

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

Bachelorarbeit im Studiengang Physik
eingereicht von

Moto Togawa

geboren in Düsseldorf (Germany)

2019

**Resonante Anregung der $1s - nl$ -Übergänge in He-
und Li-artigen Sauerstoffionen mittels weicher
Röntgenstrahlung bei PETRA III:
Experiment und Theorie**

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

Zusammenfassung

In einer Elektronenstrahl-Ionenfalle (EBIT) können hochgeladene Ionen produziert und untersucht werden, um stringente Tests der Quantenelektrodynamik durchzuführen. Hierfür wurde an die Beamline P04 am Elektronen-Synchrotron PETRA III eine, mit einer Off-axis Kanone ausgestattete Miniatur-EBIT angeschlossen, um über eine kontinuierliche Messung die resonante Photoabsorption im Bereich von 550eV bis 750eV zu messen. Dabei wurden die Resonanzen K_α bis K_κ des heliumartigen (He-artig) Sauerstoff und K_β bis K_δ des lithiumartigen Sauerstoff (Li-artig) aufgenommen. Diese konnten mit einer relativen Auflösung von $\Delta E/E \approx 6 \cdot 10^{-4}$ bestimmt werden. Aus einer nominellen Kalibration dieser Messung wurde die Güte der Beamline-Kalibration abgeschätzt und messungsabhängige Systematiken bestimmt und erklärt.

Mithilfe einer Extrapolation dieser Messergebnisse wurde die Ionisationsenergie des He-artigen Sauerstoffs auf 16meV genau bestimmt. In den Li-artigen Linien konnten verschiedene Zerfallskanäle beobachtet und qualitativ ausgewertet werden.

Abstract

With the use of Electron-Beam-Ion-Traps (EBITs) highly charged ions can be produced to investigate quantum electrodynamic corrections to atomic structure calculations. For this objective a continuous scan from 570eV to 750eV was measured at the P04-Beamline at the Electron-Synchrotron PETRA III with the use of a portable miniature EBIT. Resonances K_α to K_κ of heliumlike (He-like) oxygen and also K_β to K_δ of Li-like Oxygen have been recorded with a resolution of $\Delta E/E \approx 6 \cdot 10^{-4}$ in this scan. The accuracy of the nominal Beamline calibration was evaluated and measurement dependent systematics determined. Out of an extrapolation of the He-like lines the ionisation energy of He-like oxygen was determined with a uncertainty of 16meV. Regarding the Li-like lines various decay channels were observed and analysed in their respective deexcitation spectra. Especially K_δ which has almost no Auger decay channel and subsequently a natural linewidth of only few meV is particularly interesting for the study of QED corrections in three-electron systems.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	8
2	Grundlagen	10
2.1	Hochgeladene Ionen	10
2.2	Energieniveaus	10
2.2.1	Spin-Bahn-Wechselwirkung	11
2.2.2	Relativistische Korrektur	11
2.2.3	Configuration Interaction	12
2.3	Der elektrische Dipolübergang	13
2.3.1	Autoionisation	15
2.3.2	Zwei-Elektronen, Ein-Photon Abregung	16
2.4	Elektronenstrahl-Ionenfallen	16
2.4.1	Prozesse in einer EBIT	17
2.5	Synchrotron und Speicherringe	18
2.5.1	Synchrotronstrahlung	19
2.5.2	Undulator und Wiggler	21
2.5.3	Undulatorstrahlung	22
2.6	Der Siliziumdriftdetektor	23
2.6.1	Datenaufnahme	23
3	Experimenteller Aufbau	24
3.1	Die PolarX-EBIT	24
3.2	PETRA III	26
3.2.1	P04 Variable Polarization XUV Beamline	27
4	Auswertung	30
4.1	Auswertung diskreter Linienmessungen	31
4.2	Nominelle Kalibration der kontinuierlichen Messung	33

4.3	Bestimmung beobachteter Resonanzenergien	36
4.3.1	Vergleich mit der Theorie	39
4.4	Ionisationsenergie des heliumartigen Sauerstoffs	42
4.5	Lithiumartiger Sauerstoff	44
4.5.1	Kalibration der SDD-Achse	45
4.5.2	Zerfallsgänge des angeregten lithiumartigen-Sauerstoffs .	47
5	Zusammenfassung und Ausblick	54

Kapitel 1

Einleitung

Ein gemeinsames Interesse der Astrophysik und der Kernphysik ist die Untersuchung von hochgeladenen Ionen (HCI, engl. *Highly Charged Ions*). Dabei handelt es sich um positive Ionen, welche einen Großteil ihrer gebundenen Elektronen verloren haben. Sie bilden einen erheblichen Bestandteil des sichtbaren Universums und können in heißen Plasmen, wie zum Beispiel in Sternen, kosmischen Nebeln oder heißen intergalaktischen Medien (IGM) [26] gefunden werden. Beispielsweise wird die Spektroskopie hochgeladener Sauerstoffionen zur Untersuchung des heißen gasförmigen Halo der Milchstraße angewendet [8][9].

Mit Astro-H, ein mit mehreren Teleskopen und Detektoren, unter anderem einem Mikrokalorimeter [21], ausgestatteter Röntgensatellit, später umbenannt zu *Hitomi* (ひとみ, deutsch *Pupille*), erhoffte man sich einen besonders klaren Blick auf solche astrophysikalische Objekte [29]. Nach dem tragischen Zerfall *Hitomis* [31], einen Monat nach ihrem Start im Februar 2016, verblieb die Möglichkeit einer hochauflösenden, beobachtungsbasierenden Röntgen-Spektroskopie von astrophysikalisch interessanten Ionen wie Kohlenstoff, Stickstoff und Sauerstoff mittelfristig verwehrt.

Die Untersuchung von HCIs ist jedoch auch im Labor mittels Schwerionenbeschleuniger oder Elektronenstrahl-Ionenfallen (EBIT) möglich [1][3]. Insbesondere die Kombination aus brillanten Synchrotronstrahlungsquellen und EBITs ermöglicht die Anregung hochenergetischer Übergänge im Ion, welche ebenfalls in solchen astrophysikalischen Objekten beobachtbar sind.

Diese Arbeit bezieht sich auf Daten, die während einer Strahlzeit bei PETRA III an der P04-Beamline im Dezember 2018 aufgenommen worden sind. Es wurde die PolarX-EBIT, welche nach dem Modell der HC-EBIT gebaut wurde, mit der

Beamline des P04-Strahlgangs verbunden und mit Synchrotronstrahlung bestrahlt. Nach einer Injektion von Sauerstoff in die EBIT wurde die K-Serie des He-artigen Sauerstoffs und vereinzelte Linien von Li-artigem Sauerstoff aufgenommen. Die Ergebnisse der Messkampagne soll im Rahmen dieser Arbeit analysiert und diskutiert werden.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Hochgeladene Ionen

Mit ihrem Ionisationszustand als zusätzliche Variable erweitern hochgeladene Ionen (HCI) das bekannte Periodensystem um eine weitere Dimension. Dementsprechend weisen HCIs in ihrer Charakteristik Übereinstimmungen mit ihrem neutralen Analogon auf. Wasserstoffartige (H-artige) Ionen, also Ionen mit nur einem Elektron, können daher quantenmechanisch wie das neutrale Wasserstoff mit erhöhter Ladungszahl Z behandelt werden. Ebenso wechselwirken die verbliebenen Elektronen eines HCIs mit ionisierender Strahlung. Dies führt vor allem bei stark geladenen Ionen zu ausgeprägten und hochenergetischen Resonanzen.

2.2 Energieniveaus

Die Beschreibung der diskreten Energiezustände von Atomen und Ionen kann durch das Bohrsche Atommodell approximiert werden. Die Bohrsche Formel

$$E_n = E_R \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.1)$$

mit der Rydbergenergie E_R und der Hauptquantenzahl n folgert die spezifischen Energieniveaus eines Systems aus halbklassischen Annahmen und wurde 1913 von Niels Bohr hergeleitet [4]. Die Gleichung 2.1 beschreibt diskrete Energiezustände E_n , welche nach der Hauptquantenzahl n entartet sind und proportional zur Kernladungszahl Z quadratisch ansteigen. Dieses Modell beschreibt jedoch

nur näherungsweise die Energiezustände H-artiger Atome und Ionen. Eine genauere Bestimmung dieser Niveaus erfordert die Beachtung komplexer Wechselwirkungen und Effekte im System, wie zum Beispiel die relativistische Korrektur, Spin-Bahn-Wechselwirkung und den Darwin-Term. Diese werden zusammengefasst als die Feinstruktur bezeichnet [28]. Durch die Feinstruktur wird die Entartung der Hauptquantenzahl n , welche im Bohrschen Modell jedem Energieniveau eine Energie zuordnet, aufgehoben.

2.2.1 Spin-Bahn-Wechselwirkung

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung beschreibt die Kopplung des magnetischen Moment des Spins μ_s mit dem Magnetfeld B_l , welches durch die Bahnbewegung des Elektrons um den Kern induziert wird. Der über die Kopplung entstehende Hamilton-Operator

$$H_{\text{SL}} = -\vec{B}_l \cdot \vec{\mu}_s = \frac{a}{\hbar^2} \vec{l} \cdot \vec{s} \quad (2.2)$$

erzeugt eine zusätzliche Verschiebung im Energieniveau.

2.2.2 Relativistische Korrektur

Mit dem Impuls p , der Masse μ und der Lichtgeschwindigkeit c kann zur Abschätzung des relativistischen Effekts zunächst der Ausdruck der Energie-Impuls-Beziehung für $v/c \rightarrow 0$ entwickelt werden.

$$\sqrt{p^2 c^2 + \mu^2 c^4} \approx \mu c^2 + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{p^4}{8\mu^3 c^2} + \dots \quad (2.3)$$

Der Hamilton-Operator

$$H_{\text{kin}} = -\frac{p^4}{8\mu^3 c^2} \quad (2.4)$$

beschreibt nun als Störterm die relativistische Korrektur im Energieniveau.

Da die Beiträge der relativistischen Korrektur und der Spin-Bahn-Kopplung von derselben Größenordnung sind, werden meist beide Terme zu einer Formel:

$$\Delta E = \frac{E_n(Z\alpha)^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2} - \frac{3}{4n}} \right) \quad (2.5)$$

vereinigt. Der Gesamtdrehimpuls $j = l \pm s$ ist nun zusätzlich für das jeweilige Energieniveau ausschlaggebend. Die experimentelle Beobachtung der Feinstruktur gelang 1887 als erstes A.A. Michelson und E.W. Morley bei der Untersuchung des Wasserstoffatoms.

An kernnahen Niveaus kann jedoch auch eine Aufhebung dieser Entartung betrachtet werden. Messungen der Energieniveaus $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ von W.E. Lamb (1947) [17] ergaben eine Energiedifferenz von etwa 4×10^{-6} eV, welche heute als Lambverschiebung bekannt ist. Die Erklärung dieser Beobachtung fand man in der Quantenelektrodynamik.

Die bisherige Betrachtung der Energieniveaus in diesem Abschnitt bezog sich lediglich auf wasserstoffartige Atome und Ionen. Die Beschreibung von Vielteilchensystemen fordert jedoch weitere Effekte, wie die Coulomb-Wechselwirkung [7] zwischen Hüllenelektronen oder den Quantendefekt [22].

Ebenso ist die dominante Kopplungsart bei leichten Mehrelektronensystemen die LS-Kopplung und bei schwereren Atomen die jj-Kopplung zu berücksichtigen. Ein weiteres Problem ist die Formulierung einer akkuraten Vielteilchen-Wellenfunktion.

2.2.3 Configuration Interaction

Ein Ansatz zur Formulierung einer Vielteilchen-Wellenfunktion wird in der Configuration Interaction (CI) gegeben. Es handelt sich dabei um eine Methode zur Lösung der Schrödinger-Gleichung. Sie bildet in vielen theoretischen Berechnungen atomarer Zustände einen grundlegenden Ansatz.

Bei der CI wird eine Vielteilchen-Wellenfunktion $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ zunächst als Htree-Produkt

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \chi_1(x_1)\chi_2(x_2)\dots\chi_N(x_N) \quad (2.6)$$

angesetzt. Diese Gleichung enthält jedoch nicht die Antisymmetrie-Eigenschaft, welche von allen fermionischen Wellenfunktionen erfüllt werden muss.

Zur Lösung wird nun eine Linearkombination des Htree-Produkts gebildet. Für eine Zweiteilchenwellenfunktion entspräche dies der Funktion

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1(x_1)\chi_2(x_2) - \chi_1(x_2)\chi_2(x_1)), \quad (2.7)$$

mit einer Normierung $\frac{1}{\sqrt{2}}$. Die rechte Seite der Gleichung entspricht genau einer Determinante und es folgt

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \chi_1(x_1) & \chi_2(x_1) \\ \chi_1(x_2) & \chi_2(x_2) \end{vmatrix}. \quad (2.8)$$

Eine Vielteilchen-Wellenfunktion kann somit aus einer Verallgemeinerung der obigen Gleichung gewonnen werden. Zur Bestimmung der Energieeigenwerte, muss somit nur noch die Schrödinger-Gleichung

$$\tilde{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (2.9)$$

gelöst werden.

Anspruchsvolle Berechnungen wie die CIQEDMOD [32] fügen dem Hamiltonian weitere Störoperatoren, welche beispielsweise QED-Effekte oder die Coulomb-Wechselwirkung beschreiben, hinzu und berechnen so präzise theoretische Werte, welche als Referenzwert für experimentell bestimmte Resonanzenergien unerlässlich sind.

2.3 Der elektrische Dipolübergang

Für die Photoanregung eines Übergangs ist die Energie des Photons zum Energieniveau abgestimmt. Aus einer quantenmechanischen Betrachtung ergeben sich jedoch weitere Bedingungen.

Beschreibt man die Wechselwirkung eines Elektrons in einem Atom mit einer ankommenden ebenen elektromagnetischen Welle, kann der Hamiltonian des Elektrons beschrieben werden durch:

$$H = H_0 + W(t), \quad (2.10)$$

mit H_0 als zeitunabhängigen Teil und $W(t)$ als zeitabhängigen Störungsterm. Entwickelt man $W(t)$ kann der Störungsterm dargestellt werden als:

$$W(t) = W_{\text{DE}}(t) + W_{\text{DM}}(t) + W_{\text{QE}}(t) + \dots \quad (2.11)$$

Die sogenannten elektrischen Dipolübergänge (DE) sind Übergänge zwischen Energieniveaus vom System mit dem Hamiltonian $W(t) = H_0 + W_{\text{DE}}$. Die magnetischen Dipolübergänge (DM) und elektrischen Quadrupolübergänge (QE) beschreiben dabei Übergänge niedrigerer Ordnung.

Nach Fermis Goldener Regel kann so die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand $\langle \psi_i |$ zu einem angeregten Zustand $\langle \psi_f |$ durch

$$|\langle \psi_i | W(t) | \psi_f \rangle|^2 \quad (2.12)$$

beschrieben werden. Ist die Übergangswahrscheinlichkeit eines elektrischen Dipolübergangs gleich Null, also

$$|\langle \psi_i | W_{DE}(t) | \psi_f \rangle|^2 = 0 \quad (2.13)$$

so wird dieser Übergang als dipol-verboten bezeichnet und Übergänge höherer Ordnung ($W_{DM}, W_{QE}, etc.$) müssen betrachtet werden. Um die Bedingungen für einen möglichen Dipolübergang zu untersuchen, muss außer der Energieerhaltung die Erhaltung des Drehimpulses und bestimmte Symmetrieprinzipien betrachtet werden. Man erhält für den elektrischen Dipolübergang im Wasserstoffatom die folgenden Auswahlregeln:

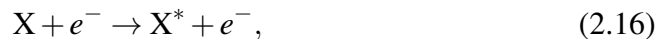
$$\Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1, \quad \pi_f = -\pi_i \quad (2.14)$$

Unter der Annahme, dass im betrachteten Atom weitestgehend LS-Kopplung herrscht, müssen weitere Auswahlregeln beachtet werden.

$$\Delta L = \pm 1, \quad \Delta S = 0 \Leftrightarrow \Delta L = 0, \pm 1 (L = 0 \leftrightarrow 0) \quad (2.15)$$

An- und Abregungsprozesse

Hüllenelektronen können durch Aufnahme von Energie aus einem initialen Energiezustand E_i auf ein höher energetisches Energieniveau E_f angeregt werden. Die Aufnahme kann dabei über einen elastischen Stoß mit einem freien Elektron erfolgen



aber auch über die Absorption eines Photons



Findet die Anregung über ein Elektron statt, wird dieser Prozess als Elektronenstoßanregung bezeichnet. Eine Anregung induziert durch ein Photon wird Photoanregung genannt. Ein wichtiger Unterschied zwischen beiden Anregungsprozessen ist, dass die Photoanregung resonant erfolgt. Eine Anregung kann daher nur dann erfolgen, wenn die Energie des Photons genau dem Abstand zweier Energieniveaus entspricht. Die Elektronenstoßanregung kann hingegen auch nicht-resonant erfolgen.

Solche angeregten Atome und Ionen sind meist sehr kurzlebig und können durch Freisetzung eines Photons in einen stabileren Zustand zerfallen

$$X^* \rightarrow X + \gamma. \tag{2.18}$$

Historisch bedingt werden Übergänge aus der K-Schale, also aus den innersten Energieniveau mit der Hauptquantenzahl $n = 1$, in höhere Zustände mit der Notation K_n beschriftet. Wobei $n = \alpha, \beta, \gamma, \dots$ jeweils mit $\alpha = 2, \beta = 3, \dots$ die Hauptquantenzahl der Endniveaus angibt. Aus 2.1 kann somit mit

$$K_n = Z_{\text{eff}}^2 E_R \left(\frac{1}{(1 - \delta_{1,s})^2} - \frac{1}{(n - \delta_{n,p})^2} \right) \tag{2.19}$$

die Energie des K_n -Übergangs bestimmt werden. Z_{eff} beschreibt dabei die effektive Kernladungszahl, welche durch

2.3.1 Autoionisation

Bei der Abregung eines Atoms, kann die dabei freiwerdende Energie auch zu einem Herauslösen eines schwächer gebundenen Elektrons (Auger-Elektron) führen. Dazu muss die freiwerdende Energie höher als die Bindungsenergie des zu herauszulösenden Elektrons sein. Überschüssige Energie wird in Form von kinetischer Energie auf das Auger-Elektron übertragen. Es handelt sich somit um einen strahlungslosen Übergang.

$$X^{q+*} \rightarrow X^{(q+1)+} + e^- \tag{2.20}$$

Mit der Bindungsenergie E_B und der Energie des emittierten Photons E_γ gilt für die kinetische Energie des Elektrons somit: $E_{\text{kin}} = E_\gamma - E_B$. Ein solcher strahlungsloser Übergang wird als Auger-Effekt bezeichnet.

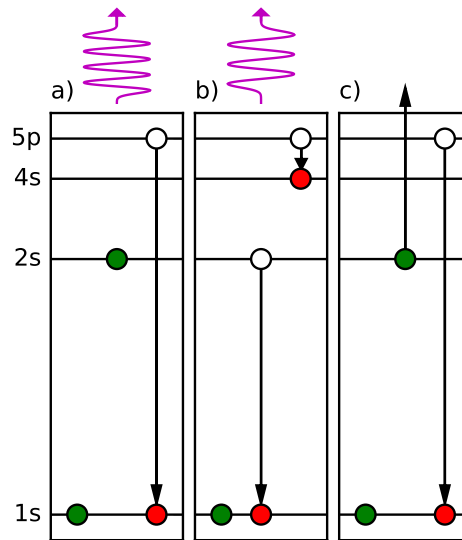


Abbildung 2.1: Mögliche Zustandsänderungen eines Li-artigen Ions, dessen $K\delta$ -Übergang angeregt wurde. a) Der angeregte Zustand zerfällt direkt in den Grundzustand. b) Ein Zwei-Elektronen, Ein-Photon Übergang c) Auger-Zerfall.

2.3.2 Zwei-Elektronen, Ein-Photon Abregung

In einem Mehrelektronenübergang wird trotz Änderung des Zustands von mehr als einem Elektron, nur ein Photon emittiert. Solche Linien werden oftmals als Satelliten bezeichnet. Die Auswahlregeln solcher Mehrelektronenübergänge wurden als erstes von S. Goudsmit und L. Gropper [24] hergeleitet. Der Fall, in dem zwei Elektronen ihren Zustand ändern, wird als Zwei-Elektronen, Ein-Photon Übergang (engl. Two-electron, one-photon; TEOP) bezeichnet. Es gelten dabei die Regeln: l_1 kann sich um ± 2 oder 0 ändern und l_2 kann sich um ± 1 ändern [14]. Dies sind die sogenannten Heisenbergschen Zwei-Elektronen Auswahlregeln [12]. Der in Abbildung 2.1 b) dargestellte Zerfall beschreibt somit einen $\Delta l_1 = 0$ und $\Delta l_2 = 1$ TEOP.

2.4 Elektronenstrahl-Ionenfallen

Die Elektronenstrahl-Ionenfalle (engl. Electron Beam Ion Trap, EBIT) ist eine Ionenfalle, welche einen intensiven Elektronenstrahl zur Ionisation des Gases in der EBIT und zum radialen Einfang der produzierten Ionen nutzt.

Die Elektronen werden dabei aus einer Glühkathode emittiert und beschleunigt, daraufhin durch ein externes Magnetfeld stark komprimiert und in das Fallenzentrum geleitet. Im Zentrum der EBIT befinden sich mehrere Fallenelektroden (Zylinderelektroden), die ein Potential zum axialen Einfang der Ionen erzeugen. Dies intensiviert die elektrische Raumladungsdichte im Fallenzentrum, wodurch der Ladungszustand in der Falle erhöht wird.

Der Strahl wird letztendlich nach Durchgang der Falle von einer Kollektorelektrode aufgefangen.

Das elektrische Potential in einer EBIT

Atome in der EBIT werden durch Elektronenstoßionisation schrittweise ionisiert. Der maximal erreichbare Ladungszustand wird dabei durch die kinetische Energie der Elektronen im Elektronenstrahl bestimmt. Die kinetische Energie ergibt sich aus dem Potential ϕ_K an der Kathode und dem Potential am jeweiligen Ort des Elektrons.

Eine genauere Betrachtung erfordert jedoch die Beachtung zusätzlicher Faktoren. Der Elektronenstrahl kann angenähert als zylindrischer, mit konstanter Dichte und Radius r_H [13] bestückter Elektronenstrahl betrachtet werden. r_H bezeichnet dabei

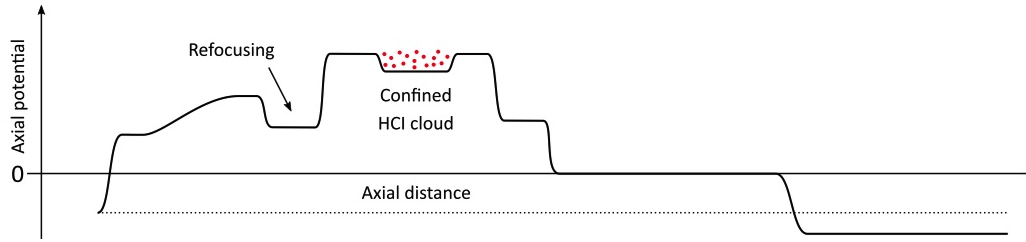


Abbildung 2.2: Ein typischer Verlauf des elektrostatischen Potentials in der EBIT. Aneinanderreihungen von Zylinderelektroden formen eine Potentialsenke im Fallenzentrum [20].

den Hermann-Radius, welcher den zeitlich gemittelten Strahlradius angibt. Die Ladungsdichte ρ_e eines solchen Elektronenstrahls wird beschrieben durch

$$\rho_e = \frac{I_e}{\pi r_H^2 v} \quad (2.21)$$

wobei I_e den Elektronenstrom angibt. Als Lösung der Poisson-Gleichung erhalten wir das Potential

$$\phi(r) = \phi_D + \phi_0 \cdot \left[\left(\frac{r}{r_H} \right)^2 + 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) - 1 \right] \quad (2.22)$$

für $r < r_H$. Wobei r_D den Driftröhren Radius und ϕ_D das Potential der Driftröhre angibt. Die kinetische Energie eines Elektrons im Strahl kann nun bestimmt werden über

$$e \cdot U = e \cdot \left(\phi_D - \phi_K + \phi_0 \cdot 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) + \phi_I + \phi_A \right). \quad (2.23)$$

Dabei beschreiben ϕ_I das Raumladungspotential der produzierten Ionen im Fallenzentrum und ϕ_A die Austrittsarbeit der Kathode und der Driftröhren.

2.4.1 Prozesse in einer EBIT

Während der Elektronenstrahl einer EBIT die Atome schrittweise ionisiert, wirken dabei Rekombinationsprozesse der Ionisation entgegen und es bildet sich ein Gleichgewicht mit einer konstanten Ladungszustandsverteilung in der Falle.

Eine Messung, bei welcher die Elektronenstrahlenergie über einen gewünschten

Bereich abtastet, kann dazu verhelfen die Ladungsverteilung in der EBIT zu messen. In einer solchen Messung kann unter anderem die Dielektronische Rekombination beobachtet werden.

Die Dielektronische Rekombination (DR) [19] ist ein Prozess, in dem ein freies Elektron mit der kinetischen Energie E_{kin} in ein Niveau mit der Bindungsenergie E_{B} eines Ions gefangen, während ein gebundenes Elektron in ein höherenergetisches Niveau angeregt wird. Dieser Prozess erfüllt die Bedingung

$$\Delta E = E_{\text{kin}} + E_{\text{B}}, \quad (2.24)$$

wobei ΔE die Energie beschreibt, welche an das Elektron übergeben wird. Es entsteht daraufhin ein angeregter, kurzlebiger Zustand, welcher sich über radiative Abregung oder Autoionisation stabilisiert.

2.5 Synchrotron und Speicherringe

In den letzten Jahrzehnten wurden viele Methoden und Verfahren entwickelt, um mit Photonen hochenergetische Übergänge im Atom anzuregen. Ein Beispiel dieser Art wäre die Zwei-Photonen-Spektroskopie [10][11]. Dabei absorbieren Atome gleichzeitig zwei entgegengesetzt propagierende Photonen gleicher Energie. Es wird automatisch die Dopplerverschiebung erster Ordnung kompensiert und die Laserphotonen müssen nur die Hälfte der benötigten Übergangsenergie aufbringen. Der $1s \rightarrow 2s$ (Lyman- α)-Übergang im Wasserstoff, welcher mit $\sim 13\text{ eV}$ im Extrem-Ultraviolett-Regime ist, konnte so schon um 1980 durch Farbstofflaser angeregt werden.

Doch um Photonen im Röntgen-Regime zu erzeugen, müssen größer angelegte Aufbauten genutzt werden. Eine Möglichkeit ist die Erzeugung von Bremsstrahlung durch beschleunigte Elektronen in einem Synchrotron.

In einem Synchrotron ist der zeitlich gemittelte Radius der Teilchenflugbahn konstant. Mehrere Ablenkmagnete halten dabei die Elektronen auf der vorgesehenen Bahn. Aus dem Gleichgewicht der Zentripetalkraft und Lorentzkraft kann der Radius

$$r_{\text{sync}} = \frac{mv^2}{qvB} = \frac{mv}{qB} \quad (2.25)$$

in Abhängigkeit zur Energie und zum Magnetfeld bestimmt werden. Mit Ladung $q = e$ und für relativistische Geschwindigkeiten $v \approx c$ folgt :

$$r_{\text{sync}} = \frac{1}{ec} \frac{E}{B} \quad (2.26)$$

Man sieht, dass das Verhältnis aus Energie und Magnetfeld stets konstant sein muss. Da mit jedem Umlauf die Elektronen durch eine Beschleunigerstrecke an Energie gewinnen, muss das Magnetfeld somit „synchron“ ansteigen.

Die Energie, die ein Elektron pro Umlauf im Synchrotron erhält, kann durch:

$$\Delta E = eU_0 \sin(\Psi_s) - \Delta E_{\text{Verlust}} \quad (2.27)$$

bestimmt werden. Dieser Verlust erfolgt durch Bremsstrahlung der Elektronen auf der Bahn.

Aufgrund von technischen Gründen werden die Elektronen vor der Injektion in den Synchrotron durch einen Vorbeschleuniger, meist Linearbeschleuniger (LINAC) auf etwa 200 MeV beschleunigt.

2.5.1 Synchrotronstrahlung

Aus der klassischen Elektrodynamik ist bekannt, dass beschleunigte Ladung Energie abstrahlt. Die Larmor-Formel [18]

$$P_s = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 m_0^2 c^3} \left(\frac{dp}{dt} \right)^2 \quad (2.28)$$

beschreibt für nicht-relativistische Geschwindigkeiten die abgestrahlte Leistung. Für Elektronen, die im Synchrotron auf mehrere GeV beschleunigt werden, benötigt man jedoch eine Lorentz-invariante Formulierung der Larmor-Formel, welche durch eine Transformierung der Zeit und Impuls erhalten werden kann.

$$dt \rightarrow d\tau, \vec{p} \rightarrow P_\mu \quad (2.29)$$

mit $d\tau = \frac{dt}{\gamma}$ und $P_\mu = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right)$ erhalten wir für den Vierer-Impuls:

$$\left(\frac{P_\mu}{d\tau} \right)^2 = \left(\frac{dp}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{1}{c^2} \frac{dE}{d\tau} \right)^2 \quad (2.30)$$

Insgesamt also:

$$P_s = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 m_0^2 c^3} \left[\left(\frac{dp}{d\tau} \right)^2 - \left(\frac{1}{c^2} \frac{dE}{d\tau} \right)^2 \right] \quad (2.31)$$

Da für ein Elektron auf einer Kreisbahn die Energie konstant bleibt, vereinfacht sich die obige Formel zu:

$$P_s = \frac{e^2 \gamma^2}{6\pi \epsilon_0 m_0^2 c^3} \left(\frac{dp}{dt} \right)^2. \quad (2.32)$$

Da $\vec{v} = \omega r$ gilt, kann die Änderung des Impulses bei einer infinitesimalen Winkeländerung dargestellt werden als:

$$dp = d\phi p \quad (2.33)$$

Mit einem Ablenkradius R und für Bahngeschwindigkeiten $v \approx c$ folgt somit nach einer Zeitableitung:

$$\frac{dp}{dt} = p\omega = p \frac{v}{R} \approx \frac{pc}{R} = \frac{E}{R} \quad (2.34)$$

Die Strahlenleistung kann nun dargestellt werden über die Teilchenenergie:

$$P_s = \frac{e^2}{6\pi \epsilon_0} \frac{1}{(m_0 c^2)^4} \left(\frac{E^4}{R^2} \right)^2 \quad (2.35)$$

Unter der Annahme, dass das Elektron kontinuierlich Strahlung im Ablenkmagneten emittiert, kann der Energieverlust bestimmt werden über:

$$\Delta E = \oint P_s dt = P_s t_b = P_s \frac{2\pi R}{c}, \quad (2.36)$$

dabei beschreibt R den Biegeradius des Ablenkmagneten und t_b das Intervall, das vom Elektron innerhalb der Ablenkmagnete verbracht wird.

Um die Winkelverteilung der Strahlung zu bestimmen, betrachten wir nun ein senkrecht zur Bewegungsrichtung und senkrecht zur Beschleunigungsrichtung des Elektron abgestrahltes Photon. Im Schwerpunktsystem des Elektron hat das Photon nun den Impuls:

$$\vec{p}_y = \vec{p}_0 = E'_s / c \cdot \vec{n} \quad (2.37)$$

mit der Energie des Photons im Schwerpunktsystem E'_s und der Flugrichtung \vec{n} . Um das Verhalten des Photons im Laborsystem zu erhalten, transformieren wir nun den Viererimpuls im Schwerpunktsystem in das System des Beobachters.

$$P_\mu = \Lambda \cdot P'_\mu = \begin{pmatrix} E'_s / c \\ 0 \\ p'_0 \\ \gamma \beta E'_s / c \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

Der Öffnungswinkel der abgestrahlten Strahlung zur Flugrichtung des Elektrons kann so nun bestimmt werden über

$$\tan(\theta) = \left(\frac{p_y}{p_z} \right) = \frac{p'_0}{\gamma\beta p'_0} \approx \frac{1}{\gamma}, \quad (2.39)$$

für relativistische Geschwindigkeiten des Elektrons. Beispielsweise erhält man für ein Elektron mit $E_e = 1 \text{ GeV}$ ($\gamma = 1957$) einen Öffnungswinkel von $\theta = 0.03^\circ$. Das Emissionsprofil der Synchrotronstrahlung, das an den Ablenkmagneten erzeugt wird, ähnelt somit einem stark gebündelten Konus.

2.5.2 Undulator und Wiggler

Um die oben genannte aufgefächerte Synchrotronstrahlung zu intensivieren, nutzen Speicherringe Magnetkonfigurationen, die als Undulatoren oder Wiggler bezeichnet werden. Sie bestehen entweder aus Elektromagneten, Permanentmagneten oder einer Kombination aus beiden.

Strukturell wird das Magnetfeld durch quaderförmige Magnete mit Feldrichtung parallel zu den Seitenflächen erzeugt, die um 90° zueinander verdreht positioniert werden (Halbach Array). So entstehen pro vier aufeinanderfolgende Magnete eine Periode λ_u im Magnetfeld. Die Feldstärke wird über den Spaltabstand definiert.

Wie soeben erwähnt, ist das Potential eines Undulators oder Wigglers (U/W) periodisch entlang der Strahlachse und kann somit dargestellt werden als :

$$\phi(s, z) = f(z) \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_u} s\right) \quad (2.40)$$

mit der vertikalen Feldabhängigkeit

$$f(z) = A \sinh(k_u z), \quad (2.41)$$

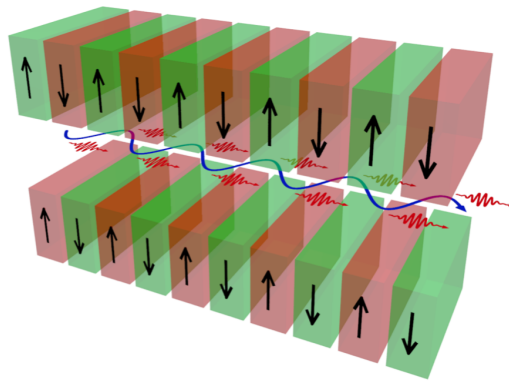


Abbildung 2.3: Im periodischen Magnetfeld des Undulators wird über die gesamte Länge Synchrotronstrahlung erzeugt. [2]

dabei beschreibt λ_u die Periodenlänge und k_u die zugehörige Wellenzahl. Das Magnetfeld vertikal zur Strahlachse

$$B_z(s, z) = \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (2.42)$$

wird beschrieben über die Ableitung des Potentials. Betrachtet man lediglich das Feld auf der Strahlachse ($z = 0$), kann die Formel zu

$$B_z(s, z) = B_{\max} \cos(k_u s) \quad (2.43)$$

vereinfacht werden. Solche U/W-Magnetkonfigurationen werden meist auf geraden Strecken innerhalb des Speicherrings auf sogenannten Insertions eingebaut. Es ist daher wichtig, dass die Elektronen nach Durchlauf der Insertion nicht von der Bahn abkommen. Da eine solche Dispersion ein Verbiegen des Orbits zur Folge haben würde, muss das Magnetfeld die Bedingung

$$\int_{W/U} B_z(s) ds = B_{\max} \int_{s_1}^{s_2} \cos(k_u s) ds = 0 \quad (2.44)$$

erfüllen. Abgesehen von der trivialen Lösung mit $s_1 = s_2$ gilt dies für :

$$s_1 = 0, \quad s_2 = \frac{n}{2} \lambda_u \quad (2.45)$$

Am Anfang und am Ende der Insertion werden daher jeweils Magnete halber Länge eingesetzt.

2.5.3 Undulatorstrahlung

Aufgrund des periodischen Magnetfelds führen die Elektronen Oszillationen aus, dessen Periode durch die Periode des Undulators/Wigglers λ_u definiert ist. Dies führt zu einer Abstrahlung einer charakteristischen Wellenlänge

$$\lambda_\gamma \approx \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{1}{2} K \right). \quad (2.46)$$

Der einheitslose Undulatorparameter K beschreibt die aufgrund der sinusartigen Bewegung des Elektrons im Undulatorfeld entstehende Verlängerung der zurückgelegten Wegstrecke gegenüber einer geradlinigen Bewegung. Für $K \leq 1$ ist somit die Auslenkung der Elektronen klein und als Konsequenz interferieren die ausgesendeten Lichtkegel konstruktiv. Man spricht hierbei von einem Undulator. Bei $K > 1$ handelt es sich um einem Wiggler.

2.6 Der Siliziumdriftdetektor

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Siliziumdriftdetektoren(SDD) der Firma KE-TEK vom Typ AXAS-M [15] zum Nachweis der Fluoreszenzphotonen verwendet. Der SDD gehört zu den EDS-Detektoren und wandelt somit auftreffende Strahlung in einem dazu proportionalen Strom um. Umgesetzt wird dies durch die Anwendung von Halbleitern. Diese werden durch auftreffende Photonen ionisiert und hinterlassen Elektron-Loch-Paare, deren Anzahl proportional zur Photonenenergie ist. Der SDD hat nach Herstellerangabe bei der Emissionslinie K_{α} von Mangan eine Halbwertsbreite ~ 125 eV.

2.6.1 Datenaufnahme

Die Datenaufnahme erfolgt über ein kommerzielles MPA4-System der Firma Fast-ComTec. Parallel werden so aufgenommene Signale des SDD und aus der Beamline ausgelesene Spannungen zwischen 0 und 10 V, welche linear auf die nominelle Photonenenergie übertragen werden können, eingespeist. Ein zusätzliches Zeitstempelsignal wird jede Millisekunde eingefügt. So werden die analogen Signale des Detektors und der Beamline über zwei Analog-Digital-Umsetzer (ADC1, ADC2) umgewandelt und je nach Signalgröße in entsprechende Kanäle eingefügt und in einer Listfile gespeichert.

Kapitel 3

Experimenteller Aufbau

3.1 Die PolarX-EBIT

Die PolarX-EBIT, welche zur Erzeugung und Speicherung der hochgeladenen Ionen genutzt wurde, ist nach dem Vorbild der HC-EBIT gebaut mit einer zusätzlichen Modifikation in der Kanone.

Die HC-EBIT ist eine kompakt konstruierte EBIT mit einem durch Permanentmagnetkonfiguration erzeugtes Magnetfeld. Das Magnetsystem hat eine Abmessung von $320\text{ mm} \times 350\text{ mm}$ mit einer Flussdichte von etwa 0.86 T im Fallenzentrum. Sie ermöglicht mithilfe ihrer Kompaktheit und gleichzeitig zuverlässigen Leistung ein gutes Apparat zur Spektroskopie an Synchrotronstrahlungsquellen und Freien-Elektronen-Laser. Sechs aufeinander folgende Drifttröhen erzeugen für die zu produzierende Ionenwolke ein axiales Fallenpotential. Der Durchmesser einer solchen Ionenwolke beträgt wenige hundert Mikrometer.

Die PolarX-EBIT ist zusätzlich mit einer Off-axis Kanone ausgestattet, was das Einführen des Synchrotronstrahls kollinear zum Elektronenstrahl ermöglicht. Dabei ist die Kathode in einem Winkel von 22° zur Strahlachse montiert. Um den nun schräg austretenden Elektronenstrahl auf die vorgesehene Achse zu leiten,

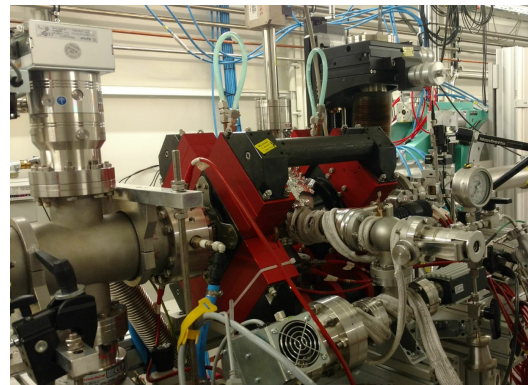


Abbildung 3.1: Die PolarX-EBIT

verhilft eine zweigeteilte Anode. Da auf die schräg zum Magnetfeld austretenden Elektronen eine Lorentzkraft wirkt, wird diese Ablenkung auf den Strahl mittels einer ebenfalls zweigeteilten Fokuselektrode kompensiert.

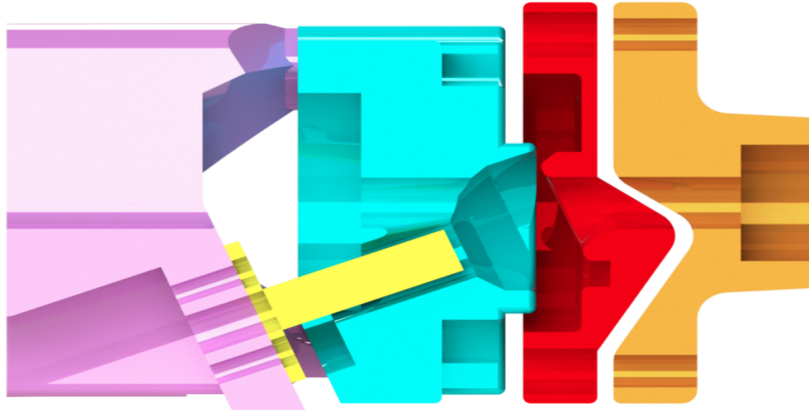


Abbildung 3.2: Schematischer Aufbau der Off-Axis Kanone der PolarX-EBIT. Die Kathode (gelb) ist um 22° angewinkelt und versetzt von der Hauptachse montiert. Die Umlenkelektroden sind in rot und orange dargestellt [16].

Bei einer On-axis Kanone wird der Photonenstrahl entweder senkrecht zur Symmetrieachse oder durch den Kollektor auf die Kanone zugeführt, was zu einer kurzfristig verringerten Emissionsleistung und langfristig zu einer dauerhaften Beschädigung der Kathode führt. Da sich die Kathode in der Off-axis-Konstruktionsweise nicht auf der Symmetrieachse der EBIT befindet, kann ein Photonenstrahl durch eine 4 mm breite Bohrung geführt werden ohne Kontakt zu der Kanone zu haben.

3.2 PETRA III

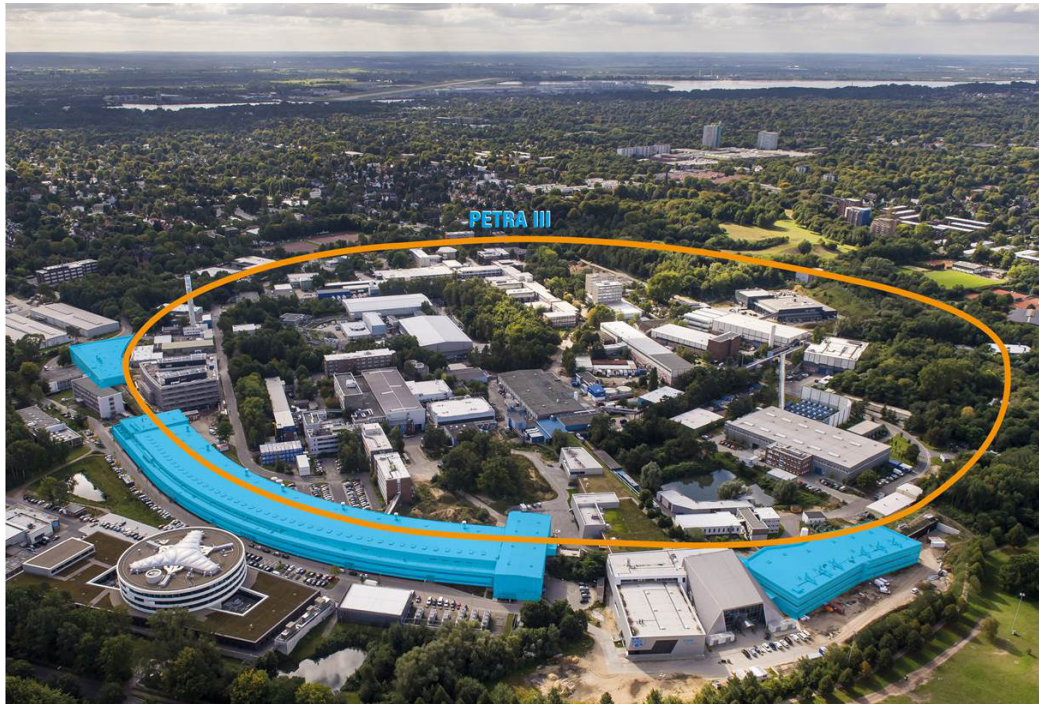


Abbildung 3.3: Die drei Experimentierhallen der PETRA III : „Ada Yonath (links)“, „Max von Laue (mitte)“ und „Paul P. Ewald (rechts)“ [5].

Die Abkürzung PETRA bezeichnet die Positron-Elektron-Tandem-Ring-Anlage des Deutschen Elektronen-Synchrotron (DESY) in Hamburg. Mit einem Umfang von 2304 Metern gehört sie zu den größten Speicherringen. PETRA unterlief seit ihrer Inbetriebnahme im Jahr 1978 mehreren Umwandlungen und befindet sich heute in ihrer dritten Ausbaustufe. Anfangs diente sie als größter Ringbeschleuniger der Welt vielen Forschungen und verhalf zum Beispiel 1979 zum Nachweis des Gluons. Mit der Eröffnung vom Teilchenbeschleuniger HERA in 1990, wurde sie mehrere Jahre als Vorbeschleuniger verwendet (PETRA II).

2009 wurde PETRA II, mit 14 Undulatoren bestückt und als die brillianteste Speicherring-Röntgenstrahlungsquelle PETRA III wiedereröffnet.

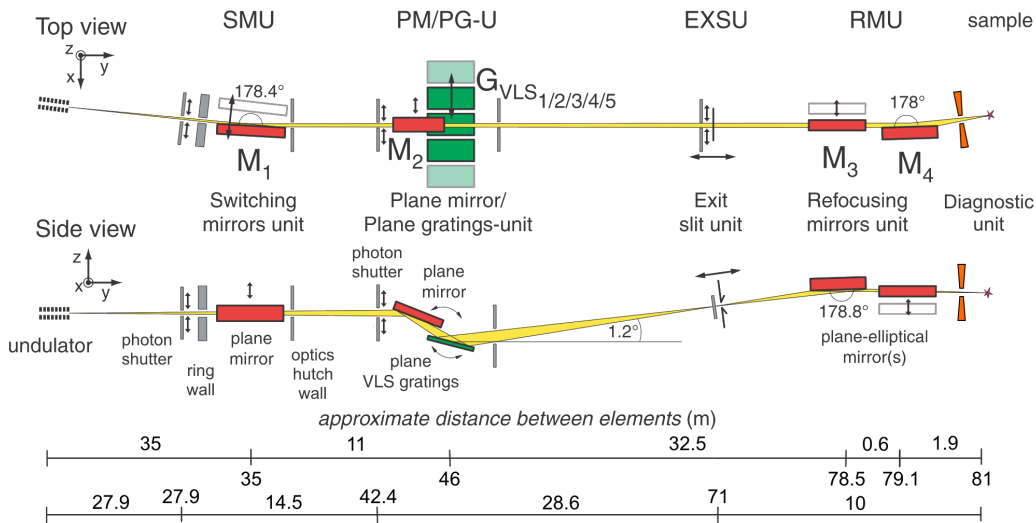


Abbildung 3.4: Schematischer Aufbau der P04 Beamline [6].

3.2.1 P04 Variable Polarization XUV Beamline

P04 ist eine von 14 Hauptbeamlines (P01 bis P14) in der Max-von-Laue Experimentierhalle. Die P04 XUV Beamline ist auf die Erzeugung von Photonen im Energiebereich von 250 eV bis 3000 eV mit einem Fluss von bis zu 10^{12} Photonen pro Sekunde spezialisiert.

Nach einer Beschleunigung der Elektronen im Synchrotron auf mehrere GeV werden diese durch weitere Ablenkmagnete in den Strahlengang geführt.

Dieser beginnt zunächst mit einem 4.9 m langen APPLE II-Undulator [33], welcher aus ankommenden Elektronen in Synchrotronstrahlung erzeugt. Der APPLE II-Undulator, bestehend aus 72 Perioden mit jeweils 65.6 mm Länge, ist aus vier Magnetreihen zusammengesetzt, welche je nach relativer Verschiebung zueinander die gewünschte Polarisation der Synchrotronstrahlung erzeugen kann.

Die gesamte P04-Beamline, vom Undulator bis zum Strahlfokus, hat dabei eine Länge von etwa 81 m. Mehrere Spiegelkonfigurationen und ein Monochromator verhelfen dabei zur Charakterisierung und spektralen Isolierung des Strahls im Fokus, wobei vor jeder Beamline-Komponente ein variabler Schlitz (Slit) gelagert ist.

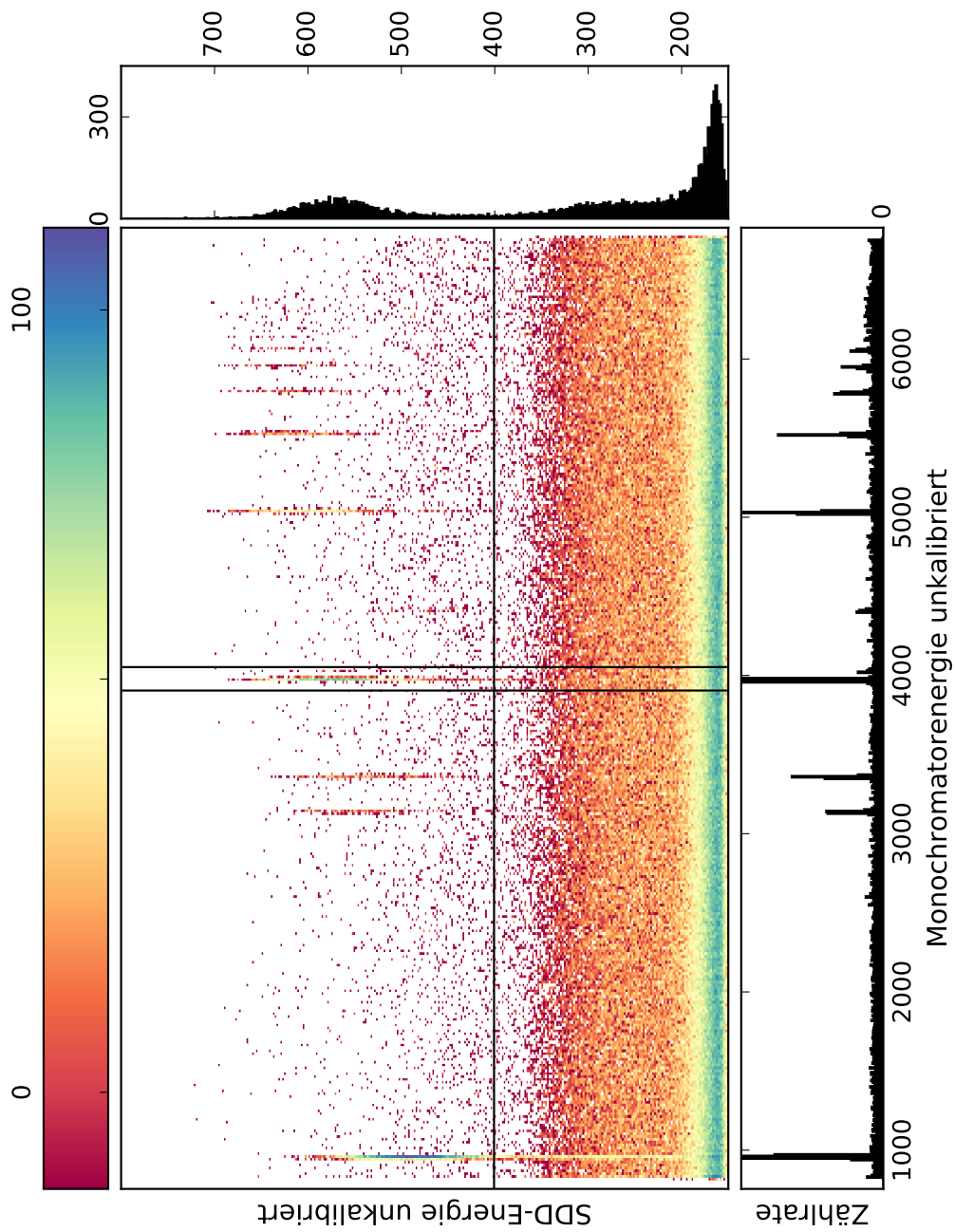


Abbildung 3.5: Mitte: Aufgenommenes OTF-Spektrum. Rechts: Projektion des vertikal umschlossenen Energiebereichs auf die Achse des SDD. Unten: Projektion des gesamten Spektrums oberhalb des Kanals 400 auf die Achse der Monochromatorenergie.

Kapitel 4

Auswertung

Der zu untersuchende Datensatz wurde im sog. „On The Fly“-Scan aufgenommen. Es handelt sich dabei um eine kontinuierliche Messung, welche einen ausgewählten Energiebereich mit konstanter jedoch verhältnismäßig hoher Geschwindigkeit durchläuft (Abbildung 3.5).

Vor der Auswertung dieser Messung, werden im ersten Teil dieses Kapitels zunächst konventionelle, diskrete Scans der He-artigen Linien K_α bis K_δ untersucht, um die Güte der nominellen Kalibration der Beamline abzuschätzen. Daraufhin werden im kontinuierlichen Scan die gemessenen Resonanzenergien der He-artigen und Li-artigen Linien bestimmt und mit verfügbaren theoretischen Werten verglichen. Nachdem auftretende Systematiken erklärt und entfernt wurden, werden die Ergebnisse zusammengefasst und diskutiert. Zum Schluss werden anhand der He-artigen Linien die Achse des SDD kalibriert und im Abregungsspektrum die Li-artigen Linien analysiert.

Die Rohdaten können zunächst in einem 2D-Histogramm veranschaulicht werden, sodass auf den Achsen jeweils die Kanäle des SDD und die Monochromatorenenergie aufgetragen sind, während die jeweilige Intensität mittels unterschiedlicher Farben wiedergegeben wird. In Abbildung 3.5 ist unterhalb des Kanals 400 der SDD-Achse das durch die EBIT erzeugte Rauschen und im oberen Bereich die aufgenommenen Resonanzen zu sehen.

4.1 Auswertung diskreter Linienmessungen

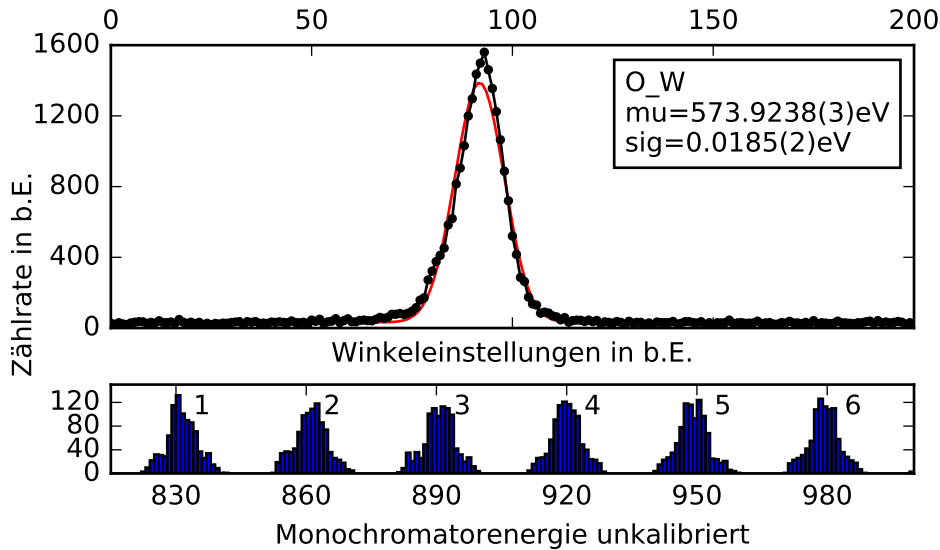


Abbildung 4.1: Oben: Darstellung einer K_α -Resonanz. Jede Projektion eines Datenpunkts auf die Abzisse entspricht einer Winkeleinstellung im Monochromator, die Projektion auf die Ordinate entspricht der Summe aller Messereignisse per Winkeleinstellung. Unten: Verteilung der Zählrate pro Winkeleinstellung ohne Abzug des Untergrunds. Dargestellt sind die ersten 6 Winkeleinstellungen von insgesamt 200.

Diskrete Messungen, in denen prinzipiell nur ein kleines Energiefenster von ≈ 1 eV in 200 gleichmäßigen Schritten vom Monochromator abgefahren wird, werden hier aufgrund ihrer verhältnismäßig guten Reproduzierbarkeit der Resonanzmaxima zur Abschätzung der Güte der Beamline-Kalibrierung ausgewertet. Die einzelnen Gaußkurven (siehe Abbildung 4.1 unten) bilden in der diskreten Messung einzelne Winkeleinstellungen des Monochromatorgitters ab. Somit kann die gesamte Zählrate einer Winkeleinstellung zu einem Kanal für einen Winkel θ_i , mit $i = 1, 2, \dots, 200$ zusammengefasst werden. Ordnet man der Winkeleinstellung θ_1 mit der Anfangsenergie (für K_α -Messung) $E_{\text{start}} = 573.65$ eV und θ_{200} mit $E_{\text{stop}} = 574.25$ eV zu, so erhält man die nominelle Kalibrierung der diskreten Messungen.

Die diskreten Messungen wurden von K_α bis K_δ jeweils 3 bis 4 mal durchgeführt. Die Resonanzmaxima wurden jeweils bestimmt und die Standardabweichung ge-

bildet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.2 und Tabelle 4.1 zusammengefasst.

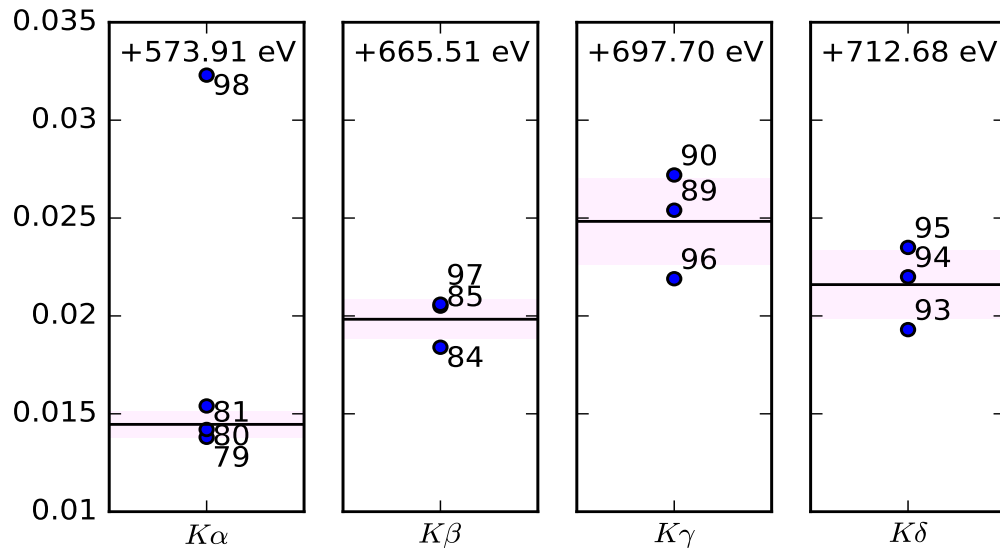


Abbildung 4.2: In dieser Graphik sind die Resonanzenergien einzelner Linienmessungen von $K\alpha$ bis $K\delta$ zusammengefasst. Anhand der Dateinummer kann die zeitliche Abfolge der Scans bestimmt werden. Es wurde über jeden Übergang gemittelt (schwarze Linie) und die Standardabweichung (pink) gebildet. Da die letzte $K\alpha$ -Messung stark vom Rest abweicht wurde diese bei der Bestimmung des Mittelwerts ausgelassen.

Tabelle 4.1: Die nominell kalibrierten diskreten Messungen der Linien $K\alpha$ bis $K\delta$ und die jeweiligen CIQEDMOD-Werte [32] sind hier aufgelistet. Es wurde der Mittelwert der energetischen Verschiebungen der Linien zur Theorie gebildet.

Label	Diskret (eV)	CIQEDMOD (eV)	ΔE (eV)
$K\alpha$	573.9245(7)	573.9614(5)	-0.037
$K\beta$	665.5298(10)	665.5743(3)	-0.044
$K\gamma$	697.7248(22)	712.7221(3)	-0.061
$K\delta$	712.7016(20)	720.8434(3)	-0.021
		Mittelwert:	-0.041(15)

4.2 Nominelle Kalibration der kontinuierlichen Messung

Auch die Kalibrierung der kontinuierlichen Messung kann prinzipiell über die von der Beamline übermittelten nominellen Energien durchgeführt werden. Dazu wird zunächst der Anfang und das Ende des Spektrums untersucht. Man sieht, dass die Zählrate nicht abrupt ansteigt (Stufenfunktion), sondern eher einer Sigmoidfunktion ähnelt. Zusätzlich wird diese Sigmoid-Funktion von einer Gaußfunktion überlagert. Aus einer Modellierung dieser Charakteristik folgte, dass eine Überlagerung einer Gaußkurve mit einem Sigmoid, dessen Symmetriepunkt auf der Symmetrieachse der Gaußkurve liegt, die beobachtete Form des Spektrums beschreibt (siehe Abbildung 4.3).

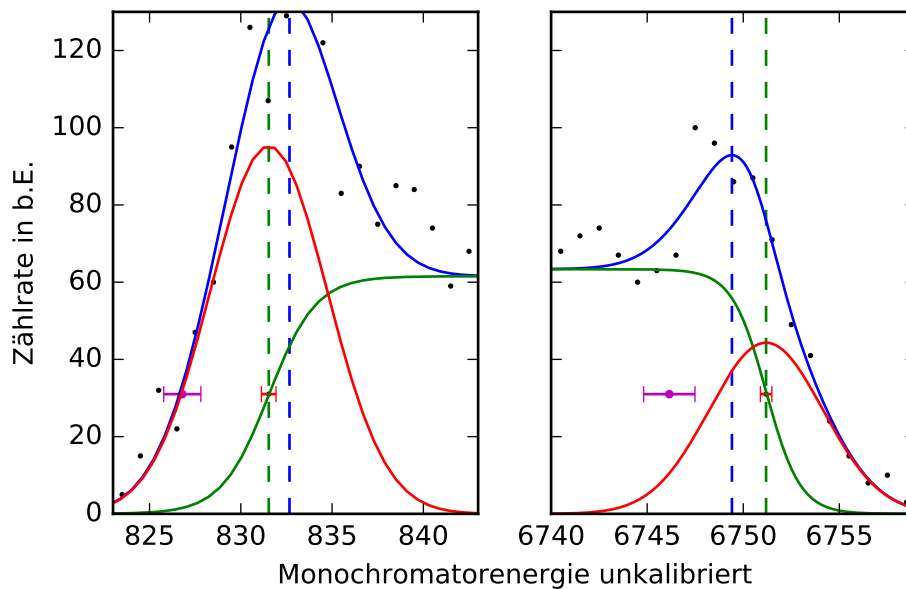


Abbildung 4.3: Die blaue Funktion beschreibt die Überlagerung der Gaußkurve (rot) und der Sigmoid-Funktion (grün). Die roten Punkte beschreiben die Mittelpunkte der Sigmoidfunktionen. Die lilanen Punkte beschreiben die Anfangs- und Endkanäle, welche aus einer Kalibration mit den Resonanzenergien der CIQEDMOD-Werten erfolgen.

Aus einem Fit der überlagernden Funktion können somit die Parameter der zugrundeliegenden Funktionen (Gauß und Sigmoid) bestimmt werden. Der Mit-

34.2. NOMINELLE KALIBRATION DER KONTINUIERLICHEN MESSUNG

telpunkt der Sigmoidfunktion wird als Kalibrationspunkt des Spektrums verwendet.

Eine mögliche Erklärung für das Ansteigen der Zählrate, repräsentiert durch die rote Gaußkurve in Abbildung 4.3, beruht auf einer nicht konstanten Geschwindigkeit der kontinuierlichen Monochromatorgitterbewegung. Diese Vermutung wurde anhand des, von der Beamline mitaufgezeichneten, Datensatzes [23] derselben kontinuierlichen Messung untersucht. Dieser zeichnet die Energie des Monochromators und des Undulators simultan mit einem Zeitstempel auf, sodass die Änderung der Energie über den Messverlauf betrachtet werden kann. Eine syste-

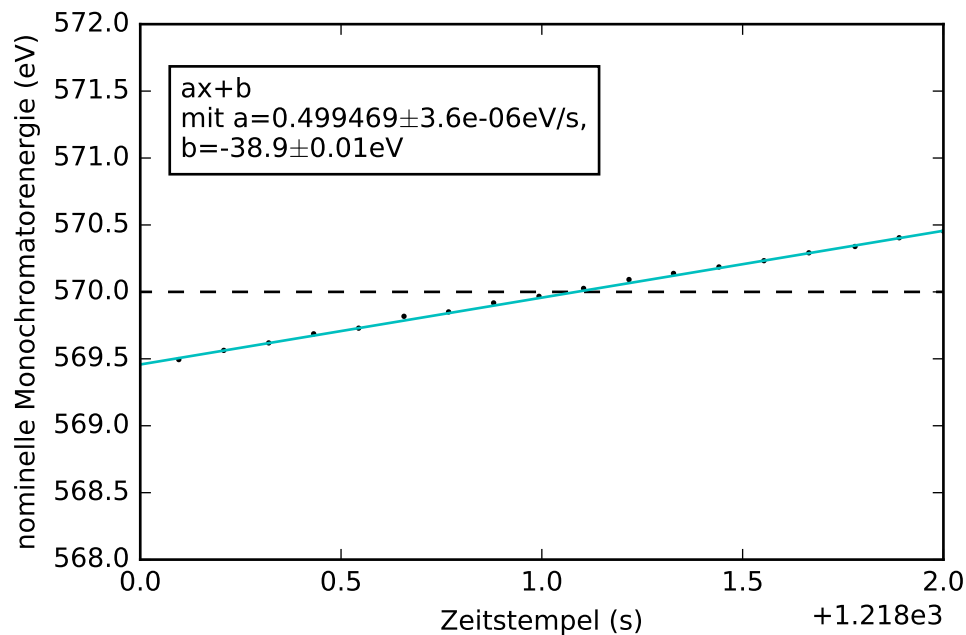


Abbildung 4.4: Die Monochromatorenergien, welche während des Scans direkt von der Beamline mitaufgezeichnet wurden, werden hier über näherungsweise äquidistante Zeitstempel aufgezeichnet. Ein linearer Fit wurde zur Beschreibung dieser Daten aufgetragen.

matische Abweichung zum Fit in der Umgebung der nominellen Startenergie ist nicht beobachtbar. Aus der Steigung des Fits kann jedoch die Winkelgeschwindigkeit des Monochromatorgitters bestimmt werden. Aus dem Fit wurde ein Wert

von

$$v_{\text{mono}} = 0.499469(4) \frac{\text{eV}}{\text{s}} \quad (4.1)$$

ausgelesen. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit dem extern angegebenen Messparameter von 0.5 eV/s .

Mit den Anfangsbedingungen $E_{\text{start}} = x_{\text{start}}$ und $E_{\text{stop}} = x_{\text{stop}}$ kann die lineare Funktion zur nominellen Kalibration als

$$E(x) = \frac{E_{\text{start}} - E_{\text{stop}}}{x_{\text{start}} - x_{\text{stop}}} \cdot x + E_{\text{start}} - \frac{E_{\text{start}} - E_{\text{stop}}}{x_{\text{start}} - x_{\text{stop}}} \cdot x_{\text{start}} \quad (4.2)$$

hergeleitet werden, wobei x die Kanalnummer angibt. Diese Formel wird nun genutzt, um den vom Datenaufnahmesystem verwendeten Kanälen die entsprechende Photonenenergie zuzuordnen.

4.3 Bestimmung beobachteter Resonanzenergien

Es wird zunächst zur Bestimmung der Anregungsenergien das 2D-Histogramm (Abbildung 3.5) als eindimensionales Spektrum betrachtet. Dabei wurden nur Datenpunkte mit einer Zählrate überhalb des Rauschens in das Spektrum eingefügt.

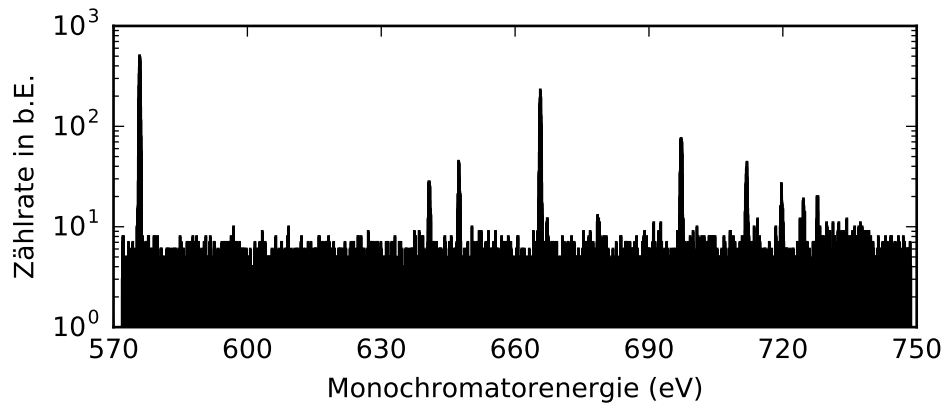


Abbildung 4.5: Übersichtsdarstellung der gemessenen Resonanzen im Bereich von 570 eV nach 750 eV. Auf der Ordinate ist die Anzahl der Messereignisse logarithmisch dargestellt.

Zur Bestimmung der Resonanzmaxima wurden nun die einzelnen Resonanzen mit Gaußfunktionen gefittet. Der Fehler jedes Datenpunktes mit einer Zählrate von N wird abgeschätzt durch \sqrt{N} , was der Fehler einer poissonverteilten Variable ist. Um auch bei Resonanzen mit relativ niedriger Zählrate einen erfolgreichen Fit zu erhalten, werden mehrere Kanäle zu einem zusammengefasst („Rebinning“). Im zweidimensionalen Spektrum kann abgeschätzt werden, wie weit der Untergrund „abgeschnitten“ werden kann (Cut Off), so dass der ausgewählte Bereich das beste Signal zu Rausch-Verhältnis bietet.

Da Übergänge in Niveaus mit hohen Hauptquantenzahlen n an das Ionisationspotential des jeweiligen Ladungszustands konvergieren und daher bei solchen Linien nur wenig Untergrund zwischen benachbarten Resonanzen vorliegt, wurden mehrere Linien in einem einzelnen Fit bestimmt (siehe Graph 4.7).

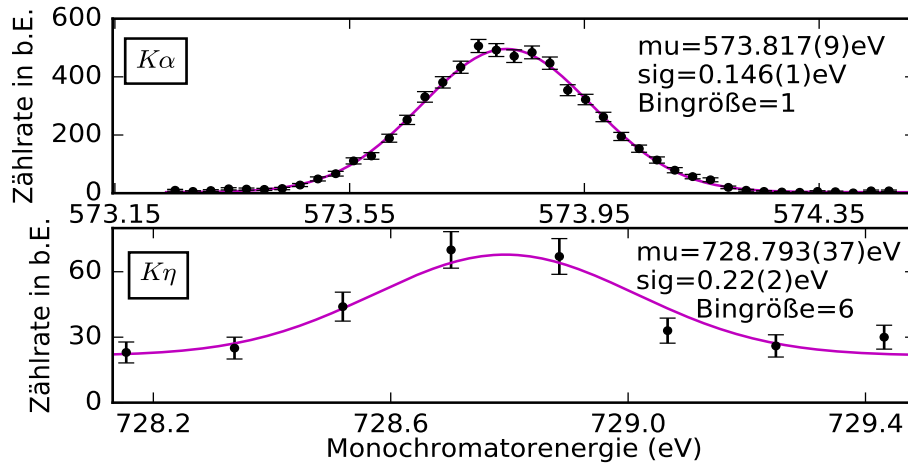


Abbildung 4.6: Vergleich von K_α und K_η . Während K_α bei einer Bingröße von 1 im Maximum eine Zählrate von ~ 500 hat, ist die Zählrate von K_η lediglich bei ~ 70 bei einer sechsfachen Bingröße.

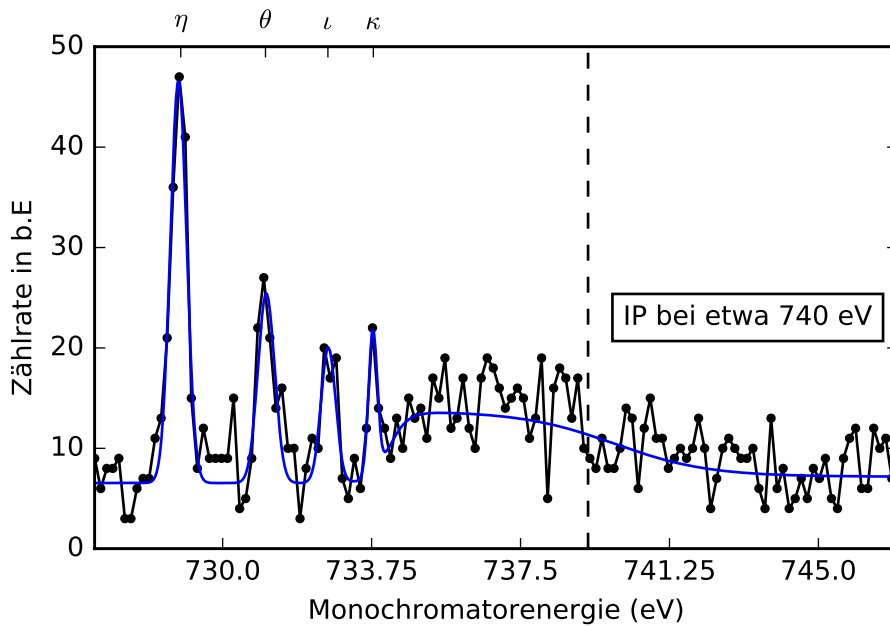


Abbildung 4.7: Im Fit wurden erfasst, die Linien K_η bis K_κ . Zudem ist die Ionisations Grenze mittig im Graphen zu sehen.

Tabelle 4.2: Dokumentation der nominell kalibrierten Resonanzenergien der K-Serie von K_α bis K_κ des He-artigen Sauerstoffs im Vergleich zu vorhandenen Referenzwerten. Die erste Spalte beinhaltet die Anregungsenergien der kontinuierlichen Messung, die zweite Spalte die der diskreten Messungen. Die Spalte der Theorie beinhaltet die theoretischen CIQEDMOD-Werte. In der unteren Hälfte sind die nominellen Resonanzenergien der Li-artigen Linien aufgezeichnet. Diese werden separat in einem späteren Kapitel behandelt.

Label	Kont. (eV)	Diskret (eV)	Theorie (eV)	NIST (eV)	MBPT (eV)
K_α	573.817(9)	573.9245(7)	573.9614(5)	573.9478	573.7094
K_β	665.427(14)	665.5298(10)	665.5743(3)	665.6154	665.3200
K_γ	697.640(18)	697.7248(22)	697.7859(3)	697.7955	697.5237
K_δ	712.588(21)	712.7016(17)	712.7221(3)	712.717	712.4715
K_ϵ	720.657(23)		720.8434(3)	720.8379	720.6154
K_ζ	725.594(29)		725.7432(3)	725.6473	725.6471
K_η	728.793(37)				728.6745
K_θ	730.926(62)				
K_ι	732.497(88)				
K_κ	733.642(59)				
$K\beta_1$	640.057(2)				
$K\beta_2$	646.811(19)				
$K\gamma$	667.027(38)				
$K\delta$	678.745(53)				

4.3.1 Vergleich mit der Theorie

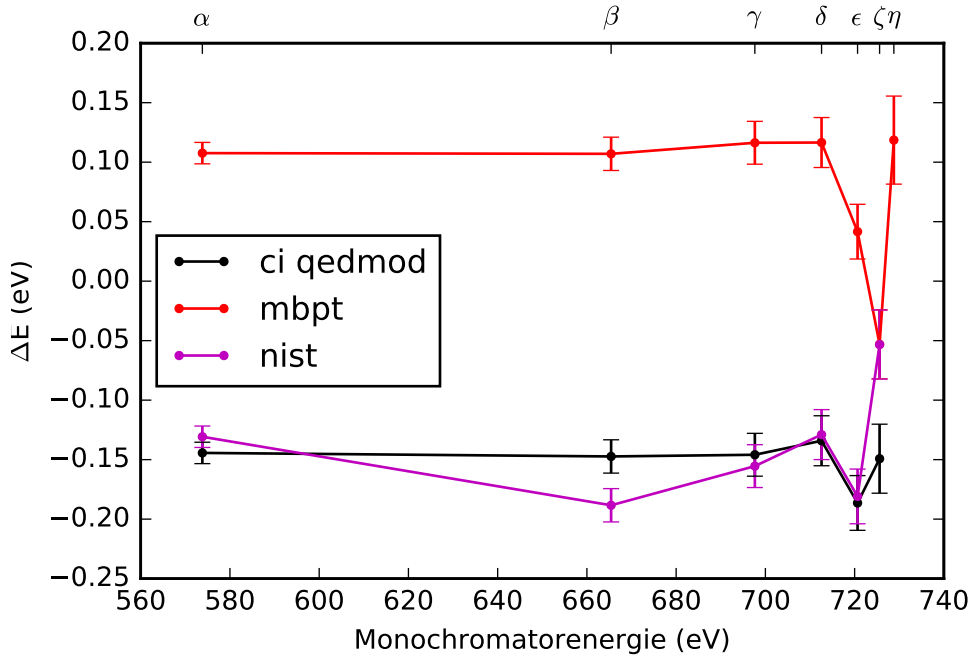


Abbildung 4.8: Es wurden die theoretisch bestimmten Resonanzenergien der K-Serie von den gemessenen nominellen Resonanzenergien abgezogen und dargestellt. Die schwarzen Datenpunkte zeigen die Energiedifferenz zu den CIQEDMOD-Werten. Analog wurden die Differenzen zu Werten aus NIST (lila) und MBPT-Rechnungen (rot) dargestellt.

Die hier zur Verfügung stehenden theoretischen Werte der gemessenen Heartigen Linien sind CI QEDMOD [32], MBPT (FAC) [25] und CI (FAC). Ebenfalls wurden die Messergebnisse mit den vorhandenen NIST Atomic Spectra Database Werten verglichen. Aus den Auswahlregeln der Dipolübergänge können S-Zustände als Endniveaus der hier gemessenen Übergänge ausgeschlossen werden. Durch Berechnungen im Flexible Atomic Code (FAC) konnte festgestellt werden, dass es sich um Übergänge der Art

$$1s^2 \rightarrow [1s_{1/2} n p_{3/2}]_1 \quad (4.3)$$

handeln, wobei n die Hauptquantenzahl des Endniveaus angibt. Für $n=2$, also K_{α} , hat ein solcher Übergang eine Übergangsrate von etwa $3.46 \times 10^{12} \text{ 1/s}$. Der

nächst wahrscheinliche Übergang geht in das Niveau $[1s_{1/2}2p_{3/2}]_2$ und hat mit 3.11×10^{15} 1s eine Rate, welche im Vergleich sieben Größenordnungen kleiner ist. Zur genauen Bestimmung der gemessenen Übergangsenergien des He-artigen Sauerstoffs ist somit keine Betrachtung energetisch benachbarter Übergänge notwendig.

Im Graphen 4.8 sind die Energiedifferenzen zwischen den gemessenen und theoretischen Resonanzenergien dargestellt.

Es kann eine konstante Verschiebung zu den theoretischen CIQEDMOD-Werten beobachtet werden, welche gemittelt über alle Linien einen Wert von $-0.151(16)$ eV ergeben.

Festgestellt wurde nun, dass diskrete Messungen mit einer Abweichung von etwa $-0.041(15)$ eV eine um $0.11(2)$ eV bessere Übereinstimmung zu den theoretischen CIQEDMOD-Werten haben als die nominellen Resonanzenergien der kontinuierlichen Messung. Unter der Annahme, dass die energetische Verschiebung durch die Laufzeit und Verarbeitungszeit des Signals der jeweiligen Position des Gitters entsteht, ergibt sich durch Gleichung 4.1 eine Verzögerung von ~ 220 ms. Die Verschiebung von $-0.041(15)$ eV der stationären Messungen könnte auf einen konstanten Winkelfehler des Inkrementalgebers des Monochromatorgitters beruhen.

Um diese Systematiken zu beheben, wird nun das gemessene kontinuierliche Spektrum über die ersten fünf He-artigen Resonanzenergien mit theoretischen Werten der CIQEDMOD rekaliert. Der über diese Kalibration angegebene Anfangs- und Endkanal der unkalibrierten Monochromatorachse ist in Abbildung 4.3 aufgezeichnet.

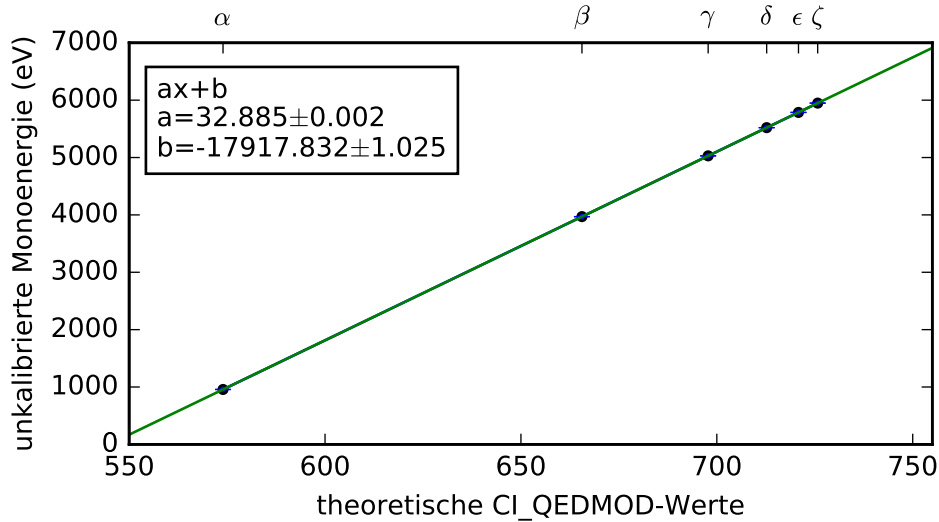


Abbildung 4.9: Lineare Kalibration über CIQEDMOD-Werte und den gemessenen Linien K_α bis K_ζ .

Tabelle 4.3: Dokumentation der Resonanzenergien der kontinuierlichen Messung kalibriert durch CIQEDMOD-Werte. Anbei erneut die zur Verfügung stehenden theoretischen Referenzwerte.

Label	Kont.*(eV)	CIQEDMOD(eV)	NIST(eV)	MBPT(eV)
$K\alpha$	573.961(44)	573.9614(5)	573.9478	573.7094
$K\beta$	665.575(48)	665.5743(3)	665.6154	665.32
$K\gamma$	697.790(50)	697.7859(3)	697.7955	697.5237
$K\delta$	712.740(50)	712.7221(3)	712.717	712.4715
$K\epsilon$	720.808(51)	720.8434(3)	720.8379	720.6154
$K\zeta$	725.746(52)	725.7432(3)	725.6473	725.6471
$K\eta$	728.945(54)			728.6745
$K\theta$	731.078(62)			
$K\iota$	732.650(73)			
$K\kappa$	733.794(61)			

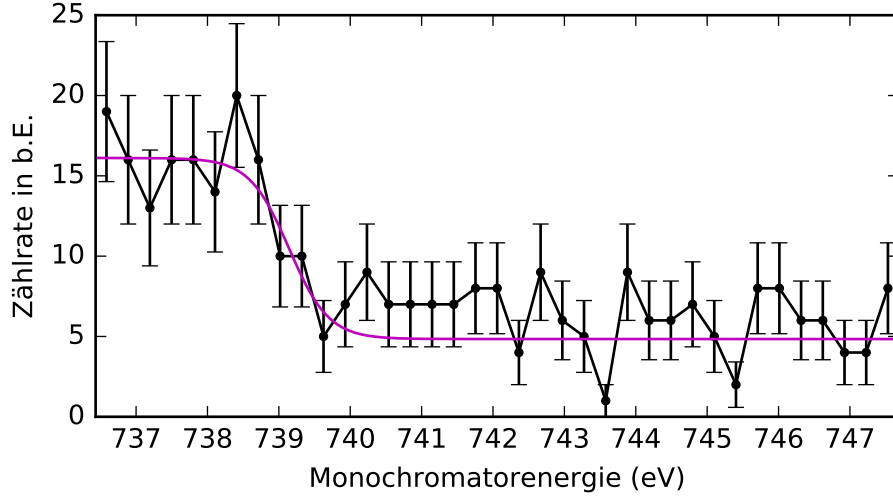


Abbildung 4.10: Darstellung der Ionisationsgrenze im eindimensionalen Spektrum der kontinuierlichen Messung. Durch den Fit mit einer Sigmoidfunktion (li-la) wurde die Ionisationsgrenze bestimmt.

4.4 Ionisationsenergie des heliumartigen Sauerstoffs

Die Ionisationsgrenze des He-artigen Sauerstoffs ist im eindimensionalen Spektrum als eine Art Plateau am Ende des Spektrums beobachtbar. Angenähert durch eine Sigmoidfunktion konnte ein Wert von 739.143(265) eV ausgelesen werden (Abbildung 4.10). Ebenso können die aus der kontinuierlichen Messung bestimmten Linien der K-Serie verwendet werden, um die Ionisationsenergie des He-artigen Sauerstoffs zu bestimmen. Da die Ionisationsenergie im Grunde dem K_{∞} -Übergang entspricht, kann dieser mit Gleichung 2.19 über einen Fit der Funktion

$$K_n = Z_{\text{eff}}^2 E_R \left(\frac{1}{(1 - \delta_{1,s})^2} - \frac{1}{(n - \delta_{n,p})^2} \right) = E_{\text{IP}} - Z_{\text{eff}}^2 E_R \frac{1}{(n - \delta_{n,p})^2} \quad (4.4)$$

hergeleitet werden. Dabei wurde der erste Term zusammengefasst in E_{IP} , was die Ionisationsenergie repräsentiert. Die effektive Kernladungszahl Z_{eff} und der Quantendefekt $\delta_{n,p}$ wurden als weitere Parameter in den Fit eingespeist.

Für die Ionisationsenergie erhält man so einen Wert von 739.327(16) eV. Es muss jedoch angemerkt werden, dass für den Fit ein konstanter Quantendefekt für die P-Zustände angenommen wurde. Tatsächlich ist dieser auch von der Hauptquantenzahl n abhängig.

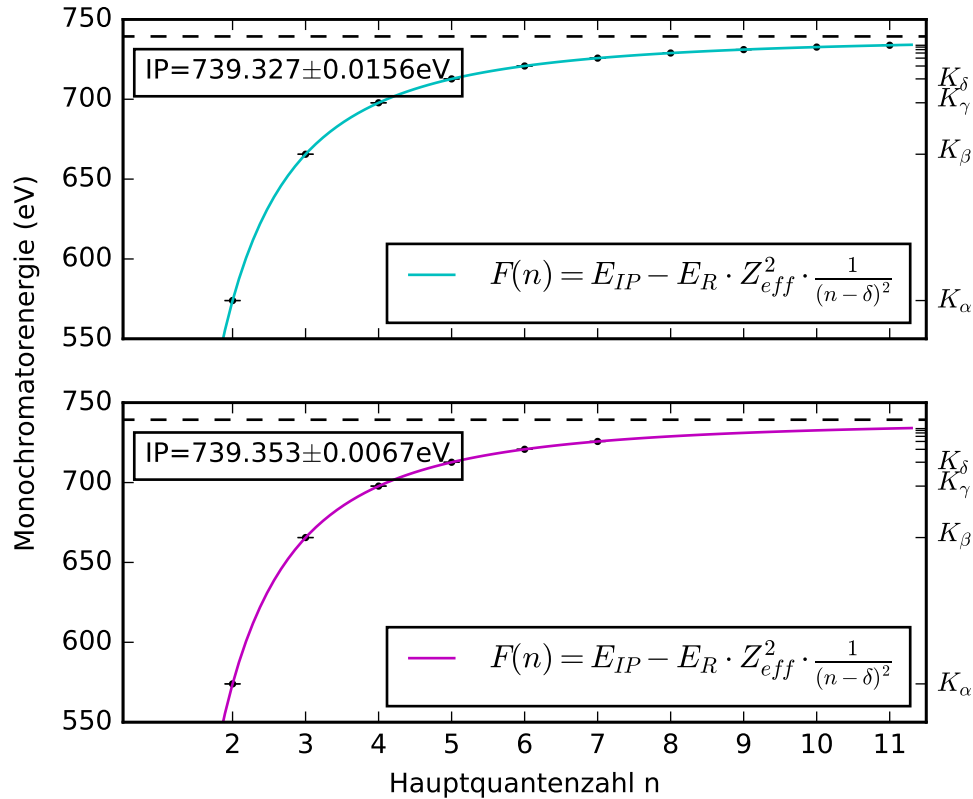


Abbildung 4.11: Dargestellt ist der Fit, welcher den Verlauf der Resonanzenergien über die Hauptquantenzahl n des Endzustands beschreibt, und die Ionisationsenergie (schwarz gestrichelt), welche aus dem Fit entnommen wurde. Der Obere Fit (blau) beinhaltet die über CIQEDMOD kalibrierten Resonanzen. Als Vergleich wurde der selbe Fit (lila) direkt auf die CIQEDMOD-Werte angewendet.

Tabelle 4.4: Dokumentation der bestimmten Fit-Parameter. Zu den Ionisationsenergien sind Referenzen aus NIST und von J. Scofield angegeben.

	Kont.* (eV)	CIQEDMOD (eV)	J.S. (eV)	NIST (eV)
IE	739.327(16)	739.353(7)	739.3	739.32682(6)
Z_{eff}	7.007(4)	7.011(1)		
δ	-0.0098(10)	-0.0108(4)		

Zum Vergleich wurde ebenfalls die selbe Fit-Funktion auf die CIQEDMOD-Werte angewendet (Abbildung 4.11). Man erhält einen Wert von 739.353(7) eV, welcher stark vom ersten Wert abweicht und mit einem kleineren Fehler behaftet ist. Aus der Tabelle der Ionisationsenergien von J. Scofield [30] lässt sich ein Vergleichswert von 739.3 eV auslesen. Da dieser keinen Fehler beinhaltet, kann kein qualitativer Vergleich gezogen werden. Der Wert von 739.32682(6) eV aus der NIST Atomic Spectra Database zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert und befindet sich im 1σ -Bereich der hier bestimmten Ionisationsenergie.

4.5 Lithiumartiger Sauerstoff

Innerhalb der kontinuierlichen Messung sind weitere Resonanzen im zweidimensionalen Spektrum zu sehen. Die naheliegende Vermutung ist, dass es sich um Resonanzen niedrig geladener Sauerstoffionen handelt. In Frage kommen somit lithiumartiger (Li-artig) und möglicherweise beriliumartiger (Be-artig) Sauerstoff.

Diese wurden analog zu den He-artigen Linien ermittelt und gefittet.

Die dominantesten Linien, sind die beiden Resonanzen zwischen He-artigen K_{α} und K_{β} . Aus einem Vergleich mit vorhandenen Theoriewerten kann gefolgert werden, dass es sich hierbei um K_{β} -Anregungen des Li-artigen Sauerstoffs handelt. Aufgrund verschiedener Kopplungen innerhalb des atomaren Systems existieren jeweils zwei dominante Niveaus, dessen Übergangsrate und Energieniveau bis auf wenige Nachkommastellen identisch sind. Diese und weitere Befunde sind in Tabelle 4.5 dokumentiert.

Tabelle 4.5: Die gemessenen Anregungsenergien des Li-artigen Sauerstoffs aus der kontinuierlichen Messung. Als Referenz wurden jeweilige CI und MBPT-Werte angegeben.

label	Term	Kont.* (eV)	MBPT (eV)	CI (eV)
$K\beta_1$	$[(1s2s)_23p_{3/2}]_{3/2;1/2}$	640.205(48)	639.86, 639.87	640.83, 640.84
$K\beta_2$	$[(1s2s)_03p_{1/2,3/2}]_{1/2;3/2}$	646.959(48)	646.72, 646.74	647.43, 640.45
$K\gamma$	$[(1s2s)_24p_{3/2}]_{3/2;1/2}$	667.176(53)	666.86, 666.90	666.23, 666.23
$K\delta$	$[(1s2s)_25p_{3/2}]_{3/2;1/2}$	678.895(59)	678.27, 678.30	677.78, 677.78

Zur Untersuchung der Zerfallsgänge projizieren wir nun einen kleinen, resonanzfreien Energiebereich des anfänglichen 2D-Spektrums auf die SDD-Achse zu einem eindimensionalen Spektrum (siehe Abbildung 3.5). Ein typischer Intensitätsverlauf vom Untergrund am SDD-Detektor ist im unteren Graphen dargestellt. Man kann somit annehmen, dass jede Abweichung von diesem Verlauf eine Photoanregung zu Grunde hat.

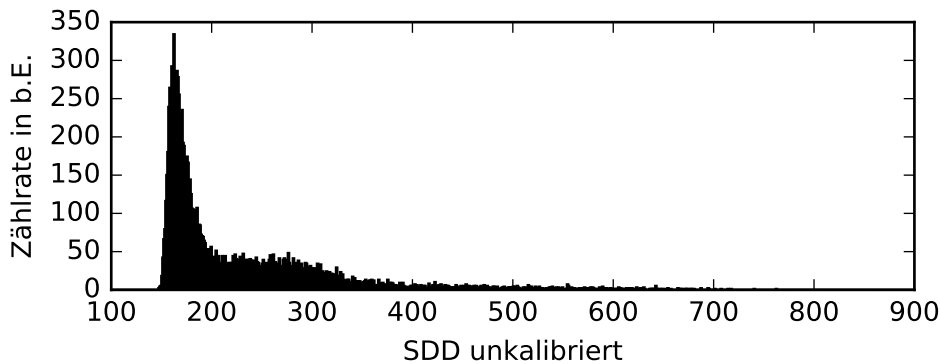


Abbildung 4.12: Es wurde ein resonanzfreier Bereich im Anregungsspektrum auf die SDD-Achse projiziert. Im niederenergetischen Bereich des Spektrums ist ein charakteristischer Verlauf zu sehen.

4.5.1 Kalibration der SDD-Achse

Während für He-artige Systeme Zerfallskanäle abseits des Anregungskanal nicht existent sind, können Li-artige Ionen durch Interaktion mit dem $2s$ Elektron verschiedene Zerfallswege einschlagen.

Zur Untersuchung dieser Zerfallskanäle wird nun die SDD-Achse über die Anregungsenergien der aufgenommenen K-Serie kalibriert. Da die angeregten Zustände der K-Serie mit stark überwiegenderm Anteil direkt in den Grundzustand zerfallen, kann die Anregungsenergie und die Abregungsenergie gleichgesetzt werden.

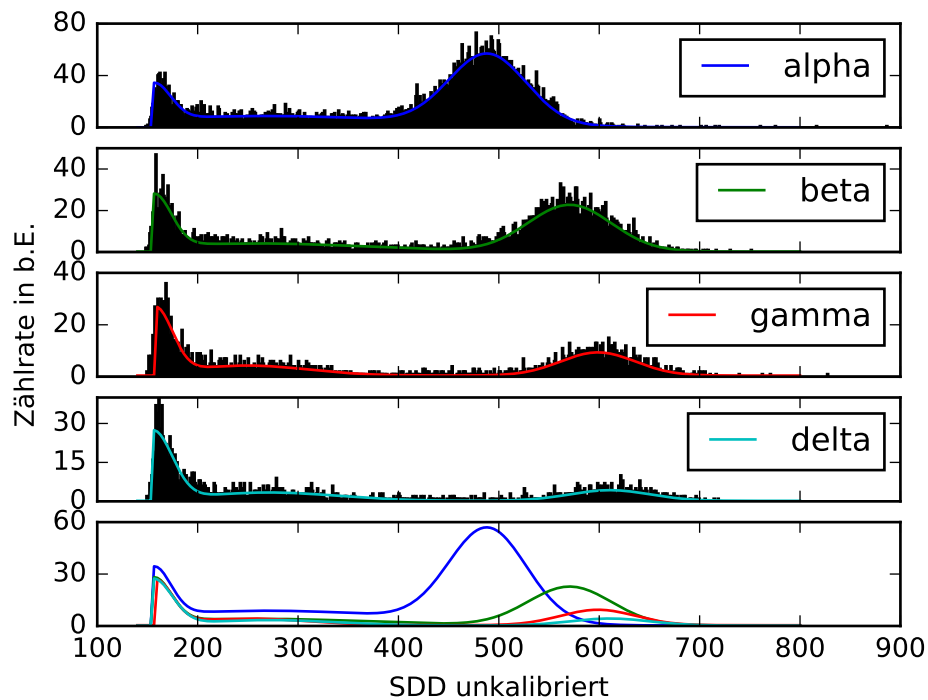


Abbildung 4.13: Die zur Kalibrierung der SDD-Achse verwendeten Linien K_α bis K_δ . Der unterste Graph zeigt die Überlagerung der jeweils angefitzten Funktionen.

Wie man in Graph 4.13 sieht, sinkt die Zählrate auf den Maxima stark mit ansteigender K-Serie-Ordnung. Bei einer Energieauflösung von etwa 120 eV wird die Fitgenauigkeit somit dementsprechend schlecht. Für die Kalibrierung der SDD-Achse verwenden wir daher nur die ersten vier Ordnungen der Serie (Abbildung 4.14).

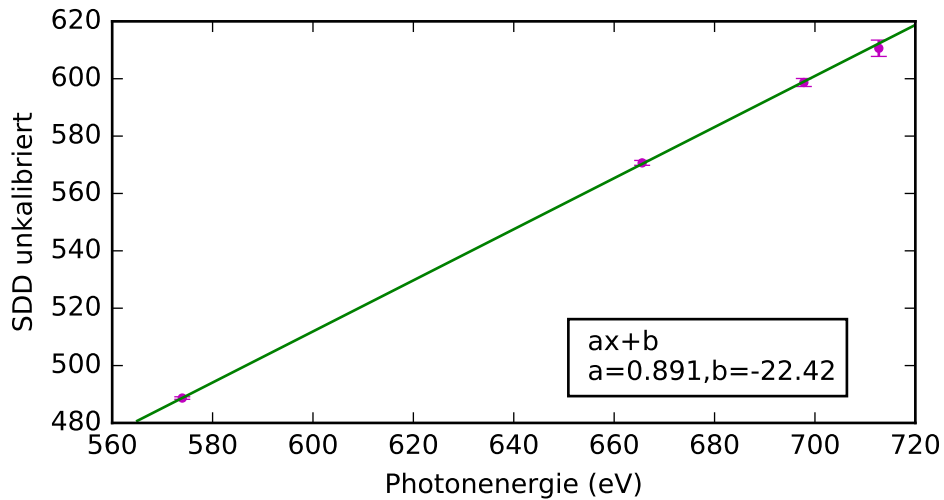


Abbildung 4.14: Für die Kalibrierung der SDD-Achse wurden die Resonanzenergien der theoretischen CIQEDMOD-Werte verwendet, dessen Fehler gegenüber der Fit-Fehler der Anregungslinien vernachlässigbar klein sind.

4.5.2 Zerfallsgänge des angeregten lithiumartigen-Sauerstoffs

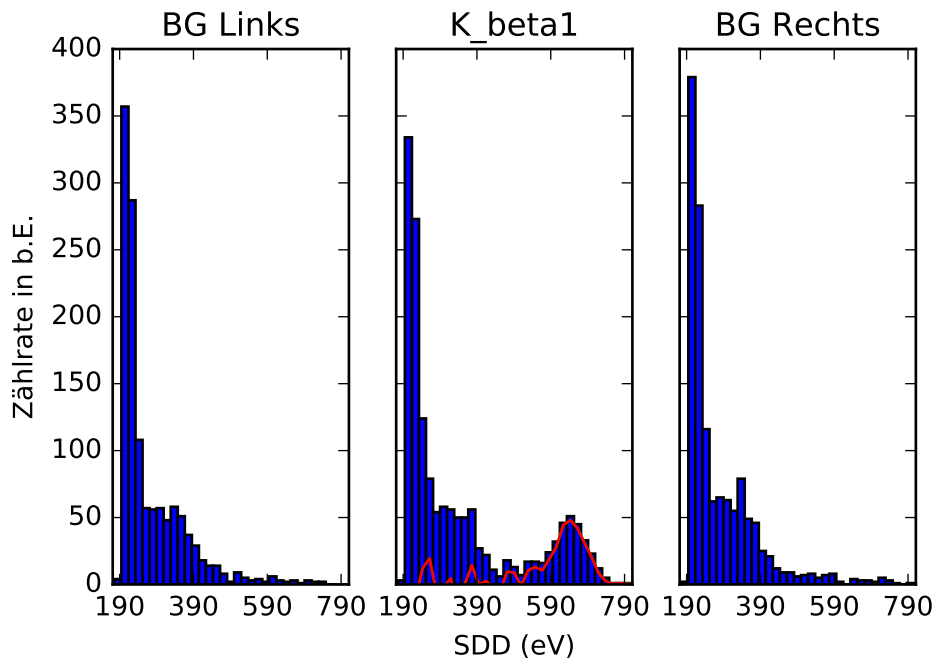


Abbildung 4.15: Mit einer Binggröße von 17 und „Unterdrückung“ des Untergrunds (BG) wurde das Abregungsspektrum der $K_{\beta 1}$ -Linie bestimmt (rot akzentuiert).

Zur Isolierung der Fluoreszenzphotonen wurde nun „rechts“ und „links“ in einem Abstand von 3σ von der Resonanzenergie der Untergrund aufgenommen, pro Kanal gemittelt und vom Abregungsspektrum abgezogen (Abbildung 4.15). Das resultierende Spektrum ist in Graph 4.16 dargestellt. Die Zählrate des Abregungsspektrums und dessen Fehler wurden berechnet durch:

$$n' = n - \frac{n_{\text{BGlinks}} + n_{\text{BGrechts}}}{2} \quad (4.5)$$

$$\Delta n' = \sqrt{n + \frac{1}{2} \sqrt{n_{\text{BGlinks}} + n_{\text{BGrechts}}}} \quad (4.6)$$

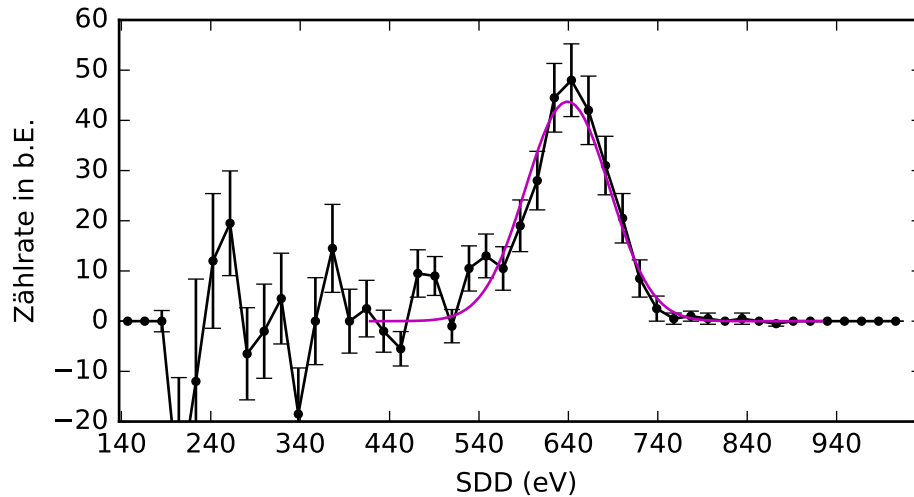


Abbildung 4.16: Gezeigt wird ein Fit der Abregungslinie $K_{\beta 1}$. Wie erwartet steigt der Fehler jedes Messpunktes mit sinkender Kanalnummer an (Gleichung 4.5,4.6).

Der SDD hat eine Energieauflösung von etwa 120 eV (bei ~ 3 keV). Um den genauen Wert abzuschätzen wird die Linienbreite der K_{α} -Abregung als Parameter für die Linienbreite aller weiteren Fits der Li-artigen Linien des Spektrums eingefügt. Es wurde mit einzelnen oder Kombination mehrerer Gaußkurven gefittet (Abbildung 4.17).

Es wird wahrscheinlich auffallen, dass die K_δ -Linie relativ zu den anderen Linien auffällig niederenergetisch. Zur Erklärung dieses Phänomens werden die bestimmten Maxima der Linien zunächst über die im vorherigen Abschnitt hergeleitete Kalibration einer Energie zugeordnet (siehe Tabelle: 4.6). Aus einem gründlichen Vergleich mit vorhandener Theorie wurden den beobachteten Abregungen Übergängen zugeordnet.

Bei der K_δ -Abregung handelt es sich um eine Konsequenz eines interessanten Zerfallswegs. Der Angeregte Zustand $1s^1 2s^1 5p^1$ zerfällt mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht direkt in den Grundzustand. Stattdessen regt sich das $5p$ -Elektron in das $4s$ -Niveau ab, dadurch kann der dipolverbotene $2s \rightarrow 1s$ -Übergang stattfinden ohne die $\Delta l = \pm 1$ -Auswahlregel des Dipolübergangs zu verletzen (TEOP, siehe Kapitel 2.3.2). Ein analoger Prozess findet in der K_{β_1} -Abregung statt. Hier ist jedoch der direkte Übergang in den Grundzustand stärker ausgeprägt. Die K_{β_1} und K_γ Abregungen sind in guter Übereinstimmung mit der Anregungsenergie, da die detektierbaren Zerfallskanäle stark vom Anregungskanal dominiert werden (Abbildung 4.20).

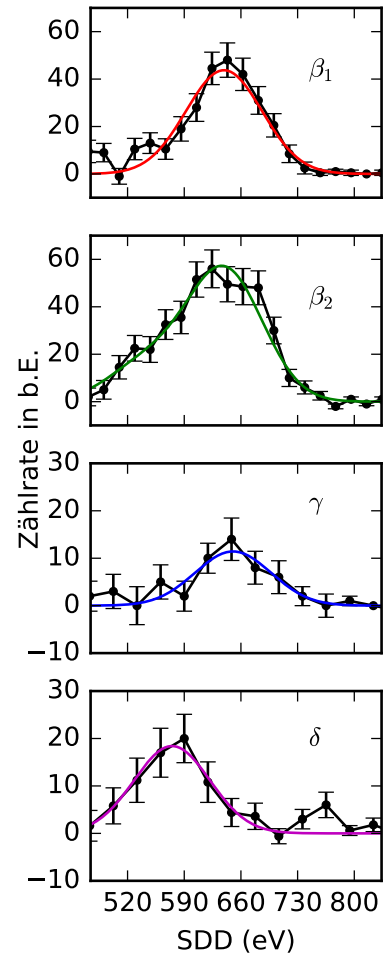


Abbildung 4.17: Fits Li-artiger Linien. Die Zählrate der K_β -Linien wurden mit einem Faktor 17 rebinnt und die K_γ , K_δ mit einem Faktor 26.

Tabelle 4.6: Zusammenfassung der gemessenen Abregungsenergien des Li-artigen Sauerstoffs. Ebenfalls werden die Amplituden (A) der einzelnen Linien und die Nomenklatur der Übergänge angegeben (PD: Photoabregung, TEOP: Zwei-Photon, Ein-Elektron Abregung). Aus Berechnungen mit FAC wurden ebenfalls die Übergangsraten (ÜR) abgelesen.

Label	Line (eV)	A (b.E.)	von	zu	CI (eV)	ÜR ($\frac{1}{s}$)	Art
$K\beta_1$	639.0(4.5)	2.57	[...]3p	1s2 2s1	638.89	4.25e11	PD
$K\beta_2$	639.8(6.0)	0.92	[...]3p	1s2 2s1	645.98	2.76e11	PD
$K\beta_2$	542.0(17.5)	3.26	[...]3p	1s2 3s1	566.68	1.01e11	TEOP
				1s2 3d1	562.26	9.02e10	TEOP
$K\gamma$	650.2(7.8)	0.44	[...]4p	1s2 2s1	655.58	2.04e11	PD
$K\delta$	574.9(7.6)	0.71	[...]5p	1s2 4s1	571.53	1.52e12	TEOP

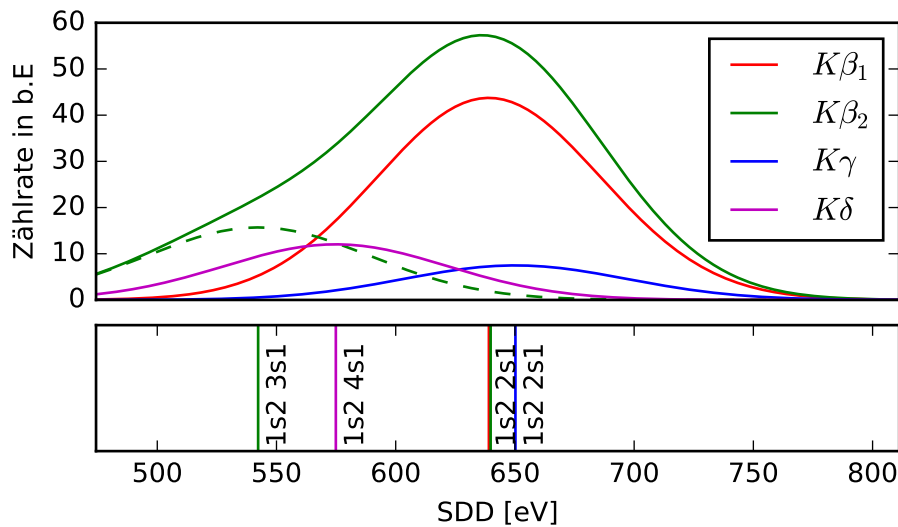


Abbildung 4.18: Oben: Die erfolgreichen Fits der Li-artigen Linien wurden zueinander normiert und hier überlagernd dargestellt. Unten: Die jeweiligen Maxima der Gaußkurven wurden farblich passend aufgezeichnet und über FAC-Berechnungen identifiziert.

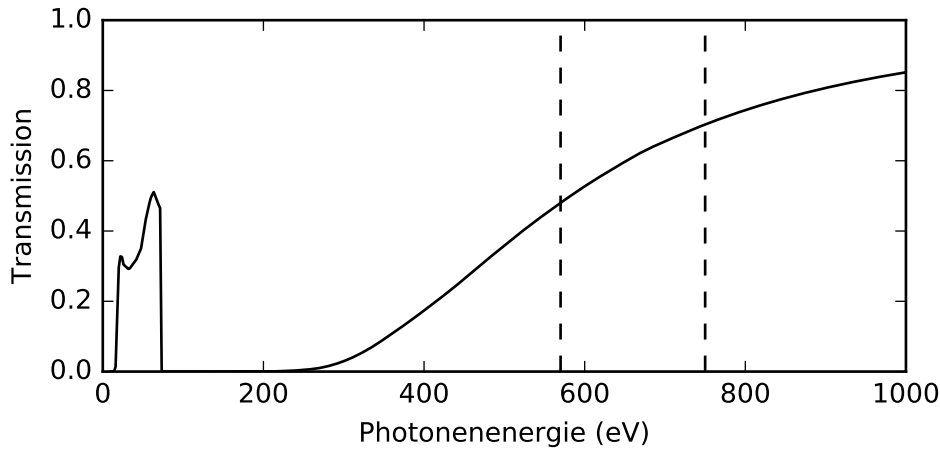


Abbildung 4.19: Transmissionsverhalten eines 0.5 μm dicken Aluminiumfilters im Energiebereich von 10 eV bis 1000 eV. Die gestrichelten Linien umfassen den gemessenen Energiebereich von 550 eV bis 750 eV.

Im Zerfallsweg von $K_{\beta 2}$ (Abbildung 4.18, grün) kann zwischen der Übergangsrate der Photoabregung und der TEOP-Abregung ein Verhältnis von

$$\frac{A_{\text{PD}}}{A_{\text{TEOP}}} = 3.53(35), \quad (4.7)$$

ausgelesen werden, welcher von der FAC-Rechnung von 1.428 signifikant abweicht. Eine zusätzliche Effizienzbetrachtung des Silikondriftdetektors würde den experimentellen Wert nach unten korrigieren und möglicherweise eine Übereinstimmung zur Theorie erzeugen. Ebenfalls muss das Transmissionsverhalten des Aluminium-Filters (Abbildung 4.19), welcher zum Schutz des Detektors eingebaut wurde, zur Evaluation absoluter Abregungsenergien beachtet werden, da eine theoretische Steigung der Transmission im gemessenen Energiebereich von ≈ 0.5 bis ≈ 0.8 erwartet wird (Abbildung 4.19).

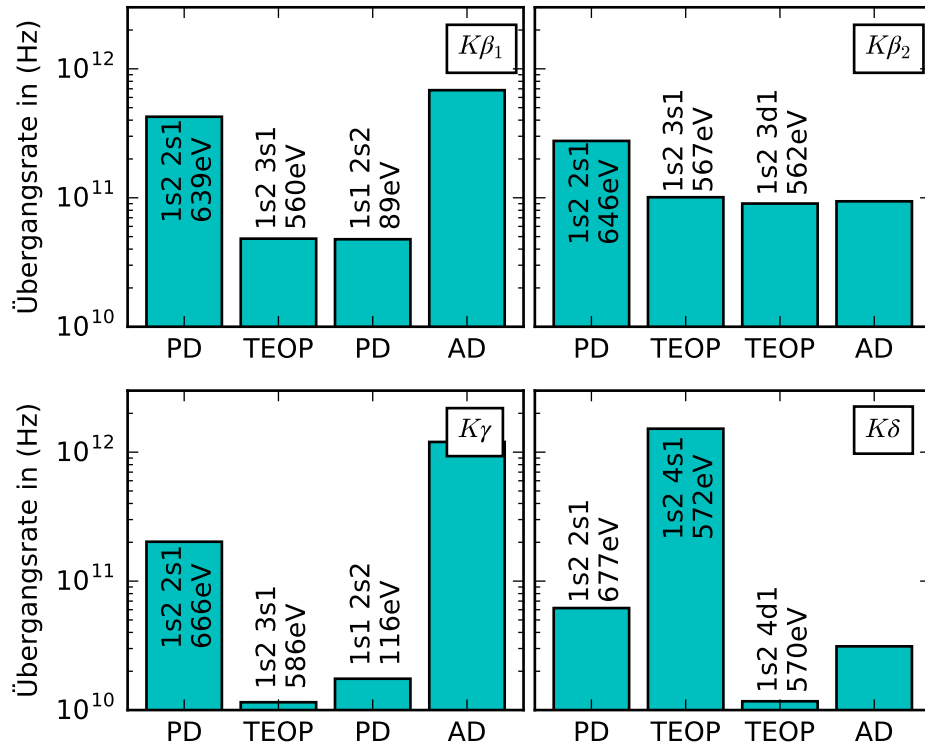


Abbildung 4.20: Für die Abregungsspektren des Li-artigen Sauerstoffs wurden die Übergangsraten im Flexible Atomic Code berechnet. Die dominanten Zerfallskanäle ($TR \geq 10^{10}$ Hz) sind hier im Histogramm logarithmisch aufgezeichnet worden. PD: Photoabregung, TEO: Zwei Elektronen, Ein Photon-Zerfall, AD: Auger-Zerfall.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In einem kontinuierlichen Scan wurden die Resonanzenergien der Übergänge des He-artigen Sauerstoffs von K_α bis K_κ bestimmt. Im Vergleich zu den verfügbaren theoretischen Werten, beobachten wir eine konstante Abweichung der Resonanzenergien in der nominellen Kalibration. Die CIQEDMOD-Werte weichen um etwa ~ -0.15 eV ab. MBPT-Berechnungen zeigen eine Verschiebung von ~ 0.1 eV. Die Resonanzenergien des Li-artigen Sauerstoffs zeigen ebenfalls eine ähnliche Übereinstimmung zu den MBPT-Werten.

Unter den Abregungslinien des Li-artigen Sauerstoffs sind neben Photoabregungen auch Zwei-Elektronen, Ein-Photon-Übergänge detektiert worden. Diese Beobachtungen stimmen mit den Berechnungen im Flexible Atomic Code energetisch überein, sind jedoch mit einem relativ großen Fehler von über 5 eV behaftet. Die Beobachtung, dass der K_δ -Übergang fast ausschließlich über TEOP zerfällt, konnte mit FAC-Berechnungen (Abbildung 4.20) geprüft werden. Ebenso fällt auf, dass der Auger-Zerfallskanal um etwa zwei Größenordnungen kleiner ist als der dominante TEOP-Zerfallskanal.

Solche Li-artigen Übergänge mit unterdrückten Auger-Zerfallskanälen weisen eine natürliche Linienbreite von wenigen meV auf [27]. Dementsprechend ist die praktisch mögliche Genauigkeit einer absoluten Resonanzenergiemessung solcher Linien hoch. Es können Abweichung zur Theorie von Dirac gemessen werden um Berechnungen atomarer Energieniveaus einschließlich quantenelektrodynamischer (QED) Korrekturen in Li-artigen Ionen zu prüfen. Hierfür werden Energieauflösungen von $\Delta E/E < 10^{-6}$ angestrebt. Im Hinblick auf die nächste Strahlzeit an der P04-Beamline bei PETRA III [27], welche dieser Aufgabe gewidmet wird, hoffe ich mit dieser Arbeit einen kleinen Beitrag leisten zu können.

Literaturverzeichnis

- [1] S. Bernitt. Un unexpectedly low oscillator strength as the origin of the fe xvii emission problem. *Nature*, 492(225), 2012.
- [2] S. Bernitt. *Resonante Anregung astrophysikalischer Röntgen-Übergänge in hochgeladenen Eisenionen mit dem Freie-Elektronen-Laser LCLS*. PhD thesis, Max-Planck Institut für Kernphysik, 2013.
- [3] B.M.Laughlin. K-shell photoionization of o4+ and o5+ ions: experiment and theory. *Monthly Notices of the royal astronomical society*, 465, 2017.
- [4] N. Bohr. On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine*, 26(1), 1913.
- [5] DESY. Aerial view of the three petra iii experimental halls.
- [6] DESY. Beamline layout.
- [7] G.Breit. The effect of retardation on the interaction of two electrons. *Ohysical Review*, 34(4), 1929.
- [8] A. Gupta. Probing the mass and anisotropy of the milky way gaseous halo: sight-lines toward mrk 421 and pks 2155-304. *Astrophyscal Space Science*, 352.
- [9] A. Gupta. Probing the mass and anisotropy of the milky way gaseous halo: sight lines towards mrk 421 and pks 2155-304. *Astrophysics and Space Science*, 352(2), 2014.
- [10] T. Hänsch. Two-photon spectroscopy of na 3s-4d without doppler broadening using cw dye laser. *Optics Communications*, 11(1), 1974.

-
- [11] T. Hänsch. Doppler-free two-photon spectroscopy of hydrogen 1s-2s. *Physical Review Letters*, 34(307), 1975.
- [12] W. Heisenberg. Zur quantentheorie der multiplettstruktur und der anomalen zeemaneffekte. *Physical Review A*, 32(1), 1925.
- [13] G. Herrman. Optical theory of thermal velocity effects in cylindrical electron beams. *Journal of applied physics*, 29(2), 1957.
- [14] B. Hodge. Two electron, one-photon x-ray transitions. *Physical Review A*, 16(4), 1977.
- [15] KETEK-GmbH. Analytical x-ray acquisition system-modular.
- [16] S. Kühn. Inbetriebnahme und charakterisierung einer elektronenkanone mit optischem zugang zur strahlachse in einer kompakten elektronenstrahlionenfalle. Master's thesis, Max-Planck Institut für Kernphysik, 2017.
- [17] W. E. Lamb. Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Physical Review*, 72(3), 1947.
- [18] J. Larmor. On the theory of the magnetic influence on spectra; and on the radiation from moving ions. *Philosophical Magazine*, 44(271), 1897.
- [19] H. S. W. Massey. The properties of neutral and ionized atomic oxygen and their influence on the upper atmosphere. *Reports on Progress in Physics*, 9(62), 1942.
- [20] P. Micke. The heidelberg compact electron beam ion trap. *Review Of Scientific Instruments*, 89(063109), 2018.
- [21] K. Mitsuda. The high-resolution x-ray microcalorimeter spectrometer system for the sxs on astro-h. *SPIE Astronomical Telescopes and Instrumentation*, 2010.
- [22] M.J.Seaton. Quantum defect theory. *Reports on progress in physics*, 46(167), 1983.
- [23] J. Seltmann. Internal communications. 2019.
- [24] L. S.Goudsmit. Many-electron selection rules. *Physical Review*, 38(225), 1931.

- [25] C. Shah. Internal communications.
- [26] J. M. Shull. The baryon census in a multiphase intergalactic medium: 30 baryons may still be missing. *The Astrophysical Journal*, 759(1), 2012.
- [27] S. Kühn. High-precision determination of transition energies of lithium-like low z -ions as a stringent test of bound-state qed. P04-Proposal, 3 2019.
- [28] A. Sommerfeld. Zur feinstruktur der wasserstofflinien. geschichte und gegenwärtiger stand der theorie. *Die Naturwissenschaften*, 27, 1940.
- [29] T. Takahashi. The astro.h mission. *AIP Conference Proceedings*, 1248(537), 2010.
- [30] A. Thompson. X-ray data booklet, October 2009.
- [31] M. Tsujimoto. In-orbit operation of the astro-h sxs. *SPIE Astronomical Telescopes and Instrumentation*, 9905, 2016.
- [32] V.A. Yerokhin. Ci-qedmod calculation of energy levels of the 1snp states of he-like nitrogen and oxygen: Internal report. Persönliche Kommunikation, 2019.
- [33] A. Wefer. *Commissioning of the APPLE II Undulator*. Radiation Safety at Synchrotron Radiation Sources.

Erklärung

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

Heidelberg, den ...,