

Fakultät für Physik und Astronomie
Universität Heidelberg

Bachelorarbeit der Physik
eingereicht von

Marc Botz

geboren in Weinheim (Deutschland)

2020

**Untersuchung dielektronischer
LMn-Resonanzen von Neon-artigen
Kryptonionen mit einer
Elektronenstrahl-Ionen-Falle**

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

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die dielektronische Rekombination von hochgeladenem Krypton mithilfe einer Elektronenstrahl-Ionen-Falle (FLASH-EBIT) am Heidelberger Max-Planck-Institut für Kernphysik untersucht. Dabei wurden insbesondere die LMn -Resonanzen verschiedener Ladungszustände betrachtet. Unter Variation der Elektronenstrahlenergie wurde kontinuierlich ein Röntgenspektrum aufgezeichnet. Dabei wurde die Elektronenenergie in zwei Messungen einmal schnell und einmal langsam variiert. Die Betrachtung der so aufgezeichneten dielektronischen Resonanzen und deren Vergleich mit theoretischen Spektren verschiedener Ladungszustände von Krypton, die mithilfe des „Flexible Atomic Code“ (FAC) erzeugt wurden, offenbarte deutliche Unterschiede in den Ladungszustandsverteilungen während der beiden Messungen in Folge der Variationsgeschwindigkeit der Elektronenenergie.

Die Lage und Intensität der dielektronischen LMn -Resonanzen von Neon- und Natrium-artigem Krypton wurde mit dem, während des schnellen Scans aufgenommenen, Spektrum verglichen. Eine gute Übereinstimmung in der Lage der Resonanzen im Elektronenenergiespektrum war festzustellen. Die stellenweise Abweichung der relativen Intensitäten zwischen Theorie und Experiment konnte mit den Beiträgen anderer Ladungszustände, sowie durch Übergänge in Folge von Stoßanregung erklärt werden.

Aus der Stärke der LMM-Resonanzen wurde außerdem die Ladungszustandsverteilung, die während des schnellen Scans vorlag, bestimmt.

Abstract

In this thesis, the dielectronic recombination of highly charged krypton has been investigated using an electron-beam-ion-trap (FLASH-EBIT) at the Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg. Mainly, the LMn -resonances of various charge states have been examined.

The X-ray spectra of the trapped ions were recorded while the electron energy was varied continuously. Two measurements were conducted, differing by the speed of the variation of the electron energy. The investigation of the observed dielectronic resonances and the comparison to theoretical spectra, generated using the „Flexible Atomic Code“(FAC), showed significant differences in the charge state distributions between the two measurements, as a result of the difference in variation speed.

The position and intensity of the dielectronic LMn -resonances of Neon- and Sodium-like krypton was compared to the data, collected during the fast scan. The theoretical position of the resonances was in good agreement to the experimental data. There were some deviations between theory and experiment regarding the relative intensities of the resonances. These disagreements were explained by the contribution of the resonances of other charge states as well as collisional excitation.

Furthermore the strength of the LMM-resonances has been facilitated to estimate the charge state distribution during the fast scan.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Theoretische Grundlagen	9
2.1	Das Wasserstoffatom	9
2.2	Mehrelektronische Systeme	11
2.2.1	Hartree-Verfahren	11
2.2.2	Configuration Interaction	13
2.3	Hochgeladene Ionen	14
2.4	Übergänge bei Hochgeladenen Ionen	14
2.4.1	Stoßionisation	15
2.4.2	Direkte Anregung	16
2.4.3	Radiative Rekombination	17
2.4.4	Dielektronische Rekombination	18
2.5	Theoretische Berechnung mit FAC	20
3	Experimentelle Methode	24
3.1	Die FLASH-EBIT	24
3.1.1	Elektronenstrahlenergie	33
3.1.2	Auflösung der Elektronstrahlenenergie	35
3.2	Messverfahren	36
3.2.1	Vorbereitende Messungen	36
3.2.2	Messung dielektronischer Rekombination von Krypton	42
4	Ergebnisse	47
4.1	Schneller Scan	47
4.1.1	Zuordnung von Elektronenstrahlenergie und Zeitsignal	47
4.1.2	Analyse des Spektrums	50
4.2	Langsamer Scan	67
5	Zusammenfassung und Ausblick	77
	Literaturverzeichnis	82

Kapitel 1

Einleitung

Als hochgeladene Ionen (HCI – highly charged ions) bezeichnet man Ionen, die nicht nur ein- oder zweifach geladen sind, sondern den Großteil ihrer Elektronenhülle verloren haben. Entgegen der alltäglichen Erfahrung auf der Erde, liegt der Großteil der sichtbaren Materie im Universum in der Form solcher Ionen als Bestandteil heißer Plasmen vor (Fang & Canizares, 2000). Entsprechend interessant ist die Untersuchung dieser Ionen für die Interpretation astronomischer Beobachtungen.

Die Zusammensetzung dieser Plasmen, HCI in Verbindung mit freien Elektronen, führt dazu, dass sich die von ihnen emittierten Spektren stark von denjenigen kalter Materie unterscheiden. So ist ein Strahlungsmechanismus, der in diesem Zusammenhang eine große Rolle spielt, die dielektronische Rekombination. Bei dieser rekombiniert ein freies Elektron mit einem hochgeladenen Ion unter Anregung eines Hüllenelektrons. Die in der folgenden Relaxation in den Grundzustand emittierte Strahlung ist charakteristisch für die Ionenspezies, die im beobachteten Plasma enthalten sind, sowie für die Eigenschaften des Plasmas wie etwa die Temperatur (Dubau & Volonte, 1980) und damit nützlich für die Diagnostik astrophysikalischer Plasmen.

Allerdings haben die abgestrahlten Photonen typischerweise, aufgrund der nur in geringem Maße kompensierten Kernladung Z der Ionen, eine Energie, welche im UV- oder Röntgenbereich liegt. Auch andere charakteristischen Emissionen der HCI liegen daher in diesen hochenergetischen Bereichen. Wegen der starken Absorption durch die Atmosphäre in diesen Spektralbereichen (Roedel, 2013) ist die Detektion dieser Strahlung bei der Beobachtung astronomischer Objekte mit Bodenteleskopen schwierig. Mit dem Start der ersten Satelliten mit hochauflösenden Röntgenteleskopen, XMM-Newton (Jansen et al., 2001) und Chandra (Weisskopf, Tananbaum, Van Speybroeck

& O'Dell, 2000), am Ende des 20. Jahrhunderts gewann die Untersuchung der Spektren hochgeladener Ionen dann massiv an Bedeutung.

Bei vielen Strahlungsquellen, die von diesen Satelliten untersucht wurden, entdeckte man Linien, die sich mit dem Vorhandensein hochgeladener Ionen erklären ließen. So fand man beispielsweise an vielen Orten des Sonnensystems Röntgenstrahlung in Folge von Ladungsaustausch, einem weiteren wichtigen Strahlungsmechanismus bei HCI, bei dem ein Elektron von einem neutralen Atom auf das Ion übertragen wird und anschließend in den Grundzustand fällt (Rapp & Francis, 1962). Diese Strahlung entsteht überall dort, wo HCI aus dem solaren Wind auf kalte, neutrale Materie treffen, unter anderem in den Atmosphären von Jupiter (Gladstone et al., 2002) und Mars (Dennerl, 2002).

Die Zuordnung dieser Linien gelang oftmals mithilfe theoretischer Berechnungen oder den bereits vorhandenen experimentellen Untersuchungen von HCI.

Doch es gab längst nicht für alle relevanten Ionenspezies experimentelle Befunde. So beobachtete man etwa in den Röntgenspektren mehrerer Galaxien eine für lange Zeit unidentifizierte Linie bei einer Energie von 3,5 keV, über deren Ursprung in verschiedene Richtungen spekuliert wurde. Ein Vorschlag etwa war, dass es sich um eine Emissionslinie steriler Neutrinos, ein Kandidat für die Erklärung dunkler Materie (Dodelson & Widrow, 1994), handelte. Eine mögliche Erklärung lieferte dann ein Laborexperiment mit hochgeladenem Schwefel (Shah et al., 2016); die Linie entstand durch Ladungsaustauschprozesse von vollständig ionisiertem Schwefel, S^{16+} , welcher häufig im stellaren Medium zu finden ist.

Auch die theoretischen Berechnungen liefern nicht immer Ergebnisse, die sich im Einklang mit den astronomischen Beobachtungen und experimentellen Ergebnissen befinden. Ein Beispiel dafür ist eine Diskrepanz zweier Linienstärken bei der dielektronischen Rekombination in hochgeladenem Eisen (Shah et al., 2019). Die beobachteten relativen Linienstärken der 3D- und 3C-Linien stimmen dabei nicht mit den theoretischen Berechnungen überein, die mit mehreren Methoden durchgeführt wurden.

Diese beiden Beispiele zeigen, wie wichtig eine experimentelle Untersuchung der Übergänge in HCI für die Interpretation astronomischer Beobachtungen und Verifikation theoretischer Modelle ist.

Eine hervorragende Möglichkeit hochgeladene Ionen im Labor zu untersuchen, bietet die Elektronenstrahl-Ionen-Falle – kurz EBIT (Electron Beam Ion Trap). In ihr können HCI sowohl erzeugt, als auch zur weiteren Untersuchung gefangen gehalten werden. Neutrales Gas wird in die Falle eingespeist

und durch einen, mithilfe eines starken Magnetfelds komprimierten, Elektronenstrahl sukzessive ionisiert, bis die Energie der Elektronen nicht mehr zur weiteren Ionisation ausreicht. Die erzeugten Ionen werden durch das Raumladungspotential des Elektronenstrahls radial gefangen gehalten. Axial wird die Bewegung der Ionen durch mehrere Driftröhren eingeschränkt, wodurch insgesamt ein dreidimensionaler Potentialtopf erzeugt werden kann.

In dieser Arbeit wurde das Spektrum von hochgeladenem Krypton mit solch einer Falle untersucht, wobei besondere Aufmerksamkeit der dielektronischen Rekombination galt.

Mit einer Atommasse, die größer als diejenige von Eisen ist, entsteht Krypton nicht durch Kernfusion in Sternen. Stattdessen wird es auf natürlichem Wege hauptsächlich während Supernovae oder in Folge von Neutroneneinfang in Riesen erzeugt (Burbidge, Burbidge, Fowler & Hoyle, 1957). Daher lassen sich aus dem Massenanteil, den Krypton an Sternen und dem interstellaren Medium hat, Aussagen zur stellaren Evolution treffen. Der Nachweis von Krypton ist aufgrund seiner Seltenheit jedoch nicht besonders einfach. So liegt der Massenanteil von Krypton bei der Sonne gerade einmal bei etwa 10^{-7} (Werner, Rauch, Ringat & Kruk, 2012). Dennoch lässt es sich gerade als Bestandteil weißer Zwerge identifizieren (Werner et al., 2012). Speziell bei Krypton gibt es etliche Ladungszustände, deren Spektren noch nicht experimentell aufgenommen wurden, vor allem Ladungszustände mit relativ vielen verbliebenen Elektronen. Deswegen wurden in diesem Experiment Ladungszustände mit abgeschlossener L-Schale betrachtet, primär Kr^{26+} .

Die dielektronische Rekombination ist dabei besonders interessant. Die Stärke der beobachteten dielektronischen Rekombination hängt sowohl von den im Plasma vorhandenen Ladungszuständen, als auch der Elektronengeschwindigkeit ab. Durch den Vergleich theoretischer, oder durch Labormessungen generierter, Spektren verschiedener Ladungszustände lassen sich diese beiden charakteristischen Eigenschaften astrophysikalischer Plasmen bestimmen. Für eine Labormessung, wie sie im Zuge dieser Arbeit durchgeführt wurde, lässt sich durch eine Variation der Energie der Elektronen, die mit den hochgeladenen Ionen interagieren, die Stärke der dielektronischen Rekombination für viele verschiedene Elektronenenergie bestimmen. Ein Vergleich mit theoretischen Berechnungen kann dann dazu dienen, die Ladungszustandsverteilung während der Labormessung festzustellen. Mit dieser Information lassen sich dann die Spektren der einzelnen Ladungszustände bestimmen und mit den theoretischen Berechnungen vergleichen. Diese Daten können dann als Maßstab für astronomische Beobachtungen dienen. Zudem kann der Vergleich der experimentellen Daten mit verschiedenen Modellrechnungen zur

Überprüfung atomphysikalischer Modelle herangezogen werden.

Im weiteren Verlauf der Arbeit werden zunächst einige theoretische Grundlagen zu hochgeladenen Ionen erklärt und Möglichkeiten zur theoretischen Berechnung der von HCI emittierten Spektren diskutiert. Anschließend wird das Funktionsprinzip der verwendeten FLASH-EBIT erläutert und der experimentelle Ablauf besprochen. Zuletzt werden die aufgenommenen Spektren analysiert und mit theoretischen Berechnungen verglichen, wodurch die vorhandenen Ladungszustände und die Lage der dielektronischen Resonanzen im Elektronenenergiespektrum bestimmt werden. In der Zusammenfassung wird noch ein Anhaltspunkt zur Fortsetzung der Untersuchung von hochgeladenem Krypton gegeben.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

Für das Verständnis des, in dieser Arbeit vorgestellten, Experiments und den Vergleich der dabei aufgenommenen Daten mit theoretischen Berechnungen, ist es wichtig, sich zunächst mit einigen Grundlagen der Atomtheorie auseinanderzusetzen, um dann die bei hochgeladenen Ionen auftretenden Prozesse zu verstehen. Insbesondere ist eine genaue Kenntnis der Energiestruktur der beobachteten Systeme notwendig.

2.1 Das Wasserstoffatom

Das einfachste vorstellbare atomare System ist der atomare Wasserstoff. Dabei handelt es sich um einen Kern, bestehend aus einem einzelnen Proton, umgeben von einer Elektronenhülle, die lediglich ein einzelnes Elektron enthält.

Diese einfache Struktur erlaubt eine exakte Berechnung der möglichen Wellenfunktionen des Hüllenelektrons und der Energien dieser Zustände.

Um die Wellenfunktionen Ψ eines quantenmechanischen Systems zu bestimmen, löst man die Schrödingergleichung (Schrödinger, 1926):

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

Dabei ist der Hamiltonoperator \hat{H} abhängig von dem Potential $V(\vec{r}, t)$, in dem sich das betrachtete Testteilchen mit der Masse m , dessen Wellenfunktion bestimmt werden soll, befindet:

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

Für das Wasserstoffatom ergibt sich das Potential aus der Coulombanziehung zwischen Elektron und Kern:

$$V(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r}|} \quad (2.3)$$

mit dem Abstand zwischen Kern und Elektron \vec{r} , der Elementarladung e , der Dielektrizitätskonstante ϵ_0 und der Kernladungszahl Z , welche für das Wasserstoffatom den Wert 1 annimmt.

Setzt man dieses Potential in die Schrödingergleichung 2.1 ein, ergibt sich eine analytisch lösbare Differentialgleichung. Deren Lösung, unter Separation der Wellenfunktion in einen Radial- R_{nl} und einen Winkelanteil $Y_{lm}(\Theta, \Phi)$, lautet (Demtröder, 2010)

$$\Psi(\vec{r}, t) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\Theta, \Phi) \quad (2.4)$$

Bei dem Winkelanteil $Y_{lm}(\Theta, \Phi)$ handelt es sich um die Kugelflächenfunktionen (Müller, 2006). Der Radialanteil lautet (Demtröder, 2010)

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

mit den Laguerre-Polynomen L_{n+l}^{2l+1} , einer Normierungskonstante D_{nl} und dem klassischen Bohrradius a_0 (Bohr, 1913).

Bei den hier eingeführten Indizes, n , l und m handelt es sich um die Haupt-, Drehimpuls- und die Magnetquantenzahl des Zustands.

Um aus dieser Lösung für die Wellenfunktion des Elektrons die Energie E des Zustandes zu erhalten, gilt es noch die stationäre Schrödingergleichung (Schrödinger, 1926),

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = E\Psi(\vec{r}, t) \quad (2.6)$$

zu lösen. Damit erhält man für die Energieniveaus des Elektrons

$$E = -\frac{e^2Z^2}{8\pi\epsilon_0a_0n^2} = -\frac{Z^2}{n^2}\text{Ry} \quad (2.7)$$

mit der Rydbergenergie $\text{Ry} = 13,6\text{ eV}$ (Bohr, 1913). Also ist für das Wasserstoffatom das Energieniveau des Elektrons lediglich abhängig von der Haupt-

quantenzahl und entartet bezüglich der Drehimpuls- und Magnetquantenzahlen.

2.2 Mehrelektronische Systeme

Im Gegensatz zum Wasserstoffatom, lassen sich bei mehrelektronischen Systemen, etwa den hier untersuchten hochgeladenen Ionen, die Wellenfunktionen $\Psi(\vec{r}, t)$ der Elektronen, sowie die Energieniveaus des Systems nicht mehr exakt berechnen, es handelt sich um Vielkörperprobleme. Da eine analytische Lösung der Schrödingergleichung 2.1 nicht mehr möglich ist, müssen Näherungsverfahren angewendet werden. Dieser Abschnitt orientiert sich an dem entsprechenden Kapitel in (Demtröder, 2010).

Der im vorigen Kapitel angesprochene Hamiltonoperator 2.2 muss nun aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen untereinander modifiziert werden. Der Hamiltonoperator des gesamten Systems lässt sich nun als Summe der Ein-Elektron-Hamiltonoperatoren darstellen, mit einem zusätzlichen Term, der die Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigt. Im nicht-relativistischen Fall lautet er:

$$\hat{H}_{tot} = - \sum_i \left(\frac{\hbar}{2m} \Delta_{\vec{r}_i} + V(\vec{r}_i) \right) + \sum_{j>i} \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} \quad (2.8)$$

2.2.1 Hartree-Verfahren

Das Hartree-Verfahren ist ein iteratives Verfahren zur näherungsweise Bestimmung der Wellenfunktionen und Energieniveaus der Elektronen bei Mehrelektronensystemen.

Dazu wird im ersten Schritt ein einzelnes Hüllenelektron i betrachtet. Für dieses wird ein sphärisches Potential $V^{(0)}(r)$ angenommen, welches grob die Abschirmung des Kernes durch die übrigen Hüllenelektronen berücksichtigt und in die Schrödingergleichung 2.1 eingesetzt. Diese gibt dann eine Wellenfunktion $\Psi_i^{(0)}(\vec{r}_i, t_i)$ für das betrachtete Elektron aus. Dieser Schritt wird für alle Elektronen i wiederholt, bis man also schließlich für jedes eine erste Abschätzung für die Wellenfunktion $\Psi_i^{(0)}(\vec{r}_i, t_i)$ hat.

Aus diesem Satz an Wellenfunktionen wird dann für jedes Hüllenelektron i beim Abstand r_i vom Kern, ein neues Potential berechnet. Dieses ergibt sich aus den zuvor bestimmten Wellenfunktionen $\Psi_j^{(0)}(\vec{r}_j, t_j)$ der übrigen Hüllenelektronen j über deren mittlere Ladungsverteilung:

$$V_i^{(1)}(r_i) = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{Z}{r_i} - \sum_{j \neq i} \int \frac{|\Psi_j^{(0)}(\vec{r}_j, t_j)|^2}{r_{ij}} dt_j \right] \quad (2.9)$$

Für jedes Elektron i setzt man dieses neue Potential wieder ein und erhält so einen neuen Satz an Wellenfunktionen $\Psi_i^{(1)}(\vec{r}_i, t_i)$. Aus diesen kann man wieder für jedes Elektron wieder ein Potential konstruieren.

Dieses Verfahren wird nun so oft wiederholt, bis das eingesetzte Potential zu Wellenfunktionen führt, die dieses Potential, innerhalb gewisser Fehlergrenzen, wieder reproduzieren.

Die Gesamtwellenfunktion des Systems wird dann aus den Eielektron-Wellenfunktionen zusammengesetzt. Aufgrund des Pauli-Prinzips (Altunbulak & Klyachko, 2008) muss dabei die Gesamtwellenfunktion gegenüber der Vertauschung zweier Elektronen antisymmetrisch sein. Dies kann mit der Konstruktion über die sogenannte Slater-Determinante (Demtröder, 2010) sichergestellt werden

$$\Psi_{\text{tot}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = C \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_N) \\ \Psi_2(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_N(\vec{r}_1) & \Psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.10)$$

Hierbei steht C für eine Normierungskonstante. Die Energie des Systems erhält man dann wieder aus der Lösung der stationären Schrödingergleichung 2.6.

Hartree-Fock-Verfahren

Der Unterschied zum Hartree-Verfahren liegt beim Hartree-Fock-Verfahren in der Berücksichtigung des Spins der Elektronen. Jede Eielektron-Wellenfunktion lässt sich nämlich als Produkt des Ortsanteils $\phi(\vec{r})$ und des Spinanteils $\chi(\vec{s})$ schreiben:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{s}) = \phi(\vec{r})\chi(\vec{s}) \quad (2.11)$$

Im vorherigen Abschnitt wurde lediglich der Ortsanteil berücksichtigt. Die Berücksichtigung des Spinanteils führt zu deutlich genaueren Ergebnissen. Abgesehen von dieser Ersetzung der Wellenfunktion, folgt das Verfahren den gleichen Prinzipien, wie das Hartree-Verfahren.

Um noch genauere Ergebnisse zu erreichen, müssen relativistische Effekte

Beachtung finden. Statt des Hamiltonoperators 2.8 verwendet man dann den relativistischen Dirac-Coulomb-Breit-Operator (Dyall, 1994). Man spricht dann vom Dirac-Hartree-Fock-Verfahren.

2.2.2 Configuration Interaction

Um die Korrelation der Hüllenelektronen eines Mehrelektronensystems bei der Bestimmung der Energieniveaus des Systems zu berücksichtigen, kann die Configuration Interaction (CI) (Nesbet, 1955) angewendet werden. Bei dieser wird die Gesamtwellenfunktion eines atomaren Zustands als Summe aus Slater-Determinanten Ψ_k dargestellt, welche beispielsweise mit den oben beschriebenen Hartree-Methoden bestimmt werden können.

$$\Psi_{\text{CI}}(\vec{r}, \vec{s}) = \sum_k c_k \Psi_k \quad (2.12)$$

Jede der Determinanten Ψ_k steht dabei für eine Konfiguration des Systems, also für eine bestimmte Verteilung der Elektronen auf die verschiedenen möglichen Energieniveaus. Diese werden mit den Faktoren c_k gewichtet.

Bei der Bestimmung der Energie des Zustands mithilfe der stationären Schrödingergleichung 2.6 treten nun auch Energiebeiträge auf, die durch die Interaktion der einzelnen Konfigurationen zustande kommen. Diese Beiträge sorgen für ein deutlich genaueres Ergebnis resultieren wiederum in einem genaueren Ergebnis bei der Bestimmung der Energie des Systems. Die einzelnen Faktoren c_k werden dabei durch die Diagonalisierung des Gesamt-Hamiltonoperators 2.8 bestimmt.

Je größer die Anzahl der berücksichtigten Konfigurationen Ψ_k , desto genauer wird die erhaltene Energie. Bei der Berücksichtigung aller möglichen Konfigurationen ist diese Methode prinzipiell sogar exakt. Allerdings skaliert die Dimension der Hamiltonmatrix zur Lösung des Eigenwertproblems zur Bestimmung der Energie des Systems exponentiell mit der Anzahl der Konfigurationen (Helgaker, Jorgensen & Olsen, 2014), weshalb die Genauigkeit der Methode praktisch durch die verfügbare Rechenleistung begrenzt ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die theoretischen Spektren mithilfe des „Flexible Atomic Code“ (FAC) berechnet. Bei diesem wird die Methode der Configuration Interaction angewendet. Bei der Bestimmung der Wellenfunktionen wurde die Breit-Wechselwirkung berücksichtigt und der relativistische Dirac-Coulomb-Hamiltonoperator verwendet.

Der FAC wurde deshalb ausgewählt, weil mit diesem eine große Zahl verschiedener Prozesse berechnet werden kann. Außerdem ist er benutzerfreundlich

genug, um im Rahmen dieser Arbeit den Umgang mit diesem zu erlernen und die benötigten theoretischen Spektren persönlich zu berechnen.

2.3 Hochgeladene Ionen

Um das durchgeführte Experiment zu verstehen, muss man sich zunächst kurz mit den untersuchten Teilchen beschäftigen: Hochgeladene Ionen, insbesondere hochgeladenes Krypton.

Unter hochgeladenen Ionen (HCI) versteht man Ionen, die den Großteil ihrer Elektronenhülle verloren haben, also eine hohe positive Ladung aufweisen. Diese hohe Ladung, gepaart mit der relativ einfachen Schalenstruktur, führt zu einer ganzen Reihe an Effekten, die sich bei neutralen Atomen, oder Ionen geringer Ladung, nur schwer, oder gar nicht beobachten lassen (Crespo López-Urrutia & Harman, 2014). Neben der Interpretation astronomischer Daten, dienen hochgeladene Ionen der Überprüfung quantenelektrodynamischer und relativistischer Effekte, die mit der Kernladung Z mit dem Faktor Z^4 skalieren. Einige quantenelektrodynamische Effekte skalieren außerdem mit der Hauptquantenzahl n der beteiligten Elektronen mit $\frac{1}{n^3}$ (Gillaspy, 2001). Daher sind schwere Ionen hoher Ladungszustände besonders interessant, etwa das hier untersuchte Krypton.

Eine Übersicht über die allgemeinen Eigenschaften hochgeladener Ionen findet man zum Beispiel in (Gillaspy, 2001).

Häufig identifiziert man HCI mit demjenigen Element, welches im neutralen Zustand die Elektronenkonfiguration des hochgeladenen Ions aufweist. So spricht man in diesem Zusammenhang etwa bei Kr^{26+} mit einer Kernladungszahl von $Z = 36$ von „Neon-artigem“ Krypton, da das Ion nur noch 10 Elektronen besitzt, was einem neutralen Neonatom mit Ordnungszahl $Z = 10$, entspräche. In der Astronomie ist auch die folgende Notation für Ionen üblich: Kr XXVII für Kr^{26+} , also das Elementsymbol gefolgt von einer römischen Zahl, die für ein Ion mit Ladung Q den Wert $Q + 1$ notiert.

2.4 Übergänge bei Hochgeladenen Ionen

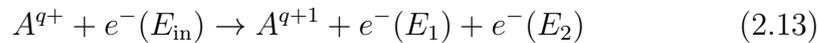
In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Arten von Strahlungsübergängen, die bei dem hier durchgeführten Experiment zu erwarten sind, beschrieben. Die prägnantesten Übergänge sind dabei bedingt durch das betrachtete Medium: Hochgeladene Ionen in Verbindung mit freien Elektronen hoher kinetischer Energie. Übergänge, die zwar im Allgemeinen eine wichtige Rolle spielen, in diesem Experiment allerdings nicht, oder nur schwach, auftauchen,

werden nicht beschrieben.

2.4.1 Stoßionisation

Um die hochgeladenen Ionen untersuchen zu können, müssen diese erst einmal aus dem neutralen Gas hergestellt werden. In der vorliegenden Arbeit wird ein Elektronenstrahl für die Ionisation verwendet.

Ein Elektron hinreichend hoher Energie, welches mit einem Atom oder Ion kollidiert, kann seine Energie auf den Stoßpartner übertragen und ein Hüllenelektron auslösen. Trifft ein Elektron mit der kinetischen Energie E_{in} auf ein Ion A mit der Ladung q , ergibt sich der Prozess als (siehe (Crespo López-Urrutia & Harman, 2014))



mit den Energien E_1 und E_2 der freien Elektronen nach dem Stoßprozess. Sei die Bindungsenergie des ausgelösten Elektrons E_B , dann gilt

$$E_1 + E_2 = E_{\text{in}} - E_B \quad (2.14)$$

Es lässt sich sofort erkennen, dass die Energie des stoßenden Elektrons die Bindungsenergie des ausgelösten Elektrons übertreffen muss:

$$E_{\text{in}} \stackrel{!}{>} E_B \quad (2.15)$$

sonst kann keine Stoßionisation stattfinden.

Die Ionisierungsenergie nimmt für jeden Ionisationsschritt zu, da die Kernladung, die das zu entfernende Elektron gebunden hält, durch jedes weitere, in der Hülle befindliche, Elektron kompensiert wird und diese Kompensation bei zunehmender Ionenladung abnimmt.

Für Krypton findet man die folgenden Ionisierungsenergien:

Zur Erzeugung von Neon-artigem Krypton werden also Elektronen mit einer kinetischen Energie von mindestens 1205 eV benötigt. Da allerdings keine höher geladenen Zustände untersucht werden sollen, sollte die Elektronenenergie 2928 eV nicht überschritten werden.

Es wird auch klar, dass neben Neon-artigem Krypton auch stets niedrigere Ladungszustände erzeugt werden, womit eine zunächst unklare Ladungszustandsverteilung in der Falle entsteht. Diese hängt im Allgemeinen, unter

Tabelle 2.1: Ionisierungsenergie von Krypton; Daten von (Saloman, 2007); Die Ionisierungsenergie zur Erzeugung des nächsthöher geladenen Zustands ist angegeben

Zustand	Verbliebene Elektronen	Ionisierungsenergie (eV)
Kr-artig	36	14
Cl-artig	17	832
S-artig	16	883
P-artig	15	945
Si-artig	14	999
Al-artig	13	1042
Mg-artig	12	1155
Na-artig	11	1205
Ne-artig	10	2928

Anderem, von der Stromstärke des Elektronenstrahls, der Form des Fallpotentials und natürlich der Elektronenstrahlenergie, ab. Eine theoretische Betrachtung der Ladungszustandsverteilung ist in (Penetrante, Bardsley, DeWitt, Clark & Schneider, 1991) gegeben. Man findet, dass sich die Ladungszustandsverteilung für höhere Elektronenstrahlenergien zu höheren Ladungszuständen bewegt. Daher ist es für die Erzeugung von Neon-artigem Krypton sinnvoll die Energie der Elektronen möglichst nah an der Ionisierungsenergie von Neon-artigem Krypton, 2928 eV, zu wählen.

2.4.2 Direkte Anregung

Die einfachste Art der Anregung, die in diesem Experiment zu beobachten ist, ist die Stoßanregung eines Ions durch ein freies Elektron mit anschließender Relaxation des angeregten Zustands unter der Abgabe eines Photons γ (siehe (Crespo López-Urrutia & Harman, 2014)):



Dabei ist die Energie des ausgesendeten Photons E_{γ} , beziehungsweise dessen Frequenz ω_{γ} ,

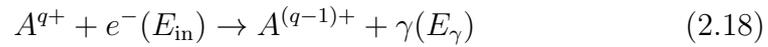
$$E_{\gamma} = \hbar\omega_{\gamma} = E_{\text{in}} - E_{\text{out}} \quad (2.17)$$

Per Stoßanregung können also immer dann Photonen einer bestimmten Ener-

gie erzeugt werden, wenn freie Elektronen mit einer höheren kinetischen Energie als Stoßpartner für das Ion vorliegen.

2.4.3 Radiative Rekombination

Die radiative Rekombination beschreibt den Umkehrprozess der Photoionisation. Dementsprechend füllt ein freies Elektron ein Loch in der Hülle des Ions unter Abgabe eines Photons (siehe (Crespo López-Urrutia & Harman, 2014)):



Hat das Elektron nach der Rekombination die Bindungsenergie E_{B} , gilt für die Energie des abgestrahlten Photons

$$E_{\gamma} = \hbar\omega_{\gamma} = E_{\text{in}} + E_{\text{B}} \quad (2.19)$$

2.4.4 Dielektronische Rekombination

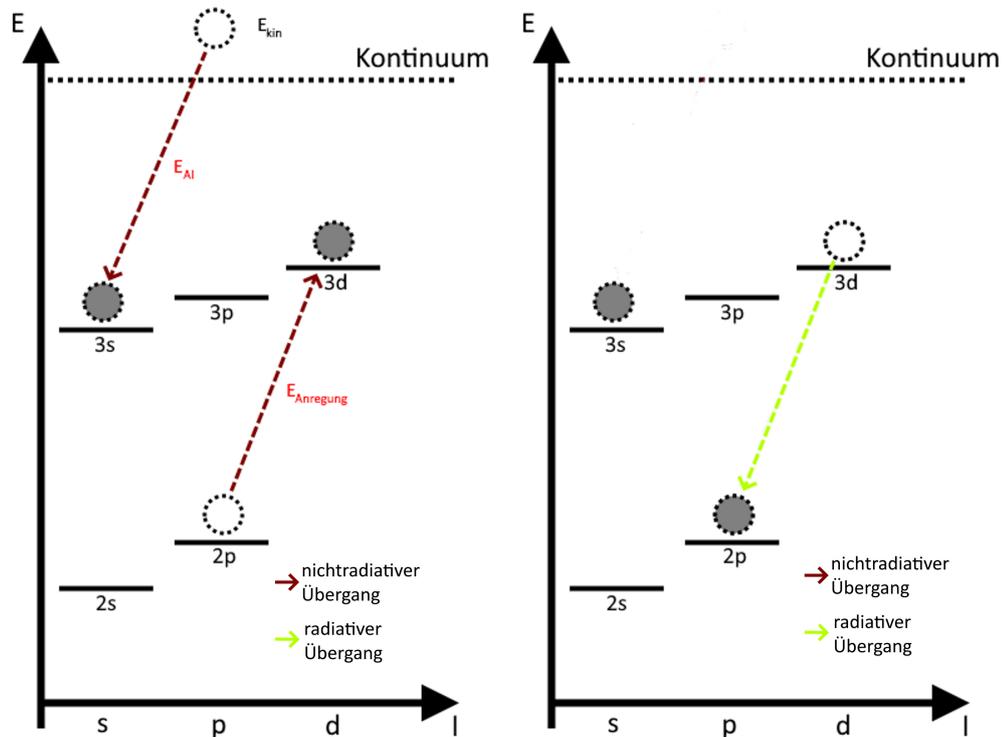
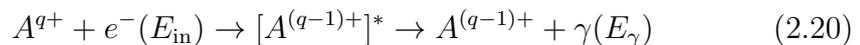


Abbildung 2.1: Schema einer beispielhaften dielektronischen Rekombination eines Neon-artigen Systems; **links:** Ein freies Elektron recombiniert in die M-Schale und regt dabei ein Elektron von der L- in die M-Schale an. Dabei ist die Energiebedingung aus Gleichung 2.21 erfüllt; **rechts:** Eines der angeregten Elektronen fällt zurück in das, durch den dielektronischen Einfang entstandene, Loch in der L-Schale. Dabei wird ein Photon ausgesendet, dessen Energie durch die Differenz der Energielevel vor und nach der Abregung festgelegt wird.

Der Strahlungsübergang, auf dem in der vorliegenden Arbeit der Fokus liegt, ist die dielektronische Rekombination. Diese ist ein mehrstufiger Prozess und stellt den Umkehrprozess zum Auger-Zerfall (Demtröder, o. J.), dar. Im ersten Schritt recombiniert ein freies Elektron, unter Anregung eines Hüllenelektrons, mit dem Ion. Das Resultat ist ein angeregter Zustand. Dieser zerfällt im nächsten Schritt unter Aussendung eines Photons oder mehrerer Photonen in den Grundzustand (Beilmann, 2011):



Die Energie E_γ des ausgesendeten Photons hängt dabei vom Relaxationspfad des Elektrons ab.

Bei der dielektronischen Rekombination handelt es sich um einen resonanten Prozess, sie findet also nur bei bestimmten kinetischen Energien E_{in} des einfallenden Elektrons statt, nämlich bei denjenigen, die zu einer Anregung des Hüllenelektrons führen. Sei also E_B die Bindungsenergie des Zustands in dem sich das freie Elektron nach der Rekombination befindet, E_{top} die Energie des angeregten Hüllenelektrons und E_{bottom} die Energie des Hüllenelektrons vor der Rekombination, dann muss für die Energien

$$E_{\text{in}} + E_B = E_{\text{top}} - E_{\text{bottom}} \quad (2.21)$$

gelten (Crespo López-Urrutia & Harman, 2014).

Die Energien E_{top} und E_{bottom} sind bei gleichen Übergängen von dem beobachteten System abhängig. So sind diese Energien auch für die verschiedenen Ladungszustände eines Ions jeweils unterschiedlich, weshalb sich auch die Resonanzenergien E_{in} für die verschiedenen Ladungszustände unterscheiden. Außerdem kann das Hüllenelektron während der Rekombination in verschiedene Hauptschalen angeregt werden, was für wesentliche Unterschiede in den möglichen Energien E_{top} sorgen kann. Aufgrund dieser beiden Effekte erwartet man dielektronische Resonanzen im Elektronenenergiespektrum in Scharen mit leichten Energieunterschieden innerhalb einer Schar, wobei deren verschiedene Linien von unterschiedlichen Ladungszuständen stammen. Die verschiedenen Scharen stammen dann von Rekombinationsprozessen, bei denen das Hüllenelektron in unterschiedliche Hauptschalen angeregt wird.

Ein dielektronischer Übergang wird gemäß der Schalen klassifiziert, in die das freie Elektron rekombiniert und in denen sich das gebundene Elektron vor und nach der Anregung befindet. So bezeichnet man beispielsweise den Prozess, bei dem ein freies Elektron in die M-Schale ($n=3$) rekombiniert und ein gebundenes Elektron von der L- ($n=2$) in die M-Schale anhebt als L-MM-Resonanz.

Neben der dielektronischen Rekombination gibt es auch noch mehrelektronische Resonanzen. Bei diesen regt das rekombinierende Elektron mehrere Hüllenelektronen an. Bei vielen Ionenspezies sind mehrelektronische Resonanzen nicht zu vernachlässigen und tragen signifikant zum beobachteten Spektrum bei. Etwa wurde bei der Untersuchung von Kr^{30+} in (Beilmann et

al., 2009) festgestellt, dass mehrelektronische Resonanzen einen Anteil von 6% an der gesamten resonanten Photonenrekombinationsrate ausmachen. Daher wurden bei diesem Experiment auch mehrelektronische Resonanzen aufgezeichnet. Deren theoretische Beschreibung ist jedoch äußerst schwierig, weshalb sie in dieser Arbeit nicht weiter beachtet wurden. Das führt allerdings dazu, dass einige aufgezeichnete Linien nicht erklärt werden können und die Intensitätsverhältnisse mancher Linien nicht mit den Erwartungen übereinstimmen.

2.5 Theoretische Berechnung mit FAC

Die theoretischen Spektren in dieser Arbeit wurden mithilfe des „Flexible Atomic Code“ erzeugt. Eine Beschreibung der Software findet sich in (Gu, 2008), woran sich dieses Kapitel orientiert.

Mithilfe dieses Pakets sollen zunächst die Energielevel der untersuchten Systeme bestimmt werden. Aus dieser Struktur erhält man dann Übergangsraten für die einzelnen, bei der dielektronischen Rekombination beteiligten, Prozesse und setzt aus diesen wiederum die Übergangsamplituden der dielektronischen Rekombination in Abhängigkeit von der kinetischen Energie des freien Elektrons zusammen.

Mithilfe der in Abschnitt 2.2 beschriebenen Methoden lässt sich mit dem FAC die Atomstruktur eines betrachteten Systems bestimmen. Entsprechend lassen sich auch für verschiedene Elektronenkonfigurationen dieses Systems die Energieniveaus direkt bestimmen.

Für die Bestimmung der Stärke der dielektronischen Übergänge werden neben den Energieniveaus des Ions die Autoionisationsraten der intermediären Zustände (zwischen Elektroneneinfang und Relaxation) sowie die radiativen Übergangsraten zwischen den angeregten Zuständen und dem Grundzustand benötigt. Auch diese Raten lassen sich mit den integrierten Funktionen des FAC mittels der in (Gu, 2008) angegebenen Methoden direkt bestimmen.

Bei der Autoionisation verlässt ein gebundenes Elektron spontan die Elektronenhülle eines mehrfach angeregten Ions. Ein weiteres, angeregtes, Hüllenelektron überträgt dabei seine Energie auf das die Hülle verlassende Elektron. Die kinetische Energie des freien Elektrons E_{if} lässt sich dementsprechend aus dem Energieübertrag des relaxierenden Elektrons E_{trans} sowie der Bindungsenergie E_B des ausgelösten Elektrons in dessen angeregten Zustand bestimmen.

$$E_{\text{if}} = E_{\text{trans}} - E_{\text{B}} \quad (2.22)$$

Die kinetische Energie des Elektrons ist also für einen bestimmten Übergang theoretisch exakt festgelegt.

Der Umkehrprozess der Autoionisation ist der dielektronische Elektroneneinfang, der erste Teilschritt der dielektronischen Rekombination (siehe 2.4.4). Entsprechend obiger Überlegungen ist dabei die Resonanzenergie eines Übergangs ebenso scharf bestimmt.

Nun lässt sich die Stärke des dielektronischen Einfangs aus der Autoionisationsrate, die der FAC direkt bestimmen kann, berechnen. Sei für einen Übergang A^a die Autoionisationsrate. Dann lässt sich als Umkehrprozess die Resonanzstärke S_{DC} des Elektroneneinfangs mit

$$S_{\text{DC}} = \frac{g_i}{2g_f} \frac{\pi^2}{E_{\text{if}}} A^a \quad (2.23)$$

berechnen. Dabei ist E_{if} die Resonanzenergie des Elektroneneinfangs. Der Faktor $\frac{g_i}{2g_f}$ berücksichtigt die statistische Gewichtung in Folge der unterschiedlichen Drehimpulse der Zustände vor dem Elektroneneinfang $g_i = 2L_i + 1$, und nach dem Elektroneneinfang $g_f = 2L_f + 1$.

Um die dielektronische Rekombination zu vervollständigen, muss sich der angeregte Zustand nach dem Einfang radiativ abregen.

Daher muss für die Berechnung der Intensität der dielektronischen Resonanz bei einer bestimmten Energie noch das Verzweigungsverhältnis $B(i)$ bestimmt werden, welches die Wahrscheinlichkeit für die radiative Abregung in einen nicht weiter autoionisierenden Zustand angibt.

Die durch den dielektronischen Elektroneneinfang gebildeten angeregten Zustände können im Folgenden entweder radiativ zerfallen oder autoionisieren. Falls der angeregte Zustand radiativ zerfällt, ist die dielektronische Rekombination abgeschlossen, wenn der finale Zustand unterhalb der Ionisationsgrenze liegt. Wenn der radiative Zerfall jedoch zu einem Energieniveau oberhalb der Ionisationsgrenze führt, kann der Zustand erneut radiativ zerfallen und so die dielektronische Rekombination vollenden, oder wieder autoionisieren. Damit ist das Verzweigungsverhältnis:

$$B(i) = \frac{\sum_k A^r(i \rightarrow k) + \sum_a A^r(i \rightarrow a)B(a)}{\sum_{k'} A^a(i \rightarrow k') + \sum_k A^r(i \rightarrow k) + \sum_a A^r(i \rightarrow a)} \quad (2.24)$$

Hier sind A^r und A^a die Übergangsamplituden für die Autoionisation beziehungsweise den radiativen Zerfall zwischen den angegebenen Zuständen. k' notiert finale Zustände nach der Autoionisation, die nicht weiter zerfallen, k Grundzustände nach radiativem Zerfall, a autoionisierende und i die zerfallenden Zustände.

Die Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand in einen weiteren autoionisierenden Zustand und daraufhin radiativ zerfällt ist klein, weshalb dieser Beitrag hier vernachlässigt wird. Dann gilt für das Verzweigungsverhältnis

$$B(i) = \frac{\sum_k A^r(i \rightarrow k)}{\sum_{k'} A^a(i \rightarrow k') + \sum_k A^r(i \rightarrow k)} \quad (2.25)$$

Schließlich lässt sich die Resonanzstärke der dielektronischen Rekombination aus dem Produkt der Stärke des dielektronischen Einfangs S_{DC} und dem Verzweigungsverhältnis $B(i)$ bestimmen:

$$S_{\text{DR}} = S_{\text{DC}}B(i) = \frac{2L_f}{2L_i + 2} \frac{\pi^2}{E_{if}} A^a \frac{\sum_k A^r(i \rightarrow k)}{\sum_{k'} A^a(i \rightarrow k') + \sum_k A^r(i \rightarrow k)} \quad (2.26)$$

Die Lage der Resonanz im Elektronenenergiespektrum ist, wie man in Gleichung 2.22 sieht, durch die Energiedifferenz E_{if} zwischen dem Zustand vor dem Elektroneneinfang und dem angeregten intermediären Zustand festgelegt.

Das in Gleichung 2.26 angegebene Ergebnis für die Linienstärke muss für den Vergleich mit dem hier vorgestellten Experiment noch modifiziert werden. Um die korrekten relativen Linienstärken zu berechnen, muss berücksichtigt werden, dass die Intensität der, von den Ionen emittierten, Strahlung nicht aus jeder Richtung gemessen wird, sondern nur in dem kleinen, vom Röntgendetektor eingenommenen Raumwinkel.

In den meisten Experimenten spielt dies keine Rolle, da die emittierte Strahlung isotrop ist und damit die vom Detektor aufgenommenen Linienstärken proportional zu den Gesamtliniestärken sind. In dem hier vorgestellten Experiment kommt jedoch ein Elektronenstrahl zum Einsatz, der die Isotropie des Systems aufhebt. In (Percival & Seaton, 1958) wird hergeleitet, dass für einen Winkel Θ zwischen Elektronenstrahl und Detektor für die gemessene Intensität I

$$I(\Theta) = \bar{I} \left[\frac{3(1 - P \cos^2(\Theta))}{3 - P} \right] \quad (2.27)$$

gilt. Dabei ist \bar{I} die mittlere Intensität auf einer Kugelschale um die Ionenwolke mit einem Radius gleich dem Detektorabstand und P der lineare Polarisationsgrad. Der Polarisationsgrad kann mithilfe des FAC für jeden Übergang berechnet werden. Damit können die theoretisch berechneten Linienstärken für den hier verwendeten Aufbau korrigiert werden.

Der Röntgendetektor in diesem Experiment ist in einem Winkel von $\Theta = 90^\circ$ zur Strahlachse angeordnet. Damit vereinfacht sich Gleichung 2.27 zu

$$I(\Theta) = \bar{I} \left[\frac{3}{3 - P} \right] \quad (2.28)$$

Bei der Berücksichtigung der Polarisation in der theoretischen Berechnung der Spektren ist noch zu beachten, dass der Polarisationsgrad der Strahlung von der Elektronenstrahlenergie abhängt. Da während des angewendeten Messzyklus (siehe Kapitel 3.2) die Energie der Strahlelektronen über einen weiten Bereich zeitlich variiert wird, sollten die theoretischen Spektren für jede auftretende Energie neu berechnet werden. In dieser Arbeit wurde eine einfachere Methode gewählt. Zur Berechnung des Polarisationsgrads wurde eine breite Elektronenenergieverteilung angenommen, die die Energien, bei denen die berechneten Resonanzen auftreten umfasst und ihr Maximum bei den stärksten Linien des bestimmten Spektrums hat. Diese Methode hat den Vorteil, dass sie einen deutlich geringeren Rechenaufwand benötigt. Allerdings kann es auch zu leicht verfälschten Intensitätsverhältnissen zwischen den berechneten Linien kommen.

Kapitel 3

Experimentelle Methode

3.1 Die FLASH-EBIT

Das Instrument, das zur Untersuchung des hochgeladenen Kryptons eingesetzt wurde, ist die FLASH-EBIT am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg, eine Elektronenstrahl-Ionen-Falle – kurz EBIT. EBITs bieten eine hervorragende Möglichkeit, hochgeladene Ionen zu untersuchen, da in ihnen die Ionen mittels eines Elektronenstrahls sowohl erzeugt, als auch gefangen gehalten werden können. Eine genaue Beschreibung der Funktionsweise einer solchen Falle ist in (Levine, Marrs, Henderson, Knapp & Schneider, 1988) zu finden. Die FLASH-EBIT im Speziellen wird in (Epp, 2007) beschrieben.

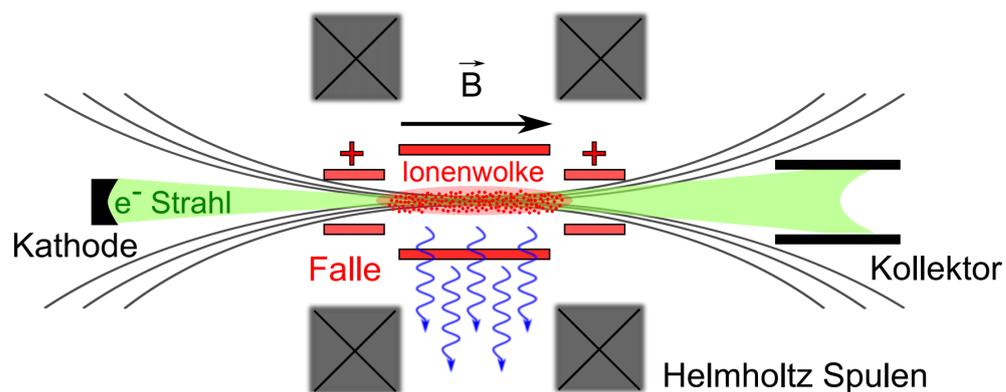


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau einer EBIT; übernommen aus (Baumann, 2012)

Eine schematische Darstellung des Aufbaus einer EBIT ist in Abbildung 3.1 zu sehen. Eine Elektronenkanone stellt mittels einer geheizten Kathode freie Elektronen zur Verfügung. Diese werden durch eine Potentialdifferenz zwischen den Driftröhren in der Mitte der Falle und der Glühkathode in Richtung des Fallenzentrums beschleunigt. Das Potential der Driftröhren kann einzeln oder als Gruppe verändert werden. So können beliebig geformte Potentialtöpfe entlang der Elektronenstrahlachse erzeugt und die Energie des Elektronenstrahls eingestellt werden. In diesem Experiment wird die Form des Potentialtopfes für die Dauer einer Messung eingestellt und die Elektronenstrahlenergie durch eine Änderung der Vorspannung der gesamten Driftröhrengruppe angepasst.

Die Spannung, die zu diesem Zweck an den Driftröhren anliegt, wird mit einem Funktionsgenerator generiert und mithilfe eines Spannungsverstärkers verstärkt. Dadurch kann die Elektronenenergie zeitlich mit der gewünschten Änderungsrate variiert werden.

Der entstehende Elektronenstrahl wird durch ein starkes Magnetfeld komprimiert, welches über ein supraleitendes Helmholtz-Spulenpaar, das die Fallenregion umgibt, erzeugt wird. In der Fallenregion trifft der Elektronenstrahl dann auf ein, über ein Injektionssystem eingespeistes, Gas, welches er ionisiert. Die entstehende Ionenwolke wird radial bezüglich der Achse des Elektronenstrahls durch dessen Raumladung gefangen gehalten. Axial wird die Bewegung der Ionen durch den mithilfe der Driftröhren erzeugten Potentialtopf eingeschränkt. Nachdem der Elektronenstrahl die Fallenregion passiert hat, trifft er auf einen Kollektor, der ihn auffängt und den Stromkreis schließt.

Die bei der Kollision von Ionen und Elektronen entstehende Strahlung kann über ein Fenster zur Fallenregion ausgekoppelt werden. Verschiedene Detektoren können für die verschiedenen Wellenlängenbereiche des in der Falle erzeugten Lichts verwendet werden. In dem hier vorgestellten Experiment wird die Strahlung mit einem Siliziumdriftdetektor detektiert.

Die gesamte Fallenregion, die Elektronenkanone und der verwendete Detektor befinden sich in einer Ultrahochvakuumumgebung. Die Anordnung wird in mehreren Stufen gekühlt, wobei die supraleitenden Helmholtzspulen mithilfe von flüssigem Helium auf etwa 4 K abgekühlt werden.

Durch die Verwendung des Funktionsgenerators und Analog-Digital-Converters lässt sich gleichzeitig zur Variation des Driftröhrenpotentials ein Spannungssignal an das Datenverarbeitungssystem übergeben, welches den Zeitpunkt der aufgenommenen Ereignisse kodiert. So kann dann ein zweidimensionales Spektrum erstellt werden, welches jedem Ereignis sowohl eine Elektronenenergie als auch eine Photonenenergie zuordnet.

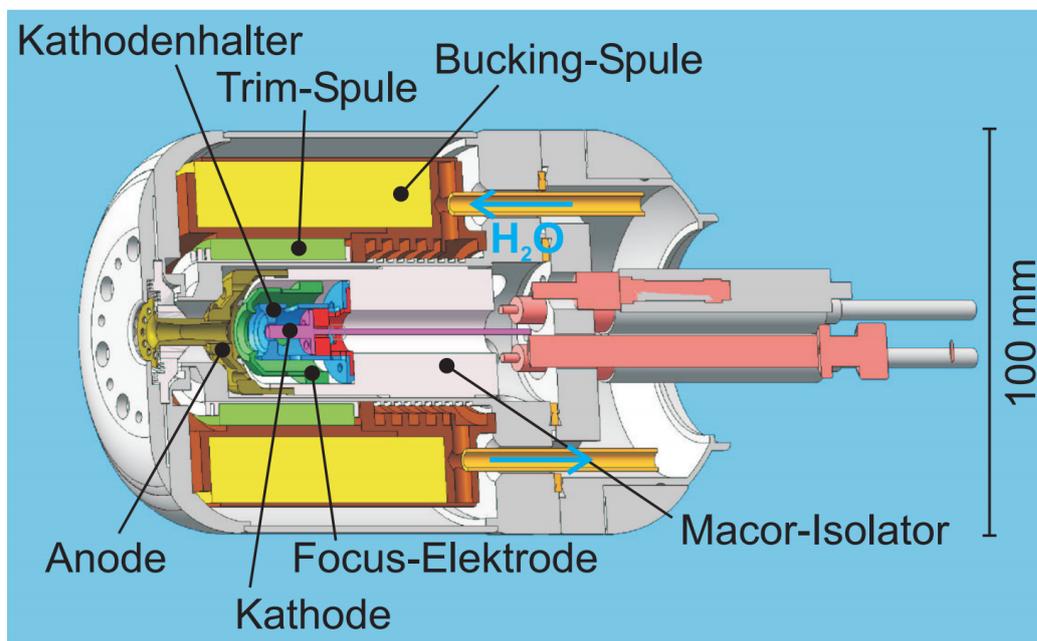


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Elektronenkanone, eingebaut in der FLASH-EBIT, entnommen aus (Epp, 2007)

Im Folgenden werden die einzelnen Teile der EBIT noch einmal im Detail betrachtet, um anschließend auf einige, für diese Arbeit relevanten, Eigenschaften des Elektronenstrahls einzugehen.

Elektronenkanone

Die Elektronenkanone stellt die freien Elektronen bereit, die den Elektronenstrahl der EBIT ausmachen. Eine schematische Darstellung der verwendeten Elektronenkanone, entnommen aus (Epp, 2007), ist in Abbildung 3.2 zu sehen

In der Elektronenkanone werden die Elektronen zunächst aus einer Glühkathode, welche elektrisch geheizt wird, ausgelöst. Um einen möglichst fokussierten Elektronenstrahl zu erhalten, ist es sinnvoll, die Temperatur der ausgelösten Elektronen klein zu halten (Herrmann, 1958). Daher wird ein Material mit einer geringen Austrittsarbeit, hier Barium, als Elektronenlieferant verwendet. Typische Temperaturen der Kathode liegen dann bei etwa 1000 °C.

In geringem Abstand vor der Kathode befindet sich die Fokuselektrode, die

die Elektronen passieren müssen. Durch die Einstellung des Potentials der Fokuselektrode lässt sich der Elektronenstrahlstrom einstellen. Setzt man die Fokuselektrode auf ein stark negatives Potential lässt sich der Strahl komplett abschalten. Jenseits der Fokuselektrode liegt die Anode. Auch diese kann dazu benutzt werden, die Elektronen in Richtung der Falle zu beschleunigen. Praktisch sorgt die Verwendung der Fokuselektrode jedoch für einen Strahl mit besserer Fokussierung (Epp, 2007).

Umgeben ist die Elektronenkanone von zwei Magnetspulen, der Bucking- und der Trimspule. Die Buckingspule dient dazu, das starke Magnetfeld, das durch die supraleitenden Helmholtzspulen an der Fallenregion erzeugt wird, zu kompensieren. Der Grund dafür ist wieder die Fokussierung des Strahls: In (Herrmann, 1958) wird gezeigt, dass der Strahldurchmesser eines Elektronenstrahls, welcher seinen Ursprung in einem Raum ohne Magnetfeld hat, kleiner ist, als wenn ein Magnetfeld an dessen Ursprungsort vorhanden ist. Die Trim-Spule dient der Feinjustierung der Strahlposition.

Um die hohen Temperaturen, die für den Betrieb der Glühkathode benötigt werden, auszuhalten, ist die Elektronenkanone wassergekühlt.

Die Position der Kanone kann in x - y - und z -Richtung manipuliert werden, um so einen möglichst mittig durch die Fallenregion verlaufenden Strahl zu erhalten.

Die Elektronenkanone besitzt ihr eigenes Arrangement an Vakuumpumpen und kann zu Wartungszwecken vom Vakuum der restlichen Falle durch eine Klappe entkoppelt werden.

Driftröhren

Das Herzstück der EBIT stellen die Driftröhren dar, die die eigentliche Fallenregion umgeben. Insgesamt beinhaltet die Falle 9 Driftröhren aus Kupfer. Davon haben 7 die Form von Hohlzylindern, deren Innenradius konisch vom Fallenzentrum nach außen zunimmt. Die verbliebenen beiden Elektroden befinden sich am weitesten vom Fallenzentrum entfernt und laufen trompetenförmig in Richtung des Kollektors, beziehungsweise der Kanone auseinander. Die Form dieser beiden Elektroden dient unter Anderem dazu, das Fallenzentrum von thermischer Strahlung der wärmeren Teile der EBIT abzuschirmen (Dobrodey, 2019).

Die Elektroden sind durch Saphirisolatoren miteinander verbunden. Die Wahl des Isolatormaterials zwischen den Elektroden fällt deswegen auf Saphir, weil dieses bei sehr niedrigen Temperaturen ein sehr guter Wärmeleiter (Wolfmeyer & Dillinger, 1971) und dennoch ein elektrischer Isolator ist. Dadurch wird erreicht, dass die Wärme, die durch die Strahlung der Ionen in der Falle auf

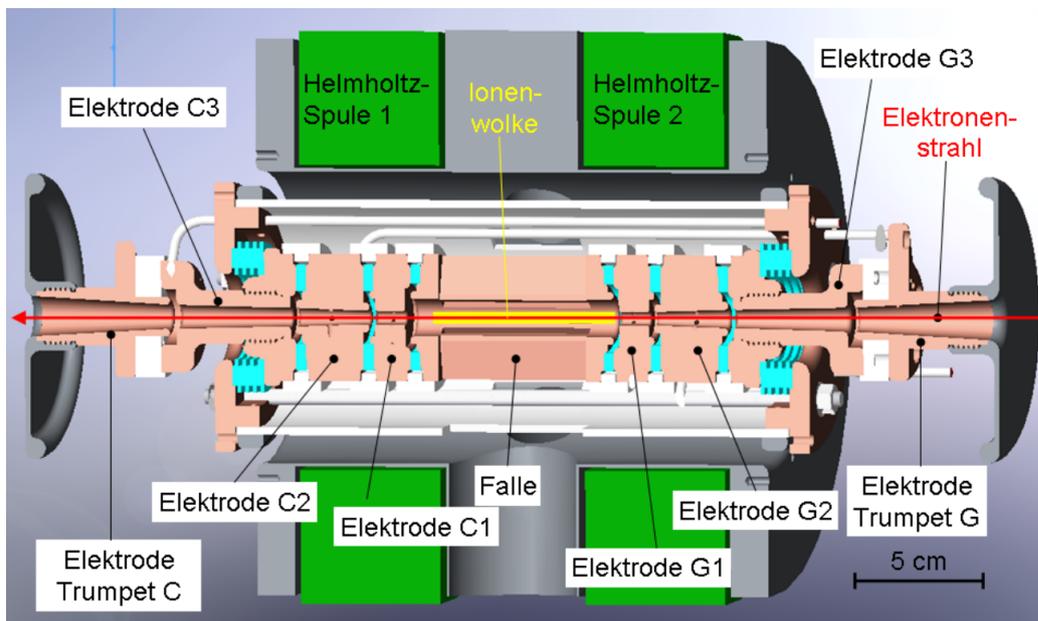


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung der Fallenregion. In der Skizze läuft der Elektronenstrahl von rechts, von der Elektronenkanone, durch die Fallenregion mit der Ionenwolke nach links zum Kollektor. Umgeben sind die Driftröhren von dem supraleitenden Helmholtz-Spulenpaar, welches das Magnetfeld zur Kompression des Elektronenstrahls erzeugt. Darstellung entnommen aus (Steinbrügge, 2010)

die Elektroden übertragen wird, schnell abtransportiert werden kann und sich die Elektroden nicht zu stark aufheizen. Die gesamte Driftröhrengruppe ist mit dem Kühlsystem, basierend auf flüssigem Helium, verbunden.

Die mittlere Elektrode ist die größte der neun zylindrischen Röhren. Mehrere Öffnungen im Mantel dieser Elektrode dienen dazu, Strahlung aus der Fallenmitte auszukoppeln und mit den verwendeten Detektoren aufzuzeichnen. Die gesamte Driftröhrengruppe liegt an einer gemeinsamen Vorspannung an, deren Differenz zur Kathodenspannung für die Beschleunigung der Elektronen verwendet wird.

Zur Erzeugung dieser Vorspannung wird das Signal eines Funktionsgenerators aus der Agilent Serie 33500 verwendet, welches durch einen Trek 30/20A Hochspannungsverstärker, mit einer maximalen Spannung von 30 kV und einem Verstärkungsfaktor von $\frac{3000\text{V}}{\text{V}}$, verstärkt und an die Driftröhrenplattform übergeben wird.

Zusätzlich kann die Spannung der einzelnen Driftröhren angepasst werden, um die Ionen in Richtung des Elektronenstrahls gefangen zu halten. Dazu wird in der Regel das Potential der Nachbar Elektroden der mittleren Elektrode auf das höchste Potential gesetzt, mit einem vom Fallenzentrum aus abnehmendem Potential. Die mittlere Driftröhre liegt meist auf einem etwas niedrigeren Potential als ihre Nachbarn. Dabei ist es auch möglich, die mittlere Elektrode auf ein höheres Potential als die anderen Röhren zu setzen und trotzdem Ionen in der Falle zu halten. Die Falle funktioniert weiterhin wegen der Raumladung der Elektronen, die in der Fallenmitte am größten ist und dort das am stärksten Potential absenkt. Setzt man das Potential der mittleren Driftröhre auf eine sehr hohe positive Spannung lässt sich die Falle entleeren, um so ungewollte Fremdionen zu entfernen.

Kollektor

Nachdem der Elektronenstrahl die Fallenregion durchquert hat, wird dieser durch das, von den Driftröhren erzeugte, elektrische Feld verlangsamt. Anschließend trifft er auf den Kollektor und wird von diesem aufgefangen. Der Kollektor besteht aus einer hohlen, wassergekühlten Kupferelektrode, einer Supressor- und einer Extraktorelektrode. Eine Darstellung des Kollektors sieht man in 3.4.

Zunächst passiert der Elektronenstrahl den Supressor und gerät in die Hohlelektrode. Der Supressor liegt dabei auf einem leicht negativen Potential, durch das verhindert wird, dass sekundäre Elektronen, die aus der Hohlelektrode bei Kontakt mit den Elektronen des Strahls ausgelöst werden, den Kollektor wieder verlassen. Dann werden die Elektronen vom Extraktor, der

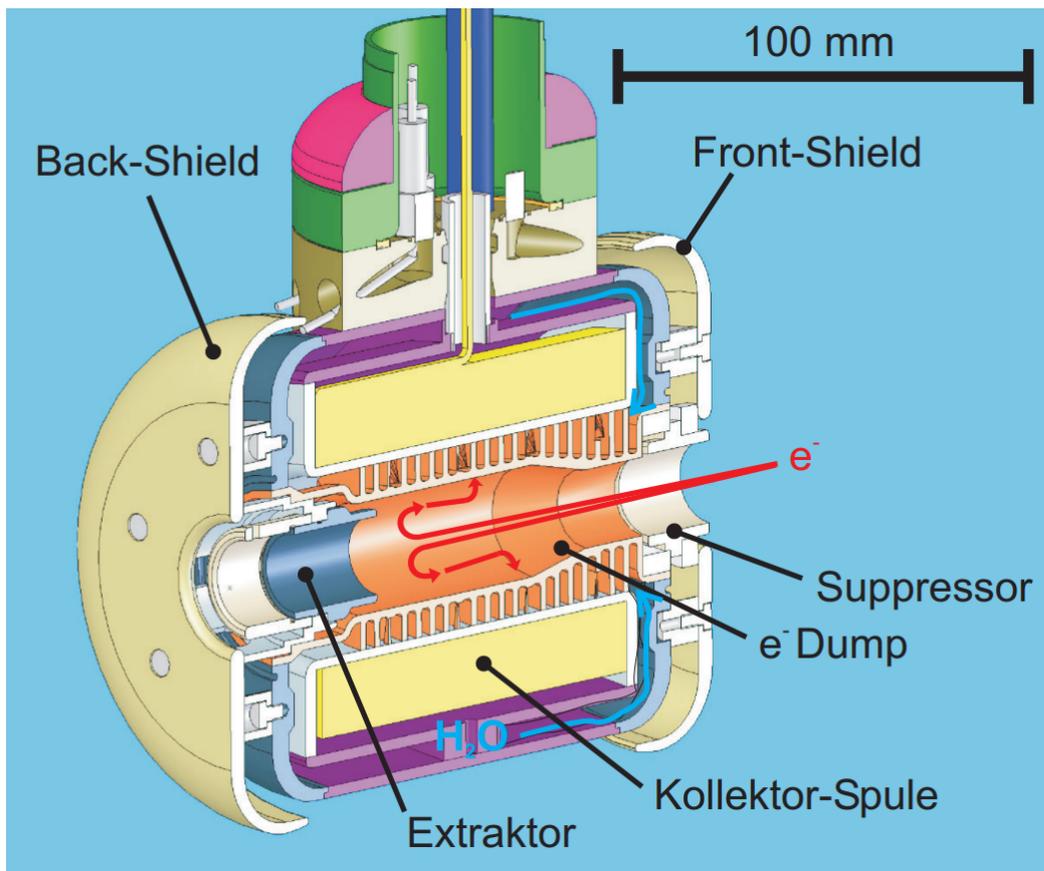


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung des Kollektors der FLASH-EBIT, entnommen aus (Epp, 2007)

sich auf der gegenüberliegenden Seite des Kollektors befindet und auf ein negatives Potential gesetzt ist, verlangsamt. Damit wird der Wärmeübertrag auf die Kupferelektrode reduziert und verhindert, dass der Strahl gerade durch den Kollektor hindurch geht.

Die Kupferelektrode wird von einer Magnetspule umschlossen, die das Restmagnetfeld des supraleitenden Magneten eliminiert. Ohne Magnetfeld dehnt sich der Elektronenstrahl aus (Herrmann, 1958) und trifft so großflächig auf die Kupferelektrode. Dadurch wird der Wärmeübertrag des Elektronenstrahls auf die Kollektorelektrode über eine große Fläche verteilt.

Magnetfeld

Um bei dem erzeugten Elektronenstrahl hohe Stromdichten zu erreichen, ist es hilfreich, diesen mit einem Magnetfeld zu komprimieren (Herrmann, 1958). Dazu wird bei der FLASH-EBIT ein supraleitendes Helmholtz-Spulenpaar, welches ein Magnetfeld von einer Stärke bis zu 6 T erzeugen kann, verwendet. Dieses umgibt die Fallenregion, wobei die beiden Spulen einen etwas größeren Abstand voneinander haben, als es in der Helmholtz-Konfiguration der Fall wäre. Damit wird im Zentrum der Falle ein größerer Bereich nahezu konstanten Magnetfelds erzeugt und es bleibt mehr Platz zwischen den Spulen, um das Fallenzentrum mit den Detektoren oder dem Injektionssystem zu erreichen. Das ist auch ein großer Vorteil der Helmholtz-Spule gegenüber einer einzelnen langen Magnetspule für diesen Aufbau. Der Magnet wird durch ein Kühlsystem unter Verwendung flüssigen Heliums auf etwa 4 K abgekühlt und von der Umgebung durch mehrere Hitzeschilder abgeschirmt.

Siliziumdriftdetektor

Die Beschreibung des Detektors an dieser Stelle orientiert sich an (Lechner et al., 2001).

Der Vorteil eines Siliziumdriftdetektors ist, dass er die detektierten Ereignisse sowohl zeitlich als auch energetisch auflösen kann, wodurch zweidimensionale Spektren generiert werden können. Eine Skizze des Detektors findet sich in Abbildung 3.5. Der Siliziumdriftdetektor ist ein Halbleiterdetektor. Er besteht hauptsächlich aus einem n-dotierten Siliziumzylinder. Auf diesem sind p-dotierte Ringe angebracht und in der Mitte befindet sich eine n-dotierte Anode auf einem positiven Potential. Auf der Rückseite des Detektors befindet sich ein weiterer p-dotierter Kontakt, welcher flächig auf den Siliziumkörper aufgebracht ist. Durch eine von außen angelegte Spannung zwischen den p-dotierten Ringen auf negativem Potential und dem n-dotierten Silizium auf positivem Potential entsteht eine ausgedehnte Raumladungszone. In den De-

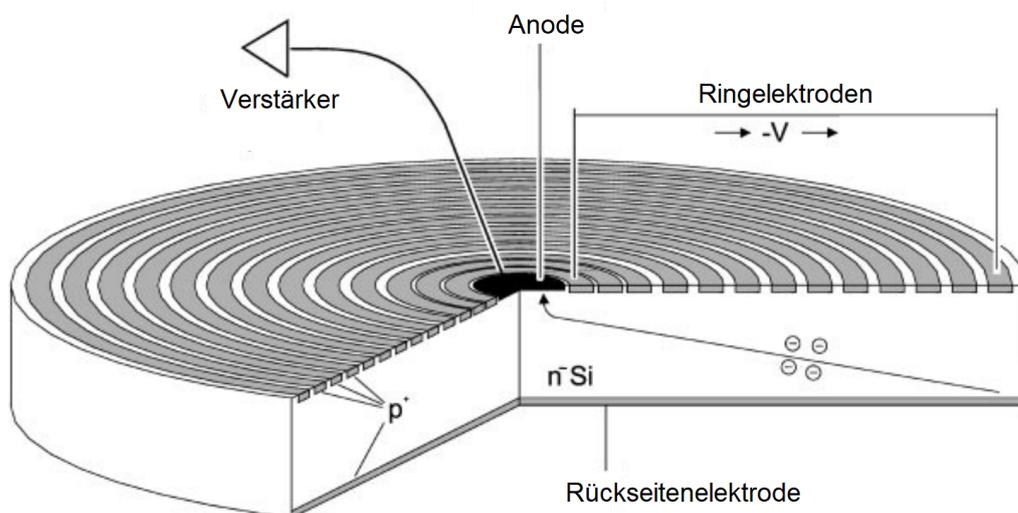


Abbildung 3.5: Skizze eines Siliziumdriftdetektors, entnommen aus (Lechner et al., 2001)

tektor durch die Rückseite eintretende Röntgenstrahlung erzeugt in dieser Raumladungszone des Siliziumkörpers Elektron-Loch-Paare, welche durch die angelegte Spannung getrennt werden. Das elektrische Feld innerhalb des Siliziums ist so geformt, dass sich die Elektronen zur zentralen Anode bewegen, während die Löcher zu den p-dotierten Ringen auf der Vorderseite wandern. Der Strompuls, der an der Anode ankommt wird durch einen nachfolgenden „ORTEC 672 Spectroscopy Amplifier“ verstärkt und zur Verwendung in der Kontrollsoftware digitalisiert. Die Höhe des Pulses ist dann proportional zur Energie des detektierten Photons.

Die Anordnung mit einer kleinen Anode in der Mitte und mehreren p-dotierten Ringen auf negativen Potentialen unterschiedlicher Höhe, hat den Vorteil, dass zum Einen eine große Raumladungszone erreicht wird und so das gesamte Siliziumsubstrat zur Aufzeichnung von Röntgenphotonen dienen kann, und zum Anderen eine geringen elektrische Kapazität des Detektors erreicht wird.

Daher kann der Siliziumdriftdetektor bei wesentlich höheren Zählraten betrieben werden als etwa eine als Röntgendetektor eingesetzte Photodiode. Außerdem ist der Detektor weniger sensitiv für das durch die nachfolgende Verstärkungsschaltung entstehende Rauschen und hat damit eine bessere Auflösung.

3.1.1 Elektronenstrahlenergie

Zur Auswertung der aufgenommenen Daten ist es essentiell die Energie des Elektronenstrahls genau zu kennen. Sie wird durch die Potentialdifferenz zwischen der Glühkathode in der Elektronenkanone und der Driftelektrode in der Fallenmitte festgelegt. Zusätzlich muss sie aufgrund der durch den Strahl selbst entstehenden negativen Raumladung nach unten korrigiert werden. Betrachtet man den Elektronenstrahl als unendlich lange zylindrische Ladungsverteilung konstanter Ladungsdichte, lässt sich das Raumladungspotential mithilfe des Gaußschen Satzes bestimmen. Sei die Raumladungsdichte

$$\rho = \frac{I_e}{\pi r_H^2 v_e} \quad (3.1)$$

wobei I_e den Strahlstrom, r_H den Strahlradius und v_e die Elektronengeschwindigkeit bezeichnet. Dann erhält man zwei verschiedene Fälle für das Raumladungspotential, abhängig vom Abstand zur Strahlmitte (Dobrodey, 2019):

(a) $r > r_H$:

$$\oint_A \vec{E} d\vec{A} = \frac{Q}{\epsilon_0} \quad (3.2)$$

$$\Rightarrow 2\pi r l E(r) = \frac{\pi r_H^2 \rho l}{\epsilon_0}$$

$$\Rightarrow E(r) = \frac{\rho r_H^2}{2r\epsilon_0}$$

$$\Rightarrow \Phi_e = \int_0^r E(r') dr' = \frac{I_e}{2\pi v_e \epsilon_0} \ln(r)$$

Sei Φ_D das Potential an der Driftröhre, die den Elektronenstrahl an der betrachteten Stelle mit einem Radius von r_D umgibt. Dann folgt

$$\Rightarrow \Phi_e = \Phi_D + \frac{I_e}{2\pi v_e \epsilon_0} \ln\left(\frac{r}{r_D}\right) \quad (3.3)$$

(b) $r \leq r_H$:

$$\begin{aligned}
\oint_A \vec{E} d\vec{A} &= \frac{Q}{\epsilon_0} \\
\Rightarrow 2\pi r l E(r) &= \frac{\pi r^2 \rho l}{\epsilon_0} \\
\Rightarrow E(r) &= \frac{\rho r}{2\epsilon_0} \\
\Rightarrow \Phi_e &= \int_0^r E(r') dr' = \frac{I_e}{4\pi v_e \epsilon_0} r^2 \\
\Rightarrow \Phi_e &= \frac{I_e}{4\pi v_e \epsilon_0} \left[\left(\frac{r}{r_H} \right)^2 + 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) - 1 \right] \quad (3.4)
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde hierbei das Ergebnis aus Gleichung 3.3 verwendet.

Damit lautet der gesamte Ausdruck für das Raumladungspotential

$$\Phi_e = \begin{cases} \frac{I_e}{4\pi v_e \epsilon_0} \left[\left(\frac{r}{r_H} \right)^2 + 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right) - 1 \right] & r \leq r_H \\ \frac{I_e}{4\pi v_e \epsilon_0} 2 \ln \left(\frac{r}{r_D} \right) & r > r_H \end{cases} \quad (3.5)$$

Man erkennt, dass das Potential proportional zum Strahlstrom ist. Daher kann später der Einfluss des Potentials durch eine Messreihe bei unterschiedlichen Strahlströmen als Funktion von I_e bestimmt, und in den Messungen die Elektronenstrahlenergie entsprechend korrigiert werden.

Neben der Raumladung der Elektronen, spielt auch die Raumladung der erzeugten Ionen eine Rolle. Diese vermindert das Raumladungspotential um den Faktor f (Beilmann, 2011). Bei der experimentellen Bestimmung des Raumladungspotentials findet dieser Faktor automatisch Berücksichtigung. Damit ist die die Gesamtenergie der Strahlelektronen bekannt:

$$E_{kin} = e(U_{Falle} - U_{Kathode} + \Phi_e) \quad (3.6)$$

Dabei sind Φ_e und U_{Kathode} negativ.

3.1.2 Auflösung der Elektronstrahlenenergie

Das im vorherigen Abschnitt hergeleitete Raumladungspotential (Gleichung 3.5) ist abhängig vom Abstand zur Strahlmitte.

Damit wird die Energie der verschiedenen Elektronen, welche sich nicht alle im gleichen Abstand zur Strahlachse befinden, nicht in gleichem Maße vermindert. Das heißt die Energie der Strahlelektronen ist nicht scharf definiert. Da sich die Ionen ebenfalls nicht immer exakt in der Strahlmitte befinden, wechselwirken sie also nicht mit Elektronen einer scharf definierten Energie, da, wie in Gleichung 3.5 zu sehen, die Elektronenenergie vom Abstand zur Strahlachse abhängt. Das ist der hauptsächliche Effekt, der die Auflösung der Elektronenenergie in diesem Experiment begrenzt.

Eine erste Möglichkeit die Auflösung zu verbessern liegt darin den Strahlstrom möglichst klein einzustellen. Da das Raumladungspotential (siehe Gleichung 3.5) proportional zur Stromstärke des Elektronenstrahls ist, sorgt ein kleinerer Strahlstrom für eine geringere Variation des Potentials und daher eine bessere Auflösung. Allerdings ist die Reaktionsrate in der Falle proportional zum Quadrat des Strahlstroms (Levine et al., 1988)

$$R \propto I_e^2 \quad (3.7)$$

Daher gilt es abzuwägen, wie gering der Strom eingestellt werden kann, ohne die Ereignisrate zu sehr zu verringern. Gerade in dem hier vorgestellten Experiment, bei der Messung mit schnellem Scan, wurde aufgrund der Kurzlebigkeit des Neon-artigen Ladungszustandes von Krypton lediglich $\frac{1}{200}$ -stel der Zeit gemessen, während in der restlichen Zeit das Neon-artige Krypton erzeugt wurde.

Eine zweite Methode zur Verbesserung der Auflösung basiert auf einer Verringerung der Temperatur der Ionen in der Falle. Man nehme an, dass es sich bei der Ionenwolke um ein ideales Gas handelt. Sei T_{Ion} dann die Temperatur der gefangenen Ionenwolke, so ist die mittlere kinetische Energie eines Ions, gemäß der kinetischen Gastheorie

$$\overline{E_{\text{kin}}} = \frac{3}{2} k_B T_{\text{Ion}} \quad (3.8)$$

mit der Boltzmannkonstante k_B (Richter, 2010). Daraus lässt sich leicht mithilfe von Gleichung 3.5 der maximale Abstand r_{max} von der Strahlmitte für ein solches Ion mit der Ladung q von der Strahlachse bestimmen:

$$r_{\max} = \begin{cases} r_H \sqrt{\frac{6k_B T_{\text{Ion}} \pi v_e \epsilon_0}{I_e q} - 2 \ln \left(\frac{r_H}{r_D} \right)} & r \leq r_H \\ r_D e^{\frac{3k_B T \pi v_e \epsilon_0}{I_e q}} & r > r_H \end{cases} \quad (3.9)$$

Damit hängt also die radiale Ausdehnung der Ionenwolke maßgeblich von deren Temperatur ab. Ist die radiale Ausdehnung der Ionenwolke klein, findet nur eine Interaktion mit den Elektronen nahe der Strahlachse statt, wodurch auch die Energie der beteiligten Elektronen eingeschränkt wird. Flacht man nun die Falle in axialer Richtung ab, entkommen die Ionen mit der höchsten Energie der Falle, die Temperatur sinkt und folglich auch der Radius der Wolke. Diese Methode bezeichnet man als evaporatives Kühlen (Beilmann, López-Urrutia, Mokler & Ullrich, 2010). Auch hierbei gilt es wieder abzuwägen, wie flach die Falle eingestellt werden kann, da sich in einer sehr flachen Falle deutlich weniger Ionen befinden und die Reaktionsrate wieder sinkt.

In diesem Experiment wurde durch eine Kombination der beiden Methoden versucht, die Auflösung bei einer nicht zu kleinen Reaktionsrate zu optimieren.

3.2 Messverfahren

3.2.1 Vorbereitende Messungen

Bevor die eigentliche Messung an hochgeladenem Krypton gemacht werden konnte, mussten zunächst einige Kalibrationen vorgenommen werden. Zum Einen musste der Röntgendetektor kalibriert werden und zum Anderen eine Messreihe für die Korrektur der Elektronenstrahlenergie bezüglich des Raumladungspotentials durchgeführt werden.

Zur Kalibration des Röntgendetektors wurde das Röntgenspektrum von hochgeladenem Argon und Eisen aufgenommen. Dabei wurden jeweils dielektronische Resonanzen betrachtet. Wie die Aufnahme der dielektronischen Resonanzen durchgeführt wurde ist im nächsten Abschnitt 3.2.2 beschrieben.

Die vom Röntgendetektor angegebenen Kanäle wurden mit theoretisch berechneten Werten verglichen und so durch Interpolation jedem Kanal des Detektors eine Energie zugeordnet.

Von einer zuvor durchgeführten Messung befanden sich noch genügend Eisenionen in der Falle, um die Kalibration durchzuführen. Das für die Kalibration verwendete Argon stammt aus der Luft, wo es etwa 1% des Gemischs ausmacht (Tschegg, Heindl & Sigmund, 1984).

Für die Messung mit Argon wurde eine Spannung von -1900 V an die Glühkathode angelegt und das Potential der Driftröhren zyklisch von 1100 V bis 0 V und wieder bis 1100 V variiert.

Damit konnte in der Falle Helium-artiges Argon erzeugt werden. Die Verwen-

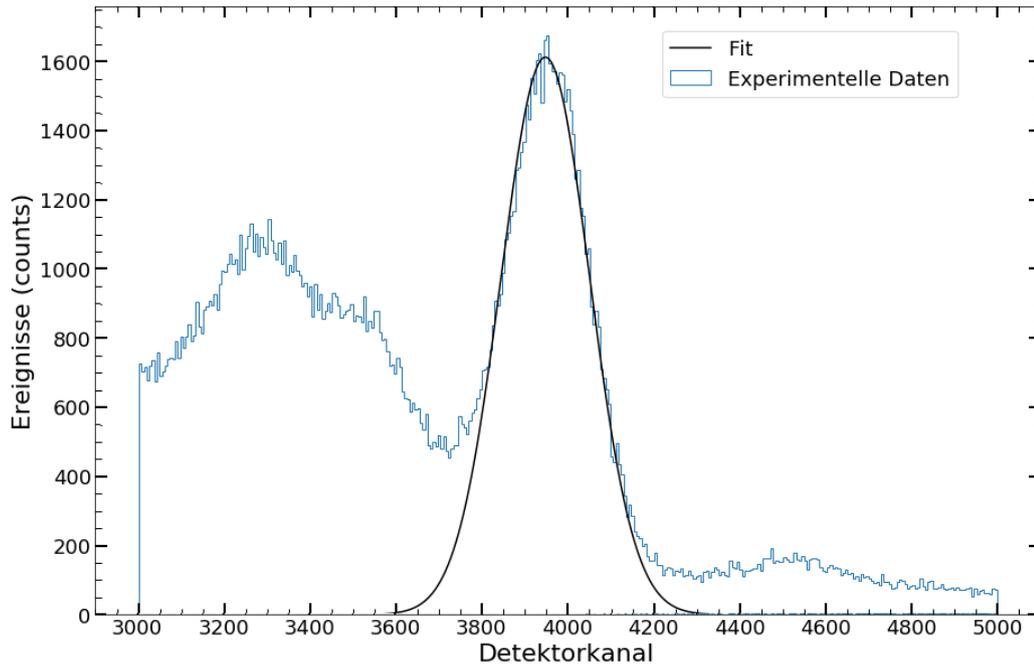


Abbildung 3.6: Aufgenommenes Röntgenspektrum von Argon zur Energiekalibration; Für den Fit der Gaußkurve K_α -Linie ergibt sich für das Linienzentrum $x_0 = 3947,4(9)$ Kanäle und für die Breite des Peaks $\text{FWHM} = 242,5(26)$ Kanäle; Die Energie der K_α -Photonen beträgt etwa 3110 eV .

dung eines Helium-artigen Systems für diese Kalibration ist deshalb sinnvoll, weil die einfache Atomstruktur dafür sorgt, dass theoretische Berechnungen der Übergangsenergien genaue Ergebnisse liefern.

Die KLL-Resonanzen von Argon ließen sich aufnehmen. Entsprechend handelte es sich bei den abgestrahlten Photonen um K_α -Photonen. Deren Energie liegt, gemäß durchgeführter FAC-Berechnungen, bei etwa 3110 eV . Die genaue Position des Peaks im aufgenommenen Spektrum wird mittels des Fits einer Gaußkurve ermittelt.

Ebenso wurde für die Messung der LMM-Resonanzen von Eisen eine Glühkathodenspannung von -500 V angelegt und die Driftröhrenspannung von 0 V bis 1100 V variiert. Bei Eisen wurden nicht die KLL-Resonanzen des Helium-

artigen Systems betrachtet, da die Photonen, die bei diesen Übergängen erzeugt werden, eine deutlich höhere Energie haben, als es bei den anderen untersuchten Übergängen der Fall ist. Daher war der Verstärker, der das Signal des Röntgendetektors verstärkt, auf den niederenergetischen Bereich eingestellt, weshalb dort die Auflösung deutlich besser war und die Wahl auf die LMM-Übergänge fiel. Beim Eisenspektrum wurde die Energie der 3d-2p-Linienschar (Shah et al., 2019) betrachtet. Deren theoretische Energie wurde mit dem FAC als etwa 955 eV bestimmt.

Aus den Datenpunkten der beiden Messungen lässt sich nun eine lineare Zuordnung zwischen Detektorkanälen und Photonenenergien ableiten:

$$E_\gamma = 0,903 \frac{\text{eV}}{\text{Ch}} N_{\text{Channel}} - 448 \text{ eV} \quad (3.10)$$

Wie man in den Abbildungen 3.6 und 3.7 sehen kann, liegt die Auflösung des Röntgendetektors (FWHM) bei etwa 200 eV. Daher ist die Genauigkeit der hier vorgenommenen Kalibration ausreichend. Durch die Verwendung zusätzlicher Übergänge bekannter Energie könnte noch eine genauere Zuordnung durchgeführt werden, was hier aber nicht nötig ist.

Als weitere vorbereitende Messung musste das in Kapitel 3.1 angesprochene Raumladungspotential in Abhängigkeit des Strahlstroms bestimmt werden, um später genaue Werte für die Elektronenenergien zu erhalten, bei denen die untersuchten dielektronischen Übergänge auftreten.

Der Einfluss der Elektronen führt zu einer Verringerung der Spannungsdifferenz zwischen Elektronenkanone und der Fallenmitte, gemäß des erzeugten Raumladungspotentials (Gleichung 3.5). Dadurch wird bei einem höheren Strahlstrom eine größere Beschleunigungsspannung benötigt, um die gleiche Elektronenenergie zu erreichen. Daher treten dann Resonanzen bei einer scheinbar höheren Elektronenenergie auf, wenn man diese lediglich auf die eingestellte Beschleunigungsspannung zurückführt. Daher muss die Größe dieser scheinbaren Verschiebung bestimmt werden, um diese abzuziehen, und dann aus der Beschleunigungsspannung die tatsächliche Elektronenenergie zu erhalten.

Dazu wurde bei sonst unveränderten Prozessparametern für fünf verschiedene Stromstärken I_e des Elektronenstrahls ein Spektrum der dielektronischen Resonanzen von hochgeladenem Krypton aufgenommen. Die präsenten Ladungszustände waren dabei nicht bekannt, was allerdings keine Rolle für diese Messung spielt. Es mussten sich nur in jedem Spektrum die gleichen Linien

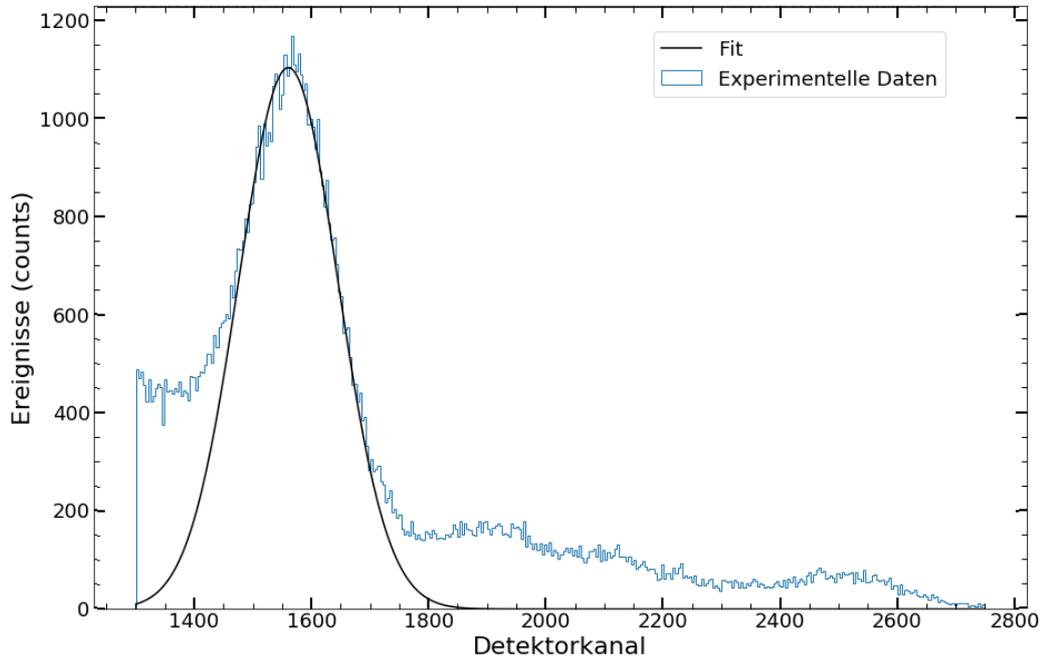


Abbildung 3.7: Aufgenommenes Röntgenspektrum von Eisen zur Energiekalibration; Für den Fit der Gaußkurve an die K_{α} -Linie ergibt sich für das Linienzentrum $x_0 = 1559,8(9)$ Kanäle und für Breite des Peaks $\text{FWHM} = 197,8(28)$ Kanäle; Die Energie der K_{α} -Photonen beträgt etwa 955 eV.

identifizieren lassen. Tatsächlich treten bei jedem aufgenommenem Spektrum andere Linien auf und die Intensitätsverhältnisse der verschiedenen Linien sind jeweils unterschiedlich. Der Grund dafür ist, dass auch die Stromstärke des Elektronenstrahls die vorhandene Ladungszustandsverteilung beeinflusst (Penetrante et al., 1991).

Drei der aufgenommenen Spektren sind in Abbildung 3.8 zu sehen. Bei diesen handelt es sich um LMM-Resonanzen.

Drei verschiedene Linien ließen sich in allen fünf Aufnahmen identifizieren. Deren Lage wurde mithilfe eines Gaußfits bestimmt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.9 zu sehen. Die Unsicherheit der experimentell bestimmten Lage der Linien entspricht dabei der Unsicherheit des Fits für die Lage der Linienzentren. Für jede identifizierte Linie wurde ein linearer Fit an die Messpunkte gelegt. Wie in Gleichung 3.5 ersichtlich ist, hängt das Raumladungspotential nicht nur linear vom Strom ab, sondern wird auch von der Elektronengeschwindigkeit beeinflusst. Diese wiederum hängt von der Beschleunigungsspannung ab:

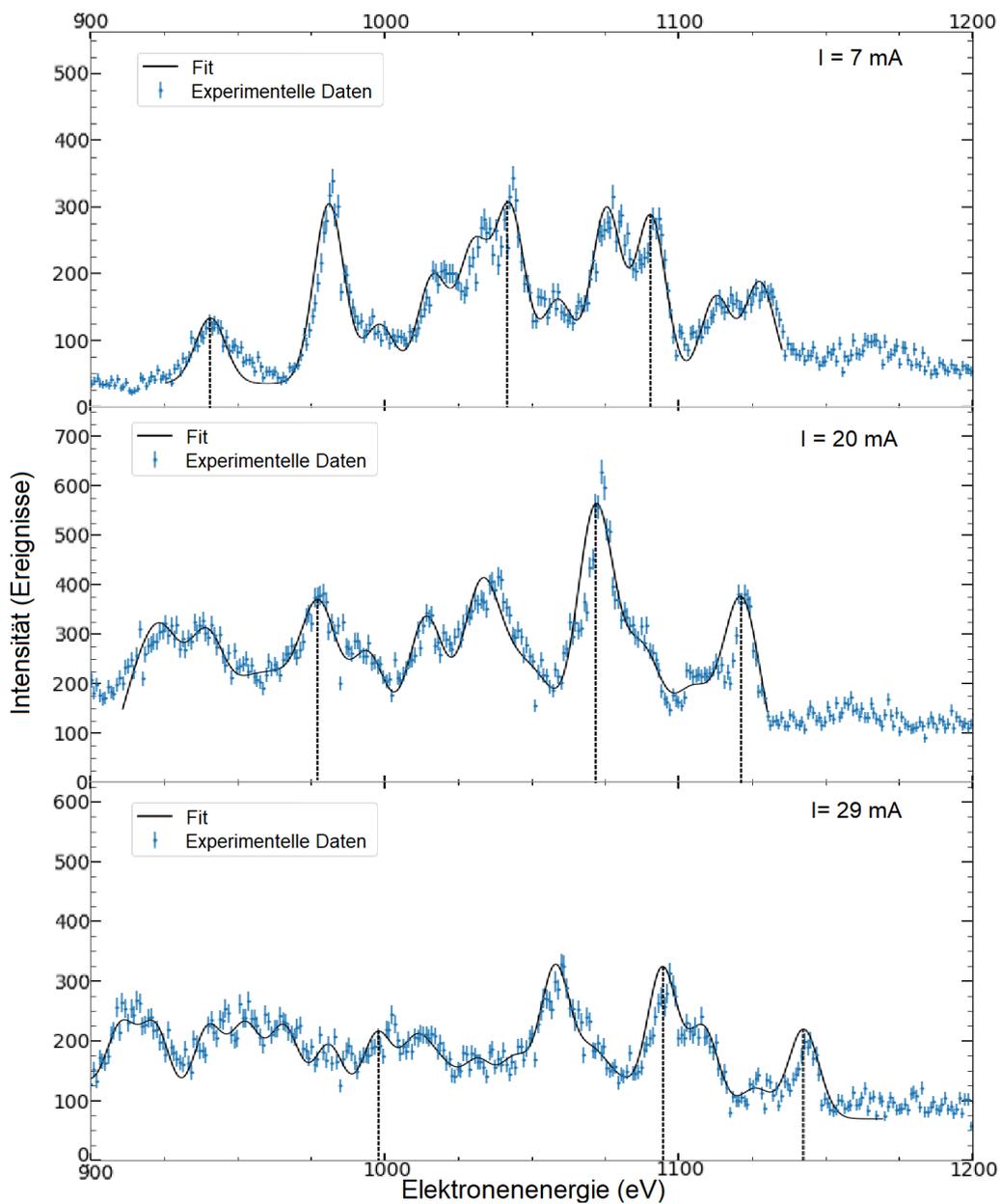


Abbildung 3.8: Drei der fünf aufgenommenen Spektren, die für die Bestimmung der Variation des Potentials mit dem Strahlstrom verwendet wurden. Die ausgemessenen Linien sind markiert. Es fallen große Unterschiede zwischen den Spektren in Folge unterschiedlicher Ladungszustandsverteilungen auf.

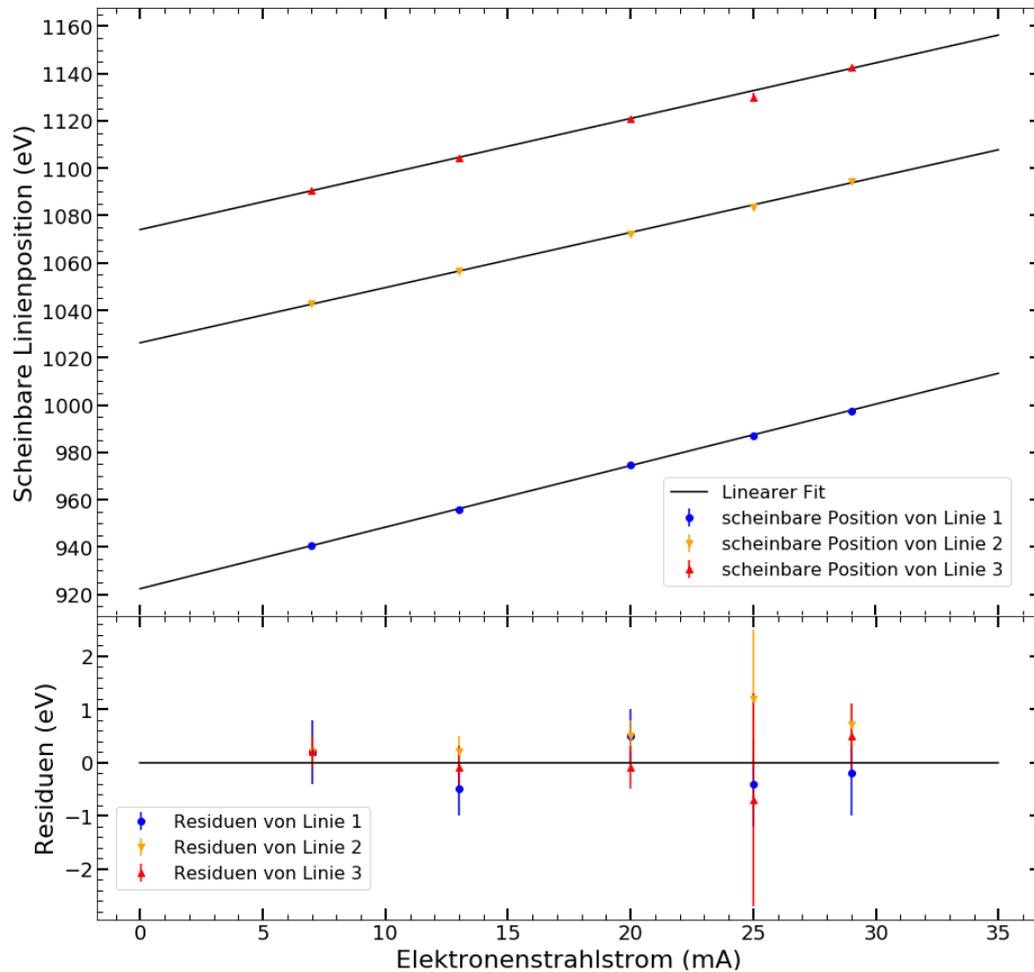


Abbildung 3.9: oben: Position von drei unterschiedlichen Spektrallinien bei hochgeladenem Krypton in Abhängigkeit vom Elektronenstrahlstrom. Die untersuchten Linien sind in Abbildung 3.8 dargestellt und hier entsprechend der Elektronenenergie, bei denen sie auftreten, nummeriert. Die farbigen experimentellen Datenpunkte wurden mittels eines Gaußfits am Spektrum, das bei der jeweiligen Stromstärke aufgenommen wurde, ermittelt. Der eingetragene Fehler wurde aus dem Fit bestimmt. Ein linearer Zusammenhang ist bei allen drei ausgewählten Linien erkennbar und die Abhängigkeit der Linienposition vom Strahlstrom ist bei allen drei Linien innerhalb der Fehlergrenzen gleich. unten: Residuen des linearen Fits an die drei Linien. Weil sich die Linien in der Aufnahme bei einem Strahlstrom von 25 mA weniger stark vom Untergrund abhoben, war die Bestimmung der Linienpositionen mit einem größeren Fehler behaftet.

$$v_e = \frac{p_e}{m_e} = \frac{\sqrt{\frac{E^2}{c^2} - m_e^2 c^2}}{m_e} = \frac{\sqrt{\frac{(eU)^2}{c^2} - m_e^2 c^2}}{m_e} \quad (3.11)$$

Daher erwartet man für jede Elektronenenergie ein anderes Raumladungspotential bei gleichem Strom. Allerdings ist dieser Effekt bei diesem Experiment klein und wird hier vernachlässigt. Zudem wurden bei dieser Messung Linien ausgewählt, die bei für das folgende Experiment typischen Elektronenstrahlenergien zu finden sind.

Innerhalb der Unsicherheit des Fits stimmen die drei ermittelten Abhängigkeiten der Linienposition vom Strahlstrom miteinander überein. Das zeigt auch, dass die Variation des Raumladungspotentials mit der Elektronengeschwindigkeit die Elektronenstrahlenergie nicht besonders stark beeinflusst. Durch die Vermessung der Lage weiterer Linien, ließe sich dieser Einfluss genauer bestimmen. Dazu sollten Linien gewählt werden, die im Elektronenenergiespektrum möglichst weit auseinander liegen. In den hier vorgenommenen Messungen konnten jedoch keine Linien in allen fünf gemachten Aufnahmen eindeutig identifiziert werden, die einen großen Abstand zu den bereits untersuchten Linien haben.

Durch Mittelung über die drei erhaltenen Ergebnisse findet man eine Abhängigkeit des Raumladungspotentials 3.5 vom Strahlstrom von

$$\Phi_e = -2,43(15) \frac{\text{eV}}{\text{mA}} I_e [\text{mA}] \quad (3.12)$$

3.2.2 Messung dielektronischer Rekombination von Krypton

Wie in Abschnitt 2.4 beschrieben wurde, handelt es sich bei dielektronischer Rekombination um einen resonanten Prozess. Um ihn zu beobachten, müssen die Ionen in der Falle mit Elektronen genau definierter Resonanzenergien in Kontakt gebracht werden. Da eine Vielzahl an Resonanzen untersucht werden soll, wird dafür die Elektronenstrahlenergie durch die Variation des Driftröhrenpotentials über einen großen Bereich zeitlich variiert.

Die durchgeführte Messung besteht aus mehreren Zyklen. Zunächst findet eine Brütungsphase statt, in der das Gas in der Falle auf die gewünschten Ladungszustände gebracht wird. Während dieser Phase ist die eingestellte Elektronenstrahlenergie konstant und liegt zwischen der Ionisierungsenergie des Zustands, der erzeugt werden soll und der Ionisierungsenergie des Zustands, der eine um Eins erhöhte Ladung hat. In diesem Experiment wird zur

Erzeugung von Neon-artigem Krypton also eine Spannung zwischen 1205 V und 2928 V angelegt.

Eine Brütungsphase wird bei der Untersuchung von Neon-artigem Krypton und einigen anderen Ladungszuständen deshalb benötigt, weil viele der dielektronischen Resonanzen, etwa die LMM-Resonanzen, bei einer Elektronenenergie deutlich unterhalb der Produktionsschwelle dieser Ladungszustände auftreten. Daher lassen sich diese Resonanzen nicht beobachten, falls man nur diejenigen Ionen beobachtet, die während des Scanvorgangs erzeugt werden.

Nach der Brütungsphase findet der eigentliche Scan statt. Dabei wird die Elektronenstrahlenergie zunächst mit einer konstanten Rate verringert und anschließend wieder mit derselben Rate auf das Niveau während der Brütungsphase gebracht. Das Minimum der Elektronenstrahlenergie ist dann in der Regel bei einem Driftröhrenpotential von 0 V erreicht. Dann beträgt die Beschleunigungsspannung nur noch

$$U_e = \Phi_{\text{Falle}} + U_{\text{Kathode}} + \Phi_{\text{Raumladung}}$$

Um jedem Ereignis, das der Röntgendetektor aufzeichnet, eine entsprechende Elektronenstrahlenergie zuzuordnen, wird das verstärkte Signal des Röntgendetektors zusammen mit einer digitalen Spannung, welche einen Zeitpunkt innerhalb des Messzyklus markiert, an das Datenaufnahmesystem übergeben. Da jeder Zeitpunkt einer gewissen Strahlenergie entspricht, hat man nun eine eindeutige Zuordnung von Elektronenenergie und Ereignis am Detektor. Um die beiden Scanhälften zu unterscheiden, diejenige, bei der die Elektronenenergie verringert wird und diejenige, bei der sie erhöht wird, wird beiden Abschnitten jeweils ein unterschiedlicher Spannungsbereich zugeordnet.

Die beiden Signale, für die Einstellung der Elektronenenergie und für die Zeitmarkierung, werden mittels des Funktionsgenerators (siehe Abschnitt 3.1) erzeugt. Das Signal, das an die Driftröhren zur Festlegung der Strahlenergie übergeben wird, wird mit dem Hochspannungsverstärker (siehe Abschnitt 3.1) mit einem Faktor von $\frac{3000\text{V}}{\text{V}}$ verstärkt. Das Zeitsignal wird mit einem ADC zur Verwertung in der Messanordnung digitalisiert und dann an das Datenaufnahmesystem übergeben. Die beiden, vom Funktionsgenerator erzeugten, Signale sind in Abbildung 3.10 zu sehen.

Zusätzlich zu diesem Messzyklus muss die Falle auch regelmäßig geleert werden, um eine Anhäufung ungewollter Fremdionen zu verhindern. Dazu wird das Fallenzentrum auf ein stark positives Potential gesetzt. Dadurch werden die positiv geladenen Ionen aus der Falle hinaus beschleunigt, die Falle ist wieder leer und kann mit den gewünschten Ionen erneut aufgefüllt wer-

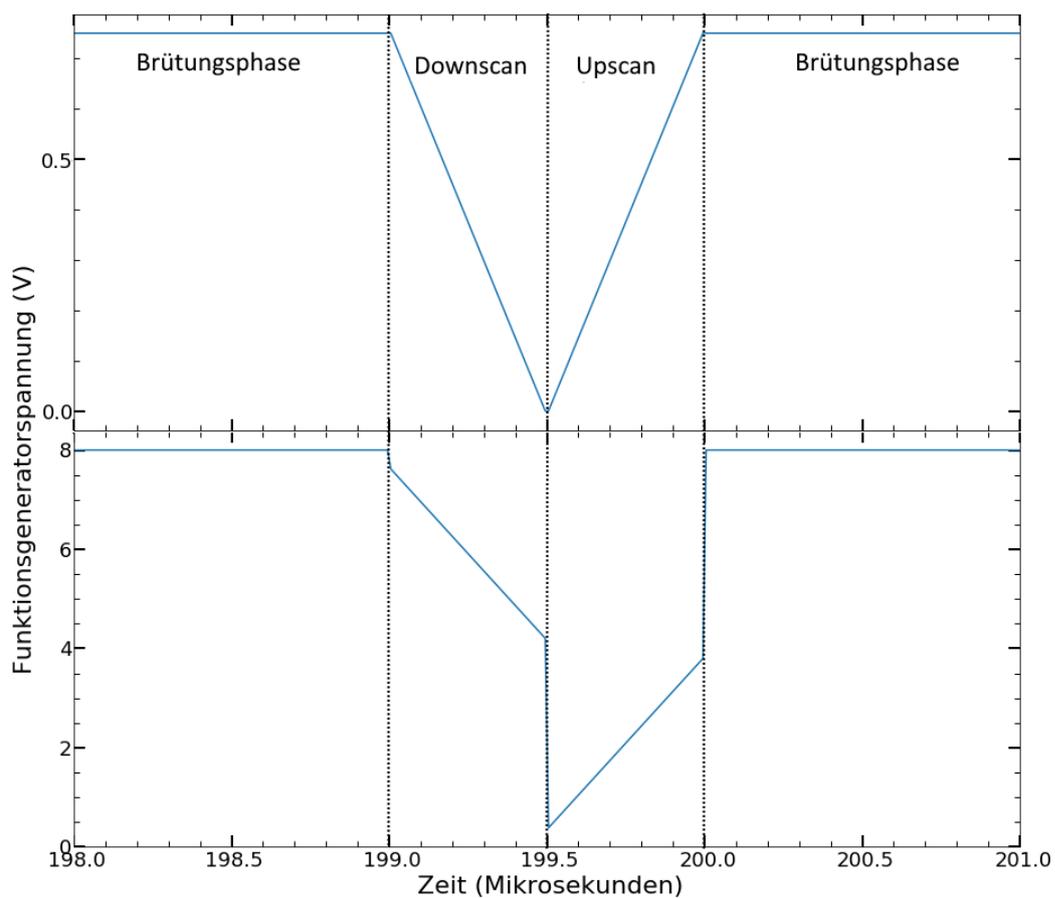


Abbildung 3.10: Vom Funktionsgenerator erzeugte Signale zur Steuerung des Messzyklus während des schnellen Scans. **oben:** Signal zur Anpassung der Driftröhrenspannung, übergeben an den Spannungsverstärker (Trek Model 30/20A) mit einem Verstärkungsfaktor von $\frac{3000\text{ V}}{\text{V}}$; **unten:** Signal zur Erstellung der Zeitmarken für die Ereignisse am Röntgendetektor. Den beiden Hälften des Scans werden jeweils andere Spannungsbereiche zugewiesen, sodass diese später unterschieden werden können.

den. Dabei ist darauf zu achten, dass die Leerung der Falle nicht immer am gleichen Zeitpunkt im Messzyklus stattfinden sollte, da sonst Lücken im aufgenommenen Spektrum auftreten. In diesem Experiment betrug die Zeit zwischen Leerungen der Falle etwa 17 s.

Die gesamte Messung wurde bei zwei unterschiedlichen Einstellungen durchgeführt.

Einmal betrug die Scanzeit 1800 s. Die Driftröhrenspannung wurde währenddessen von 100 V bis 1200 V, bei einer Stromstärke von 8 mA, variiert. Bei einem solch langen Scan ist es nicht notwendig, eine Brütungsphase in den Messzyklus einzubauen, da ohnehin für jede Elektronenenergie, durch die langsame Variation, die Verteilung der Ladungszustände in der Falle im Gleichgewichtszustand ist.

Daher befanden sich bei dieser Messung eher niedrigere Ladungszustände in der Falle. Neon-artiges Krypton hingegen, für dessen Erzeugung Elektronenenergien von mindestens 1205 eV benötigt werden (siehe Tabelle 2.1), ließ sich kaum nachweisen.

Um die dielektronischen Resonanzen von Neon-artigem Krypton zu untersuchen, musste der oben beschriebene Messzyklus, bestehend aus Brütungs- und Scanphase, eingesetzt werden. Die Scanzeit wurde dabei kurz gewählt, um einen Zerfall des Neon-artigen Zustandes in niedrigere Ladungszustände während des Messvorgangs möglichst zu verhindern.

Deswegen wurde in einer zweiten Messung die Driftröhrenspannung innerhalb von 500 μ s zwischen 0 V und 2250 V variiert. Zwischen den Scanphasen wurde für 199 ms bei einer Driftröhrenspannung von 2250 V Neon-artiges Krypton gebrütet. Die schnelle Variation der Spannung von $4,5 \frac{\text{V}}{\mu\text{s}}$ war mit dem verwendeten Hochspannungsverstärker (Trek Model 30/20A) gut zu erreichen. Dieser kann die ausgegebene Spannung, laut Herstellerangaben, mit einer Geschwindigkeit von bis zu $550 \frac{\text{V}}{\mu\text{s}}$ variieren. Die Stromstärke des Strahls betrug 34 mA. Die Stromstärke musste bei dieser Messung größer gewählt werden als zuvor, weil die Anzahl der detektierten Ereignisse pro Zeitintervall quadratisch vom Strom abhängt (siehe Abschnitt 3.1.2. Da während des Experiments effektiv nur ein $\frac{1}{200}$ -stel der Zeit gemessen wurde, musste die Reaktionsrate auf einem hohen Niveau gehalten werden, zu Ungunsten der Auflösung.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Schneller Scan

Da die Ladungszustandsverteilung bei der Messung mit der kürzeren Scanzeit klarer ist und die vorhandenen Ladungszustände einfacher theoretisch zu behandeln sind, werden zunächst die Ergebnisse dieser Messung dargestellt. Wie in Kapitel 3.2 angesprochen wurde, war eine geringe Messzeit, also ein schneller Scan, in Verbindung mit einer Brütungsphase, nötig, um die Resonanzen des Neon-artigen Zustands aufzunehmen, da einige der Resonanzen bei Elektronenenergien deutlich unterhalb der Produktionsschwelle des Zustands zu beobachten sind. Bei einer zu langen Scanzeit rekombinieren Elektronen mit den Neon-artigen Ionen und die Übergänge des Zustands sind nicht mehr beobachtbar.

4.1.1 Zuordnung von Elektronenstrahlenergie und Zeitsignal

Die während der Messung aufgenommenen Ereignisse wurden, wie in Kapitel 3.2 beschrieben, sowohl einer bestimmten Photonenenergie, als auch einer Elektronenstrahlenergie zugeordnet. Dabei werden die Rohdaten zunächst einem Kanal des Röntgendetektors und einer, durch den Funktionsgenerator generierten Spannung, die den Zeitpunkt im Messzyklus kodiert (siehe Abbildung 3.10), zugewiesen.

Die Eichung des Röntgendetektors wurde bereits in Kapitel 3.2 durchgeführt. Die Zuordnung zwischen Zeitsignal und Elektronenstrahlenergie wurde im ersten Schritt der Auswertung der Daten durchgeführt.

Grob lässt sich diese Zuordnung mithilfe der Parameter des Experiments durchführen. Während der Messung wurde die Driftröhrenspannung um 2250 V

von 0 V bis 2250 V variiert. In den Rohdaten entspricht dies einer Variation des Zeitsignals um 3270 Kanäle. Das Potential der mittleren Driftröhre betrug dabei 14 V und das Potential der Glühkathode -430 V. Der Elektronenstrahlstrom betrug 34 mA. Die durch diesen Strahlstrom entstehende Verschiebung der Elektronenstrahlenergie wird mit dem Ergebnis 3.12 aus dem vorherigen Abschnitt korrigiert.

Nach Gleichung 3.6 erwartet man damit eine lineare Zuordnung zwischen Elektronenstrahlenergie und Zeitsignalkanal von

$$E_{\text{Elektron}} = 0,6881 \frac{\text{eV}}{\text{Kanal}} N_{\text{Kanal}} + 361(5) \text{ eV} \quad (4.1)$$

Der angegebene Fehler für den konstanten Energieoffset in der Umrechnung ergibt sich aus der Unsicherheit des Ergebnisses 3.12 für die Stromabhängigkeit des Potentials.

Um diese erwartete Zuordnung zu überprüfen, wurde zusätzlich ein experimentell aufgenommenes Spektrum der LM n -Resonanzen (das kleine n notiert in diesem Zusammenhang eine unbestimmte Hauptquantenzahl), welches im Folgenden genauer analysiert werden wird, mit der theoretisch bestimmten Lage der LM n -Resonanzen von Neon-artigem Krypton verglichen. Durch diesen Vergleich wurde ein linearer Fit erstellt, der in Abbildung 4.1 zu sehen ist. Die Lage der Linien im experimentellen Spektrum wurde mithilfe eines Gaußfits bestimmt.

Dieser lineare Fit führt zu einer Zuordnung von

$$E_{\text{Elektron}} = 0,6889(17) \frac{\text{eV}}{\text{Kanal}} N_{\text{Kanal}} + 370,8(23) \text{ eV} \quad (4.2)$$

Die Fehler der einzelnen Datenpunkte in Abbildung 4.1 ergeben sich aus der Unsicherheit bei der Bestimmung der Linienposition mithilfe des Gaußfits. Die Unsicherheit im Ergebnis 4.2 ergibt sich aus dem durchgeführten Least-Square-Fit.

Damit stimmt die erwartete Zuordnung mit der Überprüfung durch das theoretische Spektrum innerhalb der Fehlergrenzen überein. Mit dieser Überprüfung wurden etwaige systematische Verfälschungen der Elektronenstrahlenergie durch den verwendeten Aufbau, die beispielsweise durch eine fehlerhafte Eichung der Spannungsquellen entstehen könnten, ausgeschlossen.

Diese Überprüfung zeigt auch bereits, dass die Position der Linien im theoretischen und experimentell aufgenommenen Spektrum grob übereinstimmt. Bei der Betrachtung der Residuen des linearen Fits in Abbildung 4.1 fällt al-

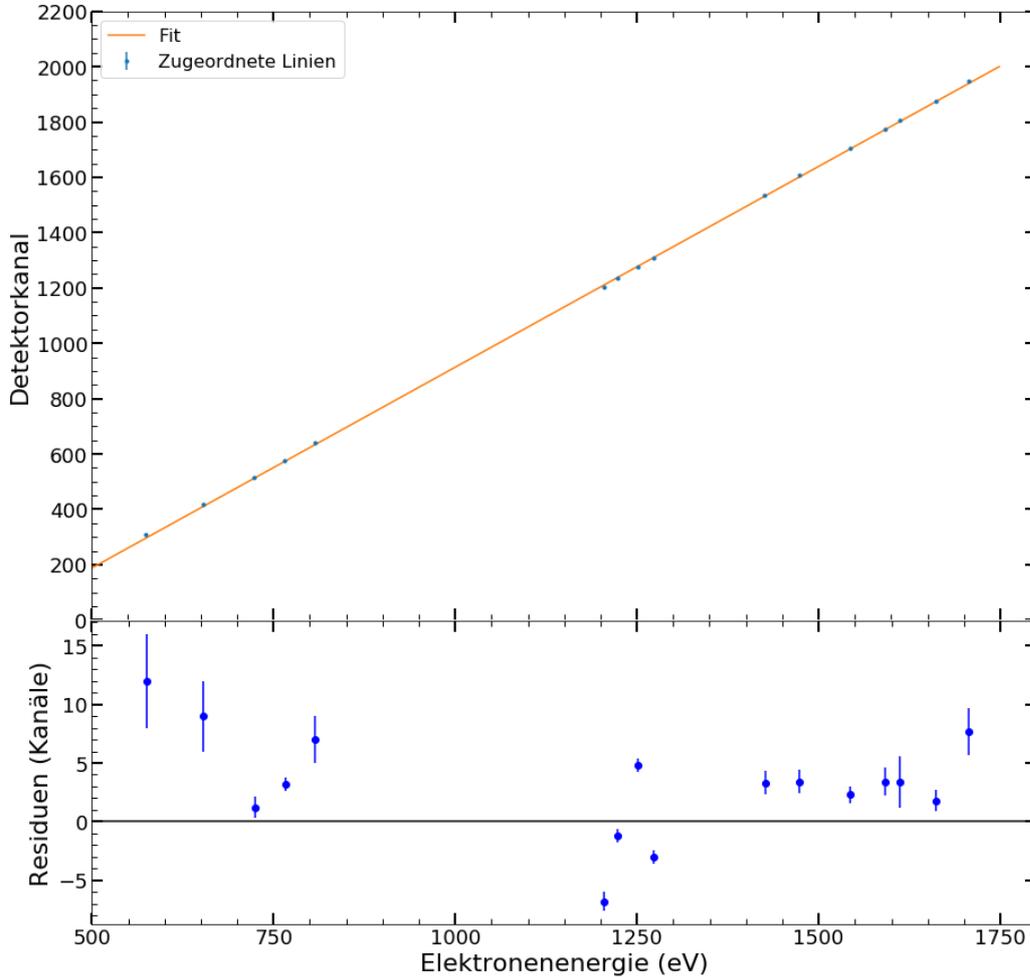


Abbildung 4.1: Linearer Fit zur Zuordnung von Zeitsignal und Elektronenstrahlenergie. Ein experimentell aufgenommenes Spektrum der LMn -Resonanzen von Krypton wurde mit der theoretisch bestimmten Lage der LMn -Resonanzen von Neon-artigem Krypton verglichen und korrespondierende Linien in das Diagramm eingetragen. Die experimentelle Lage der Linien wurde mithilfe eines Gaußfits bestimmt. Der Fehler der Datenpunkte stammt aus dem Fit. Der lineare Fit führt zu einer Zuordnung von Elektronenenergie und Zeitsignalkanal von $E_{\text{Elektron}} = 0,6889(17) \frac{\text{eV}}{N_{\text{Kanal}}} N_{\text{Kanal}} + 370,8(23) \text{ eV}$; **unten:** Residuen des linearen Fits. Es fällt auf, dass die Unsicherheiten der experimentellen Lage durch den Fitfehler unterschätzt werden, da die Lage der Linien im experimentellen Spektrum zusätzlich noch durch die Resonanzen anderer Ladungszustände verschoben werden.

lerdings auf, dass viele der ermittelten Datenpunkte weiter vom linearen Fit für die Zuordnung von Zeitsignalkanal und Elektronenstrahlenergie entfernt sind, als es der eingetragene Fehler, in Folge der Unsicherheit des Gaußfitergebnisses bei der Bestimmung der Linienposition vermuten lässt. Der Grund dafür ist, dass nicht nur das, als theoretische Referenz betrachtete, Neon-artige Krypton dielektronische Resonanzen erzeugt, sondern auch weitere Ladungszustände im Experiment produziert werden, welche ebenso Resonanzen mit leicht verschobenen Resonanzenergien erzeugen. Welche Ladungszustände während der Messung noch vorlagen, und inwiefern sich die Lage derer dielektronischer Resonanzen von denen des Neon-artigen Zustands unterscheidet, wird im folgenden Abschnitt 4.1.2 betrachtet.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird die Zuordnung, die aus dem Vergleich zwischen Theorie und Experiment verwendet, da diese Methode aufgrund der großen Unsicherheit bei der Bestimmung der Stromabhängigkeit des Raumladungspotentials vermutlich ein genaueres Ergebnis liefert. Außerdem gibt dieses Ergebnis einen Anhaltspunkt dafür, wie groß die Unsicherheit des Proportionalitätsfaktors für die Zuordnung von Elektronenstrahlenergie und Kanal des Messsystems ist.

Der systematischer Fehler, der aufgrund der Unsicherheit bei der Zuordnung von den Kanälen des Datenaufnahmesystems und der Elektronenenergie entsteht, wird bei der Bestimmung von Linienpositionen berücksichtigt. Für dessen Größe wird der Fitfehler des Ergebnisses 4.2 angenommen.

4.1.2 Analyse des Spektrums

Das während des Experiments aufgenommene, zweidimensionale Spektrum ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Auf der Abszisse ist die Elektron- und auf der Ordinate die Photonenenergie aufgetragen. Die Ereignisdichte ist farblich kodiert.

Die dielektronischen LMn -Resonanzen, die untersucht werden sollen, lassen sich bei einer Photonenenergie von 1500 eV bis 2100 eV identifizieren. Wie nach Abschnitt 2.5 erwartet, ergeben sich nur für definierte Elektronenenergien Resonanzen. Ab einer Elektronenenergie von etwa 1700 eV findet man allerdings keine getrennten Linien mehr, sondern ein kontinuierliches Band. Der Grund dafür ist, dass die Elektronenenergie dort groß genug ist, um durch Stoßanregung zu den gleichen Übergängen zu führen, die man auch bei der dielektronischen Rekombination beobachtet. Generell sieht man, dass überall dort, wo die Elektronenenergie die Photonenenergie übersteigt, aus diesem Grund die Ereignisdichte deutlich größer ist. Auch der starke Untergrund bei niedrigen Photonenenergien wird hauptsächlich durch Stoßanregung erzeugt.

Zusätzlich wird die Untergrundstrahlung durch Übergänge von Fremdatomen in der Falle und Übergänge zwischen höherenergetischen Schalen und der M-Schale der Kryptonionen erzeugt.

Neben der dielektronischen Rekombination und der Stoßanregung findet man im zweidimensionalen Spektrum auch noch durch radiative Rekombination entstandene Photonen. Dabei handelt es sich um die diagonal über den dielektronischen Resonanzen verlaufenden Linien. Wie in Gleichung 2.19 beschrieben, hängt die Energie des abgestrahlten Photons linear von der Energie des rekombinierenden Elektrons ab, wodurch der diagonale Verlauf entsteht.

Bei den dielektronischen Resonanzen fällt auf, dass sich zwei Bänder unterschiedlicher Photonenenergie ausbilden, eines mit einem Linienzentrum bei etwa 1700 eV und eines mit einem Zentrum bei etwa 1900 eV.

Die höherenergetische Linie kommt dabei durch dielektronische Rekombinationsprozesse zustande, bei denen das Relaxationsphoton durch den Übergang 3d-2p erzeugt wird. Die niederenergetische Linie wird dann entsprechend durch Relaxationsphotonen, die beim Übergang 3s-2p entstehen, erzeugt (Buchet et al., 1988). Eine dritte Linie, die den Übergang 3p-2p beschreibt, tritt nicht auf, da dieser Übergang, aufgrund der Auswahlregel $\Delta l = \pm 1$, verboten ist (Meschede, 2015).

Bei einigen dielektronischen Resonanzen findet man im zweidimensionalen Spektrum in Abbildung 4.2 auch noch erhöhte Ereignisdichten bei sehr niedrigen Photonenenergien (unter 1000 eV). Etwa bei Elektronenenergien von 1400 eV bis 1700 eV, wo auch dielektronische Resonanzen auftreten. Dabei handelt es sich um Relaxationsphotonen, die bei Übergängen einer höheren Schale in die M-Schale entstehen.

In Abbildung 4.3 ist eine Projektion des Spektrums der L-M-Übergänge auf die Photonenenergie dargestellt. Durch den Fit zweier Gaußkurven lassen sich die Energien der beiden verschiedenen Übergänge als 1676 eV (3s-2p) und 1881 eV (3d-2p) bestimmen, also existieren tatsächlich wie erwartet zwei Gruppen an Übergängen, mit jeweils leicht unterschiedlicher Energie. Verwendete man einen Röntgendetektor höherer Auflösung, ließen sich die Linien auch separat auflösen.

Interessanter als die Projektion der Ereignisse auf die Photonenenergie ist die Betrachtung der Elektronenenergie der Ereignisse. Wie in Kapitel 2.5 erörtert wurde, findet die dielektronische Rekombination nur bei spezifischen Elektronenenergien statt. Diese hängen von der Schale ab, in die das Hüllenelektron bei der Rekombination gehoben wird und dem Ladungszustand der Ionen. Daher erwartet man jeweils für die verschiedenen LMn-Übergänge einzelne Scharen, wobei die individuellen Linien Rückschlüsse auf die vor-

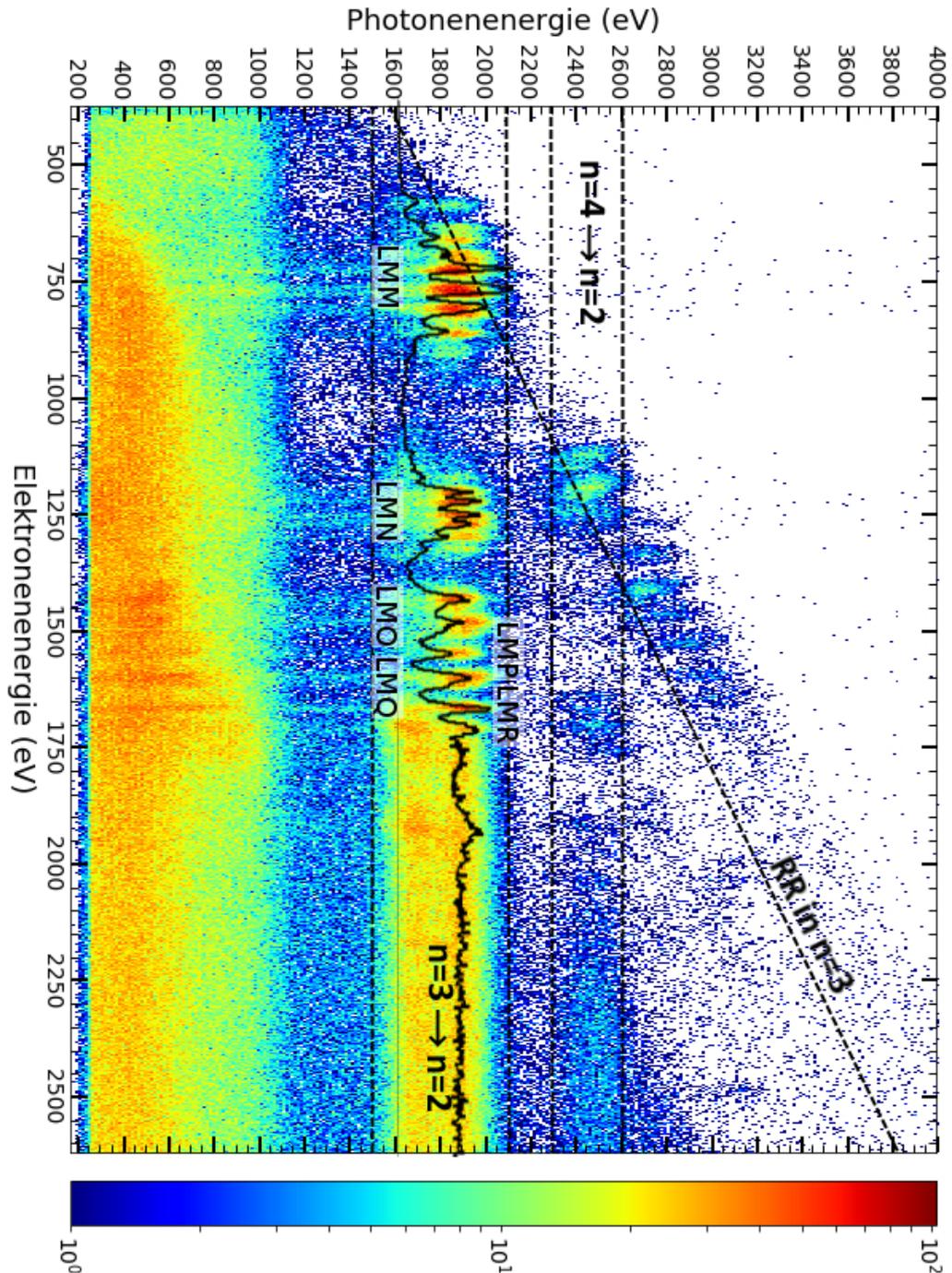


Abbildung 4.2: Zweidimensionales Spektrum der Messung von hochgeladenem Krypton mit schnellem Scan. Dabei ist auf der x-Achse die Elektronenenergie und der y-Achse die Photonenenergie angegeben. Die Ereignisdichte ist farblich kodiert. Man sieht Bänder, erzeugt durch Elektronenübergänge von der M- in die L-Schale und bei höheren Energien von der N- in die L-Schale. Die starken LMM-Resonanzen findet man bei einer Elektronenenergie von etwa 750 eV, die LMN-bis LMR-Resonanzen zwischen 1200 eV und 1700 eV. Durch radiative Rekombination entsteht ein diagonales Band. Bei niedrigen Photonenenergien liegt eine hohe Ereignisrate, bedingt durch Fremdatome und Stoßanregung, vor. Die Projektion der Ereignisse einer Photonenenergie zwischen 1500 eV bis 2100 eV, welche die LMn -Resonanzen umfassen ist eingebettet

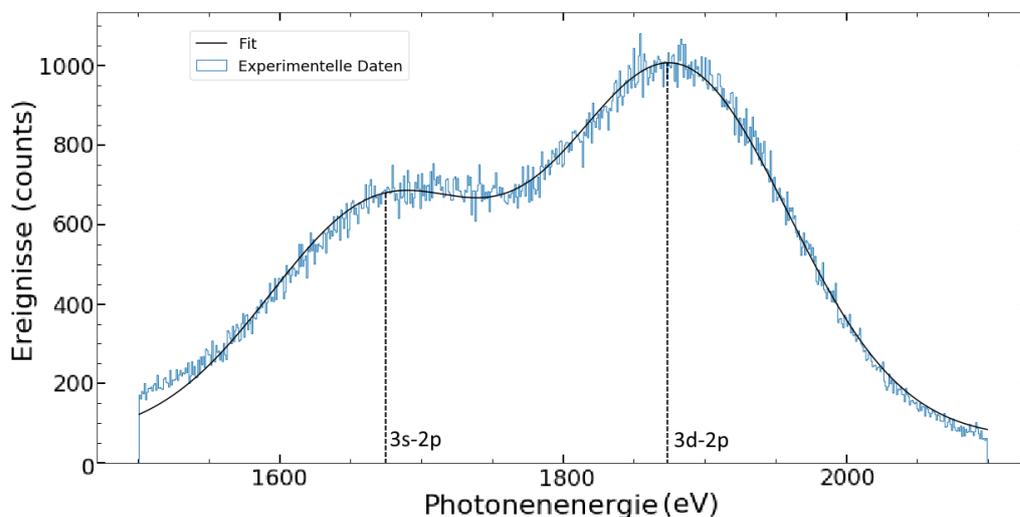


Abbildung 4.3: Projektion der Photonenergebnisse, die während des schnellen Scans aufgenommen wurden, auf die Photonenergie. Mittels der Summe zweier Gaußkurven lassen sich zwei Linienzentren identifizieren (1676 eV und 1881 eV), $\text{FWHM} = 207$ eV; Bei diesen beiden Linien handelt es sich um die 3s-2p- (1676 eV) und die 3d-2p-Übergänge (1881 eV)

handenen Ladungszustände zulassen.

Abbildung 4.5 zeigt die Projektion der Intensität der starken LMM-Resonanzen auf die Elektronenenergie. Die, gemäß Kapitel 2.5 mithilfe des FAC berechneten, theoretischen Kurven für verschiedene Ladungszustände sind gemeinsam mit den experimentellen Daten eingetragen. Man sieht deutlich, dass sich das aufgenommene Spektrum hauptsächlich aus Linien von Neon-artigem, Natrium-artigem und Magnesium-artigem Krypton zusammensetzt. Die experimentell gemessenen und theoretisch berechneten Spektren stimmen für die LMM-Resonanzen in der Lage der Linien im Elektronenenergiespektrum bis auf etwa 10 eV miteinander überein. Diese Abweichung lässt sich gut mit den, die Auflösung begrenzenden, Mechanismen, die in Abschnitt 3.1.2 angesprochen wurden, erklären. Außerdem sind auch die errechneten Spektren nicht exakt. Unter Berücksichtigung einer größeren Anzahl an Zuständen bei der Configuration Interaction (siehe Abschnitt 2.2) ließe sich die Genauigkeit der Berechnungen, bei längerer Berechnungszeit, noch erhöhen (Gu, 2008). Insgesamt ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment aber ziemlich gut, die Abweichungen liegen in der Größenordnung der experimentellen Linienbreite.

Zur Einschätzung der Ladungszustandsverteilung, und um die experimentel-

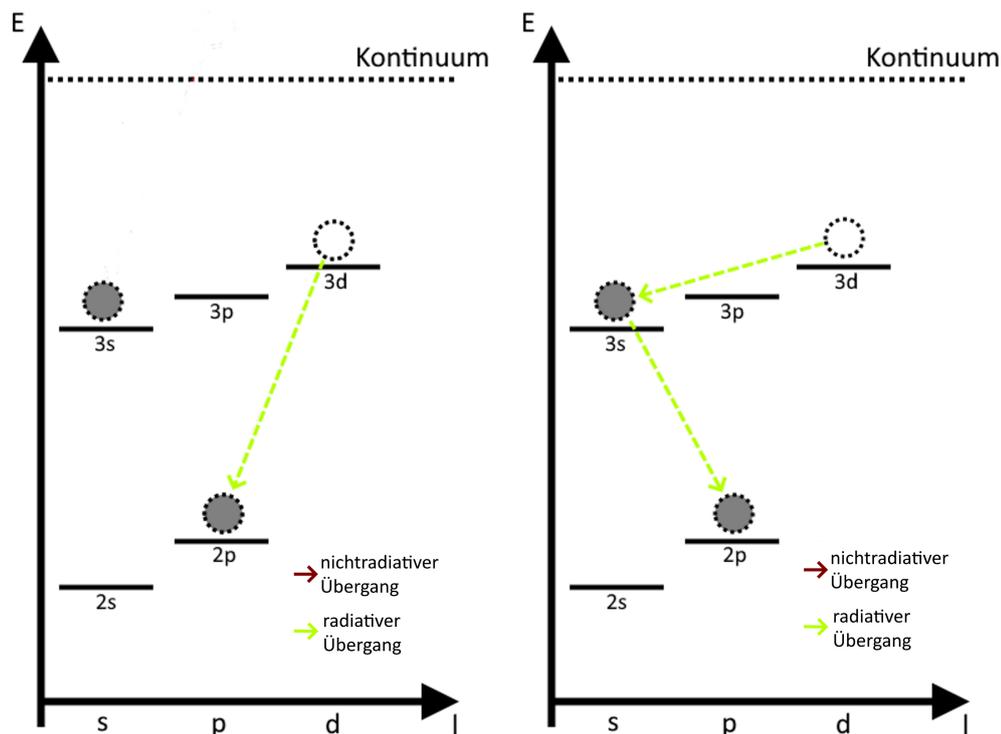


Abbildung 4.4: Zwei mögliche radiative Relaxationspfade ausgehend vom gleichen Zustand nach dem dielektronischen Einfang bei einem Neon-artigen System, die zu unterschiedlichen Photonenenergien führen; **links:** direkte Relaxation vom höheren 3d-Niveau in das, durch den dielektronischen Einfang erzeugte, Loch im 2p-Niveau; **rechts:** Mehrstufige Relaxation, wobei zwei niederenergetische Photonen entstehen. Damit gibt es bei gleicher Energie des rekombinierenden Elektrons verschiedene resultierende Photonenenergien; daher die beiden Linien im Röntgenspektrum

len Aufnahmen möglichst genau mit den theoretischen Berechnungen reproduzieren zu können, wurden die Summe der theoretisch berechneten Spektren der drei Ladungszustände mit verschiedenen Gewichtungen, mit den experimentellen Daten verglichen. Das heißt, dass für verschiedene Gewichtungen a_{Ne} , a_{Na} und a_{Mg} das gesamte theoretische Spektrum

$$X_{\text{total,theo}} = a_{\text{Ne}}X_{\text{Ne}} + a_{\text{Na}}X_{\text{Na}} + a_{\text{Mg}}X_{\text{Mg}} \quad (4.3)$$

mit den Spektren der einzelnen Ladungszustände, X_{Ne} , X_{Na} und X_{Mg} , bestimmt wurde. Der mittlere quadratische Abstand zwischen den Datenpunkten des experimentellen Spektrums, X_{exp} , und der Summe der theoretischen Spektren, $X_{\text{total,theo}}$, wurde dann berechnet und diejenige Gewichtung gefunden, bei der die Abweichung am geringsten war. Bei dieser Methode wurde zusätzlich das Spektrum des Aluminiumartigen Ladungszustands miteinbezogen. Allerdings konnte kein Anteil dieses Spektrums gefunden werden.

Als Abschätzung für die Ladungszustandsverteilung erhält man so: 17 % Neon-artig, 53 % Natrium-artig und 30 % Magnesium-artig. Bei der Bestimmung der Ladungszustandsverteilung wurde auch noch das Spektrum des Aluminium-artigen Kryptons berücksichtigt, allerdings war kein Beitrag des Spektrums dieses Zustands zu erkennen, weshalb davon auszugehen ist, dass sich kaum Aluminium-artiges Krypton, während dieser Messung, in der Falle befand.

Damit ist der Anteil an Neon-artigem Krypton, auch unter Verwendung der Brütungsphase und mit einer sehr kurzen Scandauer, noch immer verhältnismäßig niedrig. Um die Ausbeute an Neon-artigem Krypton zu erhöhen gibt es mehrere Möglichkeiten. Zum Einen könnte man die Brütungsphase verlängern. Falls sie mit 199 ms zu kurz ist, sodass sich kein Gleichgewicht der Ladungszustände einstellen kann, sollte eine verlängerte Brütungsphase zu einem höheren Anteil an Neon-artigem Krypton führen. Eine zweite Möglichkeit wäre eine Verkürzung der Scanphase. Sollte sich herausstellen, dass sich die Ladungszustandsverteilung während der Messung ändert, sollte die Scandauer gesenkt werden, damit der Anteil an Neon-artigem Krypton nicht während des Scans zu großen Teilen bereits wieder zu niedrigeren Ladungszuständen rekombiniert.

Ob sich die Ladungszustandsverteilung während der Messung signifikant geändert hat, wurde überprüft, indem die Spektren, die in der ersten und in der zweiten Hälfte des Scanvorgangs entstanden sind, verglichen wurden. Sollte sich die Ladungszustandsverteilung während der Messung ändern, so müssten Unterschiede zwischen den Spektren sichtbar werden. Allerdings konnten keine großen Unterschiede zwischen den Hälften des Scans festgestellt werden,

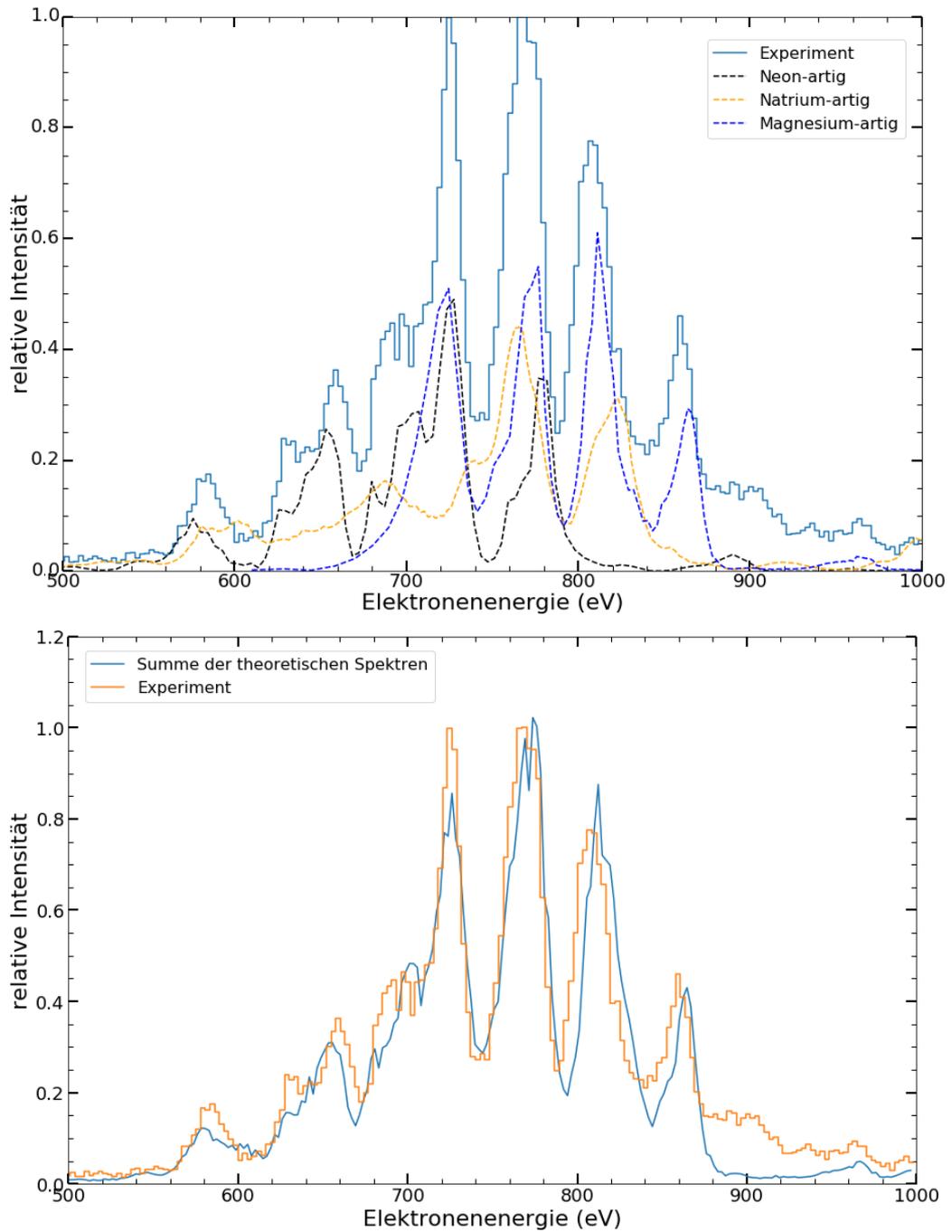


Abbildung 4.5: Projektion der LMM-Resonanzen auf die Elektronenenergieskala im Bereich von 500 eV bis 1000 eV. Ereignisse mit einer Photonenenergie von 1500 eV bis 2100 eV wurden miteinbezogen. Das experimentell aufgenommene Spektrum in diesem Bereich ist zusammen der gewichteten Summe der theoretischen Spektren von Neon-artigem bis Mg-artigem Krypton eingetragen. Die Gewichtung der einzelnen Spektren wurde mithilfe der Minimierung der quadratischen Abweichung zwischen experimentellen Daten und der Summe der drei theoretischen Spektren gefunden; **oben:** Die theoretischen Spektren der einzelnen Ladungszustände; **unten:** Die Summe der theoretischen Spektren

womit die Ladungszustandsverteilung, über die Dauer der Messung, nahezu konstant sein sollte.

Eine dritte Möglichkeit wäre die Senkung des Injektionsdrucks des Krypton-gases. Mit einem geringeren Injektionsdruck strömen pro Zeiteinheit weniger neutrale Kryptonatome in die Falle, welche von den vorhandenen Elektronen ionisiert werden müssen. Dies führt zu einer Verschiebung der Ladungszustandsverteilung hin zu höheren Ladungszuständen (Penetrante et al., 1991). Allerdings führt ein verringerter Injektionsdruck auch zu einer Verringerung der Ereignisrate, was die ohnehin schon lange Messzeit weiter verlängern würde.

Nach der Untersuchung der Photonenenergien der Übergänge und der näherungsweisen Bestimmung der Ladungszustandsverteilung, folgt nun ein Vergleich zwischen den aufgenommenen Daten und den theoretischen Spektren verschiedener Resonanzen, bezüglich der Lage und Intensität der Linien.

Um die Lage der gemessenen Resonanzen im Elektronenenergiespektrum genau zu bestimmen, wurde ein Fit an die experimentellen Daten vorgenommen. Dazu wurde eine Summe aus Gaußfunktionen mit einem konstanten Untergrund an die Daten mithilfe der Least-Square-Methode angepasst. Der resultierende Fit für die LMM-Resonanzen ist in Abbildung 4.6 zu sehen. Damit lassen sich Werte für die Intensitäten und Lage der Linienzentren sowie ein Wert für die Auflösung des Experiments bestimmen. Praktisch gestaltet sich die Erstellung eines solchen Fits schwierig, da es eine Vielzahl an Linien im Spektrum gibt, die sich nicht einzeln auflösen lassen. Durch diese Methode lässt sich auch die Breite der Linien als $\text{FWHM} = 19,5(5) \text{ eV}$ bestimmen. Tatsächlich ist die Auflösung bei dem durchgeführten Experiment besser, denn wegen der teilweisen verschmolzenen Linien, wird durch den Fit die Breite der Linien überschätzt.

Abgesehen von den LMM-Resonanzen, kann man im Spektrum noch weitere LM*n*-Resonanzen identifizieren. Auch diese Linienscharen ergeben sich wieder aus den Linien der einzelnen Ladungszustände.

Für das Neon-artigen Krypton, das primär mit dieser Messung untersucht werden sollte, wurden neben den LMM-Resonanzen, zusätzlich die dielektronischen LM*N*- bis LMR-Resonanzen theoretisch berechnet.

Die Projektion der Ereignisse mit einer Photonenenergie von 1500 eV bis 2100 eV auf die Elektronenenergieachse, für alle untersuchten Elektronenenergien, ist in Abbildung 4.7 zu sehen. Zusätzlich wurden die theoretisch berechneten Spektren eingetragen. Einmal wurde dabei jede Resonanz mit

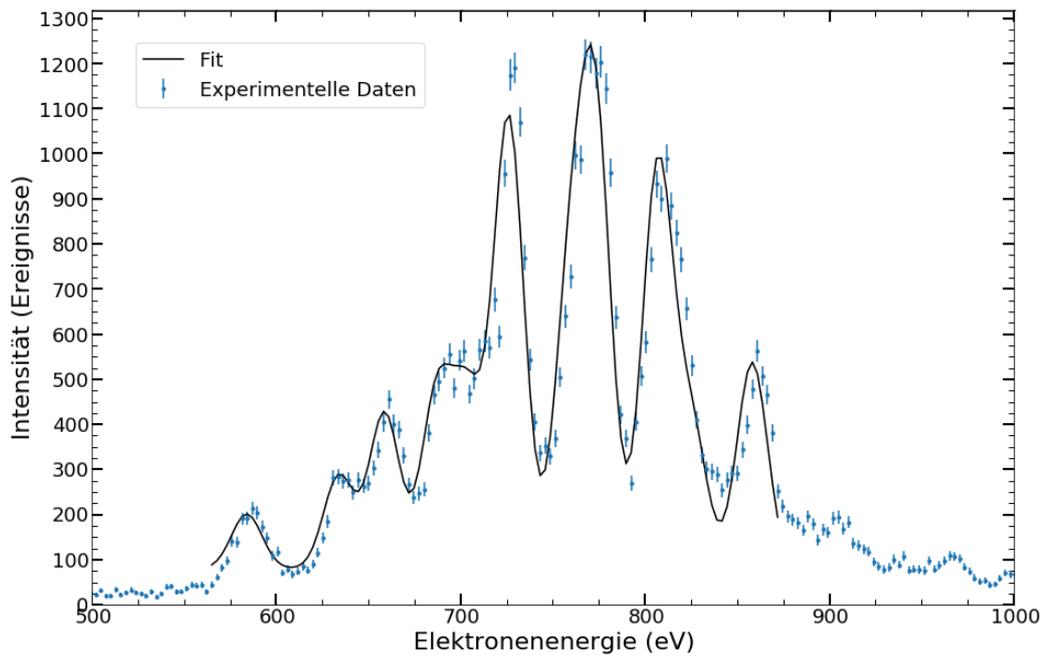


Abbildung 4.6: Das experimentell aufgenommene Spektrum der LMM-Resonanzen und der, durch eine Summe an Gaußkurven erstellte, Least-Square-Fit. Durch diesen Fit lassen sich die Lage und Intensitäten der Linien sowie ein Wert für die Auflösung der durchgeführten Messung bestimmen. Die eingetragenen Fehler der Messpunkte resultieren aus der statistischen Unsicherheit der Messwerte, die als Wurzel des Messwertes angenommen wurde

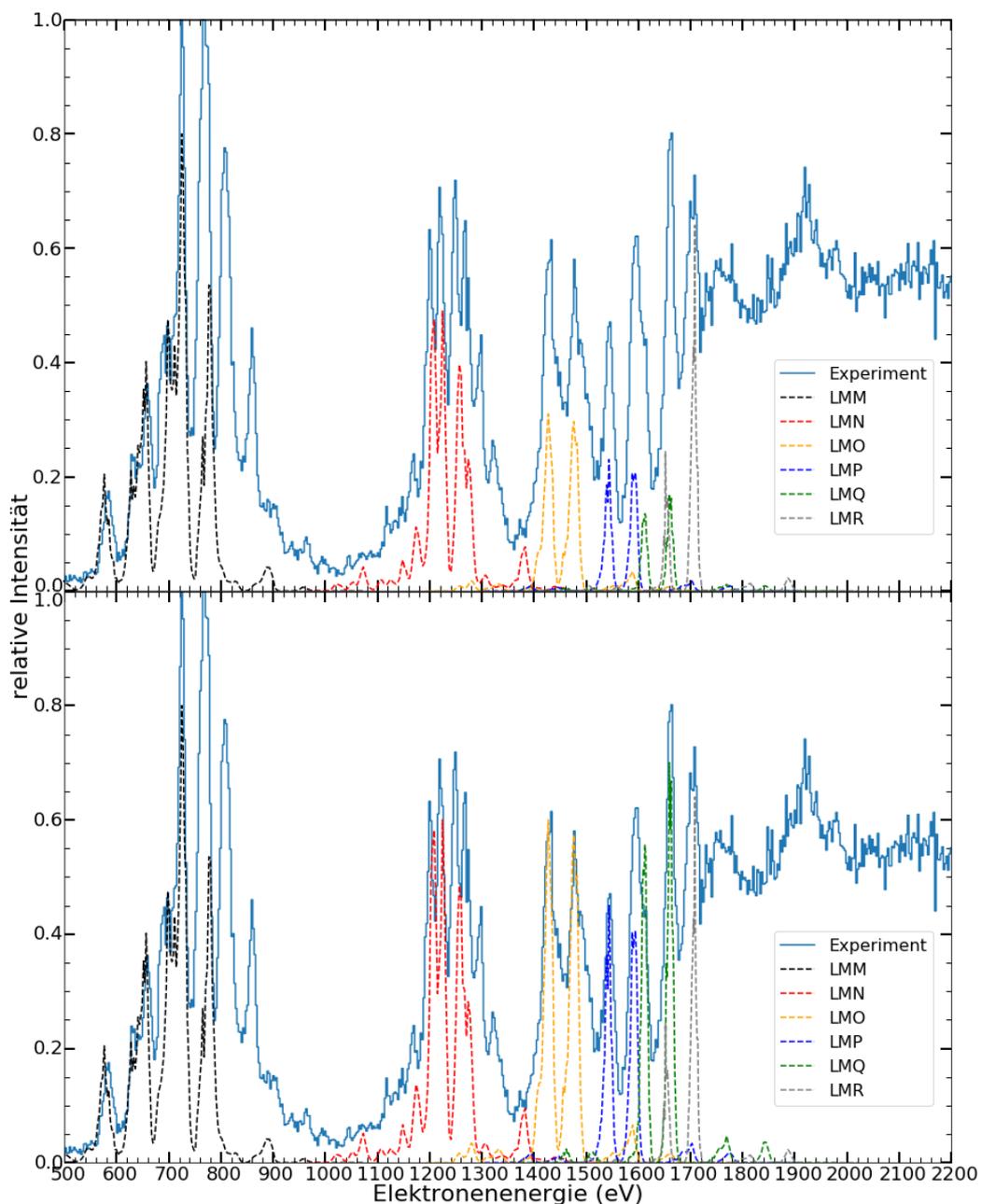


Abbildung 4.7: Projektion der Ereignisse mit einer Photonenenergie von 1500 eV bis 2100 eV auf die Elektronenenergieachse. Neben den experimentellen Daten wurden verschiedene theoretisch berechnete dielektronische Resonanzen von Neon-artigem Krypton eingezeichnet. **oben:** Die einzelnen Resonanzen wurden ohne Gewichtung eingetragen; **unten:** Die Resonanzen wurden in ihrer Intensität an das aufgenommene Spektrum angepasst

einem anderen Faktor an das experimentelle Spektrum angepasst, da die höheren LMn -Resonanzen deutlich stärker sind, als die Berechnungen es vermuten lassen.

Zunächst sieht man, dass auch für die übrigen Resonanzen die Übereinstimmung in der Lage der Resonanzen im Elektronenenergiespektrum, zwischen Experiment und Theorie, gegeben ist.

Für die Abweichung der Intensitäten gibt es mehrere Gründe. Zum Einen führen Übergänge in Folge von Stoßanregung zu deutlich höheren Zählraten bei hohen Elektronenenergien. Das Spektrum lässt sich also nicht mehr allein durch die dielektronische Rekombination erklären. Die Näherung bei der Berücksichtigung der Polarisierung in der theoretischen Berechnung (siehe Kapitel 2.5), kann auch zu abweichenden Intensitäten führen.

Zudem gibt es noch weitere, in dieser Arbeit unberücksichtigte, Übergänge, die die Zählraten an manchen Stellen des Elektronenenergiespektrums erhöhen, gerade bei hohen Energien. Dazu zählen resonante Streuung und Kaskaden, bei denen das Elektron während des dielektronischen Einfangs zunächst in einer höheren Elektronenschale eingefangen wird und dann sukzessive in den Grundzustand relaxiert (Shah et al., 2019). So kann es beispielsweise an den Stellen, wo sich die Ereignisse der dielektronischen LMN -Resonanz beobachten lassen, auch Beiträge von der LNN -Resonanz geben, wobei der Relaxationspfad dann zu Photonen führt, die sowohl bei dem $M-N$ -Übergang, als auch bei dem $L-M$ -Übergang entstehen. Die durch den $L-M$ -Übergang erzeugten Photonen werden dann in der hier vorgenommenen Betrachtung in der Projektion der experimentellen Daten miteinbezogen. Hinweise auf solche Kaskaden findet man bereits im zweidimensionalen Spektrum in Abbildung 4.2, wo erhöhte Ereignisdichten bei geringen Photonenenergien, an den Stellen der LMn -Resonanzen im Elektronenenergiespektrum, beobachtet wurden. Dies sind dann die Ereignisse, die durch die Übergänge von der höheren Schale in die M -Schale zustande kommen.

Denkbar ist auch, dass die Stellen, an denen sich die Resonanzen der niedrigeren Ladungszustände im Elektronenenergiespektrum befinden, mit denen der Resonanzen des Neon-artigen Kryptons zusammenfallen, und diese daher nicht getrennt aufgelöst werden können und zu einer scheinbar höheren Intensität der Linien des Neon-artigen Zustandes führen. Dieser Sachverhalt wird im Folgenden genauer untersucht.

Für höhere Elektronenenergien lassen sich deutlich mehr der im experimentellen Spektrum vorhandenen Linien allein durch das Vorhandensein von Neon-artigem Krypton erklären. Der Grund dafür könnte auch sein, dass sich die Ladungsverteilung während der Messung ändert und tatsächlich bei höheren Elektronenenergien fast ausschließlich Neon-artiges Krypton in der Falle befindet. Allerdings wurde eine Änderung der Ladungszustandsverteilung

lung während des Scans bereits durch den Vergleich der beiden Scanhälften ausgeschlossen.

So wurden zusätzlich zu den LMn -Resonanzen von Neon-artigem Krypton auch noch die Resonanzen des Natrium-artigen Ladungszustands berechnet. Dabei fällt auf, dass die Lage der LMM- und LMN-Resonanzen der beiden Ladungszustände noch getrennt aufgelöst werden können, ab den LMO-Resonanzen hingegen verschmelzen die Linien bei der Auflösung dieses Experiments. Aus diesem Grund konnten alle Linien für hohe Elektronenenergien scheinbar nur mit der Präsenz des Neon-artigen Kryptons erklärt werden und die Intensitätsverhältnisse zwischen den Linienscharen weichen so stark von den Erwartungen ab.

Ein weiterer Prozess, der für eine Diskrepanz zwischen den erwarteten und den tatsächlich während des Experiments aufgenommenen Intensitäten führt, ist eine Änderung der Elektronendichte n_e während eines Messzyklus. Für die Elektronendichte gilt (Herrmann, 1958):

$$n_e \propto \frac{I_e}{\sqrt{E_e}} \quad (4.4)$$

Da die Ereignisrate, also auch die Intensität der aufgenommenen Strahlung, von der Elektronendichte abhängt, sollte der Strahlstrom gemeinsam mit der Elektronenenergie variiert werden, um die Elektronendichte konstant zu halten. Allerdings war es zum Zeitpunkt der Messungen nicht möglich, diese Variation in den Messvorgang einzubauen.

Um das experimentell aufgenommene Spektrum der dielektronischen Resonanzen quantitativ mit den theoretischen Berechnungen zu vergleichen, wurde die Lage sämtlicher gefundener Resonanzen, nach der in Abbildung 4.6 angewendeten Methode eines Least-Square-Fits einer Summe aus Gauß-Funktionen, bestimmt. Die so ermittelten Linienpositionen werden mit den Positionen der Linien in den theoretischen Spektren der Neon- und Natrium-artigen Ladungszustände verglichen und in Tabelle 4.1 aufgeführt. Der notierte statistische Fehler bei der Lage der Linien stammt aus der Unsicherheit bei der Bestimmung der Fitparameter. Der systematische Fehler kommt durch die Unsicherheit bei der Kalibration der Elektronenstrahlenergie in Gleichung 4.2 zustande.

Da sich die Maxima der Linien im theoretischen Spektrum meist aus einer Vielzahl an verschiedenen Übergängen leicht unterschiedlicher Resonanzenergie zusammensetzen, ist deren Lage auf ganze Elektronenvolt angegeben. In der Regel haben die Linien bei den hier berechneten Spektren eine Breite

von wenigen Elektronenvolt. In Anbetracht der Auflösung des experimentellen Spektrums, ergibt es wenig Sinn die Lage der einzelnen theoretischen Satellitenlinien aufzulisten.

Die meisten der in Tabelle 4.1 zugeordneten Linien stimmen in der Lage der Resonanzen innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen überein, wie sich nach der Überprüfung in Abschnitt 4.1.1 schon vermuten ließ. Bei einigen Linien gibt es eine signifikante Abweichung, die durch die Verschiebung der Linie im experimentellen Spektrum aufgrund von Beiträgen weiterer Ladungszustände, vor allem von Magnesium-artigem Krypton, erklärt werden kann. Eine genauere Berechnung der theoretischen Spektren, unter Berücksichtigung einer größeren Anzahl interagierender Zustände, könnte die Lage der Maxima der Linien auch noch um wenige Elektronenvolt verschieben.

Nach der Betrachtung der gesamten dielektronischen LMn -Resonanzen werden noch die beiden in Abbildung 4.3 entdeckten Bänder getrennt betrachtet. Wie bereits zuvor erwähnt, (siehe Abbildung 4.3) setzen sich die dielektronischen Resonanzen aus zwei Bändern zusammen, eines mit 3d-2p- und eines mit 3s-2p-Relaxationsphotonen. Die Linien überlagern sich jedoch im aufgenommenen zweidimensionalen Spektrum.

Mit dem hier verwendeten Röntgendetektor lassen sich die Linien dennoch separat auflösen, indem man jeweils nur deren Ränder betrachtet. So lassen sich bei Photonenenergien von jeweils 1200 eV bis 1700 eV die Eigenschaften der 3s-2p-Linie und in einem Bereich von 1900 eV bis 2200 eV die Eigenschaften der 3d-2p-Linie untersuchen. Die Grenzen der untersuchten Bereiche wurden dabei so gewählt, dass noch genügend Ereignisse der zu untersuchenden Linie einbezogen werden, ohne dass weitere Übergänge eingeschlossen werden. Damit wird sichergestellt, dass der Hintergrund das Ergebnis nicht zu stark verfälscht. Allerdings gibt es damit auch noch eine gewisse Verunreinigung der beiden Linien durch die jeweils andere. Dieser Effekt sollte nicht besonders stark ins Gewicht fallen, da die ausgewählten Bereiche jeweils mindestens 2 Standardabweichungen von der anderen Linie entfernt anfangen. Die Projektionen auf die Elektronenenergie für diese beiden Energiebereiche findet sich in Abbildung 4.8.

Der Vergleich der beiden Übergänge, 3d-2p und 3s-2p, offenbart deutliche Unterschiede zwischen den Linien. Bei höheren Elektronenenergien ist die 3s-2p-Linie verhältnismäßig stark ausgeprägt, während die 3d-2p-Linie die stärkste Intensität bei den LMM-Resonanzen aufweist. Die 3d-2p-Linie ähnelt insgesamt eher der in Abbildung 4.7 erstellten Projektion und passt auch gut zu den theoretischen Berechnungen. Damit lässt sich sagen, dass die dielektronischen Resonanzen hauptsächlich durch Übergänge der Elektronen von der 3d- in die 2p-Schale sichtbar werden. Das 3s-2p-Spektrum hingegen

Tabelle 4.1: Experimentelle und theoretische Position der Linien der LM*n*-Resonanzen von Neon- und Natrium-artigem Krypton

Neon-artiges Krypton				
Resonanz	Exp. Lage	Stat. Fehler	Syst. Fehler	Theo. Lage
LMM	582,9 eV	2,2 eV	2,8 eV	575 eV
	632,9 eV	1,5 eV	2,9 eV	628 eV
	657,6 eV	0,9 eV	3,0 eV	654 eV
	693,8 eV	8 eV	3,1 eV	708 eV
	724,9 eV	0,4 eV	3,2 eV	724 eV
LMN	1168,1 eV	2,1 eV	4,3 eV	1175 eV
	1198,7 eV	0,4 eV	4,3 eV	1205 eV
	1220,2 eV	0,3 eV	4,4 eV	1223 eV
LMO	1425,6 eV	0,7 eV	4,9 eV	1426 eV
	1477,1 eV	0,7 eV	5,0 eV	1474 eV
LMP	1542,4 eV	0,5 eV	5,2 eV	1543 eV
	1591,1 eV	0,8 eV	5,3 eV	1591 eV
LMQ	1611,7 eV	1,5 eV	5,4 eV	1611 eV
	1660,9 eV	0,6 eV	5,5 eV	1662 eV
LMR	1708,8 eV	1,4 eV	5,6 eV	1706 eV
Natrium-artiges Krypton				
Resonanz	Exp. Lage	Stat. Fehler	Syst. Fehler	Theo. Lage
LMM	686,0 eV	1,4 eV	3,1 eV	690 eV
	758,2 eV	1,0 eV	3,3 eV	766 eV
	805,8 eV	0,5 eV	3,4 eV	821 eV
LMN	1247,6 eV	0,3 eV	4,5 eV	1252 eV
	1269,0 eV	0,4 eV	4,5 eV	1273 eV
	1294,0 eV	0,6 eV	4,6 eV	1302 eV
LMO	1449,5 eV	1,3 eV	5,0 eV	1450 eV
	1503,1 eV	0,9 eV	5,1 eV	1546 eV
LMP	1542,4 eV	0,5 eV	5,2 eV	1546 eV
	1611,7 eV	1,5 eV	5,4 eV	1599 eV

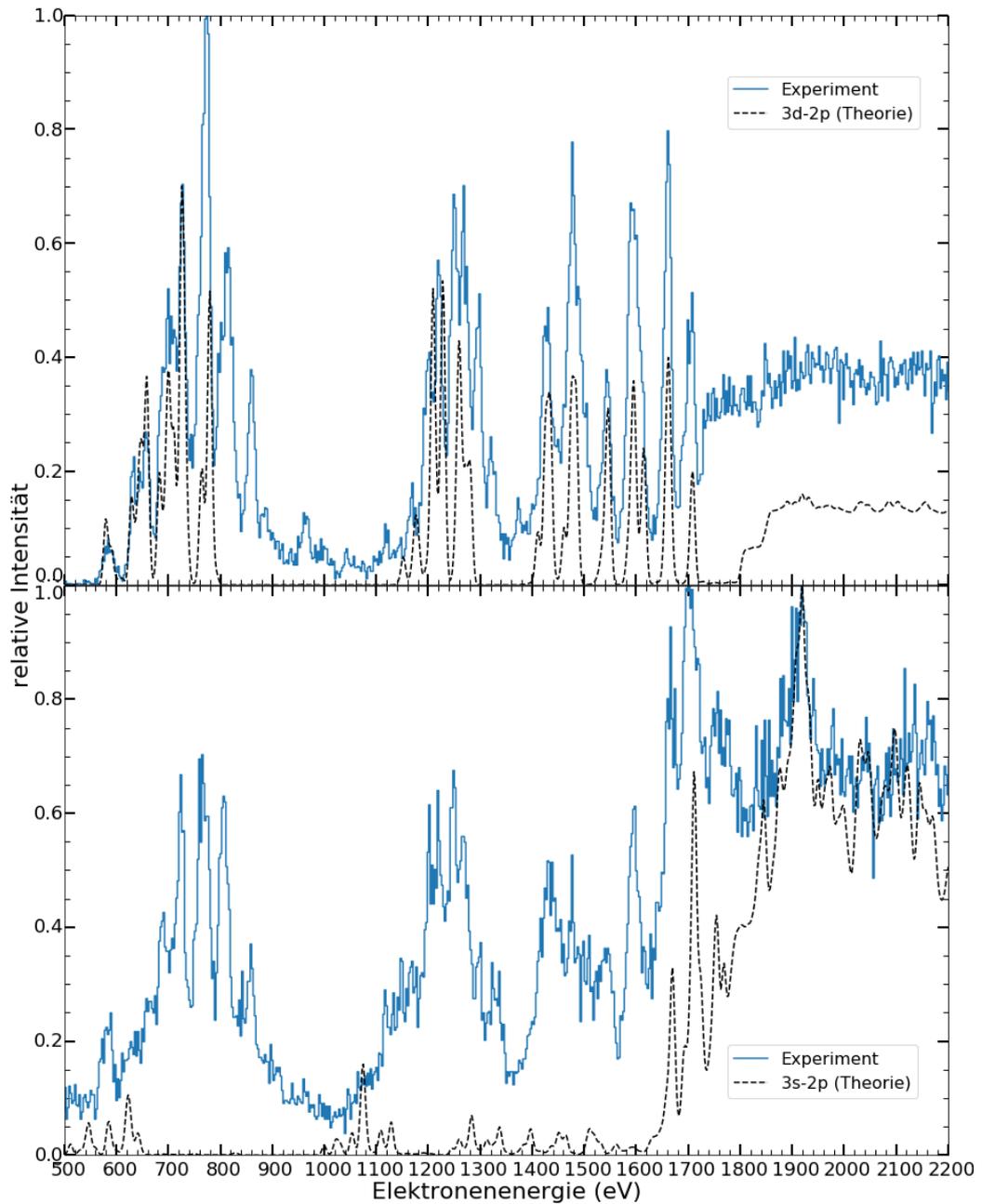


Abbildung 4.8: Die Projektion der Photonereignisse, verursacht von hochgeladenem Krypton, die während des schnellen Scans aufgenommen wurden, auf die Elektronenenergie. Außerdem sind die theoretischen Spektren für die dielektronische Rekombination mit 3d-2p- und 3s-2p-Übergängen eingetragen; **oben:** 3d-2p-Linie bei der dielektronischen Rekombination, Photonenenergiebereich von 1900 eV - 2200 eV; **unten:** 3s-2p-Linie, Photonenenergiebereich von 1200 eV - 1700 eV (Theoretische Spektren von Dr. Chintan Shah)

wird von der Stoßanregung dominiert.

Dennoch tritt die LMM-Schar im 3s-2p-Spektrum immer noch stärker auf, als es die theoretische Berechnung vermuten lässt. Dieses Phänomen findet sich auch bei weiteren dielektronischen Resonanzen und auch noch bei Energien, die deutlich kleiner sind als die Energie der identifizierten 3s-2p-Relaxationsphotonen. Eine genauere Untersuchung des Spektrums im Bereich zwischen der 3s-2p-Linie und der Untergrundstrahlung bis zu einer Energie von etwa 1000 eV, welche durch Stoßanregung zustande kommt, wurde durchgeführt. Dabei ergab sich bei der Projektion der Ereignisse auf die Photonenenergie eine flache Verteilung, ohne erkennbare Linien. Daher ist davon auszugehen, dass es sich bei der vertikalen Fortsetzung der dielektronischen Resonanzen nicht um weitere Übergänge klar definierter Energie handelt.

Eine Eigenschaft des verwendeten Siliziumdriftdetektors ist, dass dieser bei der gleichzeitigen Detektion mehrerer Photonen diese als ein Photon mit einer Energie, die der kombinierten Energie der Photonen entspricht, aufzeichnen kann. Allerdings lässt sich auch damit das beobachtete Spektrum nicht erklären, da sich dann die Resonanzlinie nur in den Bereich höherer Photonenenergien fortsetzen würde.

Eine Ursache für diese Linien könnten Zwei-Photon-Zerfälle sein, bei denen in Folge eines Elektronenübergangs zwei Photonen abgestrahlt werden, deren kombinierte Energie der Energie des Elektronenübergangs entspricht (Schäffer et al., 1999). Die Zwei-Photonen-Zerfälle treten bei der Relaxation langlebiger angeregter Zustände auf, bei denen es keine erlaubten Übergänge unter Abstrahlung eines einzelnen Photons gibt. Weil die Energie der beiden Photonen nicht einzeln festgelegt ist, sondern nur in der Summe bestimmt, ergibt sich eine breite Energieverteilung bei diesen Übergängen (Chluba & Sunyaev, 2006). Solch eine breite Energieverteilung würde mit den hier beobachteten Linien übereinstimmen.

Auch bei weiteren, nachfolgenden Messungen mit der FLASH-EBIT wurden diese senkrechten Fortsetzungen beobachtet, auch bei Übergängen, bei denen sich Zwei-Photon-Zerfälle ausschließen lassen. Eine weiterführende Untersuchung der Verstärkerschaltung des Siliziumdriftdetektors ergab, dass eine Einstellung des verwendeten Spectroscopy amplifiers dafür sorgte, dass parallel zur Aufzeichnung des eigentlichen Pulses ein zweiter Puls mit negativer Auslenkung aufgezeichnet wurde. Dessen Amplitude war stets kleiner als die des eigentlichen Pulses, wodurch weitere Ereignisse mit einer scheinbar geringeren Photonenenergie aufgetaucht sind.

Damit handelt es sich bei den senkrechten Linienfortsetzungen in den hier vorliegenden Daten um Artefakte. Nach einer Anpassung der Einstellungen des Verstärkers ließen sich die Linien in den Messungen der EBIT nicht mehr

nachweisen.

Die vorliegenden Messungen mit hochgeladenem Krypton wurden allerdings nicht mit dieser Korrektur wiederholt, daher ist es durchaus denkbar, dass auch Zwei-Photon-Zerfälle in diesem Experiment auftreten, die in einer zusätzlichen Messung untersucht werden könnten. Eine Untersuchung von Zwei-Photon-Zerfällen ist interessant, um theoretische Modelle zur Atomstruktur zu testen (Schäffer et al., 1999).

Neben den L-M-Übergängen, die nun eingehend untersucht wurden, kann man bei einer Photonenenergie von etwa 2400 eV auch L-N-Übergänge beobachten. Auch diese werden bei niedrigen Elektronenenergien wieder hauptsächlich durch dielektronische Rekombination und bei hohen Elektronenenergien durch Stoßanregung bedingt. Abbildung 4.9 zeigt die Projektion der Ereignisse des oberen markierten Bereichs in Abbildung 4.2 auf die Elektronenenergie. Zusätzlich wurden wieder die theoretischen Spektren verschiedener dielektronischer Resonanzen von Neon-artigem Krypton eingezeichnet.

Man sieht, dass sich die beobachteten dielektronischen Resonanzen beinahe ausschließlich auf Neon-artiges Krypton zurückführen lassen, wobei anzunehmen ist, dass der Grund dafür wieder die Nähe der Linien der verschiedenen Ladungszustände ist.

Bei den betrachteten Resonanzen findet eine Anregung von der L- in die N-Schale statt. Die Unterschiede zwischen den im Experiment auftauchenden Ladungszuständen finden sich hingegen in ihrer Besetzung der M-Schale. Daher ist es denkbar, dass die Unterschiede in der Struktur der Zustände die Lage der dielektronischen L N n-Resonanzen weniger stark beeinflusst, als es bei den LM n -Resonanzen der Fall ist und die verschiedenen Ladungszustände ähnlichere Spektren erzeugen. Entsprechend lässt sich schon die erste experimentell aufgenommene Linienschar, die L N N-Resonanzen, in gleichem Maße durch die Übergänge des Neon-artigen Zustands erklären, wie die übrigen Resonanzen. Daher sind auch hier die relativen Intensitäten der einzelnen Resonanzen in deutlich besserer Übereinstimmung, als es bei den LM n -Resonanzen der Fall war.

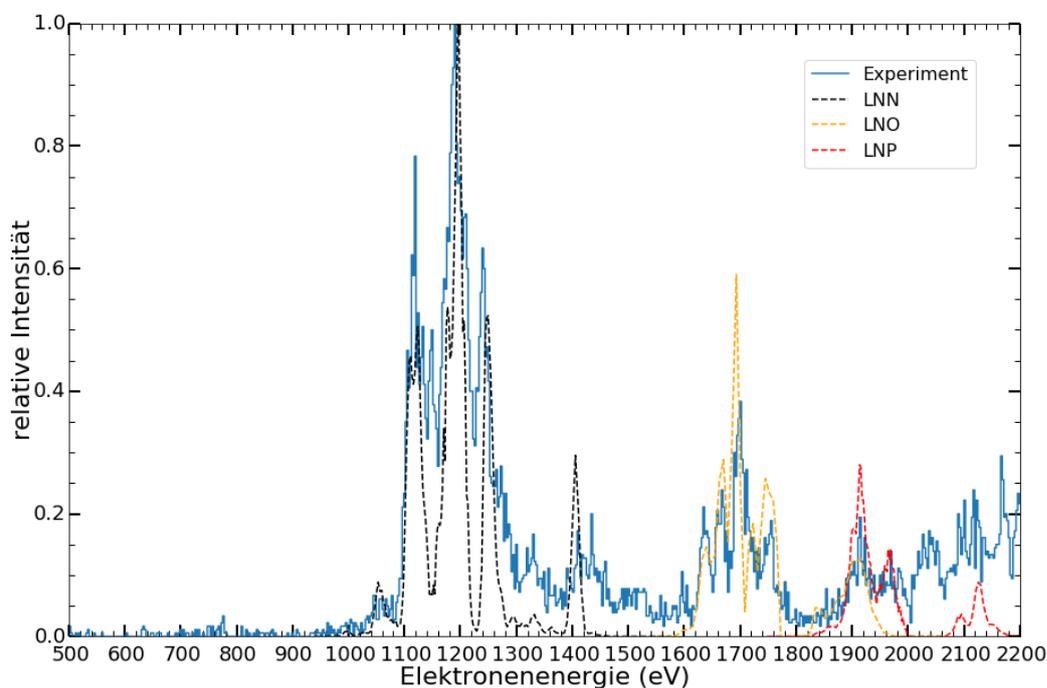


Abbildung 4.9: Projektion der Ereignisse, die während des schnellen Scans entstanden sind, mit einer Photonenenergie von 2300 eV bis 2600 eV, welche die Übergänge von der N- in die L-Schale darstellen, auf die Elektronenenergieachse. Zusätzlich sind die wichtigsten dielektronischen Resonanzen eingetragen, die für die gemessenen Übergänge verantwortlich sind, wobei es sich jeweils um Übergänge von Neon-artigem Krypton handelt; hier passen die relativen Intensitäten der Resonanzen der theoretischen Spektren zu den experimentellen Ergebnissen.

4.2 Langsamer Scan

Die zweite Messung mit hochgeladenem Krypton führte, wegen einer wesentlich längeren Scanzeit, zu einem deutlich anderem Spektrum. Wieder wurde nach obiger Methode, nur diesmal ohne Brütungsphase und mit einer Scangeschwindigkeit von $0,61 \frac{\text{eV}}{\text{s}}$, ein zweidimensionales Spektrum generiert. Da die Variation der Elektronenenergien mit einer so geringen Rate erfolgte, befinden sich die vorhandenen Ladungszustände bei jeder Energie im Gleichgewicht (González Martínez, 2005). Es tauchen also für jede Energie lediglich Ionen auf, die auch bei dieser Energie durch Stoßionisation erzeugt werden können, weshalb sich die Ladungszustände deutlich von der letzten Messung unterscheiden. Bei niedrigen Elektronenstrahlenergien, wo sich die LMM-Resonanzen befinden sind niedrigere Ladungszustände zu erwarten als beim schnellen Scan, insbesondere kein Neon-artiges Krypton, dessen Produkti-

onsschwelle bei 1205 eV liegt.

Weil die Ladungszustandsverteilung während dieser Messung zunächst unklar ist und daher kein passendes theoretisches Spektrum vorliegt, lässt sich keine Kalibration des Zeitsignals wie in Abschnitt 4.1.1 durchführen. Stattdessen wird die Zuordnung anhand der Parameter des Experiments durchgeführt.

Die Variation der Elektronenenergie über 1100 eV, von 100 eV bis 1200 eV, entspricht 3350 Kanälen in den aufgenommenen Daten. Mit einem Strahlstrom von 8 mA, einer Glühkathodenspannung von -720 V und einem Potential der Fallenmitte von 22 V, ergibt sich eine Zuordnung von

$$E_{\text{Elektron}} = 0,3284 \frac{\text{eV}}{\text{Kanal}} N_{\text{Kanal}} + 822,6(12) \text{ eV} \quad (4.5)$$

Für die Unsicherheit des Zuordnungsfaktors zwischen Kanälen und Elektronenenergie wird ein ähnlicher Fehler wie bei dem schnellen Scan angenommen.

Das zweidimensionale Spektrum ist in Abbildung 4.10 zu sehen. Die Darstellung ist analog zu derjenigen in Abbildung 4.2.

Die generelle Struktur des zweidimensionalen Spektrums ähnelt derjenigen beim schnellen Scan. Wieder sind Übergänge infolge radiativer Rekombination als diagonaler Verlauf zu erkennen. Ein starker Untergrund wird bei niedrigen Photonenenergien durch Stoßanregung erzeugt. Die L-M- und, wenn auch schwach, die L-N-Übergänge, sind wieder als Bänder konstanter Photonenenergie zu erkennen. Erneut findet man bei niedrigen Elektronenenergien die einzelnen Linien der dielektronischen Resonanzen und bei hohen Energien durchgehend eine hohe Ereignisdichte in Folge von Stoßanregung. Die LMM-Resonanzen liegen dieses Mal bei deutlich höheren Energien als beim schnellen Scan, etwa bei 1000 eV.

Jedoch unterscheiden sich die beiden Spektren auch in mehrerer Hinsicht. Abseits der Region der LMn -Resonanzen finden sich in dieser Messung zahlreiche Linien, die bei der Messung mit schnellem Scan nicht entdeckt wurden. So treten bei niedrigeren Energien zwei neue Übergänge auf: Einer bei einer Photonenenergie von etwa 1100 eV und einer bei etwa 800 eV. Diese Energien sind zu hoch, um durch Übergänge innerhalb einer einzelnen Schale zustande zu kommen, dort liegen die Energien für die betrachteten Krypton-Spezies höchstens bei wenigen Hunderten Elektronenvolt (Die höchsten Energien bei Übergängen innerhalb einer Schale, für die in diesem Experiment potentiell vorkommenden Ladungszustände, findet man bei $n=2$ -Übergängen, bei Natrium-artigem Krypton (Rice, Fournier, Goetz, Marmar & Terry, 2000)).

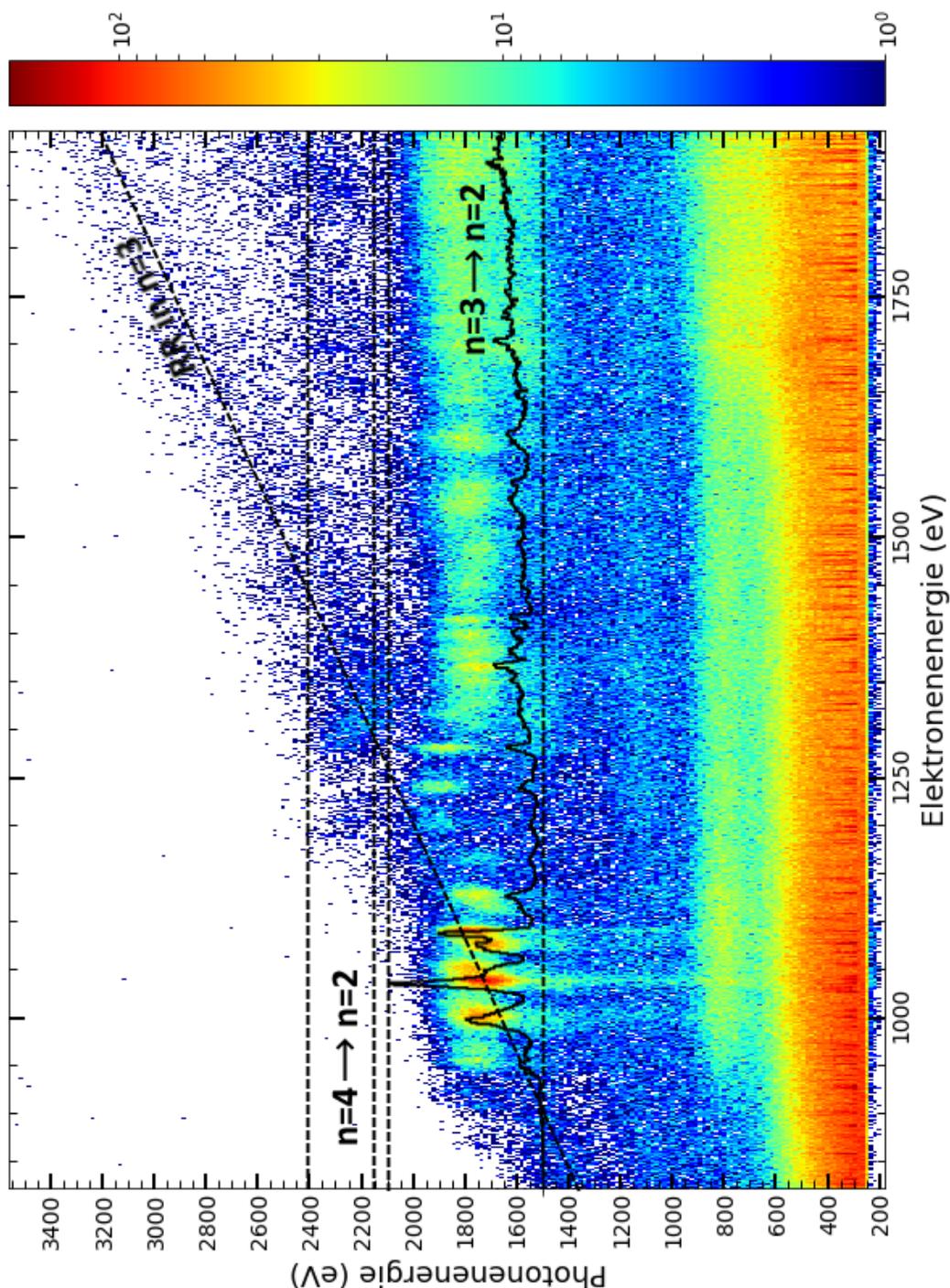


Abbildung 4.10: Zweidimensionales Spektrum von hochgeladenem Krypton, während der Messung mit langer Scanzeit ($t_{\text{Scan}} = 1800\text{ s}$) aufgenommen. In analoger Darstellung zu Abbildung 4.2 sind auf der x-Achse die Elektronen und auf der y-Achse die Photonenergie aufgetragen, wobei die Ereignisdichte farblich kodiert ist. Erneut ist die Projektion der Ereignisse mit einer Photonenergie von 1500 eV bis 2100 eV eingetragen. Die generelle Struktur des Spektrums stimmt mit demjenigen, das beim schnellen Scan aufgenommen wurde (siehe Abbildung 4.2) überein, jedoch ergeben sich deutliche Unterschiede in der Lage der dielektronischen Resonanzen.

Allerdings lassen sich die Linien mit Übergängen zwischen verschiedenen Schalen, angeregt durch Stöße mit Strahlelektronen, erklären. Als Anregungsmechanismus kommt Stoßanregung deshalb in Frage, weil die Linien erst bei gewissen Elektronenenergien auftauchen, wo die Photonenenergie des Übergangs die Elektronenenergie übersteigt.

Basierend auf den Daten für Natrium-artiges Krypton aus der Arbeit (Saloman, 2007), kommen für die zu sehenden Linien folgende Übergänge in Frage:

Tabelle 4.2: Vermutete Übergänge, die zu den horizontalen Linien in Abbildung 4.10 führen; Basierend auf (Saloman, 2007); bei mehreren bekannten Übergängen wurde ein Mittelwert als typische Energie zum Vergleich gewählt

Beobachtete Energie (eV)	Energie bei Na-artigem Krypton (eV)	Übergang
1000	936	6p-3s
800	813	5p-3s
600	580	4p-3s

Aufgrund der relativ geringen Auflösung des Röntgendetektors ist keine genauere Zuordnung der Linien möglich.

Dabei ist zu beachten, dass eher niedrigere Ladungszustände als Natrium-artiges Krypton während der Messung vorlagen, die aufgrund der größeren Kernabschirmung Übergänge mit etwas geringerer Energie aufweisen, für diese waren allerdings keine Daten für die Energie der Übergänge zu finden.

Diese Linien in Folge von Stoßanregung sollten sich auch bei einer kürzeren Scanzeit nachweisen lassen, jedoch war dabei die Zahl der aufgenommenen Ereignisse zu niedrig, um die Linien vom Untergrund zu trennen.

Auch die Projektion des Spektrums auf die Photonenenergie offenbart einen deutlichen Unterschied zur Messung mit kürzerer Scanzeit. Abbildung 4.11 zeigt das Röntgenspektrum der LMn -Übergänge. Wieder lassen sich mittels eines Gaußfits zwei Linienzentren bestimmen. Allerdings liegen diese nun bei einer Energie von 1525 eV und 1771 eV. Es ist anzunehmen, dass dafür die Unterschiede in der Ladungszustandsverteilung in der Falle während der beiden Experimente verantwortlich ist. Für die niedrigeren Ladungszustände ist die positive Kernladung stärker durch die Hüllenelektronen abgeschirmt, weswegen die Elektronenübergänge zwischen den L- und M-Schalen weniger energetische Photonen erzeugen (Slater, 1930).

Um die beiden Messungen besser vergleichen zu können, wird wieder ei-

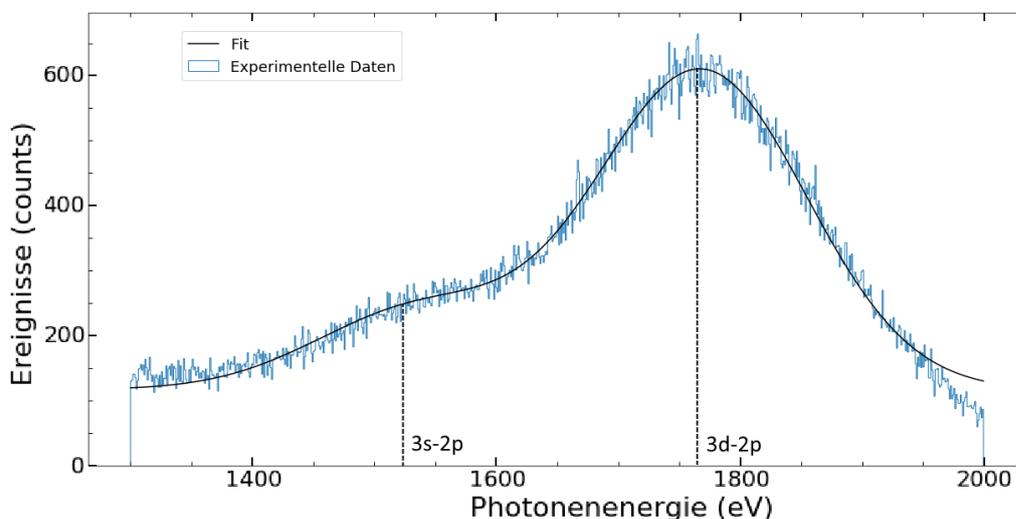


Abbildung 4.11: Röntgenspektrum der Messung mit langsamem Scan; Die Linienzentren liegen nun bei 1525 eV (3s-2p) und 1771 eV (3d-2p) bei einer Auflösung von $\text{FWHM} = 219 \text{ eV}$

ne Projektion der Ereignisse im Bereich der Übergänge zwischen L- und M-Schale, auf die Elektronenenergieachse durchgeführt. Die Projektionen der beiden Messungen sieht man in Abbildung 4.12.

Die beiden Spektren unterscheiden sich grundlegend in der Lage der dielektronischen Resonanzen. Damit lässt sich mit Sicherheit sagen, dass die während des schnellen Scans dominanten Ladungszustände (Neon- bis Magnesium-artig) während des langsamen Scans, zumindest bei einer geringen Elektronenstrahlenergie, wo die LMM-Resonanzen erzeugt wurden, kaum noch in der Falle zu finden sind. Damit entsteht das gemessene Spektrum durch die dielektronische Rekombination niedrigerer Ladungszustände, bei denen die gleiche Art der Resonanz (z.B. LMM) bei einer höheren Elektronenenergie beobachtet wird (Fuchs, Biedermann, Radtke, Behar & Doron, 1998).

Weil die niedrigeren Ladungszustände mehr Elektronen enthalten, wird die theoretische Berechnung der Energien und der Wellenfunktionen der Zustände deutlich aufwändiger, da eine erhöhte Zahl an Elektronen die Dimension des Hamiltonoperators, der für die Bestimmung der Energie diagonalisiert werden muss, erhöht (Gu, 2008). Ebenso nimmt die Anzahl der zu berechnenden Zustände und die Zahl der möglichen Übergänge, deren Übergangsamplituden berechnet werden müssen, stark zu.

Um herauszufinden, welche Ladungszustände vorliegen, wurden die LMM-Resonanzen für Aluminium- und Silizium-artiges Krypton nach obiger Me-

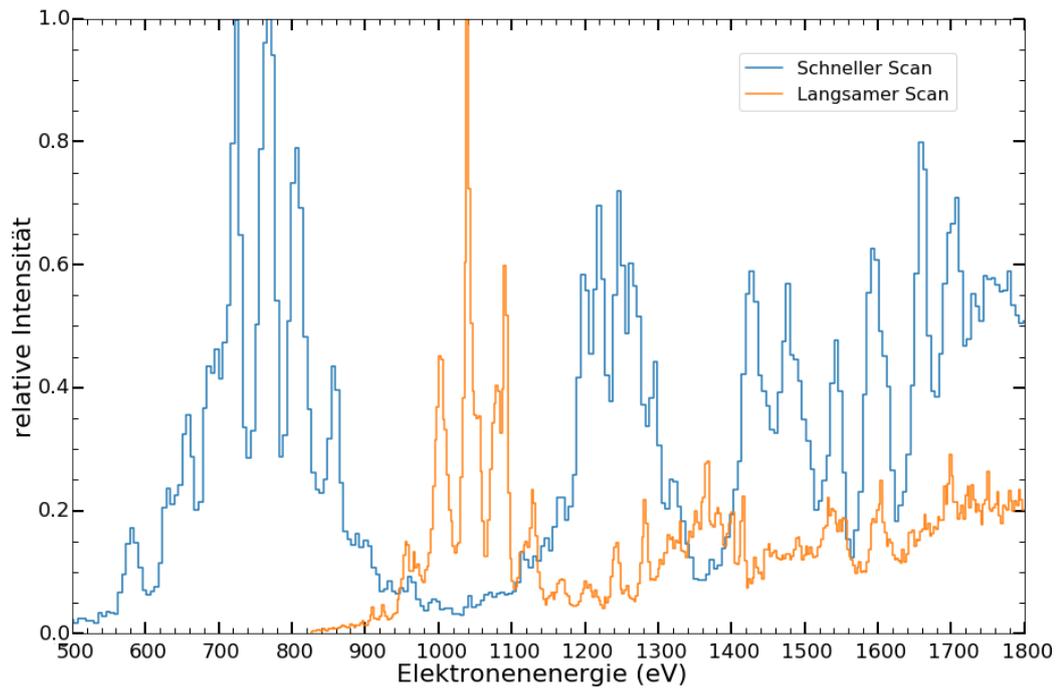


Abbildung 4.12: Die beiden, bei unterschiedlichen Scanzzeiten aufgenommenen, Spektren, projiziert auf die Elektronenenergie. Nur Ereignisse mit Relaxationsphotonen einer Energie von 1500 eV bis 2100 eV werden in die Projektion miteinbezogen, um möglichst nur die LMn -Resonanzen abzubilden. Die beiden Spektren weisen bei grundlegend verschiedenen Elektronenenergien Resonanzen auf. Der Grund dafür ist die unterschiedliche Ladungszustandsverteilung in der Falle während der beiden Messungen.

thode in erster Näherung, also mit eingeschränktem Zustandsraum, bestimmt. Allerdings fand sich keine Übereinstimmung mit dem gemessenen Spektrum, weshalb davon auszugehen ist, dass noch niedrigere Ladungszustände das Spektrum erzeugen. Deren zunehmend komplizierte und damit zeitaufwändige Berechnung, geht über den Rahmen dieser Arbeit hinaus.

Das Spektrum der LMM-Resonanzen, das für das Aluminium-artige Krypton berechnet wurde, enthält Linien bis zu einer Elektronenenergie von 900 eV, das Spektrum für das Silizium-artige Krypton enthält Linien bis zu Energien von 950 eV.

Da die Resonanzen nur bei deutlich höheren Elektronenenergien zu finden sind, ist anzunehmen, dass das Spektrum hauptsächlich durch Schwefel- bis Argon-artiges Krypton erzeugt wird. Noch niedrigere Ladungszustände sind nicht auszuschließen. Jedoch nimmt die Ionisierungsenergie für niedrigere Ladungszustände rapide ab und liegt deutlich unter der Elektronenstrahlenergie von etwa 1050 eV, bei der die LMM-Resonanzen zu finden sind. So werden für die Erzeugung von Argon-artigem Krypton bereits nur noch 640 eV benötigt (Rodrigues, Indelicato, Santos, Patté & Parente, 2004). Daher ist eine Verschiebung der Ladungszustandsverteilung zu noch geringer geladenen Zuständen unwahrscheinlich.

Bei höheren Elektronenstrahlenergien findet man eine gewisse Übereinstimmung zwischen den beiden aufgenommenen Spektren. Etwa haben beide Spektren jeweils ein Maximum bei Elektronenenergien von 1550 eV und 1610 eV. Das entspricht unserer Erwartung, dass sich die Ladungszustände in der Falle für höhere Elektronenenergien stärker ähneln, da sich dann die Elektronenenergie während der Messung derjenigen während der Brütungsphase bei der Messung mit schnellem Scan annähert. Dennoch lässt sich der Großteil der Linien bei höheren Elektronenenergien nicht mit den angefertigten theoretischen Spektren der LMn -Resonanzen von Neon- und Natrium-artigem Krypton erklären. Daher kann es auch sein, dass an diesen Stellen lediglich auch die dielektronischen Resonanzen der vorhandenen niedrigeren Ladungszustände zu finden sind.

Zur Bestimmung der Lage der dielektronischen Resonanzen wurde erneut, wie in Abschnitt 4.1.2, eine Summe aus Gaußfunktionen an das aufgenommene Spektrum gefittet. Für die Größe des systematischen Fehlers, der sich aus der Unsicherheit bei der Bestimmung der Elektronenenergie ergibt, wurden ähnliche Fehler wie beim schnellen Scan angenommen. Zur Anfertigung des Fits wurde das Spektrum in mehrere Teile unterteilt und für diese getrennt ein Fit erstellt. Der Grund dafür ist die im Allgemeinen unbekannt Form der Untergrundstrahlung, die sich durch Übergänge in Folge von Stoßanregung

ergibt. Ein Fit über das gesamte Spektrum würde zu einer Verfälschung der Parameter führen. Die Bereiche der einzelnen Fits wurden so gewählt, dass die Untergrundstrahlung über den betrachteten Bereich beinahe konstant ist. Dann wurde mit dem Fit ein konstanter Wert für den Untergrund bestimmt und abgezogen.

Die so gefundenen Positionen sind:

Tabelle 4.3: Position der dielektronischen LMn -Resonanzen beim langsamen Scan, ermittelt durch einen Fit einer Summe an Gaußkurven an das experimentelle Spektrum

Exp. Lage	Stat. Fehler	Syst. Fehler
955,2 eV	1,1 eV	3,6 eV
971,5 eV	1,4 eV	3,7 eV
1000,0 eV	0,3 eV	3,9 eV
1013,3 eV	0,7 eV	4,0 eV
1038,5 eV	0,2 eV	4,2 eV
1053,2 eV	0,4 eV	4,3 eV
1075,2 eV	0,4 eV	4,4 eV
1089,3 eV	0,3 eV	4,5 eV
1113,9 eV	1,2 eV	4,6 eV
1128,1 eV	0,7 eV	4,7 eV
1165,3 eV	1,8 eV	5,0 eV
1201,8 eV	1,0 eV	5,2 eV
1240,5 eV	0,3 eV	5,5 eV
1255,8 eV	1,9 eV	5,5 eV
1279,9 eV	0,2 eV	5,7 eV
1313,8 eV	1,3 eV	5,9 eV
1327,0 eV	1,1 eV	6,0 eV
1348,7 eV	0,7 eV	6,1 eV
1363,8 eV	0,4 eV	6,2 eV
1379,7 eV	0,6 eV	6,3 eV
1397,0 eV	0,7 eV	6,5 eV
1415,4 eV	1,2 eV	6,6 eV
1429,6 eV	2,8 eV	6,7 eV
1450,3 eV	1,7 eV	6,8 eV
1469,5 eV	1,6 eV	6,9 eV
1489,0 eV	1,0 eV	7,0 eV

Fortsetzung auf der nächsten Seite

Tabelle 4.3 – *Fortsetzung*

Exp. Lage	Stat. Fehler	Syst. Fehler
1509,3 eV	1,0 eV	7,2 eV
1531,3 eV	0,6 eV	7,3 eV
1552,0 eV	2,1 eV	7,4 eV
1560 eV	9 eV	7,5 eV
1591 eV	5 eV	7,7 eV
1600,3 eV	1,9 eV	7,7 eV
1616,0 eV	2,3 eV	7,9 eV
1643,8 eV	1,0 eV	8,0 eV
1662,4 eV	0,8 eV	8,1 eV
1681,0 eV	0,9 eV	8,3 eV
1698,1 eV	0,9 eV	8,4 eV

Da keine theoretischen Spektren für die Ladungszustände beim langsamen Scan vorliegen, lässt sich keine Zuordnung der Linien zu einem bestimmten dielektronischen Übergang durchführen. Einzig für die erste Linienschar (Linienzentren von 955,2 eV bis 1165,3 eV), welche deutlich von den anderen Linien abgegrenzt ist, lässt sich die Vermutung anstellen, dass es sich dabei um die LMM-Resonanzen der vorhandenen Ladungszustände handelt. Bei hohen Elektronenenergien lassen sich die dielektronischen Resonanzen nicht mehr getrennt identifizieren, da dort die Liniendichte im Spektrum zu groß ist. Die Lage dieser Linien ließ sich entsprechend nicht bestimmen.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In zwei verschiedenen Messungen wurde das Spektrum unterschiedlicher Ladungszustände von hochgeladenem Krypton mit der FLASH-EBIT am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg untersucht. Besondere Aufmerksamkeit galt der Lage der dielektronischen Resonanzen im Elektronenenergiespektrum, insbesondere den LMn -Resonanzen. Diese spielen bei der Charakterisierung astrophysikalischer Plasmen sowie Laborplasmen eine wichtige Rolle.

Dafür wurde zunächst in der EBIT befindliches Kryptongas durch Stoßionisation mit Elektronen auf den gewünschten Ladungszustand gebracht. Anschließend wurde die Elektronenstrahlenergie kontinuierlich über einen bestimmten Energiebereich variiert und das bei jeder Elektronenstrahlenergie entstandene Röntgenspektrum der gefangenen Ionen mittels eines Siliziumdriftdetektors aufgezeichnet.

Bei der Messung mit dem schnelleren Scan wurde eine Brütungsphase in den Messzyklus eingebaut, um die Resonanzen von Neon-artigem Krypton beobachten zu können. Einige Resonanzen dieses Ladungszustands, etwa die LMM-Übergänge, liegen deutlich unterhalb der Produktionsschwelle des Zustands.

Für den Vergleich mit den theoretisch zu erwartenden Spektren wurden Berechnungen mit dem „Flexible Atomic Code“ (FAC) durchgeführt, wobei die Abhängigkeit der Linienstärke von der Polarisation des abgestrahlten Lichts berücksichtigt wurde. Bei den während des schnellen Scans aufgenommenen Daten wurde insgesamt eine gute Übereinstimmung von Theorie und Experiment in der Lage der Resonanzen im Elektronenenergiespektrum gefunden. Die Intensitäten der Linien wiesen teilweise starke Diskrepanzen auf, vor allem bei höheren Elektronenenergien. Diese Unterschiede lassen sich hauptsächlich auf die Näherungen, die bei der Berechnung gemacht wurden, der Untergrundstrahlung in Folge von Stoßionisation und die Überla-

gerung der Linien verschiedener Ladungszustände im experimentellen Spektrum, zurückführen.

Die Änderung der Variationsgeschwindigkeit der Elektronenenergie hatte große Auswirkungen auf das Experiment, da sich die in der Falle vorhandenen Ladungszustände grundlegend unterschieden. Weil in der Messung mit schneller Variation die Scanzeit hinreichend kurz ist, sodass sich die Ladungszustandsverteilung während eines Messzyklus kaum ändert, liegen dort die während der Brütungsphase erzeugten Ladungszustände vor, überwiegend Neon-artiges, Natrium-artiges und Magnesium-artiges Krypton. Beim langsamen Scan ändert sich die Ladungszustandsverteilung zusammen mit der Elektronenstrahlenergie, sodass bei jeder Energie andere Zustände vorliegen. Insbesondere tauchen nicht diejenigen aus dem schnellen Scan auf, da diese relativ schnell in weniger stark geladene Zustände zerfallen. Die während des langsamen Scans in der Falle vorhandenen Ladungszustände konnten aufgrund der aufwändigen theoretischen Berechnung der Spektren niedrigerer Ladungszustände nicht bestimmt werden. Vermutlich handelt es sich um Schwefel- bis Argon-artiges Krypton.

Die Lage der aufgenommenen dielektronischen Resonanzen im Elektronenenergiespektrum wurde, sowohl für den schnellen, als auch für den langsamen Scan, mithilfe eines Gaußfits bestimmt und aufgelistet. Damit hat man nun für weitere Ladungszustände von Krypton experimentelle Daten, mithilfe derer sich astrophysikalische Plasmen sowie Laborplasmen anhand ihres emittierten Spektrums charakterisieren lassen. Die Untersuchung der Spektren hat aber auch ergeben, dass die Bestimmung der in einem Plasma vorhandenen Ladungszustände nicht immer möglich ist, sondern nur bei niedrigen Elektronenenergien, also weniger heißen Plasmen, oder mit sehr hochauflösenden Messungen. Die Elektronenenergie, bzw. Temperatur des Plasmas, hingegen, lässt sich aus dem beobachteten Röntgenspektrum aus der relativen Stärke der dielektronischen Rekombination bestimmen oder zumindest eingrenzen.

Die Theoretischen Berechnungen, die bei der Auswertung der Daten verwendet wurden, könnten noch einmal genauer durchgeführt werden. Mit einer höheren Anzahl an einbezogenen Elektronenkonfigurationen bei der Berechnung der Energie der Zustände, könnte, mit einem deutlich höheren Rechenaufwand, die Genauigkeit verbessert werden. Außerdem sollten die dielektronischen Resonanzen noch für die niedrigeren Ladungszustände berechnet werden, um so die Ladungszustände bestimmen zu können, die während der Messung mit langer Scanzeit beobachtet wurden. Interessant wäre zudem die Berechnung der Spektren der dielektronischen Rekombination mit anderen Programmen, die sich vom FAC unterscheidende Berechnungsverfahren

verwenden, und deren Ergebnisse mit den experimentellen Daten zu vergleichen. Beispiele für solche Programme sind HULLAC (Bar-Shalom, Klapisch & Oreg, 2001), ATOM (Amusia, Chernysheva & Natarajan, 1998) und der voll relativistische Code entwickelt in (Sampson, Zhang, Mohanty & Clark, 1989) (Zhang, Sampson & Mohanty, 1989).

Weitere Messungen mit hochgeladenem Krypton ließen eine bessere Überprüfung der Theorie zu. So könnte man die Ionen aus der Falle extrahieren um die Ladungszustandsverteilung direkt zu bestimmen. Dies ließe sich mit einer Anordnung wie in (Simon, 2010) durchführen. Mit bekannter Ladungszustandsverteilung könnten dann direkt die theoretische Spektren passend gewichtet und mit dem experimentell aufgenommenen Spektrum verglichen werden. Vor allem ließe sich dann die Messung mit langer Scanzeit auswerten.

Die hier vorgenommenen Messungen sollten noch einmal mit der Korrektur der Einstellungen des Verstärkers für die Verstärkung der Pulse des Siliziumdriftdetektors durchgeführt werden. Dadurch könnten die Artefakte, die sich als senkrechte Linien in den zweidimensionalen Spektren äußerten, entfernt werden. Falls dann immer noch an diesen Stellen senkrechte Fortsetzungen der dielektronischen Resonanzen zu finden wären, hätte man einen Hinweis auf Zwei-Photon-Zerfälle gefunden, die man im Detail in einer weiteren Messung untersuchen könnte. Sinnvoll wäre außerdem auch eine erneute Messung mit einem Röntgendetektor höherer Auflösung. Damit ließen sich die 3d-2p- und 3s-2p- Linien besser trennen und analysieren, da in den hier vorgenommenen Messungen noch eine starke Kontamination der Linien durch die jeweils andere vorlag und die Artefakte die Trennung unmöglich machten. Durch den Einsatz eines Mikrokalorimeters wie in (Porter et al., 2004) wäre eine Auflösung besser als 10 eV erreichbar. Damit könnten die gefundenen Linien, deren Linienzentren einen Abstand von etwa 200 eV voneinander hatten, gut getrennt untersucht werden. Dann wären auch die verschiedenen Übergänge leicht unterschiedlicher Energie, aus denen sich die beiden gefundenen Linien zusammensetzen, auflösbar. Eine solche genaue Analyse des Photonenenergiespektrums hat gerade bei der Interpretation astronomischer Daten eine große Bedeutung, da dort meist nur ein einzelnes Photonenpektrum des beobachteten Objekts aufgenommen werden kann und aus diesem Rückschlüsse über die Bestandteile des beobachteten Objektes gezogen werden sollen.

Generell könnte die Messung mit schnellem Scan auch für eine längere Dauer durchgeführt werden. Dann würden sich zusätzliche Linien von der Hintergrundstrahlung abheben, wie beispielsweise die im langsamen Scan entdeckten Linien, welche durch Übergänge zwischen den Hauptschalen der Ionen

entstehen. Kombinierte man eine längere Dauer des Experiments mit einer flacheren Falle und einem geringeren Strahlstrom, könnte auch noch die Auflösung der Elektronenstrahlenergie signifikant verbessert werden. Dann wären einige der dielektronischen Resonanzen der verschiedenen Ladungszustände getrennt auflösbar.

Zudem gibt es auch noch mehrere Ladungszustände von hochgeladenem Krypton, die noch nicht im Detail untersucht worden sind. Durch die Ausmessung eines anderen Elektronenenergiebereiches ließen sich auch deren dielektronische Resonanzen aufnehmen. Vergangene astronomische Beobachtungen haben den Wert experimenteller Befunde mehrfach gezeigt, entsprechend wichtig ist es, weiter daran zu arbeiten, den experimentellen Katalog der Spektren hochgeladenen Ionen zu komplettieren.

Erklärung

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

Weinheim, den 14.08.20,


.....

Literaturverzeichnis

- Altunbulak, M. & Klyachko, A. (2008). The pauli principle revisited. *Communications in Mathematical Physics*, 282 (2), 287–322.
- Amusia, M. Y., Chernysheva, L. & Natarajan, L. (1998). *Computation of atomic processes: A handbook for the atom programs*. American Institute of Physics.
- Bar-Shalom, A., Klapisch, M. & Oreg, J. (2001). Hullac, an integrated computer package for atomic processes in plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 71 (2-6), 169–188.
- Baumann, T. (2012). *Spektroskopische untersuchungen resonanter rekombinationsprozesse an hochgeladenem silizium in einer elektronenstrahlionenfalle* (Unveröffentlichte Dissertation).
- Beilmann, C. (2011). *Über die stärke mehrelektronischer resonanzen bei der photorekombination und-ionisation* (Unveröffentlichte Dissertation).
- Beilmann, C., López-Urrutia, J. C., Mokler, P. & Ullrich, J. (2010). High resolution resonant recombination measurements using evaporative cooling technique. *Journal of Instrumentation*, 5 (09), C09002.
- Beilmann, C., Postavaru, O., Arntzen, L., Ginzler, R., Keitel, C., Mäkel, V., ... others (2009). Intershell trielectronic recombination with k-shell excitation in kr 30+. *Physical Review A*, 80 (5), 050702.
- Bohr, N. (1913). I. on the constitution of atoms and molecules. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 26 (151), 1–25.
- Buchet, J., Buchet-Poulizac, M., Denis, A., Desesqueliqelles, J., Druetta, M., Martin, S., ... Wyart, J. (1988). The neonlike spectrum of kr xxvii. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 31 (1-2), 177–181.
- Burbidge, E. M., Burbidge, G. R., Fowler, W. A. & Hoyle, F. (1957). Synthesis of the elements in stars. *Reviews of modern physics*, 29 (4), 547.
- Chluba, J. & Sunyaev, R. (2006). Induced two-photon decay of the 2s level and the rate of cosmological hydrogen recombination. *Astronomy & Astrophysics*, 449, 1–11.

- Astrophysics*, 446 (1), 39–42.
- Crespo López-Urrutia, J. & Harman, Z. (2014, 01). Emission and laser spectroscopy of trapped highly charged ions in electron beam ion traps. In (Bd. 256, S. 315-373).
- Demtröder, W. (o. J.). *Experimentalphysik 3: Atome, moleküle und festkörper. 2010*. Springer.
- Demtröder, W. (2010). *Atoms, molecules and photons* (Bd. 3) (Nr. 7). Springer.
- Dennerl, K. (2002). Discovery of x-rays from mars with chandra. *Astronomy & Astrophysics*, 394 (3), 1119–1128.
- Dobrodey, S. (2019). *Charge-exchange studies of bare and hydrogen-like low-z ions in the x-ray and extreme-ultraviolet ranges inside an electron beam ion trap* (Unveröffentlichte Dissertation).
- Dodelson, S. & Widrow, L. M. (1994). Sterile neutrinos as dark matter. *Physical Review Letters*, 72 (1), 17.
- Dubau, J. & Volonte, S. (1980). Dielectronic recombination and its applications in astronomy. *Reports on Progress in Physics*, 43 (2), 199.
- Dyall, K. G. (1994). An exact separation of the spin-free and spin-dependent terms of the dirac-coulomb-breit hamiltonian. *The Journal of chemical physics*, 100 (3), 2118–2127.
- Epp, S. (2007). *Röntgen-laserspektroskopie hochgeladener ionen in einer ebit am freie-elektronen-laser flash* (Unveröffentlichte Dissertation). Ruprecht-Karls Universität Heidelberg.
- Fang, T. & Canizares, C. R. (2000). Probing cosmology with the x-ray forest. *The Astrophysical Journal*, 539 (2), 532.
- Fuchs, T., Biedermann, C., Radtke, R., Behar, E. & Doron, R. (1998). Channel-specific dielectronic recombination of highly charged krypton. *Physical Review A*, 58 (6), 4518.
- Gillaspy, J. D. (2001). Highly charged ions. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 34 (19), R93.
- Gladstone, G., Waite, J., Grodent, D., Lewis, W., Crary, F., Elsner, R. F., . . . others (2002). A pulsating auroral x-ray hot spot on jupiter. *Nature*, 415 (6875), 1000–1003.
- González Martínez, A. J. (2005). *Quantum interference in the dielectronic recombination of heavy highly charged ions* (Unveröffentlichte Dissertation).
- Gu, M. F. (2008). The flexible atomic code. *Canadian Journal of Physics*, 86 (5), 675–689.
- Helgaker, T., Jorgensen, P. & Olsen, J. (2014). *Molecular electronic-structure theory*. John Wiley & Sons.

- Herrmann, G. (1958). Optical theory of thermal velocity effects in cylindrical electron beams. *Journal of Applied Physics*, 29 (2), 127–136.
- Jansen, F., Lumb, D., Altieri, B., Clavel, J., Ehle, M., Erd, C., ... others (2001). Xmm-newton observatory-i. the spacecraft and operations. *Astronomy & Astrophysics*, 365 (1), L1–L6.
- Lechner, P., Fiorini, C., Hartmann, R., Kemmer, J., Krause, N., Leutenegger, P., ... others (2001). Silicon drift detectors for high count rate x-ray spectroscopy at room temperature. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 458 (1-2), 281–287.
- Levine, M. A., Marrs, R., Henderson, J., Knapp, D. & Schneider, M. B. (1988). The electron beam ion trap: A new instrument for atomic physics measurements. *Physica Scripta*, 1988 (T22), 157.
- Meschede, D. (2015). *Gerthsen physik*. Springer-Verlag.
- Müller, C. (2006). *Spherical harmonics* (Bd. 17). Springer.
- Nesbet, R. (1955). Configuration interaction in orbital theories. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 230 (1182), 312–321.
- Penetrante, B., Bardsley, J., DeWitt, D., Clark, M. & Schneider, D. (1991). Evolution of ion-charge-state distributions in an electron-beam ion trap. *Physical Review A*, 43 (9), 4861.
- Percival, I. C. & Seaton, M. J. (1958). The polarization of atomic line radiation excited by electron impact. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 251 (990), 113–138.
- Porter, F. S., Brown, G. V., Boyce, K. R., Kelley, R. L., Kilbourne, C. A., Beiersdorfer, P., ... Szymkowiak, A. E. (2004). The astro-e2 x-ray spectrometer/ebit microcalorimeter x-ray spectrometer. *Review of scientific instruments*, 75 (10), 3772–3774.
- Rapp, D. & Francis, W. E. (1962). Charge exchange between gaseous ions and atoms. *The Journal of Chemical Physics*, 37 (11), 2631–2645.
- Rice, J., Fournier, K., Goetz, J., Marmar, E. & Terry, J. (2000). X-ray observations of 2l-nl' transitions and configuration-interaction effects from kr, mo, nb and zr in near neon-like charge states from tokamak plasmas. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 33 (23), 5435.
- Richter, D. (2010). Mechanics of gases; mechanik der gase.
- Rodrigues, G., Indelicato, P., Santos, J., Patté, P. & Parente, F. (2004). Systematic calculation of total atomic energies of ground state configurations. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 86 (2), 117–233.
- Roedel, W. (2013). *Physik unserer umwelt: Die atmosphäre*. Springer-Verlag.

- Saloman, E. B. (2007). Energy levels and observed spectral lines of krypton, kr i through kr xxxvi. *Journal of physical and chemical reference data*, 36 (1), 215–386.
- Sampson, D. H., Zhang, H. L., Mohanty, A. K. & Clark, R. E. (1989). A dirac-fock-slater approach to atomic structure for highly charged ions. *Physical Review A*, 40 (2), 604.
- Schäffer, H., Dunford, R., Kanter, E., Cheng, S., Curtis, L., Livingston, A. & Mokler, P. (1999). Measurement of the two-photon spectral distribution from decay of the $1s2s1s0$ level in heliumlike nickel. *Physical Review A*, 59 (1), 245.
- Schrödinger, E. (1926). Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen der physik*, 385 (13), 437–490.
- Shah, C., Dobrodey, S., Bernitt, S., Steinbrügge, R., López-Urrutia, J. R. C., Gu, L. & Kaastra, J. (2016). Laboratory measurements compellingly support a charge-exchange mechanism for the “dark matter” 3.5 keV x-ray line. *The Astrophysical Journal*, 833 (1), 52.
- Shah, C., López-Urrutia, J. R. C., Gu, M. F., Pfeifer, T., Marques, J., Grilo, F., . . . Amaro, P. (2019). Revisiting the fe xvii line emission problem: High-resolution laboratory measurements of the 3s-2p and 3d-2p line-formation channels. *arXiv preprint arXiv:1903.04506*.
- Simon, M. C. (2010). *Photoionisation hochgeladener Ionen durch weiche Röntgenstrahlung in einer Elektronenstrahl-Ionenfalle* (Unveröffentlichte Dissertation). Ruprecht-Karls Universität Heidelberg.
- Slater, J. C. (1930). Atomic shielding constants. *Physical Review*, 36 (1), 57.
- Steinbrügge, R. F. (2010). *Weiterentwicklung eines Geschwindigkeitsfilters zur Beobachtung Ladungsändernder Prozesse Hochgeladener Ionen* (Unveröffentlichte Dissertation). Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg.
- Tschegg, E., Heindl, W. & Sigmund, A. (1984). Die Luft und ihre Zusammensetzung. In *Grundzüge der Bauphysik* (S. 218–253). Springer.
- Weisskopf, M. C., Tananbaum, H. D., Van Speybroeck, L. P. & O’Dell, S. L. (2000). Chandra x-ray observatory (cxo): overview. In *X-ray optics, instruments, and missions iii* (Bd. 4012, S. 2–16).
- Werner, K., Rauch, T., Ringat, E. & Kruk, J. W. (2012). First detection of krypton and xenon in a white dwarf. *The Astrophysical Journal Letters*, 753 (1), L7.
- Wolfmeyer, M. & Dillinger, J. (1971). The thermal conductivity of sapphire between 0.4 and 4 K. *Physics Letters A*, 34 (4), 247–248.
- Zhang, H. L., Sampson, D. H. & Mohanty, A. K. (1989). Fully relativistic and quasirelativistic distorted-wave methods for calculating collision strengths for highly charged ions. *Physical Review A*, 40 (2), 616.

Danksagung

Besonderer Dank gilt Dr. Stepan Dobrodey für die eingehende Betreuung während meiner Bachelorarbeit und die vielen Anregungen zur Verbesserung der Arbeit.

