.68691e+04	1.29e+01	1.83e+00
$(1s2p_{1/2})_1 \left( 2p_{3/2}^3 \right)_{3/2}$	3/2 +	2.68914e+04	1.11e+01	4.84e+01
$1s2p_{3/2}^4$	1/2 +	2.74364e+04	8.87e+00	1.93e+01

**Tabelle B.4:** KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for B-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^22p_{1/2}^22p_{3/2}$	2 -	2.55503e+04	4.27e+00	2.77e+04
$1s2s^22p_{1/2}^22p_{3/2}$	1 -	2.55898e+04	1.01e+01	2.21e+04
$(1s2s^22p_{1/2})_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 -	2.60700e+04	3.28e+00	1.56e+04
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	3 -	2.60858e+04	4.50e+00	1.89e+04
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	1 -	2.61113e+04	1.15e+01	4.10e+03
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 -	2.61375e+04	9.68e+00	6.94e+03
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	1 -	2.61410e+04	7.26e+00	5.69e+03
$(1s2s^22p_{1/2})_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	0 -	2.61511e+04	4.22e+00	1.91e+03
$(1s2s2p_{1/2}^2)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	3 +	2.62231e+04	5.66e+00	0.00e+00
$(1s2s2p_{1/2}^2)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 +	2.62970e+04	1.13e+01	0.00e+00
$(1s2s2p_{1/2}^2)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	1 +	2.63215e+04	8.29e+00	0.00e+00
$(1s2s2p_{1/2}^2)_1 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	1 +	2.63525e+04	1.27e+01	0.00e+00
$(1s2s2p_{1/2}^2)_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	2 +	2.63823e+04	7.61e+00	0.00e+00
$(1s2s2p_{1/2}^2)_0 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	0 +	2.64265e+04	9.20e+00	0.00e+00
$1s2s^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 -	2.66506e+04	4.50e+00	8.11e+00
$1s2s^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 -	2.66871e+04	9.82e+00	1.08e+01
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 +	2.67770e+04	6.10e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	3 +	2.68053e+04	7.59e+00	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{1/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 +	2.68349e+04	1.13e+01	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 +	2.68629e+04	1.05e+01	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	0 +	2.68878e+04	1.30e+01	0.00e+00
$((1s2s)_1 2p_{1/2})_{3/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 +	2.68944e+04	1.20e+01	0.00e+00
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 +	2.69325e+04	6.77e+00	0.00e+00
$((1s2s)_0 2p_{1/2})_{1/2} \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 +	2.69405e+04	7.76e+00	0.00e+00
$1s2p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 -	2.70992e+04	6.30e-02	3.01e+01
$1s2p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 -	2.71365e+04	1.39e-01	2.41e+01
$1s2s2p_{3/2}^4$	1 +	2.74038e+04	9.05e+00	0.00e+00
$1s2s2p_{3/2}^4$	0 +	2.74997e+04	7.88e+00	0.00e+00
$1s2p_{1/2}2p_{3/2}^4$	1 -	2.76535e+04	2.17e-02	1.14e+01
$1s2p_{1/2}2p_{3/2}^4$	0 -	2.76630e+04	1.35e-02	3.83e+00

**Tabelle B.5:** KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for C-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^22p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	5/2 +	2.62336e+04	5.74e+00	3.15e+04
$1s2s^22p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^2\right)_2$	3/2 +	2.62804e+04	1.25e+01	1.07e+04
$1s2s^22p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^2\right)_0$	1/2 +	2.62962e+04	8.44e+00	7.43e+03
$(1s2s^22p_{1/2})_0 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	3/2 +	2.67748e+04	6.18e+00	1.15e+01
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	5/2 +	2.67869e+04	7.29e+00	5.89e+01
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1/2 +	2.68053e+04	1.24e+01	6.94e+00
$(1s2s^22p_{1/2})_1 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	3/2 +	2.68272e+04	1.07e+01	1.41e-01
$(1s2s)_1 2p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	5/2 -	2.69766e+04	8.62e+00	0.00e+00
$(1s2s)_1 2p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	3/2 -	2.70346e+04	1.22e+01	0.00e+00
$(1s2s)_1 2p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1/2 -	2.70769e+04	1.41e+01	0.00e+00
$(1s2s)_0 2p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	3/2 -	2.71149e+04	1.01e+01	0.00e+00
$1s2s^22p_{3/2}^4$	1/2 +	2.73508e+04	8.63e+00	6.18e+00
$(1s2s)_1 2p_{1/2}2p_{3/2}^4$	1/2 -	2.75429e+04	9.77e+00	0.00e+00
$(1s2s)_1 2p_{1/2}2p_{3/2}^4$	3/2 -	2.75642e+04	1.16e+01	0.00e+00
$(1s2s)_0 2p_{1/2}2p_{3/2}^4$	1/2 -	2.76563e+04	9.68e+00	0.00e+00
$1s2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 +	2.78761e+04	1.27e+01	1.48e+01

**Tabelle B.6:** KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for N-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^22p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	2 -	2.64274e+04	8.56e+00	1.68e+04
$1s2s^22p_{1/2}^2 \left(2p_{3/2}^3\right)_{3/2}$	1 -	2.64633e+04	1.36e+01	7.15e+03
$1s2s^22p_{1/2}2p_{3/2}^4$	1 -	2.69704e+04	1.13e+01	7.42e+00
$1s2s^22p_{1/2}2p_{3/2}^4$	0 -	2.69798e+04	8.07e+00	0.00e+00
$1s2s2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1 +	2.72310e+04	1.25e+01	0.00e+00
$1s2s2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	0 +	2.73276e+04	1.25e+01	0.00e+00

**Tabelle B.7:** KLL DR resonance energies, resonance widths and strengths for O-like Pr ( $Z=59$ )

Resonant state	J P	Resonance energy [eV]	Width [eV]	Strength [barn eV]
$1s2s^22p_{1/2}^22p_{3/2}^4$	1/2 +	2.66271e+04	1.24e+01	7.89e+03

## B.2 FAC Rechnung

```

1 # calculation of the energy levels
2 # and radiative transition rates
3
4 from pfac import fac
5 fac.SetAtom('Bi')
6
7 fac.Closed('1s 2s 3s 3p ')
8 fac.Config('2p6 3d9', group = 'n3')
9 fac.Config('2p5 3d10', group = 'n2')
10
11
12 fac.ConfigEnergy(0)
13
14 fac.OptimizeRadial(['n2'])
15 fac.ConfigEnergy(1)
16 fac.Structure('Bi68.lev.b', ['n2', 'n3'])
17 fac.MemENTable('Bi68.lev.b')
18 fac.PrintTable('Bi68.lev.b', 'Bi68.lev', 1)
19
20 fac.TransitionTable('Bi68.tr.b', ['n2'], ['n3'], -1)
21 fac.PrintTable('Bi68.tr.b', 'Bi68.tr', 1)

```

**Abbildung B.1:** Exemplarisches Python-Skript der FAC Rechnungen eines ML Übergangs in Fe-artigem Bismut

# Literaturverzeichnis

- [1] J. R. Crespo López-Urrutia, J. Braun, G. Brenner, H. Bruhns, A. Lapierre, A. J. González Martínez, V. Mironov, R. Soria Orts, H. Tawara, M. Trinczek, and J. Ullrich. Optimization of the charge state distribution of the ion beam extracted from an ebit by dielectronic recombination. *Review of Scientific Instruments*, 75(5):1560–1562, 2004.
- [2] T. Mayer-Kuckuk. *Atomphysik*. B.G. Teubner Stuttgart, 1997.
- [3] R. D. Cowan. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. University of California Press, 1981.
- [4] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.*, 28:1049–1070, Dec 1926.
- [5] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 117(778):pp. 610–624, 1928.
- [6] J. P. Desclaux. A multiconfiguration relativistic dirac-fock program. *Computer Physics Communications*, 9(1):31 – 45, 1975. ISSN 0010-4655.
- [7] T. Baumann. *Spektroskopische Untersuchungen resonanter Rekombinationsprozesse an hochgeladenem Silizium in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2005.
- [8] Z. Harman. 2015. persönliche Mitteilung.
- [9] I. P. Grant. Relativistic calculation of atomic structures. *Advances in Physics*, 19(82):747–811, 1970.

- [10] F. A. Parpia, C. Froese Fischer, and I. P. Grant. Grasp92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations. *Computer Physics Communications*, 94(2–3):249 – 271, 1996.
- [11] J. P. Desclaux, D. F. Mayers, and F. O’Brien. Relativistic atomic wave functions. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 4(5):631, 1971.
- [12] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia, and E. P. Plummer. Grasp: A general-purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications*, 55(3):425 – 456, 1989.
- [13] M. F. Gu. The flexible atomic code. *Canadian Journal of Physics*, 86, 2008.
- [14] Y. S. Kim and R. H. Pratt. Direct radiative recombination of electrons with atomic ions: Cross sections and rate coefficients. *Phys. Rev. A*, 27:2913–2924, Jun 1983.
- [15] A. J. González Martínez. *Quantum interference in the dielectronic recombination of heavy highly charged ions*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2005.
- [16] V. Mäckel. *Spektroskopische Untersuchung dielektronischer Resonanzen von hochgeladenen Ionen*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2006.
- [17] S. Bernitt. *Resonante Anregung astrophysikalischer Röntgen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit dem Freie-Elektronen-Laser LCLS*. PhD thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2013.
- [18] W. R. Leo. *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*. Springer-Verlag, 1994. Berlin, Heidelberg, New York.
- [19] G. Herrmann. Optical theory of thermal velocity effects in cylindrical electron beams. *Journal of Applied Physics*, 29(2):127–136, 1958.
- [20] L. Brillouin. A theorem of larmor and its importance for electrons in magnetic fields. *Phys. Rev.*, 67:260–266, Apr 1945.
- [21] J. Scofield. Ionization energies. persönliche Mitteilung.

# Danksagung

Mein besonderer Dank geht an dieser Stelle an alle, die mich während dieser Arbeit unterstützt, mir ausgeholfen und mir den Einstieg in die experimentelle Physik ermöglicht haben.

In besonderer Weise geht dieser Dank an Hendrik Bekker, für unzählige Stunden im Labor, bei denen er nicht nur auf sämtliche Frage eine Antwort hatte, sondern nebenbei auch noch auf das Aufrechterhalten meiner Fitness geachtet hat.

An José Ramón Crespo López-Urrutia dafür, dass er auch gegen Ende meiner Bachelorarbeit noch darauf geachtet hat, dass mir nicht langweilig wird, es aber gleichzeitig geschafft hat, dass ich nie verzweifelt bin.

An meine Familie für die nicht-physikalische und moralische Unterstützung, insbesondere an Ursula Kromer die sich, trotz ihrer Fachfremdheit, durch meine Arbeit kämpfte um diese auch auf dem Gebiet der deutschen Interpunktion auf den neuesten Stand zu bringen.

Last but not least an meine tolle Arbeitsgruppe, die mir immer wieder unter die Arme griff, sei es beim Programmieren, beim Verständnis neuer Software oder bei der Frage wo in Heidelberg das beste Bier zu bekommen ist. Ich hatte eine super Zeit auf dem Berg (am MPIK), was ohne euch in der Weise nicht möglich gewesen wäre.



# Erklärung

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

Heidelberg, den 15. Juli 2015,