

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

Bachelorarbeit in Physik
vorgelegt von

Nicky Potters

geboren in Capelle aan den IJssel (Niederlande)

16. Dezember 2016

Spektroskopische Untersuchung der optischen
Übergänge von den hochgeladenen
Praseodym-Ionen Pr^{9+} bis Pr^{13+}

Die Bachelorarbeit wurde ausgeführt von *Nicky Potters* am
Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg
unter der Betreuung von
Priv.-Doz. Dr. José Ramón Crespo López-Urrutia

Abstract

Highly charged Sn-like to Pd-like Praseodymium ions (Pr^{9+} to Pr^{13+}) were produced for the first time in an electron beam ion trap. Optical transitions, due to the $4d - 5s$ level crossing of those ions were measured. Furthermore, a detailed study of the $5s^2 5p^2 \ ^3P_1 - 5s^2 5p^2 \ ^3P_0$ transition of Sn-like Pr^{9+} was undertaken. The Zeeman splitting of this transition was resolved and investigated. Similarly, the $5s^2 5p \ ^2P_{3/2} - 5s^2 5p \ ^2P_{1/2}$ transition of the In-like Pr^{10+} was studied. The measured wavelengths of these fine-structure transitions are in agreement with state-of-the-art theoretical predictions. Determining the electronic structure of these ions is one of the first steps towards a possible application of their forbidden transitions as an ultra-precise optical frequency standard for optical clocks.

Zusammenfassung

Zum ersten Mal werden hochgeladenen Sn-ähnliche bis Pd-ähnliche Praseodym Ionen (Pr^{9+} bis Pr^{13+}) mit einer Elektronenstrahl Ionenfalle erzeugt. Es werden dabei, durch das Vorliegen von Kreuzungen der Konfigurationen $4d - 5s$, optische Übergänge dieser Ionen vermessen. Weiterhin wurde der $5s^2 5p^2 \ ^3P_1 - 5s^2 5p^2 \ ^3P_0$ -Übergang des Sn-ähnlichen Pr^{9+} ausführlich erforscht. Hierbei wird die Zeeman-Aufspaltung dieses Übergangs aufgelöst und untersucht. Gleichermäßen wird der $5s^2 5p \ ^2P_{3/2} - 5s^2 5p \ ^2P_{1/2}$ -Übergang des In-ähnlichen Pr^{10+} analysiert. Die gemessenen Wellenlängen dieser Feinstruktur-Übergänge sind in Übereinstimmung mit modernster theoretischen Vorhersagen. Das Bestimmen der elektronischen Strukturen dieser Ionen ist einer der ersten Schritte in Richtung einer möglichen Anwendung derer verbotenen Übergängen als einen ultragenauen Atomfrequenznormale für optischen Atomuhren.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	7
1 Einleitung	3
2 Theoretische Grundlagen	5
2.1 Bohrsches Atommodell	5
2.2 Schrödingergleichung	6
2.3 Wasserstoff-ähnliche Systeme	6
2.4 LS-Kopplung und	7
2.5 Hyperfeinstruktur	8
2.6 Zeeman-Effekt (bei schwachem Magnetfeld)	9
2.6.1 Polarisation Elektrischer und Magnetischer Übergänge	10
2.7 Elektrische und Magnetische Übergänge	10
2.7.1 Intensitäten der Übergänge	13
2.8 Kreuzung der Konfigurationen $4d - 5s$	14
2.9 Flexible Atomic Code	15
3 Elektronenstrahl-Ionenfalle	21
3.1 Heidelberg EBIT	21
4 Aufbau des Experiments	25
4.1 Czerny-Turner-Spektrometer	26
4.2 CCD Detektor	26
4.2.1 Kosmische Strahlung	27
4.2.2 Abbildungsfehler	28
4.3 Kalibration	29
4.3.1 Das Profil der Spektrallinien	33
4.4 Datenaufnahme	34
5 Einstellverfahren	35
5.1 Der Eintrittsspalt	35
5.2 Fokussierung auf den Eintrittsspalt	36
5.3 Spiegel M1	37
5.4 Optimierung der Elektronenstrahlenergie	40

6	Ergebnisse und Diskussion	43
6.1	Bestimmung der Wellenlängen	43
6.2	Analyse einer Spektrallinie mit einem hochauflösenden Gitter	47
6.2.1	Analyse des ${}^3P_1 - {}^3P_0$ Übergangs	47
6.2.2	Analyse des ${}^2P_{3/2} - {}^2P_{1/2}$ Übergangs	58
6.3	Systematische Korrekturen	65
7	Zusammenfassung und Schlussfolgerung	67
8	Anhang	71
8.1	Skript zur Berechnung der Energien mittels FAC	71
8.2	Tabelle der Anregungsenergien von Praseodym	72
	Literaturverzeichnis	73
9	Danksagung	77

1 Einleitung

„Zeit ist das, was man an der Uhr abliest“
– Albert Einstein (1879 - 1955)

Wie Albert Einstein in diesem Zitat schon beschrieb, ist Zeit ein für den Menschen schwer vorstellbares Konstrukt, das durch die Einführung von Uhren als greifbares Element verdeutlicht werden sollte. Diese Verdeutlichung ist für (den meisten) Menschen ein hilfreiches Werkzeug, welche einen praktischen Umgang mit der vierte Dimension ermöglichen.

Zeit ist somit ein wichtiges Element zur Orientierung und stellt zusammen mit dem Ort eine der wichtigsten Basisgrößen der Physik dar. Es ist daher nicht verwunderlich, dass der Mensch seit der Sonnen- bzw. Schattenuhr unser Dasein mit Zeit versucht zu beschreiben bzw. ihre Genauigkeit zu verbessern.

In dem Paper „Highly Charged Ions for Atomic Clocks, Quantum Information, and Search for α variation“ von M.S. Safronova et al. [16], werden verschiedene Übergänge von hochgeladenen Ionen vorgeschlagen, die zu der Verbesserung der (optischen) Atomuhren führen könnten. Hierbei wird auch ein hochgeladenes In-ähnliches Ion (Pr^{10+}) vorgeschlagen, welches einer der Anregungen dieser Bachelorarbeit darstellt.

Alle Uhren arbeiten mit dem gleichen Prinzip, sie spiegeln einen periodischen Ereignis mit einer konstanten Frequenz wider und somit bestimmten Zeitintervallen. Durch Zählen dieser Zyklen und bestimmen ihrer Lebensdauer kann man somit eine Definition der Zeit erstellen. Im Beispiel der Sonnenuhr besitzt die Frequenz der Erdumdrehung große Zeitinvarianzen. Zudem ist es für Uhren sehr wichtig, dass ihre Frequenzen und produzierten Zeitangaben bzw. Zyklen verwertbar und nicht orts- und umweltsabhängig sind. Die Eigenschaft, dass Atome der gleichen Elements sich identisch verhalten, wurde als Anregung genommen, um daraus eine somit ortsunabhängige Uhr zu erstellen. Diese sogenannten Atomuhren besitzen ein bestimmbares Oszillator Signal, durch bauen eines Gerätes welches ein Resonanzsignal erzeugt, kann durch zählen ihrer Zyklen die Zeit bestimmt werden.

In den letzten Jahren gab es sowohl in der Genauigkeit, als auch in der Stabilität der optischen Frequenzen Verbesserungen. Mit der Strontium-Uhr wurde eine Genauigkeit von $6.4 \cdot 10^{-18}$ erreicht [41]. Die neutralen oder niedrig geladenen Atome, welche für Atomuhren benutzt werden besitzen jedoch sowohl Vor- als auch Nachteile.

Ein Nachteil ist die Empfindlichkeit für äußere Einwirkungen, welche zu systematischen Verschiebungen der Energieniveaus führt. Diese müssen durch aufwendige Berechnungen korrigiert werden und haben somit einen Einfluss auf die Unsicherheit bzw. die Genauigkeit der Ergebnisse. Es werden somit hochgeladene Ionen vorgeschlagen, da diese durch ihr kompakteres und stärker am Kern gebundenes Orbital bzw. die Elektronenwolke, weniger empfindlich für externen Einwirkungen sind. Detaillierte Untersuchungen haben ergeben, dass diese Uhren mit hochgeladenen Ionen eine neue Ära der Atomuhren einläuten können, welche zu einer Genauigkeit von unter 10^{-19} führen könnten [16].

Ein Nachteil der hochgeladenen Ionen ist ihre hohe Temperatur welche sie bei der Erzeugung in der Elektronenstrahl Ionen Falle erhalten. Zusätzlich sind diese Übergänge meist nicht geeignet für Laserkühlung im Gegensatz zu neutralen Atomen. Durch Kombinieren einer Elektronenstrahl Ionen Falle mit einer Paulfalle, kann dieses Problem behoben werden. In einer Paulfalle werden Berrilium-Ionen durch Laserkühlung auf bis zu 1 Kelvin gekühlt. Die erzeugten hochgeladenen Ionen können somit abgekühlt werden, indem sie in dem Kristall welchen das Berrilium bei bei kryogenen Temperatur bildet gefangen werden und somit sympathetisch gekühlt werden [40]. Durch dieses Verfahren ist es möglich hochgeladene Ionen mit einer niedrigen Temperatur und geringen Dopplerverbreiterungen zu erzeugen und für Atomuhren zu nutzen.

Diese Unempfindlichkeit gegenüber äußeren Einwirkungen der hochgeladenen Ionen kann nicht nur zur Verbesserung von optischen Uhren sondern auch in Verbindung mit der langen Lebensdauer eines Übergangs, zu Möglichkeiten für Quanteninformationsspeicher führen [16].

Zusätzlich werden im Rahmen dieser Arbeit noch nicht untersuchte Ionisationszustände von Praseodym bestimmt. Es wird hierbei eine Metapher verwendet, wobei das „Land des Wissens“ die erkannten Ionen darstellt, im Gegensatz zu dem „Meer der Unwissenheit“ der den noch nicht erforschten Bereich darstellt. Dieses Meer nimmt wie auch auf der Erde einen Großteil der Fläche ein. Im Rahmen dieser Arbeit wird somit zusätzlich zur Verringerung des „Meeres der Unwissenheit“ beigetragen.

Ein besonderes Interesse liegt in dieser Arbeit auf der Messung von In-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}) und dessen Übergang $5s^25p^2P_{\frac{3}{2}} - 5s^25p^2P_{\frac{1}{2}}$ und Sn-ähnliches Praseodym (Pr^{9+}) mit dessen Übergang $5s^25p^2^3P_1 - 5s^25p^2^3P_0$, welche theoretisch von Safronova et al. berechnet wurden. Zur Untermauerung dieser theoretischen Ergebnisse sollen experimentelle Ergebnisse gewonnen werden und Grundlage zur Messung des vorgeschlagenen Atomuhrübergangs liefern.

2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der Quantenmechanik erläutert, um damit die experimentellen Beobachtungen dieser Arbeit zu erklären. Dazu wird zuerst auf das Bohrsche Atommodell eingegangen, um aus diesen Vorkenntnissen, die Feinstruktur, Zeeman-Aufspaltung, Hyperfeinstruktur, Multipol-Übergänge und Kreuzungen der Konfigurationen zu erklären. Anschließend wird hin blickend auf dem Versuch, theoretische Voraussagen über die Messergebnisse gemacht. Einen Großteil der Theorie wurde den Quellen [17–19, 27] entnommen, welche somit als Quelle Detaillierterer Information empfohlen wird. Bei Verwendung zusätzlicher Quellen werden diese zusätzlich gekennzeichnet.

2.1 Bohrsches Atommodell

Aus dem Vorwissen von Rutherford, der ein Atom als einen schweren, positiv geladenen Atomkern, der sich mit leichten, negativ geladene Elektronen umgibt, beschrieben hat, konnte das Bohrsche Atommodell gebildet werden. Mit den Untersuchungen von Gustav Kirchhoff und Robert Bunsen wurde außerdem bekannt, dass Atome nur bestimmte Wellenlängen absorbieren bzw. emittieren. Hieraus wurde gefolgert, dass die an dem Atomkern gebundenen Elektronen nur diskrete Energiewerte annehmen können (E_n). Dies begründet die Einschränkung im Bohrschen Atommodell, dass Elektronen nur diskrete Energieniveaus bevölkern können. Diese Energieniveaus werden mit der Hauptquantenzahl n ($n = 1, 2, 3, \dots$ bzw. $n = K, L, M, \dots$) bezeichnet.

Diese Diskretisierung in der Wechselwirkung zwischen Atomkern und gebundenen Elektronen konnte nicht mehr auf der Grundlage von klassischer Mechanik und Elektrodynamik beschrieben werden. Mit dem Versuch von Franck und Hertz [4] wurde nun erstmals die Existenz von diskreten Energieniveaus bewiesen und somit die ersten Schritte der Quantenmechanik beschrieben. Somit postulierte Bohr, dass beim Übergang eines gebundenen Elektrons zwischen den Energieniveaus E_1 und E_2 ein Photon mit der Energie $h\nu$ emittiert wird:

$$\nu = \frac{|E_2 - E_1|}{h} \quad (2.1)$$

Dabei bezeichnet ν die Frequenz eines absorbierten/emittierten Photons und h die Planck-Konstante.

Einen Energie Übergang kann somit durch die Wellenlänge λ eines Photons definiert werden.

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{|E_2 - E_1|} \quad (2.2)$$

Hierbei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit. Mit dieser Gleichung, konnten nun Übergänge von diskreten Spektren durch ihre Wellenlänge beschrieben werden.

2.2 Schrödingergleichung

Die fundamentale Postulate der Quantenmechanik wurden von Schrödinger mit einer Grundlegenden Gleichung beschrieben:

$$H\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.3)$$

Für den Fall eines Atoms beschreibt $\psi(\vec{r}, t)$ die Wellenfunktion eines Elektrons, wobei $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte an einem Ort \vec{r} zu einem bestimmten Zeitpunkt t definiert. Da die Schrödinger Gleichung nur für Wasserstoff-ähnliche Systeme lösbar ist, wird bei Mehr-Teilchen-Systemen auf numerische Lösungen zurückgegriffen. Deshalb stellen hochgeladene Ionen (engl.: highly-charged ions (HCI)) sehr interessante Systeme dar, da diese mit ihrer vereinfachten Elektronenstruktur für die Theorie leichter zu beschreiben sind als neutrale Atome und somit zu einer Erweiterung der Theorie führen können.

2.3 Wasserstoff-ähnliche Systeme

Die zeitliche Entwicklung einer Wellenfunktion unter dem Hamiltonoperator (H) wird durch die Schrödingergleichung

$$H\psi(\vec{r}, t) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}^2} + E_{\text{pot}}\psi(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

beschrieben. Für Wasserstoff-ähnliche Systeme wird auf ein Zweikörperproblem reduziert. Durch die Transformation auf Schwerpunkts- und Relativkoordinaten, kann die Relativbewegung von Kern und Elektron mit Gleichung 2.5 beschrieben werden.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E_{\text{kin}} + V_{\text{Coulomb}} \quad (2.5)$$

Die potentielle Energie des Systems ist durch die Coulomb-Energie gegeben, welche ein System beschreibt, in dem ein quasi-stationärer Kern der Ladung Z von

einem einzelnen Elektron im Abstand r umkreist wird. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung 2.5 führt auf diskrete Energieniveaus zurück.

$$E_n = -E_{\text{Ryd}} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = -Z^2 \frac{\alpha^2 \mu c^2}{2n^2} \quad (2.6)$$

Hierbei wird die Rydberg-Energie durch $E_{\text{Ryd}} = \alpha^2 \frac{\mu c^2}{2}$ und die Feinstrukturkonstante durch $\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c} \frac{e^2}{\hbar} = 7.2973525664(17)10^{-3} \approx \frac{1}{137}$ [5] beschrieben. Die reduzierte Masse des Systems ist durch $\mu = \left(\frac{1}{m_{el}} + \frac{1}{m_p}\right)^{-1}$ gegeben. Bei der experimentellen Überprüfung dieser Theorie wurden kleine Abweichungen gemessen, welche durch relativistische Effekte hervorgerufen werden. Als Erweiterung der Schrödinger-Gleichung wurde zunächst die Dirac-Gleichung eingeführt, welche relativistische Effekte wie die Massenzunahme des Elektrons im Coulombfeld des Kerns, den Darwin-Term und die Wechselwirkung zwischen Drehimpulsen und Spins beschreiben konnte.

Die anschließenden Kapitel der Theorie werden in der ein-Elektron-Näherung durchgeführt.

2.4 LS-Kopplung und

In einem Atom besitzt das Elektron durch die Bewegung um den Kern einen Bahndrehimpuls, welcher von n abhängig ist und durch $|\vec{l}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ definiert wird, wobei $l = 0, 1, \dots, n-1$ ist. Darüber hinaus besitzt das Elektron, wie im Stern-Gerlach-Experiment [2] beschrieben, ein inneres Drehmoment (Spin), welcher die Werte $|\vec{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ annehmen kann, wobei für das Elektron $s = \frac{1}{2}$ ist. Die Wechselwirkung beider Drehimpulse kann klassisch durch einen präzedierenden Kreisel beschrieben werden, der durch dem inneren Drehmoment auch eine zweite Präzession um derer gemeinsamen Achse macht. Diese gemeinsame Achse ist der Gesamtdrehimpuls \vec{j} , welche die Vektorsumme von dem Bahndrehimpuls und Spin beschreibt.

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (2.7)$$

Für eine klassische Beschreibung wird die Wechselwirkung im Bezugssystem des Elektrons beschrieben. Die Bewegung des Atomkerns um das Elektron erzeugt einen Kreisstrom, welcher ein magnetisches Moment erzeugt. Transformiert man diesen Effekt nun zurück in das ursprüngliche Koordinatensystem, muss noch ein relativistischer Effekt beachtet werden (Thomas-Präzision), der dafür sorgt, dass der klassisch berechnete Magnetische Moment mit einem Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert werden muss. Dieser Erzeugte Magnetfeld \vec{B}_l ist parallel zum Bahndrehimpuls. Das von dem Spin herkömmlichen magnetische Moment $\vec{\mu}_s$ kann sich durch die Wechselwirkung parallel oder anti-parallel zu dem erzeugten Magnetfeld

ausrichten, wodurch eine Aufspaltung der Energieniveaus entsteht. Diese Spin-Bahn-Kopplungsenergie lässt sich durch $\Delta E_{l,s} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_l$ beschreiben. Mit dem Gesamtdrehimpuls j lässt sich die Spin-Bahn-Kopplung unter der Voraussetzung, dass $l > 0$ und $j = l \pm \frac{1}{2}$ für ein Wasserstoff-ähnliches System beschreiben.

$$\Delta E_{LS} = -\alpha^2 \frac{E_{\text{Ryd}}}{n^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{l(l + \frac{1}{2})(l+1)} \quad (2.8)$$

Um die Feinstruktur komplett zu beschreiben, müssen neben der Spin-Bahn-Kopplung, welche nur bei $l > 0$ vorkommt, auch alle weiteren relativistischen Effekte berücksichtigt werden. Für den Bahndrehimpuls $l = 0$ spielt der Darwin-Term eine Rolle:

$$\Delta E_{\text{Dw}} = -\alpha^2 \frac{E_{\text{Ryd}}}{n^3} \quad (2.9)$$

Dieser Term kann als Zitterbewegung des Elektrons um den Kern interpretiert werden und ist durch die Unschärfe des Orts des Elektrons gegeben, da dieser nur bis auf die Compton-Wellenlänge genau bestimmt ist. Befindet sich das Elektron näher am Kern, beeinflusst das Coulombfeld seine potentielle Energie. Als Letztes tritt noch eine weitere relativistische Korrektur auf.

$$\Delta E_{\text{rel}} = -\alpha^2 \frac{E_{\text{Ryd}}}{n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right) \quad (2.10)$$

Diese Korrektur ergibt sich durch die relativistisch zu betrachtenden Geschwindigkeit des Elektrons. Die Feinstruktur ergibt sich als Summe aller relativistischen Korrekturen zu:

$$\Delta E_{\text{FS}} = -\alpha^2 Z^4 \frac{E_{\text{Ryd}}}{n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right) \quad (2.11)$$

Diese Beschreibung von Wasserstoff-ähnlichen Systemen vernachlässigt Quantenelektrodynamische-Effekte (QED-Effekte) Einer der berühmtesten QED-Effekte ist der Lambshift, der eine Aufspaltung von Zuständen mit gleichen Hauptquantenzahlen und Gesamtdrehimpulsquantenzahlen erlaubt und wird vor allem durch Vakuumfluktuationen bewirkt [20]. Zusätzlich wurde die Hyperfeinstruktur des Systems nicht beachtet, welche im folgenden Abschnitt behandelt wird. Wegen der Auflösung der Messungen, die nur empfindlich genug ist um die Feinstruktur und ihre Magnetfeld Wechselwirkungen aufzulösen, wird nur noch allgemein auf die Hyperfeinstruktur eingegangen.

2.5 Hyperfeinstruktur

Die Hyperfeinstruktur ist sehr ähnlich zu der Feinstruktur. Hierbei wechselwirken allerdings nicht Spin- und Bahndrehimpulse miteinander, sondern es koppelt der

Gesamtdrehimpuls \vec{j} des Elektrons mit dem Kernspin \vec{i} des Atoms zum Gesamtdrehimpuls \vec{f} des Atoms.

$$\vec{f} = \vec{i} + \vec{j} \quad (2.12)$$

Die Aufspaltung lässt sich durch $\Delta E_{HFS} = -\vec{\mu}_I \cdot \vec{B}_J$ beschreiben, welches die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Kerns ($\vec{\mu}_I$) mit dem Magnetfeld der gebundenen Elektronen (\vec{B}_J) darstellt. Hierbei setzt sich das Magnetische Moment des Kerns $\mu_I = g_I \mu_K \vec{I}$ aus dem Kernspin \vec{i} , dem Kern-g-Faktor (Landé-Faktor des Kerns) g_I und dem Kernmagneton $\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_K}$, wobei m_K die Kernmasse entspricht zusammen. Damit erhält man die Hyperfeinaufspaltung;

$$\Delta E_{HFS} = \frac{A}{2} [f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)] \quad (2.13)$$

wobei $A = \frac{g_I \mu_K B_J}{\sqrt{J(J+1)}}$ die Hyperfeinstrukturkonstante ist.

2.6 Zeeman-Effekt (bei schwachem Magnetfeld)

In der bisherigen Beschreibung des Atoms wurden Wechselwirkungen mit der Umgebung nicht berücksichtigt. Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten befinden sich Ionen im Bereich eines Magnetfelds. Hierbei muss beachtet werden, dass es sich um ein schwaches Magnetfeld handelt. Das bedeutet, dass die Spin-Bahn-Kopplung signifikant stärker ist als die Kopplung der magnetische Momente an das Magnetfeld.

$$\Delta E_{FS} \gg \mu_J \cdot B \quad (2.14)$$

Für den Fall eines Starken Magnetfelds, spricht man von dem Paschen back Effekt. Dieser beschreibt die Entkopplung von Spins und Bahndrehimpulsen in externen Magnetfelder.

Im Fall des schwachen Magnetfeldes, kann man diese Zeeman-Aufspaltung als Präzision des Gesamtdrehimpulses (bzw. des magnetischen Moments $\vec{\mu}_J$) um das extern angelegte Magnetfeld vorstellen. Dieses gesamte magnetische Moment lässt sich wie in Kapitel 2.4 aus den magnetischen Momenten des Spins und des Bahndrehimpulses addieren $\vec{\mu}_J = \frac{\mu_B}{\hbar} (g_l \vec{l} + g_s \vec{s})$. Hierbei bezeichnet $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ das Bohrsche Magneton und g_s, g_l die Landé-Faktoren des Spins und des Bahndrehimpulses. Diese lassen sich zu einem Landé-Faktor des Gesamtspins addieren, da gilt, dass $g_l = 1$ und $g_s \approx 2$ und somit $g_s \neq g_l$ ist. Dadurch folgt, dass das magnetische Moment μ_J nicht parallel zu J ist. Der Landé-Faktor g_j ist somit auch von L und S abhängig.

$$g_j = g_l \frac{j(j+1) + l(l+1) - s(s+1)}{2j(j+1)} + g_s \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (2.15)$$

Der Gesamtdrehimpuls kann $(2J+1)$ äquidistante Niveaus annehmen, wodurch für die Quantenzahlen gilt $-j < m_j < j$, wobei die Distanz der Schritte jeweils einfach ist. Es ergibt sich somit für die Zeeman-Aufspaltung.

$$\Delta E_{Zeeman} = \mu_B B m_j g_j \quad (2.16)$$

Man unterscheidet noch zwischen normalem und anomalem Zeeman-Effekt. Der normale Effekt ergibt sich, wenn $S = 0$. Dadurch gilt für den Landé-Faktor des Gesamtspins, dass $g_j = 0$ für $L = 0$ und $g_j = 1$ für $L > 0$ [32].

2.6.1 Polarisation Elektrischer und Magnetischer Übergänge

Die erlaubten Übergänge eines Zeeman-Spektrums sind normalerweise Elektrischen Dipolübergänge, welche mit E1 bezeichnet werden. Im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen werden ebenfalls magnetische Dipol Übergänge, mit M1 bezeichnet, untersucht welche ihren eigenen Auswahlregeln unterliegen (siehe Kapitel 2.7). Zwischen diesen beiden Übergangsarten findet nur in der Ausrichtung der Wellen relativ zum Magnetfeld eine Änderung statt. Die jeweiligen Auswahlregeln der Übergänge in einem externen Magnetfeld sind für beide Fälle durch $\Delta m_j = 0, \pm 1$ gegeben. Die Polarisation der emittierten elektromagnetischen Strahlung in einem externen Magnetfeld ist für transversale und longitudinale Beobachtung in Tabelle 2.1 aufgetragen. Die Beobachtungsrichtung ist relativ zu der Richtung des Magnetfeldes [21].

Tabelle 2.1: Polarisationsrichtung Elektrischer- und Magnetischer-Übergänge der Photonen zur Magnetfeldrichtung in Abhängigkeit der Auswahlregeln.

Übergang	Δm_j	Longitudinal	Transversal
E1	0		Parallel (π)
	± 1	Zirkular(r,l)	Senkrecht(σ)
M1	0		Senkrecht(σ)
	± 1	Zirkular(r,l)	Parallel (π)

2.7 Elektrische und Magnetische Übergänge

Neben den genannten Dipolübergänge existieren auch Multipol-Übergänge höherer Ordnung (Quadrupol, Oktupol). Alle diese Übergänge unterliegen bestimmten Re-

geln, die einzuhalten sind (siehe Tabelle 2.2). Die Auswahlregeln für jeden Multipolübergang lassen sich aus einer Betrachtung der Übergangswahrscheinlichkeiten herleiten. Damit ein Übergang erlaubt ist, muss das Dipolmatrixelement ungleich Null sein: $M_{i,k} \neq 0$. Geht man nun von einem Elektrischen Feld in z-Richtung aus, so sind die einzigen Kombinationen von Dipolmatrixelementen durch

$$\begin{aligned} (M_{i,k})_z &\propto \int_{\phi=0}^{2\pi} e^{i(m_k - m_i)\phi} d\phi \\ (M_{i,k})_x \pm i(M_{i,k})_y &\propto \int_{\phi=0}^{2\pi} e^{i(m_k - m_i \pm 1)\phi} d\phi \end{aligned} \quad (2.17)$$

gegeben. Diese Integrale können somit nur von Null verschieden sein, wenn $\Delta m_j = 0, \pm 1$ gilt. Betrachtet man nun Multipolübergänge höherer Ordnung sind auch höhere magnetische Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses möglich ($\Delta m_j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$). Um nun die Auswahlregeln für die Bahndrehimpulsquantenzahlen zu bekommen, betrachtete man die Paritätsregeln. Hierbei gilt, dass das Dipolmatrixelement nur von Null verschieden ist, wenn die Wellenfunktionen der beiden beteiligten Energieniveaus unterschiedliche Parität (P) haben. Für Wasserstoff besitzen die Wellenfunktionen die Parität $P = (-1)^l$. Haben die Wellenfunktionen die ungleiche Parität (E1, M2, E3) gilt, dass $\Delta l = \pm 1$ bzw. $\pm 3, \dots$ für höhere Multipolmomente erfüllt sein muss. Analog muss für Wellenfunktionen gleicher Parität (M1, E2, M3) gelten, dass $\Delta l = 0$ bzw. $\pm 2, \dots$ für höhere Multipolmomente erlaubt sein muss. Die Auswahlregeln der Spinquantenzahl sind nicht direkt mit der Ordnung des Multipols verbunden. Somit gilt für alle nicht-schweren Atomen, dass $\Delta S = 0$ erfüllt sein muss. Bei schweren Atomen wird die Spin-Bahn-Kopplung stärker, was zur Folge hat, dass S keine gute Quantenzahl mehr ist. Somit ist es möglich, dass ΔS auch von Null verschiedene Werte besitzen kann.

Im Gegensatz zu elektrischen Dipolübergängen, sind alle anderen Übergänge Verboten. Diese verbotene Übergänge erfolgen durch Brechung der Auswahlregeln, die für ein E1 Übergang gelten sollten. Das Matrixelement $M_{i,k}$ wurde für die obige Erklärungen mit der Elektrischen Dipolnäherung vereinfacht. Das Gesamte Übergangsmatrixelement $((M_{i,k})_{\text{ges}})$ setzt sich somit aus den Beiträgen des elektrischen Dipolübergangs und aus magnetische Übergänge oder elektrische Übergänge höherer Ordnung zusammen, welche als Störung behandelt werden.

$$(M_{i,k})_{\text{Ges}} = M_{i,k} + (M_{i,k})_{\text{Stoerung}} \quad (2.18)$$

Ein verbotener Übergang lässt sich vereinfacht über $M_{i,k} = 0$ wobei $(M_{i,k})_{\text{ges}} \neq 0$ definieren. Ein sogenannter verbotener Übergang ist somit nicht unbedingt verboten, sondern erfolgt meist mit einer wesentlich niedrigeren Übergangsrates.

Für genauere Informationen wird zusätzlich auf verwiesen [23–25].

Tabelle 2.2: Auswahlregeln für Multipolübergänge [21, 23].

Übergang		E1 erlaubt	M1	E2 Verboten	M3
Strenge Regeln	ΔJ	$0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$)	$0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$)	$0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftrightarrow 0, 1$), ($\frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{1}{2}$)	$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ ($0 \leftrightarrow 0, 1, 2$), ($\frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$), ($1 \leftrightarrow 1$)
	ΔM_j	$0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$) ,wenn $\Delta J = 0$	$0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$) ,wenn $\Delta J = 0$	$0, \pm 1, \pm 2$	$0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$
	ΔP	-1	1	1	1
LS-Kopplung	ΔS	0	0	0	0
	Δl	± 1	0	$0, \pm 2$ ($0 \leftrightarrow 0, 1$),	$0, \pm 2$ ($0 \leftrightarrow 0, 1$),

2.7.1 Intensitäten der Übergänge

Die Intensität der Übergänge lässt sich durch die Übergangsraten der spontanen Emission bestimmen, wobei diese von dem gesamten Multipolmoment abhängt.

$$A_{i \rightarrow f}^{\text{spont}} = \frac{\alpha \omega_{if}^3}{3m_e^2 c^4} |(M_{ik})_{\text{Ges}}|^2 \quad (2.19)$$

Betrachtet man nun einen M1 Übergang, verschwinden durch die Auswahlregeln die nicht von M1 abhängigen Komponenten des Gesamten Übergangsmatrixelementes. Das Gleiche gilt für alle anderen Übergangsarten [25]. Wie schon in Kapitel 2.7 beschrieben erfolgen normalerweise verbotene Übergänge bei einer wesentlich geringeren Rate und weisen somit im Spektrum eine deutlich geringere Intensität auf. Dass dies nicht immer der Fall ist, lässt sich über die Abhängigkeit des Multipol-Matrix-elementes der Ordnungszahl Z erklären, wobei $(M_{ik})_{\text{E1}} \propto Z^4$ und $(M_{ik})_{\text{M1}} \propto Z^{10}$ ist. Es folgt daraus, dass für schwere hochgeladenen Ionen magnetische Dipolübergänge eine vergleichbare oder sogar höhere Intensität als elektrische Dipolübergänge im optischen Bereich haben können [26]. Um die relativen Intensitäten der Zeeman-Komponenten innerhalb eines Feinstrukturübergangs zu bestimmen, benutzt man Clebsch-Gordan-Koeffizienten, welche sich aus den Drehimpulsen J_1 , J_2 und den zugehörigen Quantenzahlen m_{J1} , m_{J2} der zwei Energieniveaus zusammensetzen. Aus diesen Werten lässt sich der Gesamtdrehimpuls $J = J_1 + J_2$ mit der Projektion $M = m_{J1} + m_{J2}$ berechnen. Mit diesen Clebsch-Gordan-Koeffizienten kann die Struktur der Zeeman-Aufspaltung vorhergesagt werden, womit sie ein wichtiges Mittel zur Identifizierung von Spektrallinien darstellen. Bei der Identifizierung müssen Aufbau bedingte Effekte, wie die Polaritätsabhängige Gittereffizienz in Betracht genommen werden. Zudem spielt der Betrachtungswinkel zum Magnetfeld eine Rolle, welche durch die winkelabhängige Intensität des magnetischen Dipolübergangs verdeutlicht wird [21].

$$\begin{aligned} I_{\Delta m_J=0} &\propto \sin^2 \Theta \\ I_{\Delta m_J=\pm 1} &\propto \frac{1 + \cos^2 \Theta}{2} \end{aligned} \quad (2.20)$$

In dem im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messung wird die emittierte Strahlung transversal zu einem externem Magnetfeld beobachtet ($\Theta = 90^\circ$). Es wird somit vermutet, dass die Intensität der Übergänge mit $\Delta m_J = \pm 1$ um einen Faktor 2 schwächer als die $\Delta m_J = 0$ -Übergänge ist.

2.8 Kreuzung der Konfigurationen $4d - 5s$

In dem Messungen dieser Bachelor Arbeit wurde der konfigurationelle Bereich von Praseodym gewählt, an dem eine Kreuzung der Konfigurationen (engl.: level-crossing) stattfindet. Solche level-crossings entstehen beim Übergang der Madelung- zur Coulomb-Ordnung der Orbitale. Dieser ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Die Theorie nach Coulomb beruht auf der elektrostatischen Wechselwirkung des Kernpotentials, verursacht durch die Protonen, mit den Elektronen. Betrachtet man nun das Bohrsche Schalenmodell, werden zuerst die energetisch günstigsten, untersten Schalen (Hauptquantenzahlen n) mit ihren Unterschalen (Bahndrehimpuls l) komplett befüllt. Diese Theorie beschreibt durch ihre Kern-Elektron-Wechselwirkung am besten das Aufbauprinzip kernnaher Schalen. Allerdings wird die Wechselwirkung zwischen den Elektronen vernachlässigt, welche in der Theorie nach Madelung berücksichtigt wird. Das Aufbauprinzip nach Madelung beruht auf der sogenannten $n + l$ -Regel und ist vor allem für Mehr-Elektronen-Systeme einsetzbar. Durch Abschirmung des Kernes von kernnah gebundenen Elektronen wird die anziehende Wechselwirkung zwischen Kern und gebundenen Elektronen verringert. Bei Erhöhung des Bahndrehimpulses bei fester Hauptquantenzahl erhöht sich die mittlere Entfernung des Elektrons vom Atomkern. Somit verringert sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen in Kern nähe. Analog dazu haben Orbitale mit hoher Hauptquantenzahl n und kleinem Bahndrehimpuls l eine größere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe und somit wiederum eine höhere Kern-Elektron-Wechselwirkung. Bis auf 20 Ausnahmen haben Experimente gezeigt, dass dieses Aufbauprinzip für Neutrale Atome gilt [28]. Durch entfernen von Elektronen bzw. das sukzessive ionisieren der Atome wird die Abschirmung des Kernpotentials verringert. Dadurch wird das effektive Kernpotential, in welchen die Elektronen gebunden sind, erhöht. Somit gewinnt die Kern-Elektron-Wechselwirkung bzw. das Coulomb Aufbauprinzip, im Vergleich zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung, an Bedeutung. Dieser Effekt sorgt für die genannte Überschneidungen der beiden Theorien. Durch diese Level-crossings, werden die Energiedifferenzen zwischen den Konfigurationen drastisch erniedrigt so dass, die normalerweise im keV bzw. im Röntgenbereich liegenden Übergänge nun in den optischen Bereich verschoben sind. Dieser Übergangsbereich zwischen beiden Theorien kann somit mit einem optischen Spektrometer untersucht werden und ist die Grundlage der durchgeführten Messung.

Tabelle 2.3: Darstellung des Orbitalaufbaus nach Madelung und Coulomb, wobei die Kreuzungen der Konfigurationen mit Pfeilen gekennzeichnet wurden. Zudem werden die betroffenen Konfigurationen in rot und die Unbetroffenen in schwarz dargestellt.

Coulomb	Madelung
1s	1s
2s	2s
2p	2p
3s	3s
3p	3p
3d	4s
4s	3d
4p	4p
4d	5s
4f	4d
5s	5p
5p	6s
5d	4f

2.9 Flexible Atomic Code

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen für Sn-ähnliches (Pr^{9+}) und In-ähnliches (Pr^{10+}) Praseodym werden mit Berechnungen von Safronova et al. [15, 16] verglichen. Zusätzlich dazu wurden zum Verständnis der Messungen Berechnungen unter Verwendung des „Flexible Atomic Code“ (FAC) [3] durchgeführt. Mit Hilfe diesen Python Code (siehe Anhang 8.1) kann man mit einfache Code Änderungen eine gute Abschätzung machen über Energieübergänge innerhalb einer Konfiguration. In Abb.2.1 und 2.2 werden diese mit dem FAC berechneten Energieniveaus Visualisiert. Zusätzlich werden für Cd-ähnliches (Pr^{11+}), Ag-ähnliches (Pr^{12+}) und Pd-ähnliches (Pr^{13+}) Praseodym FAC Berechnungen durchgeführt, welche als Hilfe zur Identifizierung der Ionisationsstufen der Spektrallinien des Kapitels 5.1 dienen sollen. Diese werden den Abbildung 2.3, 2.4 und 2.5 dargestellt.

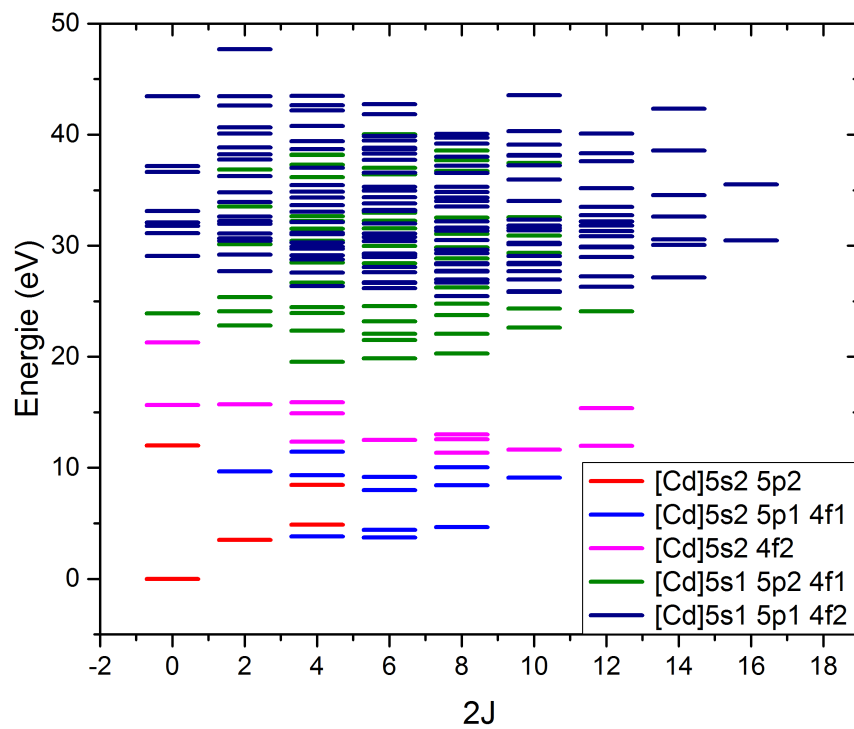


Abbildung 2.1: Darstellung der mit FAC berechneten Energieniveaus von Sn-ähnlichem Praseodym (Pr^{9+}). J entspricht hierbei dem Gesamtdrehimpuls.

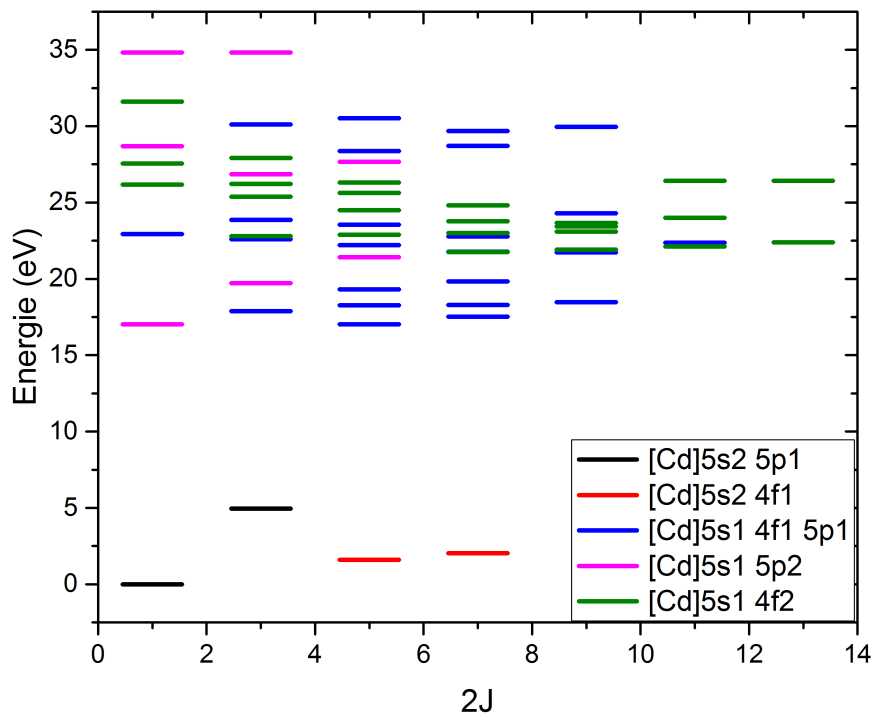


Abbildung 2.2: Darstellung der mit FAC berechneten Energieniveaus von In-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}). J entspricht hierbei den Gesamtdrehimpuls.

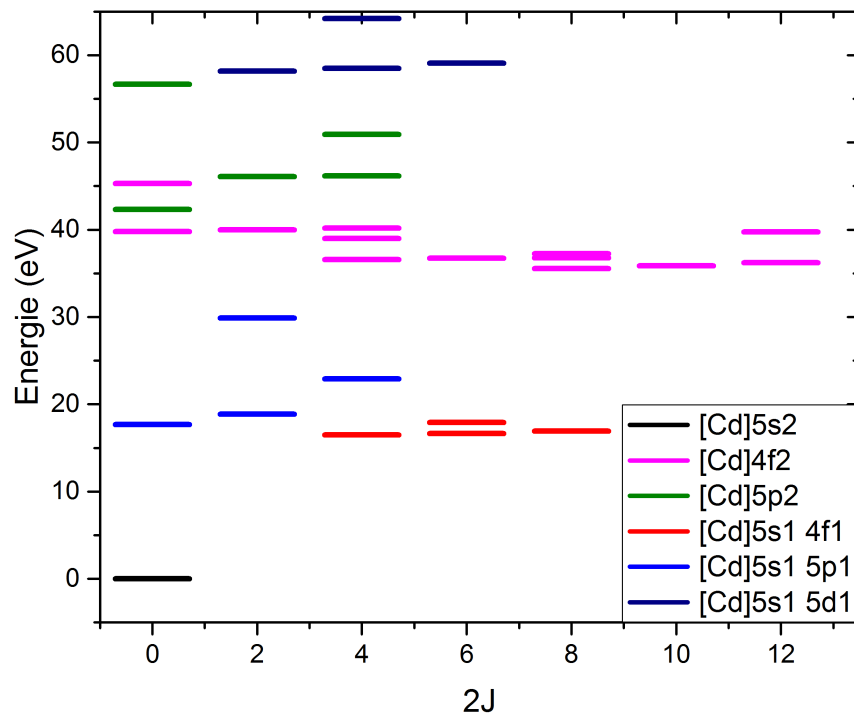


Abbildung 2.3: Darstellung der mit FAC berechneten Energieniveaus von Cd-ähnlichem Praseodym (Pr^{11+}). J entspricht hierbei dem Gesamtdrehimpuls.

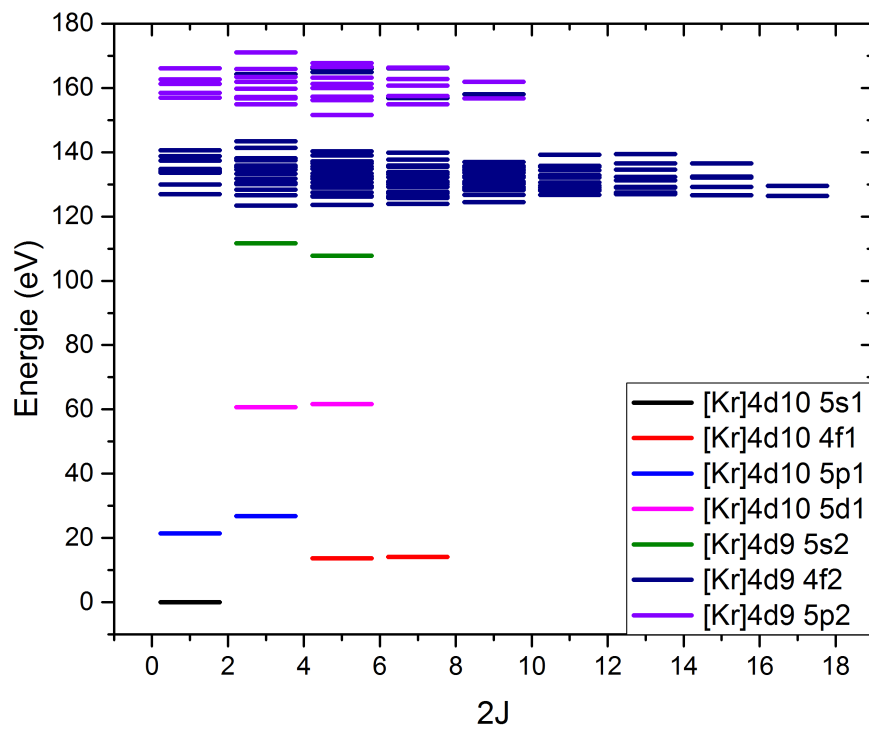


Abbildung 2.4: Darstellung der mit FAC berechneten Energieniveaus von Ag-ähnlichem Praseodym (Pr^{12+}). J entspricht hierbei dem Gesamtdrehimpuls.

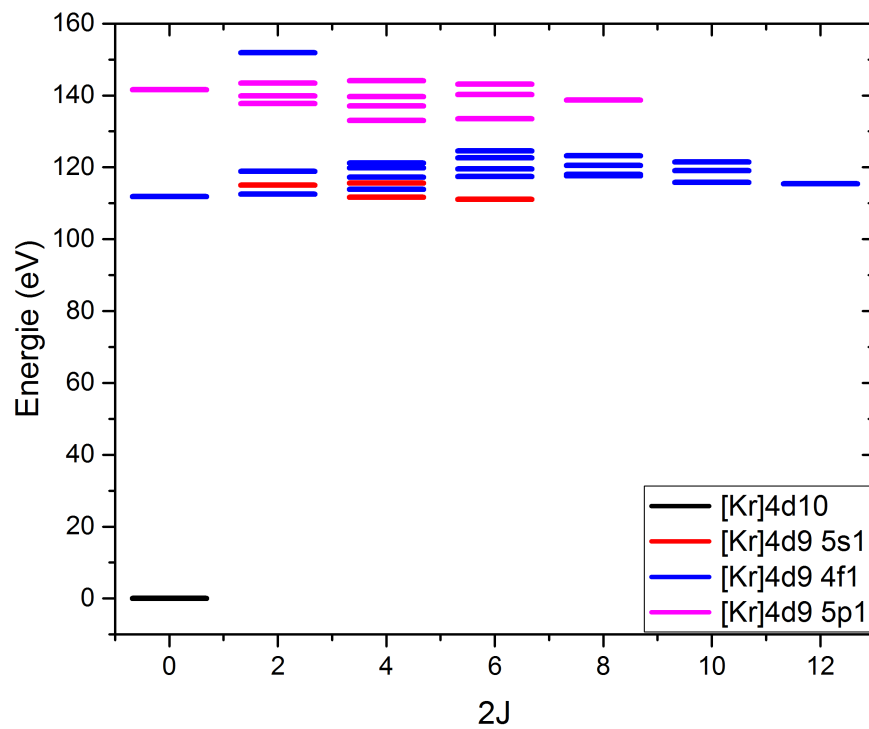


Abbildung 2.5: Darstellung der mit FAC berechneten Energieniveaus von Pd-ähnlichem Praseodym (Pr^{13+}). J entspricht hierbei dem Gesamtdrehimpuls.

3 Elektronenstrahl-Ionenfalle

Das Prinzip einer Elektronenstrahl-Ionenfalle (engl.: electron beam ion trap (EBIT)) besteht darin, dass einen Elektronenstrahl auf eine Ionenwolke fokussiert wird. Diese Fokussierung erfolgt durch einen supraleitenden Magnet, der bei Betriebsnahme auf kryogene Temperaturen gekühlt werden muss, welches durch Zugabe von Flüssig-Helium erfolgt. Durch geeignete Wahl der Elektronenstrahlenergie kann der maximale Ladungszustand der Ionen in der Falle präzise gewählt werden. Durch die negative Raumladung des Elektronenstrahls wirkt ein radiales Potential auf die positiv geladenen Ionen. Mit einem zusätzlichen axialen Potential können die Ionen in der Falle gefangen werden. Die so gespeicherten Ionen können spektroskopisch untersucht werden. Die Heidelberger EBIT besitzt eine horizontale Anordnung, sowie zwei thermische Schilde um den Helium Verbrauch zu minimieren. Der schematische Aufbau des Heidelberg EBITs wird in Abbildung 3.1 dargestellt.

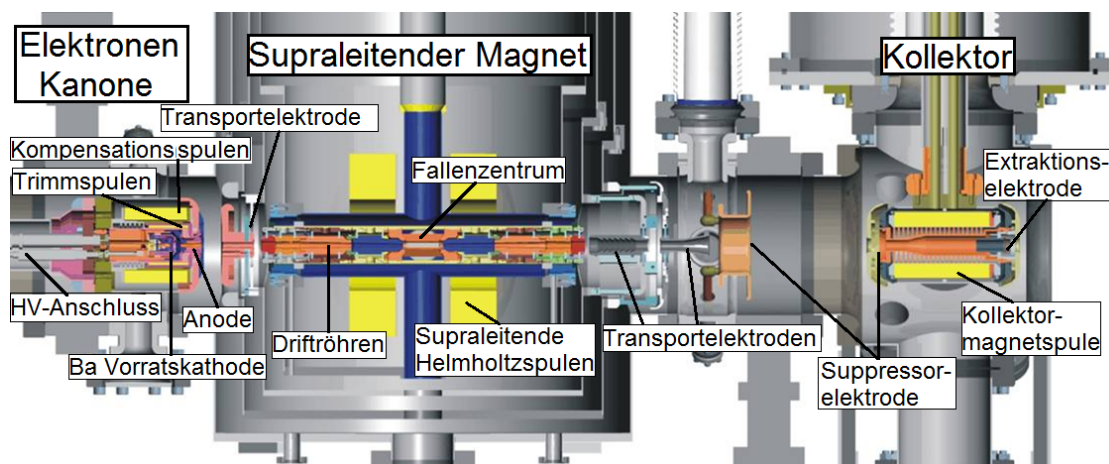


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau und Seitenansicht der Heidelberg-EBIT [22].

3.1 Heidelberg EBIT

Die Heidelberg EBIT kann grob in drei Komponenten aufgeteilt werden: Die Elektronenkanone, die Fallenregion und der Kollektor.

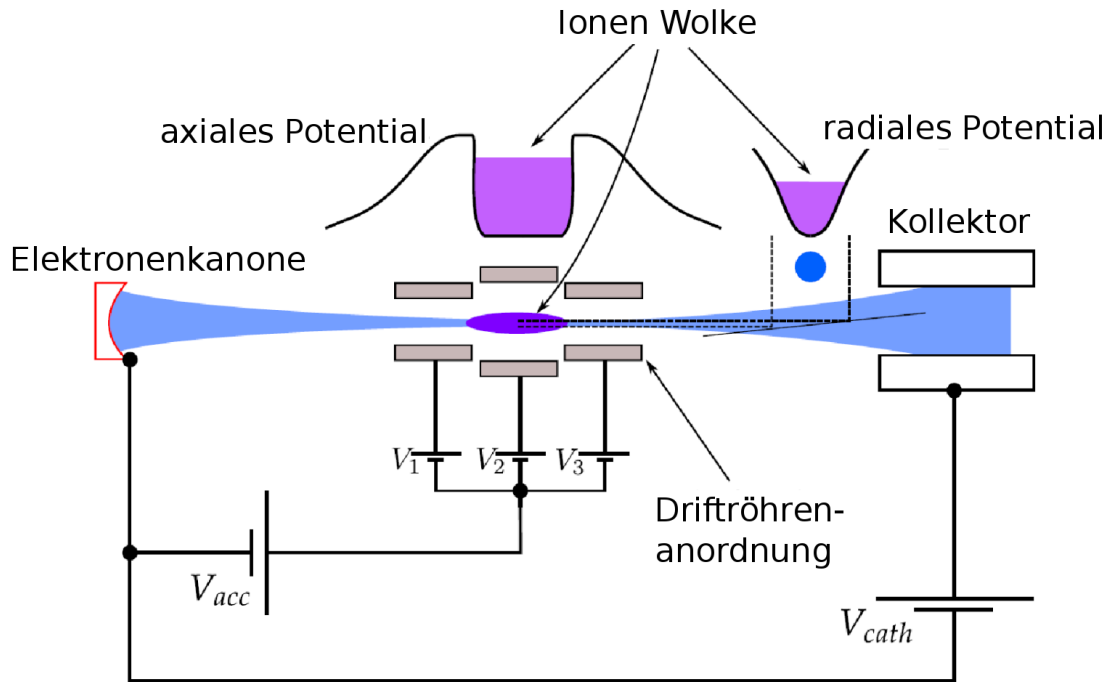


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Energiehaushalts der EBIT, mit Darstellung des Radialen und Axialen Potentials [29].

Die Elektronenkanone besteht aus einer negativ geladenen Kathode (V_{Cath}), die beim Erhitzen Elektronen emittiert. Die Fokus-Elemente und eingebauten Spulen sorgen dafür, dass der Strahl gebündelt und positioniert werden kann, bevor die Elektronen in Richtung Anode geführt werden. Durch anlegen eines Potentials in der Driftröhren-anordnung (V_{acc}), entsteht eine Energiedifferenz und werden die Elektronen in Richtung der mittleren Driftröhre beschleunigt. Dabei kann die Form des axialen Fallenpotentials durch insgesamt neun individuell regelbare Fallelektroden (DT1, DT2, DT3, DT4, DT9, DT5, DT6, DT7, DT8) beliebig gewählt werden, wobei DT9 die Bezeichnung der Mittleren ist. Die schematische Übersicht des Spannungen und Potentiale wird in Abbildung 3.2 dargestellt.

Dieser beschleunigte Elektronenstrahl wird durch ein starkes Magnetfeld (im Experiment: 6,3 T und 8 T) auf dem Weg von der Elektronen Kanone zum Fallenzentrum bis auf einen Radius von $25 \mu\text{m}$ [26] komprimiert. Es kann somit eine hohe Elektronendichte erreicht werden, die ihr Maximum im Fallenzentrum hat. Das Magnetfeld wird durch eine Supraleitende und auf $T = 4 \text{ K}$ gekühlte Helmholtz-Spule erzeugt. Durch diese niedrige Temperatur der Fallenregion kann ein Druck von 10^{-10} mbar in der Falle erreicht werden. Wie schon erwähnt bewirkt die negative Raumladung des Elektronenstrahls einen radialen Potenzialtopf.

Durch die Erhöhung der Elektronendichte des Elektronenstrahls auf dem Weg zum Fallenzentrum, entsteht zusätzlich eine axiale Potenzialdifferenz, welche somit durch Einstellen der Fallenelektroden verstärkt werden kann. In der Abbildung 3.2 wurden vereinfacht nur drei Fallenelektroden (v_1, v_2, v_3) dargestellt, die dieses Einstellen verdeutlichen sollen.

Nachdem der Elektronenstrahl den Driftröhren passiert, trifft er hinter der Fallenregion auf den Kollektor. Hier werden die Elektronen abgebremst und aufgefangen. Zusätzlich wird durch eine Extraktorelektrode sichergestellt, dass keine Sekundärelektronen zurück in die Falle gelangen. Eine genauere Erklärung der Spannungen bzw. Energien wird in Kapitel 5.4 behandelt. Für ausführlichere Informationen wird auf [22, 29] verwiesen.

4 Aufbau des Experiments

In dem folgenden Kapitel wird erklärt, wie die Fluoreszenzspektren der gespeicherten Ionen vermessen werden. Dazu wird in Abbildung 4.1 die schematische Übersicht des optischen Aufbaus dargestellt. Die Photonen, welche durch Abregungen von den gespeicherten Ionen emittiert wurden, treten zuerst durch zwei in dem Vakuum Bereich der EBIT eingebauten, plankonvexen Quarz Linsen (L1, L2), die Parallel zum Magnetfeldes der EBIT liegen. Diese Linsen fokussieren das Licht, durch einen Quarz Fenster (Transmission, $T \approx 92\%$) des EBITs, auf dem Eingang der Koppelbox. Dort wird das horizontale Bild der Ionenwolke durch die Spiegel M2 und M3 gedreht und anschließend unter Verwendung zweier plankonvexer Quarzlinsen (L3, L4) auf den vertikalen Eingangsspalt des Spektrometers fokussiert. Ein dritter Spiegel (M1) wird benötigt, um das Licht für alle Wellenlängen und Linseneinstellungen in der Koppelbox, mittig auf den Eintrittsspalt des Spektrometers zu justieren. Mit diesem optischen Aufbau ist es möglich die sphärische Aberration zu reduzieren [29].

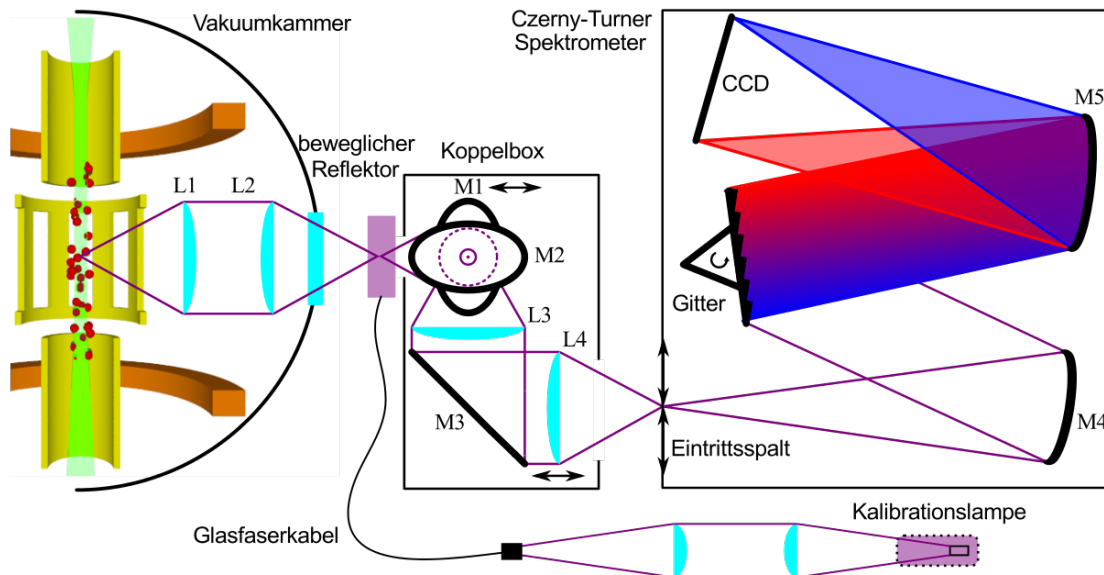


Abbildung 4.1: Schematische Übersicht des optischen Aufbaus mit Spektrometer [26].

4.1 Czerny-Turner-Spektrometer

Nach der Fokussierung auf dem Eintrittsspalt, treffen die Photonen auf die erste von zwei in dem Spektrometer befindlichen konkaven Spiegel, welcher diese auf ein Blazegitter kollimiert. Durch die Benutzung des Gitters kann das einfallende Licht nach seinen spektralen Anteilen aufgeteilt werden. (siehe Abb. 4.1) Diese Anteile werden wiederum mit dem zweiten konkaven Spiegel auf die CCD-Kamera fokussiert. Blazegitter werden genutzt um die Beugungseffizienz bei einer bestimmten Wellenlänge zu erhöhen. Es beinhaltet somit die Maximierung einer bestimmter Beugungsordnung, wobei die restlichen Beugungsordnungen minimiert werden. Die Oberfläche eines Blazegitters hat eine Sägezahn-ähnliche Struktur, wobei die Neigung des Profils durch den sogenannten Blazewinkel (Θ_B) gegeben ist [6].

$$\Theta_B = \arcsin\left(\frac{k\lambda}{2g}\right) \quad (4.1)$$

Hierbei bezeichnet k die Beugungsordnung und g die Gitterkonstante. Die Beugungswinkel des Gitters werden durch ihre Sägezahn-ähnliche Anordnung nicht beeinflusst. Durch die Änderung des Einfallswinkels auf das Gitter können unterschiedliche spektrale Anteile bzw. Wellenlängen Bereiche des einfallenden Lichts auf die CCD-Kamera fokussiert werden. Dies wird durch die Gittergleichung beschrieben.

$$\sin \alpha + \sin \beta = \frac{k\lambda}{g} \quad (4.2)$$

Hierbei entspricht α dem Einfallswinkel des eingestrahlenen Lichts und β dem Beugungswinkel. In den hier durchgeführten Messungen wurden zwei verschiedene Gitter mit 300 bzw. 2400 Gitterstrichen pro mm verwendet.

4.2 CCD Detektor

Das in seine spektralen Anteile zerlegte Licht des Czerny-Turner-Spektrometers wird durch eine CCD-Kamera detektiert. Diese besteht aus 2048 x 512 Pixel mit einer jeweiligen Größe von $13,5 \mu\text{m}^2$ [30]. An jeder Pixelposition befindet sich ein Silizium-Festkörperdetektor (engl.: Silicon solid state detector), welcher die eintreffenden Photonen zunächst nach dem Photoelektrischen Effekt in freie Ladungsträger umformt und speichert. Diese werden nach einer prä-determinierten Zeit gemessen und zur Analyse in ein digitales Signal umwandelt, wodurch ein zusätzliches Rauschen entsteht. Im Experiment wurde die nicht-dispersive Achse der CCD-Kamera in mehreren Streifen zusammengefasst bzw. „gebündelt“. Dies beinhaltet die Zusammenfassung der empfangen Signale mehrere Pixel, wodurch

das Signal-zu-Rausch-Verhältnis verbessert wird. Effektiv wird bei einer Einstellung von 8 Streifen die Anzahl der Pixel einer Abbildung auf 2048×8 Pixel reduziert. Die minimale Anzahl der Streifen ist durch die Intensität des Signals und weitere optische Phänomene, welche die Auflösung der Messung verschlechtern, beschränkt. Dazu gehören die Abbildungsfehler und die Kosmische Strahlung, welche in Kapitel 4.2.1, 4.2.2 vorgestellt und in Abbildung 4.2 dargestellt werden. Zudem kommt noch eine Ungenauigkeit in Form von Rauschen durch thermische Erzeugung von freien Elektronen, die linear mit der Messzeit zunimmt. Zur Reduzierung, wird die Kamera auf eine Temperatur von $T = -70^\circ\text{C}$ gekühlt. Nach jeder Messeinheit erfolgt eine Dunkelmessung, wodurch der Beitrag der Hintergrundstrahlung aus dem Spektrum entfernt werden kann.

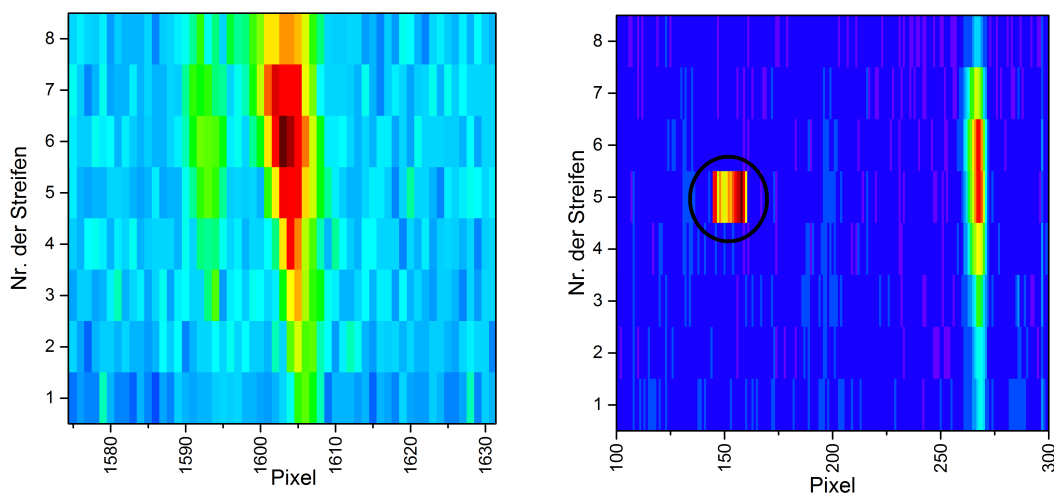


Abbildung 4.2: Beispielmessung zur Veranschaulichung der Abbildungsfehler (links) und zur Detektion von kosmischer Strahlung welcher schwarz umrandet wurde.(rechts)

4.2.1 Kosmische Strahlung

Die Kosmische Strahlung entsteht durch hochenergetische aus dem Weltall kommenden Protonen, die in den obersten Atmosphärenschichten mit den dort vorhandenen Molekülen zusammenstoßen. Aus diesen Kollisionen entstehen Hadronen, die selbst wieder in Myonen zerfallen. Diese Zerfallsprodukte können durch eine CCD Kamera detektiert werden und sorgen für einen hoch-intensives Signal, welches zur Sättigung einzelner Pixel führen kann (siehe Abbildung 4.2). Zur Entfernung dieser sogenannten „Cosmics“ wird im Nachhinein ein Python-Skript verwendet, welches auf dem Algorithmus von Wojtek Pych basiert [37].

4.2.2 Abbildungsfehler

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie die Abbildungsfehler des Messaufbaus im Nachhinein minimiert werden. Die Abbildungsfehler setzen sich aus mehreren Effekten zusammen. Der erste Effekt hat seinen Ursprung in der fehlerhaften Ausrichtung der CCD-Kamera, wobei der CCD-Chip stets parallel zur vertikalen Achse des Eintrittsspalts des Spektrometers sein muss. Es entsteht hieraus eine schräge der Spektrallinien [31]. Ein weiteres Phänomen ist die sogenannte „Koma“, welche sowohl eine Krümmung der Spektrallinien in der nicht-dispersiven und eine Verbreiterung entlang der dispersiven Achse verursacht. Dies wird durch eine Überlagerung aus der sphärischen Aberration und dem Astigmatismus des optischen Aufbaus verursacht. Die sphärische Aberration entsteht beim Durchgang optischer Elemente (Spiegel, Linsen,..), wobei die Brennweiten der Stahlen von ihrer Entfernung zur optischen Achse abhängt. Es folgt somit eine Verteilung der Brennweiten, welche zu einer Unschärfe des Bildes führen. Wenn Lichtstrahlen nicht senkrecht auf optische Elemente treffen, entsteht der sogenannte Astigmatismus, welcher durch unterschiedliche Brechungen der senkrecht zueinander verlaufende Strahlenbündel hervorgerufen wird. Es folgt hieraus eine zusätzliche Unschärfe des Bildes und einen Fokus außerhalb der optischen Achse [33]. Diese Abbildungsfehler werden in Abbildung 4.2 dargestellt.

Um die Auflösung der Messung zu verbessern, werden diese Effekte in den nachfolgenden Schritten minimiert. Zunächst wird die Schräge und die darin enthaltene

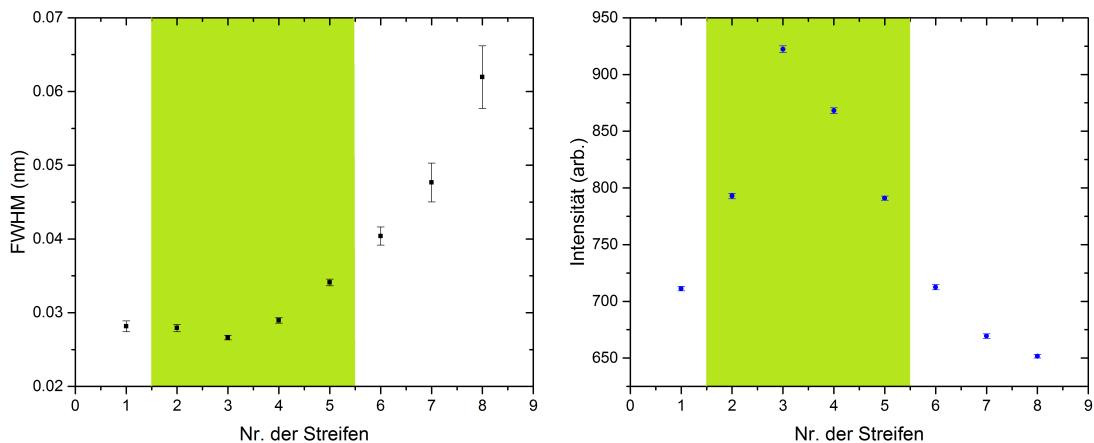


Abbildung 4.3: Beispielmessung einer Spektrallinie zur Verdeutlichung der FWHM in nm (links) und Peak-Intensität in willkürlichen Einheiten (rechts) als Funktion der Streifen auf der nicht-dispersiven Achse der CCD-Kamera. In grün ist der ausgewählte Bereich der Streifen dargestellt.

Krümmung jeder Messung bestimmt und korrigiert. Danach erfolgt eine Reduzierung der durch den Koma-Effekt erzeugten Verbreiterung der Spektrallinien, indem nur die Streifen der CCD-Kamera verwendet werden, für welche das Verhältnis von Intensität zu Halbwertsbreite (engl.: full width half maximum (FWHM)) maximal ist. Dies ist anhand einer Beispielmessung in Abbildung 4.3 gezeigt. Für das nachfolgende Experiment wurden jeweils nur die Streifen zwei bis fünf verwendet, wobei dies sich als Optimum herausgestellt hat.

4.3 Kalibration

Die Aufnahmen der CCD-Kamera enthalten Informationen über die gespeicherten Ionen in der Form von Intensität pro Pixel. Um die spektralen Anteile des ausgesendeten Lichts einer Wellenlänge zuordnen zu können, muss die Pixelposition der CCD-Kamera auf der dispersiven Achse kalibriert werden. Dazu wird das Spektrum einer Kalibrationslampe mit den bekannten Linien der NIST-Datenbank [1] verglichen. Für die hier durchgeführten Messung wird eine Eisen-Argon-Hohlkathodenlampe (200 nm – 700 nm) verwendet. Das Licht dieser Lampe wird auf einem Glasfaserkabel fokussiert, wobei dieser so eingestellt wurde, dass der Strahlengang mit dem Licht der Ionenwolke übereinstimmt. Durch eine vor dem Glasfaserkabel angebrachten Blende ist es möglich Messungen von der Ionenwolke als auch der Kalibrationslampe zu machen, ohne eine manuelle Änderung am Aufbau vornehmen zu müssen. Ein solches Kalibrationsspektrum ist in Abb.4.4 dargestellt.

Tabelle 4.1: Übersicht der verwendeten Kalibrationslinien aus der Nist-Datenbank [1].

Element	Wellenlänge (nm)	Element	Wellenlänge (nm)
Fe I	248.40204	Fe II	256.42437
Fe I	248.49374	Fe I	258.53093
Fe I	248.88931	Fe II	259.91456
Fe I	249.05035	Fe II	260.01721
Fe I	249.13956	Fe II	261.26533
Ar II	251.75463	Fe I	262.43164
Fe I	252.36082	Fe II	262.64501
Ar II	253.54704		

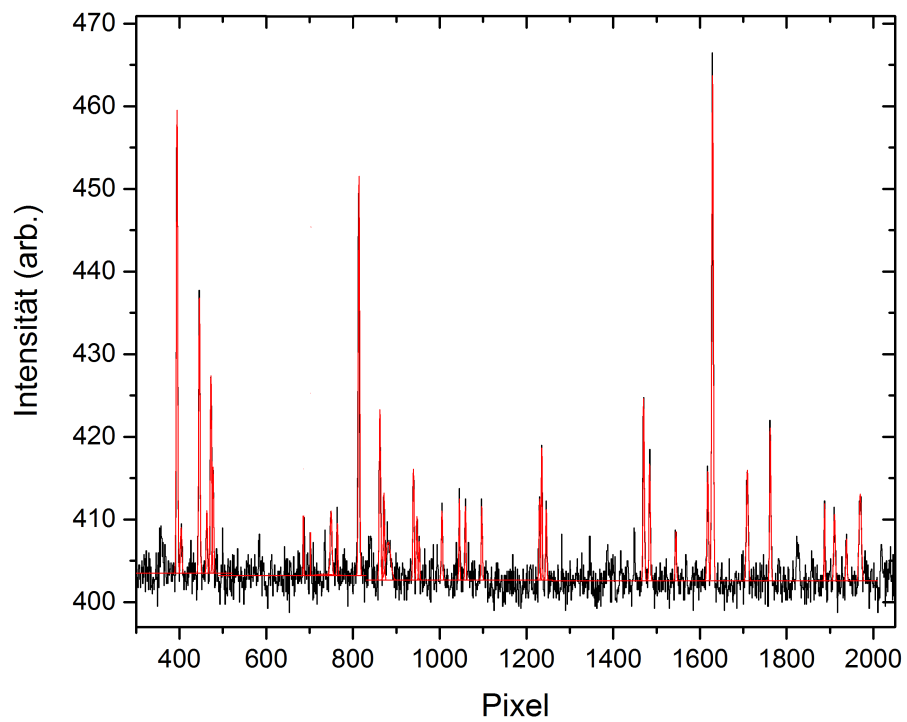


Abbildung 4.4: Beispiel eines Kalibrationsspektrums unter Verwendung der Eisen-Argon-Hohlkathodenlampe. Zusätzlich sind Gaußfunktionen (rot) an die zur Kalibration verwendeten Linien angepasst.

Eine Spektrallinie mit einer natürlichen Linienbreite besäße die Form einer Lorentz-Kurve. Aufgrund Dopplerverbreiterung wie in Kapitel 4.3.1 beschrieben, haben die gemessenen Spektrallinien ein Gauß-Profil. Die Kalibrationslinien sind somit einer Gaußkurve gefittet, wobei die Positionen der Peaks (bzw. das Zentrum der Gaußkurve) gegen die bekannten Wellenlängen der NIST-Datenbank [1] aus Tabelle 4.1 aufgetragen sind. Aus den ermittelten Positionen der Kalibrationslinien auf der CCD-Kamera kann man mit einem polynomiellen Fit zweiter Ordnung eine Kalibrationskurve bestimmen. Die Fehler der Peakpositionen, sind in Nanometer umgerechnet und werden als Fehler der NIST-Werte angesehen, sodass ein gewichteter Fit durchgeführt werden kann. Die Ordnung des Fit-Polynoms, welche die Dispersion des Spektrometers am besten beschreibt, wurde über den kleinsten χ^2 -Wert der Fitfunktionen bestimmt. Wie in Tabelle 4.2 zu sehen ist, liefert ein Polynom zweiter Ordnung das beste Ergebnis.

Tabelle 4.2: Bestimmung der besten Ordnung des Fitpolynoms zur Kalibration des Spektrometers. Hierbei bezeichnet F die Anzahl der Freiheitsgrade des Fits, χ^2 die Chi-Quadrat-Verteilung und R^2 das Bestimmtheitsmaß.

Fit-Polynom	Linear	Quadratisch	Kubisch
χ^2/F	87.37	1.77	2.06
R^2	1	1	1

In Abbildung 4.5 ist ein solcher quadratischer Fit für das Kalibrationsspektrum aus Abbildung 4.4 dargestellt. Zudem ist ein 1σ -Konfidenzband mit den Residuen der einzelnen Kalibrationslinien aufgetragen. Mit diesem Konfidenzband zeigt sich, dass die Genauigkeit des Fits im Bereich 900 – 1100 Pixeln, welcher für die Messung später verwendet wird, eine Genauigkeit von $5 \cdot 10^{-4}$ nm erreicht wird. Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurden bis zu 30 Kalibrationslinien verwendet, wodurch die hier erreichte Genauigkeit allerdings nicht signifikant verbessert werden konnte.

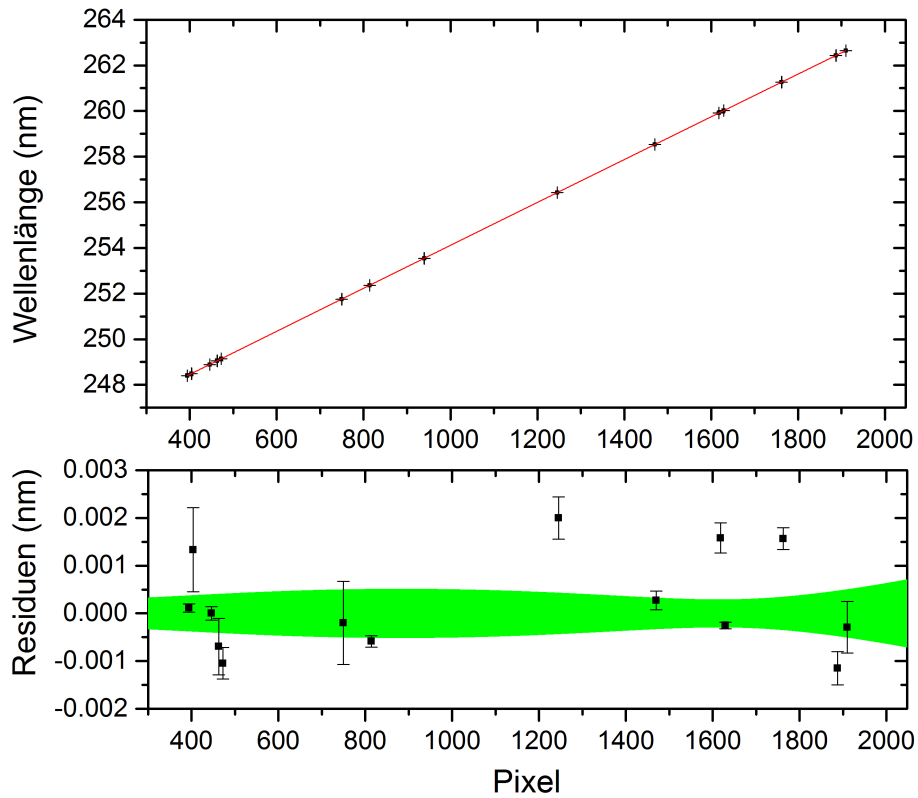


Abbildung 4.5: Die ermittelten Pixelpositionen der Kalibrationslinien sind gegen die bekannten Wellenlängen der NIST-Datenbank [1] aufgetragen und mit einem quadratischen Polynom gefittet (oben). Die Residuen der einzelnen Datenpunkte mit dem Fehler des Gaußfits ist zusammen mit dem 1σ -Konfidenzband in grün aufgetragen (unten).

4.3.1 Das Profil der Spektrallinien

Das Profil der Spektrallinien besitzt immer eine bestimmte Breite, welche sich vor allem aus der natürlichen Linienbreite, der Dopplerverbreiterung und der Auflösung des Aufbaus zusammensetzt. Die natürliche Linienbreite lässt sich quantenmechanisch aus der Heisenbergschen Unschärferelation herleiten, wobei die Lebensdauer des Übergangs die zeitliche Unschärfe darstellt. Die Unschärfe der Energie kann daraus folgend mit $\Delta E = \hbar \cdot \Delta\omega$ in die Kreisfrequenz abhängige natürliche Linienbreite umgerechnet werden.

$$\Gamma_i(\omega) = \frac{1}{\tau_i} = \sum_{i \neq f} A_{i \rightarrow f}^{spont} \quad (4.3)$$

Wie in Gleichung 4.3 erkennbar ist, ist die Linienbreite gleich der Summe aller Übergangsraten, wobei die Gleichung meist auf einen Übergang beschränkt wird [34]. Die Dopplerverbreiterung eines Übergangs ergibt sich aus dem Doppler-Effekt. Aus der Standardabweichung dieser gaußförmigen Verteilung [29] lässt sich die Dopplerbreite ($\Delta\omega_D$) bestimmen.

$$\Delta\omega_D = \frac{2\omega_0}{c} \sqrt{2 \ln 2 \frac{k_B T_i}{m_i}} \quad (4.4)$$

Hierbei entspricht ω_0 die Frequenz des Übergangs im Ruhesystem des Ions, k_B der Boltzmann-Konstante und T_i , m_i der Temperatur und Masse der Teilchen. Im Experiment wird diese Dopplerverbreiterung durch Elektron-Ion-Kollisionen der gespeicherten Ionen mit dem Elektronenstrahl verursacht. Durch die im Plasma herrschende hohe Temperaturen und die Abhängigkeit der Dopplerbreite von der Temperatur nach Gleichung 4.4, ist die Dopplerverbreiterung der dominierende Mechanismus zur Linienverbreiterung. Zur Reduzierung der Linienbreite soll die Temperatur der gespeicherten Ionen erniedrigt werden. Dies wird durch Verringern der Falltiefe erreicht, wodurch Ionen mit hoher kinetischer Energie die Falle verlassen können. Durch dieses entfliehen wird sowohl Energie als auch die Anzahl der Ionen in der Falle reduziert. Es entsteht ein Kühlungsmechanismus, welcher sich evaporatives Kühlen nennt [29]. Im Experiment wurde dieses Evaporative Kühlen zur Verbesserung der Auflösung verwendet. Dies ist in Abbildung (6.5, 6.9) zu sehen. Zusätzlich ist die Auflösung der Spektrallinien durch das Abbildungssystem beschränkt, welche vor allem von der Gitterauflösung und der Größe des Eintrittspalts abhängt. Durch die Bestimmung der Linienbreiten der Kalibrationslampe, welche eine Dopplerbreite und natürliche Linienbreite besitzen, die geringer als die Geräteauflösung Spektrometers ist, lässt sich die Auflösung des Aufbaus ermitteln [21]. Dies ist in Abbildung 5.1 in Kapitel 5.1 erläutert.

4.4 Datenaufnahme

Zur Durchführung einer Messung, wird zuerst das Spektrometer und die EBIT auf die Energie der untersuchten Übergänge optimiert. Dieses Optimierungsverfahren wird ausführlich in Kapitel 5 besprochen. Als nächstes wird eine Untergrundmessung, mit invertierter Ionenfalle durchgeführt, welches 30 Minuten erfolgt. Danach wird vor und nach jeder Belichtung der Ionenwolke, welche 30 Minuten dauert, ein Kalibrationsspektrum aufgenommen. Nachdem die Ionenwolke sechs mal belichtet wurde, wird das Gitter des Spektrometers um 0.1 nm gedreht und der nächste Spektralbereich vermessen. Dazu wiederholt sich dieser Prozess ab der Untergrundmessung [26].

5 Einstellverfahren

Das folgende Kapitel befasst sich mit dem Einstellverfahren zur Optimierung von sowohl Auflösung als auch Intensität.

5.1 Der Eintrittsspalt

Zur Verbesserung der Auflösung des optischen Abbildungssystems wird zunächst der Eintrittsspalt des Spektrometers optimiert. Dies ist erforderlich, da bei herkömmlichen Einstellungen ($70\ \mu\text{m}$) die Zeeman-Aufspaltung nicht bei jeder, der hier durchgeführten Messungen erkennbar war. Dazu werden für verschiedene Breiten des Eintrittsspalts eine Reihe von Kalibrationsspektren aufgenommen, wobei sowohl Belichtungszeit als auch die Einstellungen des Spiegels (M1) und der Fokussierungslinse (L4) unverändert bleiben. Wie in Abbildung 5.1 erkennbar ist, ändern sich Breite und Intensität der Spektrallinien proportional zur Spaltgröße. Unter einer Einstellung von $30\ \mu\text{m}$ ist die Intensität der Spektrallinien bei gleicher Messzeit zu gering um eine vernünftige Messung zu absolvieren, weshalb die Spaltbreite nicht weiter reduziert wurde. Zur Reduzierung optischer Phänomene, welche die Auflösung verschlechtern können (siehe Kap. 4.2.2), wurde diese Untersuchung nur für einen Streifen mit der besten Auflösung durchgeführt.

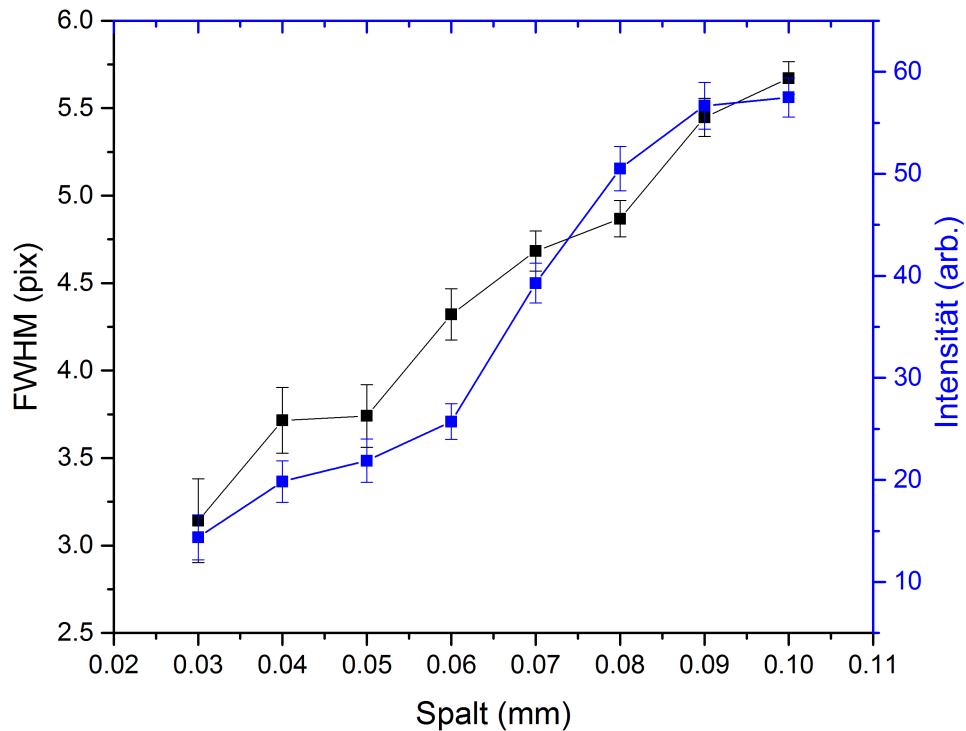


Abbildung 5.1: Optimierung der Eintrittsspaltbreite für ein beliebiges Kalibrationspektrum. Gezeigt ist die Intensität und Breite der Linie im dritten Streifen der CCD-Kamera (Bin: 3).

5.2 Fokussierung auf den Eintrittsspalt

Die Brennweiten der Linsen des Aufbaus sind Wellenlängenabhängig und müssen somit nach jeder Änderung des Spektralen Bereichs neu eingestellt werden. Hierbei wird die Linse L4 (siehe Abbildung 4.1) mit einer eingebauten Mikrometerschraube ausgerichtet, sodass das Bild der Ionenwolke auf den Eintrittsspalt des Spektrometers fokussiert wird. Zur Optimierung wird die für jede Einstellung der Mikrometerschraube die Intensität und Breite der Spektrallinien bestimmt und das Verhältnis maximiert (siehe Abb. 5.2). Dazu wird direkt das Spektrum des zu untersuchenden Elements verwendet und eine Spaltgröße von 2 mm gewählt, so dass die Auflösung allein von der Fokussierung abhängt (siehe Kapitel 5.3). In Abbildung 5.3 ist diese Optimierung für verschiedenen Stellungen der Mikrometerschraube gezeigt. Es wird sowohl das Verhältnis von Intensität zu Breite als

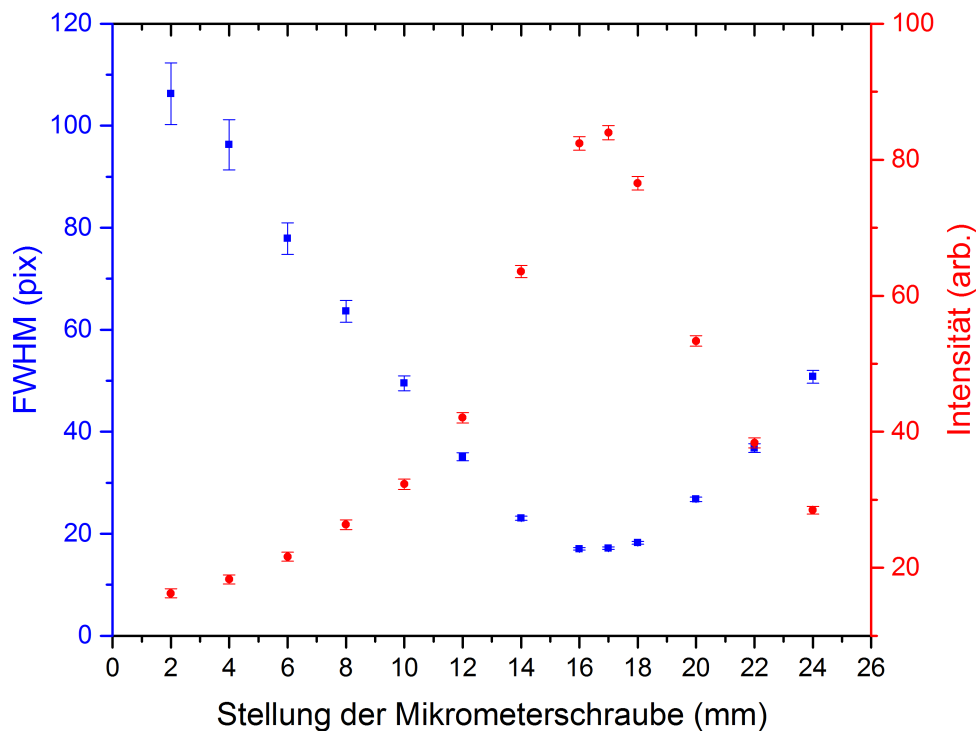


Abbildung 5.2: Optimierung der Fokussierung mit den Spektren aus Abbildung 5.3. Gezeigt ist die FWHM und Intensität der Linie als Funktion der Position der Mikrometerschraube von Linse L4.

auch das Gaußsche Linienprofil verbessert. Hieraus wird klar, dass die Ionenwolke nur bei richtiger Fokussierung auf den Eintrittsspalt des Spektrometers realistisch dargestellt werden kann. Durch die erreichte Auflösung der Messungen wurde gefolgert, dass die interne Fokussierung des Spektrometers ausreichend gut war. Diese Fokussierung wurde somit nicht verändert.

5.3 Spiegel M1

Beim Durchführen von unterschiedlichen Messungen werden meist, wie auch in diesem Experiment, verschiedene Wellenlängenbereiche betrachtet. Wie in Kap.5.2 beschrieben, wird eine Positionsänderung der Fokussierungslinse vorgenommen, um eine höhere Intensität und Auflösung zu erreichen. Durch diese Verschiebung ändert sich auch die Position des Brennpunktes, welcher sich dadurch nicht mehr

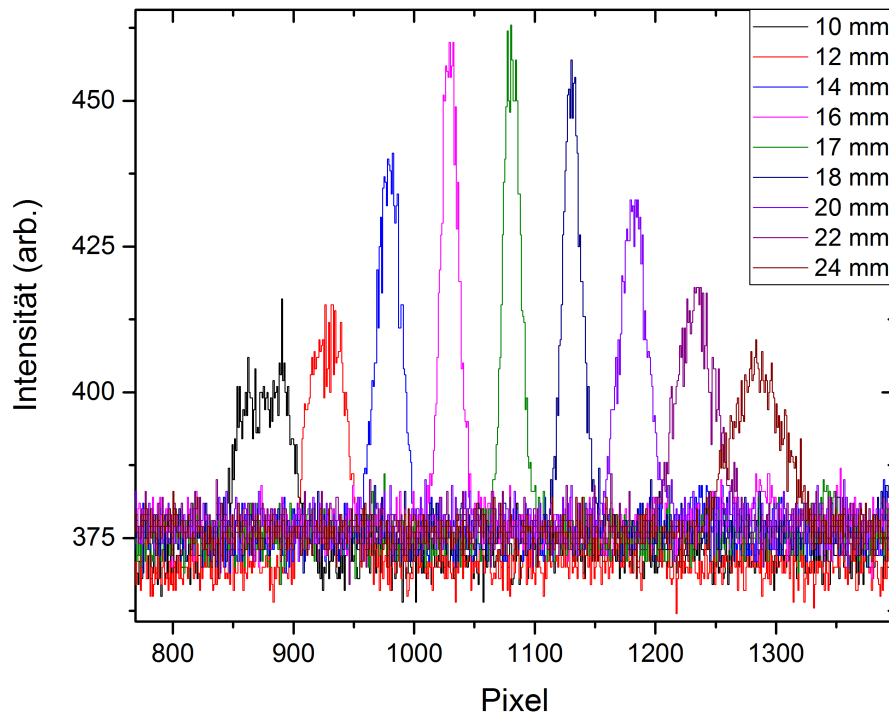


Abbildung 5.3: Optimierung der Fokussierung auf den Eintrittsspalt für eine Beispielmessung der $5p_{\frac{3}{2}} - 5p_{\frac{1}{2}}$ Linie von In-ähnliches Praseodym (Pr^{10+}). Gezeigt ist das gemessene Spektrum als Funktion der Position der Mikrometerschraube von Linse L4. (Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde die Pixelposition der Peaks mit einem relativen Offset versehen, sodass diese nicht die wahre Position auf der CCD-Kamera beschreibt.)

im Zentrum des Spektrometerspalts liegt. Dies wird durch Verstellen des Spiegels M1 behoben (siehe Abb. 4.1), wodurch eine originalgetreue und analysierbare Abbildung der Ionenwolke sichergestellt wird. Um die Fokusposition auf die Mitte des Spalts zu verschieben, wird bei verschiedenen Spiegeleinstellungen die Peakposition sowohl bei geöffnetem Spalt (2 mm) als auch bei optimierter Spaltgröße (30-50 μm) bestimmt. Das Ziel dieses Verfahrens ist es eine möglichst kleine Verschiebung der Peakpositionen zwischen den beiden Einstellungen der Spaltgröße zu erreichen, wobei eine Veränderung von weniger als einem Pixel angestrebt wird. Dieses Verfahren ist in Abbildung 5.4 anhand einer Beispielmessung dargestellt, wobei die Kreuzung den Punkt der minimalen Verschiebung der Peakpositionen zwischen den beiden Einstellungen der Spaltgrößen darstellt. Durch die Optimierung der Spiegelposition werden für ausgewählte Spaltgrößen die Intensität und Auflösung maximiert.

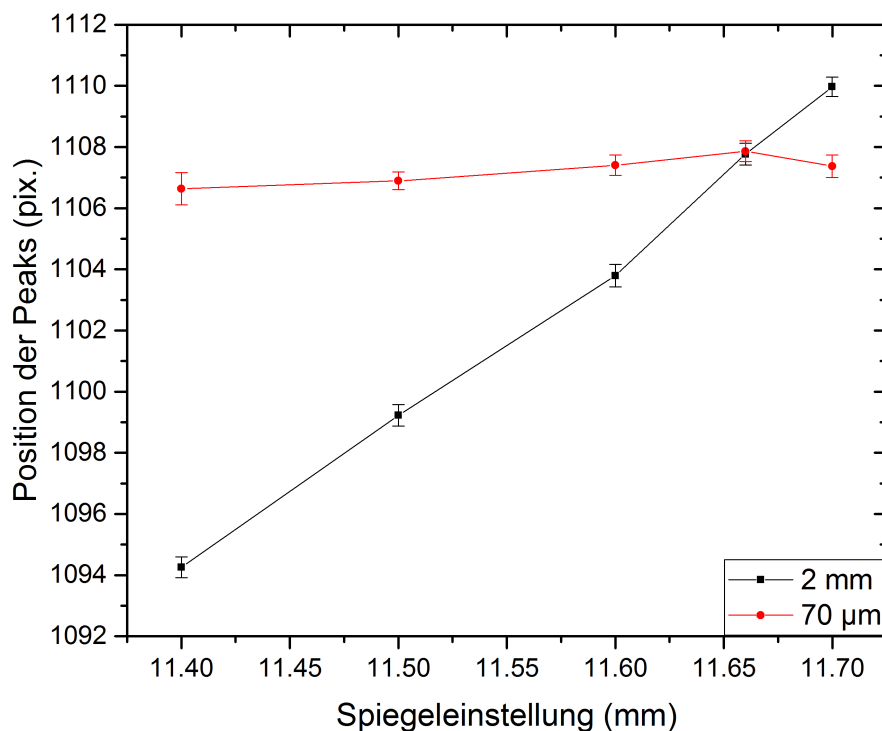


Abbildung 5.4: Position von Spiegel M1 anhand einer Beispielmessung. Es ist die Position der Spektrallinie als Funktion der Spiegelposition für verschiedenen Öffnungen des Eintrittspalts gezeigt.

5.4 Optimierung der Elektronenstrahlenergie

Wie schon in Kapitel 3.1 beschrieben, besteht die Driftröhrenanordnung aus neun Elektroden. Durch die unabhängigen Potentiale der Driftröhren kann die Tiefe und Breite des axialen Fallenpotentials variiert werden. Wie in Kapitel 4.3.1 beschrieben, hängt die Potentialtiefe direkt mit der Intensität und Breite der Spektrallinien zusammen. Dazu wurden in diesem Versuch nur die drei zentralen Driftröhren (DT4, DT9, DT5) verwendet, deren Spannungsdifferenz der Potentialtiefe der Falle entspricht. Die für die Ionisation der gespeicherten Ionen nötige Energie wird von den Elektronen im Elektronenstrahl durch die Abgabe von kinetischer Energie E_{ES} aufgebracht. Wenn diese Energie größer als die Ionisationsenergie des Ions ist, kann die nächste Ionisationsstufe erreicht werden. Die Energien, die für bestimmte Ionisationsstufen eines Elements benötigt werden, sind im Anhang (Kap. 8.2) in Tabelle 8.1 aufgelistet. Die Energie des Elektronenstrahls im Fallenzentrum kann mit der Gleichung,

$$E_{ES} = e(-V_{cath} + V_{acc} - V_{Raum}) \quad (5.1)$$

berechnet werden. Ihre Zusammensetzung wird mit der Abbildung 3.2 in Kapitel 3.1 verdeutlicht. Hierbei entspricht V_{cath} der an der Kathode angelegten Spannung, V_{acc} der Beschleunigungsspannung des Elektronenstrahls. Diese setzt sich wiederum aus der Spannung der mittleren Driftröhre V_{DT9} und dem Spannungsoffset aller Driftröhren, $V_{All\ Dts}$, zusammen.

$$V_{acc} = V_{DT9} + V_{All\ Dts} \quad (5.2)$$

Der letzte Beitrag zu Gleichung 5.1 ist nicht direkt einstellbar und bezeichnet das Raumladungspotential V_{Raum} . Sie entsteht durch das Komprimieren des Elektronenstrahls auf dem Weg zum Fallenzentrum, was eine Erhöhung der Ladungsdichte zur Folge hat. In der Fallmitte erreicht sie ihr Maximum, wodurch die effektive Beschleunigungsspannung der Elektronen verringert wird. Die Größe des Raumladungsterms lässt sich aus dem angelegten Elektronenstrahlstrom I_{ES} und einem Raumladungskorrekturterm bestimmen, welcher genauer in der Dissertation von Volkert Meakel beschrieben wird [22].

$$V_{Raum} = I_{ES} \cdot 2.8(2) \frac{V}{mA} \quad (5.3)$$

Bei der Berechnung dieses Terms muss allerdings noch die Kompensation der negativen Ladung durch die in der Falle befindlichen positiv geladenen Ionen beachtet werden. Eine genaue Bestimmung der Raumladung ist somit sehr schwierig. Für die durchgeführten Messungen wurde die Elektronenstrahlenergie so gewählt, dass die Intensität der zu untersuchenden Spektrallinie maximiert wurde. Dieses Verfahren ist in Abbildung 5.5 dargestellt.

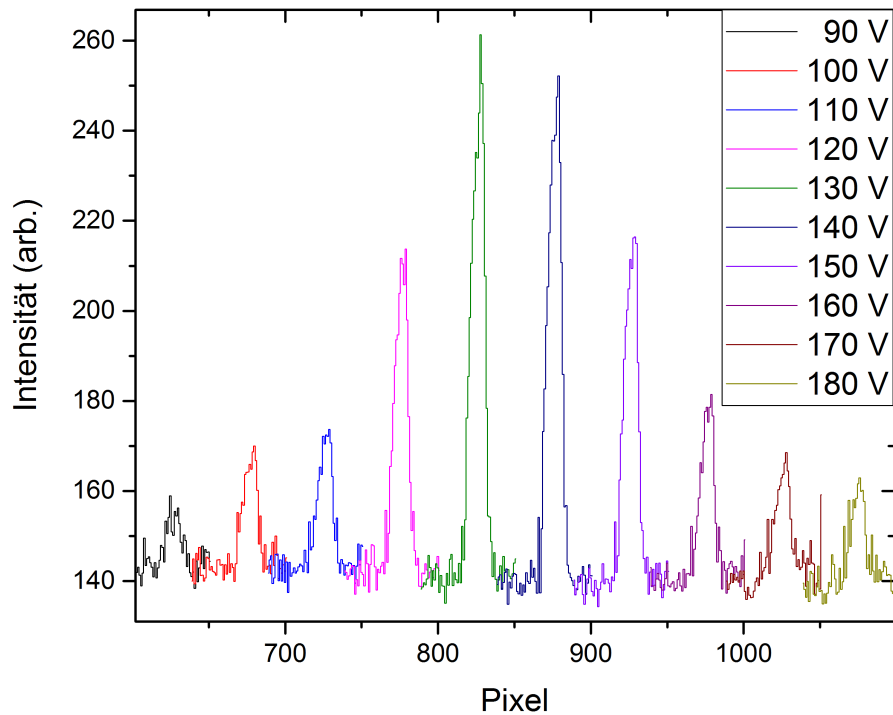


Abbildung 5.5: Optimierung der Linienintensität in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie für eine Beispielmessung. Das Spektrum ist für verschiedene Werte der Beschleunigungsspannung V_{acc} dargestellt, wobei die Peakposition der Spektrallinie zur Verbesserung der Übersichtlichkeit mit einem Offset versehen wurde und nicht der tatsächlichen Position auf der CCD-Kamera entspricht.

6 Ergebnisse und Diskussion

In dem Experiment wird Praseodym ($Z=59$) bei verschiedenen Elektronenstrahlenergien bzw. Ladungszustände untersucht. Diese Übergänge werden mit einem 300 und einem 2400 Strich pro Millimeter Gitter betrachtet. Die Ergebnisse werden mit zwei Theorien verglichen. Hierbei ergibt sich die erste Theorie aus den selbst erstellten Werten des Programmes FAC und die Zweite stammt aus zwei Publikationen von Safronova et al. [15, 16]. Zudem werden zwei Übergänge tiefgründiger untersucht. Desweiteren wird auf die Zeeman-Aufspaltung und ihre Abhängigkeit vom Magnetfeld eingegangen.

6.1 Bestimmung der Wellenlängen

Zu Beginn wird einen Überblick von Energie und Wellenlänge geliefert, welcher in Abbildung 6.2 dargestellt wird. Auf der X-Achse wird die Wellenlänge im Bereich von 191 nm bis 579 nm betrachtet und auf der y-Achse ist die angelegte Beschleunigungsspannung (V_{acc}) aufgetragen. Durch Raumladungseffekte ist die tatsächliche Energie, die an der Ionen Wolke abgegeben wird, nicht mit den angelegten Spannungen zu vergleichen. Es wird somit eine Vermutung für die jeweiligen Ionisierungsstufen in der folgenden Tabelle 6.1 aufgetragen. Zudem werden diese Ionisierungsstufen in Abbildung 6.2 gekennzeichnet. Die Vermutungen werden mit Berechnungen von FAC, welche in Abbildungen 2.1, 2.2, 2.3, 2.4 und 2.5 dargestellt werden und Betrachtungen der Struktur der Spektrallinien in Abhängigkeit der Elektronenstrahlenergie aufgestellt.

Bei der Anregung von Ladungszuständen, besitzen die betrachteten Spektrallinien bei Erhöhung der Energie einen gemäßigten Anstieg und Abfall der Intensität der einer asymmetrischen Gaußfunktion ähnelt. Bei der Untersuchung und Zuordnung der Ladungszustände wird nach der Identifikation des Ladungszustandes von Cd-ähnlichem Praseodym (Pr^{11+}) ein abrupter Anstieg mehrerer Spektrallinien erkannt. Dieser abrupte Anstieg entspricht somit nicht dem typischen Verlauf einer Ionisierung des nächsten Ladungszustandes. Zudem erkennt man ein zweites Maximum in diesen Spektrallinien. Dieses Verhalten der Spektrallinien ist auf einen metastabilen Zustand zurück zu führen. Zur Verdeutlichung werden in Abbildung 6.1 alle Linien mit diesen Merkmalen gemittelt und ihre Intensität gegen den energetischen Verlauf aufgetragen. Hierbei ist somit der abrupte Anstieg der

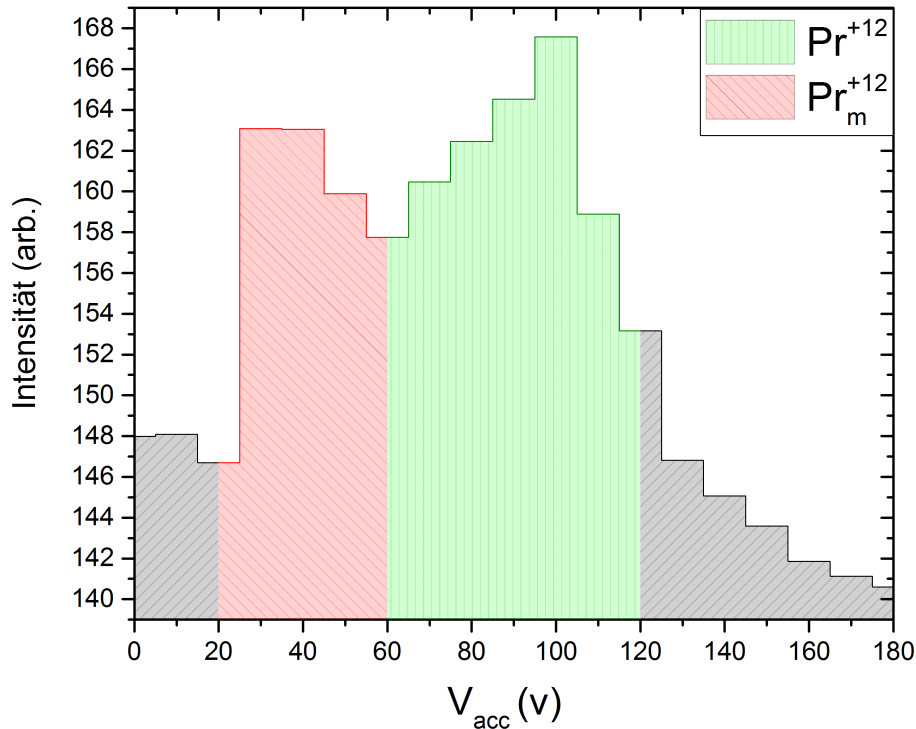


Abbildung 6.1: Darstellung der Mittelung von den gefundenen Übergängen von Ag-ähnlichen Praseodym (Pr^{12+}) zur Verdeutlichung des frühzeitigen Erreichens eines nächsten Ladungszustandes durch die Besetzung eines metastabilen Zustandes.

Intensität gut zu erkennen. Dies hat ihren Ursprung in der Anregung eines metastabilen Zustandes, welches als $[Cd]5s^14f_2^1$ -Niveau vermutet wird. Dieser besitzt nur einen einzigen Zerfallskanal, welcher ein Quadropolübergang zu dem Grundzustand ($[Cd]5s_0^2$) ist, wobei durch die niedrige Frequenz bzw. Langlebigkeit dieses Niveaus ein zweiter Grundzustand gebildet wird. Durch weitere Energiezufuhr wird somit vorzeitig der nächste Ladungszustand von Praseodym (Pr^{12+}) erreicht, was diesen abrupten Anstieg zur Folge hat. Dieses frühzeitige Anregen mit dem daraus folgenden Maximum wird in Abbildung 6.1 mit einem roten Bereich gekennzeichnet. Das zweite Maximum entsteht beim tatsächlichen Erreichen der Anregungsenergie des Ag-ähnlichen Praseodym (Pr^{12+}) und wird mit einem grünen Bereich gekennzeichnet. Für weitere Informationen zu metastabilen Zuständen wird auf die Quelle [36] verwiesen.

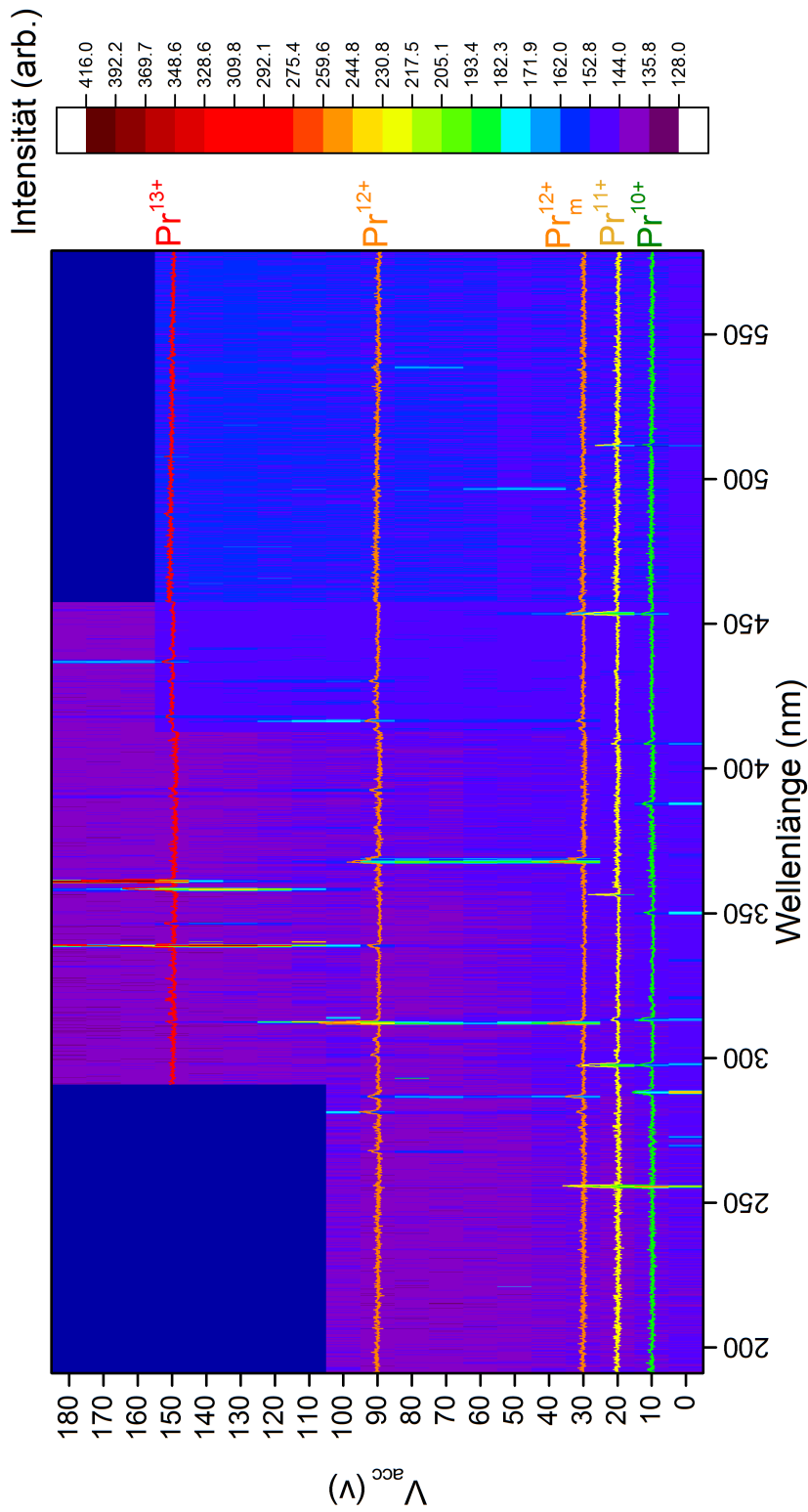


Abbildung 6.2: Darstellung der Messung von Praseodym, wobei es sich vermutlich um Pr^{9+} bis Pr^{13+} handelt. Es ist eine Zusammenfassung dreier Messungen welche eine Beschleunigungsspannung von bis zu 100 V im Bereich 190 nm bis 359 nm, 180 V im Bereich 290 nm bis 457 nm und 150V im Bereich 413 nm bis 579 besitzen. Die Farbspektra der Intensität sind hierbei zur Verdeutlichung der Spektrallinien schwacher Intensität logarithmisch angeordnet.

Tabelle 6.1: Darstellung von den Wellenlängen der Übergänge mit ihre gemessene Intensitäten und Angabe der vermuteten Ladungszustände. In grün werden die genauer bestimmten Spektrallinien angegeben. In blau werden die dargestellt, welche durch die Besetzung eines metastabilen Zustandes frühzeitig in die nächste Ionisierungsstufe angeregt werden.

Ionisierungsstufe	Wellenlänge (nm)	Intensität (arb.)
10+	255.69(1)	127(3)
12+	267.74(2)	18(1)
12+	281.28(2)	35(1)
9+	288.24(1)	107(2)
12(m)+	286.68(2)	26(1)
12+	286.68(2)	30(1)
9+	297.95(7)	24(2) 1
11+	297.46(1)	110(2)
?	299.73(3)	12(1)
?	301.14(2)	22(1)
12(m)+	311.98(1)	70(4)
12+	311.96(2)	183(6)
9+	313.49(2)	29(2)
9+	320.99(4)	13(2)
9+	323.94(9)	6(2)
9+	333.88(5)	13(2)
13+	338.71(2)	137(12)
9+	350.12(2)	37(2)
13+	358.39(1)	110(3)
?	361.10(1)	288(5)
12(m)+	367.87(2)	53(2)
12+	367.90(2)	55(2)
9+	387.97(2)	30(1)
9+	408.68(2)	19(1)
12(m)+	416.55(5)	10(1)
12+	416.51(3)	29(2)
12+	430.25(3)	14(1)
?	436.99(4)	23(2)
13+	441.58(5)	8(1)
11+	453.56(1)	50(2)
?	496.75(2)	24(1)
12+	538.67(3)	12(1)

6.2 Analyse einer Spektrallinie mit einem hochauflösenden Gitter

Von besonderer Bedeutung sind die Übergänge von In-ähnlichem und Sn-ähnlichem Praseodym. Diese werden in dem Paper von Safronova [15, 16] berechnet und beschrieben. Hierbei wird auf den optischen Übergang $5s^25p \ ^2P_{3/2} - 5s^25p \ ^2P_{1/2}$ für In-ähnliches und $5s^25p^2 \ ^3P_1 - 5s^25p^2 \ ^3P_0$ für Sn-ähnliches Praseodym eingegangen. Durch Bestätigung der Theorie dieser Übergänge kann eine vertrauenswürdigere Aussage über nicht experimentell Zeigbaren und in dem Paper beschriebene Übergänge getroffen werden. Hierzu wird einen 2400 Strich pro Millimeter Gitter benutzt, um einen genaueren Auflösung und Messung zu erhalten. Es sollte trotzdem beachtet werden, dass der Übergang dieser Energieniveaus, der untersuchten Wellenlängen, innerhalb einer Konfiguration liegen (Intra-Konfiguration) und somit die Übergangsenergie besser zu bestimmen sind als von den Übergängen, die zwischen verschiedenen Konfigurationen statt finden (Inter-Konfigurationen).

6.2.1 Analyse des $^3P_1 - ^3P_0$ Übergangs

Die Untersuchung der Wellenlänge erfolgt bei drei verschiedenen Einstellungen, die in Tabelle 6.2 dargestellt sind. Es wurden in diesem Fall die Form des Potentialtopfes (bzw. evaporatives Kühlen), das Magnetfeld und die Spaltgröße des Eintrittspalts geändert. Es handelt sich hier um einen magnetischer Dipolübergang (M1), des neunfach geladenen bzw. Sn-ähnlichen Ions von Praseodym (Pr^{9+}). Durch ein level crossing wird hier anstatt der geschlossenen [Cd]-Schale, die [Pd]-Schale als geschlossen angenommen. Somit ergibt sich $[\text{Pd}]5s^25p^2$, wobei sich die Wellenlänge aus der Feinstruktur von der P-Schale ergibt (siehe Abb. 6.3).

Zeeman-Aufspaltung

Als erstes wird auf die Zeeman-Aufspaltung des Übergangs eingegangen. Stimmt die Struktur der betrachteten Linie mit der erwarteten Struktur der Zeeman-Übergänge, welche sich aus den Clebsch-Gordan-Koeffizienten errechnen lässt, überein, kann man mit einer hoher Sicherheit die Identität der Linie bestätigen. Es handelt sich hier um den anomalen Zeeman-Effekt, wobei der Gesamtspin $S = 1$ ist. Wie in 6.3 erkennbar, kann man drei Aufspaltungslinien erwarten mit gleicher Energiedifferenz. Zur Überprüfung der Vermutung wird ein Python-Skript verwendet, welches von Hendrik Bekker geschrieben wurde [39]. Das mit diesem Skript erzeugte Bild enthält die Positionen und Intensitäten der jeweiligen Zeeman-Komponenten. Mit einer grünen Linie wird nun die untersuchte Struktur aus den gegebenen Werten angepasst, wobei gleichzeitig die experimentellen Werte mit

Tabelle 6.2: Einstellungen der durchgeführten Messungen des Sn-ähnlichen Praseodym (Pr^{9+}) Übergangs. Die dargestellten Elektronenstrahlenergien werden ohne Beachtung der Raumladung angegeben.

Parameter	Einstellungen		
	Messung 1	Messung 2	Messung 3
DT 4/9/5 (V)	10/10/10	10/10/10	10/20/10
All Dts (V)	15	10	10
Kathodenspannung (V)	-120	-120	-110
Elektronenstrahl Energie (eV)	145	140	140
Elektronenstrahl Strom (mA)	6.3	5.5	5.5
Magnetfeld (T)	6.29	8.00	8.00
Spalt(μm)	50	30	30
Beleuchtungszeit (s)	1800	1800	1800
Injektionsdruck ($\text{mbar} \cdot 10^{-8}$)	6.61	3.18	3.08
Anzahl der Messungen	6	24	15
Wellenlängenbereich(nm)	340-360	340-360	340-360

Fehler in schwarz dargestellt werden. Diesen direkte Vergleich kann man in Abbildung 6.4 sehen. Eine deutliche Übereinstimmung ist zu erkennen, wodurch man einer guten Sicherheit davon ausgehen kann, dass es sich hier um unseren gesuchten Übergang handelt. Die drei verschiedenen Komponenten werden mit einer blauen, roten und schwarzen (in Abbildung 6.3 grün) Linie gekennzeichnet. Die blaue Komponente korrespondiert zu einem Übergang von dem Niveau $m_j = -1$ zu $m'_j = 0$ und wird somit $\Delta m_J = -1$ zugeordnet, welches energetisch das Niedrigste ist. Die rote Komponente entspricht dem Übergang höchster Energie, welcher von dem $m_j = 1$ zu dem $m'_j = 0$ Niveau übergeht und somit $\Delta m_J = 1$ entspricht. Wie in Kapitel 2.6.1 erklärt, handelt es sich hier um zwei Übergänge, deren Photonen bei transversaler Betrachtung eine Ausbreitungsrichtung parallel zum Magnetfeld besitzen. Diese werden mit π^- bzw. π^+ gekennzeichnet. Die mittlere Komponente verläuft von $m_J = 0$ zu $m'_J = 0$, wobei $\Delta m_J = 0$ gilt. Dieser Übergang besitzt somit eine Polarisierung, welche in dieser Betrachtungsrichtung senkrecht verläuft und wird mit σ bezeichnet. Dieser Übergang ohne Änderung der magnetischen Gesamtdrehimpulsquantenzahlen entspricht der Feinstrukturaufspaltung ohne äußere Einwirkung des Magnetfeldes und wird zum Vergleich mit den Theorien verwendet. Für die drei Messungen werden die Wellenlängen der Einzelnen Zeeman-Komponenten bestimmt und zudem in Energie umgerechnet.

Die aufgenommene Spektren einer Messung werden addiert und zu einem Gra-

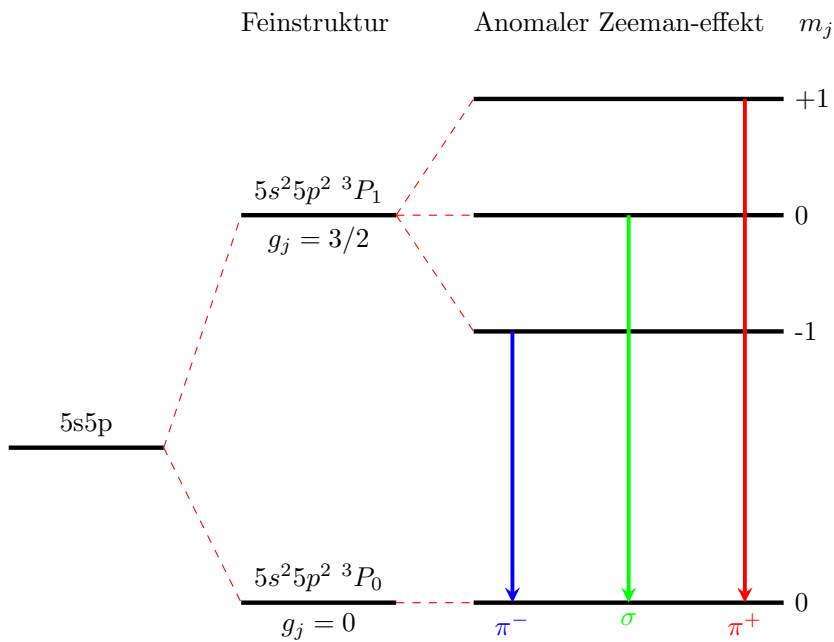


Abbildung 6.3: Schematische Darstellung der Feinstruktur und der Zeeman-Aufspaltung. Zudem werden die möglichen Übergänge und ihre Polarisation farblich gekennzeichnet.

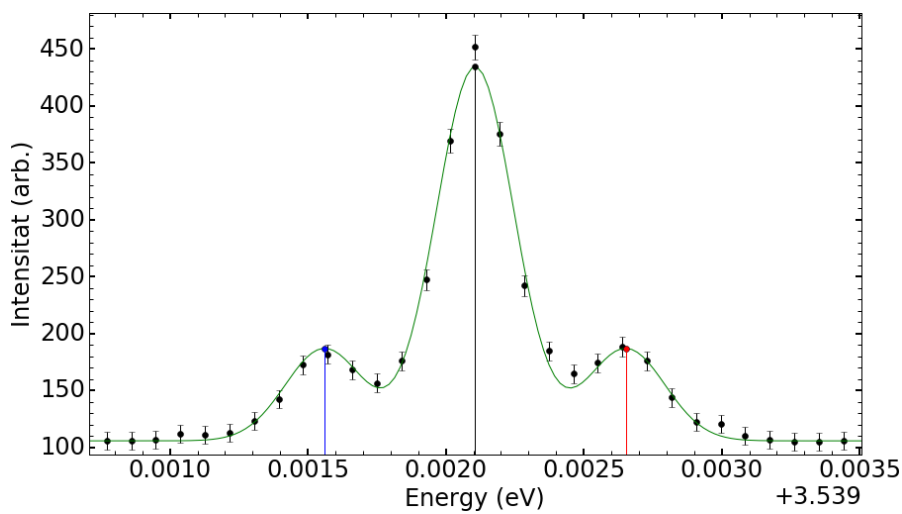


Abbildung 6.4: Abbildung der Datenpunkte von Sn-ähnlichem Praseodym (Pr^{9+}) mit ihren zugehörigen Fehlern in schwarz. Zudem eine Darstellung der Vermuteten Zeeman-Komponenten, jeweils farblich verschieden für die verschiedenen Polarisationen. In grün wird die an den Daten angepasste Funktion visualisiert.

Tabelle 6.3: Positionen der Peaks aller Zeeman-Komponenten.

Δm_J	Messung		
	1	2	3
	Wellenlänge (nm)		
1	350.0763(8)	350.0656(10)	350.0653(12)
0	350.1284(2)	350.1310(3)	350.1312(3)
-1	350.1816(9)	350.1990(11)	350.1998(14)
	Energie (eV)		
1	3.541633(8)	3.541742(11)	3.541745(13)
0	3.541111(2)	3.541080(3)	3.541078(3)
-1	3.540569(9)	3.540392(12)	3.540385(14)

phen zusammengefügt (siehe Abbildung 6.5). Die Bestimmung der Wellenlänge erfolgt aus diesen Graphen, über einen Gaußfit der Peaks, wobei die Anforderung gestellt wurde, dass die Peaks jeweils die gleiche Breite besitzen sollten. Diese Annahme ergibt sich aus der Auflösung des Spektrometers und die Ionentemperatur, welche die Dopplerverbreiterung bestimmt. Die Ergebnisse dieser Messung und die entsprechenden Energiewerte, werden in Tabelle 6.3 dargestellt. Die Umrechnung in Energie erfolgt mit den Naturkonstanten, die in CODATA angegeben werden [7, 8].

Durch das Variieren des Magnetfeldes kann die Abhängigkeit der Peakpositionen betrachtet werden. Die Messungen erfolgten, bei zwei verschiedenen Magnetfeldern, wie in Tabelle 6.2 dargestellt. Aus den Differenzen der Wellenlängen der jeweiligen Zeeman-Komponenten lassen sich die von dem Magnetfeld abhängigen Wellenlängen der Aufspaltung bestimmen. Diese Aufspaltung wird zudem in Energie umgerechnet. Zusätzlich werden die theoretischen Werte mit den Gleichungen aus Kapitel 2.6 bestimmt.

Hierbei stammt μ_B wiederum aus CODATA [9]. Die theoretischen Werte werden nun mit dem Experiment verglichen und in Tabelle 6.4 aufgetragen. Es ist hierbei zu erkennen, dass die Theorie bis zu 2σ von dem experimentellen Werte abweicht. Bei der Angabe dieser Abweichung wird davon ausgegangen, dass der eingestellte Maximalwert des Magnetfeldes mit dem in der Fallenmitte übereinstimmt. Zudem ist zu erkennen, dass die experimentellen Werte jeweils um einen ähnlichen Faktor kleiner sind als die theoretische Werte, was auf einem systematischen Fehler hinweist. Durch Inhomogenität und Abschwächung über die Laufdauer des Magnetes und zudem die Abwesenheit von einem Messgerät im Fallenbereich ist es

Tabelle 6.4: Aufspaltung der Zeeman-Komponenten und ihr zugehöriges Magnetfeld.

Messung	ΔE (eV $\cdot 10^{-4}$)		$\Delta\lambda$ (nm $\cdot 10^{-2}$)		Magnetfeld(T)	
	Exp.	Theorie	Exp.	Theorie	Hergeleitet	Eingestellt
1	5.32(7)	5.47	5.26(7)	5.40	6.13(8)	6.29
2	6.75(9)	6.95	6.67(9)	6.87	7.80(8)	8
3	6.80(10)	6.95	6.73(10)	6.87		

zu erwarten, dass das Magnetfeld schwächer sein kann als eingestellt. Es wurden somit die experimentellen Werten als richtig angenommen und auf die jeweiligen Magnetfelder zurück gerechnet, welches unsere Vermutung bestätigt. Es ist hierbei zu beachten, dass der berechnete Landé-Faktor g_J von dem experimentellen Wert abweichen könnte. In Tabelle 6.5 werden diese Faktoren mit einer (wie in Kapitel 2.6 beschrieben) nicht relativistischen Berechnung und relativistischen Berechnungen von Safronova et al. [35] dargestellt. Durch die eindeutige Übereinstimmung dieser beiden theoretischen Berechnungen, kann somit vermutet werden, dass die Abweichung zwischen Experiment und Theorie nicht signifikant ist.

Die Abweichung des Magnetfeldes ist somit eine Vermutung, die nur durch genauere Berechnung bestätigt werden könnte.

Tabelle 6.5: Darstellung der nicht relativistischen und relativistischen Landé-Faktoren der beiden Energieniveaus des ${}^3P_1 - {}^3P_0$ Übergangs von Sn-ähnlichem Praseodym (Pr^{9+}).

Energieniveau	Landé	Safronova et al.
3P_1	1.50000	1.49944
3P_0	0	0

Struktur der Peaks

Bei der Analyse der Struktur wird auf die Änderung innerhalb einer Messung eingegangen und auf die Änderung bei Variation der Einstellungen.

Wie schon beschrieben (Kap. 5.1, 4.3.1), hängt die Intensität und Breite der Spektrallinien von der Spalteinstellung und der Falltiefe ab. In den drei durchgeführten Messungen dieses Übergangs, wurden sowohl die Spalteinstellung als

Tabelle 6.6: Darstellung der Struktur der Peaks. Wobei die FWHM und Intensitäten aller Zeemankomponenten und Messungen dargestellt werden. Zudem werden experimentellen und theoretischen Werte von den relativen Differenzen der π - und σ -Komponenten dargestellt. Der sogenannte korrigierte Wert entsteht unter Einbezug der Beobachtungsrichtung relativ zum Magnetfeld und der Gittereffizienz.

Messung	FWHM(pm)	Intensität (arb.)		$A(\pi^\pm)/A(\sigma)$		
		$A(\sigma)$	$A(\pi^\pm)$	Experiment	Theorie	korrigiert
1	32.9(6)	331(4)	80(3)	0.240(9)	1	0.25
2	32.1(5)	116(2)	27(1)	0.233(12)	1	0.25
3	31.1(8)	51(1)	13(1)	0.248(14)	1	0.25

auch die Falltiefe angepasst, wobei die Auswirkung auf die Breite und Intensität in Abbildung 6.5 visualisiert ist und in Tabelle 6.6 verdeutlicht wird. Es muss dabei beachtet werden, dass zur Bestimmung vom FWHM, die Breiten aller Komponenten als eine einzige Variable angenommen werden. Die beiden π -Übergänge sollten mit gleicher Rate ablaufen. Zum Vergleich werden die beiden Intensitäten $A(\pi^-)$ und $A(\pi^+)$ addiert und gemittelt, um dadurch eine Asymmetrie zu kompensieren. Die Herkunft dieser Asymmetrie wird in Kapitel 6.3 beschrieben. Zwischen der ersten und zweiten Messung wurde die Spalteinstellung von $50\ \mu\text{m}$ auf $30\ \mu\text{m}$ verringert. Dabei wird eine Erniedrigung in Intensität und Halbwertsbreite erwartet, was bestätigt wird. Die Falltiefe hingegen ist bei diesen Messungen nicht geändert worden. Zwischen der zweiten und dritten Messung, wird die Spaltgröße nicht verändert, aber die Falltiefe um $10\ \text{eV}$ verringert. Durch das evaporative Kühlen sollte somit diese Spektrallinie eine geringere Intensität und Halbwertsbreite besitzen, was wiederum bestätigt wird. Man sollte hierbei jedoch beachten, dass die erste Messung an einem anderen Zeitpunkt und bei anderen Einstellungen (wie in Tabelle 6.2 dargestellt und in Kapitel 6.3 angesprochen) durchgeführt wurde als die letzten beiden, wodurch ein Vergleich der letzten beiden Messungen eine höhere Aussagekraft hat als der Vergleich mit der ersten.

Es wird zusätzlich auf die Änderungen der Intensität innerhalb einer Messung eingegangen, wobei die σ -Komponente ($A(\sigma)$) mit den π -Komponenten verglichen wird $A(\pi^\pm)$. Wie in Kapitel 2.7.1 beschrieben, hängt die Intensität der verschiedenen Zeeman-Komponenten von der Blickrichtung, den Clebsch-Gordan-Koeffizienten und der relativen Gittereffizienz ab. Theoretisch sagen die Clebsch-Gordan-Koeffizienten eine relative Intensität von 100% (bzw. $A(\pi^\pm)/A(\sigma) = 1$) aus. Der im Experiment benutzte Aufbau erlaubt nur eine Betrachtung in transversa-

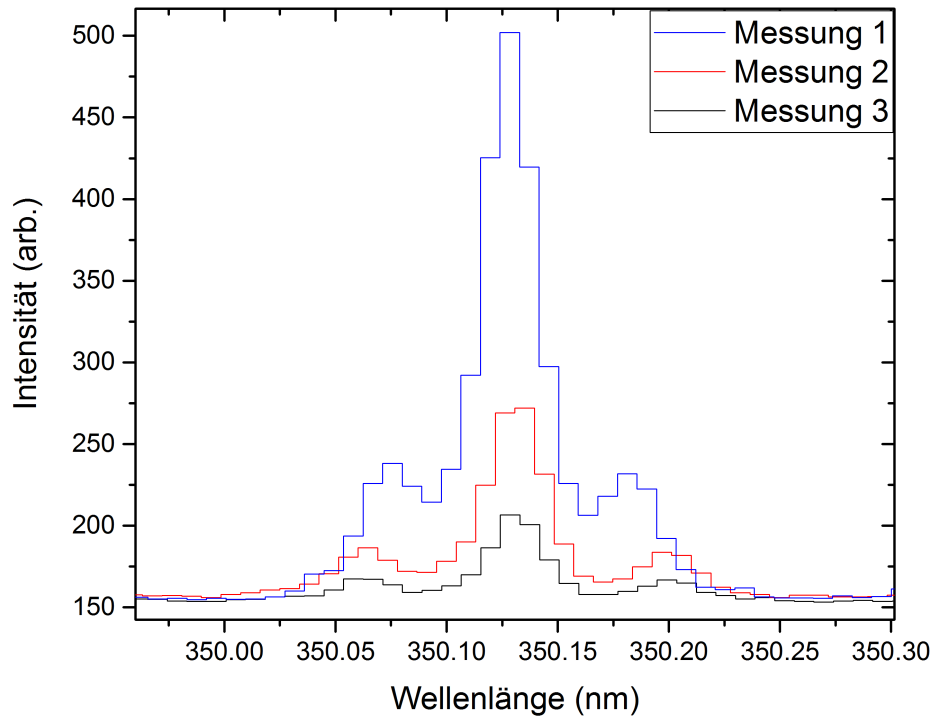


Abbildung 6.5: Messung 1 wird in blau dargestellt. Hierbei wurde ein Magnetfeld von 6.29 Tesla und eine Spaltbreite von 50 μm eingestellt. Messung 2 wird in rot dargestellt, wobei ein Magnetfeld von 8 Tesla und eine Spaltbreite von 30 μm eingestellt wurde. Messung 3 wird in schwarz dargestellt. Hierbei wurde ein Magnetfeld von 8 Tesla und eine Spaltbreite von 30 μm eingestellt. Zudem wurde die Falltiefe um 10 eV erniedrigt.

ler Richtung, wodurch sich die Intensitäten der π -Komponenten gegenüber den σ -Komponenten halbieren. Trotz dieser Überlegung ist der Wert noch signifikant größer als die experimentell ermittelten. Es wird somit die Gittereffizienz betrachtet, welche bei 350 nm eine weitere Halbierung der relativen Intensitäten vornimmt [10]. Es ergibt sich somit der in Tabelle 6.6 dargestellte korrigierten Term. Trotz Korrektur, stimmt dieser nicht immer mit dem 1σ -Bereich des experimentellen Wertes überein. Dies ist auf die relative Polarisations-Effizienz der Spiegel und Linsen zurückzuführen. Hinzu kommt, dass die Gittereffizienz eine theoretische Berechnung ist und nicht unbedingt mit der Realität übereinstimmt, wie von der Herstellungsfirma Angegeben [11]. Bei Vernachlässigung der relativen Polarisations-effizienz der Spiegel und Linsen kann aus der Mittelung der experimentellen Werte eine polarisationsabhängige Gittereffizienz von 48.1(6)% bestimmt werden.

Temperatur der Ionenwolke

Mittels der Breite der betrachteten Peaks kann zusätzlich eine Abschätzung der Temperatur der Ionenwolke erfolgen. Hierzu formt man die Gleichung der Dopplerverbreiterung (4.4), welche in Kapitel 4.3.1 beschrieben wurde, nach der Temperatur um.

$$T_i \cdot k_B = \left(\frac{\Delta\omega_D}{\omega_0} \right)^2 \cdot \frac{c^2 m_i}{8 \ln(2)} \quad (6.1)$$

Durch Integration der Boltzmann-Konstante k_B in die Temperatur T_i kann diese in eV angegeben werden. Zusätzlich werden die Konstanten eingesetzt um somit eine vereinfachte Gleichung zu erhalten.

$$T_i[\text{eV}] \approx 1.67 \cdot 10^8 \left(\frac{\Delta\omega_D}{\omega_0} \right)^2 m_i[\text{a.u.}] \quad (6.2)$$

Mit dieser Gleichung, der atomaren Masse von Praseodym $m_{\text{Pr}} = 140.907648(3)$ [38], der ermittelten Breiten der Spektrallinien ω und der Geräteauflösung ω_A kann

Tabelle 6.7: Darstellung der berechneten Temperatur und Dopplerverbreiterung $\Delta\omega_D$, zusammen mit der ermittelten Breite der Spektrallinien ω und der Geräteauflösung ω_A .

Messung	ω (pm)	ω_A (pm)	ω_0 (nm)	$\Delta\omega_D$ (pm)	Temperatur(eV)
1	32.9(6)	26(4)	350.1284(2)	20(5)	78(37)
2	32.1(5)	25(4)	350.1310(3)	20(5)	78(39)
3	31.1(8)	25(4)	350.1312(3)	19(6)	66(39)

nun die Temperatur bestimmt werden, welche in Tabelle 6.7 aufgetragen wird. Es ist hierbei zu beachten, dass es sich hier um eine Abschätzung handelt und dass die in der Ionenwolke herrschende Temperatur nur durch eine komplexe, ausführliche Berechnung bestimmbar ist.

Vergleich der Wellenlängen

Zuletzt wird auf die Wellenlänge bzw. Energie der σ -Komponente eingegangen, welche dem Feinstrukturübergang entspricht. Zur Bestimmung werden alle Beleuchtungen einer Messung mit einer eigenen Gaußfunktion gefittet. Aus diesen Werten wird ein gewichteter Mittelwert gebildet. Die Werte der drei Messungen werden mit ihrem Mittelwert in Abbildung 6.6 dargestellt. Zudem wird der Statistische Fehler aus der gewichteten Mittelung als farbiger Bereich dargestellt. Die experimentellen und theoretischen Werte, mit ihren Unsicherheiten werden in Tabelle 6.8 dargestellt. Es ist sowohl aus der Abbildung als auch aus der Tabelle zu erkennen, dass die Messungen 2 und 3, welche bis auf die Falltiefe, bei gleichen Einstellungen erfolgten, den selben Wert haben. Nur der Fehlerbereich variiert, was auf die geringere Intensität der dritten Messung zurückzuführen ist. Die erste Messung, welche bei unterschiedlichen Einstellungen durchgeführt wurde, weicht signifikant ab. Dies ist vermutlich auf einen systematischen Fehler zurückzuführen. Zwischen diesen Messungen wurde die Energie, Spaltöffnung, Spiegel und Fokus Einstellungen variiert. Zudem wurde das Spektrometer zwischen den Messungen verschoben. Eine genaue Bestimmung der Ursache ist durch die Änderung vieler Variablen erschwert. In Kapitel 6.3 wird nochmal näher auf dieses Problem eingegangen.

Die theoretische Werte, welche sowohl mit FAC als auch von Safronova et al. berechnet wurden, weichen signifikant vom Experiment ab. Die Berechnungen mit FAC erfolgen ohne Fehlerangabe, wodurch eine Aussage über ihre Genauigkeit nicht möglich ist. Dieser Wert dient somit nur zur groben Orientierung und weicht um 4 nm ab. Zur Berechnung von energetischen Übergängen werden von Safronova et al. [15, 16] zwei verschiedene Berechnungsmöglichkeiten vorgeschlagen. Die erste Methode ist die relativistische lineare gekoppelte Cluster Methode (engl.: relativistic linearized coupled-cluster method), welche alle einzelne, doppelte und partial dreifache Anregungen der Dirac-Fock Wellenfunktion beinhaltet (SDpT) [12]. Diese Berechnungsmethode kann nur für monovalente Systeme (Systeme mit einen Valenzelektron) eingesetzt werden. Näherungsweise kann In-ähnliches Praseodym hiermit berechnet werden. Die zweite Methode kombiniert die Konfigurations-Interaktion Methode (engl.: configuration interaction method) mit der modifizierten lineare gekoppelte Cluster Methode(CI+all) [13, 14]. Hiermit können Systeme mit bis zu vier Valenzelektronen berechnet werden, sowie Sn-ähnliches Praseodym und somit auch In-ähnliches Praseodym. Die Unsicherheiten

Tabelle 6.8: Darstellung der theoretischen und experimentellen Werten des ${}^3P_1 - {}^3P_0$ Übergangs. Hierbei entspricht stat. der statistischen Unsicherheit, welche sich aus der Fehlerfortpflanzung, der Unsicherheit der gewichteten Mittelung und aus der Unsicherheit des Kalibrationsverfahrens ergibt (1σ -Konfidenzband).

Messung		stat.	FAC	CI+all	Diff(%)
Wellenlänge(nm)					
1	350.1282	$7 \cdot 10^{-4}$	354.38	351.2(5)	0.3
2	350.1311	$6 \cdot 10^{-4}$			
3	350.1311	$7 \cdot 10^{-4}$			
Energie(eV)					
1	3.541108	$7 \cdot 10^{-6}$	3.4986	3.530(5)	0.3
2	3.541079	$6 \cdot 10^{-6}$			
3	3.541079	$7 \cdot 10^{-6}$			

dieser Berechnungen, ergeben sich aus die, in dem Paper [15] verglichenen, experimentellen und theoretischen Werten. Wie man in Tabelle 6.8 erkennen kann, liegen die experimentellen Werte nicht im Fehlerbereich der Theorie. Dies weist auf eine Unterschätzung des Fehlers der Theorie hin. Zudem wurde zum ersten mal in der Arbeit [15] die CI+all-Methode für vier Valenzelektronen, wie dieses Sn-Ähnliche Praseodym (Pr^{9+}) zunutze genommen. Es besteht zwischen der Theorie und der Messung eine Differenz von 0.3%.

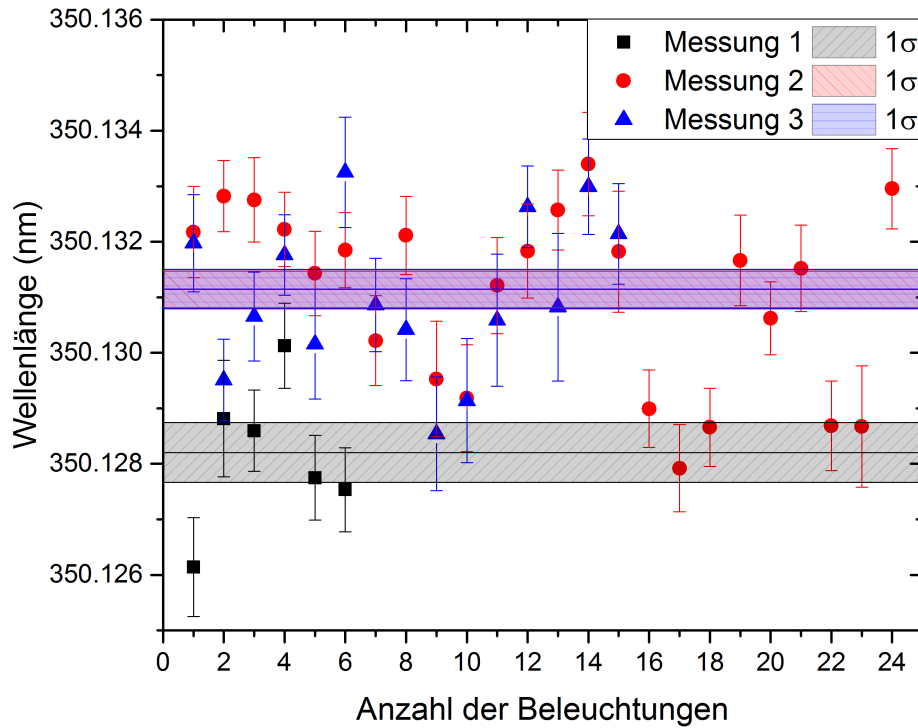


Abbildung 6.6: Darstellung der Wellenlängen, der durchgeführten Messungen von Sn-ähnlichem Praseodym (Pr^{9+}), mit ihrem zugehörigen Fitfehler. Der 1σ -Bereich wird farbig angegeben, wobei die durchgezogene Linie dem gewichteten Mittelwert der Beleuchtungen entspricht. Zusätzlich ist eine Verschiebung der Wellenlängen zwischen der ersten und den nachfolgenden beiden Messungen zu erkennen. In Kapitel 6.3 wird näher auf dieses Problem eingegangen.

6.2.2 Analyse des ${}^2P_{3/2} - {}^2P_{1/2}$ Übergangs

Die Untersuchung dieses Energie-Übergangs erfolgt bei zwei verschiedenen Einstellungen, welche in Tabelle 6.9 dargestellt sind. Es werden zwischen diesen beiden Messungen, die Fallen Tiefe und die Spaltbreite verändert. Es handelt sich hier um einen magnetischen Dipolübergang (M1) von In-ähnliches bzw. 10-fach geladenem Praseodym (Pr^{10+}). Analog zu der Messung bei Sn-ähnliches Praseodym (Pr^{9+}) findet ein Level crossing statt, wodurch hier [Pd] als geschlossen angenommen werden kann. Es ergibt sich somit $[\text{Pd}]5s^25p^1$, wobei die Feinstruktur sich aus den Übergang der P-Schale ergibt. Wie in Abbildung 6.8 dargestellt, ergeben sich aus dieser Feinstruktur, bei Anschalten des Magnetfeldes sechs verschiedene Übergänge mit ihren jeweiligen Wellenlänge und Polarisation.

Tabelle 6.9: Einstellungen der durchgeführten Messungen des In-ähnlichen Praseodym (Pr^{10+}) Übergangs. Die dargestellten Elektronenstrahlenergien werden ohne Beachtung der Raumladung angegeben.

Parameter	Einstellungen	
	Messung 1	Messung 2
DT 4/9/5 (V)	10/10/10	10/30/10
All Dts (V)	35	15
Kathodenspannung (eV)	-120	-120
Elektronenstrahl Energie (eV)	165	165
Elektronenstrahl Strom (mA)	6.3	5.5
Magnetfeld (T)	6.29	8
Spalt(μm)	50	30
Beleuchtungszeit (s)	1800	1800
Injektionsdruck ($\text{mbar}\cdot 10^{-8}$)	5.96	4.16
Anzahl der Messungen	22	93
Wellenlängenbereich (nm)	245-265	245-265

Zeeman-Aufspaltung

Die Zeeman-Aufspaltung hängt wie in Kapitel 2.6 beschrieben, bei konstantem Magnetfeld, von der magnetischen Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses m_J und von dem Landé-Faktor ab. Der Landé-Faktor, ist wie in Tabelle 6.10 ersichtlich unterschiedlich für beide Energieniveaus. Zudem werden in dieser Tabelle die nicht relativistischen und relativistischen Landé-Faktoren dargestellt. Die Berechnung des nicht relativistischen Terms beruht wiederum auf der Gleichung (2.15) in Ka-

Tabelle 6.10: Darstellung der nicht relativistischen und relativistischen Landé-Faktoren der beiden Energieniveaus des ${}^2P_{\frac{3}{2}} - {}^2P_{\frac{1}{2}}$ Übergangs von Sn-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}).

Energieniveau	Landé	Safronova et al.
${}^2P_{\frac{3}{2}}$	1.33333	1.33280
${}^2P_{\frac{1}{2}}$	0.66667	0.66602

pitel 2.6. Der Wert des relativistischen Terms beruht auf einer Berechnung von Safronova et al. [35]. Es wird hierbei ersichtlich, dass diese Terme sich nicht signifikant unterscheiden.

Aus den Auswahlregeln ergeben sich drei verschiedenen Möglichkeiten für Δm_J : 0, 1 und -1. Durch die unterschiedlichen g_j der beiden Feinstruktur Niveaus können pro Δm_J zwei energetisch unterschiedliche Übergänge stattfinden. Es kommen somit drei verschiedene Polarisierungen mit jeweils zwei energetisch unterschiedliche Übergänge zustande. Bei der ersten Messung ist jedoch nur einen Peak zu erkennen, der keine Struktur ersichtlich macht (siehe Abbildung 6.9). Zur Verbesserung der Auflösung wurde somit die Falltiefe um 20 eV erniedrigt, das Magnetfeld erhöht und zudem die Spaltbreite verringert. Durch dieses Verfahren wird die Intensität drastisch verringert. Dahingegen werden nun innere Strukturen ersichtlich, wie in Abbildung 6.9 dargestellt. Analog zum ersten Teil der Auswertung wird die innere Struktur zur Identifizierung benötigt. Es handelt sich hier um den anomalen Zeeman-Effekt mit dem Gesamtspin $S = \frac{1}{2}$, wobei die Differenzen der auf einander folgenden Energien äquidistant sind. Es wird wiederum mit dem Python Skript [39] ein Bild erzeugt (Abbildung 6.7), welches die Intensitäten und Positionen der jeweiligen Zeeman-Komponenten zeigt. Zudem ist zwischen der angepassten grünen Funktion und den Datenpunkten eine Übereinstimmung zu erkennen. Dies ist somit ein guter Indiz für die richtige Zuordnung der Linie. Die beiden blauen Komponenten korrespondieren zu dem Übergang von $m_J = -\frac{3}{2}$ zu $m'_J = -\frac{1}{2}$ und von $m_J = -\frac{1}{2}$ zu $m'_J = \frac{1}{2}$. Sie werden $\Delta m_J = -1$ zugeordnet und entsprechen eine π -Polarisation. Zur Unterscheidung wird die Notation $\pi_{3/2}^-$ bzw. $\pi_{1/2}^-$ gewählt. Die beiden schwarzen Komponenten (in Abbildung 6.8 grün) werden $\Delta m_J = 0$ zugeordnet und entsprechen einen Übergang von $m_J = \mp\frac{1}{2}$ zu $m'_J = \mp\frac{1}{2}$. Es handelt sich um eine σ -Polarisation, wobei unterschieden wird zwischen σ^+ und der energetisch geringere σ^- . Die mit rot gekennzeichneten Komponenten korrespondieren zu den Übergängen von $m_J = \frac{1}{2}$ zu $m'_J = -\frac{1}{2}$ und $m_J = \frac{3}{2}$ zu $m'_J = \frac{1}{2}$, welche eine Differenz von $\Delta m_J = 1$ besitzen und als $\pi_{1/2}^+$ bzw. $\pi_{3/2}^+$ bezeichnet werden.

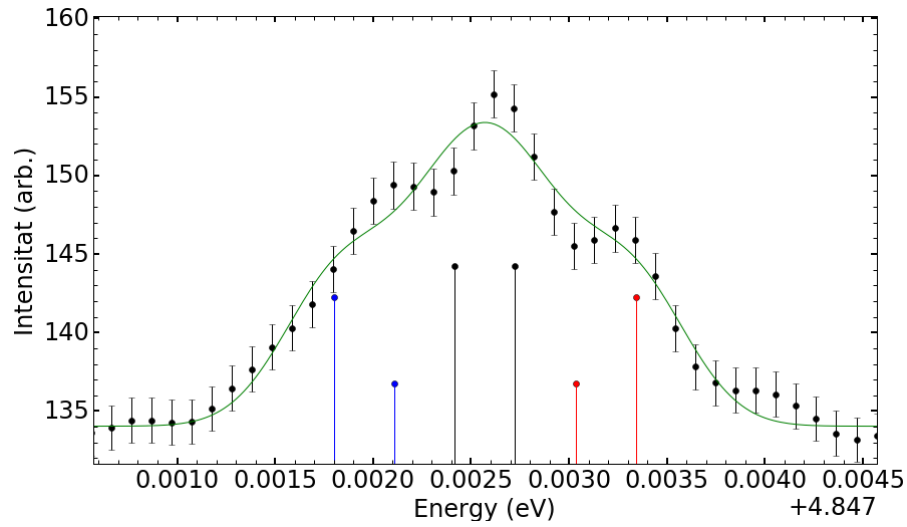


Abbildung 6.7: Abbildung der Datenpunkte, von In-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}) mit deren zugehörigen Fehler in schwarz. Zudem eine Darstellung der Zeeman-Komponenten, jeweils farblich verschieden für die verschiedenen Polarisierungen. In grün wird die an den Daten angepasste Funktion visualisiert.

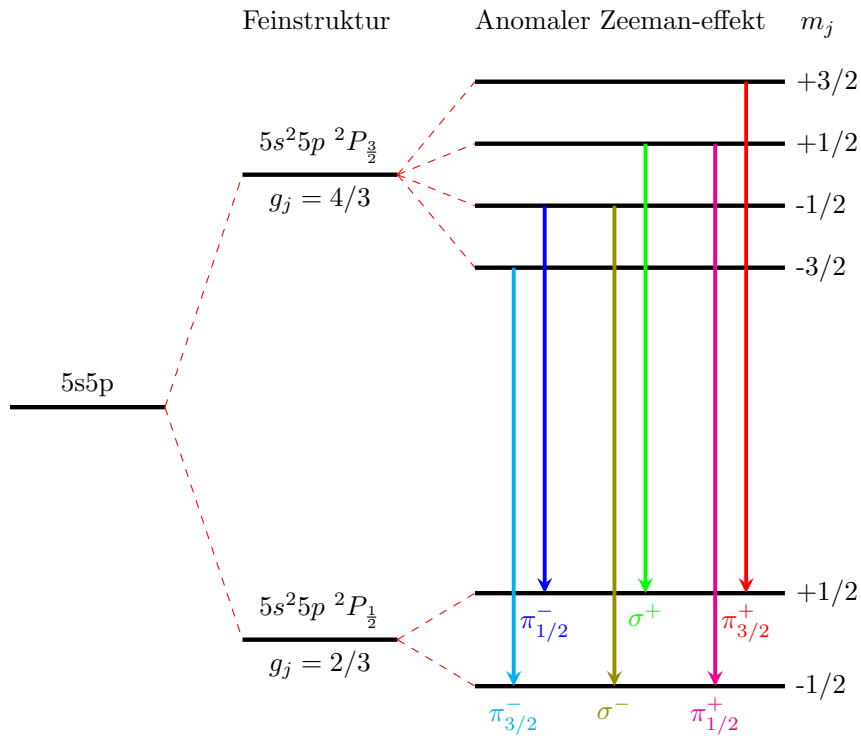


Abbildung 6.8: Schematische Darstellung der Feinstruktur und der Zeeman-Aufspaltung. Zudem werden die möglichen Übergänge und ihre Polarisation farblich gekennzeichnet.

Struktur der Peaks

Die signifikantesten Unterschiede der beiden Messungen sind die Spaltgröße, das Magnetfeld und die Falltiefe, welche wie schon angesprochen zu einer höheren Auflösung und niedrigeren Intensität führen. Wie in Tabelle 6.11 zu erkennen ist, liegt eine signifikante Intensitätsverringering vor. Daringegen verbreitert sich die FWHM, was normalerweise nicht zu erwarten wäre. Dies liegt an der Erhöhung des Magnetfeldes, wodurch sich die Zeeman-Komponenten energetisch verschieben und trotz verbesserter Auflösung, die gesamte Breite erhöht wird. Trotz dieser angewandten Methoden um die Auflösung zu verbessern, sind wie in Abbildung 6.7 zu erkennen nicht alle vermuteten Peaks sichtbar. Die Geräteauflösung wird bei einem Spalt von $30\ \mu\text{m}$ bei 3 Pixel erwartet (siehe Kap.5.1), welches eine Wellenlänge von $0.0286\ \text{nm}$ entspricht. Bei einem Magnetfeld von 8 Tesla ist die Differenz der aufeinander folgenden Komponenten $0.0249\ \text{nm}$ welches somit unter der Auflösungsgrenze liegt. Es ist dadurch mit diesen Methoden nicht möglich alle Peaks aufzulösen. Eine Verbesserung könnte durch ein anderes Spektrometer bzw. ein höher auflösendes Gitter und CCD-Kamera erreicht werden und durch Erhöhung des Magnetfeldes, was bei diesem Aufbau auch nicht möglich ist. Mit einem zusätzlichen Polarisator können die Peaks einzelner Polarisierungen bestimmt werden, wodurch die Überlappungseffekte verschiedener Polarisierungen entfallen und somit effektiv eine genauere Bestimmung vorliegen könnte.

Tabelle 6.11: Struktur der Peaks

Messung	FWHM(pm)	Intensität (arb.)
1	66.8(3)	738.8(27)
2	81.7(23)	18.6(4)

Vergleich der Wellenlängen

Zuletzt werden wiederum die bestimmten Wellenlängen bzw. Energien des Feinstrukturübergangs beider Messungen miteinander und den Theorien verglichen. Zur Bestimmung dieser Werte wird pro Messung ein gewichteter Mittelwert aus alle Beleuchtungen gebildet, wie in Abbildung 6.10 verdeutlicht. Zudem wird die gewichtete statistische Unsicherheit als ein farbiger Bereich dargestellt. Diese Gewichteten Werte werden mit den Theorien in Tabelle 6.12 dargestellt. Es ist eine Differenz von gerundet $2 \cdot 10^{-3}\ \text{nm}$ zwischen den beiden Messungen zu erkennen. Dies ist signifikant größer als die angegebenen Fehler der Messungen. Zwischen den beiden Messungen werden wiederum systematische Fehler vermutet, welche

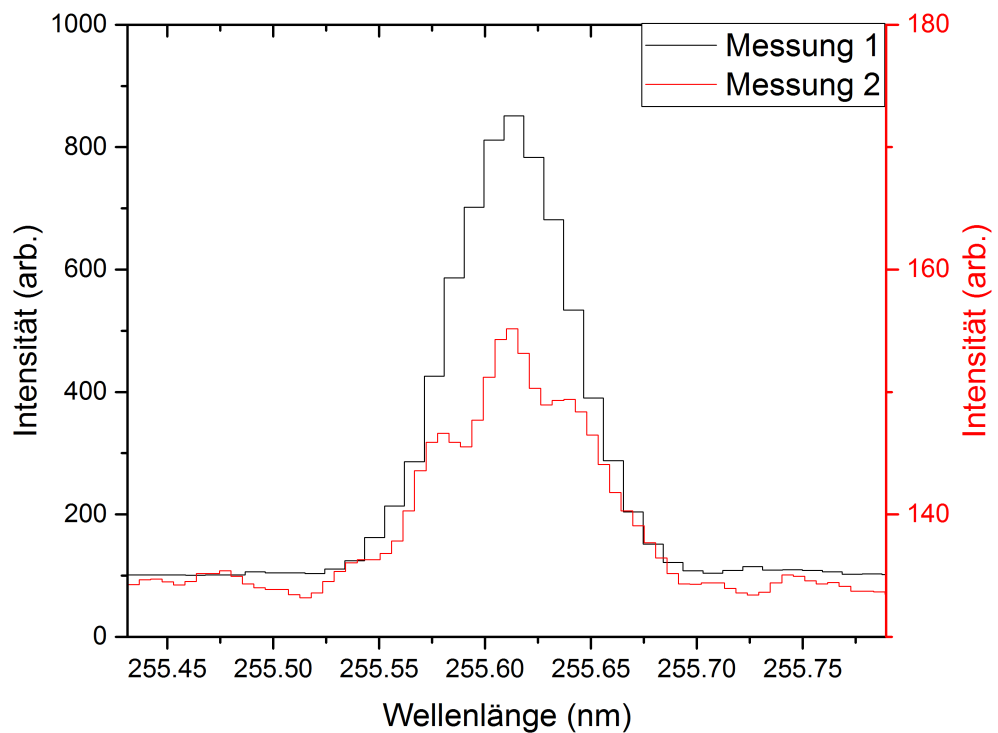


Abbildung 6.9: Messung 1 wird in schwarz dargestellt. Hierbei wurde ein Magnetfeld von 6,29 Tesla und eine Spaltbreite von $50\ \mu\text{m}$ eingestellt. Messung 2 wird in rot dargestellt, wobei ein Magnetfeld von 8 Tesla und eine Spaltbreite von $30\ \mu\text{m}$ eingestellt wurde. Zudem wurde die Falltiefe um 20 eV erniedrigt.

Tabelle 6.12: Darstellung der theoretischen und experimentellen Werten des ${}^2P_{\frac{3}{2}} - {}^2P_{\frac{1}{2}}$ Übergangs. Hierbei entspricht stat. der statistischen Unsicherheit, welche sich aus der Fehlerfortpflanzung, der Unsicherheit der gewichteten Mittelungen und des Kalibrationsverfahrens (1σ -Konfidenzband) ergibt. Zudem werden die Differenzen zwischen den experimentellen und theoretischen Werten der beiden Methoden dargestellt.

Messung	stat.	FAC	Methode		Diff(%)		
			CI+all	SDpT	CI+all	SDpT	
Wellenlänge(nm)							
1	255.6129	$6 \cdot 10^{-4}$	249.97	255.5(3)	255.9(3)	-0.04	0.1
2	255.6146	$6 \cdot 10^{-4}$					
Energie(eV)							
1	4.850467	$11 \cdot 10^{-6}$	4.9600	4.853(5)	4.846(5)	-0.04	0.1
2	4.850435	$11 \cdot 10^{-6}$					

zu dieser Verschiebung geführt haben (siehe Kapitel 6.3). Die theoretische Berechnung von FAC weicht signifikant von dem experimentellen Wert ab und wird wiederum nur zur groben Orientierung genutzt. Zur Berechnung dieses Übergangs können beide Methoden von Safronova et al. zunutze genommen werden. Hierbei wird für die SDpT-Methode angenommen, dass es sich bei dem In-ähnlichen Praseodym (Pr^{10+}) um ein System mit nur einem Valenzelektron handelt. Die $5s^2$ Konfiguration ist somit zusätzlich geschlossen und ergibt ein System von $[\text{Cd}]5p^1$. Die CI+all-Methode nimmt darin gegen alle Valenzelektronen in Betracht [15]. Beide experimentellen Werte liegen innerhalb des Fehlerbereichs der Theorie. Die Differenzen zwischen den Theorien und des Experiments liegen bei 0.1 % für die SDpT-Methode und bei -0.04 % für die CI+all-Methode. Insgesamt gibt somit die CI+all-Methode eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment her.

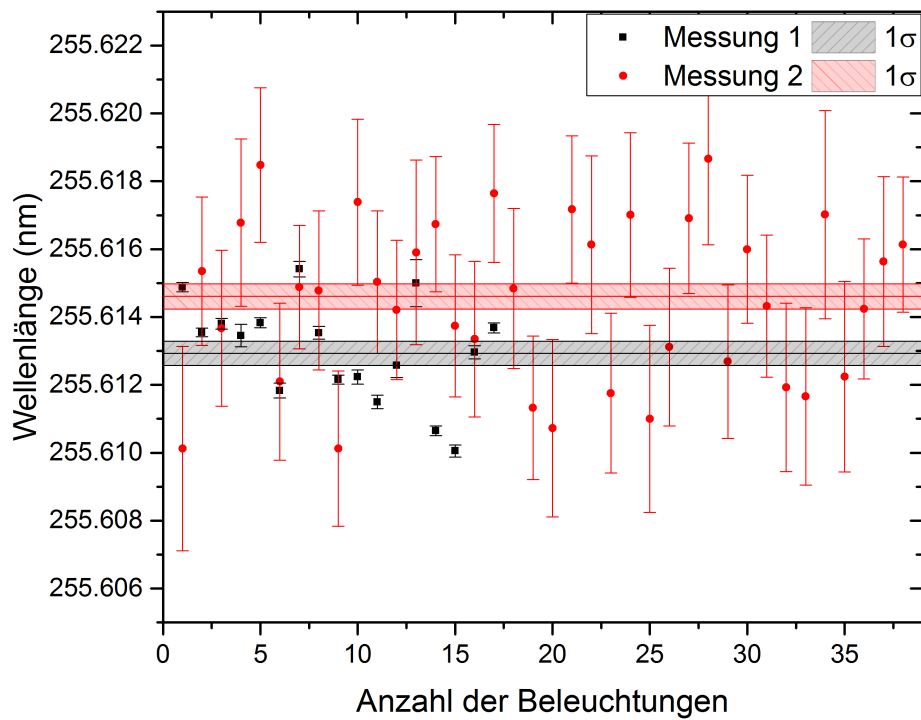


Abbildung 6.10: Darstellung der Wellenlängen der durchgeführten Messungen von In-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}) mit ihren zugehörigen Fitfehler. Der 1σ -Bereich wird farblich angegeben, wobei die durchgezogene Linie den gewichteten Mittelwert der Beleuchtungen entspricht. Zusätzlich ist eine Verschiebung der Wellenlängen zwischen den beiden Messungen zu erkennen. In Kapitel 6.3 wird nochmals näher auf dieses Problem eingegangen.

6.3 Systematische Korrekturen

Wie erwähnt entsteht zwischen den in Kapitel 6.2.1 und 6.2.2 durchgeführten Messungen eine Veränderung der Wellenlänge bzw. der Energie, welche auf systematische Faktoren zurück zu führen sind. Eine der vorgenommenen Änderungen zwischen den Messungen ist die Höhe des Magnetfeldes. Dies sollte bei einer Magnetfeldänderung von 2 Tesla zu keiner signifikanten Veränderung des Feinstrukturübergangs führen und wird aus der Fehlersuche ausgeschlossen. Zudem werden mehrere Python Programme zunutze genommen, wobei es somit nicht deutlich ist inwiefern dies auf die Änderungen der Messungen eine Rolle spielen könnten. Durch den Vergleich mit anderen Programmen und die Übereinstimmung ihrer Ergebnisse wurde dies auch zur weiteren Untersuchung ausgeschlossen. Zudem werden Spiegel und der Fokus verstellt. Diese beiden sind dafür verantwortlich wie die Photonen in das Spektrometer eintreffen. Sie sind somit für Asymmetrie des Systems und die Breite der Linien zuständig. Dieser Effekt kann durch Reduzieren des Eintrittspalts verringert werden, indem mehr schräg eintreffende Lichtstrahlen ausgeblendet werden. Diese Faktoren sind somit zuständig für eine Asymmetrie der Systems. Diese Asymmetrie könnte zu einer Verschiebung der Wellenlänge führen. Dies erfolgt durch die Empfindlichkeit auf das Kalibrationsspektrum und die erwartete Unempfindlichkeit auf den Lichtstrahl der Ionen Wolke. Beim durchführen des Kalibrationsprozesses werden die Peaks als symmetrisch und gaußförmig angenommen. In der Realität liegt ein Asymmetrischer Gauß vor. Vergleicht man nun die Peaks welche mit einem Symmetrischen Gauß gefittet wurden mit denen die mit einem Asymmetrischen Gauß gefittet wurden, erkennt man Verschiebungen die von -0.006 nm bis 0.006 nm reichen kann. Zudem erkennt man eine Änderung der Asymmetrie zwischen jeder Beleuchtung. Zusätzlich hängt die Asymmetrie von der betrachteten Position auf der Dispersiven Achse ab, wobei hierbei meist annähernd eine lineare Tendenz zu erkennen ist. Den Zusammenhang dieser Faktoren ist durch die hohen Anzahl der Freiheitsgrade nicht ohne weiteres bestimmbar. Bei der Erforschung des Verschiebungsfaktors wurden keine eindeutigen Ergebnisse erzielt um dies genau bestimmen zu können. Wie in der Abbildung 6.9 und der Tabelle 6.3 zu erkennen ist, ist auch eine Asymmetrie in den Beleuchtungen der Ionenwolke zu erkennen, obwohl dies nicht erwartet wurde. Das ist somit nicht mehr nur auf die Einstellung der Spiegel und Linseneinstellungen zurück zu führen. Zwischen den ersten Messungen der beiden ausführlich analysierten Feinstruktur-Übergängen und den nachfolgenden Messungen, ergab sich eine Lockerung des beweglichen Reflektors (siehe Abb. 4.1), welcher somit provisorisch neu befestigt wurde. Trotz dieser neuen Befestigung wird vermutet, dass durch Änderung seiner Einstellung, dieser Faktor verantwortlich ist für einen Großteil der Asymmetrie und die daraus folgende Verschiebung der gemessenen Wellenlängen.

7 Zusammenfassung und Schlussfolgerung

„We live on an island surrounded by a sea of ignorance. As our island of knowledge grows, so does the shore of our ignorance.“
– John Archibald Wheeler (1911 - 2008)

Das Ziel der Arbeit war mit einer Elektronenstrahl Ionenfalle eine Untersuchung an einem unerforschten Gebiet der hochgeladenen Ionen von Praseodym durch zu führen, welches sich an einem levelcrossing befindet und somit optisch untersucht werden konnte. Die in dem Paper von Safronova et al. [15,16] beschriebenen Übergängen waren dabei von besonderem Interesse und wurden ausführlich analysiert.

Zu Beginn dieser Arbeit wurde in dem Bereich von 190 nm bis 579 nm Messungen durchgeführt um einen Überblick über die Zustände von hochgeladenen Ionen von Praseodym zu erhalten. Hierbei wurden Zustände von Sn-ähnlichem (Pr^{9+}) bis Pd-ähnlichem Praseodym (Pr^{13+}) erkannt und durch verschaffen eines Überblicks mit FAC, identifiziert. Diese Identifikationen tragen somit zur Vergrößerung von dem „Land des Wissens“ bei. Wie auch in dem Zitat von John Archibald Wheeler beschrieben wird, ist das Land umgeben von einem Meer aus Unwissenheit und trotz der Untersuchungen und der Vergrößerung von dem Land des Wissens, werden immer mehr Fragen aufgeworfen und Übergänge eines Ladungszustandes gefunden, die eine Untersuchung erfordern. Während das Wissen sich somit vergrößert, vergrößert sich auch die Unwissenheit.

Nachfolgend wurde der ${}^3P_1 - {}^3P_0$ Übergang von Sn-ähnliche Praseodym (Pr^{9+}) untersucht. Hierbei wurde zum ersten mal die Zeeman-Struktur dieses M1 Übergangs

Tabelle 7.1: Darstellung der Ergebnisse des ${}^3P_1 - {}^3P_0$ Übergangs.

Messung	Experiment (nm)	CI+all (nm)	Diff (%)
1	350.1282(7)	351.2(5)	0.3
2	350.1311(6)		0.3
3	350.1311(7)		0.3

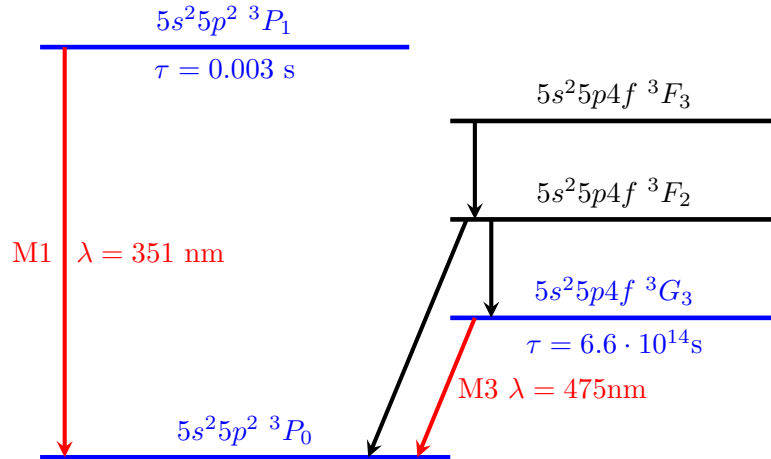


Abbildung 7.1: Energieniveaus und Lebensdauer von energetisch niedrig gelegenen Niveaus von Sn-ähnliches Praseodym (Pr^{9+}). Die im Rahmen dieser Arbeit interessanten Energieniveaus werden in blau und ihre zugehörigen Übergänge in rot dargestellt.

aufgelöst und untersucht. Zudem wurde die Wellenlänge des Feinstrukturübergangs bestimmt, welche mit der theoretischen Berechnung von Safronova et al. verglichen wurde. Die Ergebnisse werden zur Verdeutlichung in Tabelle 7.1 zusammengefasst. Die verwendete (CI+all) Berechnungsmethode wurde zur Berechnung dieses Übergangs zum ersten mal für Systeme mit 4 Valenzelektronen verwendet. Obwohl der experimentelle Wert nicht im Fehlerbereich der Theorie liegt, kann durch ihre geringfügige Differenz, welche 0.3 % entspricht, geschlossen werden, dass die Berechnungen ein vertrauensvolles Ergebnis erzielen.

Neben den in dieser Arbeit untersuchten Übergängen wurde von Sn-ähnlichem Praseodym (Pr^{9+}) zusätzlich ein metastabiler M3-Übergang mit optischer Wellenlänge und einer Lebensdauer von 21 000 000 Jahren zur Untersuchung vorgeschlagen. Diese werden zur Verdeutlichung in Abbildung 7.1 dargestellt. Hierbei werden die Lebensdauer, Wellenlänge, Konfiguration und die Art des Übergangs angegeben. Das Energieniveau $5s^25p4f \ ^3G_3$ besitzt nur einen Zerfallskanal zum Grundzustand mit extremer Langlebigkeit und wird von Safronova et al. auf Grund dieser Eigenschaften als Quelle für einen Quantenspeicher vorgeschlagen [16]. Durch das vertrauensvolle Ergebnis zwischen Experiment und Theorie wird somit eine weitere Untersuchung zur Bestimmung des $5s^25p4f \ ^3G_3$ -Niveaus empfohlen.

Zum Schluss wurde der $^2P_{\frac{3}{2}} - ^2P_{\frac{3}{2}}$ Übergang von In-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}) untersucht und die Wellenlänge bestimmt. Dieses Ergebnis wurde mit den beiden Berechnungsmethoden verglichen und zur Verdeutlichung in Tabelle 7.2 zusammengefasst. Sowohl die CI+all- als auch die SDpT-Methode beinhalten die

Tabelle 7.2: Darstellung der Ergebnissen des ${}^2P_{\frac{3}{2}} - {}^2P_{\frac{1}{2}}$ Übergangs.

Messung	Experiment (nm)	Methode (nm)		Diff(%)	
		CI+all	SDpT	CI+all	SDpT
1	255.6129(6)	255.5(3)	255.9(3)	-0.04	0.1
2	255.6146(6)				

experimentellen Werte in ihrem Fehlerbereich. Die SDpT-Methode betrachtet angenähert ein monovalentes System, wobei die 5s-Schale in die geschlossene Schale inkludiert wurde. Es wurde hierbei erkannt, dass die CI+all-Methode welche alle drei Valenzelektronen betrachtet, besser mit dem Experiment übereinstimmt.

Neben der im Experiment durchgeführten Messung an In-ähnlichem Praseodym (Pr^{10+}), wurde ein Übergang welcher sich als Atomuhrübergang eignen könnte vorgeschlagen. Zur Verdeutlichung werden die Übergänge mit deren Übergangsraten, Wellenlängen und ihren zugehörigen Energieniveaus in Abbildung 7.2 dargestellt. Hochgeladene Ionen sind durch die erhöhte Bindung der Elektronen an dem Kern weniger empfindlich für äußere Einwirkungen, welches wie schon erwähnt zu einer Verbesserung einer Atomuhr führen könnte. Der vorgeschlagene Übergang von $5s^24f^2F_{\frac{5}{2}}$ zu $5s^25p^2P_{\frac{1}{2}}$ liegt in dem energetisch niedrigen Bereich von In-ähnliches Pr^{10+} . Die Berechnungsmethode welche für diesen Übergang benutzt wurde ist die CI+all-Methode. Obwohl es sich hierbei um einen Inter-Konfigurations-Übergang handelt, welches schwieriger zu bestimmen ist als dem im Experiment betrachteten Intra-Konfigurations-Übergang, wird eine hohe Genauigkeit zwischen Experiment und Theorie erwartet. Die Untersuchung dieses Übergangs wird somit sehr empfohlen.

Die experimentellen Werte dieser Arbeit können in den Lücken, der von Safrova et al. gesuchten experimentellen Werten eingeordnet werden, welche somit eine Hilfe zur Optimierung der Theorien ist. Zusätzlich werden in dieser Arbeit zwei Energieübergänge zur weiteren Untersuchung empfohlen, welche zum einen in dem Gebiet der Quantenspeicher hilfreich sein könnten und zum anderen eine neue Ära von optischen Atomuhren einläuten könnte.

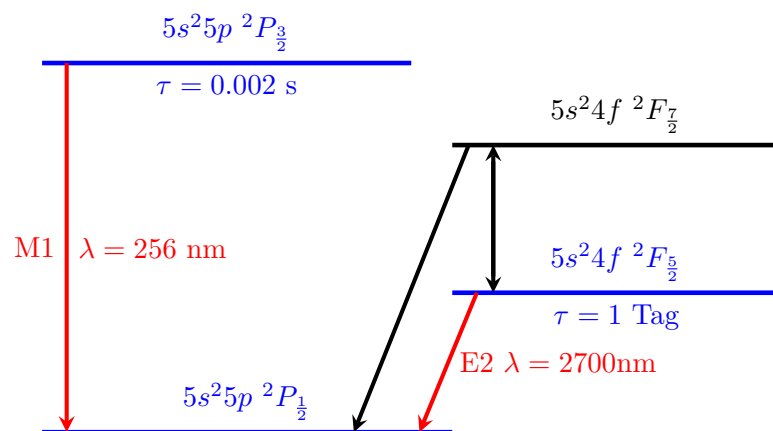


Abbildung 7.2: Energieniveaus und Lebensdauer von energetisch niedrig gelegenen Niveaus von In-ähnliches Preaseodym (Pr^{10+}). Die im Rahmen dieser Arbeit interessanten Energieniveaus werden in blau und ihre zugehörigen Übergänge in rot dargestellt.

8 Anhang

8.1 Skript zur Berechnung der Energien mittels FAC

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"calculation of the energy levels. and radiative transition rates "
from pfac import fac
fac.SetAtom('Pr')
# 1s shell is closed fac.Closed('1s', '2s', '2p', '3s', '3p', '3d', '4s', '4p', '4d')
fac.Config('5s2 5p1', group = 'n2')
# instead of a keyword, the group name can also
# be given as the first argument.
fac.Config('n3', '5s2 4f1')
fac.Config('n4', '5s1 5p1 4f1')
# Self-consistent iteration for optimized central potential
fac.ConfigEnergy(0)
# the configurations passed to OptimizeRadial should always
# be one or two of the lowest lying ones. and it is often best to
# just use the ground configurations. If you need more highly
# excited levels, such as n=4, 5, 6, ..., do not put them
# in the OptimizeRadial.
fac.OptimizeRadial(['n2'])
fac.ConfigEnergy(1)

    print 'starting hard work'
fac.Structure('Pr10.lev.b', ['n2', 'n3', 'n4'])
print 'finished hard work'
fac.MemENTable('Pr10.lev.b')
fac.PrintTable('Pr10.lev.b', 'Pr10.lev', 1)
fac.TransitionTable('Pr10.tr.b', ['n2'], ['n2'])
fac.TransitionTable('Pr10.tr.b', ['n2'], ['n3'])
fac.TransitionTable('Pr10.tr.b', ['n3'], ['n3'])
fac.TransitionTable('Pr10.tr.b', ['n3'], ['n4'])
fac.TransitionTable('Pr10.tr.b', ['n4'], ['n4'])
fac.PrintTable('Pr10.tr.b', 'Pr10.tr', 1)
```

8.2 Tabelle der Anregungsenergien von Praseodym

Tabelle 8.1: Darstellung der Ionisationsenergie, isoelektronische Reihenfolge und Ionen Ladung von Praseodym [1].

Sp. Name.	Ion Charge	Isoel. Seq.	Ionization Energy (eV)
Pr I	0	Pr	5.470
Pr II	1	Ce	10.55(7)
Pr III	2	La	21.6237(25)
Pr IV	3	Ba	38.981(25)
Pr V	4	Cs	57.53(5)
Pr VI	5	Xe	82(4)
Pr VII	6	I	97(5)
Pr VIII	7	Te	112(6)
Pr IX	8	Sb	131(7)
Pr X	9	Sn	148(7)
Pr XI	10	In	162.0(24)
Pr XII	11	Cd	196.0(25)
Pr XIII	12	Ag	217.02(12)
Pr XIV	13	Pd	350.0(30)
Pr XV	14	Rh	378.0(30)
Pr XVI	15	Ru	412.0(30)
Pr XVII	16	Tc	445.0(30)
Pr XVIII	17	Mo	478.0(30)
Pr XIX	18	Nb	516.0(30)
Pr XX	19	Zr	554(4)
Pr XXI	20	Y	590(4)

Literaturverzeichnis

- [1] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and and NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.3), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2016, November 10]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD., 2015.
- [2] O. Stern, W. Gerlach: Der experimentelle Nachweis des magnetischen Momentes des Silberatoms. Zeitschrift für Physik 8, 110 (1922) und 9, 349 (1922)
- [3] Gu, Ming F.: The Flexible Atomic Code. In: Canadian Journal of Physics
- [4] J. Franck und G. Hertz: Über Zusammenstöße zwischen Elektronen und Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung desselben. In: Physikalische Blätter, Volume 23, Issue 7, Juli 1967 S. 294–301.
- [5] CODATA Recommended Values. National Institute of Standards and Technology, abgerufen am 15. November 2016. Wert für α .
- [6] Gerhard, Christoph: Tutorium Optik : ein verständlicher Überblick für Physiker, Ingenieure und Techniker / Christoph Gerhard. - Berlin ; Heidelberg: Springer Spektrum, [2016]. - xxi, 273 Seiten : Illustrationen, Diagramme DOI: 10.1007/978-3-662-48575-0 Themen: Optik
- [7] CODATA Recommended Values. National Institute of Standards and Technology, abgerufen am 10. November 2016. Wert für h in der Einheit eVs.
- [8] CODATA Recommended Values. National Institute of Standards and Technology, abgerufen am 10. November 2016. Wert für c in der Einheit m/s.
- [9] CODATA Recommended Values. National Institute of Standards and Technology, abgerufen am 10. November 2016. Wert für μ_B in der Einheit eV/T.

- [10] Horiba Scientific, “Blazed Holographic Plane Gratings.” <http://www.horiba.com/us/en/scientific/products/diffraction-gratings/for-industrial-applications/blazed-holographic-plane-gratings/grating-list/>. [abgerufen am 23. November 2016].
- [11] Horiba Scientific, “Blazed Holographic Plane Gratings.” <http://www.horiba.com/us/en/scientific/products/diffraction-gratings/catalog/blazed-holographic-plane-gratings/> [abgerufen am 23. November 2016].
- [12] Safronova, M. S. & Johnson, W. R. All-order methods for relativistic atomic structure calculations. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* 55, 191–233 (2008)
- [13] M. G. Kozlov, Precision calculations of atoms with few valence electrons. *Int. J. Quantum Chem.* 100, 336–342 (2004). doi:10.1002/qua.20127
- [14] M.S. Safronova, M. G. Kozlov, W. R. Johnson and Dansha Jiang, “Development of a configuration-interaction plus all-order method for atomic calculations”, *Phys. Rev. A* 80, 012516 (2009).
- [15] M. S. Safronova, V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, U. I. Safronova, S. G. Porsev and M. G. Kozlov, ”Highly charged Ag-like and In-like ions for the development of atomic clocks and the search for α variation”, *Phys. Rev. A* 90, 042513 (2014)
- [16] M. S. Safronova, V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, U. I. Safronova, S. G. Porsev and M. G. Kozlov, ”Highly Charged Ions for Atomic Clocks, Quantum Information, and Search for α variation”, *Phys.Rev.Lett.* 113 (2014) no.3, 030801
- [17] Tipler, Paul A. ; Mosca, Gene ; Pelte, Dieter: *Physik für Wissenschaftler und Ingenieure*. Heidelberg : Spektrum Akademischer Verlag, 2009
- [18] Meschede, Dieter: *Gerthsen Physik*. Bonn : Springer-Verlag, 2010
- [19] Demtröder, Wolfgang: *Experimentalphysik 3*. Kaiserslautern: Springer-Verlag, 2009
- [20] Wikipedia: Lamb-Verschiebung - Wikipedia, Die freie Enzyklopädie. <https://de.wikipedia.org/wiki/Lamb-Verschiebung>. Version: 2016. – [Online; Stand 4. November 2016]

- [21] Soria Orts, Rosario: Isotopic effect in B-like and Be-like argon ions, Johann Wolfgang Goethe - Universität, Frankfurt am Main, Diss., 2005
- [22] Mäckel, Volkhard: Laserspektroskopie hochgeladener Ionen an der Heidelberger Elektronenstrahl-Ionenfalle, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diss., 2010
- [23] Wikipedia: Auswahlregel - Wikipedia, Die freie Enzyklopädie. <https://de.wikipedia.org/wiki/Auswahlregel>. Version: 2016. – [Online; Stand 10. November 2016]
- [24] Branson, Jim
http://quantummechanics.ucsd.edu/ph130a/130_notes/130_notes.html.
Version: 2013. – [Online; Stand 25. Oktober 2016]
- [25] Fitzpatrick, Richard: Quantum Mechanics, University of Texas, Austin. <https://farside.ph.utexas.edu/teaching/qm/Quantum/Quantumhtml.html>
Version: 2016. – [Online; Stand 30. November 2016]
- [26] Bekker, Hendrik: Optical and EUV spectroscopy of highly charged ions near the $4f-5s$ levelcrossing, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diss., 2016
- [27] Corney, Alan: Atomic and Laser Spectroscopy. Oxford: Clarendon Press, 2006
- [28] Eric R. Scerri, How Good Is the Quantum Mechanical Explanation of the Periodic System? J. Chem. Educ., 1998, 75 (11), p 1384 (1998). doi: 10.1021/ed075p1384
- [29] Klawitter, Renee: Resonant laser spectroscopy of a visible magnetic dipole transition in Ar^{13+} , Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Diplom, 2009
- [30] Instruments, Princeton: Pixis System, 2014
- [31] Windberger, Alexander: Identification of optical transitions in complex highly charged ions for applications in metrology and tests of fundamental constants, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, Diss., 2015

- [32] Wikipedia: Landé-Faktor - Wikipedia, Die freie Enzyklopädie. <https://de.wikipedia.org/wiki/Landé-Faktor>. Version: 2016. – [Online; Stand 10. Dezember 2016]
- [33] Pohl, Robert W.: Optik und Atomphysik. Heidelberg: Springer-Verlag, 1976
- [34] A. Thorne, U. Litzén, S. Johansson: Spectrophysics - Principles and Applications: Springer Science and Business Media, 1999
- [35] persönliche Übergabe von M.S. Safronova (Juli 2016)
- [36] A. Windberger, F. Torretti, A. Borschevsky, A. Ryabtsev, S. Dobrodey, H. Bekker, E. Eliav, U. Kaldor, W. Ubachs, R. Hoekstra, J. R. Crespo Lopez-Urrutia, O. O. Versolato, Analysis of the fine structure of $Sn^{11+} \dots^{14+}$ ions by optical spectroscopy in an electron beam ion trap, 10.1103/PhysRevA.94.012506, July 2016
- [37] Wojtek Pych. A fast algorithm for cosmic-ray removal from single images. Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 116(816):148, 2004.
- [38] J.R. de Laeter, J.K. Böhlke, P. De Bièvre, H. Hidaka, H.S. Peiser, K.J.R. Rosman, and P.D.P. Taylor. Atomic weights of the elements, Pure Appl. Chem. 75, 683-800 (2000)
- [39] persönliche Übergabe von Hendrik Bekker (Juni 2016)
- [40] L. Schmöger et al., Coulomb crystallization of highly charged ions, Science 347 (6227), 1233-1236 (2015)
- [41] B. J. Bloom et al., An optical lattice clock with accuracy and stability at the 10^{-18} level, Nature 506, 71–75 (2014)

9 Danksagung

Ich möchte mich hierbei, bei José Crespo López-Urrutia bedanken, dass er diese Bachelorarbeit möglich gemacht hat und alle Ressourcen bereitgestellt hat, die dafür benötigt wurden. Zudem möchte ich mich bei Hendrik Bekker bedanken, der immer wieder für Fragen offen war und stets bemüht war gemeinsam mit mir die Daten zu betrachten und jegliche Fehlerquellen zu begleichen. Zusätzlich möchte ich mich bei ihm bedanken, dass er seine Python Analyseprogrammen bereit gestellt hat.

Ich möchte mich bei Julian Stark, David Wachs und Timo Wunderlich bedanken, dass sie mir bei einer sprachlichen Optimierung geholfen haben.

Ich möchte mich bei Sven Bernitt bedanken, dass sein out-of-the-box Denken und seine zugehörigen Lebensweisheiten mir immer ins Gedächtnis bleiben.

Ich möchte mich bei Zachary Hockenbery, Janko Nauta, Michael Blessenohl, Stepan Dobrodey, Steffen Kühn und Chintan Shah über jegliche lustige Gespräche bedanken.

Ich möchte mich bei Thomas Pfeiffer bedanken, da seine positive Sicht auf das Leben mich stets Motiviert hat.

Zudem möchte ich mich bei Peter Micke bedanken, dass durch seine unglaubliche Präzision seiner Handhabung, ich auch dazu motiviert wurde alles zu hinterfragen.

Ich möchte mich insgesamt bei allen Leuten das MPI-K bedanken für die tollen Momente und die allgemein herrschende angenehme Arbeitsatmosphäre.

Zuletzt möchte ich mich bei meiner Mutter bedanken, da sie immer für mich da ist und immer mit ganzer Macht versucht, das Leben für die Menschen um sich herum so schön wie möglich zu gestalten.

Erklärung

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

Heidelberg, den 16. Dezember 2016, _____
Nicky Potters