

# **Inaugural-Dissertation**

zur  
Erlangung der Doktorwürde  
der  
Naturwissenschaftlich-Mathematischen  
Gesamtfakultät  
der Ruprecht-Karls-Universität  
Heidelberg

vorgelegt von  
**Dipl.-Phys. Katharina Kubiček**  
aus Darmstadt

**Tag der mündlichen Prüfung: 07.07.2010**



**Absolut- und Relativbestimmungen der Energien von  
2p-1s-Übergängen in wasserstoff-, helium- sowie  
lithiumartigen Schwefel-, Argon- und Eisenionen**

**Gutachter: PD Dr. José R. Crespo López-Urrutia  
Prof. Dr. Thomas Stöhlker**



## Zusammenfassung:

In dieser Arbeit wurden mit Hilfe einer speziell entwickelten Technik zur Bestimmung absoluter Bragg-Winkel ohne Rückgriff auf Referenzlinien hochpräzise Messungen der Wellenlängen der Lyman- $\alpha_1$  Übergänge in  $S^{15+}$  und  $Ar^{17+}$  und der  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  („ $w$ “) Übergänge in  $S^{14+}$  und  $Ar^{16+}$  mit einem Kristallspektrometer durchgeführt. Des Weiteren wurden die Wellenlängen des  $w$  Übergangs in  $Fe^{24+}$  sowie einiger dielektronischer Satelliten-Linien von  $Fe^{23+}$  und  $Fe^{22+}$  relativ zu den Lyman- $\alpha$  Linien von  $Fe^{25+}$  vermessen. Das Ergebnis der  $w$  Resonanzlinie von  $S^{14+}$ , 2460.626(3) eV, ist mit einer relativen Unsicherheit von  $\sim 1.2$  ppm die bisher genaueste Röntgenwellenlängenmessung in hochgeladenen Ionen, was es ermöglicht, theoretische Vorhersagen über Zwei-Elektronen und Zwei-Photonen QED-Korrekturen für heliumartige Systeme zu überprüfen. Die Resultate für die Übergänge in  $Fe^{23+}$  zeigen innerhalb ihrer Unsicherheiten von nur wenigen ppm eindeutige Diskrepanzen zu gängigen, bisher für gültig befundenen Modellen des Li-artigen Systems für  $Z = 26$ . Eine exzellente Übereinstimmung mit den Vorhersagen für wasserstoffartige Systeme, die sehr kleine theoretische Unsicherheiten aufweisen, demonstriert einerseits die Zuverlässigkeit unserer Methode. Andererseits stellen diese Messungen aber auch die genaueste experimentelle absolute Überprüfung solcher Berechnungen dar. Die in früheren Experimenten noch vorliegende systematische Korrektur konnte mit einem Aufbau, bei dem die Ionenwolke als Punktquelle erscheint, nahezu vollständig reduziert werden.

## Abstract:

Within this work, high-precision wavelength measurements were carried out without reference lines on the Lyman- $\alpha_1$  transitions in  $S^{15+}$  and  $Ar^{17+}$ , as well as the  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  („ $w$ “) transitions in  $S^{14+}$  and  $Ar^{16+}$  making use of a special technique of Bragg-angle determination in combination with a flat crystal spectrometer. The wavelengths of the  $w$  line in  $Fe^{24+}$  and dielectronic satellite lines in  $Fe^{23+}$  and  $Fe^{22+}$  were also measured with respect to the Lyman- $\alpha$  lines in  $Fe^{25+}$ . The result for the resonance line in  $S^{14+}$  of 2460.626(3) eV with a relative uncertainty of  $\sim 1.2$  ppm is the most precise x-ray wavelength reported for highly charged ions to date, and allows to test recent predictions for QED two-electron and two-photon radiative corrections for He-like ions. The values obtained for the wavelengths of the lines in  $Fe^{23+}$  reveal a significant discrepancy with predictions for the Li-like system with  $Z = 26$ . The excellent agreement with predictions for the hydrogen-like systems, which have very small theoretical uncertainties, demonstrates on one hand the reliability of our method. On the other hand, these measurements constitute the most accurate absolute test of those calculations. The already small sources of systematic uncertainty in previous experiments were nearly completely eliminated by using a setup in which the ion cloud appears as a point source.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Theorie wasserstoff- und heliumartiger Systeme</b>	<b>7</b>
1.1 Nichtrelativistische Theorie wasserstoffartiger Systeme . . . . .	9
1.2 Relativistische Beschreibung wasserstoffartiger Systeme . . . . .	10
1.3 Relativistische Feldtheorie: Quantenelektrodynamik . . . . .	13
1.3.1 Lamb-Verschiebung . . . . .	13
1.3.2 Quantisierung von Feldern und Quantenelektrodynamik . . . . .	13
1.3.3 Störungstheorie und Feynman-Diagramme . . . . .	14
1.3.4 Schwere wasserstoffähnliche Systeme: All-order Rechnungen . . . . .	17
1.3.5 Kerneffekte . . . . .	20
1.3.6 Experimentelle Messungen der Lamb-Verschiebung . . . . .	22
1.4 Nichtrelativistische Theorie heliumartiger Systeme . . . . .	23
1.4.1 Zentralfeldnäherung . . . . .	24
1.4.2 Störungstheorie . . . . .	24
1.4.3 Variationsprinzip . . . . .	26
1.5 Relativistische Beschreibung heliumartiger Systeme . . . . .	27
1.6 Quantenelektrodynamische Beschreibung heliumartiger Systeme . . . . .	28
1.7 Experimentelle Messung von Bindungsenergiebeiträgen in heliumartigen Systemen	29
<b>2 Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen</b>	<b>33</b>
2.1 Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor . . . . .	33
2.1.1 Beschleuniger . . . . .	34
2.1.2 Tokamaks . . . . .	42
2.1.3 Elektronenstrahlionenfallen . . . . .	44

2.2	Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen . . . . .	49
2.2.1	Beugung von Röntgenstrahlung . . . . .	50
2.2.2	Kristallspektrometer . . . . .	53
2.2.3	Messung von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien . . . . .	59
<b>3</b>	<b>Absolut-Wellenlängen-Kalibrationsmethode für hochpräzise Röntgenspektroskopie mit Kristallspektrometern</b>	<b>65</b>
3.1	Das Prinzip der Wellenlängenmessung . . . . .	65
3.1.1	Die a/b-Methode unter Verwendung von Lichtreferenzlinien . . . . .	66
3.1.2	Kombination der a/b-Methode und der Bond-Methode . . . . .	70
3.2	Experimenteller Aufbau . . . . .	72
3.2.1	Die Kristallspektrometer-Anordnung . . . . .	72
3.2.2	Der Lichtreferenzlinien-Aufbau . . . . .	76
3.3	Systematische Fehlerquellen . . . . .	81
3.3.1	Dreidimensionale Betrachtung der Bragg-Reflektion . . . . .	82
3.3.2	Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Einsatz einer Röntgenpunktquelle . . . . .	83
3.3.3	Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Verwendung einer ausgedehnten Röntgenquelle . . . . .	93
3.3.4	Experimenteller Ansatz zur Verringerung der Linienkrümmung . . . . .	102
3.3.5	Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Verwendung einer ausgedehnten, nicht ideal positionierten Röntgenquelle . . . . .	105
3.3.6	Ausrichtung des Spektrometers bei senkrechter Montage zum Elektronenstrahl . . . . .	115
3.3.7	Ausrichtung des Spektrometers bei paralleler Montage zum Elektronenstrahl	121
3.3.8	Simulation der Linienkrümmung auf dem Detektor . . . . .	125
3.3.9	Experimentelle Beobachtung der Linienkrümmung . . . . .	145
<b>4</b>	<b>Datenanalyse und Ergebnisse</b>	<b>151</b>
4.1	Analyse der Lichtreferenzlinien . . . . .	151
4.2	Analyse der Röntgenspektren . . . . .	155
4.3	Bestimmung der a/b-Verhältnisse . . . . .	159
4.4	Experimentelle Resultate . . . . .	161



## *Inhaltsverzeichnis*

---

4.4.1	Experimenteller Aufbau und Datenaufnahme . . . . .	164
4.4.2	Details der Röntgenspektren . . . . .	167
4.4.3	Analyse der a/b-Abstandsverhältnisse . . . . .	172
4.4.4	Bestimmung der Röntgenwellenlängen . . . . .	175
4.4.5	Diskussion der experimentellen Ergebnisse . . . . .	179
4.4.6	Röntgenwellenlängenmessungen an wasserstoffartigen Ionen ohne Rückgriff auf Referenzlinien . . . . .	180
4.4.7	Relativ- und Absolutmessungen von Röntgenwellenlängen an heliumartigen Ionen . . . . .	186
4.4.8	Röntgenwellenlängenmessungen an lithiumartigen Ionen . . . . .	196
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>207</b>



# Einleitung

Fast die ganze Welt kennt heute den Namen des Physikers Wilhelm Conrad Röntgen. Bekannt wurde Röntgen durch die Entdeckung der Röntgenstrahlung am Abend des 9. November 1895. Er hatte Phänomene untersucht, die entstehen, wenn elektrische Ladung durch Gase geleitet wird, die unter extrem niedrigem Druck stehen. Ähnliche Experimente wurden in jener Zeit auch durch andere Physiker wie H. Hertz und P. Lenard durchgeführt. Zu diesem Zweck wurden sehr hohe Spannungen an eine mit Edelgas gefüllte Röhre angelegt, wobei zwischen den Spannungspolen ein leuchtender Strahl entstand. Man nannte diese Strahlung "Kathoden-Strahlung", denn das Elektron war noch nicht bekannt. Bei diesen Experimenten machte Röntgen die Entdeckung, dass, sobald die Kathodenstrahlung einschaltet wurde, ein einige Meter von der Röhre entferntes, mit fluoreszierendem Material beschichtetes Papier zu leuchten begann. Das Papier schimmerte auch weiter, als Röntgen versuchte, die Röhre mit einer dicken schwarzen Pappe abzuschirmen. Bis zum Januar 1896 veröffentlichte er drei wissenschaftliche Forschungsberichte: „Über eine neue Art von Strahlen: Vorläufige Mitteilungen“, „Eine neue Art von Strahlen“ und „Weitere Beobachtungen über die Eigenschaften der X-Strahlen“ [1]. Dies waren die ersten formalen, öffentlichen Abhandlungen über die Röntgenstrahlung. Im Jahre 1901 erhielt Röntgen dann auch den ersten Nobelpreis für Physik „als Anerkennung des außerordentlichen Verdienstes, den er sich durch die Entdeckung der nach ihm benannten Strahlen erworben hat“. Die Untersuchung der Röntgenstrahlung machte weitere Fortschritte als M. von Laue [2], P. Knipping und W. Friedrich im Jahre 1912 die Beugung von Röntgenstrahlung an Kristallen beobachteten. W. H. und W. L. Bragg entwickelten 1913 gemeinsam die so genannte Drehkristallmethode, ein in der Kristallographie bis heute verwendetes Analyseverfahren zur Bestimmung von Kristallstrukturen auf der Basis von Röntgenbeugung. Im Mittelpunkt stand dabei das von den Forschern aufgestellte und nach ihnen benannte Braggsche Gesetz [3]. In Anerkennung dieser Leistungen wurden Vater und Sohn 1915 mit dem Physiknobelpreis „für ihre Verdienste um die Erforschung der Kristallstrukturen mittels Röntgenspektroskopie“ ausgezeichnet.

Auch Röntgen hatte bei seiner Entdeckung der Röntgenstrahlung noch nicht geahnt, welch vielfältigen Einsatz diese bis in die heutige Zeit finden würde. So revolutionierte die Röntgenstrahlung u.a. die medizinische Diagnostik und führte zu weiteren wichtigen Erkenntnissen des 20. Jahrhunderts, z. B. der Entdeckung und Erforschung der Radioaktivität. Bereits im Jahre 1896 experimentierte Henri Becquerel mit lumineszenten Materialien und stieß dabei auf die Strahlung, die in der Lage ist, Materialien zu durchdringen. Indirekt führte die Entdeckung der Röntgenstrahlung damit zur Entdeckung der Radioaktivität, für die Becquerel zusammen mit Marie und Pierre Curie 1903

mit dem Physiknobelpreis erhielt. In der Medizin lassen sich heutzutage mit Hilfe von Röntgenstrahlung durch Verwendung mathematischer Verfahren in Kombination mit neuen bildgebenden Verfahren wie der Computertomographie dreidimensionale Abbildungen des Körperinneren erhalten. Weitere wichtige Anwendungsgebiete liegen in der Werkstoffprüfung, wo sich Objekte mit Hilfe der Röntgentechnik (Durchstrahlungsprüfung) auf z.B. Risse im Inneren untersuchen lassen. In der Mineralogie werden chemische Analysen von Gesteinen und Mineralen mit Hilfe der Röntgenfluoreszenz-Analyse möglich gemacht. Weiterhin findet die Röntgenstrahlung in der Kristallstrukturanalyse zur Bestimmung des molekularen Aufbaus von Kristallen durch Beugung dieser Strahlung am Kristallgitter Verwendung. Neben diesen Anwendungen helfen Röntgenstrahlen aber auch bei der Erforschung kleinster Strukturen (Röntgenmikroskop) und bei der Erforschung des Weltalls (Röntgenastronomie).

Röntgenstrahlung wird im Universum von Quellen freigesetzt, die extrem heiße Materie bei Temperaturen von Millionen bis hundert Millionen Kelvin besitzen, und generell bei den energiereichsten Prozessen, d.h. bei Vorgängen, an denen Atome, Ionen oder Elektronen mit extrem hoher Energie beteiligt sind. Dazu gehören zum Beispiel Materieeinfall auf schwarze Löcher und „Geburten“ und „Tode“ von Sternen, wie Supernovae. Auch von den Konstituenten des Sonnensystems selbst wird Röntgenstrahlung freigesetzt, z.B. direkt von der Sonne oder indirekt von Planeten oder Kometen durch Rekombination mit den Ionen des Sonnenwindes. Da die Absorption der Röntgenstrahlung in der Erdatmosphäre Beobachtungen vom Boden aus verhindert, sind Röntgensatelliten heutzutage das wichtigste Werkzeug der Röntgenastronomie. Im Jahr 1999 wurden gleich zwei dieser Röntgensatelliten gestartet, *XMM-Newton* (engl: X-ray Multi-Mirror, d.h. Röntgen-Mehrfachspiegel) [4] und *Chandra* (vollständiger Name: engl.: Chandra X-Ray Observatory, d.h. Röntgenobservatorium) [5], seit 2005 gibt es zudem *Astro-E2*, der in *Suzaku* [6] umbenannt wurde. Über die Analyse der durch diese Satelliten erhaltenen Röntgenspektren lässt sich z.B. klären, wann und wie die chemischen Elemente erzeugt wurden, was passiert wenn Materie in ein schwarzes Loch einfällt und wie Gas auf Temperaturen aufgeheizt und Dichten gebracht wird, bei denen es als Plasma vorliegt und ein hohes Maß an Röntgenstrahlung emittiert. Für die Interpretation der so erhaltenen Daten sind Labordaten für solche Plasmen vonnöten. Oft hängt die Analyse solcher Spektren stark von Computermodellen ab, welche sich auf einen sehr begrenzten Satz an Labordaten oder eine unvollständige theoretische Beschreibung stützen. Um zuverlässige Labordaten zu erhalten, ist es notwendig, hochgeladene Ionen (engl.: highly charged ions, HCIs) unter genau definierten Bedingungen z.B. bezüglich der Temperatur zu erzeugen. Leider gestaltet sich dies oft als schwierig. Tokamaks oder Stellaratoren erzeugen Plasmen bei Temperaturen im Megakelvin Bereich, welche extreme Temperaturgradienten aufweisen. Außerdem weisen diese Plasmen eine hohe zeitliche Abhängigkeit auf, die im Tokamak eingesetzten elektrischen und magnetischen Felder sind nur ungenau bekannt und die Zusammensetzung des Plasmas ist nicht genau definiert, da z.B. auch schwerere Elemente aus den Wänden des Tokamaks in das Plasma gelangen können. Eine präzise Beschreibung der Eigenschaften dieses Plasmas ist daher sehr schwierig, so dass Aussagen für einzelne Ionensorten schwerlich getroffen werden können. Im Gegensatz dazu stellen Schwerionenspeicherringe und Elektronenstrahlionenfallen (engl.: electron beam ion traps, EBITs) nahezu ideale Bedingungen zur Verfügung, um Ionen jedes Elementes in jedem Ladungs-

zustand zu untersuchen. In dieser Arbeit wurden wasserstoff-, helium- und lithiumartige Ionen im mittleren Bereich der Kernladungszahl  $Z$  in einer solchen EBIT untersucht.

Die Vorstellungen, die wir heute über den Aufbau und die Struktur von Atomen und Ionen haben, stammen vorwiegend aus der ersten Hälfte des 20. ten Jahrhunderts. Der eigentliche Beginn der Atomphysik deutet sich mit der Entdeckung der Spekrallinien von Atomen und der Erklärung dieses Phänomens durch Joseph von Fraunhofer an. Die Untersuchung dieser Linien führte u.a. zum Bohrschen Atommodell [7, 8]. Dieses konnte, die Energien der Niveaus in Atomen vorhersagen. Für das Wasserstoffatom stimmten die mit diesem Modell vorhergesagten und die in Experimenten der damaligen Zeit ermittelten Energien überein. Durch die Weiterentwicklung der Messmethoden wurde eine immer größere Präzision in den experimentellen Ergebnissen erzielt und deutliche Abweichungen der experimentellen Ergebnisse von den einfachen theoretischen Vorhersagen beobachtet. Um diese Widersprüche zwischen Experiment und Theorie aufzuheben, wurden stetig neue Theorien entwickelt, so z.B. von Heisenberg, Schrödinger und anderen die Quantenmechanik [9,9–17]. Um den Geltungsbereich dieser Theorie zu vergrößern, wurde sie von P. A. M. Dirac um die Relativistik erweitert [14, 16, 17]. Eine weiterführende Theorie, die Quantenelektrodynamik (QED), wurde initiiert als W. Lamb und R. Retherford eine kleine Differenz zwischen den zwei Energieniveaus  $2s_{1/2}$  und  $2p_{1/2}$  des Wasserstoffatoms, die sogenannte Lamb Verschiebung, beobachteten [18], die innerhalb der Dirac Theorie nicht gedeutet werden konnte. Ausgehend vom Konzept des quantisierten Strahlungsfeldes, konnten R. P. Feynman und diesen experimentellen Befund mit dem neuen Konzept der QED [19–25] erklären. Der Erfolg dieser Theorie begründet sich in der extremen Genauigkeit, mit der die Theorie in der Lage ist, die Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen und dem quantisierten elektromagnetischen Feld mittels Austausches von Photonen zu beschreiben. Beispiele dafür sind die extrem genaue Vorhersage der  $1s$ - $2s$  Übergangsenergie in atomarem Wasserstoff mit einer Präzision von  $10^{-14}$ .

Allerdings sind viele der interessantesten atomphysikalischen Effekte wie z.B. relativistische oder QED-Beiträge zu den Energien der Niveaus sehr gering und daher schwer nachweisbar bzw. zu vermessen. Durch die Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor ergeben sich in Bezug auf dieses Problem neue experimentelle Möglichkeiten. Viele der erwähnten Effekte skalieren mit  $Z^n$ , wobei  $n < 2$  gilt und  $n$  eine ganze Zahl darstellt. So ergibt sich für die QED-Beiträge zu den Energien der Niveaus eine Abhängigkeit von  $Z^4$  und für die Hyperfeinstrukturaufspaltung von  $Z^3$ . Damit nimmt, wenn sich der Ladungszustand eines Ions erhöht, gleichzeitig der relative Anteil dieser Beiträge an der Bindungsenergie, die von  $Z^2$  abhängig ist, zu, und die Beiträge selbst werden experimentell leichter zugänglich. So beträgt die  $1s$  Lamb Verschiebung für  $U^{91+}$  bereits  $\sim 460$  eV. Allerdings verschieben sich auch die Wellenlängen der zu spektroskopierten Linien von Atomen zu Ionen vom sichtbaren in den Röntgenbereich. Ein weiterer Vorteil beim Einsatz hochgeladener Ionen ergibt sich dadurch, dass Systeme mit einer geringeren Anzahl von Elektronen und einem größeren Zentralpotential des Kernes theoretisch einfacher zu beschreiben sind. Aufgrund der Schwierigkeiten in der theoretischen Beschreibung von Viel-Körper-Systemen liegen hochpräzise theoretische Berechnungen für Energieniveaus nur für Ein- und Zwei-Elektronen-Systeme vor [26–30].

In vielen Fällen werden heutzutage Speicherringe oder Elektronenstrahlionenfallen (EBITs) ein-

gesetzt, um hochgeladene Ionen für Hochpräzisionsspektroskopie herzustellen. In Speicherringen können hochgeladene Ionen, die bei relativistischen Energien in Beschleunigern erzeugt wurden, stark abgebremst werden [31]. In einer EBIT werden die Ionen im Gegensatz dazu in einem kleinen Fallenvolumen gefangen und weisen nur thermische Geschwindigkeiten auf [32]. Dadurch vermeiden beide Methode systematische Fehlerquellen, die sich durch eine Dopplerverschiebung der im Laborsystem gemessenen Wellenlängen bezüglich der im Ruhesystem der Ionen vorliegenden Wellenlängen ergeben könnten. Außerdem sind die Spektren von Übergängen in Ionen, die mit einer EBIT erzeugt und gefangen werden, aufgrund der geringen Wechselwirkung der Ionen untereinander frei von oft störenden sogenannten „Satelliten“ und weisen symmetrische Linienprofile auf. Der Nachteil, der sich für den Einsatz einer EBIT ergibt, ist, dass die Intensität der von den Ionen emittierten Röntgenstrahlung gering ist, da die Dichte der Ionen und die Anregungsrate für die Übergänge niedrig sind. Die Heidelberg-EBIT und die FLASH-EBIT haben jedoch von allen EBITs weltweit die höchsten Elektronenstrahlströme und liefern damit beste Voraussetzungen für die Experimente dieser Arbeit.

Die Röntgenspektroskopie greift zur Bestimmung von Wellenlängen auch heute noch zum größten Teil auf klassische wellenlängendispersive Verfahren, wie z.B. Kristallspektrometer, zurück. Dies liegt vor allem daran, dass im Gegensatz zum sichtbaren Bereich für den Röntgenbereich bis zum jetzigen Zeitpunkt keine schmalbandigen, kollimierten Laser existierten. Allerdings verändert sich diese Situation seit kurzem. In Deutschland, den USA und Japan sind/werden mit den Freien-Elektronen-Lasern (FEL) X-FEL [33], LCLS [34] und Spring-8 [35] zum ersten Mal Laser für den Röntgenbereich entwickelt und zugänglich gemacht (worden). Bereits jetzt ist es am DESY in Hamburg gelungen, durch eine Kombination aus einem FEL für weiche Röntgenstrahlen, kurz FLASH, mit einer speziell für diesen Einsatz am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg konstruierten EBIT, FLASH-EBIT, einen inneratomaren Ein-Elektronen-Übergang in einem HCI im weichen Röntgenbereich, bei 48.6 eV, durch resonante Ein-Photonen Laserspektroskopie zu untersuchen [36]. Für den härteren Röntgenbereich war ein solches Experiment allerdings bis jetzt noch nicht möglich. In dieser Arbeit wurde für die Röntgenspektroskopie ein Flachkristallspektrometer mit rotierbarem Kristall eingesetzt, welches im Vergleich zu anderen Kristallspektrometerkonfigurationen mit gekrümmten Kristall keine komplizierte Fokussierungsgeometrie aufweist und einen großen Bereich an Röntgenwellenlängen für die Spektroskopie zugänglich macht. Wie für alle Röntgenkristallspektrometer beruht das Prinzip der Wellenlängenbestimmung auf der Beugung von Röntgenstrahlung an Kristallen und dem damit verbundenen Bragg-Gesetz. Für eine Wellenlängenmessung muss im Prinzip bei präzise bekannter Gitterkonstante des Kristalls allein der Bragg-Winkel der untersuchten Röntgenstrahlung ermittelt werden. Strebt man für die Wellenlängenmessung allerdings eine Genauigkeit von wenigen ppm an, so stellt diese Winkelmessung eine große experimentelle Herausforderung dar, da Winkelfehler von wenigen  $\mu\text{rad}$  schwerlich zu vermeiden sind und hochpräzise Messgeräte eingesetzt werden müssen. Daher werden die gemessenen Bragg-Winkel typischerweise eine unbekannte Verschiebung des Nullpunktes in der Winkelskala beinhalten. Aufgrund dieser Tatsache werden Wellenlängen spektraler Linien im Röntgenbereich bis heute normalerweise durch den Vergleich mit Referenzlinien, deren Wellenlängen tabelliert sind [37], bestimmt. Der Nachteil dieses Verfahrens ist, dass die Präzisi-

on, die in der Wellenlängenbestimmung erreicht werden kann, durch die Ungenauigkeit, mit der die Wellenlänge der Referenzlinie bekannt ist, limitiert wird und die Spektren der Referenzlinien, meist der  $K \alpha$  Linien, häufig Satelliten-behaftet sind [38]. Außerdem wird die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung für die Spektroskopie mit Kristallspektrometern normalerweise durch Kollimationsspalte festgelegt, welche den detektierten Photonenfluss erheblich reduzieren.

Um diese Probleme zu umgehen und Röntgenwellenlängen von hochgeladenen Ionen absolut vermessen zu können, wurde in dieser Arbeit eine andere Methode eingesetzt, die  $a/b$ -Methode [39], die am Max-Planck-Institut für Kernphysik von J. Braun und H. Bruhns entwickelt wurde. Diese Methode verzichtet auf Kollimierung der einfallenden Röntgenstrahlung und nutzt Strahlen sichtbaren Lichtes, um die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung als Funktion des Kristallwinkels zu verfolgen. Die  $a/b$ -Methode wurde mit der Bond Methode [40] kombiniert, die eine Bestimmung von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf Referenzlinien erlaubt. Dabei wird die untersuchte Röntgenlinie zweifach unter den Bragg-Winkeln  $\theta$  und  $-\theta$  spektroskopiert, um einen Fehler in der Winkelmessung aufgrund einer Nullpunktverschiebung zu vermeiden. Dies ermöglicht hochpräzise Wellenlängenmessungen an Übergängen in hochgeladenen Ionen bei geringer Intensität der Röntgenstrahlung über einen großen Wellenlängenbereich. Solche Absolutwellenlängenmessungen, wie sie auch in dieser Arbeit durchgeführt wurden, können zum einen genutzt werden, um neue Röntgenstandardwellenlängen zu etablieren. Stimmen bei einer angestrebten relativen Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung von 1 ppm experimentelle und theoretische Werte für die Wellenlängen von Übergängen in wasserstoffartigen Ionen überein, können diese Röntgenlinien als neuer Röntgenstandard etabliert werden [41, 42]. Zum anderen sind solche Messungen nötig, um die Theorie des Atoms, und insbesondere quantenelektrodynamische Effekte zu testen, ohne auf sekundäre Referenzwellenlängen zurückzugreifen. Dies ist besonders für helium- und lithiumartige Ionen interessant, da diese die einfachsten Systeme sind, in denen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und die korrespondierende Verschiebung der Energieniveaus in den Ionen sowie die Gültigkeit unterschiedlicher theoretischer Ansätze zur Beschreibung dieser Wechselwirkung [27–30] spektroskopisch untersucht werden können.

Für die Experimente dieser Arbeit ist noch hervorzuheben, dass die dreidimensionale Betrachtung der Bragg-Reflektion für den Röntgenreflex in der Detektorebene zu einer geringen Krümmung führt. Diese Krümmung der Röntgenlinie ruft, sofern sie in den Hochpräzisionswellenlängenmessungen nicht berücksichtigt wird, einen relativen systematischen Fehler in der Wellenlängenbestimmung von einigen bis einigen Duzend ppm hervor. In früheren Wellenlängenmessungen [43], die nichts desto trotz die genauesten Röntgenwellenlängenmessungen ohne Rückgriff auf Referenzwellenlängen darstellen, wurde die Größe dieser Linienkrümmung für Röntgenlinien, die von wasserstoff- und heliumartigen Ionen stammen, über die Lyman- $\alpha_1$  Linien von ausgewählten wasserstoffartigen Ionen und ein Skalierungsgesetz theoretisch berechnet und in der Datenauswertung berücksichtigt. Die Krümmung selbst konnte experimentell nicht aufgelöst werden. Für die Messungen dieser Arbeit wurde die Größe dieser Krümmung für den speziellen Messaufbau durch eine Monte-Carlo-Simulation ermittelt und konnte mittels verbesserter Methoden der Datenanalyse experimentell beobachtet werden. Dieses Vorgehen zusammen mit einer detaillierten Untersuchung anderer systematischer Fehlerquellen in Kombination mit experimentellen Techniken, die

es erlauben diese Fehlerquellen zu minimieren oder gar ganz zu vermeiden, führt für die Messungen dieser Arbeit zu Übergangsenergien von wasserstoff- und heliumartigen Ionen, die relative Unsicherheiten im Bereich von 1.5 ppm aufweisen. Damit handelt es sich bei diesen Messungen bis heute um die präzisesten Absolutröntgenwellenlängenmessungen an hochgeladenen Ionen.

Das erste Kapitel dieser Dissertation widmet sich der theoretischen Beschreibung von wasserstoff- und heliumartigen Systemen. Die verschiedenen physikalischen Effekte, die die Bindungsenergien in diesen Systemen modifizieren, werden beschrieben und die Größe der entstehenden Verschiebungen abgeschätzt. Für heliumartige Ionen wird ein Überblick über die verschiedenen Berechnungsmethoden für die Energien der Zustände in diesen Systemen gegeben. Kapitel 2 geht auf die Techniken zur Erzeugung von hochgeladenen Ionen im Labor mitsamt ihren Vor- und Nachteilen ein und gibt einen Überblick über die Methoden zur Messung von Röntgenwellenlängen an Übergängen in hochgeladenen Ionen. Kapitel 3 erklärt die in dieser Arbeit eingesetzte Messmethode und den Spektrometeraufbau und diskutiert mögliche systematische Fehlerquellen, die sich unter Einsatz dieser Methode ergeben können. Ein besonderer Schwerpunkt liegt dabei auf der Simulation und dem experimentellen Nachweis der Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene. Das vierte Kapitel schließlich erläutert die Datenanalyse und stellt die Resultate der Wellenlängenmessungen für wasserstoff-, helium- und lithiumartige Systeme vor. Für heliumartige Systeme werden die theoretischen Vorhersagen mit den neuen experimentellen Daten verglichen und die Gültigkeit der Theorien diskutiert. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick.



# Kapitel 1

## Theorie wasserstoff- und heliumartiger Systeme

Der Fortschritt in der Physik hat verschiedenste Erscheinungsformen, oft verläuft er sprunghaft, manchmal schrittweise, indem die bisher bekannten physikalischen Gesetze und Modellvorstellungen genutzt werden, um neue experimentelle Beobachtungen und Resultate zu erklären. Manchmal jedoch wird eine experimentelle Abweichung von den durch die bekannten physikalischen Modelle vorhergesagten Resultaten beobachtet und dies führt dann zur Entdeckung neuer physikalischer Gesetzmäßigkeiten und Beschreibungsformen. In der Atomphysik war eine solche experimentelle Abweichung von der bis daher umfassendsten Theorie zur Beschreibung des Wasserstoffatoms, der Dirac Theorie [14, 16, 17], die Entdeckung der Energiedifferenz zwischen dem  $2s_{1/2}$ - und dem  $2p_{1/2}$ -Niveau (Lamb-Verschiebung) im Wasserstoffatom durch W.E. Lamb und R.C. Retherford [18]. Ausgehend vom Konzept des quantisierten Strahlungsfeldes, waren R. P. Feynman und andere in der Lage dieses Experiment mit einer neuen, von ihnen entwickelten Theorie, der Quantenelektrodynamik (QED) [19–25] zu deuten. Diese sogenannte *zweite Quantisierung* setzt eine Nullpunktsenergie des Vakuums voraus, die analog zur Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators behandelt werden kann. Die Nullpunktsenergie rührt dabei vom elektromagnetischen Feld virtueller Photonen her, die in einem durch die Unschärferelation [11, 13] limitierten Zeitraum existieren können. Die Wechselwirkung dieser virtuellen Photonen mit den Elektronen des Atoms oder Ions führt zu einem „Versmieren“ der Ladungsverteilung der Elektronen bei ihrer Bewegung um den Atomkern und zu einer Verschiebung der Energieniveaus im Atom oder Ion.

Die QED liegt im Vergleich zur Dirac Theorie noch nicht einmal für den einfachsten gebundenen Zustand des einzelnen Wasserstoffatoms in geschlossener Form vor. Die präzise Berechnung von Energieniveaus eines Systems muss die Energieverschiebungen berücksichtigen, die durch die Wechselwirkung dieses Systems mit einer beliebigen Anzahl von virtuellen Photonen mit beliebiger Energie verursacht werden, d.h. durch eine unendliche Anzahl von Feynman-Diagrammen. Dies entspricht einer störungstheoretischen Expansion der Wechselwirkungsterme im Hamilton-Operator nach der Kopplungskonstante  $\alpha = e^2/(\hbar c) \approx 1/137$  für die Elektronenladung  $e$ , wobei

$c$  für die Lichtgeschwindigkeit steht und  $\hbar$  sich über die Planck-Konstante  $h$  zu  $\hbar = h/(2\pi)$  berechnen lässt. Zusätzlich können die in der Entwicklung nach  $\alpha$  auftretenden Terme (auch für Mehr-Elektronen-Atome und Ionen) mit Hilfe der Störungstheorie jeder einzeln entweder nach der Kopplungskonstante ( $Z\alpha$ ) oder  $1/Z$ , die das externe Feld des Kernes berücksichtigt, entwickelt werden, je nachdem ob die Bedingung  $(Z\alpha) \ll 1$  erfüllt wird oder nicht. Für schwere Atome oder Ionen mit mehreren Elektronen liegt ein Viel-Körper-System vor, in dem der Kern starke Coulombwechselwirkung verursacht. In den Berechnungen für die Energieniveaus solcher Systeme treten üblicherweise divergente Integrale auf. Zudem beeinflusst die Beschränkung auf einzelne Terme der störungstheoretischen Entwicklung die durch die Theorie tatsächlich erhaltenen Werte und deren Genauigkeit. Aufgrund der Schwierigkeiten in der theoretischen Beschreibung von Viel-Körper-Systemen liegen hochpräzise theoretische Berechnungen für Energieniveaus nur für Ein- und Zwei-Elektronen-Systeme vor [26–30]. Diese Rechnungen resultieren in Vorhersagen, die relative Genauigkeiten von 1 ppm oder besser aufweisen. Allerdings führen die oben genannten Probleme für Mehr-Elektronen-Systeme und die dazugehörigen Lösungsansätze dazu, dass die Resultate der verschiedenen theoretischen Berechnungen in Größenordnungen variieren, die größer als die genannten Unsicherheiten sind.

Auf der anderen Seite sind Wasserstoff und wasserstoffartige Ionen schon seit jeher ideale Systeme, um atomare Modelle [44, 45] sowie relativistische [46] und QED Effekte [18] zu testen. Ein Vorteil gegenüber Mehr-Elektronen-Systemen besteht darin, dass es sich bei wasserstoffähnlichen Systemen lediglich um Zwei-Körper-Systeme handelt, in denen keine Elektron-Elektron-Wechselwirkung auftritt. Experimente von T. W. Hänsch *et al.* (Nobelpreis 2005), bei denen die Übergangsenergie zwischen dem  $1s$  und dem  $2s$ -Niveau in Wasserstoff mit einer relativen Ungenauigkeit von  $1.8 \cdot 10^{-14}$  [47, 48] vermessen wurde, machen die QED zu einer der best überprüften Theorie der modernen Physik. Daneben richtet die heutige Forschung in Wasserstoff und wasserstoffartigen Ionen ihr Augenmerk unter anderem auf die Bestimmung des Protonen-Formfaktors und der Polarisierbarkeit des Protons [49], die Etablierung alternativer (zu den bisher verwendeten  $K_\alpha$  Übergangslinien in  $3d$ -Metallen [50]) Röntgenstandardlinien [41, 42, 51], die Messung der Lamb-Verschiebung verschiedener Energieniveaus [43, 46, 52–59] und die Überprüfung der QED in schweren hochgeladenen Ionen [60–62].

Helium und heliumartige Ionen sind die einfachsten Systeme, in denen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und die korrespondierende Verschiebung der Energieniveaus sowie die Gültigkeit unterschiedlicher theoretischer Ansätze zur Beschreibung dieser Wechselwirkung [27–30] spektroskopisch untersucht werden können. Allerdings erreicht die experimentelle Genauigkeit bis heute in vielen Fällen nicht das ausreichende Niveau (von ca. 1 ppm), um die Gültigkeit der Theorien zu überprüfen oder zu entscheiden, welche Theorie, das heliumartige System am besten beschreibt. Zudem ergeben verschiedene unabhängige Messungen der  $w$  [63],  $1s2p \ ^1P_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$ , Übergangsenergie in heliumartigen Ionen in einem Bereich der Kernladungszahl von  $Z = 20 - 32$  erheblich größere Werte als von der Theorie vorhergesagt [49, 64–66].

Nach einem kurzen Abriss der Geschichte der Atomphysik geben die folgenden Kapitel eine Übersicht über die heutige theoretische Beschreibung von wasserstoff- und heliumartigen Ionen. Diese wird in Beziehung zu ausgewählten spektroskopischen Messungen von Übergangsenergien in wasserstoff- und heliumartigen Ionen gesetzt.

## 1.1 Nichtrelativistische Theorie wasserstoffartiger Systeme

Im Jahre 1859 formulierte G. R. Kirchhoff sein Strahlungsgesetz [67], welches besagt, dass die Wärmestrahlungsemission und das Absorptionsvermögen eines Körpers im thermischen Gleichgewicht - unabhängig von der Temperatur des Körpers und der untersuchten Strahlungswellenlänge - proportional zueinander sind. Die weitere Untersuchung der Wärmestrahlung schwarzer Körper mündete 1900 in dem von M. Planck formulierten Strahlungsgesetz [68, 69] für die spektrale Energiedichte  $\rho(\lambda)$  der Schwarzkörperstrahlung pro Volumeneinheit in Abhängigkeit von der Strahlungswellenlänge  $\lambda$  und der Temperatur  $T$  des Körpers

$$\rho(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} . \quad (1.1)$$

Bei der Herleitung dieser Formel ging Planck davon aus, dass die Energie des Systems nur kleinste diskrete Werte annehmen kann, d.h. von einer Quantisierung der Energie.

Die von G. R. Kirchhoff und R. Bunsen experimentell in der Spektralanalyse beobachteten Linienspektren (1859) [70–72] von Atomen sowie die von J. Balmer gefundene Gesetzmäßigkeit für die Frequenzen  $\nu$  der Linien des Emissionsspektrums des atomaren Wasserstoffs [73],

$$\nu = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) , \quad (1.2)$$

mit der ganzen Zahl  $n > 2$  und der Rydberg-Konstante  $R_H = 109678 \text{ cm}^{-1}$  konnten 1913 mit Hilfe des Planckschen Konzeptes der Energiequantisierung durch N. Bohrs Atommodell [44, 45] erklärt werden. Bohr postulierte, dass ein Elektron im Coulombfeld eines Atomkernes stabile Kreisbahnen ohne Strahlungsemission einnehmen kann. Die Radien dieser diskreten Kreisbahnen  $r$  leitete er durch die Annahme eines gequantelten Gesamtdrehimpulses  $L$  des Elektrons zu  $r = a_0 \cdot n^2 / Z$  mit Kernladungszahl  $Z$  und dem Bohrradius  $a_0 = 5.2917 \cdot 10^{-11} \text{ m}$  her.

Für Mehr-Elektronen-Systeme lieferten die beim Wasserstoffatom bewährten Modellvorstellungen allerdings eine Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment. Dies deutete auf eine andere, von solchen Widersprüchen freie Theorie hin, die in der Formulierung der Quantenmechanik [9, 9–17] durch L. de Broglie, W. Heisenberg, E. Schrödinger, M. Born, P. A. M. Dirac und andere im frühen 20. Jahrhundert gefunden wurde. Der zentrale Begriff dieser Theorie ist die Wellenfunktion  $\psi$ . Das Betragsquadrat der Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}, t) \cdot \psi^*(\mathbf{r}, t)$  ist dabei die Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen am Ort  $\mathbf{r}$  zur Zeit  $t$  zu finden ist durch die Integration

der Wahrscheinlichkeitsdichte über das betreffende Raumelement gegeben. Den klassischen Größen wie z.B. Ort und Impuls werden Operatoren zugeordnet. Meßgrößen der klassischen Physik werden durch den Erwartungswert des jeweiligen Operators repräsentiert. Ein Teilchen der Masse  $m$  in einem Potential  $V(\mathbf{r}, t)$  wird durch seine Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}, t)$  beschrieben, die der Bewegungsgleichung, der *Schrödinger-Gleichung* zu genügen hat:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) . \quad (1.3)$$

Dabei ist  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}, t)$  der der Energie zugeordnete Operator, der Hamilton-Operator. Ist das Potential zeitunabhängig, so lassen sich als Lösung der Schrödinger-Gleichung *stationäre Zustände*  $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{(iEt/\hbar)} \varphi(\mathbf{r})$  finden [74], die zu einer zeitunabhängigen Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\varphi(\mathbf{r})|^2$  führen. Die „Eigenfunktionen“ der Energie  $\varphi(\mathbf{r})$  müssen der Gleichung

$$\hat{H} \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

genügen. Für das Coulombfeld des Atomkernes mit Kernladungszahl  $Z$ , das auf ein Elektron im Abstand  $r$  wirkt, gilt  $V(\mathbf{r}) = -Ze^2/r$ . Für Wasserstoff und wasserstoffartige Ionen ist die Masse  $m$  durch die reduzierte Masse  $\mu$  des Systems zu ersetzen, da es sich um ein Zwei-Körper-System handelt und die Bewegung des Elektrons im Schwerpunktsystem betrachtet werden muss. Die Wellenfunktion des Elektrons  $\psi_{nlm}$  hängt von der Hauptquantenzahl  $n = 1, 2, 3 \dots$  der Drehimpulsquantenzahl  $l = 0, 1 \dots (n - 1)$  sowie der Projektion des Drehimpulses, der Magnetquantenzahl  $m = -l, \dots, l$  ab. Für Ein-Elektronen-Systeme erhält man durch Separation der Variablen der Form  $\varphi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$  in einen radialen und einen winkelabhängigen Teil für die Eigenwerte des Hamilton-Operators die Beziehung

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 \alpha^2 c^2}{2n^2} , \quad (1.5)$$

wobei  $\alpha = e^2/\hbar c$  die Feinstrukturkonstante und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit ist. Die von Balmer empirisch gefundene Formel für die Energie von Spektrallinien des Wasserstoffatoms [73] läßt sich damit *a priori* herleiten. Die Energieeigenwerte sind allein von der Hauptquantenzahl  $n$  abhängig, nicht aber von der Drehimpulsquantenzahl  $l$  oder der Magnetquantenzahl  $m$ , d.h. sie sind bzgl.  $l$   $n$ -fach und bzgl.  $m$   $2l + 1$ -fach *entartet*. A. Sommerfeld hatte jedoch schon 1916 gezeigt, dass die relativistische Massenveränderlichkeit und die Spin-Bahn-Kopplung bewegter Teilchen zu einer Aufspaltung und damit zu einer Feinstruktur [75] der Wasserstofflinien führen muss.

## 1.2 Relativistische Beschreibung wasserstoffartiger Systeme

Diese Feinstruktur lässt sich dadurch jedoch nicht erklären, da die Schrödinger-Gleichung nicht lorentzinvariant ist, d.h. relativistische Effekte wie die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Elektronenmasse und die Spin-Bahn-Kopplung, das Auftreten von magnetischen Feldern bei der Bewegung des Elektrons im Coulombfeld des Atomkerns sowie die „nicht lokale“ Wechselwirkung des Elektrons mit diesem Feld sind in der Gleichung nicht enthalten. P.A.M. Dirac erweiterte 1927 die

## 1.2. Relativistische Beschreibung wasserstoffartiger Systeme

Schrödingersche Wellenmechanik des Wasserstoffatoms [14, 16], sodass sie auch den Forderungen der speziellen Relativitätstheorie gerecht wird. Die allgemeine Wellenfunktion besteht aus  $n$  Komponenten  $\psi_i$  mit  $i = 1, 2, \dots, n$  und lässt sich als Matrix der Form

$$\psi_i = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

schreiben. Für ein freies Teilchen mit Ruhemasse  $m_0$  finden sich mit dem Ansatz  $\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta m_0 c^2$  über die Bedingung  $H^\dagger H\psi = |E|^2\psi$  mit  $|E|^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$  die Komponenten  $i$  von  $\boldsymbol{\alpha}$ , die Diracmatrizen  $\alpha_i$ , und  $\beta$

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

mit der  $2 \times 2$ -Einheitsmatrix  $I$  und den Pauli-Matrizen  $\boldsymbol{\sigma}$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

Die Einführung eines elektrischen Feldes dem Skalarpotential  $\phi(r)$  führt zu einem zusätzlichen Term im Hamilton-Operator von  $+q\phi(r)$ , wobei für ein Elektron im Zentralpotential eines Kerns mit Kernladungszahl  $Z$   $+q\phi(r) = -Ze^2/r$  gilt. Der Hamilton-Operator für ein solches System unter Berücksichtigung des Spins des Elektrons mit relativistischen Korrekturen der Ordnung  $(v^2/c^2)$  ergibt sich mit Hilfe der Störungstheorie zu [76]

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} + \frac{1}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \frac{\pi \hbar^2}{2m_0^2 c^2} Z e^2 \delta(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

mit dem Drehimpulsoperator  $\mathbf{L}$  und dem Spinoperator  $\mathbf{S} = \hbar/2\boldsymbol{\sigma}$ . Bei den ersten beiden Termen handelt es sich um den Hamilton-Operator der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung, der zweite Term stellt die Korrektur auf Grund der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Masse dar, der dritte Term beinhaltet die Spin-Bahn-Kopplung und der vierte Term berücksichtigt die „nicht lokale“ Wechselwirkung zwischen Elektron und Kernfeld (Darwin-Term). Die nichtrelativistische Näherung der Dirac-Gleichung führt zu Schrödinger-Gleichung mit Korrekturen, was die Konsistenz von Schrödinger- und Dirac-Gleichung bestätigt. Die Eigenwerte des Hamilton-Operators ergeben sich zu [77]

$$E_{n,j} = m_0 c^2 \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{Z\alpha}{n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} - 1 \right\} \quad (1.10)$$

mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $j = |l - s|, \dots, l + s$  und möglichen Werten für die Spinquantenzahl  $s = -1/2, +1/2$ . Entwickelt man Gl. 1.10 in Potenzen von  $\alpha$ , so erhält man in

Element	$Z$	Energie (eV)
H	1	$4.53 \cdot 10^{-5}$
S <sup>15+</sup>	16	2.97
Ar <sup>17+</sup>	18	4.75
Fe <sup>25+</sup>	26	20.69
U <sup>91+</sup>	92	3244.04

**Tabelle 1.1:** Energiedifferenz der zwei Feinstrukturkomponenten mit  $n = 2$ ,  $l = 1$ ,  $j_1 = 3/2$  und  $j_2 = 1/2$  in wasserstoffartigen Ionen.

erster Näherung wieder die  $1/n^2$  Abhängigkeit der Energieeigenwerte der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung. In höherer Ordnung hängen die Energieniveaus allerdings nicht mehr allein von der Hauptquantenzahl  $n$  ab, sondern auch von  $j$ , was die von Sommerfeld vorhergesagte Feinstrukturaufspaltung erklärt. Für Ein-Elektronen-Systeme mit Kernladungszahl  $Z$  und  $n \neq 1$  ist die Energiedifferenz der beiden extremen Komponenten eines Feinstrukturmultipletts gegeben durch [76]

$$\Delta E(j_1 = n - 1/2, j_2 = 1/2) = 27.2116 \frac{\alpha^2 Z^4 (n - 1)}{2n^4} \text{ eV} . \quad (1.11)$$

Tab. 1.1 zeigt die mit Hilfe Gl. 1.11 berechneten Energiedifferenzen der Niveaus mit den Quantenzahlen  $n = 2$ ,  $l = 1$ ,  $j_1 = 3/2$  und  $j_2 = 1/2$  für verschiedene Ein-Elektronen-Systeme mit Kernladungszahl  $Z$  (insbesondere auch für die wasserstoffartigen Ionen, die für die Experimente dieser Arbeit verwendet wurden). Die  $Z^4$ -Abhängigkeit der Energiedifferenz der Feinstruktur-niveaus führt im Falle hochgeladener wasserstoffartiger Ionen im Vergleich zum Wasserstoffatom zu einer erheblich größeren Feinstrukturaufspaltung, z.B. im Falle des wasserstoffartigen Argons bereits zu einer um Faktor  $\sim 100000$ -fach erhöhten Energiedifferenz. Diese läßt sich experimentell als Aufspaltung der Lyman-Linie in den Lyman- $\alpha_1$  Übergang,  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ , und den Lyman- $\alpha_2$  Übergang,  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ , beobachten (siehe auch Kap. 4.4.2).

Die Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms [78–80] wird durch die Dirac-Gleichung allerdings nicht beschrieben, da sie eine Folge des magnetischen Moments des Protons ist und dieses in der Betrachtung nicht berücksichtigt wurde. E. Fermi zeigte aber, dass bereits in der nichtrelativistischen Quantenmechanik eine magnetische Wechselwirkung zwischen Elektron und Atomkern einfach beschrieben werden kann und so bei Beachtung des magnetischen Moments des Atomkerns die Hyperfeinstruktur theoretisch hergeleitet werden kann [81].

Neben der Beschreibung der Feinstruktur, ist ein weiterer Erfolg der Dirac-Gleichung die Vorhersage des halbzahligen Spins des Elektrons [82] sowie die des ersten Antiteilchens, des später 1932 experimentell von C.D. Anderson in der kosmischen Strahlung nachgewiesenen Positrons [83]. Festzustellen bleibt noch, dass Energieeigenwerte der Zustände in der Dirac-Theorie lediglich von der Hauptquantenzahl  $n$  und der Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $j$  und nicht von der Bahndrehimpulsquantenzahl  $l$  oder der Spinquantenzahl  $s$  abhängen, sie sind also bzgl.  $l$  und  $s$  entartet.

## 1.3 Relativistische Feldtheorie: Quantenelektrodynamik

### 1.3.1 Lamb-Verschiebung

1937/8 führten W. V. Houston und R. C. Williams Experimente durch, die darauf schließen ließen, dass ein  $2s_{1/2}$ - und ein  $2p_{1/2}$ -Elektron im Wasserstoffatom nicht die gleiche Bindungsenergie aufweisen, d.h. dass die Niveaus bzgl.  $j$  nicht entartet sind, wie durch die Dirac-Theorie abgeleitet worden war [76]. Nach einigen Kontroversen lieferten W. E. Lamb und R. C. Retherford den Beweis für eine Energiedifferenz zwischen dem  $2s_{1/2}$ - und dem  $2p_{1/2}$ -Niveau (Lamb-Verschiebung) im Wasserstoffatom, indem sie Mikrowellentechniken ausnutzten, um den Übergang zwischen diesen beiden Niveaus anzuregen [18]. Heute bezeichnet man als Lamb-Verschiebung alle Korrekturen zur Dirac-Theorie, d.h. die durch die endliche Größe des Atomkerns (siehe Kap. 1.3.5), Rückstoß-Beiträge sowie die dominierenden quantenelektrodynamischen Schleifenkorrekturen auftretenden Modifikationen (Erklärung: siehe Kap. 1.3.2). Die Lamb-Verschiebung im Wasserstoffatom beträgt  $4.37 \cdot 10^{-6}$  eV und ist damit ca. 10-mal kleiner als die Feinstrukturaufspaltung des  $n = 2$  Niveaus.

### 1.3.2 Quantisierung von Feldern und Quantenelektrodynamik

Um die von Lamb und Retherford entdeckte Lamb-Verschiebung zu erklären und die Entartung der Niveaus bzgl.  $j$  in der Dirac-Theorie aufzuheben, entwickelten ab 1950 H. Bethe, S. Tomonaga, J.S. Schwinger, R.P. Feynman, F.J. Dyson maßgeblich [19–25] die Theorie der Quantenelektrodynamik (QED). Dabei gingen sie von der Quantisierung elektromagnetischer Felder aus. Dies ist notwendig, da sich die Wechselwirkung von zwei Teilchen, die sich nicht am selben Ort befinden, relativistisch nur durch den Austausch eines Wechselwirkungsteilchens beschreiben läßt. In einer solchen relativistischen Feldtheorie genügen skalare, Vektor- und Fermionfelder den jeweiligen Eulerschen Bewegungsgleichungen, die sich aus Lagrange-Funktionen ableiten lassen, welche invariant gegenüber Lorentz-Transformationen sind. Dabei ist die Bewegungsgleichung für skalare Felder durch die Klein-Gordon-Gleichung, für Vektor-Felder durch die Wellengleichungen der Maxwell-Theorie und für Fermionfelder durch die Dirac-Gleichung gegeben. Tab. 1.2 gibt eine Übersicht über die Felder und Feldgleichungen der Quantenfeldtheorie. Dort ist  $\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$  der D'Alembertoperator (Quabla), die Verallgemeinerung des Laplaceoperators im vierdimensionalen Minkowskiraum und  $\gamma^\mu$  ist  $\gamma^0 = \beta$ ,  $\gamma = \beta\alpha$  ( $\alpha, \beta$  siehe Kap. 1.2).  $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$  sind die Komponenten des Feldstärketensors. Die oben aufgeführten Bewegungsgleichungen beschreiben freie Felder, die nicht wechselwirken. Für Wechselwirkungen der Felder untereinander müssen den Gleichungen zusätzliche Terme hinzugefügt werden. Die Feldquantisierung im kanonischen Formalismus geschieht dadurch, dass die klassischen kanonischen Impulsvariablen durch *Feldoperatoren* ersetzt werden. Analog zum harmonischen Oszillator läßt sich der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  in der Besetzungszahldarstellung im Impulsraum mit Hilfe von Auf- und Absteigeoperatoren (*Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren*) ausdrücken [84] und in die Summe dreier Terme zerlegen:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_\gamma + \hat{V}(t) . \quad (1.12)$$

Feld	Feldgleichung	
Skalares Feld $\phi$ (Spin = 0)	$(\square + m^2)\phi = 0$	Klein-Gordon-Gleichung
Fermionfeld $\psi$ (Spin = 1/2)	$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0$	Dirac-Gleichung
Vektorfeld $A^\mu$ (Spin 1)	$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0$	Maxwell-Gleichung

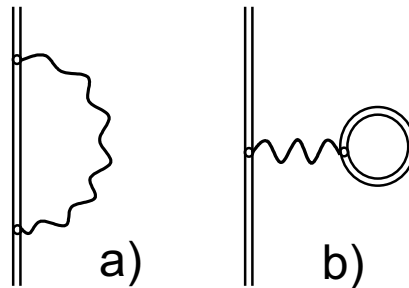
Tabelle 1.2: Felder und Feldgleichungen der Quantenfeldtheorie.

Hier ist  $\hat{H}_e$  der Hamilton-Operator für freie Elektronen und Positronen (Fermionen),  $\hat{H}_\gamma$  der für freie Photonen (Vektorbosonen) und  $\hat{V}(t)$  beschreibt die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Photonen.  $\hat{V}(t)$  selbst läßt sich in 8 Terme untergliedern, die von zeitabhängigen Faktoren  $\Gamma$ , den sogenannten *Vertices* abhängig sind. Die 8 Terme beschreiben folgende acht quantenelektrodynamische Wechselwirkungsprozesse von Elektron, Positron und Photon: Emission eines Photons von einem Elektron (das Elektron wird dabei von einem Impuls-Spin-Zustand  $|\mathbf{p}, s\rangle$  in einen Zustand  $|\mathbf{p}', s'\rangle$  gestreut), Absorption eines Photons an einem Elektron, Emission eines Photons von einem Positron, Absorption eines Photons an einem Positron, Vernichtung eines Elektron-Positron-Paars und Emission eines Photons, Paarvernichtung und Absorption eines Photons, Absorption eines Photons und Paarerzeugung sowie Emission eines Photons und Paarerzeugung. Da der Hamilton-Operator neben den Hamilton-Operatoren für freie Teilchen, deren Energieeigenzustände bekannt sind, diese Wechselwirkungsterme enthält, ist eine exakte Lösung für die Gesamtenergieeigenzustände bis heute unmöglich. Allerdings ist die Kopplungskonstante der QED, d.h. die Elementarladung  $e^2 \propto \alpha \approx 1/137$ , sehr klein. Daher kann die zeitabhängige Störungstheorie durch Entwicklung der Terme nach  $\alpha$  zur Auswertung verwendet werden. Die Ordnung  $n$  der Entwicklung nach  $\alpha$  ist dabei äquivalent zur Anzahl der am QED Prozess beteiligten Photonen. Zusätzlich können die in der Entwicklung nach  $\alpha$  auftretenden Terme mit Hilfe der Störungstheorie jeder einzeln nach der Kopplungskonstante ( $Z\alpha$ ) für das externe Feld entwickelt werden [77], solange  $(Z\alpha) \ll 1$  gilt. Für z.B. Uran ist diese Kopplungskonstante allerdings schon  $(Z\alpha) \approx 0.67$ , so dass eine Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  sehr langsam konvergiert [85]. Daher muss für starke Kernfelder wie z.B. für wasserstoffartige schwere Ionen ein anderer Ansatz gefunden werden (siehe auch Kap. 1.3.4).

### 1.3.3 Störungstheorie und Feynman-Diagramme

Behandelt man die oben diskutierten quantenmechanischen Streuprozesse der Elektrodynamik von Teilchen mit Impuls-Spin-Zuständen  $|\mathbf{p}, s\rangle$  in Zustände  $|\mathbf{p}', s'\rangle$  im Rahmen der Störungstheorie, so ergeben sich in  $n$ -ter Ordnung der Entwicklung nach dem Parameter  $\alpha$  bereits  $2^n$  Wechselwirkungsterme im Hamilton-Operator. Daher wurden von R.P. Feynman-Diagramme eingeführt, die sogenannten Feynman-Diagramme, die in sehr anschaulicher Weise jeweils einen dieser Streuprozesse zwischen Teilchen und damit die störungstheoretischen Beiträge zur Amplitude eines Quantenprozesses mit Anfangszustand  $|i\rangle$  und Endzustand  $|f\rangle$  beschreiben. In diesen Diagrammen ist die Zeitachse üblicherweise nach oben gerichtet (die Raumachse nach rechts). Durchgezogene Linien entsprechen den Wellenfunktionen, d.h. der Propagation von Teilchen und An-



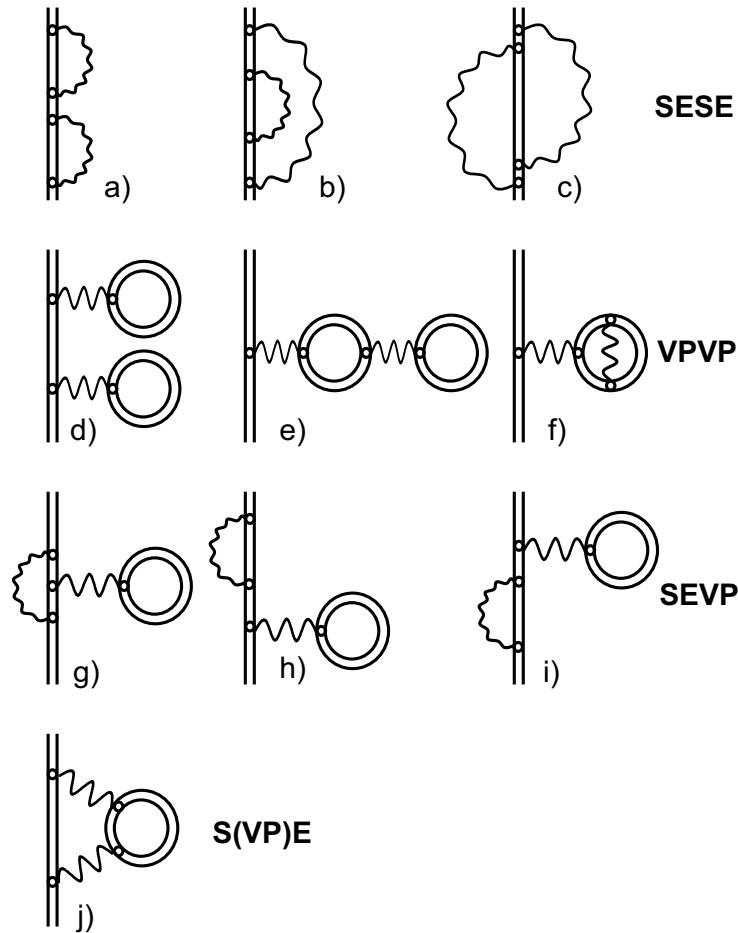


**Abbildung 1.1:** Feynman-Diagramme der QED Korrekturen erster Ordnung Störungstheorie in der Entwicklung nach  $\alpha$  [86]. a) stellt die Selbstenergiekorrektur dar, b) die Vakuumpolarisationskorrektur. Die vertikale Achse korrespondiert mit der Zeit (die horizontale Achse mit dem Raum). Gerade Doppellinien beschreiben die Elektronen in Wechselwirkung mit dem Atomkern, Wellenlinien stellen Photonen dar.

teilchen (also Elektronen und Positronen). Doppellinien kennzeichnen Fermionen, die sich im Feld des Kernes bewegen. Photonen werden durch Wellenlinien dargestellt. Die Wechselwirkung zwischen Teilchen und Quanten wird durch Kreuzungspunkte, die Vertizes, ausgedrückt, an denen die Linien verknüpft werden. An jedem Vertex gilt Impuls- und Energieerhaltung. Teilchen oder Quanten, die weder im Anfangszustand noch im Endzustand auftauchen werden als *virtuelle Teilchen* bezeichnet. Feynman-Diagramme in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie in der Entwicklung nach  $\alpha$  sind in Abb.1.1 und 1.2 dargestellt. In erster Ordnung tauchen zwei Diagramme auf, die man als Selbstenergiekorrektur (SE) und Vakuumpolarisationskorrektur (VP) bezeichnet. Die physikalische Ursache dieser Terme bzw. ihre Größe werden im Folgenden diskutiert. In zweiter Ordnung sind bereits 10 Diagramme vorhanden, die in die Gruppen der Selbstenergie-Selbstenergie (SESE), Vakuumpolarisation-Vakuumpolarisation (VPVP), Selbstenergie-Vakuumpolarisation (SEVP) und Selbst(Vakuumpolarisation)energie (S(VP)E) unterteilt werden.

### Selbstenergiekorrektur

Für jedes Strahlungsfeld in seinem niedrigsten Energiezustand ist das elektromagnetische Feld ungleich null; es existieren Nullpunktsoszillationen. Ein Elektron im Kernfeld kann daher innerhalb kurzer Zeit unter Beachtung der Heisenbergschen Unschärferelation [11, 13]  $\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar/2$  Photonen absorbieren und reemittieren. Dadurch wird eine schnell oszillierende Bewegung des Elektrons verursacht, was zu einem "Versmieren" der Elektronenladung führt. Damit unterscheidet sich das elektrische Potential, dem dieses Elektron eines Atomkernes ausgesetzt ist, von dem Potential, das auf punktförmiges Elektron wirken würde durch den Korrekturterm  $\delta V_{SE}$ . Dies führt, verursacht durch das Matrixelement des von  $\delta V_{SE}$  hervorgerufenen Störtermes, zu einer Verschiebung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators. Die Entartung der Energieniveaus bzgl.  $j$  in der Dirac-Theorie wird somit aufgehoben. Die Energieverschiebung  $\Delta E_{SE}$  der Energieeigenwerte ist positiv, da die Elektronenladung sich im Mittel weiter um das Coulombzentrum ausbreitet als im Falle eines punktförmigen Elektrons und das Elektron dadurch schwächer gebunden ist als von der Dirac-Theorie vorhergesagt. Da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi(0)|^2$  für  $s$ -Elektronen



**Abbildung 1.2:** Feynman-Diagramme der QED Korrekturen in zweiter Ordnung Störungstheorie in der Entwicklung nach  $\alpha$  [86]. Es existieren jeweils drei Diagramme für die Gruppe der Selbstenergie-Selbstenergie (SESE), Vakuumpolarisation-Vakuumpolarisation (VPVP) und Selbstenergie-Vakuumpolarisation (SEVP) sowie ein Selbst(Vakuumpolarisation)energie (S(VP)E) Diagramm.

am Ort  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$  größer ist als für Elektronen anderer Zustände, sind die Bindungsenergieverschiebungen, die sich für diese Elektronen auf Grund des Selbstenergiekorrekturterms der QED ergeben viel größer als für die Elektronen in den übrigen Niveaus. Für ein  $s$ -Niveau im Wasserstoffatom läßt sich die Verschiebung durch störungstheoretische Expansion nach  $(Z\alpha)$  zu [77]

$$\Delta E_{SE} \approx \frac{4m_0(Z\alpha)^4}{n^3} \frac{\alpha}{3\pi} \ln[(Z\alpha)^{-2}] \delta_{l0} \quad (1.13)$$

abschätzen. Für das  $2s$ -Niveau des Wasserstoffatoms ergibt diese Näherung eine Verschiebung von ca.  $1330 \text{ MHz} \approx 5.5 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$ , was für diese Abschätzung eine gute Übereinstimmung mit der experimentellen Lamb-Verschiebung von  $1040 \text{ MHz} \approx 4 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$  darstellt.

### Vakuumpolarisation

Die oben beschriebenen Nullpunktsoszillationen können wie in Kap. 1.3.2 beschrieben auch für die Entstehung von Elektron-Positron-Paaren innerhalb der Heisenbergschen Unschärferelation verantwortlich sein. Entstehen diese virtuellen Teilchen in der Nähe einer negativen Ladung, z.B. des Elektrons, so wird das (virtuelle) Positron angezogen und das entstandene Elektron abgestoßen. Das bedeutet, dass das Positron dann eine höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe des ursprünglichen Elektrons hat, und das effektive Coulombpotential für das Elektron um  $\delta V_{VP}$  erhöht. Die Energieeigenwerte des Hamilton-Operators werden dadurch negativer, das Elektron ist stärker gebunden, d.h. die Vakuumpolarisationskorrektur wirkt der Selbstenergiekorrektur entgegen. Für die  $s$ -Niveaus des Wasserstoffatoms kann man durch Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  die Energieverschiebung nähern [77]:

$$\Delta E_{VP} \approx -\frac{4m_0(Z\alpha)^4}{n^3} \frac{\alpha}{15\pi} \delta_{l0}. \quad (1.14)$$

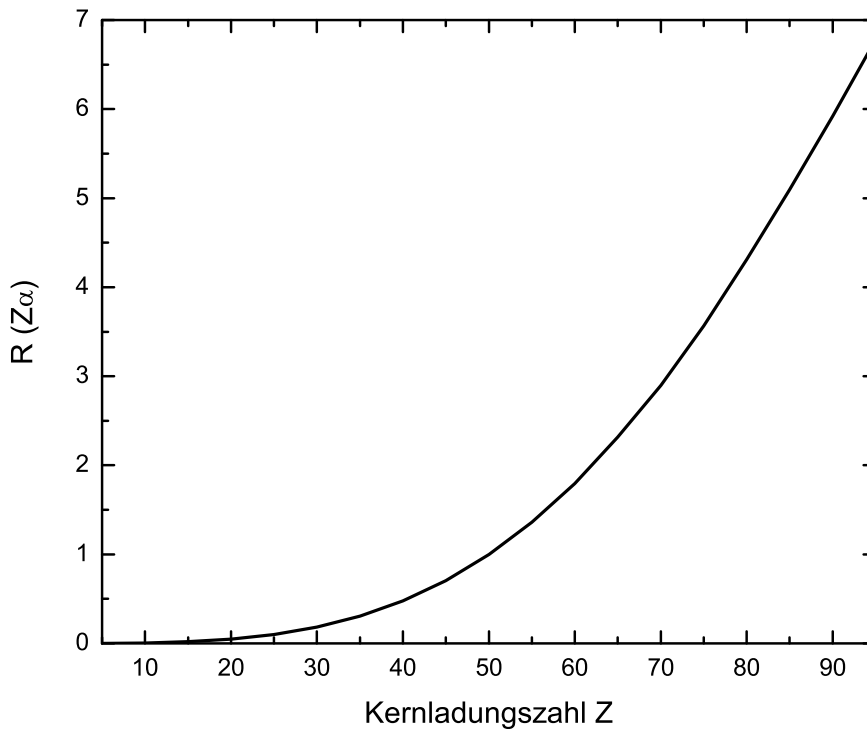
Für das  $2s$ -Niveau ergibt sich eine Verschiebung von  $-30 \text{ MHz} \approx -1.2 \cdot 10^{-7} \text{ eV}$  und diese ist vom Betrag ca. 40-mal kleiner als die, die durch die Selbstenergiekorrektur hervorgerufen wird. In erster Ordnung Störungstheorie bei Entwicklung nach  $\alpha$  ist daher die Selbstenergiekorrektur das Diagramm, das am meisten zur Lamb-Verschiebung beiträgt.

### 1.3.4 Schwere wasserstoffähnliche Systeme: All-order Rechnungen

Wie in Kap. 1.3.2 angemerkt, konvergiert die Entwicklung (der nach  $\alpha$  entwickelten Terme) nach der Kopplungskonstante  $(Z\alpha)$  für das Kernfeld für starke Felder, wie sie in schwere hochgeladenen Ionen auftreten, sehr langsam oder nicht mehr. Für die quantenelektrodynamische Berechnung der gebundenen Energieeigenzustände in starken Kernfeldern muss das Feld daher exakt in die Berechnungen aufgenommen werden. Die Notwendigkeit dazu wird von Fig. 1.3 für das  $1s_{1/2}$ -Niveau in wasserstoffähnlichen Systemen veranschaulicht. Sie stellt das Verhältnis

$$R = \frac{\Delta E(Z\alpha) - \Delta \tilde{E}(Z\alpha)}{\Delta E(Z\alpha)} \quad (1.15)$$

dar, wobei  $\Delta E(Z\alpha)$  die Selbstenergiekorrektur für einen punktförmigen Atomkern [87] aus der Entwicklung nach allen Termen in  $(Z\alpha)$  bezeichnet.  $\Delta \tilde{E}(Z\alpha)$  [85] dagegen enthält nur Entwicklungskomponenten bis zur Ordnung  $(Z\alpha)^6$ . Dargestellt ist somit der Anteil der Terme mit  $n$ -ter ( $n > 7$ ) Ordnung an der gesamten Selbstenergiekorrektur. Für wasserstoffähnliche Ionen mit geringer Kernladung  $Z$  funktioniert die störungstheoretische Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  offensichtlich sehr gut; den Hauptanteil an der gesamten Selbstenergieverschiebung haben Entwicklungsterme mit  $n < 7$ , d.h. die Summe der Entwicklungsterme konvergiert. Das Verhältnis  $R$  verschwindet für  $(Z\alpha) \rightarrow 0$ . Für wasserstoffähnliche Systeme mit  $Z > 20$  dagegen, dominieren die Terme höherer Ordnung der Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  den Gesamtbetrag der Selbstenergiekorrektur, d.h. die Konvergenz der Entwicklung ist nicht mehr gegeben. Die Standardexpansion in  $(Z\alpha)$  zur Berechnung

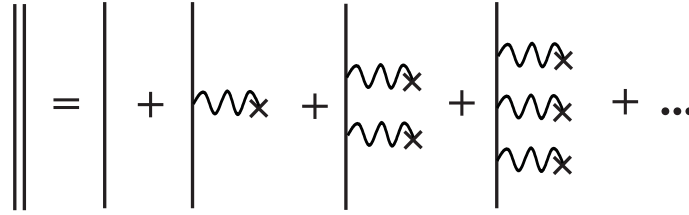


**Abbildung 1.3:** Anteil der Beiträge höherer Ordnung ( $n > 7$ ) der störungstheoretischen Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  an dem Gesamtbetrag der Selbstenergieverschiebung für das  $1s_{1/2}$ -Niveau in wasserstoffähnlichen Systemen als Funktion der Kernladungszahl  $Z$ .

der Selbstenergiekorrektur versagt.

In sogenannten *All-Order-Methoden* wird ein externes Feld, z.B. ein Kernfeld, von Anfang an in der Wellenfunktion berücksichtigt, d.h ebene Wellen, die das Kernfeld vernachlässigen, und freie Propagatoren werden vermieden (Furry-Bild). Anschaulich läßt sich ein solcher Gesamt-Dirac-Propagator für ein gebundenes Elektron im Kernfeld in einem Feynman-Diagramm wie in Fig. 1.4 darstellen. Er setzt sich aus der Summe des Dirac-Propagators für ein freies, ungestörtes Elektron, des Dirac-Propagators des freien Elektrons unter Ein-Photonen-Wechselwirkung mit dem Kern, unter Zwei-Photonen-Wechselwirkung mit dem Kern usw. zusammen, d.h. er läßt sich in eine Entwicklung in  $n$  Ordnungen nach  $(Z\alpha)$ , wobei das jeweilige  $n$  identisch mit der Anzahl der Photonen im Graphen ist, die mit dem Kern in Wechselwirkung treten, zerlegen.

Die *Selbstenergiekorrektur* läßt sich mit Hilfe der All-Order-Methoden für wasserstoffähnliche



**Abbildung 1.4:** Gesamt-Dirac-Propagator für ein gebundenes Elektron im Kernfeld als Summe einer Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  des Diracpropagators des freien Elektrons (Furry Bild). Die Ordnung  $n$  der Entwicklung ist dabei identisch mit der Anzahl der mit dem Kern wechselwirkenden Photonen.

Systeme auch mit  $Z > 20$  zuverlässig berechnen [85]:

$$E_{SE}^{nlj} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right) \left[\frac{Z\alpha^4}{n^3}\right] F^{nlj}(Z\alpha, R)m_0c^2. \quad (1.16)$$

Die Funktion  $F^{nlj}$  ist dabei sowohl von  $Z\alpha$  als auch vom effektiven Kernradius  $R = \langle r^2 \rangle^{1/2}$  abhängig. Die Werte der  $F^{nlj}$  sind in der Literatur tabelliert. Ist  $Z < 54$ , so liegt der Einfluss von  $R$  auf  $E_{SE}^{nlj}$  unterhalb der numerischen Präzision, mit welcher die Funktionen  $F^{nlj}$  berechnet werden können. Für schwere Systeme allerdings kann der explizite Einfluss des endlichen Kernradius auf diese Größe (andere Kerneffekte werden in Kap. 1.3.5 behandelt) nicht länger vernachlässigt werden, z.B. beträgt die Korrektur für das  $1s$ -Niveau auf Grund von  $R$  in  $U^{91+}$  1 eV [88], d.h. sie macht 0.22% der gesamten Lamb-Verschiebung aus.

In Furry-Bild (s.o.) läßt sich die *Vakuumpolarisationskorrektur*, die sich in erster Ordnung der Entwicklung nach  $\alpha$  ergibt, was der Wechselwirkung eines Photons mit dem Elektron entspricht, als Summe von Feynmann-Diagrammen in der Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  darstellen, wobei die Ordnung  $n$  der Entwicklung der Wechselwirkung von  $n$  Photonen mit dem Kern entspricht (siehe Fig. 1.5). Nach dem Furry-Theorem treten dabei nur Beiträge mit ungerader Ordnung  $n$  in der Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  auf, d.h. Feynman-Diagramme mit geschlossenen inneren Linien, die sogenannten Schleifendiagramme (die z.B. die Wechselwirkung eines Elektrons mit virtuellen Photonen aus dem Vakuum oder die Wechselwirkung eines Photons mit virtuell erzeugten Teilchen-Antiteilchen Paaren aus dem Vakuum beschreiben). Aber diejenigen mit einer geraden Anzahl von Photonenlinien tragen zur Korrektur nicht bei [89]. Die erste Ordnung der Entwicklung bezeichnet man dabei als *Uehling-Korrektur* [90, 91], die oft auch als Photonen-Selbstenergie bezeichnet wird. Ein Photon, das als Übermittler der Wechselwirkung zwischen Kern und gebundenem Elektron fungiert, generiert ein Elektron-Positron-Paar, welches frei propagiert, d.h. unbeeinflusst vom Coulombfeld. Die Erzeugung dieses  $e^+e^-$  Paares führt zu einer Modifikation des Coulombfeldes, dem sogenannten *Uehling-Potential*, und verschiebt damit die Energieeigenwerte. Für Wasserstoff trägt die Uehling-Korrektur in allen Termen der Entwicklung nach  $\alpha$  für das  $1s$ -Niveau mit  $-8,91 \cdot 10^{-7}$  eV bei [26], was  $1/40$  der gesamten Lamb-Verschiebung entspricht, während sie beim wasserstoffartigen Uran mit  $Z = 92$  ca.  $-100$  eV ausmacht, d.h. ca.  $1/4$  des Betrages der gesamten Lamb-Verschiebung von ca. 460 eV. Der starke Anstieg des Betrages der Energieverschiebung mit der Kernladungszahl  $Z$  rührt von der höheren Aufenthaltswahrscheinlichkeit der

$$\text{VP} = \underset{\alpha(Z\alpha)}{\text{Uehling}} + \underset{\sum_n \alpha(Z\alpha)^n \quad n=3,5,\dots}{\text{Wichman-Kroll}} + \dots$$

**Abbildung 1.5:** Feynman-Diagramm der Vakuumpolarisationskorrektur als Summe von Diagrammen in der Entwicklung nach  $(Z\alpha)$ . Die Ordnung  $n$  dieser Entwicklung entspricht der Anzahl der Photonen, die mit dem Kern wechselwirken.

Elektronen in schweren wasserstoffartigen Systemen in Kernnähe her, wo das Uehling-Potential größer ist. Für  $\text{Ar}^{17+}$  beträgt die Energieverschiebung der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie bereits  $\sim 360$  meV [26] und ist daher bei Hochpräzisionswellenlängenmessungen dieser Übergangsenergie nicht mehr zu vernachlässigen, bzw. die Messungen sind auf diesen Korrekturterm sensitiv. Die höheren Ordnungen der Entwicklung nach  $(Z\alpha)$  nennt man *Wichmann-Kroll-Korrekturen* (WKK) [92]. Der  $(Z\alpha)^3$  Term ist hier besonders interessant, da das von ihm hervorgerufene Potential bei großen Kernabständen  $r$  einem polynomiellen Abfall beschreibt, während das Uehling Potential mit  $r$  exponentiell abnimmt [85]. Für gebundene Elektronen in höheren Niveaus dominiert die WKK daher die Uehling Korrektur. Für den Lyman- $\alpha_1$  Übergang in wasserstoffartigem Argon beträgt die WKK 0.28 meV, was ca. 0.3 % der kompletten Lamb-Verschiebung entspricht. Bei einer angestrebten relativen Genauigkeit von  $\Delta\lambda/\lambda \sim 1$  ppm für die Messung der Übergangswellenlängen in dieser Arbeit sind die experimentell erhaltenen Werte daher nicht mehr sensitiv auf die WKK. Für  $\text{U}^{91+}$  beträgt die Korrektur schon 6 eV, d.h. 0.13% der gesamten Lamb-Verschiebung.

### 1.3.5 Kerneffekte

Zur Lamb-Verschiebung zählen alle Korrekturen zur Dirac-Theorie (siehe Kapitel 1.3.1), d.h. auch die durch die *endliche Größe des Atomkernes* verursachte Verschiebung der Energieeigenwerte. Diese kommt durch die Tatsache zustande, dass ein Zentralpotential einer Diracschen Punktladung sich vom dem Potential einer ausgedehnten Ladungsverteilung unterscheidet. Die Energieverschiebung ist für schwere Ionen viel größer als für Wasserstoff, wo sie z.B. für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie mit  $4.4 \cdot 10^{-6}$  meV nur einen Anteil von 0.13 % an der gesamten Lamb-Verschiebung von 0.035 meV hat. Daher kann diese Verschiebung auch, wenn die Präzision, die in Experimenten mit schweren Ionen erreicht wird, geringer ist, nicht vernachlässigt werden. Um die Größe der Energieverschiebung zu berechnen, nimmt man als Modell für die Kernstruktur eine homogen geladene Kugel mit effektivem RMS-Radius  $(\langle r^2 \rangle^{1/2})$  an [93].  $(\langle r^2 \rangle^{1/2})$  läßt sich durch Röntgenexperimente an myonischen Atomen und Elektronenstreuexperimente [42] bestimmen. So läßt sich eine modifizierte Dirac-Gleichung aufstellen, die analytisch mit der gewünschten Präzision gelöst werden kann [93]. Für den Lyman- $\alpha_1$  Übergang in wasserstoffartigem Argon ( $Z = 18$ )

### 1.3. Relativistische Feldtheorie: Quantenelektrodynamik

Ion	S <sup>15+</sup>	Ar <sup>17+</sup>	Fe <sup>25+</sup>
Selbstenergiekorrektur	0.81	1.21	4.26
Uehling Korrektur	-0.05	-0.09	-0.37
Wichmann-Kroll-Korrektur	$1.33 \cdot 10^{-4}$	$2.83 \cdot 10^{-4}$	$2.31 \cdot 10^{-3}$
Endliche Größe des Kernes	$5.39 \cdot 10^{-3}$	$9.10 \cdot 10^{-3}$	$5.28 \cdot 10^{-2}$
gesamte Lamb-Verschiebung	0.76	1.14	3.95

**Tabelle 1.3:** Beiträge zur Lamb-Verschiebung für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie in wasserstoffartigen S<sup>15+</sup>, Ar<sup>17+</sup> und Fe<sup>25+</sup> Ionen. Alle Angaben in eV.

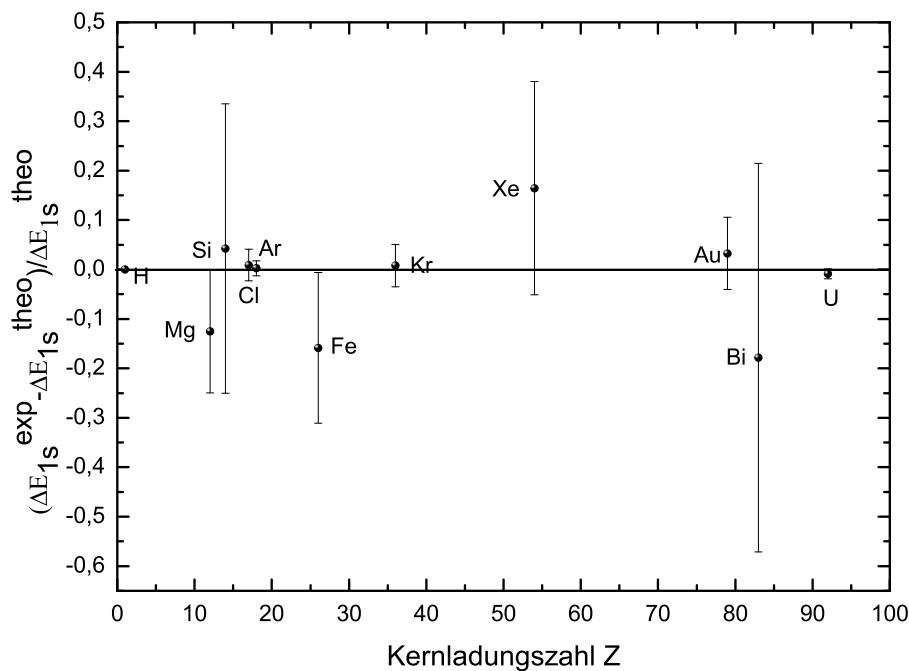
ergibt sich eine Verschiebung von  $9 \text{ meV} \approx 3 \text{ ppm}$  (das entspricht 0.7% der kompletten Lamb-Verschiebung), auf die eine Messung der Übergangswellenlänge bei einer angestrebten Präzision von 1 ppm sensitiv ist. Die Kerngrößenkorrektur skaliert mit hohen Potenzen in  $Z$ , etwa  $Z^{5 \dots 6}$ . Für U<sup>91+</sup> ( $Z = 92$ ) ist die Verschiebung bereits 194 eV, was 43% der kompletten Lamb-Verschiebung ausmacht und daher bereits bei einer Messung mit einer geringeren experimentellen relativen Genauigkeit aufgelöst werden kann.

Neben der durch die endliche Größe des Atomkernes verursachten Verschiebung der Energieniveaus treten noch andere durch den Kern verursachte Energieverschiebungen auf. Der *Rückstoßeffekt*, der durch die endliche Masse des Atomkernes und seine Bewegung verursacht wird und die *Polarisierbarkeit des Kernes*, die von der internen Kernstruktur abhängt, sind solche Kerneffekte, die in einer theoretischen, hochpräzisen Berechnung der Energieeigenwerte berücksichtigt werden müssen. Der Rückstoßeffekt wird in die nichtrelativistische Theorie durch die effektive Masse einbezogen. Die Verschiebung in wasserstoffartigen Systemen wird als normale Massenverschiebung (NMS) [94] bezeichnet. Eine exakte, relativistische Berücksichtigung des Rückstoßeffekts bieten die *ab initio* QED Berechnungen für wasserstoffartige Systeme [95], die im Falle von Ar<sup>17+</sup> eine Energieverschiebung von 0.3 meV für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie ergeben. Damit sind die in dieser Arbeit vorgestellten Messungen nicht auf den Rückstoß Effekt sensitiv. Die Polarisierbarkeit des Kernes trägt bei U<sup>91+</sup> mit 200 meV zur kompletten Lamb-Verschiebung für den  $1s$ -Zustand bei [96], ist aber bei Kernen mit geringerer Kernladungszahl  $Z$  geringer, da diese aufgrund ihrer geringeren Größe „schwer verformbar“ sind. Für eine detaillierte Betrachtung siehe auch [51, 97].

Abschließend sind für die in dieser Arbeit relevanten wasserstoffartigen Ionen S<sup>15+</sup> und Ar<sup>17+</sup> sowie zum Vergleich für Fe<sup>25+</sup>-Ionen die Beiträge zur Lamb-Verschiebung für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie in Tab. 1.3 aufgelistet. Die Hyperfeinstruktur spielt für die wasserstoffartigen Ionen S<sup>15+</sup> und Ar<sup>17+</sup>, die in den Messungen dieser Arbeit durch Stoßionistaion von <sup>32</sup>S- und <sup>40</sup>Ar-Atome erzeugt wurden, keine Rolle, da diese Atome einen Kernspin von  $I = 0$  aufweisen.

### 1.3.6 Experimentelle Messungen der Lamb-Verschiebung

Um theoretisch berechnete Lamb-Verschiebungen in wasserstoffartigen Ionen zu überprüfen, wurden bisher eine Vielzahl von Experimenten an solchen Ionen mit unterschiedlichen Kernladungszahlen  $Z$  durchgeführt. Die beste Präzision wurde dabei im Wasserstoffatom selbst mit einer Genauigkeit von  $1.8 \cdot 10^{-14}$  [47,48] mit Hilfe von Laserspektroskopie erreicht. Leider kann die Laserspektroskopie bis heute nur im nahen Ultraviolett, im Infraroten sowie im Sichtbaren angewendet werden. Durch die Entwicklung, die Konstruktion und die Inbetriebnahme Freier-Elektronen-Laser im Röntgenbereich (X-FEL) an vielen Standorten auf der ganzen Welt [33–35] werden allerdings in der nächsten Zeit zum ersten Mal resonante Laseranregungsexperimente [36] bis zu einer Photonenenergie von  $\sim 2.5$  keV ermöglicht. Bis zum heutigen Zeitpunkt wurden daher in Experimenten zur Röntgenwellenlängenmessung an Übergängen mit Photonenenergien von 1 – 20 keV in wasserstoffartigen Ionen Kristallspektrometer (siehe Kap. 2.2.2) eingesetzt, wobei unterschiedliche Techniken zur Erzeugung der Ionen verwendet wurden. Experimente an Übergängen mit höheren Photonenenergien wurden zumeist mit Hilfe von Germanium Detektoren durchgeführt. Abb. 1.6 zeigt die relative Abweichung der experimentell gemessenen  $\Delta E_{1s}^{exp}$  und der theoretisch berech-



**Abbildung 1.6:** Vergleich zwischen theoretisch berechneter [26] und experimentell gemessener Grundzustands-Lamb-Verschiebung für wasserstoffartige Ionen. H: ( $Z=1$ ) [46], Mg: ( $Z=12$ ) [57], Si: ( $Z=14$ ) [58], Cl: ( $Z=17$ ) [43], Ar: ( $Z=18$ ) [53], Fe: ( $Z=26$ ) [98], Kr: ( $Z=36$ ) [54], Xe: ( $Z=54$ ) [99], Au: ( $Z=79$ ) [56], Bi: ( $Z=83$ ) [55], U: ( $Z=92$ ) [61]. Die einzigen Absolutwellenlängenmessungen ohne Verwendung von Röntgenreferenzwellenlängen sind hier die Messung an Magnesium [57], Silizium [58] und Chlor [43].



neten  $\Delta E_{1s}^{theo}$  Grundzustands-Lamb-Verschiebung [26] in wasserstoffartigen Ionen als Funktion der Kernladungszahl  $Z$ . Innerhalb des  $1\sigma$ -Bereiches stimmen alle experimentellen Resultate mit den theoretischen Berechnungen überein; besonders genau treffen die experimentellen die theoretischen Werte für Wasserstoff und Uran. Für Wasserstoff ist dies zu erwarten, da für diesen störungstheoretische Berechnungen besonders präzise sind. Unglücklicherweise gestalten sich besonders im mittleren  $Z$ -Bereich die theoretischen Berechnungen schwieriger, da dort  $(Z\alpha) \ll 1$  nicht mehr „voll gültig“ ist. Auch die erreichte experimentelle relative Genauigkeit ist geringer als für Wasserstoff und  $U^{91+}$ , sogar für die mit einer älteren Version des in dieser Arbeit verwendeten Röntgenspektrometers erzielten Resultate für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie in  $Cl^{16+}$  [43]. Um die Lyman- $\alpha_1$  Übergangswellenlängen als Referenzstandards für Wellenlängenmessungen im Röntgenbereich (anstatt der bisher eingesetzten  $K_\alpha$  Übergangswellenlängen [50]) verwenden zu können [41, 42, 51], müssen die theoretischen Berechnungen mit Hilfe von Absolutwellenlängenmessungen, die nicht von Röntgenreferenzwellenlängen abhängig sind, auf einem höheren Niveau relativer Genauigkeit getestet werden. Die einzigen Absolutwellenlängenmessungen in Fig. 1.6 sind die Messungen an Magnesium, Silizium und Chlor, die allerdings noch nicht die erforderliche Präzision von  $\sim 1$  ppm aufweisen.

## 1.4 Nichtrelativistische Theorie heliumartiger Systeme

Die in Kap. 1.2 vorgestellte Herleitung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators für das Wasserstoffatom gestaltet sich im Vergleich zur Behandlung des Heliumatoms deshalb als verhältnismäßig einfach, weil das Wasserstoffatom nur ein einziges Elektron besitzt. Dies hat weitreichende Konsequenzen. Nach dem *Symmetrisierungspostulat* können bei einem System aus mehreren *identischen* Teilchen nur bestimmte Vektoren des Zustandsraumes seine physikalischen Zustände beschreiben. Die zugehörigen physikalischen Vektoren sind entweder total symmetrisch oder total antisymmetrisch in Bezug auf die Permutation dieser Teilchen. Die Teilchen, deren Zustände durch die ersteren Vektoren beschrieben werden, nennt man *Bosonen*, die, deren Zustände durch die letzteren Vektoren charakterisiert sind, *Fermionen*. Man kann zeigen, dass es keinen antisymmetrischen Vektor, der den Zustand von zwei Fermionen, die sich im selben Einzelzustand befinden, gibt. Zwei identische Teilchen können daher nicht im selben Einzelzustand sein (*Paulisches Ausschließungsprinzip*) [100]. Befindet sich Teilchen 1 in Zustand  $|\phi\rangle$  und Teilchen 2 im Zustand  $|\chi\rangle$ , so läßt sich der normierte physikalische Vektor schreiben als

$$|\varphi; \chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 : \varphi; 2 : \chi\rangle - |1 : \chi; 2 : \varphi\rangle). \quad (1.17)$$

Verallgemeinert lässt sich der physikalische Vektor für  $N$  Fermionen stets in Form einer  $N \times N$ -Slater-Determinante ausdrücken. Neben dem Pauli-Prinzip muss bei heliumartigen Systemen beachtet werden, dass ein Drei-Körper-Problem vorliegt. Die Berechnung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators kann nicht mehr wie im Wasserstoffatom auf die Berechnung der Energieeigenwerte für ein Relativteilchen im Schwerpunktsystem unter Einfluß eines Zentralpotentials zurückgeführt werden. Im Schwerpunktsystem hat man es mit mehreren, voneinander *abhängigen*

Teilchen zu tun. Geht man dennoch von unabhängigen Teilchen aus, d.h. von einem Hamilton-Operator als Summe der Hamilton-Operatoren der einzelnen Elektronen der Form

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2\mu} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i}, \quad (1.18)$$

wobei die Summation jeweils über alle  $N$  Elektronen erfolgt, so erhält man für die Grundzustands-Ionisationsenergie des Heliumatoms einen Wert von ca.  $-108.8$  eV. Dies steht im Widerspruch zum experimentellen Wert von ca.  $-79.04$  eV [101–103]. Das Bild unabhängiger Teilchen ist daher nicht zulässig.

### 1.4.1 Zentralfeldnäherung

Um die Berechnung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators des Systems abhängiger Teilchen zu vereinfachen, wurde die *Zentralfeldnäherung* entwickelt. Da die Masse des Kerns in heliumartigen Systemen mit zwei Elektronen ( $N = 2$ ) und für schwere hochgeladene Ionen mit  $N$  Elektronen im Allgemeinen viele tausendmal größer ist als die der Elektronen, fällt der Massenmittelpunkt praktisch mit dem Kern zusammen. Der Hamilton-Operator für die Bewegung der  $N$  Elektronen lautet unter Vernachlässigung relativistischer Korrekturen, insbesondere der spinabhängigen Terme,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2\mu} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (1.19)$$

Dabei stellt der erste Term des Hamilton-Operators die gesamte kinetische Energie des Systems der  $N$  Elektronen dar, der zweite Term beschreibt die Anziehung, die der Atomkern mit der positiven Ladung  $-Ze$  auf jedes Elektron ausübt und der letzte Term rührt von der gegenseitigen Abstoßung der Elektronen her (die Summation wird über  $N(N - 1)/2$  Möglichkeiten ausgeführt, die  $N$  Elektronen zu Paaren zusammenzufassen). Schon im einfachen heliumartigen System mit zwei Elektronen ist dieser Hamilton-Operator so kompliziert, dass seine Eigenwertgleichung analytisch nicht exakt lösbar ist. Zur Vereinfachung berücksichtigt man die Elektron-Elektron-Wechselwirkung dadurch, dass man annimmt, dass ein bestimmtes Elektron  $i$  sich unter dem Einfluss eines sphärischen, symmetrischen Potentials  $V_c(r_i)$  befindet, das den mittleren Abstoßungseffekt durch die anderen Elektronen berücksichtigt und das nur vom Betrag des Ortsvektors  $r$  des Elektrons abhängt (*Zentralfeldnäherung*). Mit Hilfe von Näherungsmethoden wie der *Störungstheorie* und der *Variationsmethode*, die im Folgenden kurz charakterisiert werden, lassen sich dann die Energieeigenwerte des Hamiltonoperators berechnen.

### 1.4.2 Störungstheorie

Der Hamilton-Operator (s.o.) läßt sich in zwei Terme zerlegen:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}, \quad (1.20)$$

wobei

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2\mu} + V_c(r_i) \right] \quad (1.21)$$

und

$$\lambda \hat{W} = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (1.22)$$

ist. Wenn  $V_c(r_i)$  richtig gewählt wird, kann  $\lambda \hat{W}$  ( $\lambda \ll 1$ ) als Störung von  $\hat{H}_0$  aufgefasst werden. Für die allgemeine Hamilton-Gleichung  $(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W} - E)|\phi\rangle = 0$  expandiert man die Energie  $E = \sum_{i=1}^N \lambda^n E_n$  und die Eigenfunktionen  $|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N \lambda^n |\phi_n\rangle$  in Potenzen des Parameters  $\lambda$ , so dass man eine endliche Anzahl von linear gekoppelten Gleichungen erhält, über die sich die Energieeigenwerte  $E_n$  bestimmen lassen. Die Eigenwerte von  $\hat{H}_0$  selbst können dann als Eigenwerte unabhängiger Teilchen bestimmt werden (s.o.).  $V_c(r_i)$  wird dabei so bestimmt, dass die Lösung selbstkonsistent ist, d.h. eine Lösung, bei der die mit  $V_c(r_i)$  bestimmten Wellenfunktionen eine Ladungsverteilung ergeben, die eben dieses statische Potential  $V_c(r_i)$  erzeugt.

Für die Lösung der Energieeigenwertgleichung verschiedener physikalischer Systeme werden unterschiedliche störungstheoretische Ansätze verwendet, die verschiedene  $V_c(r_i)$  wählen, je nachdem ob die Quantenzahlen  $n$  und  $l$  des Zustands, die Kernladungszahl  $Z$  klein oder groß sind usw.. Die wichtigsten auf der Störungstheorie basierenden Methoden werden hier kurz vorgestellt.

### Entwicklung in Potenzen von $1/Z$

Bei der Entwicklung in Potenzen von  $1/Z$  wird  $V_c(r_1) = V_c(r_2) = -Ze^2/r$  und der Störterm  $\hat{W} = \sum_{i < j} e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  gewählt. In erster Ordnung sind die Wellenfunktionen dann einfach Produkte der Wellenfunktionen des wasserstoffartigen Systems mit Kernladung  $Z$  und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird lediglich in der Störung  $\hat{W}$  berücksichtigt. Leider gestalten sich die Rechnungen nach der ersten störungstheoretischen Ordnung schnell schwieriger [104] und sind nur für die Beschreibung schwerer heliumartiger Ionen geeignet, da eine Entwicklung nach  $1/Z$  nur für große  $Z$  schnell konvergiert.

### Methode des Konstanter Abschirm-Faktors

Für den Grundzustand in heliumartigen Systemen kann man  $V_c(r_1) = V_c(r_2) = -(Z - s)/r$  mit der Abschirmkonstante  $s$ , die die Coulombabstoßung der Elektronen berücksichtigt, setzen. Wählt man  $s$  so, dass die erste Ordnung Störungstheorie „verschwindet“, ist die Grundzustandswellenfunktion in dieser Ordnung durch das Produkt der Wellenfunktionen des wasserstoffartigen Grundzustandes mit modifizierter Kernladungszahl  $Z^* = (Z - 5/16)$  gegeben. Allerdings stellt diese Näherung eine sehr grobe Approximation dar, da  $s$  stark vom radialen Abstand  $r$  abhängig sein sollte.

Erwähnenswert sind noch andere störungstheoretische Berechnungsmethoden, die die Relativität berücksichtigen oder auf direkten QED Ansätzen [88] beruhen, wie die sogenannten *relativistischen Vielkörper-Störungstheorien* (RMBPT) [105] und die (bound state QED) *BSQED-Methoden* [30]. Beide sind gut für die Berechnung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators von heliumartigen Ionen mit hoher Kernladung  $Z$  geeignet, für die Berechnungen in leichten heliumartigen Ionen sind diese Methoden allerdings schlechter verwendbar. Hier greift man auf Variationsmethoden wie die sogenannten All-order-Methoden [28] (siehe auch Kap. 1.4.3) zurück.

### 1.4.3 Variationsprinzip

Eine andere Möglichkeit zur Berechnung der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators eines heliumartigen Systems bildet das *Ritzsche Variationsprinzip*. Danach gilt, dass der Erwartungswert der Energie für eine beliebige Wellenfunktion  $\psi$  größer  $E_0$  ist, wobei  $E_0$  der kleinste Eigenwert des Hamilton-Operators  $\hat{H}$  ist:

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 . \quad (1.23)$$

Um die Energieeigenwerte zu ermitteln, wird eine Testwellenfunktion in Abhängigkeit von  $k$  Parametern aufgestellt. Im Falle des Heliumatoms ist dies im einfachsten Fall der Parameter der effektiven Kernladung  $Z_{\text{eff}}$ . Über Gl. 1.23 findet man dann ein Gleichungssystem, über das man die Parameter  $k$  und somit die Energieeigenwerte iterativ bestimmen kann. Der Vorteil des Ritzschen Variationsverfahrens besteht darin, dass ein Fehler  $\epsilon$  in der Wellenfunktion  $\psi$  sich als quadratischer Fehler  $\epsilon^2$  in den Energieeigenwerten niederschlägt. Eine grobe Näherung von  $\psi$  kann daher schon eine gute Näherung für die Energieeigenwerte liefern. So ergibt sich mit Hilfe dieser Methode mit dem Variationsparameter  $Z_{\text{eff}}$  für die Grundzustands-Ionisationsenergie von Helium ein Wert von  $-77.48$  eV und bei zwei Variationsparametern sogar schon ein Wert von  $-78.98$  eV, was genähert schon gut mit den experimentellen Werten ( $-79.04$  eV [101–103]) in Einklang zu bringen ist.

Eine wichtige Variationsmethode ist die Hartree-Methode, auf die im Folgenden noch kurz eingegangen wird.

### Hartree- und Hartree-Fock-Methode

Hartrees Methode nähert das im System wirkende Elektronenwechselwirkungspotential durch ein ungestörtes Potential. So wird beispielsweise für heliumartige Ionen das auf das Elektron 1 wirkende Potential als Summe des Coulombfeldes des Atomkernes und des Potentials, das durch die Ladungsverteilung des zweiten Elektrons zustande kommt, ausgedrückt, d.h.  $V_c(r_1) = -Z_1/r_1 + \int 1/(r_1 - r_2) u_2^2(2) d\tau_2$ , wobei  $d\tau_2$  das Volumenelement des zweiten Elektrons ist. Die Wellenfunktionen des Systems werden durch das Produkt aus Einteilchenwellenfunktionen beschrieben, wobei für die Einteilchenwellenfunktion (der Elektronen) Anfangswellenfunktionen  $\psi_i$  gewählt werden. Das Potential  $V_c(r_i)$  für jedes Elektron  $i$  wird berechnet und die Summe aller Potentiale, ausgenommen des Potentials für das  $i$ -te Elektron, gebildet. Die Summe des so berechneten Potentials und des Kernpotentials wird in die Schrödinger-Gleichung für das  $i$ -te Elektron

eingesetzt und numerisch für die Wellenfunktion  $\psi'_i$  ausgewertet. Dieser Prozess wird dann mit  $\psi'_i$  als Anfangswellenfunktion wiederholt usw.. Im Gegensatz zur Methode der Entwicklung in Potenzen von  $1/Z$  sind die Potentiale  $V_c(r_1)$  und  $V_c(r_2)$  nicht identisch und die Eigenfunktionen  $|u\rangle$  bilden kein orthogonales System, so dass die exakten Energieeigenwerte auch in höherer Ordnung der Berechnung nicht gefunden werden können.

Die Hartree-Fock-Methode ist ähnlich der Hartree-Methode, aber es werden symmetrisierte Wellenfunktionen in Produktform benutzt.

Außerdem gibt es auf dem Variationsprinzip beruhende relativistische Methoden, von denen manche auch QED Effekte berücksichtigen. Für leichte oder komplexe Ionen sind *All-order-Methoden* [28] am besten geeignet. Der Name leitet sich davon ab, dass die Wechselwirkung der Elektronen durch den Austausch von Photonen mit diesen Methoden in allen Ordnungen berechnet werden kann.

Für detailliertere Berechnungen muss auch die Wechselwirkung der Elektronen mit unbesetzten Zuständen (Mischung von Zuständen) berücksichtigt werden. Dies geschieht in der sogenannten (relativistischen) *Konfigurations-Wechselwirkungs-Methode* ((relativistic) configuration interaction: CI, RCI) [29, 106] sowie in der *Multikonfigurations-Hartree-Fock* (multi-configuration Hartree-Fock: MCHF) und deren relativistischer Variante, der *Multikonfigurations-Dirac-Fock-Methode* (multi-configuration Dirac-Fock: MCDF).

## 1.5 Relativistische Beschreibung heliumartiger Systeme

Bis heute kann eine relativistische Theorie für 2-Elektronen-Systeme nicht in geschlossener Form formuliert werden. Allerdings lassen sich solche Systeme in relativistischer Näherung durch Einfügen der sogenannten *Breit-Wechselwirkung* (in Form des Breit-Operators  $\hat{V}_B$ ) in den relativistischen Dirac-Hamilton-Operator beschreiben:

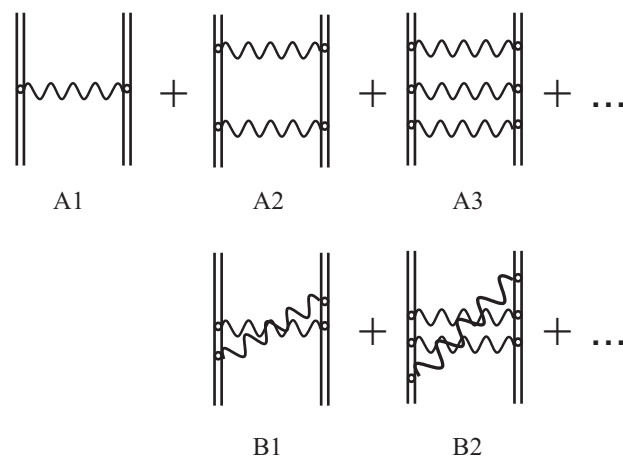
$$\hat{V}_B = -\frac{e^2}{2r_{12}} \left( \boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \mathbf{r}_{12})(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right), \quad (1.24)$$

wobei  $\boldsymbol{\alpha}_i$  ein Vektor der Dirac-Matrizen ist, der auf die Wellenfunktion des  $i$ -ten Elektrons wirkt, und  $r_{12}$  der Abstand zwischen den beiden Elektronen. Der Korrekturterm  $\hat{V}_B$  berücksichtigt die relativistischen Korrekturen niedrigster Ordnung wie magnetische Wechselwirkung und Retardation des Potentials. Höhere Retardierungsterme sind im sogenannten generalisierten Breit-Operator enthalten. Die zugehörige Eigenwertgleichung bezeichnet man als Breit-Gleichung. Diese entspricht der Dirac-Gleichung für Ein-Elektronen-Systeme, allerdings ist sie im Gegensatz zur Dirac-Gleichung nicht voll lorentzinvariant (der Term  $e^2/r_{12}$  ist nicht lorentzinvariant). Ohne Modifikation kann die Breit-Gleichung nicht benutzt werden, um Energieeigenwerte in  $n$ -ter Ordnung ( $n \geq 2$ ) störungstheoretischer Entwicklung nach  $\alpha$  konsistent zu berechnen. Nur die erste Ordnung dieser Entwicklung nach  $\alpha$  liefert sinnvolle Ergebnisse [104].

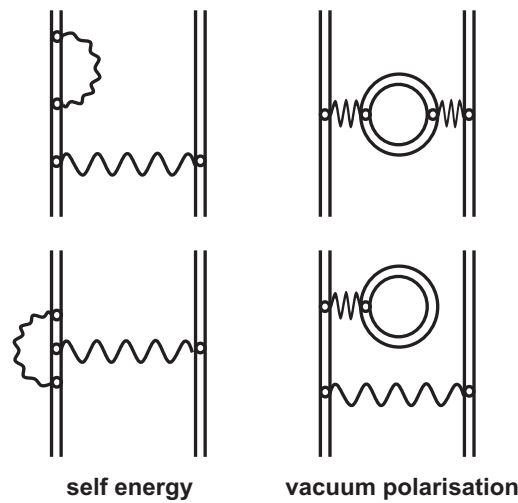
## 1.6 Quantenelektrodynamische Beschreibung heliumartiger Systeme

Um die quantenelektrodynamische Wechselwirkung der Elektronen untereinander und der Elektronen mit dem Strahlungsfeld in den Berechnungen der Energieeigenwerte des Hamilton-Operators eines Systems zu berücksichtigen, gibt es eine große Anzahl von Methoden, die alle vom quantisierten elektromagnetischen Feld (siehe Kap. 1.3.2) ausgehen. Die Stärke der Kopplung der Elektronen an dieses Feld ist durch die Kopplungskonstante  $e^2 \propto \alpha$  bestimmt. Analog zu den QED Betrachtungen für das Wasserstoffatom lassen sich die Energieeigenwerte erhalten, indem man nach  $\alpha$  entwickelt. Für Kerne mit kleinem  $Z$  kann man die Terme der Entwicklung dann ein zweites Mal entwickeln, nach der Kopplungskonstante ( $Z\alpha$ ) für das Kernfeld (siehe Kap. 1.3.2). Für große  $Z$  dagegen verwendet man eine Entwicklung nach  $1/Z$  (siehe Kap. 1.4.2). Für die Entwicklung in erster Ordnung nach  $\alpha$  ergeben sich zwei Typen von Termen: Der erste Typ, dargestellt in Fig. 1.7 ist der, bei dem ein Elektron ein Photon emittiert, was dann vom zweiten Elektron absorbiert wird (*nicht radiative QED Effekte*). Die Verschiebung der Energieniveaus, die durch diesen Typ verursacht wird, ist von der Ordnung  $\alpha(Z\alpha)(Z^2R_H)$  mit der Ryberg-Konstante  $R_H$ . Der zweite Typ beinhaltet solche Feynman-Diagramme (siehe Fig. 1.8), die einen Selbstenergie- oder Vakuum polarisationsterm aufweisen (*radiative QED Effekte*). Die durch diesen Typ hervorgerufene Verschiebung der Energieniveaus von der Größe  $\alpha(Z\alpha)(Z^2R_H) \log \alpha$  wird auch als 2-Elektronen Lamb-Verschiebung [104] bezeichnet.

In erster Näherung kann die Lamb-Verschiebung vieler Elektronen als eine Modifikation der Lamb-Verschiebung für ein Elektron behandelt werden und wird in den Berechnungen oft durch eine Abänderung des Kernfeldes berücksichtigt. Eine solche Rechnung mit Entwicklung nach  $\alpha$  und  $(Z\alpha)$  wurde von G. W. F. Drake ausgeführt [27]. Die Berechnung der QED Anteile in dieser Arbeit erfordert große Sorgfalt und ist sehr aufwendig. Daher wurden diese Anteile in andere Berechnungen wie von D. R. Plante [28] übernommen. Die kompletteste Viel-Elektronen *ab initio*



**Abbildung 1.7:** Leiter (A2, A3) und gekreuzte-Photonen (B1, B2) Feynmann Diagramme der Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Zweielektronen-Systemen.

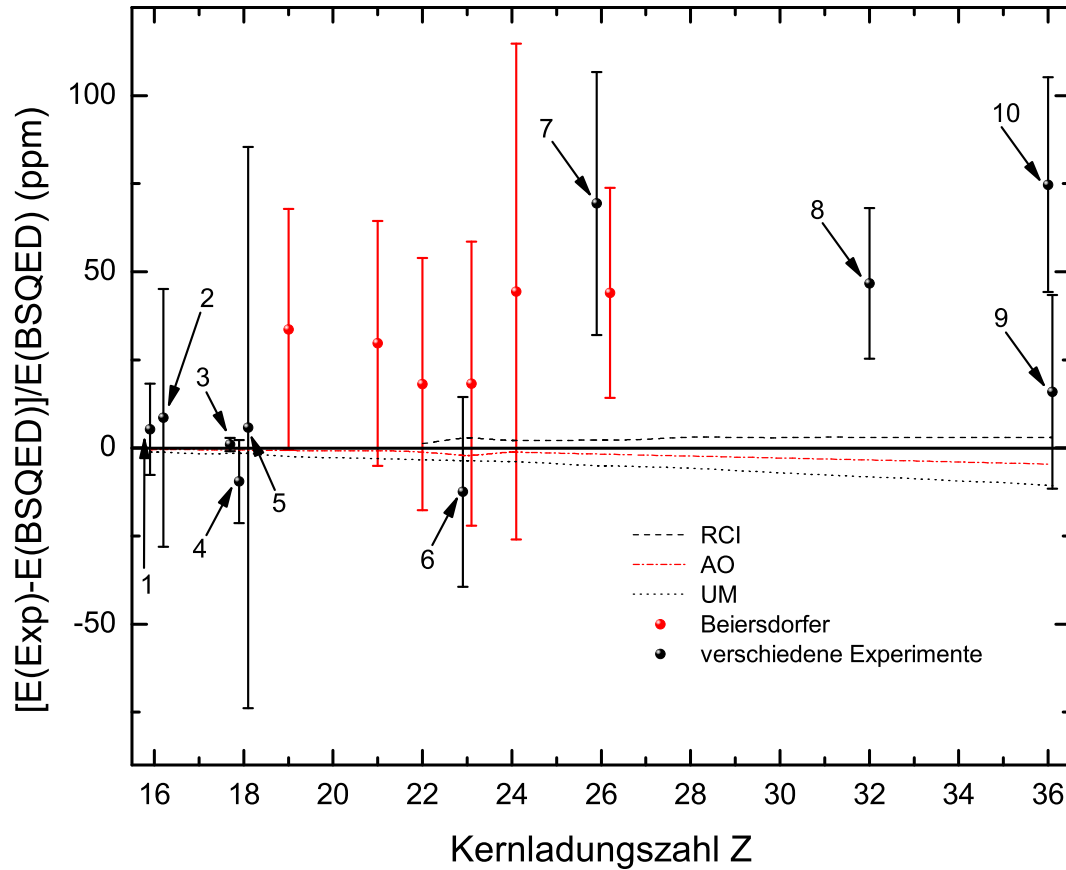


**Abbildung 1.8:** Feynman-Diagramme der radiativen QED Effekte in Zweielektronen-Systemen. Links sind die Diagramme der Selbstenergie dargestellt, rechts der Vakuumpolarisation.

QED Berechnung für die  $n = 1$  und  $n = 2$  Energieniveaus in heliumartigen Ionen findet man zusammen mit einer Übersicht über die verschiedenen Berechnungsmethoden in [30].

## 1.7 Experimentelle Messung von Bindungsenergiebeiträgen in heliumartigen Systemen

Wie in Kap. 1.6 beschrieben nutzen die unterschiedlichen Methoden zur Berechnung der Bindungsenergiebeiträge in heliumartigen Ionen verschiedene Ansätze und Näherungen. Besonders in der Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sind Unterschiede festzustellen. Während die sogenannte von Drake eingesetzte *vereinheitlichte Methode* (unified method: UM) hochkorrelierte nichtrelativistische Wellenfunktionen verwendet [27], wird die Elektron-Elektron-Wechselwirkung bei der von Plante *et al.* [28] in seinen Berechnungen benutzten *All-order* (AO) Methode sowie beim *RCI Ansatz* in den Rechnungen von K.T. Cheng *et al.* [29] durch die Breit-Wechselwirkung in die Gleichungen aufgenommen. A. Artemyev *et al.* setzen in ihren *BSQED-Ansatz* [30] nichtkorrelierte relativistische Wellenfunktionen für die Berechnung von Ein-Elektronen Energieniveaus ein und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird durch den Austausch von einem oder zwei virtuellen Photonen berücksichtigt. Da für heliumartige Ionen mit niedrigem  $Z$  die Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine große und relativistische Effekte eine geringere Rolle in Bezug auf die Verschiebung der Energieniveaus spielen, ist Drakes Methode (die relativistische Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt) besonders für die Beschreibung dieser Systeme geeignet. Im Gegensatz dazu beschreiben die anderen Methoden [28–30] heliumartige Ionen mit hohem  $Z$  besser, bei denen relativistische Einflüsse auf die Energien der Niveaus bedeutender werden und der Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sinkt, da sie die relativistischen Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-



**Abbildung 1.9:** Vergleich von experimentellen  $w(1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0)$  Übergangsenergien in heliumartigen Ionen mit Kernladungszahl  $Z$  mit theoretisch berechneten Werten. Alle experimentellen Daten wurden auf die theoretisch berechneten Übergangsenergien von Artemyev *et al.* [30] normiert. RCI: relativistische Konfigurations-Wechselwirkungs-Methode [29]; AO: All-order-Methode [28]; UM: vereinheitlichte Methode [27]; Beiersdorfer (rot): Princeton Large Torus (PLT) K: ( $Z=19$ ), Sc: ( $Z=21$ ), Ti: ( $Z=22$ ), V: ( $Z=23$ ), Cr: ( $Z=24$ ), Fe: ( $Z=26$ ) [64]; verschiedene Experimente (schwarz): (1) S: ( $Z=16$ ) [107]; (2) S: ( $Z=16$ ) [108]; (3) Ar: ( $Z=18$ ) [43]; (4) Ar: ( $Z=18$ ) [109]; (5) Ar: ( $Z=18$ ) [52]; (6) V: ( $Z=23$ ) [110]; (7) Fe: ( $Z=26$ ) [111]; (8) Ge: ( $Z=32$ ) [66]; (9) Kr: ( $Z=36$ ) [112], (10) Kr: ( $Z=36$ ) [113].

Elektron-Wechselwirkung einschließen. Die Grenze zwischen niedrigem und hohem  $Z$  liegt dabei ungefähr bei  $Z = 26$ . Aus den oben genannten Gründen ist es möglich, dass die Energieniveaus für heliumartige Ionen in diesem Grenzbereich von  $Z$  durch keine der Methoden präzise beschrieben werden, bzw. ein Vergleich zwischen Theorie und Experiment kann es ermöglichen, eine Aussage darüber zu treffen, welche Theorie die Energien der Niveaus in welchem Bereich der Kernladungszahl  $Z$  am besten wiedergibt. Fig. 1.9 stellt die bisher gemessenen  $w(1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0)$  [63] Übergangsenergien für verschiedene heliumartige Ionen im Vergleich zu verschiedenen Theorien [27–30] dar. Alle experimentellen Daten wurden auf die berechnete Übergangsenergie [30] normiert. Bei allen Messungen handelt es sich mit Ausnahme der Messungen von Bruhns *et al.* [43]



an  $\text{Ar}^{16+}$  und Kubicek *et al.* an  $\text{S}^{14+}$ , wobei eine Vorversion des in dieser Arbeit verwendeten Röntgenspektrometers (siehe auch Kap. 3.2.1) eingesetzt wurde, um Relativmessungen unter der Verwendung von Referenzlinien. Für die Messungen von H. Bruhns *et al.* (genaueste der hier vorgestellten Messungen mit einem relativen Fehler von 2 ppm) wurde allerdings auf eine Simulation für die Krümmung der Röntgenlinie entlang der dispersiven Detektorachse (ausführlicher siehe Kap. 3.3.8) zurückgegriffen. Experimentelle  $w$  Übergangsenergie Messungen von E. Aglitsky *et al.* [114] mit Hilfe einer Vakuum-Funkenquelle (engl.: vacuum spark) an einer Vielzahl von Elementen wurden nicht berücksichtigt, da sie stark von theoretischen Berechnungen zur Position und Stärke von Satelliten-Linien (siehe Kap. 2.1.1) abhängen [97, 108]. Die Messungen von P. Beiersdorfer *et al.* wurden in Tokamakplasmen am Princeton Large Torus (PLT) durchgeführt. Bei den anderen Experimenten wurden unterschiedliche Techniken zur Erzeugung hochgeladener Ionen und Messmethoden verwendet. Es ist zu erkennen, dass im Bereich bis ca.  $Z = 24$  alle gemessenen Übergangsenergien innerhalb ihrer  $1\sigma$ -Umgebung (mit der Standardabweichung  $\sigma$  des experimentell bestimmten Wertes) mit den theoretisch berechneten in Einklang sind. Der relative Fehler fast aller experimentellen Werte ist allerdings so groß (besonders groß im Falle von  $\text{Cr}^{22+}$  ( $Z = 24$ ) mit 70 ppm), dass die Gültigkeit der Theorien nicht mit der erwünschten und benötigten Sicherheit festgestellt werden und keine eindeutige Aussage darüber getroffen werden kann, welche Theorie für die Beschreibung der Energieniveaus heliumartiger Ionen in diesem Bereich der Kernladungszahl  $Z$  besser geeignet ist. Für die  $w$  Übergangsenergien in Ionen mit  $Z \geq 26$  ergibt sich sogar eine deutliche Diskrepanz zwischen experimentellen und theoretischen Werten, vor allem im Falle des  $\text{Fe}^{24+}$ , bei dem in zwei unabhängigen Messungen [64, 115] eine um 295 bzw. 465 meV höhere  $w$  Übergangsenergie bestimmt wurde als von der Theorie [30] vorhergesagt. Insgesamt ergibt sich in diesem Bereich von  $Z$  eine 1 bis  $2\sigma$ -Diskrepanz zwischen den Werten der experimentellen Messungen und den theoretisch berechneten Übergangsenergien. Diese Abweichung in der mittleren  $Z$ -Region für heliumartige Ionen legt entweder einen Fehler bzw. unzureichende Ansätze oder Näherungen der Theorie [49, 110] oder einen systematischen Fehler in den Experimenten nahe. Handelt es sich um unzureichende Ansätze oder Näherungen der Theorie, so ist es essentiell die  $Z$ -Abhängigkeit der dadurch verursachten Diskrepanzen zwischen theoretischen und experimentellen Werten zu untersuchen, was eine Messung der  $w$  Übergangsenergien in heliumartigen Ionen mit unterschiedlicher mittlerer Kernladungszahl  $Z$  erfordert. Handelt es sich um systematische Fehler in den Experimenten, so sollten weitere unabhängige Messungen zu anderen Ergebnissen führen als die bisherigen bzw. eine Anzahl präziser Experimente sollten es ermöglichen, die systematischen Fehler zu identifizieren.

Des weiteren erlaubt es die Photonenspektroskopie für heliumartige Ionen exakte Aussagen über die Energiedifferenzen der beteiligten Niveaus zu treffen und ermöglicht es so, unterschiedliche Aspekte der Relativität und der Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu testen. Da Elektronen in einem  $s$ -Zustand eine höhere Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Kernnähe haben als  $p$ -Elektronen spielen z.B. für ein  $2s$ -Elektron im Gegensatz zum  $2p$ -Elektron relativistische und QED Effekte eine größere Rolle als die Elektron-Elektron-Wechselwirkung mit dem  $1s$ -Elektron. Vergleicht man daher die Übergangsenergien vom Übergang eines Elektrons vom  $1s2s$   $^3S_1$ - und  $1s2s$   $^1P_1$ -

Ion	Zustand	Ges. 1-el.	SE	VP	2-Ph. Aust.	Ges. 2-el.	Höh. Ordn.
S <sup>14+</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	0.7562	-0.0832	0.0051	0.0066	-0.0715	0.0009
S <sup>14+</sup>	<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	0.0038	-0.0022	0.0001	0.0000	-0.0022	0.0001
Ar <sup>16+</sup>	<sup>1</sup> S <sub>0</sub>	1.1310	-0.1116	0.0072	0.0091	-0.0953	0.0009
Ar <sup>16+</sup>	<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	0.0062	-0.0031	0.0001	-0.0001	-0.0031	0.0001

**Tabelle 1.4:** Übersicht über die theoretisch berechneten Ein- und Zwei-Elektronen-Korrekturen von Artemyev *et al.* [30]. Ges. 1-el.: gesamter 1-Elektronen-QED-Beitrag; Abs. SE: Abgeschirmte Selbstenergie; Abs. VP: Abgeschirmte Vakuumpolarisation; 2-Ph. Aust.: QED Beiträge durch Austausch von 2 virtuellen Photonen; Ges. 2-el.: Summe aller dieser 2-Elektronen-Effekte; Höh. Ordn.: Effekte höherer Ordnung. Alle Angaben in eV.

Niveau in den Grundzustand, so lassen sich die theoretisch berechneten quantenelektrodynamischen Energiebeiträge zu allen beteiligten Zuständen separieren und überprüfen. Tab. 1.4 gibt eine Übersicht über diese quantenelektrodynamischen Energiebeiträge, die theoretisch berechneten Ein- und Zwei-Elektronen-Korrekturen [30] für die <sup>1</sup>S<sub>0</sub>- und <sup>1</sup>P<sub>1</sub>-Niveaus in den in dieser Arbeit untersuchten Systemen des heliumartigen Schwefels und Argons.

Die experimentellen Herausforderungen der oben diskutierten (röntgen)spektroskopischen Messungen an wasserstoff- und heliumartigen Ionen sowie die eingesetzten Messtechniken und Erzeugungsmethoden für hochgeladene Ionen sind Gegenstand der folgenden Kapitel. Ein besonderer Schwerpunkt liegt dabei auf der Beschreibung von Absolutmessungen, die auf die zusätzliche Messung von Wellenlängen von Referenzlinien zur Kalibrierung verzichten.

## **Kapitel 2**

# **Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen**

Hochpräzise röntgenspektroskopische Messungen an hochgeladenen Ionen, wie sie in dieser Arbeit vorgestellt werden, stellen besondere Anforderungen an die Eigenschaften des Plasmas und damit auch an die Techniken, mit denen diese erzeugt wird. Zum anderen setzen sie Messtechniken voraus, die eine extreme Genauigkeit ermöglichen. Die verschiedenen experimentellen Ansätze zur Erzeugung hochgeladener Ionen und korrespondierende röntgenspektroskopische Messmethoden sind Gegenstand des folgenden Kapitels.

### **2.1 Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor**

Die Erzeugung von wenig-Elektronen Ionen für Experimente im Labor und deren Untersuchung ist für viele Jahrzehnte lang ein bedeutendes Ziel der Physik gewesen. Präzisionsspektroskopie an wenig-Elektronen Ionen ermöglicht es, ein grundlegendes Verständnis der Atomstruktur und der theoretischen Beschreibung dieser für eine große Anzahl von Elementen und Isotopen zu erhalten. Insbesondere können besonders interessante angeregte Zustände selektiv über Elektroneneinfang und Kaskadenprozesse erzeugt werden. Für spektroskopische Experimente ist es dabei vorteilhaft, wenn sich die wenig-Elektronen Ionen mit geringer Geschwindigkeit bewegen, so dass die erreichbare Genauigkeit der Messungen nicht durch den Doppler-Effekt limitiert wird. Daneben ist es vorteilhaft, wenn ausschließlich der für die Spektroskopie benötigte Ladungszustand produziert wird, so dass sogenannte Satelliten-Linien (siehe Kap. 2.1.1) nicht zu einer Kontamination der Spektren führen. Um diese wenig-Elektronen Ionen zu erzeugen, wurden in der Vergangenheit im Wesentlichen zwei experimentelle Ansätze verfolgt: zum einen der Gebrauch von speziell entwickelten Ionenquellen und Fallen, wobei die Ionen eine geringe Geschwindigkeit aufweisen, die Intensität der emittierten Linien aber auch vergleichsweise gering ist. Zum anderen können hochgeladene Ionen in Beschleunigern erzeugt werden, wobei die Geschwindigkeiten der Ionen typischerweise hoch sind. Neben diesen Ansätzen hat sich im Zuge der Kernfusionsforschung in

der Plasmaphysik der Tokamak als Technik zur Erzeugung hochgeladener Ionen bewährt. Diese drei Methoden werden im folgenden mit Vor- und Nachteilen dargestellt.

### 2.1.1 Beschleuniger

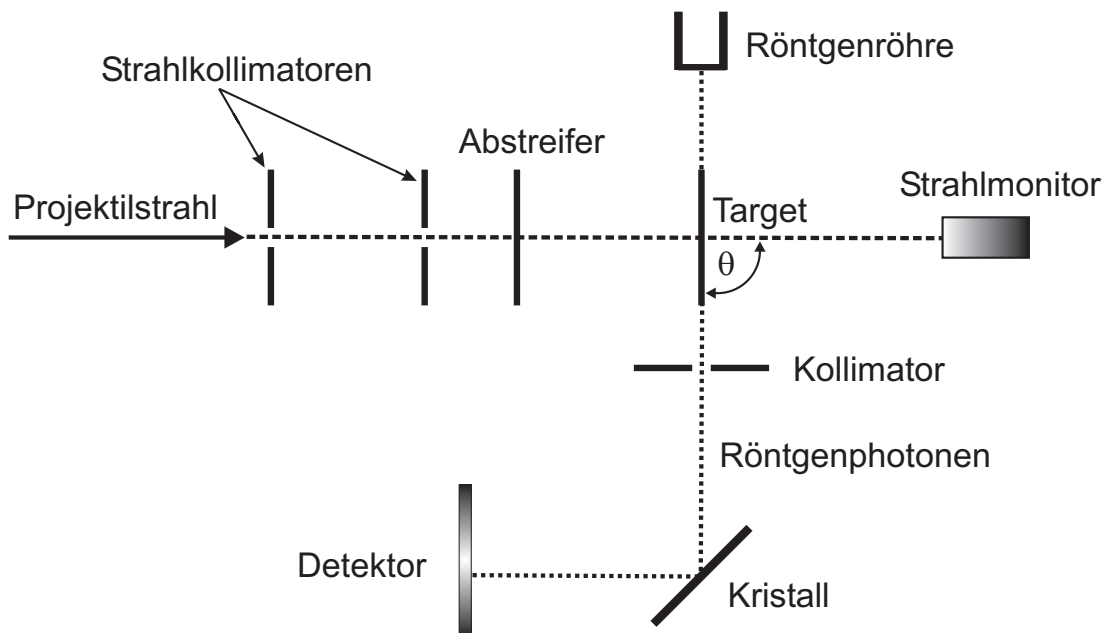
Generell unterscheidet man bei der Erzeugung von hochgeladenen Ionen in Beschleunigern zwischen Methoden, bei denen die generierten Ionen hohe Geschwindigkeiten (einige  $eV$ ) (Strahl-Folien-Methode) oder niedrige wie bei der Rückstoß-Ionen-Methode und der Abbrems-Methode haben [116]. Röntgenspektroskopische Messungen an Ionen, die mit Hilfe einer dieser Methoden erzeugt wurden, weisen jedoch Probleme auf, die im Falle schneller Ionen hauptsächlich von ihrer hohen Geschwindigkeit und der resultierenden Doppler-Verschiebung herrühren, im Falle langsamer Ionen durch Kontamination der Spektren mit unerwünschten Röntgenlinien verursacht werden. Diese Methoden zur Ionenerzeugung, ihre Probleme und die mit Hilfe dieser Methoden durchgeführten röntgenspektroskopischen Messungen von Übergangswellenlängen in wasserstoff- und heliumartigen Systemen werden im Folgenden kurz vorgestellt, und später bzgl. ihrer Vor- und Nachteile gegenüber den in dieser Arbeit vorgestellten Messungen beleuchtet.

#### Strahl-Folien-Methode

Die Strahl-Folien-Methode (beam-foil-method) wurde in den späten 1960er Jahren entwickelt, um die Struktur und Dynamik von atomaren Ionen mit beliebiger Kernladungszahl  $Z$  und beliebigem Ladungszustand mit Hilfe von Spektroskopie, Lebensdauermessungen, Polarisationsmessungen, Linienintensitätsmessungen usw. untersuchen zu können [117]. Die Methode verwendet einen kollimierten Ionenstrahl der gewünschten Atomsorte (Projektilestrahl), der in einem Van-de-Graaff-Teilchenbeschleuniger [118] oder einem Zyklotron auf Energien von typischerweise einigen bis einigen hundert MeV beschleunigt wird. Der Ladungszustand der Ionen wird dabei erhöht, indem man den Projektilestrahl durch einen sogenannten Abstreifer (engl.: Stripper) schießt (siehe Abb. 2.1). Beim Abstreifer kann es sich um eine Gaszelle oder eine dünne Festkörperfolie handeln. Bei der Wechselwirkung des Projektilestrahls mit dem Abstreifer werden die Ionen durch Stoßionisation höher ionisiert. Je höher dabei die Geschwindigkeit der Ionen vor dem Abstreifer ist, desto höher der Ladungszustand nach dem Abstreifer. Dies ergibt sich aus dem Bohr-Kriterium [119], nach dem Elektronen in Orbitalen mit geringeren Geschwindigkeiten  $u$  als die Projektilestrahl Geschwindigkeit  $v$  aus dem Atom oder Ion herausgeschlagen werden. Eine grobe Abschätzung der Energie  $E$ , die nötig ist, um ein Ion mit Masse  $M$  und Kernladungszahl  $Z$  in den wasserstoffartigen Zustand zu ionisieren, ergibt [116]

$$Z \approx \sqrt{40E/M}, \quad (2.1)$$

wobei  $E/M$  in MeV/a.u. einzusetzen ist. Der so erzeugte hochgeladene Ionenstrahl passiert eine als Target verwendete dünne (Kohlenstoff)folie mit einer Massendichte von einigen  $\mu g/cm^3$ , die in den Strahlengang eingebracht wird. Der Projektilestrahl wird dabei (in Flugrichtung) nach dem Durchfliegen der Folie unwesentlich durch Kohlenstoffionen und Fragmente kontaminiert,



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Strahl-Folien-Methode. Der kollimierte Projektilstrahl durchdringt den Abstreifer, wobei sich der Ladungszustand der Projektilionen durch Stoßionisation erhöht. Die Position des Projektilstrahls wird dabei mit einem Strahlmonitor überwacht. Die Wechselwirkung mit dem Target, einer Kohlenstofffolie, resultiert in der Freisetzung von Röntgenphotonen, die mit Hilfe eines Kristallspektrometers unter dem Winkel  $\theta$  zur Projektilachse detektiert werden können. Die Strahlung einer Röntgenröhre dient der Kalibration des Spektrometers.

die durch die Kollision von Ionenstrahl mit Folienatomen und Elektronen aus der Folie „herausgeschlagen“ werden. Die Folienteilchen müssen im Schwerpunktsystem Rutherford Streuung unter  $180^\circ$  erfahren, um im Laborsystem in Strahlrichtung fliegen zu können [120]. Haben die Projektilionen die Masse  $m_1$  und die Folienatome die Masse  $m_2$ , so lässt sich  $f$ , d.h. der Anteil der Folienionen an den gesamten Strahlionen nach Durchlaufen der Folie durch

$$f = N_0 \rho d \left\{ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4 [m_1 / (m_1 + m_2)] E_1} \right\} \quad (2.2)$$

ausdrücken. Hierbei ist  $N_0$  die Avogardokonstante,  $\rho$  die Foliendichte,  $d$  die Dicke der Folie,  $Z_{1,2}$  die Kernladungszahlen der wechselwirkenden Teilchen und  $E_1$  die Energie der Projektilionen im Laborsystem. Eine Abschätzung ergibt für 1-MeV Sauerstoffionen, die auf eine Kohlenstofffolie mit Dicke  $d = 10^{-5} \text{ cm}$  treffen,  $f = 10^{-5}$  und für Xenonionen mit einer Energie von 200 keV immerhin  $f = 10^{-3}$ .

Der Projektilstrahl befindet sich sowohl vor als auch hinter der Folie im Ultrahochvakuum, was Kollisionen mit Restgas und damit einer Störung der Ionenflugbahn vorbeugt. Bei der Wechselwirkung mit den Folienatomen und Elektronen werden die Elektronen der Strahlionen zum einen durch Stöße in energetisch höhere Energieniveaus angeregt, zum anderen werden FolienElektronen von den Projektilionen eingefangen, d.h. der Ladungszustand der Projektilionen ändert sich. Die

Relaxation der angeregten Strahlionen kann durch den Übergang ihrer Elektronen in die jeweilige Grundzustandskonfiguration unter Emission von Photonen oder Auger-Elektronen erfolgen. Die emittierten Photonen und Elektronen lassen sich in spektroskopischen Messungen untersuchen, wobei gemessene Energien und Intensitäten spektrale Informationen über die Projektionen liefern. Die präzise definierte Wechselwirkungszeit der Strahlionen mit den Folienatomen ermöglicht eine hohe zeitliche Auflösung in Experimenten, die sich der Strahl-Folien-Methode bedienen, wie sie z.B. in Lebensdauermessungen [121] benötigt wird.

Röntgenspektroskopische Messungen von Übergangswellenlängen - wie sie in dieser Arbeit durchgeführt wurden - werden bei der Verwendung der Strahl-Folien-Methode durch die Tatsache erschwert, dass der Photonenfluss aus der Beobachtungsregion ( $\sim 10^{13}$  Ionen pro Sekunde) gering ist und die Projektionen durch den Einfang einer unterschiedlichen Anzahl von Folienelektronen beim Durchgang durch die Folie in verschiedensten Ladungszuständen vorliegen. Nur der mittlere Ionisationsgrad lässt sich durch Variation der Anfangsstrahlenergie ändern und eingrenzen. Dies und die Begünstigung der Erzeugung hoher Anregungszustände durch die Methode [122] führt zu komplexen Emissionsspektren mit einer hohen Anzahl an sogenannten *Satelliten-Linien* [54, 123, 124]. Dies sind Linien, die von Ionen mit „Zuschauerelektronen“ in den äußeren Schalen emittiert werden, und deren Photonenenergien nahe an den spektroskopierten Übergangswellenlängen liegen. Diese lassen sich aufgrund der beschränkten Detektorauflösung oft nicht von den eigentlichen Messlinien separieren bzw. verschieben deren Linienschwerpunkt, was die erreichbare experimentelle Genauigkeit der Röntgenübergangswellenlängenmessungen begrenzt. Zur Veranschaulichung ist ein typisches Röntgenspektrum, aufgenommen bei der Messung der  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Übergangswellenlänge von Briand *et al.* [52] an  $\text{Fe}^{24+}$  mit einer Genauigkeit von 40 ppm, in Abb. 2.2 abgebildet. Es ist eine deutliche Kontamination des Spektrums durch Satelliten-Linien, vor allem durch Photonenemission von Ionen mit  $3p$ -Zuschauerelektronen, zu erkennen.

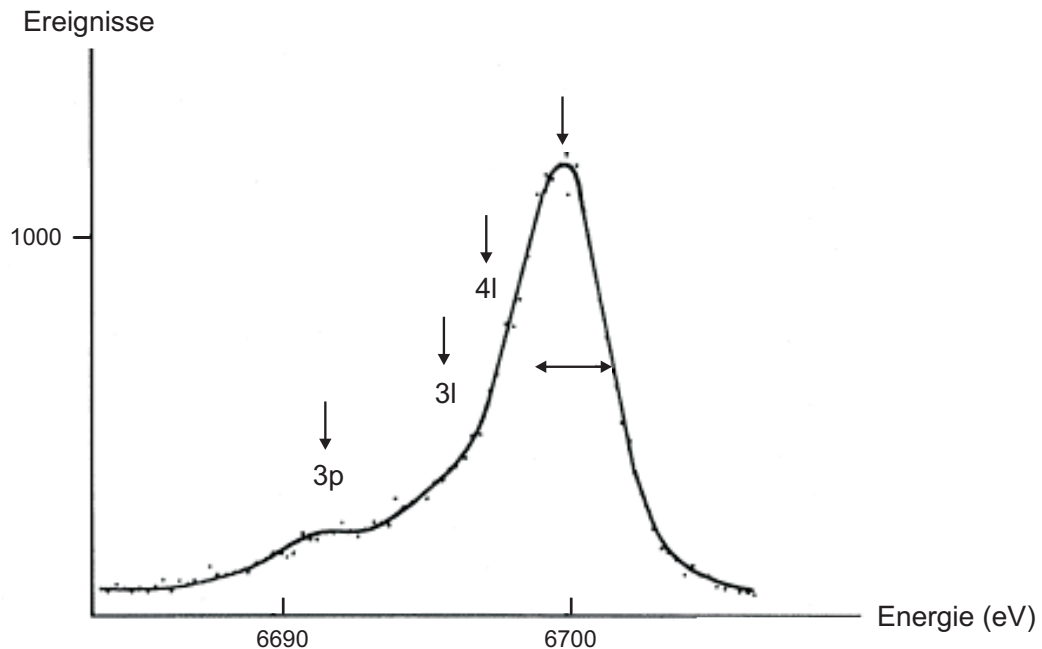
Zudem müssen die gemessenen Energien von (Röntgen)Photonen, die bei Übergängen von Elektronen in Ionen, die mit der Strahl-Folien-Methode erzeugt wurden, emittiert werden, für die im Laborsystem vorliegende Doppler-Verschiebung aufgrund der hohen Geschwindigkeit  $v$  der Projektionen korrigiert werden. Für einen Beobachtungswinkel  $\theta$  zur Ionenstrahlachse ist die gemessene Wellenlänge  $\lambda$  durch

$$\lambda = \gamma \lambda_0 (1 + \beta \cos \theta) \quad (2.3)$$

gegeben.  $\lambda_0$  entspricht der Wellenlänge, die man beobachten würde, wenn sich die Projektionen in Ruhe befinden würden; es gilt  $\beta = v/c$  und  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ . Setzt man  $\theta = 90^\circ$  so lässt sich die Doppler-Verschiebung verringern. Allerdings ist die Doppler-Verschiebung  $\Delta\lambda$  zweiter Ordnung  $\Delta\lambda = (\gamma - 1) \lambda_0$  aufgrund der Zeitdilatation auch dann vorhanden und kann sich bei Strahlenergien von einigen bis einigen hundert MeV auf einige eV belaufen [108]. Beobachtet man nicht unter  $0^\circ$  zum Projektilstrahl (die experimentelle Umsetzung einer Messung unter  $0^\circ$  gestaltet sich als schwierig) verursacht dies zusätzlich eine Dopplerbreite  $\delta\lambda$  von der Größe  $\delta\lambda = \gamma \lambda_0 \beta \sin \theta \delta\theta$ .

Vor allem in den 80er Jahren des letzten Jahrhunderts wurde die Strahl-Folien-Methode in Kombination mit verschiedenen Arten von Kristallspektrometern eingesetzt, um Röntgenspektroskopie

## 2.1. Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor



**Abbildung 2.2:** Profil der  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  [52]. Die  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen wurden mit Hilfe der Strahl-Folien-Methode erzeugt.  $3p$ ,  $3l$  und  $4l$  bezeichnen die Positionen im Spektrum, an denen Kontamination durch Photonen, die von Ionen mit Zuschauerelktronen in der  $3d$ -,  $3l$ - und  $4l$ -Schale emittiert werden, erwartet wird. Besonders der durch die Ionen mit  $3p$ -Zuschauerelktronen hervorgerufene Peak ist deutlich zu erkennen.

an hochgeladenen Ionen, insbesondere auch an den Lyman- $\alpha$  Übergängen in wasserstoffartigen Ionen, zu betreiben. So wurde bei der Messung der Lyman- $\alpha$  Übergangswellenlängen in  $\text{Cl}^{16+}$  von P. Richard *et al.* [124] am Brookhaven Van-de-Graaff-Tandem-Beschleuniger mit Chlorionen einer Energie von ca. 160 MeV die Lyman- $\alpha_1$  Übergangswellenlänge mit Hilfe eines gekrümmten Si(111)-Kristalls und eines positionsempfindlichen Proportionalzählers mit einer relativen Genauigkeit von 40 ppm bestimmt. Obwohl in diesem Experiment die Lyman- $\alpha$  Übergangswellenlängen als Funktion der Projektilenergie  $v$  vermessen wurden, um den Beobachtungswinkel  $\theta$  mit ausreichender Präzision zu bestimmen, ist die die erreichbare Genauigkeit der Wellenlängenmessung durch die Doppler-Verschiebung limitiert. Ein Anteil von 85% der Messungenauigkeit ist nämlich auf die Unsicherheit in der Bestimmung der Doppler-Verschiebung aufgrund des ungenau bekannten Beobachtungswinkels  $\theta$  und der unzureichend bestimmbar Projektilegeschwindigkeit  $v$  sowie auf die nicht ausreichend bekannte Wellenlänge der Referenzlinie zurückzuführen. Dies deutet darauf hin, dass zur Durchführung von Röntgenwellenlängenmessungen an hochgeladenen Ionen mit höherer relativer Genauigkeit andere Mechanismen zur Erzeugung der Ionen vorgezogen werden müssen. Außerdem ist es erstrebenswert, Messungen ohne Rückgriff auf Referenzwellenlängen durchzuführen, um die relative Unsicherheit nicht um den Beitrag der Unsicherheit in der Wellenlänge der Referenzwellenlänge zu erhöhen. Andere Experimente, die die Strahl-

Experiment	Beschleuniger	Ion	Übergang	$\Delta E/E$ (ppm)
Indelicato <i>et al.</i> [113]	GANIL (Caen)	Kr <sup>34+</sup>	$w$	23
Tavernier <i>et al.</i> [54]	GANIL (Caen)	Kr <sup>35+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	36
Schleinkofer <i>et al.</i> [108]	Tandem Beschl. (München)	S <sup>14+</sup>	$w$	37
Briand <i>et al.</i> [111]	SuperHILAC (Berkeley)	Fe <sup>24+</sup>	$w$	40
Briand <i>et al.</i> [52]	CEVIL (Orsay)	Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	75
Briand <i>et al.</i> [98]	SuperHILAC (Berkeley)	Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	90

**Tabelle 2.1:** Übersicht der Messungen von Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Übergangswellenlängen in hochgeladenen Ionen, welche mit Hilfe der Strahl-Folien-Methode erzeugt wurden.

Folien-Methode zur Erzeugung von hochgeladenen Ionen für die Röntgenspektroskopie nutzen, sind die Messungen der Lyman- $\alpha$  Übergangswellenlängen von M. Tavernier *et al.* am GANIL in Caen an Kr<sup>35+</sup> [54] mit einer relativen Genauigkeit von 36 ppm, von J.P. Briand *et al.* am CEVIL in Orsay an Ar<sup>17+</sup> [52] mit 75 ppm und Briand *et al.* am SuperHILAC in Berkeley [98] an Fe<sup>25+</sup> mit 90 ppm sowie die Messungen der  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Übergangswellenlänge von Briand *et al.* [111] (ebenfalls am SuperHILAC in Berkeley) an Fe<sup>24+</sup> mit 40 ppm und L. Schleinkofer *et al.* [108] am München Tandem Beschleuniger an S<sup>14+</sup> mit 37 ppm (siehe auch Tab. 2.1). Die erreichte Genauigkeit ist in allen Experimenten durch die Kontamination der Spektren durch Satelliten-Linien, die Unsicherheit in der Wellenlänge der Referenzlinie sowie durch die unzureichend bekannte Doppler-Verschiebung begrenzt.

### Rückstoß-Ionen-Methode

Um die oben erläuterten Schwierigkeiten - insbesondere die hohe Doppler-Verschiebung - röntgenspektroskopischer Messungen von Übergangsenergien an hochgeladenen Ionen, die auftreten, wenn man zur Produktion der Ionen die Strahl-Folien-Methode verwendet, zu vermeiden, wurde die Rückstoß-Ionen-Methode (recoil ion technique) entwickelt, die in der Lage ist, langsame Ionen mit einer Geschwindigkeit von einigen eV [125] zu erzeugen. Die genaueste Messung einer Übergangsenergie im Röntgenbereich mit dieser Methode wurde von Beyer *et al.* an der Lyman- $\alpha_1$  Linie in wasserstoffartigem Ar<sup>17+</sup> [53] mit einer relativen Genauigkeit in der Wellenlängenbestimmung von 5 ppm durchgeführt (siehe Tab. 2.2). In diesem Experiment wurde ein im UNILAC (Universal Linear Accelerator) an der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt erzeugter U<sup>66+</sup>-Strahl mit einer Strahlenergie von 5.9 MeV/Nukleon in eine Gaszelle mit Argon-Gas unter einem Druck von 50 mbar eingeschossen. Bei der Kollision der U<sup>66+</sup>-Ionen mit den Argon-Atomen wurden die Atome durch Stöße ionisiert, wobei die kinetische Energie des U<sup>66+</sup>-Projektilstrahls zum größten Teil bei den schwereren Uranionen verblieb [125]. Daher weisen die Spektren eine relativ geringe Dopplerverschiebung auf, die bei einer erreichten relativen Unsicherheit der Messung der Wellenlänge des Lyman- $\alpha_1$  Übergangs von  $\geq 1$  ppm vernachlässigt werden kann. Die von den angeregten Ar<sup>17+</sup> Ionen ausgesandte Röntgenstrahlung wurde dabei



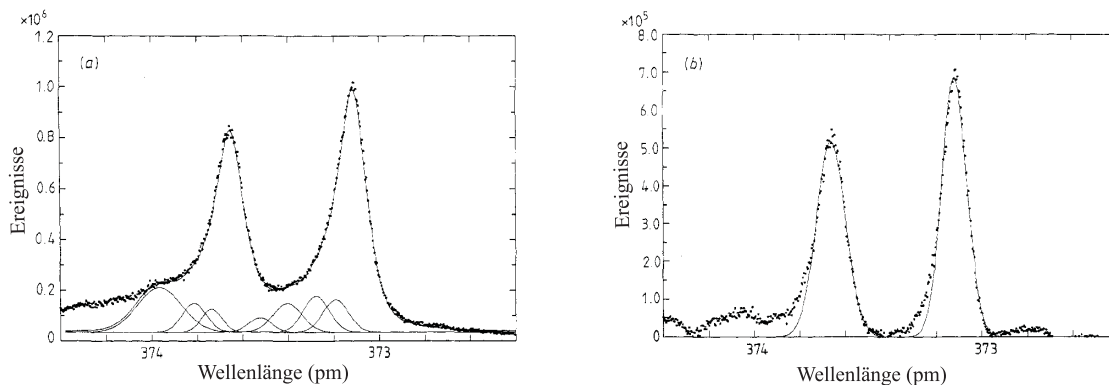
## 2.1. Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor

Experiment	Beschleuniger	Ion	Übergang	$\Delta E/E$ (ppm)
Beyer <i>et al.</i> [53]	UNILAC (GSI)	Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	5
Deslattes <i>et al.</i> [109]	UNILAC (GSI)	Ar <sup>16+</sup>	$w$	12

**Tabelle 2.2:** Übersicht der Messungen von Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Übergangswellenlängen in hochgeladenen Ionen, welche mit Hilfe der Rückstoß-Ionen-Methode erzeugt wurden.

mit Hilfe eines wellenlängendispersiven Röntgenspektrometers mit gekrümmten Ge(111)-Kristall in Johann-Geometrie (siehe Kap. 2.2.2) und eines positionsempfindlichen Proportionalzählers detektiert. Ein typisches Röntgenspektrum, wie es in dieser Konfiguration aufgenommen wurde, ist in Abb. 2.3 zu sehen. Es ist zu erkennen, dass auch die Röntgenspektren von Ionen, die mit der Rückstoß-Ionen-Methode erzeugt wurden, durch Satelliten-Linien kontaminiert sind. Dies lässt sich durch die Tatsache erklären, dass sich die Ionen in der Gaszelle befinden und in dieser Umgebung schnell (Zuschauer)Elektronen einfangen. Verstärkt wird dieser Effekt durch den relativ großen Gasdruck in der Argon-Gaszelle, der vorhanden sein muss, um einen ausreichenden Photonenfluss zu gewährleisten. Zur Auswertung der Daten unter Berücksichtigung der Satelliten-Linien wurden von Beyer *et al.* zwei Methoden benutzt. Zum einen wurde ein theoretisches Satelliten-Modell verwendet, um ein theoretisches Röntgenspektrum im fraglichen Energiebereich zu generieren. Dieses Röntgenspektrum wurde dann vom experimentell gemessenen Röntgenspektrum subtrahiert (Abb. 2.3 (b)). Die theoretische Modellierung der Satelliten-Linien gestaltet sich dabei als schwierig, da die Kollisionsprozesse zwischen den Teilchen so kompliziert sind, dass die Besetzung der beteiligten Zustände nur mit großer Unsicherheit berechnet werden kann. Zum anderen wurde rein empirisch eine Anzahl von Voigt-Profilen an das experimentelle Spektrum gefittet (Abb. 2.3 (a)), wobei die Abhängigkeit der Lyman- $\alpha$  Übergangsenergien von den Fitparametern und der Anzahl der Voigt-Profile systematisch untersucht wurde. Aus den Spektren ist zu ersehen, dass die theoretische Simulation der Satelliten-Linien deren Einfluss unterschätzt, d.h. in Abb. 2.3 (b) sind neben den Lyman- $\alpha$  Peaks noch Substrukturen zu erkennen. Die Ergebnisse für die Wellenlänge der Lyman- $\alpha$  Linien, die mit diesen unterschiedlichen Auswertemethoden erzielt wurden, unterscheiden sich um ca. 4 ppm. Obwohl die Messung eine der präzisesten röntgenspektroskopischen Übergangswellenlängenmessungen in hochgeladenen Ionen ist, wird ihr relativer Fehler von 5 ppm damit durch die Kontamination der Spektren durch Satelliten-Linien bestimmt und lässt sich mit dieser Methode auch in weiteren Messungen nicht entscheidend verringern [53].

Eine Messung von Deslattes *et al.* [109] zur Bestimmung der  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Übergangsenergie an Ar<sup>16+</sup> am gleichen Beschleuniger mit identischem Aufbau verfolgt einen anderen Ansatz zur Berücksichtigung der Satelliten-Linien bei der Auswertung der aufgenommenen Röntgenspektren. Dazu wurde der Gasdruck in der Argongaszelle zwischen 7 und 100 mbar variiert und Röntgenspektren als Funktion dieses Gasdrucks aufgenommen. Bei hohem Gasdruck sind die Röntgenspektren stark durch Satelliten-Linien kontaminiert, bei geringerem Druck nimmt dieser Effekt ab. In der Auswertung wurden daher erstere Spektren zur Bestimmung von Position und



**Abbildung 2.3:** (a) Linkes Bild: Punkte: Gemessenes Profil der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Ar}^{17+}$  [53]. Die  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen wurden mit Hilfe der Rückstoß-Ionen-Methode erzeugt. Im Spektrum sind neben den Lyman- $\alpha$  Peaks auch zusätzliche kleinere Strukturen zu erkennen, die von Ionen in anderen Ladungszuständen, d.h. von Ionen mit Zuschauerelektronen herrühren. Durchgezogene Linie: Fit des experimentellen Spektrums unter Berücksichtigung von 7 Satelliten-Linien. (b) Rechtes Bild: Punkte: Gemessenes Profil der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Ar}^{17+}$ , wobei ein theoretisch berechneter Untergrund, der durch Satelliten-Linien verursacht wird, abgezogen wurde. Durchgezogene Linie: Fit an dieses Profil.

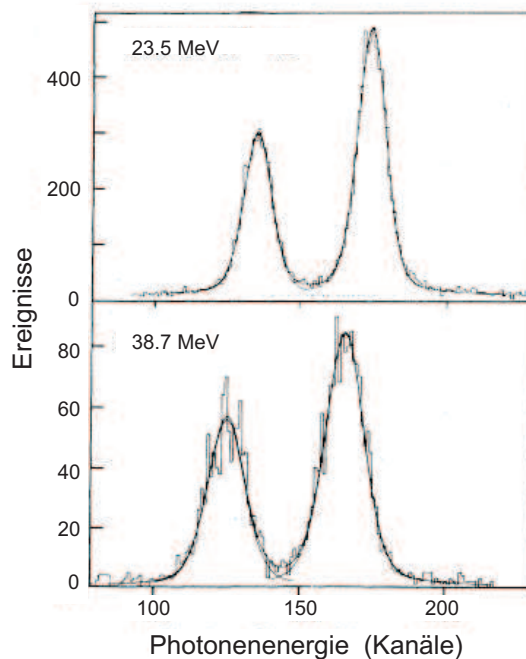
Intensität der Satelliten-Linien und letztere Spektren zur Bestimmung der Wellenlängen der untersuchten Linien genutzt. Damit lässt sich der Anteil des Fehlers, der durch die ungenau bekannten Positionen und Intensitäten der Satelliten-Linien entsteht, an der relativen Unsicherheit von (hier) 12 ppm in der Bestimmung der Wellenlänge der Röntgenlinien minimieren, aber mit 3 ppm ist dieser Fehler so groß, dass eine relative Unsicherheit von 1-2 ppm in solchen Messungen unter Verwendung der Rückstoß-Ionen-Methode nicht erreicht werden kann. Außerdem ist hier noch anzumerken, dass der Fehler durch die Unsicherheit in der Wellenlänge der Kalibrationslinie mit 10 ppm sehr hoch ist und auch hier wieder deutlich wird, wie wichtig es ist, Absolutmessungen von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien durchzuführen, will man die oben genannte Genauigkeit erreichen.

Erwähnenswert sind noch experimentelle Ansätze, die versuchen, Ionen, die mit Hilfe der Rückstoß-Ionen-Methode produziert wurden, aus der ersten in eine zweite Gaszellenregion zu transferieren, um so die Kontamination von Röntgenlinien durch Satelliten-Linien zu reduzieren [126].

### Beschleunigungs-Abstreif-Abbrems-Methode

Um langsame Ionen ohne Zuschauerelektronen, deren Emissionslinien nicht durch die Dopplerverschiebung beeinträchtigt und deren Emissionsspektren nicht durch Satelliten-Linien kontaminiert sind, zu erzeugen, wird die Beschleunigungs-Abstreif-Abbrems-Methode (ASD: acceleration-stripping-deceleration) [31] eingesetzt. Dazu wird die Strahl-Folien-Methode in Kombination mit mehrfach-Stufen Beschleunigern für hochgeladene Ionen eingesetzt. In der ersten Beschleuniger Stufe werden Ionen mit mittlerem Ladungszustand auf hohe Geschwindigkeiten beschleunigt. Diese werden durch Abstreifen der Elektronen (siehe oben) mit Hilfe einer Folie in hochgeladene Ionen umgewandelt. Zuletzt wird die letzte Beschleuniger Stufe in invertiertem Modus genutzt, um die schnellen hochgeladenen Ionen auf mäßige Geschwindigkeiten abzubremsen. Ihr

## 2.1. Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor



**Abbildung 2.4:** Spektren der Lyman- $\alpha_{1,2}$  Linien von  $\text{Cl}^{17+}$  nach Elektroneneinfang in einer Heliumgaszelle [127]. Das obere Spektrum wurde bei einer Energie der Chlorionen von 23.5 MeV/a.u., das untere bei 38.7 MeV/a.u. aufgenommen. Durchgezogene Linien repräsentieren Voigt-Fits an die experimentellen Daten.

Ladungszustand läßt sich in einem darauffolgenden Gastarget ändern, wo sie Elektronen einfangen können. Die Beschleunigungs-Abstreif-Abbrems-Methode wurde in dieser Form vor allem in den 80er Jahren des letzten Jahrhunderts eingesetzt, wobei als Beschleuniger sowohl Tandem-Anordnungen [127] als auch der UNILAC der GSI [31] zum Einsatz kamen. Eine solche Tandem-Anordnung mit Radiofrequenz-Linearbeschleuniger wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik eingesetzt, um abgebremste nackte Chlorionen mit einer Energie zwischen 23.5-67.1 MeV zu erzeugen [127]. Diese wurden dann durch Elektroneneinfang in einem Heliumgas-Target in wasserstoffartiges  $\text{Cl}^{16+}$  umgewandelt und die emittierte Lyman- $\alpha$  Röntgenstrahlung mit Hilfe eines Röntgenspektrometers mit gekrümmten Kristall in Johann-Geometrie (siehe Kap. 2.2.2) und eines positionsempfindlichen Proportionalzählers detektiert. In Abb. 2.4 ist ein typisches Spektrum dieser Messung dargestellt. Man sieht deutlich, dass das Spektrum im Vergleich zu den Emissionsspektren von Ionen, die mit der Strahl-Folien-Methode oder der Rückstoß-Ionen-Methode erzeugt wurden, nicht durch Satelliten-Linien kontaminiert ist. Allerdings ist zu erkennen, dass auch bei dieser Messung der Doppler-Effekt nicht zu vernachlässigen ist. Die Positionen der Lyman- $\alpha$  Linien verschieben sich als Funktion der Energie der Chlorionen. Dazu kommt eine Kalibration des Spektrometers mit Argon  $K\alpha$ -Linien, deren Spektrum durch Satelliten-Linien kontaminiert ist. Daher wurde auch in diesem Experiment nur eine relative Ungenauigkeit von ca. 40 ppm erreicht.

In jüngster Zeit wurden an der GSI von Gumberidze *et al.* [61] Messungen der Lyman- $\alpha_1$  Über-

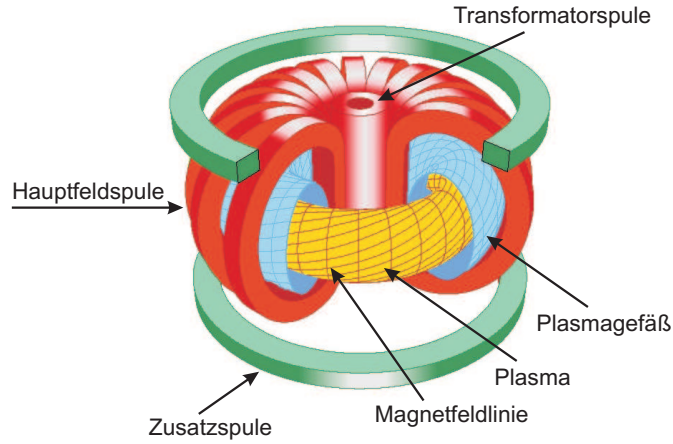
gangsenergie von  $U^{91+}$  durchgeführt, die auch auf auf abgebremste Ionen zurückgreifen. Dazu wurden Röntgenspektren nach radiativem Einfang freier Elektronen in nackte Uranionen am Elektronenkühler des ESR (Experimentier-Speicher-Ring) gemessen. Dies hat den Vorteil, dass die gegenseitige Abstoßung der Ionen aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung und Kollisionen der gespeicherten Ionen mit Restgas Molekülen, welche zu einer Vergrößerung der Größe und der Winkeldivergenz des Strahls führen, durch den Elektronenkühler vermindert werden. Dabei wird die kinetische Energie der Ionen, die eine gewisse Geschwindigkeitsverteilung besitzen, in longitudinaler Richtung durch Kollisionen der heißen Ionen mit den kalten Elektronen, die sich mit gleicher mittlerer Geschwindigkeit wie die Ionen bewegen, verringert. Die Kombination von Elektronenkühlung,  $\theta = 0^\circ$ , wobei  $\theta$  der Beobachtungswinkel zur Ionenstrahlachse ist, und Abbremsen der Ionen von 360 MeV/a.u. auf 43.59 MeV/a.u. haben es ermöglicht die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie mit einer relativen Unsicherheit von ca. 40 ppm zu bestimmen. Dies zeigt das große Potential dieser Methode, insbesondere im Bereich hochgeladener Ionen mit hoher Kernladungszahl  $Z$ .

### 2.1.2 Tokamaks

In den 1950er Jahren wurde damit begonnen, nach Möglichkeiten einer Energiegewinnung aus der kontrollierten Kernfusionsreaktion von Wasserstoff-Isotopen zu forschen. Damit diese kettenreaktionsartig abläuft, muss dabei eine bestimmte Temperatur und Teilchendichte erreicht werden, d.h. die Isotope müssen ein extrem heißes und dichtes Plasma bilden. Die bisher am besten untersuchte Entwicklungslinie von Fusionsreaktoren ist bis heute der Tokamak, ein torusförmiger Fusionsreaktor. Dieser erzeugt und speichert ein ringförmiges („toroidales“) rotierendes Plasma, was durch ein hohes Magnetfeld, das von den suprareitenden Hauptfeldspulen erzeugt wird, im Plasmagefäß eingeschlossen wird (siehe Abb. 2.5). In dieser Konfiguration können die rotierenden Teilchen im Inneren des Torus allerdings mit denen im äußeren Teil des Torus Verwirbelungen bilden. Um diesen Effekt zu vermeiden, müssen die Teilchen zusätzlich zur Rotation eine Drehung innerhalb des Querschnitts des Torus ausführen, d.h. die magnetischen Feldlinien müssen spiralförmig verlaufen. Durch den Einsatz einer zentralen Transformatorspule (Poloidalfeldspule), die wie beim Transformator einen Sekundärstrom im Plasma antreibt, ergänzt durch koaxial mit dem Torus gelegene Zusatzspulen, ergibt sich in Überlagerung mit dem toroidalen Feld der gewünschte spiralförmige Feldverlauf. Da der Strom in der Transformatorspule nicht beliebig hoch und lange ansteigen kann, ist das Tokamak-Plasma gepulst, d.h. es brennt diskontinuierlich. Eine andere Möglichkeit, eine spiralförmige Verdrillung der Magnetfeldlinien zu erreichen, wird im Stellarator genutzt. Torus und Spulen werden selbst so verdrillt, dass auch der poloidale Anteil des Feldes durch die Spulen erzeugt wird, anstatt durch einen im Plasma induzierten Strom wie beim Tokamak.

Durch *Neutralteilcheninjektion*, d.h. Injektion von neutralen Gasatomen in das Plasma, kann die Temperatur des Plasmas durch Stöße mit den neutralen Teilchen erhöht werden. Auf ihrem Weg durch das Plasma werden die Atome durch Elektronenstoß mit den Plasmaelektronen oder durch Ladungsaustausch ionisiert, durch Stöße angeregt und vom Magnetfeld gefangen. Die Linien, die

## 2.1. Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor

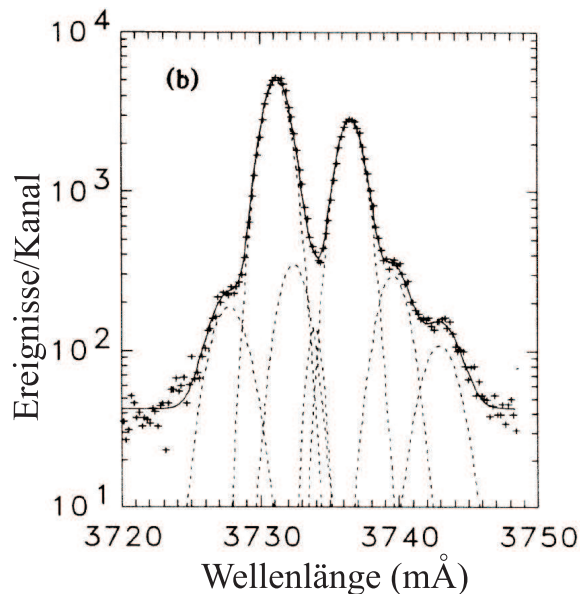


**Abbildung 2.5:** Schematischer Aufbau eines Tokamak (Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching) Ein Plasma (gelb) wird in einem Plasmagefäß (blau) durch eine Hauptfeldspule eingeschlossen (rot) und die Teilchen von der Transformatorspule (Mitte: rot) und den Zusatzspulen (grün) auf verdrehte Magnetfeldlinien (rot) gebracht.

von den angeregten Ionen emittiert werden, können dann wieder spektroskopiert werden. Die Intensität der emittierten Linien ist sehr hoch und röntgenspektroskopische Messungen kommen daher mit geringer Aufnahmezeit aus. Daneben bewegen sich die Ionen mit einer hohen thermischen Geschwindigkeit, jedoch besitzt diese Bewegung keine bevorzugte Richtung, so dass die Doppler-Verschiebung vernachlässigbar klein ist. Ein Überblick über die an Tokamaks durchgeführten Messungen der Lyman- $\alpha$  und  $w$  Übergangswellenlängen findet sich in Tab. 2.3. Im Mittel

Experiment	Tokamak	Ion	Übergang	$\Delta E/E$ (ppm)
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	Ar <sup>17+</sup>	$w$	12
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	Kr <sup>35+</sup>	$w$	23
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	Fe <sup>25+</sup>	$w$	30
Källne <i>et al.</i> [128]	Alcator C (MIT)	Cl <sup>16+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	34
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	K <sup>18+</sup>	$w$	35
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	Sc <sup>20+</sup>	$w$	35
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	Ti <sup>21+</sup>	$w$	35
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	S <sup>15+</sup>	$w$	37
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	V <sup>22+</sup>	$w$	40
Marmar <i>et al.</i> [129]	Alcator C (MIT)	Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	40
Beiersdorfer <i>et al.</i> [64]	Princeton Large Torus	Cr <sup>23+</sup>	$w$	70

**Tabelle 2.3:** Übersicht der Messungen von Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Übergangswellenlängen in hochgeladenen Ionen, welche in einem Tokamak erzeugt wurden.



**Abbildung 2.6:** Spektrum der Lyman- $\alpha$  Linien aufgenommen von Marmar *et al.* am Alcator C Tokamak des MIT. Semi-logarithmische Skala. Die gestrichelten Linien stellen Fits an die Linien des Spektrums dar, wobei 5 dieser Fits auf Satelliten-Linien zurückzuführen sind.

erreichen die Wellenlängenmessungen eine relative Ungenauigkeit von 30 ppm. In Abb. 2.6 ist stellvertretend ein Spektrum der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Ar}^{17+}$  zu sehen wie es 1986 von E.S. Marmar *et al.* am Alcator C Tokamak des Massachusetts Institute of Technology (MIT) aufgenommen wurde. In diesem Spektrum ist der Einfluss von Satelliten-Linien zu erkennen. Die gestrichelten Linien stellen Fits an die Linien des Spektrums dar, wobei 5 dieser Fits auf Satelliten-Linien zurückzuführen sind. Zwar ist der Einfluss der Satelliten-Linien auf die Peakbestimmung der Lyman- $\alpha$  Linien geringer als bei der Rückstoß-Ionen-Methode, dennoch ist die erreichte relative Genauigkeit von 40 ppm für die Wellenlänge der Lyman- $\alpha_1$  Linie und auch für die anderen Messungen unter Verwendung eines Tokamaks zur Erzeugung der gewünschten Ionensorte durch diesen Einfluss begrenzt.

### 2.1.3 Elektronenstrahlionenfallen

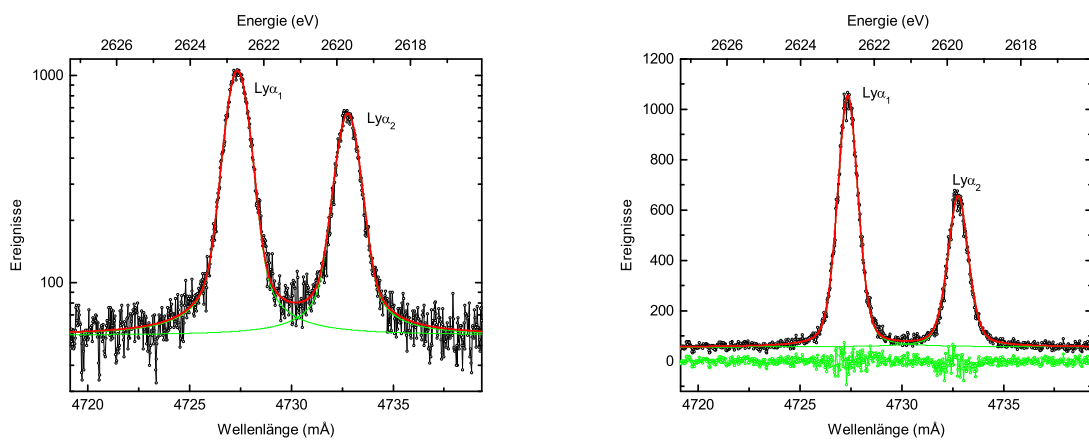
Analog zu der Erzeugung von hochgeladenen Ionen mittels der Beschleunigertechnologie werden die Ionen in Elektronenstrahlionenfallen (engl.: electron beam ion traps, EBITs), wie sie in dieser Arbeit zur Produktion der spektroskopierten Ionen verwendet wurde, mittels Elektronenstoßionisation erzeugt. Der Ladungszustand der Ionen mit Kernladungszahl  $Z$  lässt sich dabei über die Elektronenstrahlenergie einstellen, wobei die Energie, die zum Entfernen eines Elektrons benötigt wird, mindestens dessen Bindungsenergie entsprechen muss. Im Vergleich zur Strahl-Folien-Methode fällt die benötigte Schwerpunktsenergie, die die relativen Bewegungen von Ionen und Elektronen gegeneinander widerspiegelt und für die Ionisation entscheidend ist, um den Faktor  $m_{ion}/m_e$  geringer aus [51]. In diesem Punkt ist daher der technische Aufwand zur Erzeugung

## 2.1. Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor

der Ionen in einer EBIT geringer. Im Vergleich zu den vorher vorgestellten Techniken ruht der Schwerpunkt der Ionen im Laborsystem; für spektroskopische Experimente bedeutet das, dass die relative Genauigkeit der Messungen nicht durch die Doppler-Verschiebung und die daraus resultierenden Probleme in der Datenauswertung limitiert ist. Die Ionen, die in der Falle eingeschlossen sind, besitzen lediglich eine thermische Geschwindigkeit, die zu einer Verbreiterung der Linien führt. Da die Lebensdauer der angeregten Zustände in einer EBIT typischerweise geringer sind als die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen, kann man davon ausgehen, dass in einer EBIT die einfach-angeregten Zustände bevorzugt sind und daher keine Kontamination der Spektren durch Satelliten-Linien vorliegt. Abb. 2.7 belegt diese These. Sie zeigt ein typisches Summenröntgenspektrum der Lyman- $\alpha$  Übergänge in  $S^{15+}$ -Ionen aus den Messungen dieser Arbeit; Kontamination durch Satelliten-Linien ist nicht zu erkennen (siehe auch Kap. 4.4.2). Die geringe Anregungsrate der Ionen erweist sich im Hinblick auf das Satelliten-Problem zwar als hilfreich, führt aber andererseits zu einer geringen Intensität der emittierten Röntgenstrahlung im Vergleich zu den Photonenströmen, die in Experimenten mit anderen Techniken zur Ionenerzeugung erreicht werden.

Die hier besprochenen Vorteile für die Hochpräzisionsröntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen, welche mit Hilfe einer EBIT erzeugt wurden, haben dazu geführt, dass in den letzten Jahren viele Experimente, die diese Technik nutzen, durchgeführt wurden. Eine Übersicht über diese Messungen der Lyman- $\alpha$  und  $w$  Übergangswellenlängen findet sich in Tab. 2.4. Dabei ist hervorzuheben, dass es sich bei den Messungen von Tschischgale *et al.* und Hölzer *et al.* [57, 58] um Messungen handelt, bei denen die Wellenlänge nicht über die Kalibration mit einer Referenzwellenlänge erfolgt, sondern die Wellenlängen absolut mit Hilfe eines Quasimonolithen [130] vermessen werden. In Hinblick darauf, dass die Absolutröntgenwellenlängenmessungen an hochgeladenen Ionen auch Gegenstand dieser Arbeit sind, wird später (siehe Kap. 2.2.3) noch genauer auf dieses Verfahren eingegangen.

Die geforderte relative Ungenauigkeit röntgenspektroskopischer Messungen von Übergangsener-



**Abbildung 2.7:** Linkes Bild: Summenspektrum der in dieser Arbeit spektroskopierten Lyman- $\alpha$ -Übergänge in  $S^{15+}$ . Rechtes Bild: Zeigt dasselbe Spektrum in semi-logarithmischer Darstellung.

Experiment	EBIT	Ion	Übergang	$\Delta E/E$ (ppm)
Chantler <i>et al.</i> [110]	NIST EBIT	V <sup>21+</sup>	$w$	10
MacLaren <i>et al.</i> [66]	LLNL EBIT	Ge <sup>30+</sup>	$w$	21
Hölzer <i>et al.</i> [57]	LLNL EBIT	Mg <sup>11+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	24
Tschischgale <i>et al.</i> [58]	LLNL EBIT	Si <sup>13+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	70

**Tabelle 2.4:** Übersicht der Messungen von Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) Röntgenübergangswellenlängen in hochgeladenen Ionen, welche in einer EBIT erzeugt wurden.

gien an hochgeladenen Ionen von 1-2 ppm lässt sich auf Grund der oben beschriebenen Vor- und Nachteile am besten bei Erzeugung der Ionen mit der Beschleunigungs-Abstreif-Abbrems-Methode oder einer EBIT erreichen. Momentan ist der limitierende Faktor der Beschleunigungs-Abstreif-Abbrems-Methode noch die Tatsache, dass die Ionen dort nicht bei thermischen Geschwindigkeiten wie in einer EBIT vorliegen, d.h. die Doppler-Transformation kann nicht vernachlässigt werden. An der GSI in Darmstadt wurde daher begonnen, die sogenannte HITRAP (Highly charged Ions Trap) Anlage aufzubauen, mit der hochgeladene Ionen, die im GSI Beschleuniger-Komplex erzeugt und auf Energien von ca. 3 MeV/a.u. abgebremst wurden, in Penning-Fallen eingefangen und auf 10 eV oder sogar 4 K, der Temperatur der mit dem supraleitenden 6-Tesla-Magneten verbundenen Umgebung, gekühlt werden können.

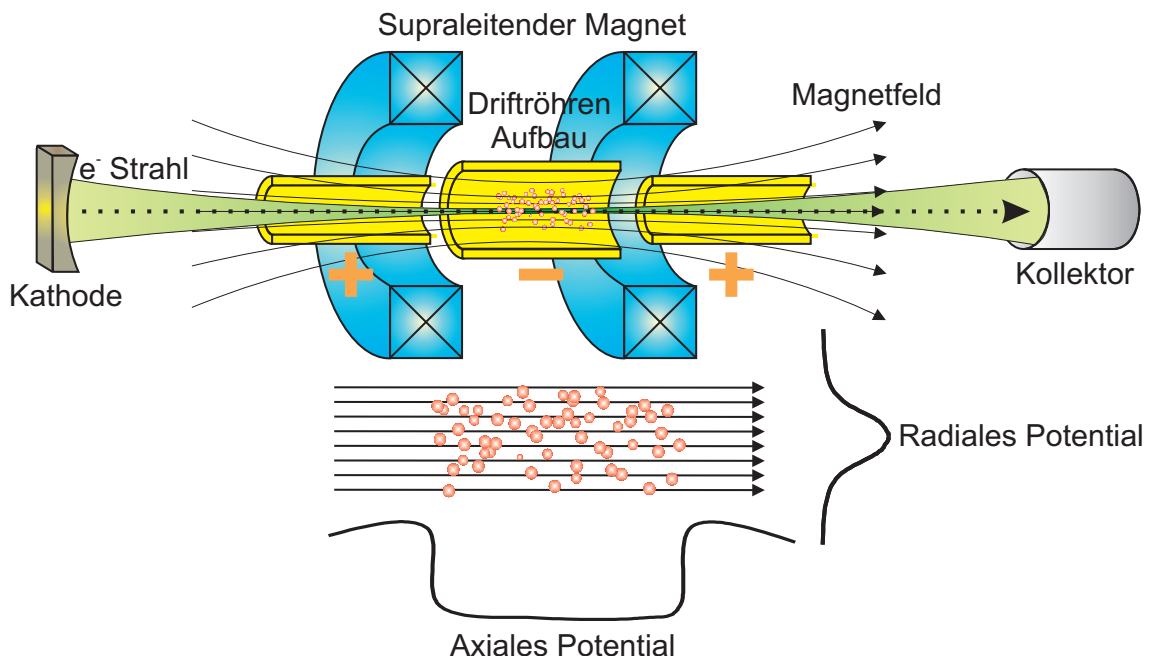
### Funktionsweise einer EBIT und Parameter der Heidelberg- und der FLASH-EBIT

Eine Elektronenstrahlionenfalle setzt sich vereinfacht gesehen aus vier Komponenten zusammen: der Elektronenkanone, den zylindrischen Fallenelektroden (Driftröhren), dem supraleitenden Magneten sowie dem Elektronenkollektor (siehe Abb. 2.8) [32]. Die Elektronen, die aus der Bariumoxid-Kathode der auf negativem Potential liegenden Elektronenkanone austreten, werden durch eine Fokuselektrode gebündelt und von der positiven Anode angezogen. Die Elektronen werden durch eine relativ zur Elektronenkanone positive Spannung an den Driftröhren auf einige hundert eV bis einige hundert keV beschleunigt. Der supraleitende Magnet in Helmholtz-Konfiguration, der bei der Temperatur des flüssigen Heliums von 4.2 K arbeitet, erzeugt ein Magnetfeld mit einer Stärke von bis zu 8 Tesla. Die axial ins Magnetfeld eintretenden Ionen werden durch die Magnetfeldlinien ins Fallenzentrum geführt, wobei sich die Stromdichte des Elektronenstrahls in Richtung der Falle auf  $10^4$  A/cm<sup>2</sup> erhöht, da die Magnetfeldliniendichte in dieser Region besonders hoch ist. Der Durchmesser des Elektronenstrahls in der Fallenmitte beträgt ca. 60  $\mu$  m. Der Elektronenstrahl passiert die Fallenregion und wird im Elektronenkollektor typischerweise auf die Energie abgebremst, welche die Elektronen allein durch das Potential der Elektronenkanone aufgenommen haben. Durch ein differentiell gepumptes Injektionssystem gelangen Gasatome, die einem Gas entstammen oder mittels eines Ofens aus einem Festkörper erzeugt wurden, in das Fallenvolumen. Beim Aufeinandertreffen von Strahlelektronen und Atomen kommt es zur sequentiellen Stoßionisation der Atome, sobald die Elektronenstrahlenergie die Bindungsenergie der jeweiligen



## 2.1. Erzeugung hochgeladener Ionen im Labor

Elektronen übersteigt. Die Ionen werden durch zwei Prozesse in der Falle gefangen: Zum einen führt die hohe negative Raumladung des Elektronenstrahls dazu, dass die Ionen, sobald sie in radialer Richtung die Falle verlassen würden, wieder in den Elektronenstrahl zurückgezogen werden. Die Ionen sind in radialer Richtung gefangen. Zum anderen lässt sich an die Driftröhren ein veränderbares elektrostatisches Potential anlegen, so dass die Ionen in axialer Richtung gefangen werden. Die Elektronen werden durch den Elektronenstrahl weiter und weiter ionisiert, solange die Elektronenstrahlenergie größer als die Energie ist, die zum Entfernen des nächsten Elektrons vonnöten wäre. Durch Stöße der Strahlelektronen mit den Ionen können die Elektronen der Ionen auch in höhere Niveaus angeregt werden und unter Emission von Photonen in niedrigere Zustände übergehen. Die emittierten Photonen lassen sich dann spektroskopieren. Die so erzeugten Ionen können sowohl mit Strahlelektronen rekombinieren als auch Elektronen der Atome durch Ladungsaustausch einfangen, wodurch sich ihr Ladungszustand verringert. Nach einer gewissen Zeit, die abhängig von der Elektronenstrahlenergie, der Stromdichte und dem Injektionsdruck ist, stellt sich ein Gleichgewicht zwischen diesen Zuständen ein. Bei den leichten bis mittelschweren Ionen, die in dieser Arbeit untersucht wurden, sind die Rekombinationsprozesse verglichen mit der Ionisation unterdrückt, so dass sich der Ladungszustand der in der Falle gefangenen Ionen durch Wahl der Elektronenstrahlenergie festlegen lässt. Die Extraktion der Ionen durch den Kollektor ist für Experimente möglich, die z.B. die Dynamik von Ion-Atom-Stößen [131] oder die Wechselwirkung hochgeladener Ionen mit Festkörpern [132–134] untersuchen.



**Abbildung 2.8:** Funktionsprinzip einer EBIT. Der Elektronenstrahl wird in Richtung der neun Driftröhren (hier sind nur 3 dargestellt) beschleunigt und vor dem Kollektor abgebremst. Radial werden die durch Stoßionisation der injizierten Atome mit den Strahlelektronen erzeugten Ionen durch die negative Raumladung des Elektronenstrahls, in axialer Richtung durch elektrostatische Potentiale an den Driftröhren in der Falle gehalten.

EBIT	Elek.-En.	Elek.-St.	Fall. (axial)	Fall. (radial)	Mag.-F.	Erz.-Ionen
Heidelberg-EBIT	100 keV	530 mA	38.5 mm	$\sim 60 \mu\text{m}$	8 T	z.B. Ba <sup>78+</sup>
FLASH-EBIT	30 keV	500 mA	50 mA	$\sim 60 \mu\text{m}$	6 T	z.B. Fe <sup>26+</sup>

**Tabelle 2.5:** Übersicht über wichtige Kenndaten der Heidelberg- und der Flash-EBIT im momentanen Zustand. Elek.-En.: Maximale Elektronenstrahlenergie; Elek.-St.: Maximaler Elektronenstrahlstrom; Fall. (axial): Axiale Fallenlänge; Fall. (radial): Radiale Fallenlänge; Mag.-F.: Maximales Magnetfeld; Erz.-Ionen: Ionen, die den höchsten bisher erzeugten Ladungszustand aufweisen.

Für die Messungen dieser Arbeit wurden - wie in Kap. 3.3.4 noch näher besprochen wird - zwei verschiedene EBITs zur Erzeugung der Ionen verwendet: Die Heidelberg- und die FLASH (Free electron laser in Hamburg)-EBIT. Bei der FLASH-EBIT handelt es sich um eine portable EBIT, die am Max-Planck-Institut in Heidelberg gebaut wurde, um damit resonante Laseranregungsexperimente am FLASH [36] sowie Photoionisationsexperimente am BESSY II (Berliner Elektronen-Speicherring Gesellschaft für Synchrotronstrahlung) in Berlin [135, 136] durchzuführen. Zur Zeit der hier vorgestellten Messungen befand die EBIT sich am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg. Die wichtigsten Kenndaten der beiden EBITs sind in Tab. 2.5 zusammengestellt. Besonders wichtig ist hier, dass die axiale Ausdehnung der Ionenwolke, d.h. parallel zum Elektronenstrahl, ca. 40 mm beträgt; wird das in dieser Arbeit verwendete Kristall-Röntgenspektrometer mit ebenem Kristall daher unter  $90^\circ$ , d.h. senkrecht, zum Elektronenstrahl aufgestellt, so erscheint die Ionenwolke vom Kristall aus gesehen ausgedehnt, d.h. als eine Aneinanderreihung von Punktquellen. Die sich daraus ergebenden Schwierigkeiten für das Experiment und die Datenanalyse werden eingehend in Kap. 3.3.1 behandelt. Betrachtet man die Wolke dagegen unter  $0^\circ$ , d.h. entlang des Elektronenstrahls, so ist die Größe der Ionenwolke lediglich durch die radiale Ausdehnung der Ionenwolke von ca.  $60 \mu\text{m}$  bestimmt. Die Anzahl der Punktquellen in dieser  $60 \mu\text{m}$ -Wolke ist bei gleichem Abstand der Punktquellen wesentlich geringer als für die 40mm-Wolke. Daraus ergeben sich Vorteile für Röntgenübergangswellenlängenmessungen wie sie in dieser Arbeit durchgeführt wurden (siehe auch Kap. 3.3.4).

Für die Messungen dieser Arbeit wurde an der Heidelberg-EBIT an die Kathodene ein Potential von  $-1500 \text{ V}$  angelgt, für die FLASH-EBIT  $-2000 \text{ eV}$  angelegt. Der Elektronenstrahlstrom betrug zwischen 360-450 mA, um eine optimale Zählrate der Röntgenstrahlung zu gewährleisten. Das angelegte Potential an den Driftröhren links und rechts der zentralen Elektrode zum axialen Einfang der Ionen variierte zwischen 0 und 250 V. Zur Erzeugung der S<sup>14+</sup>- bzw. der S<sup>15+</sup>-Ionen wurden 7.5 kV, für die Ar<sup>16+</sup>-, Ar<sup>17+</sup>-, Fe<sup>24+</sup>- und Fe<sup>25+</sup>-Ionen 9.5 kV an die Driftröhren angelegt. Der Injektionsdruck des verwendeten Argongases, des Schwefelkohlenstoffs und des Eisenpentacarbonyls, die beide einen großen Dampfdruck von 400 bzw. 30 mbar aufweisen, wurde dabei zwischen  $2\text{-}4 \cdot 10^{-8}$  mbar geregelt. Die Falle wurde alle 10 s geleert, um Akkumulation von Barium- und Wolframionen aus der Kathode der Elektronenkanone im Fallenzentrum zu vermeiden. Für die Ausrichtung des Spektrometers wurde der  $2s^2 2P_{3/2} \rightarrow 2s^2 2P_{1/2}$  (M1) Übergang in borartigem Argon [137] bei einer Elektronenstrahlenergie von 970 V, einem Strahlstrom von 100 mA und einer Spannung von 100 V an den Driftröhren links und rechts der zentralen Elektrode

verwendet.

## 2.2 Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen

Hochpräzisionsröntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen, wie auch die in dieser Arbeit vorgestellten Messungen, setzt den Einsatz von Messtechniken voraus, die eine extreme Genauigkeit der Messung ermöglichen. Diese sind Gegenstand des folgenden Kapitels.

Es gibt eine große Anzahl von Detektoren um Röntgenstrahlung zu beobachten. Dazu zählen die *energie-* und die *wellenlängendispersiven* Instrumente. Zur ersteren Gruppe gehören die Proportionalzähler, die Szintillatoren, die Halbleiterdetektoren [51] und die Mikrokalorimeter. Zur zweiten Gruppe Reflexions- und Transmissionsgitter sowie Kristallspektrometer (Transmission und Reflexion mit ebenen und gekrümmten Kristallen) - wie auch das in dieser Arbeit eingesetzte Kristallspektrometer mit ebenem Kristall - in verschiedensten Anordnungen und Geometrien. Bei den energiedispersiven Verfahren wird zunächst ein Photon absorbiert. Die Energie, die dem System dadurch zugeführt wird, wird dann in eine andere Größe umgewandelt. In Zukunft werden in der Hochpräzisionsröntgenspektroskopie vermehrt Mikrokalorimeter zum Einsatz kommen. Dieses 1982 von Moseley *et al.* [138] entwickelte Instrument basiert auf der Messung von Wärme anstatt der üblichen Messung von Ladung. Es besteht aus einem Absorber, der mit einem thermischen Bad über einen thermischen Kontakt mit geringer Wärmeleitfähigkeit verbunden ist, das sich bei einer Temperatur von einigen 10 mK befindet. Das Röntgenstrahlen-Mikrokalorimeter kann die Temperaturveränderung, die durch ein auftreffendes Photon entsteht, leicht detektieren, da seine Wärmekapazität bei diesen niedrigen Temperaturen sehr gering ist. Der Absorber heizt sich dabei auf, gibt seine Wärme aber dann langsam wieder an das Wärmebad ab und erreicht so seinen Ausgangszustand. Die Änderung der Temperatur des Absorbers ist in diesem Prozess direkt proportional zur Photonenenergie. Ein Mikrokalorimeter kombiniert hohe Absorptionseffizienz mit großer Energieauflösung, die besonders durch die niedrige Temperatur, bei der das Mikrokalorimeter operiert, begünstigt ist. So wurden an der LLNL-EBITs in Livermore bereits die Spektren von Ar-, Kr-, Xe- und Fe-Ionen im Bereich einer Photonenenergie von 0.2-10 keV mit Hilfe eines Mikrokalorimeters aufgenommen und identifiziert [139]. A. Fleischmann *et al.* [140] haben bereits eine Auflösung von 3.4 eV bei einer Photonenenergie von 5.9 keV demonstriert. Allerdings ist die heute erreichbare Zählrate unter Verwendung eines Mikrokalorimeters noch dadurch limitiert, dass die Zeitspanne, bis das thermische Gleichgewicht zwischen Absorber und Bad erreicht ist, einige 100  $\mu$ s beträgt. Bei der Konstruktion eines Mikrokalorimeters ist die Größe des Absorbermaterials nicht beliebig zu wählen, da das Absorbermaterial eine geringe Masse benötigt, um Unterschiede in der Temperatur effizient zu messen. In letzter Zeit wurden daher große Anstrengungen unternommen, um große Anordnungen (Arrays) von solchen Detektoren zu bauen. Eine Kollaboration mit der Gruppe von C. Enss [141] soll es ermöglichen, solche Mikrokalorimeter auch in Messungen an der Heidelberg-EBIT zum Einsatz zu bringen. Diese erreichen bereits ein Auflösungsvermögen von 2.8 eV. Auch in der Astrophysik kommen diese Instrumente vermehrt zum Einsatz, so z.B. bei der internationalen Röntgenbeobachtungsmission (IXO), einer Mission von NASA und ESA.

### 2.2.1 Beugung von Röntgenstrahlung

Die Messmethode aller verschiedenen Typen wellenlängendispersiver Instrumente, d.h. auch aller Arten von Kristallspektrometern (mit ebenen und gekrümmten Kristallen), gehen im Gegensatz zu den in Kap. 2.2 erwähnten energiedispersiven Instrumenten, die auf der Absorption eines Röntgenphotons und der anschließenden Umwandlung seiner Energie in andere physikalische Größen beruhen, auf den physikalischen Prozess der Beugung zurück. Röntgenstrahlung, die auf einen Kristall trifft, durchdringt diesen zwar zum großen Teil ungehindert, allerdings kann man auch beobachten, dass Strahlungsanteile durch den Kristall abgelenkt werden - ein Phänomen, das man als Röntgenbeugung bezeichnet. Bringt man hinter dem Kristall einen geeigneten Detektor an, z.B. eine Fotoplatte, um die abgelenkten Anteile der Strahlung sichtbar zu machen, ist ein charakteristisches Muster zu erkennen. Die Ursache für diese Röntgenbeugung ist in der Periodizität des Kristallgitters, d.h. der periodischen Anordnung der Atome in diesem Kristallgitter zu suchen. So wird eine Reflexion der Röntgenstrahlung an den Ebenen des Kristallgitters, den sogenannten Netz- oder Gitterebenen, die sich wie halbdurchlässige Spiegel verhalten, möglich. Ein einfachen Weg, das sogenannte Bragg-Gesetz, das diese Reflexion beschreibt, herzuleiten entnimmt man Abb. 2.9. Die Abbildung zeigt zwei äquidistante Ebenen mit Abstand  $d$ , dem Gitterabstand. Fällt Röntgenstrahlung auf den Kristall, so kann sie durch diese Ebenen unter bestimmten Bedingungen reflektiert werden. Während ein Teil der Röntgenstrahlung dabei an der ersten Ebene reflektiert wird, wird ein anderer Teil erst an der zweiten Gitterebene reflektiert. Da beide Teile der Röntgenstrahlung unterschiedliche Wegstrecken zurücklegen müssen, kann es zu Interferenzerscheinungen kommen. Die Differenz der Wegstrecken  $\Delta$  ist dabei durch  $\Delta = 2d \sin \theta$  bestimmt, wie sich der Abbildung entnehmen lässt. Daher lässt sich Reflexion nur dann beobachten, wenn die Bragg-Gleichung erfüllt ist:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4)$$

Durch die Bragg-Gleichung werden also der Abstand  $d$  zwischen parallelen Gitterebenen, die Wellenlänge  $\lambda$ , der Winkel zwischen Röntgenstrahl und Gitterebenen  $\theta$ , der sogenannte Bragg-Winkel, und die natürliche Zahl  $n$ , die die Beugungsordnung angibt, in Beziehung gesetzt. Erklären lassen sich das Phänomen der Röntgenbeugung und das dazugehörige Bragg-Gesetz auch im Wellenbild. Das elektromagnetische Feld der einfallenden Röntgenstrahlung regt die Elektronen der Atome

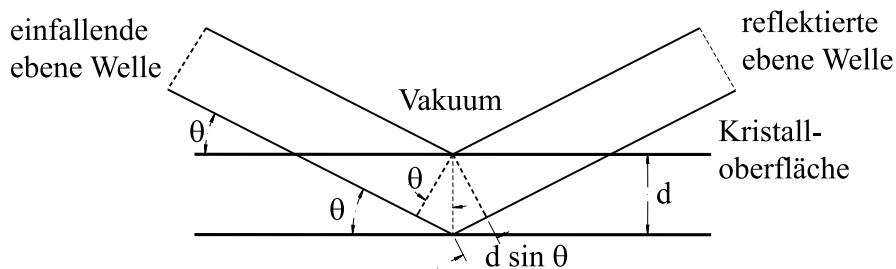


Abbildung 2.9: Schematische Darstellung der Beugung von Röntgenstrahlung an einem Kristallgitter [142].

## 2.2. Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen

zu erzwungenen Schwingungen an. Diese beginnen selbst Strahlung in Form von kugelförmigen Wellen abzustrahlen. Kommt es zu einer Überlagerung dieser kugelförmigen Wellen, so können, da die Abstände im Kristallgitter, d.h. der Abstand  $d$ , und die Wellenlänge der Röntgenstrahlung von ähnlicher Größenordnung sind, Interferenzerscheinungen auftreten. Ist die Bragg-Gleichung bei gegebener Wellenlänge  $\lambda$  der Röntgenstrahlung für eine Schar von parallelen Gitterebenen erfüllt, d.h. trifft die Röntgenstrahlung unter dem Bragg-Winkel auf den Kristall, kommt es zu konstruktiver Interferenz der bei der Beugung an den Elektronenhüllen entstehenden Kugelwellen. Makroskopisch entsteht der Eindruck einer Reflexion der Röntgenstrahlung am Kristall. Liegt der Fall nicht ausschließlich konstruktiver Interferenz vor, so gibt es aufgrund der hohen Zahl von Atomen in einem Kristall statistisch zu jedem Atom immer ein zweites, das die gebeugte Welle des ersten genau auslöscht, so dass keine Reflexion mehr beobachtet werden kann. Dies ist auch die Situation in nicht-kristallinem Material; unabhängig von der Einstrahlrichtung des Röntgenstrahls ist dort keine Reflexion zu beobachten.

Berücksichtigt man die Brechung der Röntgenstrahlung an der Kristalloberfläche, so ändert sich Gl. 2.4 wie in Abb. 2.10 dargestellt zu:

$$n\lambda' = 2d \sin \theta' . \quad (2.5)$$

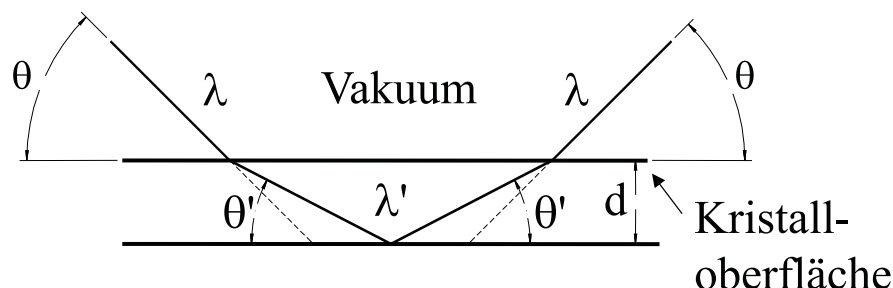
$\lambda'$  ist dabei die Wellenlänge innerhalb des Kristalls und  $\theta'$  der Winkel zwischen einer Netzebene und der Röntgenstrahlung im Kristall. Für die Brechzahl  $\mu$  der Röntgenstrahlung gilt dabei folgende Beziehung:

$$\mu = \frac{\lambda}{\lambda'} = \frac{\cos \theta}{\cos \theta'} = 1 - \delta . \quad (2.6)$$

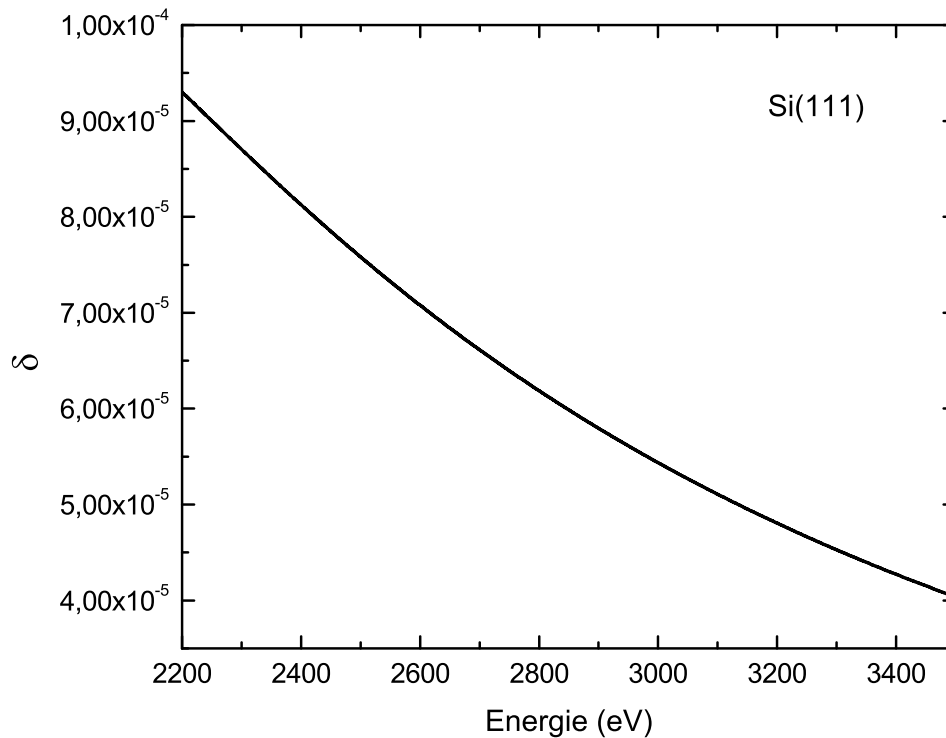
Nach Umformen und Taylorentwicklung erhält man damit das „neue“ Bragg-Gesetz

$$n\lambda = 2d \sin \theta \left( 1 - \frac{\delta}{\sin^2 \theta} \right) = 2d \sin \theta_f , \quad (2.7)$$

das gilt, solange man berechtigterweise davon ausgehen kann, dass Absorption der Röntgenstrahlung im Kristall keine große Rolle spielt [144].  $\theta_f$  ist ein fiktiver Winkel, der es ermöglicht, das Bragg-Gesetz analog zu Gl. 2.4 zu formulieren. Die Differenz  $\Delta$  zwischen dem ursprünglichen



**Abbildung 2.10:** Schematische Darstellung der Beugung von Röntgenstrahlung an einem Kristallgitter unter Berücksichtigung der Brechung [51]. Beim Eintritt in den Kristall ändern sich Wellenlänge und Ausbreitungsrichtung der Röntgenstrahlung aufgrund der geringeren Phasengeschwindigkeit im Kristall.



**Abbildung 2.11:** Abhängigkeit des mit der Brechzahl  $\mu$  über  $\delta = 1 - \mu$  verknüpften Wertes  $\delta$  von der Energie der einlaufenden Röntgenstrahlung im Bereich zwischen 2200-3500 eV unter Verwendung eines Si(111)-Kristalls.

Ion	Übergang	Energie (eV)	$\delta \cdot 10^5$
S <sup>14+</sup>	$w$	$\sim 2461$	7.79
S <sup>15+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 2623$	6.97
Ar <sup>16+</sup>	$w$	$\sim 3140$	4.47
Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 3323$	4.98
Fe <sup>24+</sup>	$w$	$\sim 6701$	1.10
Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 6973$	1.01

**Tabelle 2.6:** Übersicht der mit der Brechzahl  $\mu$  über  $\delta = 1 - \mu$  verknüpften Werte  $\delta$  für Röntgenstrahlung mit Energien der Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  ( $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$ ) Übergänge in verschiedenen Ionen. Für die Schwefel- und Argonionen ist der Wert für den in der Wellenlängenmessung verwendeten Si(111)-Kristall angegeben, für die Eisenionen bezieht sich die Angabe auf den eingesetzten Si(220)-Kristall. Werte aus [143].

Bragg-Winkel  $\theta$  und dem fiktiven Winkel  $\theta_f$  lässt sich dann für kleine Winkel zu  $\Delta\theta \sim 5 \cdot 10^{-5} / \theta$  abschätzen. Dies macht wiederum deutlich, dass für Hochpräzisionswellenlängenmessungen an

hochgeladenen Ionen, wie sie in dieser Arbeit durchgeführt wurden, eine Berücksichtigung der Brechzahlen in der Datenauswertung unbedingt erforderlich ist. Abb. 2.11 zeigt den mit der Brechzahl  $\mu$  über  $\delta = 1 - \mu$  verknüpften Wert  $\delta$  als Funktion der Energie der einlaufenden Röntgenstrahlung im Bereich zwischen 2200-3500 eV unter Verwendung eines Si(111)-Kristalls, welche den Abfall von  $\delta$  mit der Energie erkennen lässt. Tab. 2.6 schließlich gibt eine Übersicht über die in dieser Arbeit verwendeten Werte dieser  $\delta$ .

### 2.2.2 Kristallspektrometer

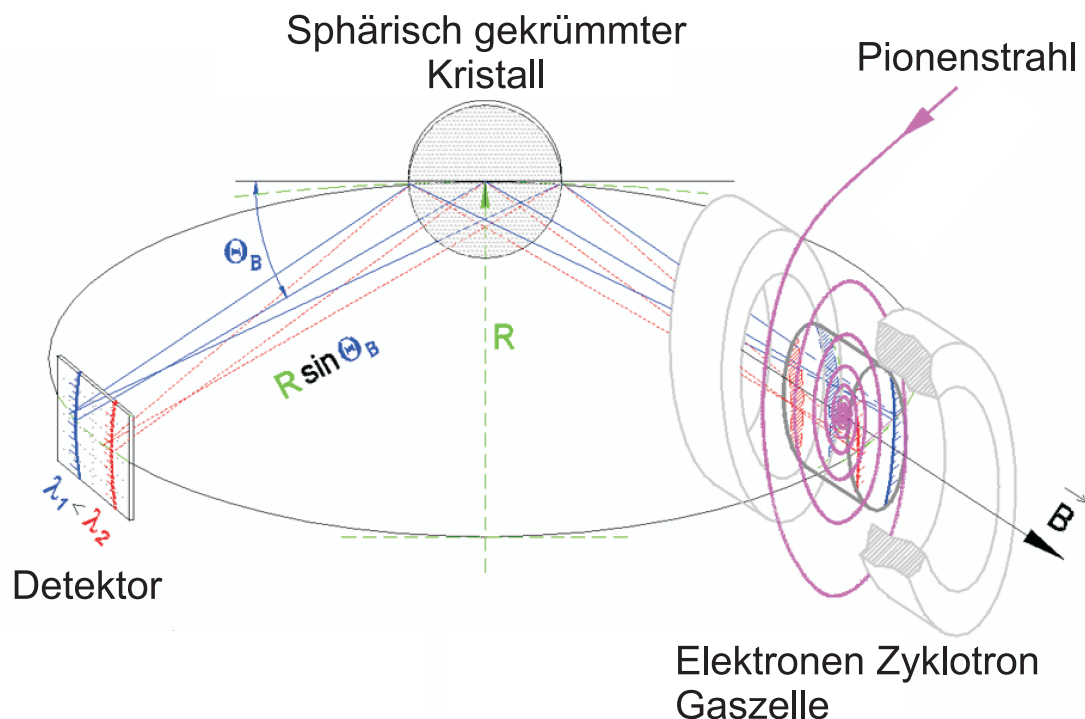
Die Wellenlänge  $\lambda$  der Röntgenstrahlung kann nach ihrer Reflexion durch den Kristall mit dem Gitter-Abstand  $d$  unter dem Bragg-Winkel  $\theta$  über die Messung dieses Bragg-Winkels bestimmt werden, wobei oft eine Referenzlinie zur Kalibration der winkeldispersiven Achse des Spektrometers eingesetzt wird. Daneben ist es möglich, einen positionsempfindlichen Detektor (engl.: position sensitive detector, PSD) oder photographische Techniken einzusetzen, um die örtliche Position des detektierten Röntgenphotons mit der einer Referenzlinie zu vergleichen und so die Wellenlänge der beobachteten Röntgenstrahlung zu ermitteln.

Um bei röntgenspektroskopischen Messungen die Linien der Spektren räumlich eindeutig trennen zu können, damit eine eindeutige Identifikation und Wellenlängenbestimmung der Linien möglich ist, muss das Auflösungsvermögen des eingesetzten Instruments möglichst hoch sein. In der Optik definiert das Rayleigh-Kriterium, wann zwei Lichtquellen als aufgelöst betrachtet werden können. Analog lassen sich in der Röntgenspektroskopie zwei Linien dann noch gerade getrennt voneinander auflösen, wenn sie mindestens um ihre Halbwertsbreiten getrennt sind, d.h. wenn sie nicht innerhalb ihrer Halbwertsbreiten überlappen. Kristallspektrometer haben ein typisches Auflösungsvermögen der Wellenlänge oder Energie von  $E/\Delta E = \lambda/\Delta\lambda \approx 1500$ , welches sehr hoch ist, insbesondere im Vergleich zu z.B. konventionellen Germanium-Detektoren mit  $E/\Delta E = \lambda/\Delta\lambda \approx 50$ . Dieses hohe Auflösungsvermögen kommt dadurch zustande, dass wie im letzten Kapitel 2.2.1 beschrieben, Reflexion der Röntgenstrahlung nur für Röntgenstrahlung mit solcher Einfallrichtung stattfinden kann, die zum Bragg-Winkel  $\theta$  in einem Winkelbereich  $\Delta\theta$  korrespondiert. Röntgenphotonen, die nicht in diesem Raumwinkel einfallen, sind für die Detektion verloren, da sie destruktiv interferieren. Das hohe Auflösungsvermögen ist einerseits ein Vorteil, da es die eindeutige räumliche Trennung und damit die Hochpräzisionsröntgenspektroskopie ermöglicht. Andererseits führt der kleine Raumwinkel, in dem Röntgenstrahlung reflektiert werden kann, zu einem schwachen Röntgensignal. Dieser Nachteil kann noch dadurch verstärkt werden, dass die Reflektionsposition der Röntgenstrahlen auf dem Kristall präzise definiert sein muss, um aus dem Experiment den Bragg-Winkel und damit die Wellenlänge der untersuchten Strahlung präzise genug bestimmen zu können. Um diese Position mit der gewünschten Genauigkeit ermitteln zu können, wird der einfallende Röntgenstrahl (oft durch Blenden, Schlitze) kollimiert. Röntgenspektrometer, deren Kristalle gekrümmt sind, und analog eines fokussierenden Spiegels wirken, können den Raumwinkel der detektierten Röntgenstrahlung erhöhen und so diesem Problem entgegenwirken. Aber auch ein Aufbau mit ebenem Kristall ohne Anwendung von Kollimation des einfallenden Röntgenstrahls kann zu einer Vergrößerung des detektierten Röntgensignals

im Vergleich zu der Methode führen, die auf Kollimation zurückgreift, so dass diese Technik, wie in dieser Arbeit geschehen, für die Hochpräzisionsröntgenspektroskopie eingesetzt werden kann.

### Kristallspektrometer mit gekrümmtem Kristall: Johann-Geometrie

Die gewöhnlichste Geometrie für ein Kristallspektrometer mit gekrümmtem Kristall ist die sogenannte *Johann-Geometrie* [145] (siehe Abb. 2.12). Ein gekrümmter Kristall, der einen Krümmungsradius  $R$  besitzt, wird wie die Ionenquelle, in diesem Fall eine Elektronen-Zyklotron-Resonanz-Ionen-Quelle (engl.: electron cyclotron resonance source, ECR) am Paul-Scherer-Institut in Villingen, und der Detektor auf dem sogenannten Rowald-Kreis mit Radius  $R/2$  angeordnet. Die Krümmung des Kristalls in dieser Konfiguration ist entlang seiner dispersiven Achse. Er fokussiert Photonen bei der oben beschriebenen Anordnung auf einen bestimmten Punkt des oben erwähnten Rowland-Kreises. Es wird nur eine kleine Bandbreite von Röntgenstrahlung bestimmter Wellenlängen reflektiert, aber für diese ist die Bragg-Bedingung auf der gesamten Kristalloberfläche erfüllt. Dadurch wird die Effizienz der Reflektion für die zu beobachtende Röntgenstrahlung erhöht und der Photonenfluss maximiert. Dies macht im Vergleich zu der später besprochenen Kristallgeometrie mit ebenem Kristall eine Raumwinkelerhöhung um den Faktor zwischen gesamter Kristalloberfläche und dem Flächenausschnitt des Kristalls, der bei einer Kristallanordnung mit



**Abbildung 2.12:** Schematische Darstellung eines Kristallspektrometers in Johann-Geometrie an einer Elektronen-Zyklotron-Resonanz-Ionen-Quelle der pionischen Wasserstoff Kollobaration am Paul-Scherer-Institut (PSI) in Villingen. (Modifiziert aus [146].)



ebenem Kristall genutzt werden kann, aus und stellt einen Vorteil für Experimente der Hochpräzisionsröntgenspektroskopie dar, bei denen intensitätsschwache Photonenquellen, wie z.B. EBITs, verwendet werden. Ein Nachteil bei der Verwendung eines gekrümmten Kristalls entsteht dadurch, dass die Krümmung des Kristalls während des Experiments nicht so genau verändert werden kann, dass ein großer Bereich von Bragg-Winkeln und damit von Röntgenwellenlängen zugänglich gemacht werden kann. Beim Einsatz von Ionenquellen, die eine größere räumliche Ausdehnung besitzen, wie z.B. ECRs, ist der Bereich der zugänglichen Wellenlängen durch die Tatsache vergrößert, dass unterschiedliche Röntgenwellenlängen Bragg-reflektiert werden können, die aus unterschiedlichen Punktquellen emittiert werden. Bei schwachen Photonenquellen wie EBITs lässt sich der Messbereich auf Kosten des Photonenflusses vergrößern, wenn man die Ionenquelle leicht innerhalb des Rowland Kreises positioniert. In jedem Fall muss bei der Verwendung von Referenzlinien zur Bestimmung der Dispersionsrelation des Detektors darauf geachtet werden, dass deren Wellenlänge nahe genug an der Wellenlänge der spektroskopierten Linien liegt. Spektrometer mit gekrümmten Kristall in Johann-Geometrie wurden unter anderem von Beyer *et al.* [53] bzw. von Deslattes *et al.* [147] bei der Bestimmung der Lyman- $\alpha_1$  Übergangswellenlänge in wasserstoffartigem  $\text{Ar}^{17+}$  bzw.  $\text{Cl}^{16+}$ , von Deslattes *et al.* [109] bzw. Beiersdorfer *et al.* [64] bzw. Chantler *et al.* [110] bei der Messung der  $w(1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$  Übergangswellenlänge in  $\text{Ar}^{16+}$  bzw. in verschiedenen heliumartigen Ionen bzw. in  $\text{V}^{21+}$  eingesetzt.

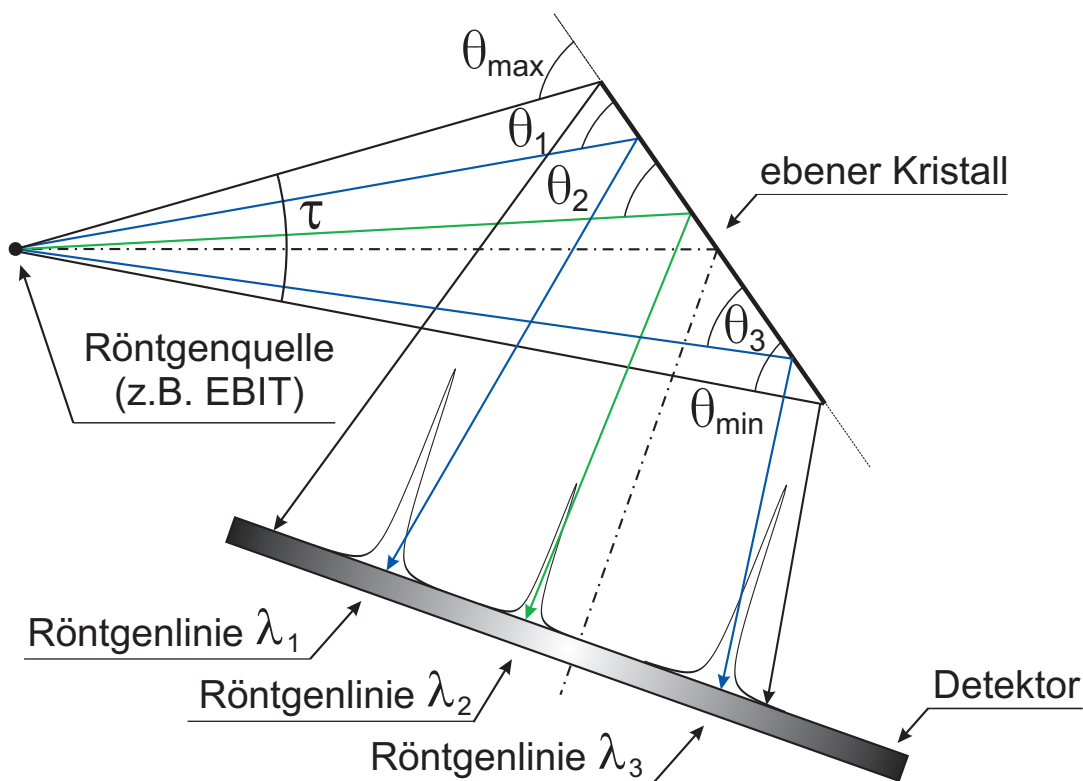
Röntgenspektrometer mit gekrümmten Kristallen in Johann-Geometrie werden auch für andere Experiment-Typen eingesetzt. Im dargestellten Experiment (siehe Abb. 2.12) der pionischen Wasserstoff Kollaboration [148] am PSI wurden Pionen in einer Zyklotron Falle fokussiert und in ein Wasserstoff Target eingefangen [149]. Die dabei frei werdende Röntgenstrahlung wird wie oben beschrieben mit Hilfe eines gekrümmten Kristalls wellenlängensepariert und von einem Array von 6 CCDs (engl.: charged coupled devices) detektiert [42]. Ziel der Experimente war unter anderem die Bestimmung der elementaren Streulängen im Pion-Nukleon System, die seit Jahren Gegenstand theoretischer und experimenteller Untersuchungen im physikalischen Bereich der starken Wechselwirkung sind. Eine direkte experimentelle Bestimmung kann durch eine hochauflösende Spektroskopie eines Lyman-Überganges im pionischen Wasserstoff erfolgen.

Eine weitere Geometrie für ein Kristallspektrometer mit gekrümmtem Kristall ist die sogenannte *von-Hámos-Geometrie* [150, 151], bei der der Kristall im Vergleich zur Johann-Geometrie entlang seiner nicht-dispersiven Achse gekrümmt ist. Diese Geometrie wurde bei den Messungen von Marmar *et al.* [129] bzw. Källne *et al.* zur Bestimmung der Lyman- $\alpha$  Übergangsenergie in  $\text{Ar}^{17+}$  bzw.  $\text{Cl}^{16+}$  sowie von MacLaren *et al.* [66] bei der Spektroskopie der  $w(1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$  Übergangsenergie in  $\text{Ge}^{30+}$  eingesetzt. Eine detaillierte Beschreibung findet sich in [51].

### **Kristallspektrometer mit ebenem rotierbarem Kristall**

Neben den Kristallspektrometern mit gekrümmtem Kristall gibt es Kristallspektrometer mit ebenen Kristallen, deren Herzstück ein ebener, hochpolierter Kristall ist. Der Gitterabstand des Kristallgitters lässt sich hochpräzise vermessen und die Orientierung der Gitterebenen bei der Fertigung im Idealfall so wählen, dass sie parallel zur Oberfläche des Kristalls liegen. Abb. 2.13 stellt

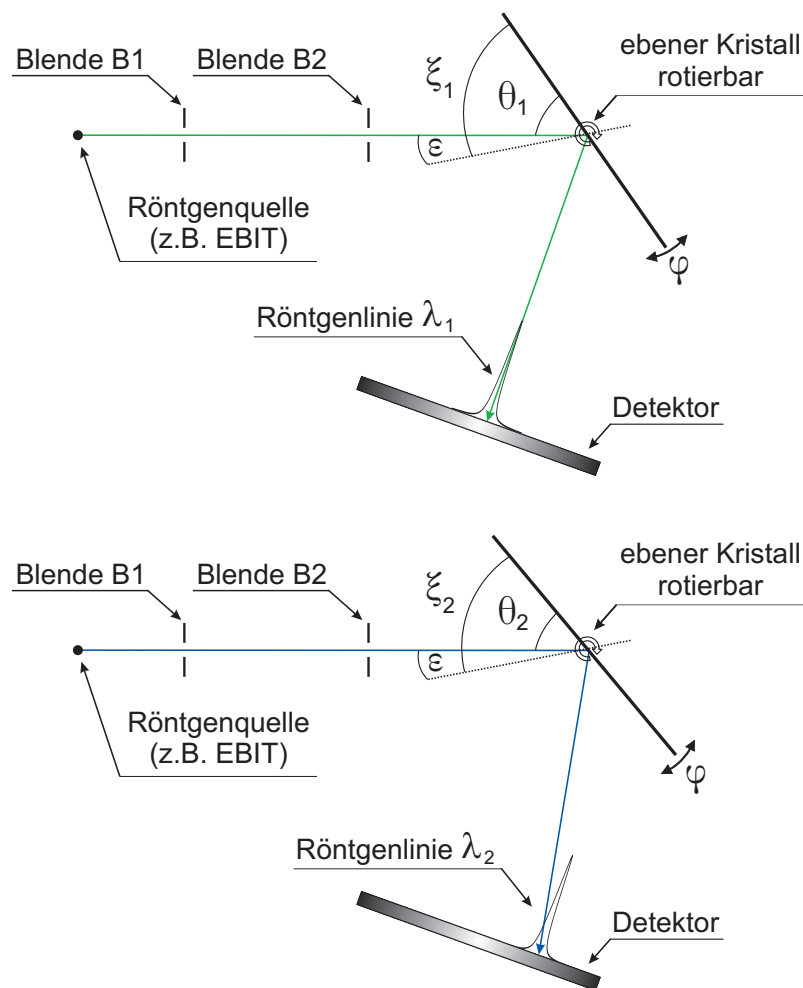
einen einfachen Aufbau eines solchen Spektrometers in der 2-dimensionalen Streuebene der Röntgenstrahlung vor. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, nutzen Kristallspektrometer mit ebenem Kristall wie Kristallspektrometer mit gekrümmten Kristall das Bragg-Gesetz aus, um die Röntgenstrahlung wellenlängendispersiv zu reflektieren und mit einem positionsempfindlichen Detektor zu vermessen. Die Grenzwinkel, unter denen eine Reflexion von Röntgenstrahlung gerade noch möglich ist, bezeichnet man als  $\theta_{max}$  bzw.  $\theta_{min}$ . Hochpräzisionsröntgenspektroskopie mit einem solchen Spektrometer setzt voraus, dass die Position von Ionenquelle, Kristall und Detektor mit höchster Genauigkeit bekannt sind. Dies entspricht einer absoluten Bestimmung des Bragg-Winkels ohne Verwendung von Referenzlinien zur Charakterisierung der Dispersionsrelation des Detektors. Diese Messungen ohne Verwendung einer Referenzlinie gestalten sich jedoch als schwierig, da Bragg-Winkel immer bezüglich einer Achse vermessen werden, deren Position nicht mit der ausreichenden Genauigkeit bekannt ist. Der gemessene Bragg-Winkel beinhaltet daher einen Offset-Winkel (in der noch zu besprechenden Abb. 2.14 ist dies der eingezeichnete Winkel  $\epsilon$ ). Im Gegensatz dazu können Messungen von Winkeldifferenzen sehr präzise sein, da die absoluten Bragg-Winkel aller Röntgenlinien in Bezug auf die gleiche Achse vermessen werden,



**Abbildung 2.13:** Einfacher Aufbau eines Kristallspektrometers mit ebenem Kristall. Es können gleichzeitig Röntgenlinien mehrerer Wellenlängen vermessen werden. Dargestellt ist die Röntgenstrahlung dreier verschiedener Wellenlängen  $\lambda_i$  mit  $i = 1, 2, 3$ , wobei  $\lambda_{1,3}$  sogenannte Referenzwellenlängen und  $\lambda_2$  die untersuchte Röntgenwellenlänge bezeichnen. Die Winkel  $\theta_{min,max}$  geben die Grenzwinkel an, unter denen Röntgenstrahlung noch auf den Kristall gelangen kann.  $\tau$  stellt die sogenannte Akzeptanz des Spektrometers dar.

## 2.2. Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen

und damit den gleichen Offset-Winkel beinhalten. Daraus ergibt sich, dass für die Hochpräzisionswellenlängenmessungen an hochgeladenen Ionen entweder Referenzlinien zur Kalibration der dispersiven Detektorachse benötigt werden (in Abb. 2.13 sind zwei solcher Referenzlinien mit Wellenlänge  $\lambda_{1,3}$  eingezeichnet) oder aber die zu spektroskopierenden Linien mit speziellen Verfahren ohne den Einsatz zusätzlicher Referenzlinien vermessen werden müssen. In jedem Fall ist bei einer geforderten relativen Unsicherheit von 1-2 ppm in der Wellenlängenbestimmung der Röntgenphotonen eine einmalige einfache Messung des Bragg-Winkels ohne Referenzlinie oder eine spezielle Technik zur Bestimmung von Wellenlängen ohne zusätzliche Referenzlinien nicht



**Abbildung 2.14:** Messprinzip zur Messung von Röntgenwellenlängen bei Einsatz eines Kristallspektrometers mit ebenem Kristall und Kollimation der einfallenden Strahlung mit Blenden. Das obere Bild stellt die Reflexion der Referenzlinie unter dem Bragg-Winkel  $\theta_1$  dar, das untere die Reflexion der beobachteten Linie unter dem Winkel  $\theta_2$  nach Rotation des Kristalls um den Winkel  $\varphi = \theta_1 - \theta_2 = \xi_1 - \xi_2$ .  $\xi_1$  und  $\xi_2$  sind die zu den Bragg-Winkeln  $\theta_{1,2}$  jeweils korrespondierenden Kristallwinkel, die einen Offset-Winkel  $\epsilon$  beinhalten und die gemessen werden. Aus ihnen lässt sich der Drehwinkel  $\varphi$  bestimmen, der keinen Offset-Winkel mehr enthält. Dieser kann zur Bragg-Winkel und damit zur Wellenlängenbestimmung der untersuchten Linie herangezogen werden.

ausreichend. In der Regel werden mindestens zwei Referenzlinien im zugänglichen Winkelbereich benötigt. Verwendet man allerdings Referenzlinien, so tragen die relativen Ungenauigkeiten, mit der ihre Wellenlängen bekannt sind, zu der relativen Unsicherheit bei, mit der die zu vermessende Röntgenlinie spektroskopiert werden kann und begrenzen damit die Genauigkeit, welche in einer Hochpräzisionswellenlängenmessung zu erreichen ist.

Ein Nachteil eines solch einfachen Aufbaus, wie er in Abb. 2.13 dargestellt ist, ergibt sich aus der Tatsache, dass, ähnlich wie bei den Kristallspektrometern in gekrümmter Geometrie, nur eine eingeschränkte Bandbreite an Wellenlängen für den Detektor zugänglich ist. Beträgt der Abstand zwischen Quelle und Kristall beispielsweise 1 m und sind die Dimensionen von Kristall und Detektor im Bereich einiger cm, was in den meisten Experimenten der Fall ist, so kann nur ein Energiebereich von einigen eV in der Photonenenergie (Akzeptanz des Spektrometers) vom Detektor abgedeckt werden. Ein Kristallspektrometer mit ebenem rotierbarem Kristall kann dieses Problem umgehen, da es mittels der Kristallrotation einen weiten Photonenenergiebereich von einigen hundert eV zugänglich machen kann. Insbesondere können sich die Wellenlängen der Referenzlinien auch um größere Beträge von den spektroskopierten Wellenlängen unterscheiden. Dabei ist darauf zu achten, dass die Referenz- und die vermessene Linie gleiche Einfallsrichtungen haben, da die Differenz in den gemessenen Bragg-Winkeln  $\varphi$  der Linien sich sonst nicht in eine Wellenlängendifferenz  $\Delta\lambda$  übersetzen lässt. Dies erfordert eine Kollimation der einfallenden Röntgenstrahlung, was zu einer Abnahme der detektierten Linienintensität führt. Schematisch ist eine solche Messanordnung in Abb. 2.14 zu sehen. Die durch Blenden kollimierte Röntgenreferenzstrahlung wird bei einer bestimmten Stellung des Kristalls unter dem Winkel  $\theta_1$  Bragg-reflektiert und vom Detektor registriert. Danach erfolgt eine Drehung des Kristalls um den Winkel  $\varphi = \theta_1 - \theta_2$ , so dass nun die zu spektroskopierende Linie unter dem Winkel  $\theta_2$  beobachtet werden kann. Gemessen werden allerdings nicht  $\theta_1$  und  $\theta_2$ , sondern die jeweils korrespondierenden Kristallwinkel  $\xi_{1,2}$ , die den oben erwähnten Offset-Winkel  $\epsilon$  noch beinhalten. Man erhält den Drehwinkel des Kristalls  $\varphi = \xi_1 - \xi_2$ . Dieser kann dann zur Bestimmung der Wellenlänge der untersuchten Linie genutzt werden, da er keinen Offset-Winkel  $\epsilon$  mehr enthält. Soll in Experimenten, die ein Kristallspektrometer mit ebenem Kristall unter Kollimation der einfallenden Strahlung nutzen, eine relative Ungenauigkeit im Bragg-Winkel von  $\delta\theta/\theta \approx 1.5 \cdot 10^{-6}$  erreicht werden, was der Genauigkeit in der Bestimmung des Bragg-Winkels der Röntgenlinien der in dieser Arbeit vorgestellten Experimente ohne Kollimation der Röntgenstrahlung entspricht, so muss eine Blende in 1 m Entfernung von der Quelle auf  $1.5 \mu\text{m}$  geschlossen werden. Dies würde einer detektierten Linienbreite von ca.  $3 \mu\text{m}$  entsprechen. Im Vergleich zur aktuell beobachteten Linienbreite von ca.  $550 \mu\text{m}$  in einer Spektrometerkonfiguration ohne Blenden erreichen den Detektor damit nur 1% der ursprünglichen Röntgenstrahlung. Ist die Ionenquelle wie in den Messungen dieser Arbeit eine EBIT, so ist eine Messung der Röntgenübergangswellenlängen mit Hilfe eines Kristallspektrometers mit ebenem Kristall unter Kollimation der einfallenden Röntgenstrahlung somit keine Option, will man realistische Messzeiten für die Röntgenaufnahmen von einigen Stunden erreichen. Daher wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik ein neues Verfahren entwickelt, um die nötige Information über die Einfallsrichtung der Röntgenstrahlung ohne Kollimation der Röntgenstrahlung zu erhalten [39]. Kap. 3.1.1 stellt diese Methode näher vor.

### 2.2.3 Messung von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien

Im letzten Kapitel wurde der Aufbau eines Kristallspektrometers mit ebenem Kristall für Hochpräzisionswellenlängenmessungen mit Referenzlinien besprochen. In diesem Kapitel wird auf die Verwendung eines solchen Kristallspektrometers mit ebenem Kristall in Kombination mit speziellen Techniken, die es ermöglichen, Röntgenwellenlängen ohne zusätzlichen Gebrauch von Referenzlinien zu vermessen, eingegangen. Diese Techniken setzen alle die präzise Kenntnis sowohl über den Gitterabstand  $d$  des verwendeten Kristalls als auch über den Einfallswinkel der untersuchten Röntgenstrahlung voraus. Messungen ohne Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien sind besonders erstrebenswert, da die Spektren der bisher als Referenzlinien für Messungen der Lyman- $\alpha$  Übergangsenergien in wasserstoffartigen Ionen mit Kernladungszahl  $(Z - 1)$  genutzten  $K\alpha$ -Linien in sogenannten  $3d$ -Übergangsmetallen [50] mit Kernladungszahl  $Z$  auf Grund von Zuschauerelektronen (siehe auch Kap. 2.1.1) asymmetrische Linienprofile aufweisen [37]. Die Unsicherheit in der Bestimmung der Wellenlängen der Referenzlinien begrenzt somit die Genauigkeit, mit der die unbekannt Linien vermessen werden können [51, 86, 97]. Im Gegensatz dazu koppeln Experimente ohne Rückgriff auf Referenzlinien die vermessenen Wellenlängen direkt an die Gitterkonstante und damit an optische Wellenlängenstandards und die SI-Einheiten. Werden die Lyman- $\alpha$  Übergangswellenlängen in wasserstoffartigen Ionen mit hoher Genauigkeit ohne Rückgriff auf Referenzlinien vermessen, können diese somit als Wellenlängenstandards im Röntgenbereich verwendet werden [152].

#### Der quasimonolithische Aufbau

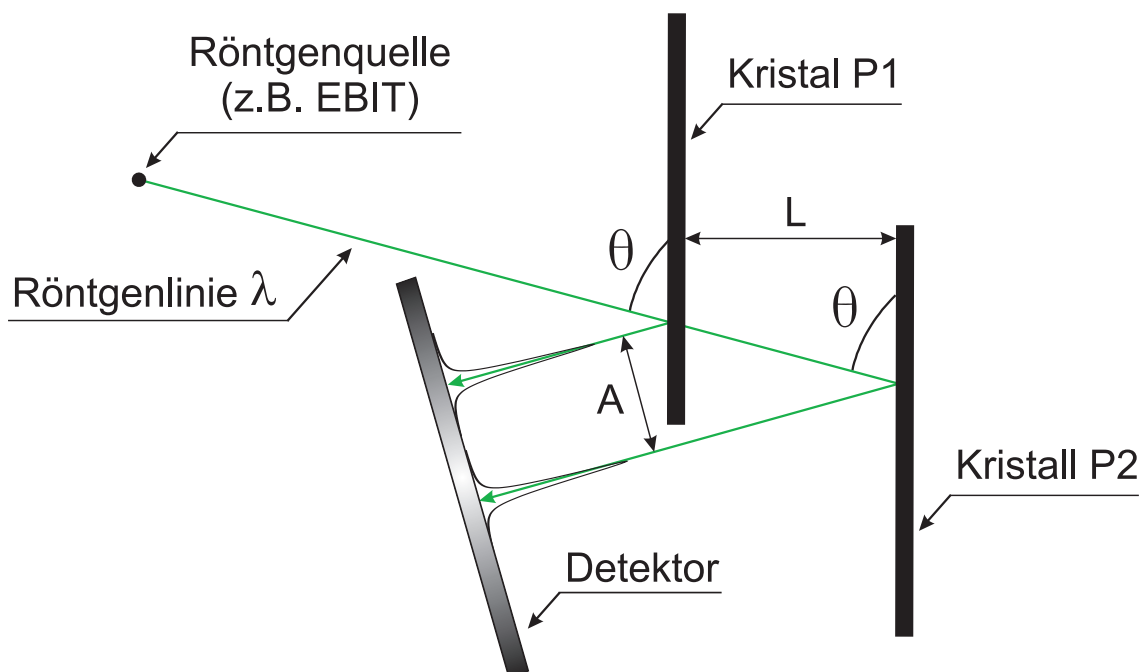
Eine Möglichkeit zur Bestimmung von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf Referenzwellenlängen bietet der sogenannte (*quasi*)*monolithische* Aufbau mit ebenen Kristallen [130]. Der Ansatz wurde bereits erfolgreich zur Messung der Lyman- $\alpha_1$  Übergangswellenlänge in wasserstoffartigem  $\text{Mg}^{11+}$  von Hölzer *et al.* [57] und wasserstoffartigem  $\text{Si}^{13+}$  von Tschischgale *et al.* [58] am LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) mit einer EBIT zur Erzeugung der hochgeladenen Ionen verwendet. Dabei werden - wie aus Abb. 2.15 ersichtlich - aus einer monochromatischen Quelle Röntgenstrahlen der Wellenlänge  $\lambda$  emittiert, die unter einem bestimmten Winkel  $\theta$  auf zwei identische Kristallplatten P1 und P2 mit Abstand  $L$  treffen. Die Bragg-reflektierten Röntgenstrahlen beider Platten treffen auf den positionsempfindlichen Detektor, wobei der Abstand  $L$  der beiden Kristallplatten P1 und P2 in einer Verschiebung  $A$  der beiden Röntgenreflexe gegeneinander in der Detektorebene führt. Wird der Detektor senkrecht zur Richtung der reflektierten Röntgenstrahlung ausgerichtet, wie in Abb. 2.15 dargestellt, so lässt sich Linienverbreiterung in Folge von Parallaxenfehlern im ausgedehnten Detektor verhindern. Die unbekannte Wellenlänge  $\lambda$  kann nun nach folgender Formel aus dem Abstand der detektierten Röntgenstrahlen  $A$  berechnet werden:

$$\lambda = 2d \left( \sqrt{1 - \left(\frac{A}{2L}\right)^2} - \delta(\lambda) \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{A}{2L}\right)^2}} \right), \quad (2.8)$$

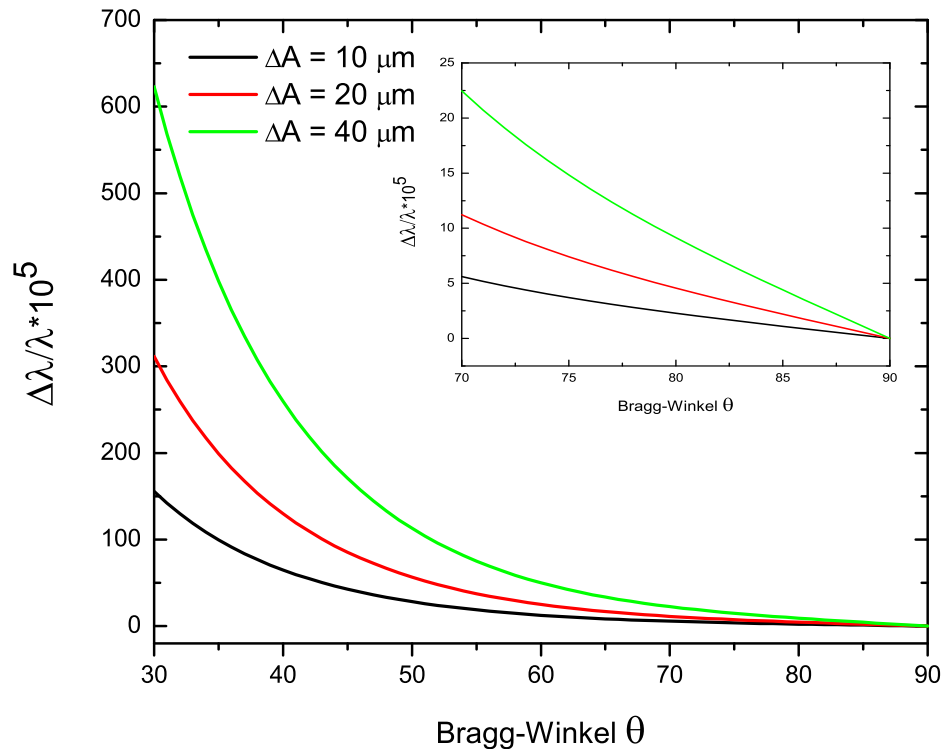
wobei  $\delta(\lambda)$  die Brechzahl aus Kap. 2.2.1 bezeichnet. Die Genauigkeit der Wellenlängenmessung ist dabei durch die Präzision bestimmt, die sich in der Bestimmung der Monolithen-Parameter  $L$  und  $d$  ergeben. Kann  $L$  mit einer Präzision von  $\sim 1$  mm und  $d$  mit einer Präzision von 0.5 fm bestimmt werden, so ist eine Wellenlängenbestimmung mit einer relativen Ungenauigkeit von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 1$  ppm bei Verwendung eines quasimonolithischen Aufbaus zu erreichen [130]. Faktoren, die zu dieser Unsicherheit beitragen, sind ein möglicher Offset-Winkel zwischen den Orientierungen der Kristallgitter in den beiden Kristallen, leicht andere Gitterabstände  $d$  in den Kristallen sowie eine mögliche leichte Krümmung der Kristalle aufgrund ihrer Montage auf dem Abstandshalter. Daher ist die relative Ungenauigkeit in der Wellenlängenbestimmung direkt proportional zu  $d$ :

$$\left| \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{\Delta d}{d} \right| + \cot^2 \theta \left[ \left| \frac{\Delta A}{A} \right| + \left| \frac{\Delta L}{L} \right| \right]. \quad (2.9)$$

Dagegen gehen  $A$  und  $L$  nur gewichtet mit dem Bragg-Winkel  $\theta$  in die Fehlerberechnung ein.  $A$  und  $L$  sind dabei über  $\cos \theta = A/(2L)$  verbunden. Für einen Aufbau, bei dem der Detektor senkrecht zu den einlaufenden Röntgenstrahlen montiert ist, ist  $\Delta\lambda/\lambda$  in Abb. 2.16 für drei Werte von  $\Delta A = 10, 20, 40 \mu\text{m}$  und  $L = 40$  mm für Bragg-Winkel zwischen  $30$ - $90^\circ$  dargestellt. Der obere kleine Bildausschnitt zeigt vergrößert den Bereich zwischen Bragg-Winkeln von  $70$ - $90^\circ$ . Der Einfluss des Fehlers  $\Delta A$  auf die relative Genauigkeit in der Wellenlängenbestimmung nimmt für  $\theta \rightarrow 90^\circ$  rapide ab. Hohe Bragg-Winkel bedingen daher eine höhere Messgenauigkeit, z.B. führt eine Unsicherheit  $\Delta A$  in der Bestimmung des Abstands  $A$  der beiden Röntgenreflexe von



**Abbildung 2.15:** Schematische Abbildung eines quasimonolithischen Aufbaus. Die zwei Kristalle sind durch einen Abstandshalter der Länge  $L$  getrennt. Die Bragg-Reflektion der einlaufenden monochromatischen Röntgenstrahlung resultiert in zwei Abbildern der Linie in der Detektorebene, die durch den Abstand  $A$  getrennt sind.



**Abbildung 2.16:** Berechnete Auflösung  $\Delta\lambda/\lambda$  eines quasimonolithischen Aufbaus als Funktion des Bragg-Winkels ( $30\text{-}90^\circ$ ) für verschiedene Unsicherheiten  $\Delta A$  in der Bestimmung des Linienabstandes. Der obere kleine Bildausschnitt zeigt vergrößert den Bereich zwischen Bragg-Winkeln von  $70\text{-}90^\circ$ . Der Detektor ist senkrecht zur reflektierten Röntgenstrahlung montiert.

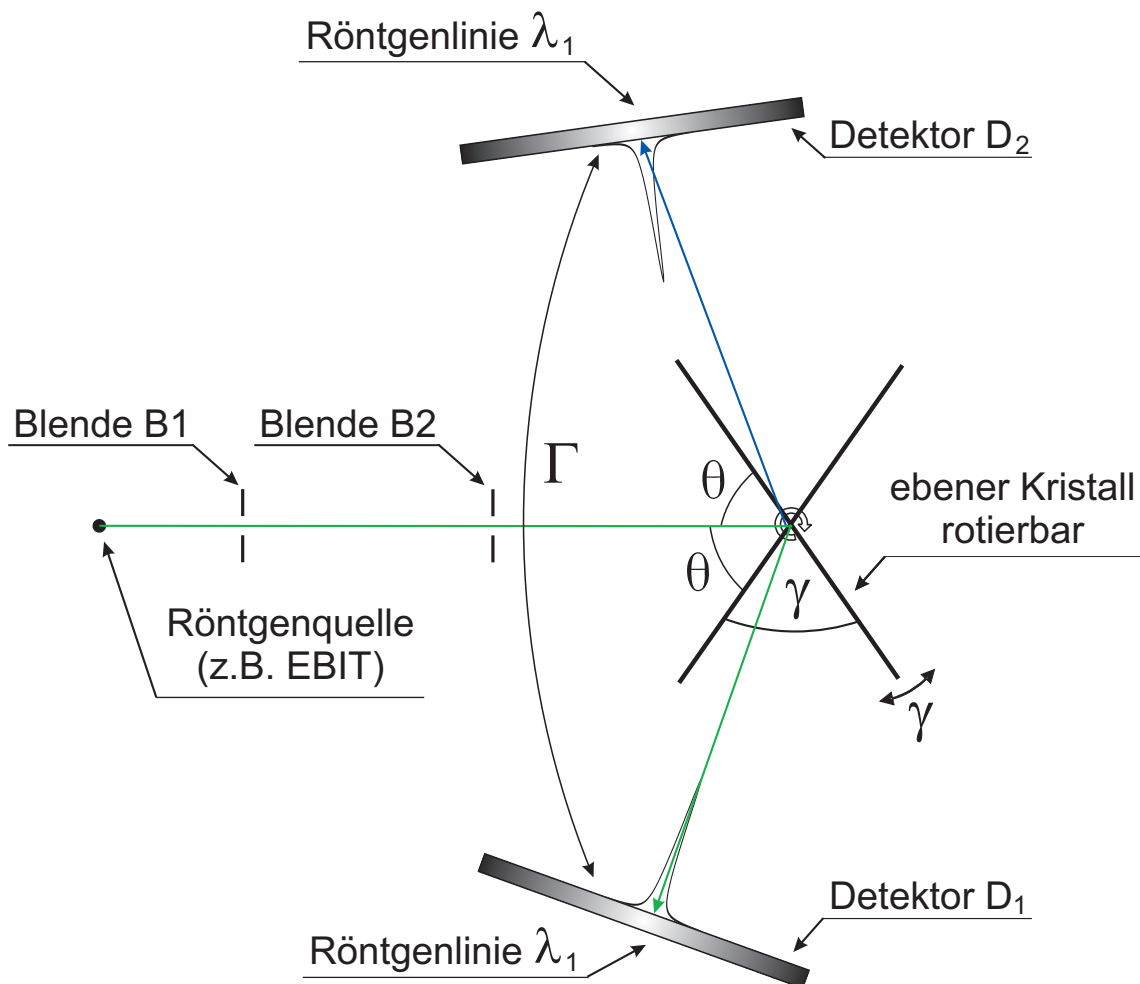
$10 \mu\text{m}$  für einen Bragg-Winkel von  $70^\circ$  zu einer relativen Ungenauigkeit von  $\Delta\lambda/\lambda = 5.62 \cdot 10^{-5}$  in der Wellenlängenbestimmung, während sich für einen Bragg-Winkel von  $85^\circ$  nur eine Ungenauigkeit von  $\Delta\lambda/\lambda = 1.10 \cdot 10^{-5}$  ergibt.

Die Hauptschwierigkeit eines quasimonolithischen Aufbaus resultiert aus der Tatsache, dass die beiden Kristallplatten akkurat gegeneinander ausgerichtet werden müssen. Dies lässt sich vermeiden, wenn man einen Monolithen wie in den Messungen von Tschischgale *et al.* [58] einsetzt.

### Die Bond-Methode

Das in den Messungen dieser Arbeit verwendete Verfahren zur Bestimmung von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf sekundäre Referenzwellenlängen ist die sogenannte Bond-Methode [40], die bereits erfolgreich eingesetzt wurde, um Gitterabstände in Kristallen [130] und Röntgenwellenlängen von  $K\alpha$ -Linien in Cr, Mn, Fe, Co, Ni und Cu [37] zu vermessen. Das grundlegende

Prinzip der Bond-Methode ist wie beim quasimonolitischen Aufbau die beobachtete Linie selbst als Referenzlinie einzusetzen. Abb. 2.17 stellt das Prinzip der Bond-Methode schematisch dar. Ein einfallender Röntgenstrahl mit definierter Einfallsrichtung, die sich z.B. durch Kollimation der Strahlung mit einer Blende festlegen lässt, wird durch den Kristall unter dem Winkel  $\theta$  auf den Detektor  $D_1$  reflektiert. Dem entspricht in der Abb. 2.17 die „grüne“ Kristallstellung  $D_1$  und der „grüne“ Strahlengang der Röntgenstrahlung. Danach erfolgt eine Rotation des Kristalls um  $\gamma = 180^\circ - 2\theta$ . Ein Röntgenstrahl mit identischer Einfallsrichtung wird nun in Richtung des Detektors  $D_2$  reflektiert. In Abb. 2.17 ist diese Situation durch die „blaue“ Stellung des Kristalls und den „blauen“ Strahlengang der Röntgenstrahlung gekennzeichnet. Detektor  $D_1$  und  $D_2$  kön-



**Abbildung 2.17:** Schematische Darstellung der Bond-Methode für die Röntgenwellenlängenbestimmung ohne Rückgriff auf Referenzlinien. Gezeigt werden in grün und blau zwei mögliche Positionen des rotierbaren Kristalls. Diese unterscheiden sich um den Kristallrotationswinkel  $\gamma$ . Ein Röntgenstrahl mit definierter Einfallsrichtung wird vor der Kristallrotation in Richtung Detektor  $D_1$  reflektiert, nach der Rotation in die Richtung, die man erhält, wenn man die ursprünglich ausfallenden Strahlen an der Ebene spiegelt, die durch die Einfallsrichtung der Röntgenstrahlung und die Kristallrotationsachse definiert ist. Anschließend wird die Röntgenstrahlung von Detektor  $D_2$  detektiert.



## 2.2. Röntgenspektroskopie an hochgeladenen Ionen

---

nen dabei identisch sein, sofern es sich um einen Aufbau mit rotierbaren Detektoren handelt. Der Bragg-Winkel lässt sich dann über den Kristallrotationswinkel  $\gamma$  oder dem Detektorrotationswinkel  $\Gamma$  zu

$$\theta = \frac{180^\circ - \gamma}{2} \qquad \theta = \frac{180^\circ - \frac{\Gamma}{2}}{2}. \qquad (2.10)$$

bestimmen. In den Röntgenübergangswellenlängenmessungen dieser Arbeit wurden die Kristallrotationswinkel  $\gamma$  präzise vermessen, um die Bragg-Winkel mit höchster Genauigkeit zu bestimmen. Wie in Kap. 2.2.2 besprochen, ist eine absolute Bestimmung von Winkeln mit der gewünschten Präzision nicht möglich. Der Vorteil der Bond-Methode ist es, dass nur Winkeldifferenzen ermittelt werden müssen. Dies ist mit hoher Präzision möglich. Der Einsatz eines Kristallspektrometers in Kombination mit der Bond-Methode an einer EBIT erschien lange als unmöglich, da dies wie beschrieben eine präzise Definition der Einfallrichtung der untersuchten Röntgenstrahlung und damit ihre Kollimation voraussetzt. Dies führt zu einer Verringerung des Photonflusses wie bereits in Kap. 2.2.2 abgeschätzt wurde. Um die Kollimation der einfallenden Röntgenstrahlung zu vermeiden und so den Röntgenphotonenfluss nicht zusätzlich zu verringern, wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg von Braun *et al.* [39] ein Aufbau entwickelt, der es ermöglicht, die Einfallrichtung des Röntgenstrahls ohne Kollimation hochpräzise zu verfolgen. Diese Methode und der darauf basierende Aufbau des in dieser Arbeit verwendeten Röntgenspektrometers sind Gegenstand des folgenden Kapitels.



## Kapitel 3

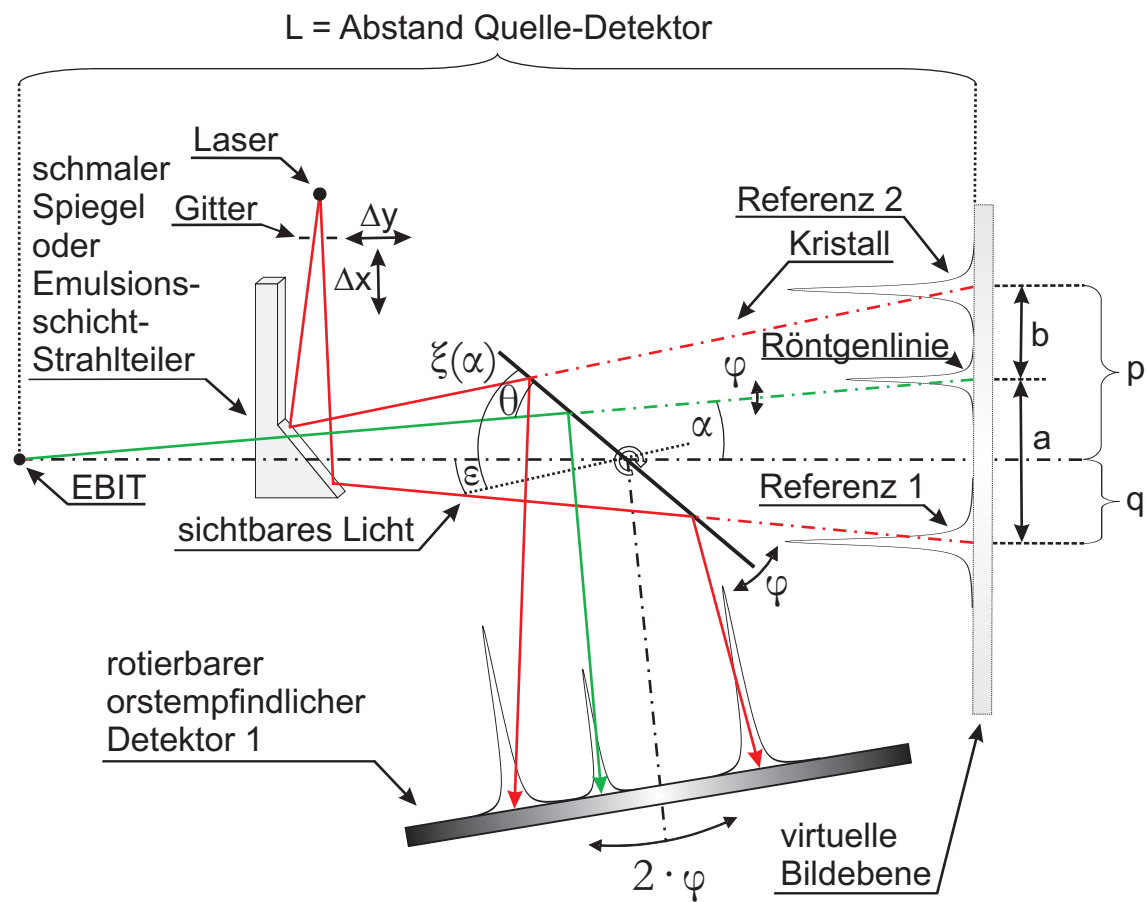
# Absolut-Wellenlängen- Kalibrationsmethode für hochpräzise Röntgenspektroskopie mit Kristallspektrometern

### 3.1 Das Prinzip der Wellenlängenmessung

Die Wellenlängenmessung von Röntgenstrahlung mit Hilfe von Kristallspektrometern setzt - wie bereits in Kap. 2.2.2 besprochen - die exakte Kenntnis von Ein- und Ausfallswinkel der untersuchten Röntgenstrahlung voraus. Dies lässt sich erreichen, wenn ein Kristallspektrometer mit ebenem Kristall in Kombination mit einem positionsempfindlichen Detektor eingesetzt wird, der es erlaubt simultan ein Spektrum in einem Wellenlängenbereich von einigen wenigen eV aufzunehmen, ohne dass Kristall oder Detektor dabei bewegt werden. Eine andere Möglichkeit, Ein- und Ausfallswinkel der untersuchten Röntgenstrahlung präzise zu bestimmen, ergibt sich, wenn die einfallende Röntgenstrahlung durch Blenden kollimiert wird und Kristall und Detektor so rotiert werden können, dass ein Röntgenenergiebereich von einigen hundert eV abgetastet werden kann. Erstere Methode hat den Nachteil, dass hier im Experiment nur ein kleiner Bereich an Röntgenenergien zugänglich ist. Zweite Methode vermindert die beobachtete Intensität der Röntgenlinie auf dem Detektor, was gleichzeitig den statistischen Beitrag zur relativen Unsicherheit in der Wellenlängenmessung  $\Delta\lambda/\lambda$  aufgrund geringer Photonen-zählrate erhöht. Im Gegensatz dazu wurde in dieser Arbeit ein am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg entwickeltes Kristallröntgenspektrometer mit ebenem Kristall und speziellem Messprinzip [39] verwendet, das im Folgenden vorgestellt werden soll. Dieser Aufbau erlaubt Röntgenwellenlängenmessungen an Übergängen in hochgeladenen Ionen mit einer relativen Ungenauigkeit von  $\Delta\lambda/\lambda = 1\text{-}2$  ppm bei Wellenlängen um die  $\sim 2\text{-}4\text{\AA}$ .

### 3.1.1 Die a/b-Methode unter Verwendung von Lichtreferenzlinien

Die in den Messungen dieser Arbeit verwendete Methode zur Röntgenwellenlängenmessung an Übergängen in mittels einer EBIT erzeugten hochgeladenen Ionen unter Verwendung eines Kristallröntgenspektrometers mit ebenem Kristall wurde am Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg von Braun *et al.* [39, 51, 86] entwickelt. Die zentrale Idee dieser Messmethode, die im folgenden als *a/b*-Methode bezeichnet wird, ist es, die Einfallsrichtung der untersuchten Röntgenstrahlung nicht durch Kollimierung festzulegen, sondern als Funktion des Kristallwinkels zu beobachten. Dies ermöglicht es, mit Hilfe der Rotation von Kristall und Detektor einen großen Bereich an Röntgenenergien von bis zu einigen keV experimentell abzudecken, ohne dass ein



**Abbildung 3.1:** Geometrie der *a/b*-Methode. Die horizontale gestrichelt-gepunktete Linie markiert die Hauptachse des Spektrometers, die durch die Röntgenstrahlungsquelle sowie die Kristallrotationsachse gekennzeichnet ist. Zwei Lichtreferenzlinien werden als Maxima erster Ordnung eines Interferenzmusters erzeugt, welches durch ein Laserstrahl, der auf ein um  $\Delta x$  und  $\Delta y$  justierbares Beugungsgitter fällt, generiert wird (rote Linien). Diese werden mittels eines kleinen Spiegels oder eines Emulsionsschicht-Strahlteilers in den Strahlengang der Röntgenstrahlung (grüne Linie) eingekoppelt. Um die späteren geometrischen Überlegungen zu vereinfachen, ist zusätzlich links eine virtuelle Bildebene eingezeichnet, die entsteht, wenn die Detektorebene an der Kristalloberfläche gespiegelt wird. Für diese Ebene gilt die gleiche Geometrie wie auf dem Detektor. Winkel und Variablen werden im Text definiert.

### 3.1. Das Prinzip der Wellenlängenmessung

---

komplizierter Umbau wie im Falle von Kristallspektrometern mit gekrümmtem Kristall nötig wäre. Außerdem erreicht man höchst mögliche Photonenflüsse. Die Methode kann, wie in Kap. 3.1.2 besprochen wird, mit der Bond-Methode (siehe Kap. 2.2.3) kombiniert werden und ermöglicht so zum ersten Mal auch den Einsatz der Bond-Methode zur Röntgenwellenlängenmessung an Übergängen in hochgeladenen Ionen, die mit einer EBIT erzeugt wurden. Die Beobachtung der Einfallrichtung der Röntgenstrahlung erfolgt dabei mit Hilfe von zwei (oder generell mehreren) Strahlen sichtbaren Lichtes, die für die Röntgenlinien als Positionsreferenzen in der Detektorebene dienen.

Wie in 3.1 dargestellt, werden diese Lichtreferenzlinien in dem hier verwendeten Aufbau durch einen Laserstrahl erzeugt, der auf ein um  $\Delta x$  und  $\Delta y$  justierbares Beugungsgitter fällt. Die beiden Maxima erster Ordnung des auf diese Weise generierten Interferenzmusters werden mittels eines kleinen Spiegels oder eines Emulsionsschicht-Strahlteilers (engl.: pellicle beamsplitters) in den Strahlengang der Röntgenstrahlung gekoppelt. Wird der Spiegel verwendet, so wird der Strahlengang eines kleinen Teiles der einfallenden Röntgenstrahlung durch diesen Spiegel blockiert. Danach werden die Lichtreferenzlinien an der polierten Oberfläche des ebenen Kristalls, der für sichtbares Licht wie ein gewöhnlicher Spiegel wirkt, Richtung des Detektors, hier einer CCD (engl.: charge-coupled device) Kamera, reflektiert. Bei einer Rotation des Kristalls um den Winkel  $\varphi$  und gleichzeitiger Rotation des (rotierbaren) Detektors um den Winkel  $2\varphi$  werden die Lichtreferenzlinien auf dieselbe Position, d.h. dieselben Ortskoordinaten in der Detektorebene reflektiert wie vor der Rotation. Auf der rechten Seite von Abb. 3.1 ist eine virtuelle Bildebene eingezeichnet, wie sie sich aus der Spiegelung der Detektorebene an der Kristalloberfläche ergibt. Bei oben beschriebenen Verfahren ändert diese virtuelle Bildebene unabhängig vom Kristallwinkel ihre (örtliche) Position nicht, sie erscheint im Raum fixiert. Die Betrachtung der Geometrie bzw. der Strahlengänge der Röntgenstrahlung und der Lichtreferenzlinien bezüglich dieser Ebene vereinfacht die weiteren geometrischen Überlegungen entscheidend, da sowohl die Detektorposition als auch die Position der Lichtreferenzlinien in dieser Ebene fix sind. Der entscheidende Punkt ist, dass diese Lichtreferenzlinien als Positionsreferenzen gebraucht werden können, da sie unabhängig von der Kristallposition oder einer Fehlausrichtung von Kristall oder Detektor zwei Richtungen im Raum definieren. Es ist dabei zu beachten, dass eine Kamerarotation für alle hier getroffenen Überlegungen nicht erforderlich ist, diese jedoch für das bessere geometrische Verständnis vorausgesetzt wird. Die exakte Position der Kamera spielt für das Messprinzip keine Rolle. Im Vergleich zu den Lichtreferenzlinien gestaltet sich die Situation für die Röntgenstrahlung anders. Die auf den Kristall fallende Röntgenstrahlung wird nach dem Bragg-Gesetz (siehe Kap. 2.2.1) in Richtung des Detektors reflektiert. Dabei wird von der auf den Kristall auftreffenden Röntgenstrahlung mit isotroper Winkelverteilung nur diejenige reflektiert, die das Bragg-Gesetz erfüllt und den dazu passenden Einfallswinkel  $\alpha$  aufweist. Röntgenstrahlung mit einer definierten Einfallssrichtung, die vor einer Rotation des Kristalls um den Winkel  $\varphi$  Bragg-reflektiert wurde, erfüllt die Bragg-Bedingung nach der Rotation nicht mehr und wird daher nicht mehr reflektiert. Andererseits kann nun Röntgenstrahlung mit anderer Einfallssrichtung  $\alpha'$  reflektiert werden. Wie aus Abb. 3.1 ersichtlich ist, wird sich die Position der Röntgenstrahlung in der Detektorebene damit als Funktion des Kristallwinkels ändern. Sind  $a$  und  $b$  die jeweiligen Abstände zwischen den Positionen, an

denen die Lichtreferenzlinien und die Röntgenstrahlung in der Detektorebene auftreffen, so ist das Verhältnis  $a/b$  eine Messgröße für die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung und hängt von dem gemessenen Kristallwinkel  $\xi$  ab. Das gleiche Verhältnis  $a/b$  impliziert damit gleiche Einfallrichtung und Einfallswinkel der Röntgenstrahlung, unabhängig von der Wellenlänge  $\lambda$  der einlaufenden Röntgenstrahlung oder dem Kristallwinkel  $\xi$ . Daher gilt bei gleichem  $a/b$ -Verhältnis für zwei verschiedene Röntgenstrahlen der Wellenlängen  $\lambda_{1,2}$  stets:

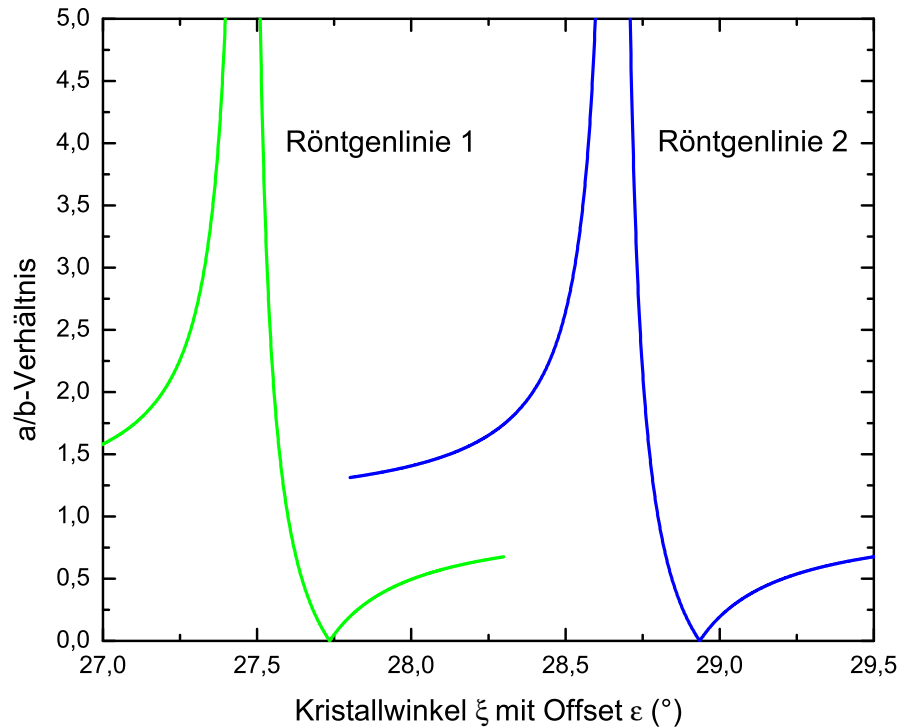
$$\xi_2 - \xi_1 = \theta_2^* - \theta_1^* . \quad (3.1)$$

$\xi_i$  bezeichnet dabei die Kristallwinkel, unter welchem die jeweilige Röntgenstrahlung mit unterschiedlicher Wellenlänge  $\lambda_i$  mit  $i = 1, 2, 3 \dots$  reflektiert werden. Der Kristallwinkel wird dabei in Hinblick auf eine beliebige Achse gemessen. Diese Achse unterscheidet sich im Allgemeinen von der Hauptachse des Spektrometers durch einen Offset-Winkel  $\epsilon$  (siehe auch Kap. 2.2.2), welcher als Winkel zwischen der Hauptachse (horizontale gestrichelt-gepunktete Linie in Abb. 3.1) und der Rotationsachse des Kristalls definiert ist.  $\theta_i^*$  bezeichnen die Bragg-Winkel, die den Offset-Winkel  $\epsilon$  enthalten; es gilt  $\theta_i^* = \theta_i + \epsilon$ .  $\theta_i$  sind die jeweiligen „reinen“ Bragg-Winkel ohne Offset-Winkel. Ein großer Vorteil der  $a/b$ -Methode ergibt sich durch die Tatsache, dass die  $a/b$ -Verhältnisse infolge des Thales-Theorems nicht von der Position von Kamera oder Kristall abhängig sind, solange die Punkte, an denen die Röntgenstrahlung und die Lichtreferenzlinien erzeugt werden, überlappen und so Dreiecke mit einem gemeinsamen Eckpunkt bilden.

Definiert man die Werte  $q$  und  $p$  als Abstände zwischen den jeweiligen Auftreffpunkten der Lichtreferenzlinien in der Detektorebene zum Schnittpunkt zwischen Hauptachse des Spektrometers und Detektorebene, so lässt sich das  $a/b$ -Verhältnis folgendermaßen beschreiben:

$$\left| \frac{a}{b}(\xi) \right| = \left| \frac{q + L \cdot \tan(\alpha(\xi))}{p - L \cdot \tan(\alpha(\xi))} \right| = \left| \frac{q + L \cdot \tan(\theta_i^* - \xi_i)}{p - L \cdot \tan(\theta_i^* - \xi_i)} \right| . \quad (3.2)$$

$\theta_i^* = \theta_i + \epsilon$  ist dabei der gemessene Bragg-Winkel derjenigen Röntgenstrahlung, die unter einem Winkel von  $\alpha = 0$  zur Spektrometerachse einfällt, für die also  $a/b = p/q$  gilt und  $L$  bezeichnet den Abstand zwischen Röntgenquelle und Detektor. Wäre  $\epsilon = 0$  und ließen sich die Bragg-Winkel  $\theta_i$  direkt bestimmen, könnte man die Wellenlängen der untersuchten Röntgenstrahlung schon an diesem Punkt ohne Rückgriff auf sekundäre Röntgenreferenzlinien, vermessen. Leider kann die Ausrichtung der Winkelskala des Winkelmessgeräts auf die Achse mit  $\epsilon = 0$  wie bereits in Kap. 2.2.2 besprochen nicht mit der erforderlichen Genauigkeit erfolgen, so dass an diesem Punkt der Diskussion nur Wellenlängenmessungen mit Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien möglich sind. Allerdings werden wir in Kap. 3.1.2 sehen, wie die  $a/b$ -Methode mit der Bond-Methode kombiniert werden kann und so auch Messungen von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf sekundäre Wellenlängenstandards ermöglicht. Hier soll noch kurz auf die Verwendung der  $a/b$ -Methode in Kombination mit einer Referenzwellenlänge eingegangen werden, da dies die Situation bezüglich des Offset-Winkels  $\epsilon$  vereinfacht. Dies ist auch in Hinblick auf Messungen notwendig, bei denen keine sekundäre Referenzwellenlänge benutzt wird, da in diesem Fall die untersuchte Wellenlänge wie etwa bei der Bond-Methode zweifach spektroskopiert wird und damit selbst als Referenzwellenlänge fungieren kann. Der Differenzwinkel  $\gamma$  zwischen dem



**Abbildung 3.2:**  $a/b$  als Funktion des Kristallwinkels  $\xi$ .  $L$ ,  $p$  und  $q$  wurden für beide Röntgenwellenlängen identisch und den experimentellen Gegebenheiten entsprechend gewählt. Die Kurve für die Referenzlinie (blau) kann zur Wellenlängenkalibration des Spektrometers verwendet werden. Die Differenz in den Bragg-Winkeln für die beiden Röntgenwellenlängen kann bei gleichem  $a/b$ -Verhältnis der zwei Kurven als Differenz in den Kristallwinkeln bestimmt werden. Diese Bragg-Winkel Differenz lässt sich in eine Wellenlängendifferenz und schließlich in die Wellenlänge der spektroskopierten Röntgenlinie übersetzen.

Bragg-Winkel der spektroskopierten Röntgenlinie und dem der Referenzlinie lässt sich durch die Differenz in den für sie gemessenen Kristallwinkeln  $\xi_{1,2}$  bei gleichem Verhältnis  $a/b$  bestimmen. Da beide Winkel  $\xi_{1,2}$  den Offset-Winkel  $\epsilon$  enthalten, spielt dieser Winkel nach der Differenzbildung keine Rolle mehr:

$$\gamma = \theta_j^* - \theta_i^* = (\theta_j + \epsilon) - (\theta_i + \epsilon) = \theta_j - \theta_i . \quad (3.3)$$

Die Wellenlänge der Referenzlinie  $\lambda_j$  wird als bekannt vorausgesetzt. Daher ist auch ihr Bragg-Winkel  $\theta_j$  bekannt und  $\theta_i$ , der Bragg-Winkel der untersuchten Linie, lässt sich aufgrund der Messung des Kristallrotationswinkels  $\gamma$  ermitteln.

Abb. 3.2 zeigt  $a/b$ -Verhältnisse, die gemäß Gl. 3.2 berechnet wurden, als Funktion des Kristallwinkels  $\xi$  für zwei verschiedene Röntgenlinien, die beobachtete und die Referenzlinie, mit unterschiedlichen Wellenlängen  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  und korrespondierenden Bragg-Winkeln  $\theta_1$  und  $\theta_2$ . An

beiden Kurven ist zu erkennen, dass Gl. 3.2 für gleiche Einfallrichtung von Röntgenstrahlung und Lichtreferenzlinie 2 divergiert. Dies entspricht dem Fall, bei dem  $p = L \cdot \tan(\xi_i - \theta_i^*)$  gilt. Gilt  $q = -L \cdot \tan(\xi_i - \theta_i^*)$ , d.h. fällt die Röntgenstrahlung parallel zur Lichtreferenzlinie 1 ein, so ergibt sich ein  $a/b = 0$ . In den Messungen dieser Arbeit wurden die Kristallwinkel, bei denen die  $a/b$ -Verhältnisse vermessen wurden, stets so gewählt, dass die Röntgenlinie immer zwischen den Lichtreferenzlinien lag, d.h. zwischen den Punkten, an denen  $a/b$  divergiert und für die  $a/b = 0$  gilt. Bei der Simulation der  $a/b$ -Verhältnisse wurden die Parameter  $L$ ,  $p$  und  $q$  für beide Kurven gleich gewählt, was berechtigt ist, da diese Parameter ausschließlich durch den Spektrometeraufbau und den Aufbau für die Lichtreferenzlinien bestimmt und unabhängig von der Wellenlänge der Röntgenstrahlung  $\lambda$  sind. Für eine ausführlichere Diskussion siehe Kap. 4. Daher sind beide Kurven insofern identisch, als dass man Kurve 1 aus Kurve 2 erhalten kann, indem man letztere parallel zur Abszisse, die den Kristallwinkel darstellt, verschiebt. Das heißt wiederum, dass die Differenz in den Kristallwinkeln  $\xi$  und damit der Kristallrotationswinkel  $\gamma$  sich bei jedem beliebigen Wert des  $a/b$ -Verhältnisses bestimmen lassen, da sie nicht von  $a/b$  abhängig sind. Daraus ergibt sich:

$$\gamma = \theta_j - \theta_i = \xi_j \left( \frac{a}{b} = \frac{p}{q} \right) - \xi_i \left( \frac{a}{b} = \frac{p}{q} \right). \quad (3.4)$$

Die Differenz in den Bragg-Winkeln  $\theta_i - \theta_j$  korrespondiert damit direkt zur Differenz in den gemessenen Kristallwinkeln, wobei diese bei beliebigem aber identischem  $a/b$ -Verhältnis bestimmt werden müssen. Da  $p$ ,  $q$  lediglich die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung, für die die Winkel-differenz  $\gamma$  bestimmt wird, festlegen, kann für die Datenanalyse ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $p = q = (p + q)/2$  gesetzt, und  $p + q$  als Abstand der beiden Lichtreferenzlinien auf dem Detektor experimentell bestimmt werden. Daraus ergibt sich, dass ein Datenfit die Winkel  $\theta_{1,2}$  an der Stelle  $a/b = p/q = 1$  liefert.

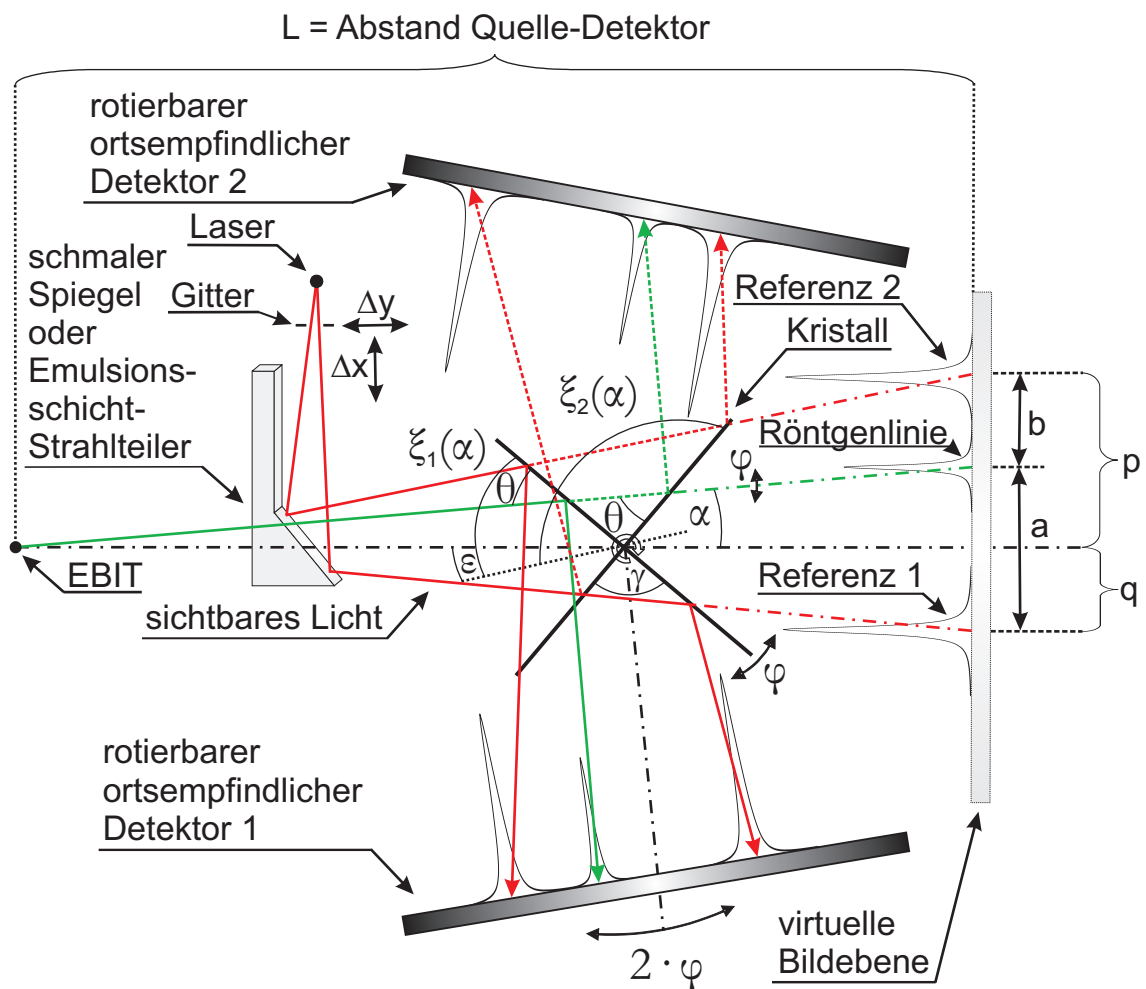
Zu bemerken ist noch, dass die beiden Lichtreferenzlinien, wie in Abb. 3.1 dargestellt, nicht die gleiche Einfallrichtung bezüglich der Hauptachse des Spektrometers besitzen müssen. Wäre dies der Fall, wäre die Messmethode schwerlich experimentell zu realisieren, da dann wieder eine präzise Kenntnis der Quell-, Kristall- und Detektorposition nötig wäre.

### 3.1.2 Kombination der $a/b$ -Methode und der Bond-Methode

Wie bereits in Kap. 2.2.2 und 3.1.1 besprochen, kann die Ausrichtung der Winkelskala des Winkelmessgeräts auf die Achse mit  $\epsilon = 0$  nicht mit der erforderlichen Genauigkeit erfolgen, so dass die Anwendung der  $a/b$ -Methode bisher nur in Hinblick auf Wellenlängenmessungen mit Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien besprochen wurde. Wird die  $a/b$ -Methode mit der Bond-Methode (siehe Kap. 2.2.3) kombiniert, so wird die Messung ohne solche ermöglicht, wobei die beobachtete Röntgenlinie gewissermaßen selbst als Referenzlinie fungiert. Mit dieser Methode kann dann eine Röntgenwellenlängenmessung an Übergängen in hochgeladenen Ionen erfolgen, auch wenn die Anzahl der Ionen und damit die Intensität der Quelle wie im Falle einer EBIT gering sind, d.h. die Bond-Methode kann damit auch zur Absolutmessung von Röntgenwellenlängen bei Einsatz schwacher Röntgenquellen genutzt werden. Wie in Kap. 2.2.3 dargestellt, basiert



### 3.1. Das Prinzip der Wellenlängenmessung



**Abbildung 3.3:** Kombination von  $a/b$ -Methode mit dem Bond-Verfahren. Bei Kristallrotation um den Winkel  $\gamma$  werden alle Strahlen statt auf Detektor 1 (durchgezogene Strahlengänge) auf Detektor 2 reflektiert (gestrichelte Strahlengänge). In beiden Fällen erfolgt die Reflexion der Röntgenstrahlung mit Wellenlänge  $\lambda$  unter dem Bragg-Winkel  $\theta$ . In der virtuellen Bildebene ergibt sich das gleiche Verhältnis  $a/b$  für beide Detektoren (gepunktet-gestrichelte Strahlengänge). Experimentell lassen sich die beiden Kristallwinkel  $\xi_{1,2}$  bestimmen und damit der Bragg-Winkel  $\theta$  und die Wellenlänge der untersuchten Strahlung ermitteln. Winkel und Variablen werden im Text definiert und entsprechen Abb. 3.1.

die Bond-Methode auf der Spektroskopie der Röntgenstrahlung mit der Wellenlänge  $\lambda$  unter zwei verschiedenen Kristallwinkel- und Detektorpositionen, wobei die Einfallsrichtung und damit der Einfallswinkel  $\alpha$  der Röntgenstrahlung (siehe grüne Linie in Abb. 3.3) in beiden Fällen identisch ist. In den Messungen dieser Arbeit wurde nicht ein und derselbe Detektor in diesen Detektorpositionen verwendet, sondern zwei Detektoren eingesetzt. Wie in Abb. 3.3 dargestellt, werden bei Kombination der Bond- mit der  $a/b$ -Methode nun die  $a/b$ -Kurven für diese beiden Detektoren ermittelt, wobei um gleiche  $a/b$ -Verhältnisse auf beiden Detektoren zu erhalten und damit gleichen Einfallswinkel  $\alpha$  der Röntgenstrahlung zu gewährleisten, eine Kristallrotation um den Winkel  $\gamma = 180^\circ - 2\theta$  (siehe Kap. 2.2.3) zwischen der Detektion der Röntgenlinie auf der einen

und der anderen CCD Kamera erfolgen muss. Den Winkel  $\gamma$  und damit den Bragg-Winkel der untersuchten Röntgenlinie erhält man also experimentell, wenn man aus den  $a/b$ -Graphen für die beiden Detektoren die Kristallwinkel  $\xi_1$  und  $\xi_2$ , unter denen die Röntgenstrahlung auf den jeweiligen Detektor trifft, unter der Bedingung  $(a/b)_1 = (a/b)_2 = a/b$  ermittelt. Hier ist  $(a/b)_1$  das  $a/b$ -Verhältnis auf Detektor 1 und  $(a/b)_2$  das auf Detektor 2. Dabei ist zu beachten, dass die Lichtreferenzlinien von Detektor 1 zu Detektor 2 bezüglich der Symmetrieachse des Detektors gespiegelt erscheinen, d.h. Referenzlinie 1 liegt für Detektor 1, Referenzlinie 2 für Detektor 2 weiter von der Ionenwolke weg. Der Bragg-Winkel der Röntgenstrahlung lässt sich dann über den Kristallrotationswinkel  $\gamma = (\xi_2 - \xi_1)$  zu  $\theta = (180^\circ - \gamma)/2 = (180^\circ - \xi_2 + \xi_1)/2$  bestimmen. Diese Situation ist in Abb. 3.3 exemplarisch für die Röntgenstrahlung der Wellenlänge  $\lambda$  unter einer bestimmten Einfallrichtung mit Winkel  $\alpha$  dargestellt.

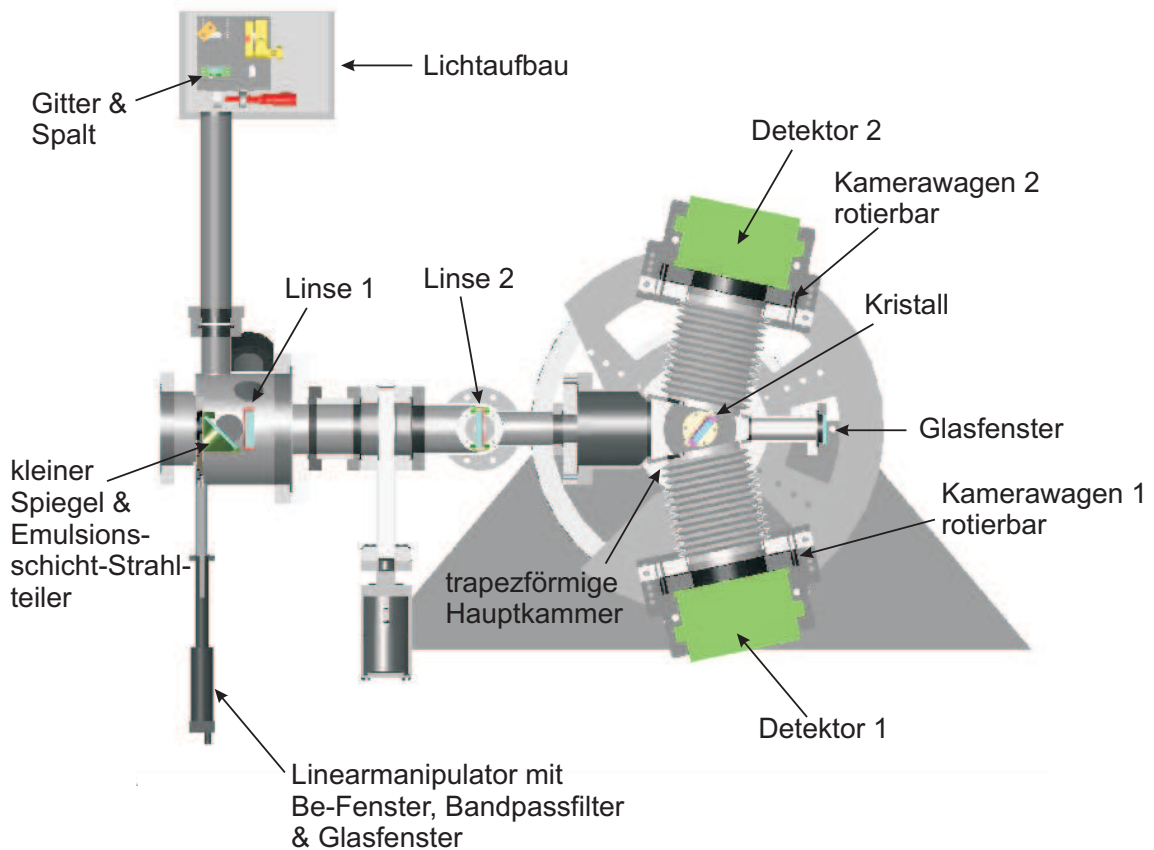
Bei der Beschreibung des Messprinzips in Kap. 3.1.1 wurde eine idealisierte Anordnung und damit Geometrie des Spektrometer-Aufbaus vorausgesetzt. Im Experiment liegt diese idealisierte Anordnung aber nie exakt vor, d.h. die diskutierte Geometrie beschreibt den Aufbau nicht mehr präzise. Die resultierenden Fehlerquellen und die Größe der durch sie erzeugten systematischen Fehler sind Gegenstand von Kap. 3.2.2 und 3.3. Unter anderem ist die Position des Lasers bzw. genauer des Beugungsgitters entscheidend, da Gl. 3.2 nur streng unter der Annahme gültig ist, dass der Ursprung der Lichtreferenzlinien sich in räumlichem Überlapp mit dem der Röntgenstrahlung befindet. Im Folgenden wird der experimentelle Aufbau, der in dieser Arbeit verwendet wurde, vorgestellt, wobei auch auf die Anordnung zur Erzeugung der Lichtreferenzlinien eingegangen wird, insbesondere in Hinblick auf die Justage des Beugungsgitters.

## 3.2 Experimenteller Aufbau

### 3.2.1 Die Kristallspektrometer-Anordnung

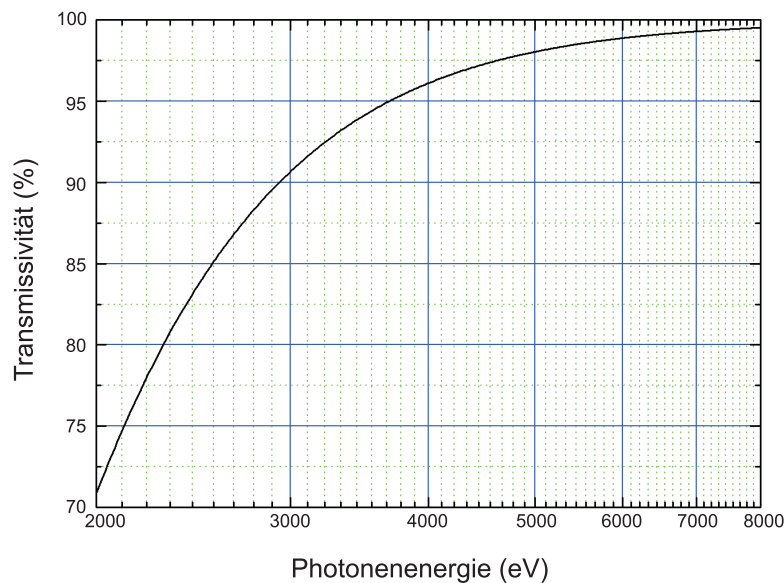
Bei dem Kristallröntgenspektrometer mit ebenem Kristall, welches für die Röntgenwellenlängenmessungen dieser Arbeit verwendet wurde, handelt es sich in [51] entwickelten und an die Bond-Methode angepassten Aufbau. Eine schematische Darstellung der wichtigsten Komponenten des Spektrometers und seines Strahlrohres findet sich in Abb. 3.4. Das Strahlrohr muss von seiner Länge her so konstruiert werden, dass der optische Überlapp zwischen der Quelle der Röntgenstrahlung und dem Ursprung der Lichtreferenzlinien hergestellt werden kann (siehe auch Kap. 3.2.2), d.h. es muss eine gewisse Mindestlänge aufweisen. Unter Beachtung der Mindestlänge des Strahlrohres muss dann ein Kompromis zwischen einem kleinem Abstand  $L$  zwischen Detektor und Quelle, welcher einen hohen Photonenfluss durch Vergrößerung des Raumwinkels zu Folge hat, und einem großen Abstand zwischen diesen beiden Spektrometerkomponenten, wodurch ein hohes Auflösungsvermögen  $\lambda/\Delta\lambda$  erreicht werden kann, gefunden werden. In den hier vorgestellten Experimenten betrug dieser Abstand für die Messungen an der Heidelberg-EBIT 1886 mm und für die Messungen an der FLASH-EBIT 2331 mm, wobei das Spektrometer für die Messungen an der Heidelberg-EBIT senkrecht zum Elektronenstrahl und für die Experimente an der FLASH-EBIT parallel zum Elektronenstrahl montiert war. Für eine detailliertere Diskussion siehe auch Kap.

### 3.2. Experimenteller Aufbau



**Abbildung 3.4:** Schematische Darstellung der wichtigsten Komponenten des Spektrometers und seines Strahlrohres. Die Röntgenstrahlung tritt in dieser Abbildung von links in das Spektrometerstrahlrohr ein, die Lichtreferenzlinien werden vom Lichtaufbau aus, in dem sie erzeugt werden (siehe auch Kap. 3.2.2), über einen kleinen Spiegel oder einen Emulsionsschicht-Strahlteiler in den Strahlengang der Röntgenstrahlung eingekoppelt. Eine Beschreibung der Funktionsweise der einzelnen Bauteile findet sich im Text.

3.3.4. Um das Spektrometer und das Strahlrohr mit dem EBIT-Vakuum kompatibel zu machen und die geringst mögliche Absorption der eintretenden Röntgenstrahlung zu gewährleisten, wurde die Anordnung als ein Ultrahoch-Vakuum-Aufbau (UHV-Aufbau) bei einem erreichbaren Druck von  $\sim 10^{-9}$  mbar konstruiert. Innerhalb des Strahlrohres sind auf einem Schieber (siehe Abb. 3.4) ein Bandpassfilter (440 nm, 3 nm Bandbreite), ein gewöhnliches Glasfenster sowie eine Beryllium-Folie angebracht, die mit Hilfe eines Linearmanipulators jeweils abwechselnd in den Strahlengang der von der EBIT emittierten Strahlung eingebracht werden können. Der Verwendungszweck des Interferenzfilters wird eingehend in Kap. 3.2.2 besprochen, der des Glasfensters in Kap. 3.3.6. Das Beryllium-Fenster mit einer Dicke von  $25 \mu\text{m}$  wird während der Röntgenwellenlängenmessung in den Strahlengang eingebracht, so dass Röntgenstrahlung mit einer Energie von 2-8 keV aufgrund der Transmissivität der Beryllium-Folie, die in Abb. 3.5 dargestellt ist, zu 70-100% diese Folie passieren kann. Oberhalb des Strahlrohres befindet sich der Lichtaufbau (Abb. 3.4), in dem die in Kap. 3.1.1 besprochenen Lichtreferenzlinien erzeugt werden (siehe Kap. 3.2.2), die dann mit



**Abbildung 3.5:** Transmissivität einer Beryllium-Folie mit einer Dicke von  $25 \mu\text{m}$  in Abhängigkeit der Energie der einfallenden Photonen.

einem im Strahlrohr montierten Spiegel oder einem Emulsionsschicht-Strahlteiler in den Strahlengang der Röntgenstrahlung eingekoppelt werden können. In das Strahlrohr sind weiterhin mit Hilfe zweier Linearmanipulatoren zwei doppelt-konkave Linsen einzubringen, deren Funktion auch Gegenstand von Kap. 3.2.2 ist. Die Spektrometer-Hauptkammer besitzt eine gleichschenkelige Trapez-Form, die den Anschluß der beiden Detektoreinheiten für das Bond-Verfahren optimiert. Membranbälge sorgen für die flexible und UHV-taugliche Verbindung zwischen der Hauptkammer und den Detektoreinheiten. Relativ zur spannungsfreien Position der Bälge ist das überstreichbare Winkelintervall aufgrund der Beweglichkeit der Bälge auf  $\pm 30^\circ$  begrenzt. Auf den beiden Seiten der Hauptkammer befinden sich konzentrisch zur Kristallrotationsachse zwei Flansche zur Montage des Kristallhalters und einer Turbomolekularpumpe. Ein Flansch, der sich parallel zum Strahlrohr befindet, ist mit einem Glasfenster versehen, das für Justagezwecke verwendet werden kann (siehe auch Kap. 3.3.6).

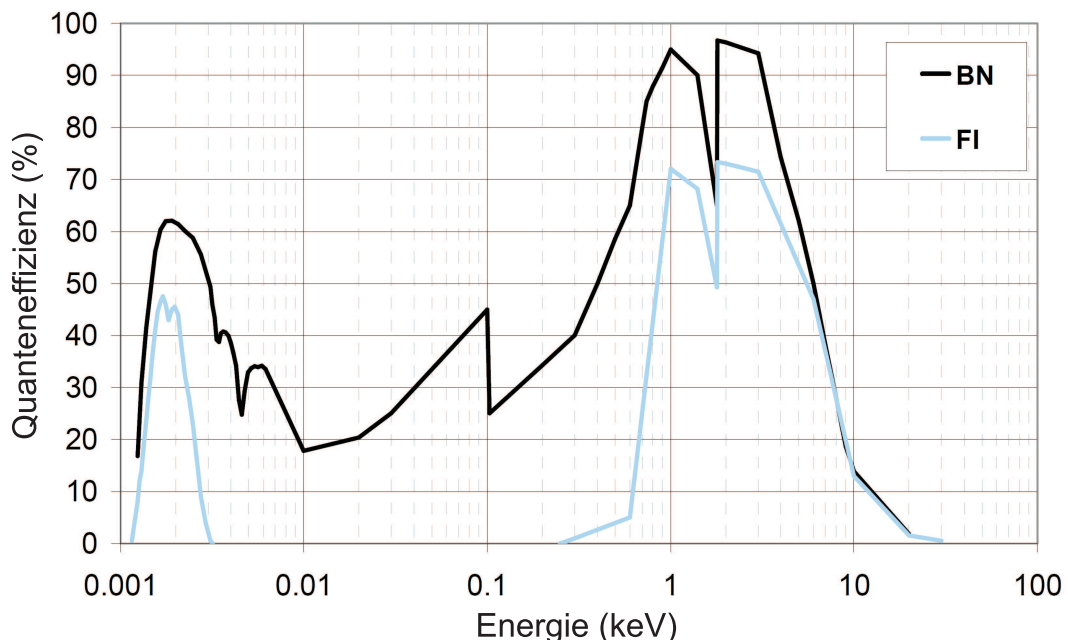
Die beiden Detektoren müssen in der Lage sein, sowohl die optischen Lichtfernenlinien (siehe Kap. 3.1.1) als auch die beobachtete Röntgenstrahlung zu detektieren, was eine Sensivität in beiden Wellenlängenbereichen erfordert. In den Messungen dieser Arbeit wurden dazu zwei identische CCD Kameras (engl.: charge coupled devices), die zudem ein für Langzeitmessungen günstiges Signal-zu-Rauschverhältnis aufweisen, verwendet. Linearmanipulatoren zwei bikonvexe Linsen einzubringen, deren Funktion auch Gegenstand von Kap. 3.2.2 ist. Es handelt sich um das Modell DO436 der Firma Andor mit einer Chipgröße von  $2048 \times 2048$  Pixeln ( $27.6 \times 27.6 \text{ mm}^2$ ) und einer Pixelgröße von  $13.5 \times 13.5 \mu\text{m}^2$ . Wie in Abb. 3.6 dargestellt, erreicht der Detektor hohe bis sehr hohe Quanteneffizienz für Photonen mit einer Energie von 300-6000 eV. Während in früheren Experimenten genutzte CCD Kameras mittels stickstoffgekühlter Peltier-Elemente auf

### 3.2. Experimenteller Aufbau

niedrige Temperaturen gekühlt wurden, lassen sich die in dieser Messung verwendeten CCDs mit Hilfe eines wassergekühlten Peltier-Elementes auf eine Temperatur auf  $-95^\circ$  stabilisieren, so dass das thermische Rauschen des Detektors unterhalb das Auslese-Rauschens des Detektors liegt, die Mobilität der Elektronen aber nicht unzulässig verringert wird. Der Einsatz der Wasserkühlung hat dabei den Vorteil, dass unterschiedliche Füllstände im  $\text{LN}_2$ -Dewar und resultierende Drehmomente sowie Erschütterungen des Spektrometers vermieden werden können.

Die CCDs sind auf Kamerawagen montiert. Diese können sich mit Hilfe von Schrittmotoren auf Schienen bewegen, die konzentrisch um die Rotationsachse des Kristalls verlaufen, wobei die Position der Kameras mit kommerziellen Winkelmessgeräten (Heidenhain ERA 880C) mit einer Genauigkeit von  $\sim 10^{-3}^\circ$  ausgelesen werden können.

Weiterhin befindet sich in der Spektrometer-Hauptkammer der Kristallhalter, der eine azimutale Ausrichtung des Kristalls beim Einbau in das Spektrometer erlaubt, so dass der Einfluss eines möglichen Verkippungswinkels  $\delta$  zwischen Netzebenen und Oberfläche des Kristalls auf die Bragg-Reflektion der Röntgenstrahlung minimiert wird. Für eine ausführlichere Betrachtung siehe auch [51,97]. Der Kristallhalter ist mit der Spektrometerkammer über eine Vakuum-Rotationsplattform (Vacuum Generators RP100M) verbunden. Diese wird über ein Getriebe mittels eines Schrittmotors, der eine Positionierung des Kristalls mit einer Schrittweite von  $0.0025^\circ$  erlaubt, angetrieben.

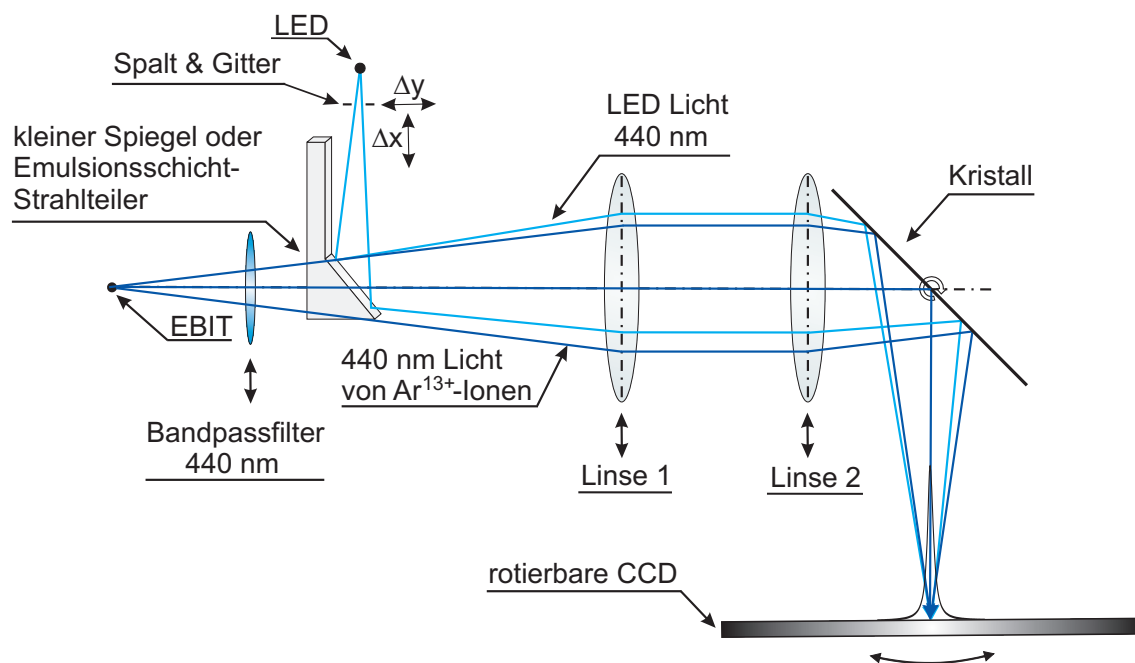


**Abbildung 3.6:** Schwarze Kurve: Typische Quanteneffizienz für Kameras, die nach der rückwärtigen Belichtungsmethode (engl.: back illuminated) konstruiert sind, also auch für die CCD Kameras, die in dieser Arbeit verwendet wurden. Blaue Kurve: Typische Quanteneffizienz für Kameras, die nach der vorderseitigen Belichtungsmethode (engl.: front illuminated) konstruiert sind.

Zur Messung des Kristallwinkels wird ein Winkelmessgerät, Modell RON 905, der Firma Heidenhain, ein inkrementaler Messgeber mit einer absoluten Genauigkeit von  $5 \cdot 10^{-5} \text{ }^\circ$ , verwendet. Da für die in dieser Arbeit gemessenen Winkeldifferenzen näherungsweise  $\gamma \geq 60^\circ$  gilt, ist der aus der Winkelmessung resultierende Anteil am Gesamtfehler einer Wellenlängenmessung damit (viel) kleiner als 1 ppm.

### 3.2.2 Der Lichtreferenzlinien-Aufbau

Wie bereits in Kap. 3.1.1 angedeutet, muss die Position des Beugungsgitters, das mit dem Ursprung der Lichtreferenzlinien zusammenfällt, präzise bekannt und zu justieren sein, da Gl. 3.2 nur streng unter der Annahme gültig ist, dass der Ursprung der Lichtreferenzlinien sich in räumlichem Überlapp mit dem der Röntgenstrahlung befindet. Eine genauere Analyse findet sich in [51, 86]. In diesem Kapitel soll der experimentelle Aufbau vorgestellt werden, der diesen Überlapp gewährleistet. Dabei muss die geforderte Positionierung des Beugungsgitters in zwei Raumrichtungen  $x$  und  $y$  mit einer Genauigkeit  $\Delta x$  und  $\Delta y$  (siehe Abb. 3.7) erfolgen. Die Werte für  $\Delta x$  und  $\Delta y$ , die gefordert werden müssen, um eine relative Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 1 \text{ ppm}$  zu erreichen, lassen sich mit Hilfe einer Simulation [51, 86] berechnen. Dabei ergibt sich, dass eine Fehlausrichtung des Beugungsgitters im Richtung  $\Delta x$  zu einem vergleichsweise geringen systematischen Fehler in der Wellenlängenbestimmung der untersuchten Röntgenlinie führt. Eine beim Montieren des Lichtaufbaus sichergestellte Ausrichtung von  $\Delta x \approx \pm 5 \text{ mm}$  ga-

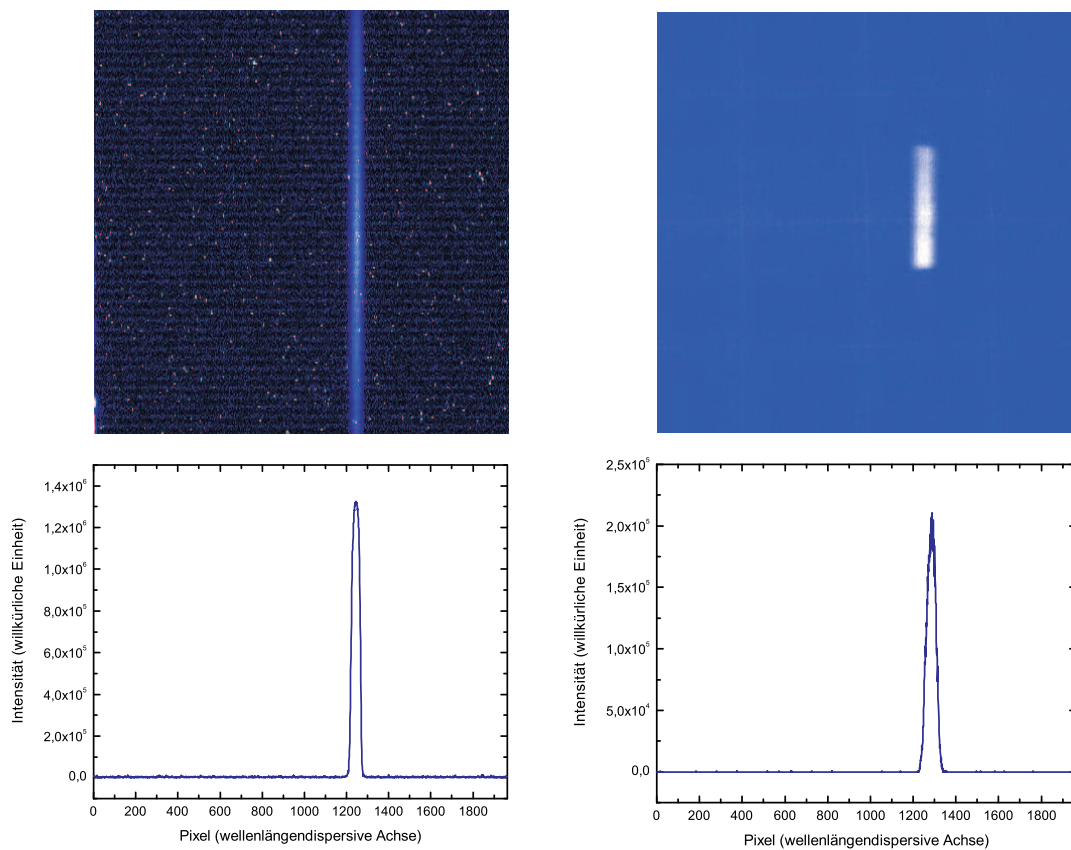


**Abbildung 3.7:** Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung für die Justage des Beugungsgitters. Dazu werden zwei reelle Abbilder, das der Ar<sup>13+</sup>-Ionenwolke bei 440 nm und des Spaltes, der das Beugungsgitter enthält, erzeugt und in Überlapp gebracht. Die einzelnen Komponenten des Aufbaus sind im Text beschrieben.

### 3.2. Experimenteller Aufbau

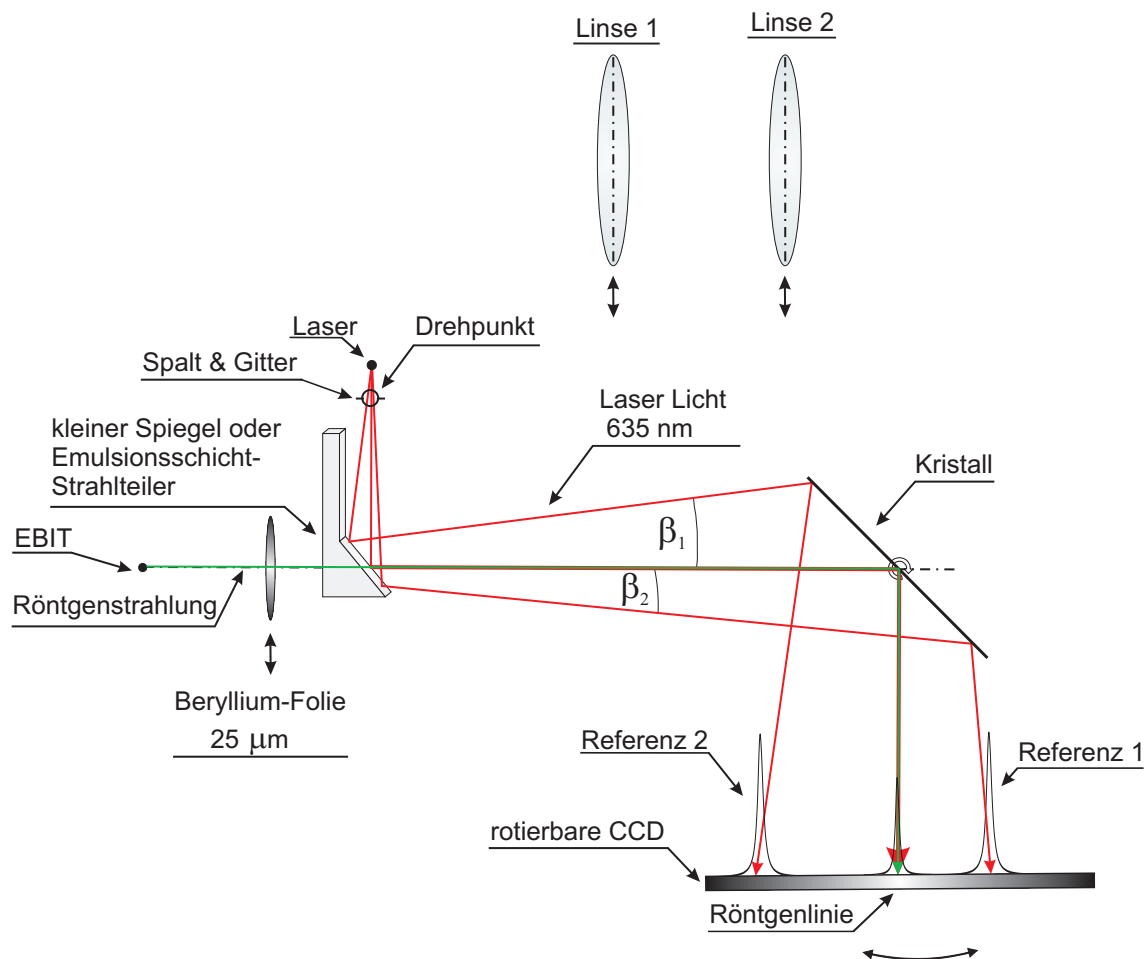
rantiert immer noch die angestrebte relative Messgenauigkeit von  $\Delta\lambda/\lambda \leq 1$  ppm. Andererseits hat eine Fehlpositionierung des Beugungsgitters um  $\Delta y$  einen viel größeren Einfluss auf die in einer Wellenlängenmessung erzielbare Genauigkeit, so dass eine Unsicherheit von  $\Delta y \leq \pm 0.5$  mm gefordert werden muss, um die angestrebte relative Genauigkeit in der Wellenlängenbestimmung von 1 ppm zu erreichen.

Um eine Positionierung mit dieser Präzision in Richtung  $y$  zu gewährleisten, werden reelle Abbilder der Ionenwolke, die die Quelle der Röntgenstrahlung darstellt, und eines Einzelspaltes mit einer Breite von  $\sim 1.2$  mm, in dem das Beugungsgitter montiert ist, erzeugt und in Überlapp gebracht. Hier soll dieser Prozess für eine Anordnung des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT diskutiert werden. Für ein parallel zum FLASH-EBIT-



**Abbildung 3.8:** Links oben: Reelles Abbild der Ionenwolke für ein senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiertes Röntgenspektrometer. Die identische Darstellung für ein parallel zum FLASH-EBIT-Elektronenstrahl ausgerichtetes Spektrometer ist in Abb. 3.41 zu sehen. Links unten: Projektion des Abbildes der Ionenwolke auf die wellenlängendispersive Detektorachse zur Bestimmung der Wolkenposition. Rechts oben: Aufnahme des mit einer LED ungleichmäßig beleuchteten Spaltes. Rechts unten: Projektion des Abbildes des Spaltes auf die wellenlängendispersive Achse zur Bestimmung der Spaltposition und damit der Position des Beugungsgitters und des Ursprungs der Lichtreferenzlinien. Die Intensität ist in den Bildern durch einen Farbkode implementiert und nimmt von schwarz über blau nach weiß zu.

Elektronenstrahl ausgerichtetes Spektrometer verläuft die Justage aber analog. Um ein reelles Abbild der Ionenwolke zu generieren, wird zunächst Argongas in die EBIT injiziert und der  $2s^2 2P_{3/2} \rightarrow 2s^2 2P_{1/2}$  (M1) Übergang in borartigem Argon [137] angeregt. Die emittierte Strahlung mit einer Wellenlänge von  $\sim 440$  nm, die aus dem gleichen Quellvolumen entstammt wie die später spektroskopierte Röntgenstrahlung, passiert den Bandpassfilter, Abb. 3.7, (siehe auch Kap. 3.2.1) (440 nm, 3 nm Bandbreite), der Streulicht, z.B. von der Kathode, unterdrückt. Mit Hilfe einer ersten durch einen Linearmanipulator in den Strahlengang der 440 nm Strahlung eingebrachten achromatischen Linse wird der Strahlengang zunächst parallelisiert. Die Fokuslänge dieser Linse entspricht dabei präzise dem Abstand zwischen Fallenzentrum und Linse. Eine zweite achromatische Linse, deren Fokus in der Detektorebene liegt, erzeugt dann ein reelles Abbild der Ionenwolke im Wellenlängenbereich von 440 nm auf dem Detektor. Ein Abbild dieser Ionenwolke für

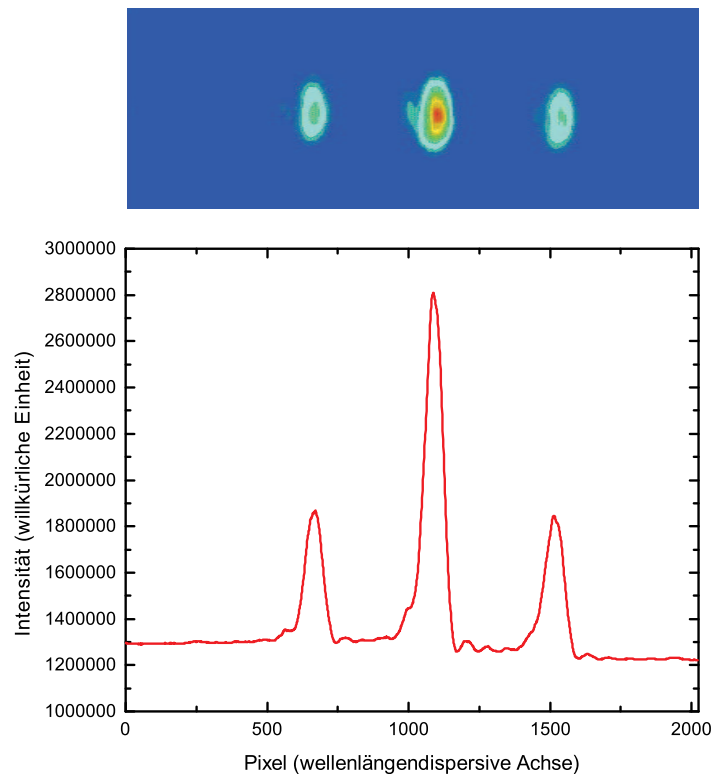


**Abbildung 3.9:** Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung für die Erzeugung der Lichtreferenzlinien. Die Öffnungswinkel der Lichtreferenzlinienstrahlen zur Hauptachse  $\beta_{1,2}$  können durch Rotation des gesamten Lichtaufbaus um den Drehpunkt geändert werden, wobei der vorher hergestellte Überlapp zwischen der Position der Ionenwolke und des Spaltes bzw. Beugungsgitters erhalten bleibt. Die weiteren Komponenten des Aufbaus sind im Text beschrieben.



### 3.2. Experimenteller Aufbau

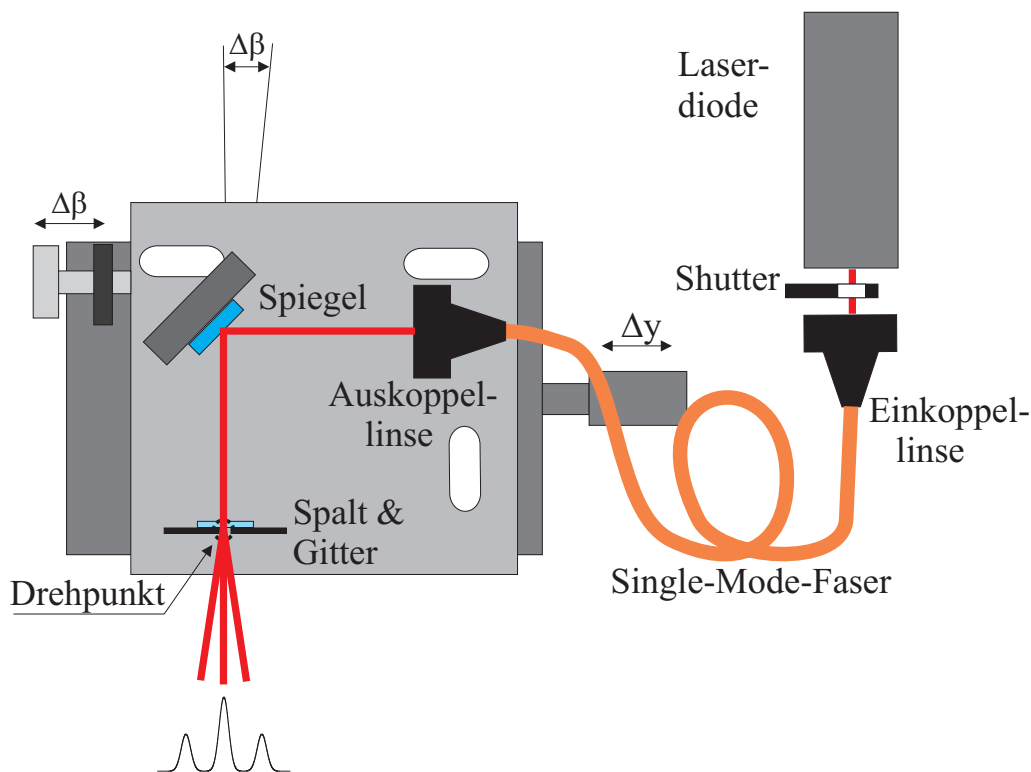
---



**Abbildung 3.10:** Oben: Interferenzmuster, das durch die Beugung der Laserstrahlung am Gitter zustande kommt. Rot bezeichnet dabei höchste Intensität, blau niedrigste. Unten: Projektion des Interferenzmusters auf die wellenlängendispersive Achse. Es ist eine Überlagerung des eigentlichen Interferenzmusters (Transmissionsgitter) mit dem des Einzelspaltes zu erkennen.

eine Spektrometermontage senkrecht zum Elektronenstrahl ist in Abb. 3.8 zusammen mit seiner Projektion auf die wellenlängendispersive Achse dargestellt. Da es sich beim Abbild der Ionenwolke um ein Bild mit Abbildungsmaßstab 1:1 handelt, lässt sich der Darstellung entnehmen, dass die Ionenwolke eine Ausdehnung parallel zum Elektronenstrahl von mindestens 27.6 mm (Größe der nicht-dispersiven Achse des Detektors) besitzt. Ein Vergleich mit der Driftröhrenkonstruktion zeigt, dass die Ionenwolke eine Ausdehnung parallel zum Elektronenstrahl von ca. 38.5 mm besitzen sollte, was, wie in Kap. 3.3 noch besprochen wird, eine große Auswirkung auf die Datenanalyse hat.

Um ein Abbild des Einzelspaltes, in dem das Beugungsgitter montiert ist, zu erhalten, wird dieser mit einer Leuchtdiode (engl.: LED: light emitting diode) mit einer Wellenlänge von 440 nm beschienen. Das Licht der LED wird durch einen kleinen Spiegel oder einen Emulsionsschicht-Strahlteiler in den Strahlengang des von der Ionenwolke emittierten 440 nm Lichtes eingekoppelt und durch die oben beschriebenen Linsen auf den Detektor fokussiert, so dass ein reelles Abbild des Spaltes erzeugt wird. Dieses Abbild ist in Abb. 3.8 zusammen mit seiner Projektion auf die



**Abbildung 3.11:** Lichtaufbau zur Erzeugung der Lichtreferenzlinien als Maxima erster Ordnung eines Interferenzmusters, das erzeugt wird, wenn ein Laser auf ein Beugungsgitter fällt. Modifiziert aus [51].

wellenlängendispersive Detektorachse zu sehen. Nun lässt sich der geforderte horizontale Überlapp von Beugungsgitter und Ionenwolke von  $\Delta y \leq \pm 0.5$  mm herstellen, indem die Position des Spaltes und damit des Beugungsgitters so lange variiert wird, bis die Peakmaxima der Gaußfits der Projektionen des reellen Abbildes der Ionenwolke und des Spaltes auf die wellenlängendispersive Achse überlappen.

Nachdem der Überlapp hergestellt wurde, werden die beiden Linsen durch Linearmanipulatoren aus dem Strahlengang entfernt (siehe Abb. 3.9). Das Beugungsgitter, das sich innerhalb des Schlitzes befindet, wird mit einer Laserdiode, die kohärentes Licht einer Wellenlänge von 635 nm emittiert, beschienen und die zwei Maxima erster Ordnung des entstehenden Interferenzmusters als Lichtreferenzlinien für die  $a/b$ -Methode genutzt. Die Öffnungswinkel der Strahlengänge der Lichtreferenzlinien relativ zur Hauptachse des Spektrometers  $\beta_{1,2}$  sind dabei sehr klein, im Bereich von  $0.15^\circ$ , da ein für die verwendete Laserwellenlänge (635 nm) verhältnismäßig großer Strichabstand des Gitters von 0.2 mm benutzt wurde. Die Lichtreferenzlinien können daher beide trotz der kleinen Chipoberfläche von  $27.6 \times 27.6$  mm<sup>2</sup> bei einem Abstand des Gitters zum Detektor von  $\sim 2300$  mm, wie er in diesem Experiment vorlag, detektiert werden. Da der Spalt eine Breite von 1.2 mm besitzt, werden gleichzeitig 6 Striche des Beugungsgitters, das sich innerhalb des Einzelspaltes befindet, beleuchtet, so dass der Kontrast der Maxima und Minima des Interferenzmusters für die Datenanalyse ausreichend hoch ist. Ein von der CCD Kamera aufgenommenes Bild

des Interferenzmusters und seiner zugehörigen Projektion auf die wellenlängendispersive Achse ist in Abb. 3.10 zu sehen. Bei der Spaltbreite von 1 mm und einem Durchmesser der Ionenwolke von  $\sim 0.5$  mm kann der Überlapp zwischen dem Abbild des Spaltes und der Ionenwolke auf ca. 0.05 mm genau bestimmt werden. Die Öffnungswinkel  $\beta_{1,2}$  der Lichtreferenzlinien können durch Rotation des gesamten Lichtaufbaus um das Zentrum des Einzelspaltes (siehe Drehpunkt in Abb. 3.9) zu  $\beta_1 \approx \beta_2$  geändert werden, ohne dass der vorher hergestellte Überlapp zwischen der Position der Ionenwolke und des Spaltes bzw. Beugungsgitters verloren geht. Alle Komponenten des Lichtaufbaus sind in Abb. 3.11 dargestellt. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, wird das Licht der Laserdiode durch eine Einzelmodenfaser (engl.: single mode fibre) in den optischen Aufbau eingeführt, so dass durch die Erwärmung der Diode keine Ausdehnung oder Verschiebung des Beugungsgitters hervorgerufen wird. Außerdem kann der Lichtaufbau auf diese Weise kompakt und leichter gehalten werden. Der Laserstrahl wird über einen kleinen Spiegel im Lichtaufbau auf das Beugungsgitter umgelenkt, was die Justage des Laserstrahles bezüglich des Beugungsgitters vereinfacht. Die LED ist neben diesem Spiegel oberhalb des Spaltes montiert.

### 3.3 Systematische Fehlerquellen

Bei der Diskussion der  $a/b$ -Methode wurden besonders in Kap. 3.1.1 ideale Voraussetzungen angenommen, die im experimentellen Aufbau nur näherungsweise erreicht werden können. Durch solche Abweichungen der experimentellen Anordnung von der idealen Geometrie können natürlich systematische Fehler in der Wellenlängenmessung entstehen, die die Genauigkeit, die in diesen Messungen erreicht werden kann, begrenzen. Solche Fehlerquellen sind eine exzentrische Rotation des Kristalls oder/und der Detektoren, verschiedene Positionen von Röntgen- und Lichtreferenzlinienquelle und ein möglicher Verkippungswinkel zwischen Kristalloberfläche und Reflektionsebene. Eine Diskussion über die Auswirkungen eines Aufbaus, bei dem der Ursprung der Röntgenstrahlung und der Lichtreferenzlinien (virtuell, d.h. nach Spiegelung an der Oberfläche des kleinen Spiegels (siehe Abb. 3.7),) nicht überlappen, auf die Präzision der Wellenlängenmessung bei einer möglichen Exzentrizität des Kristalls oder der Detektoren findet sich in [51, 86]. Es soll an dieser Stelle lediglich erwähnt werden, dass sich aufgrund der dort vorgestellten Simulationen ergibt, dass bei einer angestrebten Präzision in der Wellenlängenbestimmung von 1 ppm ein Überlapp des Ursprungs der Röntgenstrahlung und der Lichtreferenzlinien von  $\Delta y \leq 0.5$  mm sichergestellt werden muss. Motiviert durch diese Überlegungen wurde die Methode zur Justage des Lichtaufbaus und Herstellung dieses Überlapps entwickelt, die bereits eingehend in Kap. 3.2.2 diskutiert wurde. Die Auswirkungen eines Verkippungswinkels zwischen Kristalloberfläche und Kristallgitterebenen wurden in [97] detailliert untersucht und der Einfluss dieses Verkippungswinkels auf das Experiment durch geeignete Rotation des Kristalls, nämlich so, dass Verkippungswinkel und Streuebene senkrecht aufeinander stehen, minimiert [51]. Alle eben diskutierten systematischen Fehlerquellen sollen nicht Gegenstand dieses Kapitels sein, da sie bereits ausführlich beschrieben sind [51, 86, 97]. Eine weitere Fehlerquelle allerdings, die sich aufgrund der Tatsache ergibt, dass die Bragg-Reflektion bisher nur zweidimensional betrachtet wurde, und die in früheren Arbeiten [51, 86] nur oberflächlich behandelt wurde, wird im folgenden Kapitel diskutiert und es

werden experimentelle Ansätze aufgezeigt, den Einfluss dieser Fehlerquelle auf die Messresultate der hier durchgeführten Wellenlängenmessungen zu bestimmen und zu minimieren.

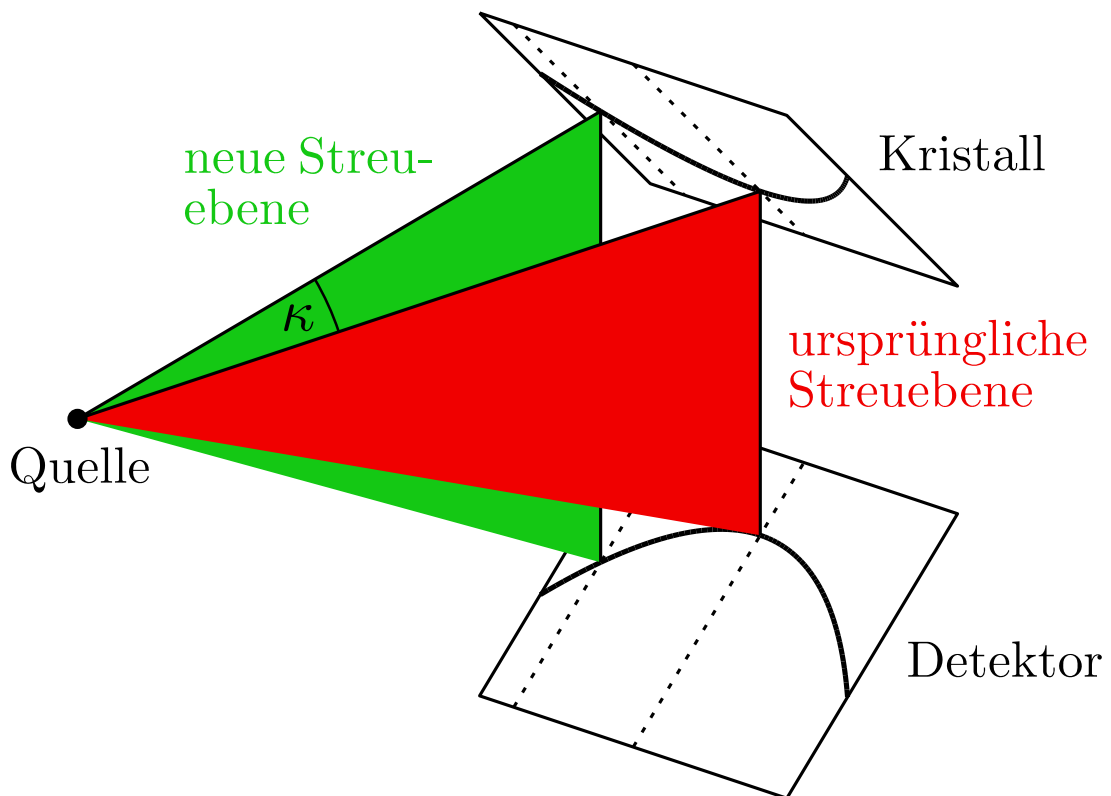
### 3.3.1 Dreidimensionale Betrachtung der Bragg-Reflektion

Zur Einführung und Erklärung der  $a/b$ -Methode (Kap. 3.1.1) und für die Herleitung des Bragg-Gesetzes (Kap. 2.2.1) wurde ein zweidimensionales Bild gewählt und die Geometrie in der zweidimensionalen Streuebene der Röntgenstrahlung betrachtet. Allerdings ist diese vereinfachte Darstellung nicht hinreichend, will man Hochpräzisionsröntgenspektroskopie mit einer relativen Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung von bis zu 1 ppm betreiben. Insbesondere können bei Vernachlässigung der dreidimensionalen Geometrie, d.h. der Tatsache, dass Detektor, Kristall und Quelle eine Ausdehnung senkrecht zur Streuebene der Röntgenstrahlung besitzen, und Auswertung der Daten mit Hilfe von zweidimensional hergeleiteten Gesetzmäßigkeiten zusätzliche systematische Fehler entstehen, die sich in der relativen Unsicherheit  $\Delta\lambda/\lambda$  der experimentell ermittelten Wellenlängen niederschlagen und so die erreichbare Genauigkeit limitieren. Wie im folgenden gezeigt wird, führt eine dreidimensionale Betrachtung der Bragg-Reflektion im Vergleich zur zweidimensionalen Betrachtung zu einer Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor und einer Verschiebung des Peakmaximums der auf die wellenlängendispersive Detektorachse projizierten Röntgenlinie. In den Absolutmessungen zur Bestimmung von Röntgenwellenlängen ohne Rückgriff auf sekundäre Referenzlinien mit Hilfe der  $a/b$ -Methode in Kombination mit der Bond-Technik heben sich diese jeweiligen Verschiebungen der Peakmaxima auf den beiden Detektoren nicht auf, stärker noch, der Effekt wird durch den Einsatz zweier Detektoren verdoppelt.

Die Krümmung der Röntgenlinien auf dem Detektor wurde in den bisherigen Röntgenwellenlängenmessungen mit dem Heidelberg-Kristallspektrometer mit ebenem Kristall nicht aufgelöst, d.h. für die bei  $w$ -Überträgen emittierte Röntgenstrahlung wurde die Verschiebung der Peakmaxima der auf die dispersive Detektorachse projizierten Röntgenlinien aufgrund der Krümmung dieser Linien nur indirekt über die Verschiebung zwischen gemessener und theoretischer Lyman- $\alpha_1$ -Wellenlänge und ein Skalierungsgesetz bestimmt [43] und limitierte daher die erreichbare relative Genauigkeit  $\Delta\lambda/\lambda$  der Wellenlängenmessungen. Ein Hauptziel dieser Arbeit war es daher, diese Linienkrümmung experimentell zu beobachten und gegebenenfalls durch Änderung des experimentellen Aufbaus zu reduzieren, um Wellenlängenmessungen ohne Rückgriff auf dieses Skalierungsgesetz mit einer relativen Genauigkeit von 1-2 ppm durchführen zu können. Die folgenden Kapitel geben zunächst ein dreidimensionales Bild der Bragg-Reflektion und beschreiben die resultierende Krümmung der Röntgenlinien auf den Detektoren sowie die Größe der resultierenden Verschiebungen der Peakmaxima der auf die dispersive Detektorachse projizierten Röntgenlinien. Danach werden zum einen Simulationen dieser Krümmung - insbesondere in Hinblick auf den speziellen Aufbau des in dieser Arbeit verwendeten Röntgenspektrometers - vorgestellt und mit experimentellen Resultaten verglichen. Zum anderen wird auf experimentelle Ansätze - wie sie in den Messungen dieser Arbeit verwendet wurden - zur Verminderung dieser Linienkrümmung eingegangen.

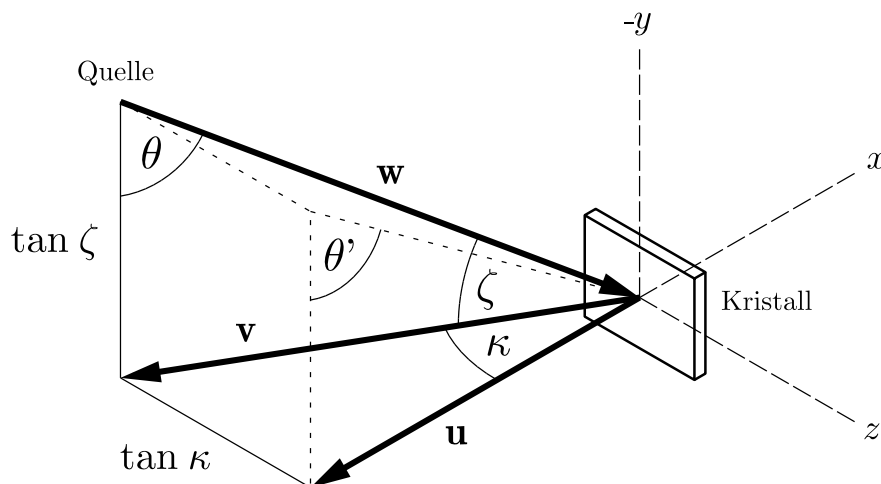
### 3.3.2 Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Einsatz einer Röntgenpunktquelle

Zur Herleitung der oben erwähnten Verschiebung der Peakmaxima der auf die wellenlängendispersive Detektorachse projizierten Röntgenlinien ist es sinnvoll, zum besseren Verständnis zunächst den einfachen dreidimensionalen Fall einer (monochromatischen) Punktquelle, eines ausgedehnten Kristalls und Detektors zu betrachten. Dies trifft zwar experimentell nicht zu, da die Ionenwolke z.B. bei senkrechter Orientierung des Spektrometers bezüglich des Elektronenstrahls vom Kristall aus gesehen eine Ausdehnung von  $\sim 40$  mm besitzt, ist aber als erster Ansatz zur Beschreibung der dreidimensionalen Geometrie durchaus sinnvoll. Abb. 3.12 zeigt eine schematische Darstellung dieser Situation. In dieser ersten Betrachtung wird angenommen, dass die monochromatische Röntgenpunktquelle, der Mittelpunkt des Kristalls und des Detektors sowie die Kristallgitternormale in der gleichen Ebene liegen, der sogenannten (ursprünglichen) Streuebene-



**Abbildung 3.12:** Dreidimensionale Betrachtung der Reflexion der von einer Röntgenpunktquelle isotrop emittierten monochromatischen Röntgenstrahlung an einem ausgedehnten Kristall. Zur besseren Übersicht sind nur zwei Röntgenstrahlen, einer, der in der ursprünglichen Streuebene, und einer, der in der neuen Ebene einläuft, dargestellt. Als ursprüngliche Streuebene wird dabei diejenige Ebene bezeichnet, in der die Röntgenpunktquelle, der Mittelpunkt des Kristalls und des Detektors sowie die Kristallgitternormale liegen. Die neue Ebene ergibt sich durch Drehung der ursprünglichen Ebene um den Winkel  $\kappa$  in der  $x$ - $z$ -Ebene.

ne des Kristalls, die senkrecht zu den Gitterebenen orientiert ist. Die Röntgenpunktquelle sendet Röntgenstrahlung der Wellenlänge  $\lambda$  isotrop, d.h. in alle Raumrichtungen gleichmäßig, aus. Die Geometrie der Röntgenstrahlung, die so abgestrahlt wird, dass sie in der ursprünglichen Streuebene auf den Kristall einläuft, lässt sich wie in Kap. 2.2.1 dargestellt durch das zweidimensionale Bragg-Gesetz mit dem Bragg-Winkel  $\theta$  und der Gitterkonstante  $d$  beschreiben. Interessant ist der Fall für die Röntgenstrahlung, welche nicht in der ursprünglichen Streuebene einläuft, sondern in einer „neuen“ Ebene, die mit der ursprünglichen Streuebene den Winkel  $\kappa$  einschließt. Auch die Reflektion der in dieser „neuen“ Streuebene einlaufenden Röntgenstrahlung kann auf die zweidimensionale Geometrie der Bragg-Reflektion, nun aber in dieser neuen Ebene, mit dem gleichen Bragg-Winkel  $\theta$  und der gleichen Gitterkonstante  $d$  wie für Röntgenstrahlung, die in der ursprünglichen Streuebene einläuft und dort Bragg-reflektiert wird, zurückgeführt werden. Die Problematik entsteht nun darin, dass die Bragg-Winkel experimentell bezüglich der ursprünglichen Streuebene vermessen werden (zu der die Detektorebene senkrecht liegt). Um dies genauer zu beleuchten ist es notwendig, den Bragg-Winkel  $\theta$  für die in der neuen Ebene einlaufende Röntgenstrahlung in die ursprüngliche Streuebene zu projizieren. Diese Projektion des Bragg-Winkels  $\theta$ , die hier als  $\theta'$  bezeichnet wird, und der Zusammenhang zwischen  $\theta'$  und  $\theta$  lässt sich durch die Einführung des Kristallnormalenvektors  $\mathbf{u}$  in der ursprünglichen Streuebene und des Vektors, den man durch Drehung von  $\mathbf{u}$  um  $\kappa$  erhält, des Vektors  $\mathbf{v}$ , in der neuen Streuebene sowie des Vektors  $\mathbf{w}$ , der die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung charakterisiert, mittels der Skalarprodukte dieser Vektoren ermitteln. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit lassen sich  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{w}$  wie in Abb. 3.13 dargestellt



**Abbildung 3.13:** Projektion des Bragg-Winkels  $\theta$  der Röntgenstrahlung, die in der neuen Ebene einläuft, die um den Winkel  $\kappa$  zur ursprünglichen Streuebene gedreht erscheint, auf diese ursprüngliche Streuebene. In der ursprünglichen Ebene ergibt sich damit der Bragg-Winkel  $\theta'$ . Der Zusammenhang zwischen  $\theta'$  und  $\theta$  lässt sich durch die Einführung des Kristallnormalenvektors  $\mathbf{u}$  in der ursprünglichen Streuebene und des Vektors, den man durch Drehung von  $\mathbf{u}$  um  $\kappa$  erhält, des Vektors  $\mathbf{v}$ , in der neuen Streuebene sowie des Vektors  $\mathbf{w}$ , der die Einfallrichtung der Röntgenstrahlung charakterisiert, mittels Skalarprodukte dieser Vektoren ermitteln.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

als

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 = -1 \\ u_2 = 0 \\ u_3 = 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 = -1 \\ v_2 = 0 \\ v_3 = -\tan(\kappa) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 = 1 \\ w_2 = \tan(\zeta) \\ w_3 = \tan(\kappa) \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

ausdrücken, wobei  $\zeta$  den Winkel zwischen  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{w}$  bezeichnet. Da sich der Winkel zwischen zwei Vektoren  $\mathbf{x}$  und  $\mathbf{y}$  über die Beziehung

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = |\mathbf{x}| |\mathbf{y}| \cos \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad (3.6)$$

ermitteln lässt, wobei  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$  das Skalarprodukt der beiden Vektoren darstellt, kann man über das Skalarprodukt  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}$  zwischen  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{w}$  den Bragg-Winkel  $\theta$  der Röntgenstrahlung, die unter dem Winkel  $\kappa$  zur ursprünglichen Streuebene einläuft, bezüglich der neuen Streuebene berechnen. Analog ergibt sich über das Skalarprodukt  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}$  zwischen  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{w}$  der Bragg-Winkel  $\theta'$  bezüglich der ursprünglichen Streuebene für die Röntgenstrahlung, welche unter dem Winkel  $\kappa$  zur ursprünglichen Streuebene einläuft. Damit ergibt sich für  $\theta$  über das Skalarprodukt

$$\sin \theta = -\frac{1 + \tan^2 \kappa}{\sqrt{1 + \tan^2 \kappa} (1 + \tan^2 \zeta + \tan^2 \kappa)} = -\frac{\cos \kappa}{(1 + \tan^2 \zeta + \tan^2 \kappa)} \quad (3.7)$$

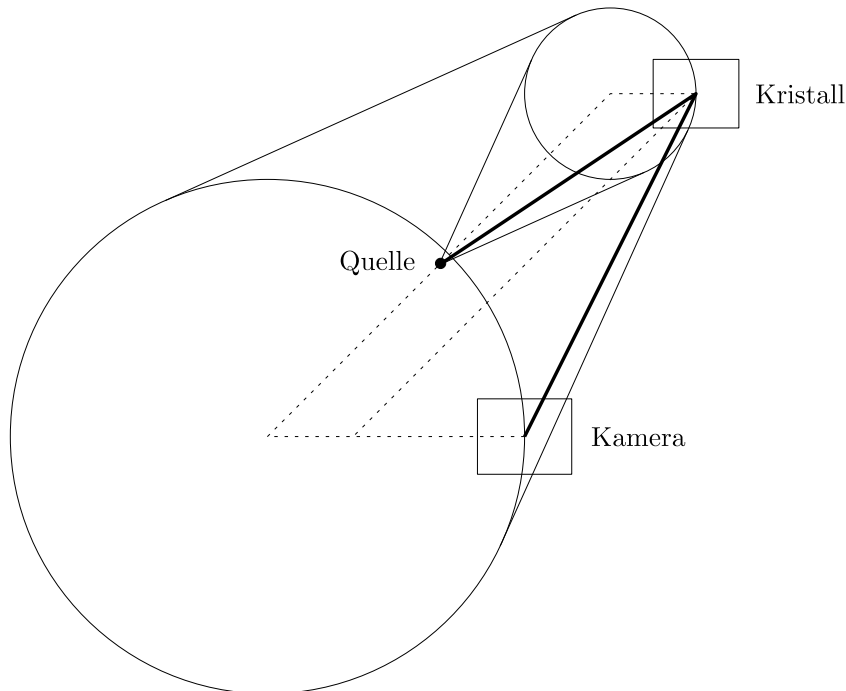
und für seine Projektion  $\theta'$  auf die ursprüngliche Streuebene

$$\sin \theta' = -\frac{1}{(1 + \tan^2 \zeta + \tan^2 \kappa)}. \quad (3.8)$$

Somit gilt für das Verhältnis  $\sin \theta / \sin \theta'$  der Röntgenstrahlung, die unter dem Winkel  $\kappa$  zur ursprünglichen Streuebene einläuft, wobei  $\theta$  den Bragg-Winkel bezüglich der neuen Ebene und  $\theta'$  die Projektion dieses Bragg-Winkels  $\theta$  auf die ursprüngliche Streuebene darstellt:

$$\frac{\sin \theta}{\sin \theta'} = \cos \kappa. \quad (3.9)$$

Durch die Projektion der Bragg-Winkel  $\theta$ , die sich für die Röntgenstrahlung in der neuen Streuebene mit einem Winkel  $\kappa$  zur ursprünglichen Streuebene ergeben, auf die ursprüngliche Streuebene, ergibt sich somit für die virtuellen Punkte, an welchen die Röntgenstrahlung, die gemäß dem Bragg-Gesetz reflektiert werden könnte, auf dem Kristall eintrifft, eine Anordnung auf einem Kegelschnitt in einer Ebene, die senkrecht zur ursprünglichen Streuebene liegt. Diese Situation wird in Abb. 3.14 wiedergegeben. Von der Röntgenstrahlung, die gemäß dem Bragg-Gesetz reflektiert werden könnte und deren Strahlengänge Schnittpunkte mit einer zur ursprünglichen Streuebene senkrechten Ebene bilden, die auf einem Kegelschnitt in dieser Ebene liegen, wird nur der Teil, der auf den Kristall fällt, Bragg-reflektiert und vom Detektor detektiert. Die beobachtete Röntgenstrahlung formt damit in der Detektorebene kein Signal, das einer Belichtung von Pixeln entlang einer Senkrechten zur dispersiven Detektorachse entspricht, sondern erscheint als gekrümmte Linie. Bei einer Projektion des vom Detektor aufgenommenen Bildes auf die disperse Achse des Detektors erhält man über einen Fit an das Röntgenlinienprofil einen Wert für das Peakmaximum,



**Abbildung 3.14:** Dreidimensionale Betrachtung der Bragg-Reflektion. Dargestellt sind zwei der einfallenden Röntgenstrahlen der Wellenlänge  $\lambda$  aus der isotropen Verteilung der von der Quelle emittierten monochromatischen Strahlung. Die Strahlengänge der Röntgenstrahlung, die gemäß dem Bragg-Gesetz reflektiert werden könnte, bilden Schnittpunkte mit einer zur ursprünglichen Streuebene senkrechten Ebene, die auf einem Kegelschnitt in dieser Ebene liegen. Ein Teil dieser Strahlung fällt auf den Kristall, wird tatsächlich Bragg-reflektiert und vom Detektor detektiert. Auf dem Detektor formt das Signal der beobachteten Röntgenstrahlung damit keine Linie, die senkrecht zur dispersiven Detektorachse ausgerichtet ist, sondern erscheint als gekrümmte Linie.

der sich um den Wert  $K$  von dem Wert unterscheidet, den man erhalten würde, wenn das detektierte Signal der Röntgenstrahlung auf dem Detektor nur durch Röntgenstrahlung mit  $\kappa = 0$  verursacht und eine senkrechte Linie zur dispersiven Detektorachse formen würde.  $K$  lässt sich - wie wir im folgenden sehen werden - aus dem Bragg-Winkel  $\theta$  und dem Winkel zwischen einlaufender Röntgenstrahlung und ursprünglicher Streuebene  $\kappa$  unter Berücksichtigung aller möglichen Einfallrichtungen der Röntgenstrahlen berechnen.

Zur Herleitung von  $K$  muss zunächst beachtet werden, dass das Bragg-Gesetz für jedwede Reflexion von Röntgenstrahlung an einem Kristall erfüllt sein muss, und sich daher nach obigen Betrachtungen ergibt, dass für die Wellenlänge  $\lambda$  der reflektierten Röntgenstrahlung

$$\lambda = \text{const.} = 2d \sin \theta = 2d \sin \theta' \cos \kappa \quad (3.10)$$

gelten muss. In der Messung wird der Bragg-Winkel in Bezug zur ursprünglichen Streuebene, die sich senkrecht zur Detektorebene befindet, gemessen, d.h.  $\theta'$  ist die gemessene Größe und  $\theta$

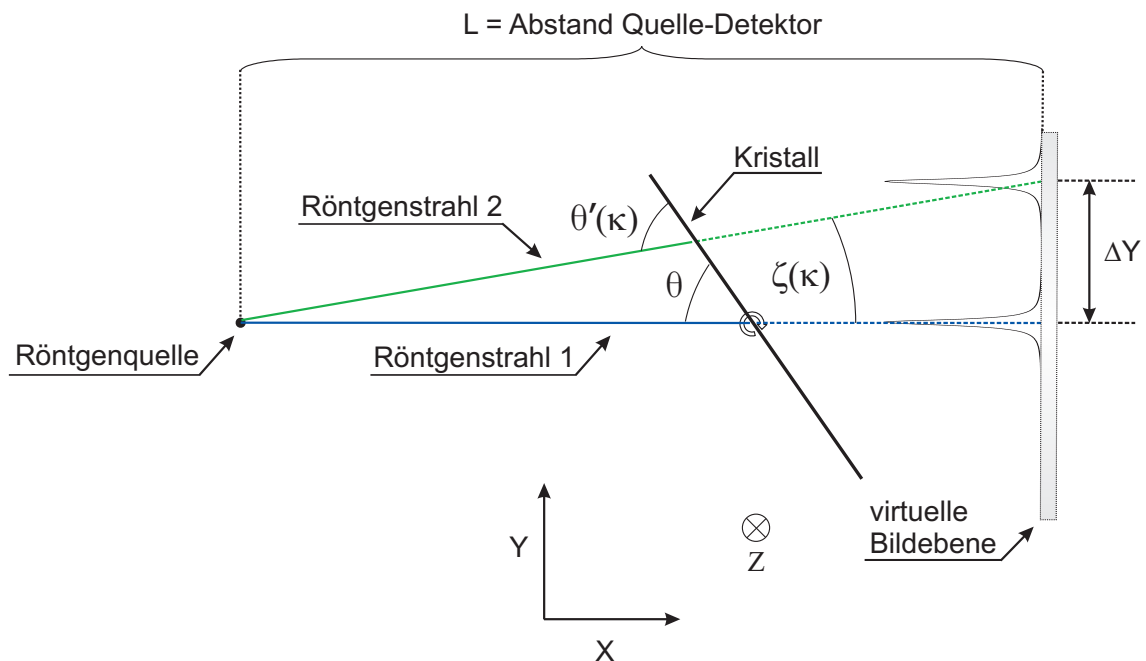


### 3.3. Systematische Fehlerquellen

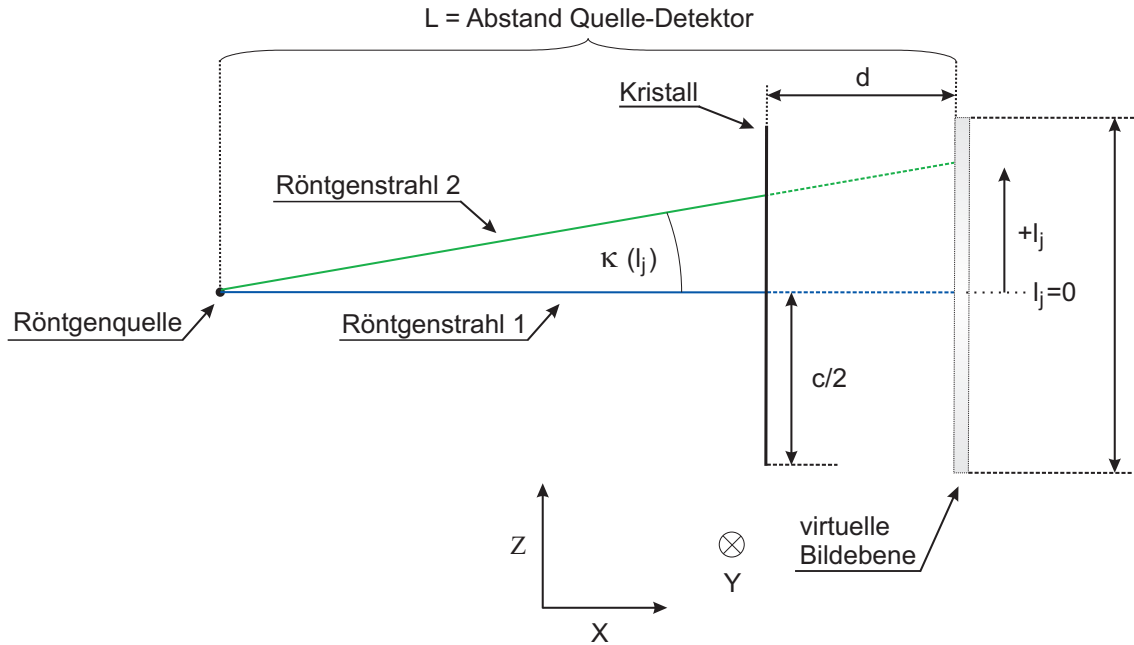
ist der tatsächliche Bragg-Winkel, dessen Größe man schlussendlich in der Messung bestimmen möchte. Da  $\cos \kappa$  immer kleiner oder gleich 1 ist, d.h.  $\cos \kappa \leq 1$  gilt, ergibt sich damit, dass der gemessene Bragg-Winkel  $\theta'$  immer größer sein wird als der tatsächliche Bragg-Winkel  $\theta$ . Die gemessene Wellenlänge wird damit, berücksichtigt man die Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor nicht gesondert, immer zu groß sein, bzw. die bestimmte Übergangsenergie zu niedrig. Mit der Definition des Winkels  $\zeta$  (siehe Abb. 3.15) als Differenz-Winkel  $\zeta(\kappa) = \theta' - \theta$  zwischen dem gemessenen Bragg-Winkel  $\theta'$  und dem tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$ , der dem Bragg-Winkel für einen unter dem Winkel  $\kappa = 0$  zur Streuebene einlaufenden Röntgenstrahl entspricht, ergibt sich

$$\zeta(\kappa) = \theta' - \theta = \arcsin(\sin \theta / \cos \kappa) - \theta . \quad (3.11)$$

Diese Änderung des gemessenen Bragg-Winkels von  $\theta$  nach  $\theta'$  führt für jeden in unterschiedlicher Streuebene einfallenden Röntgenstrahl mit  $\kappa \neq 0$  zu einer Verschiebung  $\Delta Y(\kappa)$  seines Schnittpunktes mit der Detektorebene entlang der dispersiven Detektorachse (siehe Abb. 3.15), die dann in der oben eingeführten Gesamtverschiebung  $K$  des Peakmaximums der auf die dispersive Achse projizierten Röntgenlinie resultiert. Bei einem Abstand  $L$  von Röntgenquelle und Detektor und einer Länge  $l$  (siehe Abb. 3.16) des Detektors senkrecht zur Streuebene und unter der Annahme, dass



**Abbildung 3.15:** Unterschiedlicher Strahlengang für zwei Röntgenstrahlen mit identischer Wellenlänge  $\lambda$  in der ursprünglichen Streuebene. Röntgenstrahl 1: Röntgenstrahl, der in der ursprünglichen Streuebene einläuft ( $\kappa = 0$  (siehe Abb. 3.12)). Röntgenstrahl 2: Röntgenstrahl, der unter dem Winkel  $\kappa$  (siehe Abb. 3.12) zur ursprünglichen Streuebene in der neuen Streuebene einläuft und dessen Strahlengang für diese Abbildung in die ursprüngliche Streuebene zurückprojiziert wurde.  $\theta$  bezeichnet den Bragg-Winkel des Strahles mit  $\kappa = 0$ ,  $\theta'$  die Projektion des Bragg-Winkels  $\theta$  für den Strahl mit  $\kappa \neq 0$ , der in der neuen Streuebene einfällt, auf die ursprüngliche Streuebene. Der Differenzwinkel  $\theta' - \theta$  ist  $\zeta$ .



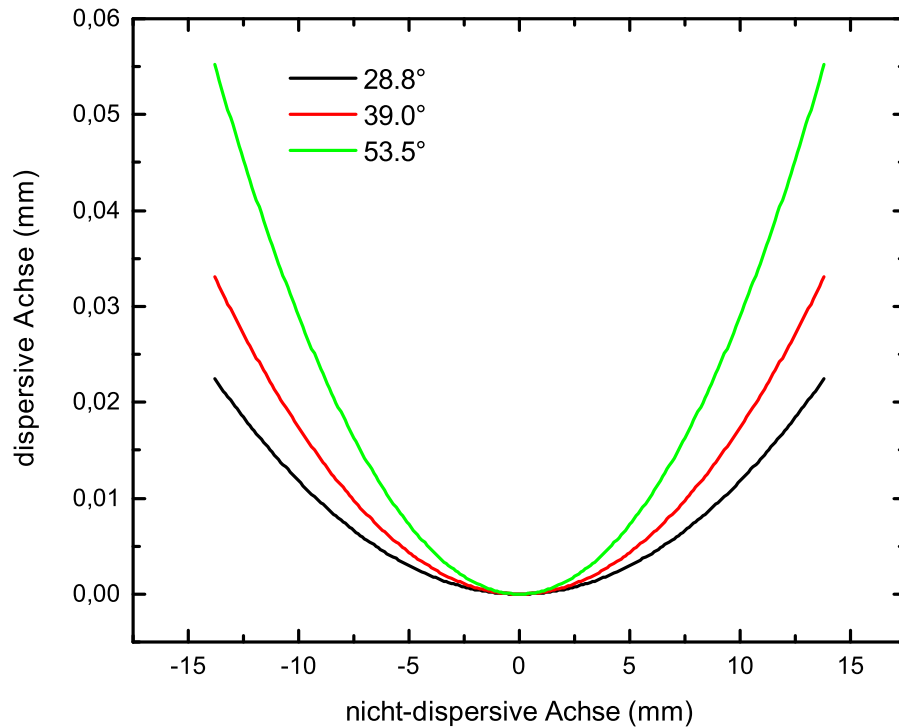
**Abbildung 3.16:** Unterschiedlicher Strahlengang für zwei Röntgenstrahlen mit identischer Wellenlänge  $\lambda$  in einer zur ursprünglichen Streuebene (siehe Abb. 3.15) senkrechten Ebene. Röntgenstrahl 1: Röntgenstrahl, der in der ursprünglichen Streuebene einläuft ( $\kappa(l_j) = 0$  (siehe Abb. 3.12)). Röntgenstrahl 2: Röntgenstrahl, der unter dem Winkel  $\kappa(l_j)$  (siehe Abb. 3.12) zur ursprünglichen Streuebene in der neuen Streuebene einläuft.  $l_j$  charakterisiert die Detektorpunkte senkrecht zur Streuebene und kann Werte zwischen  $l_{min} = -l/2$  und  $l_{max} = l/2$  annehmen, wobei  $l$  die Länge des Detektors senkrecht zur Streuebene bezeichnet. Damit gilt  $\kappa(l_j) = \arctan(l_j/L)$ .  $d$  ist der Abstand zwischen Kristall und Detektor,  $c$  bezeichnet die Länge des Kristalls senkrecht zur Streuebene.

für die Ausdehnung des Kristalls  $c$  senkrecht zur Streuebene  $c \approx l$  und für den Abstand zwischen Kristall und Detektor  $d \ll L$  gilt, erhält man (vereinfacht durch die Spiegelung der Detektoroberfläche am Kristallgitter (siehe auch Kap. 3.1.1)) - mit der Variable  $l_j$  (siehe Abb. 3.16), die die Detektorpunkte senkrecht zur Streuebene charakterisiert, und  $\kappa(l_j) = \arctan(l_j/L) - \Delta Y(l_j)$  als

$$\Delta Y(l_j) = L \cdot \tan(\zeta(\kappa(l_j))) = L \cdot \tan \left[ \arcsin \left( \frac{\sin \theta}{\cos \left( \arctan \left( \frac{l_j}{L} \right) \right)} \right) - \theta \right], \quad (3.12)$$

wobei  $l_j$  Werte zwischen  $l_{min} = -l/2$  und  $l_{max} = l/2$  annehmen kann. Ist dagegen  $c < l$ , so muss in allen hier dargestellten Betrachtungen  $l_{min} = -l/2$  durch  $l_{min} = -c/(2(L-d)) \cdot L$  und  $l_{max} = l/2$  durch  $l_{max} = c/(2(L-d)) \cdot L$  ersetzt werden, wobei stets  $|l_{min}| < l/2$  und  $|l_{max}| < l/2$  gelten muss. Für die in (einigen) Experimenten dieser Arbeit vorliegenden Maße, nämlich  $L = 2331$  mm und Detektorbreite  $l = 27.6$  mm, ist die Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene, wobei die zugehörigen  $\Delta Y$  durch analytische Rechnung mittels Gl. 3.12 ermittelt wurden, in Abb. 3.17 für  $\theta = 28.8^\circ$ ,  $39.0^\circ$  und  $53.5^\circ$  dargestellt. Wie oben besprochen werden die auf dem Detektor abgebildeten gekrümmten Röntgenlinien durch einen kleinen Anteil von Röntgenstrahlen verursacht, deren Strahlengänge Schnittpunkte mit einer zur ursprünglichen Streuebene senkrechten Ebene bilden, die auf einem Kegelschnitt innerhalb dieser Ebene liegen.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen



**Abbildung 3.17:** Linienform in der Detektorebene für Röntgenstrahlung mit Bragg-Winkeln von  $28.8^\circ$ ,  $39.0^\circ$  und  $53.5^\circ$  bei Einsatz einer Röntgenpunktquelle und einem Abstand von Quelle und Detektor von  $L = 2331$  mm für jeden Detektorpunkt  $l_j$ .

Auf den Detektor gelangt dabei nur der Anteil der Röntgenstrahlung, die tatsächlich auf den Kristall fällt, d.h. nur ein Teil der Strahlung die den Kegel formt. Der Radius  $R$  dieses Kegelschnittes lässt sich über Gl. 3.11 und Gl. 3.12 als maximal mögliches  $\Delta Y$ ,  $\Delta Y_{max}$ , ermitteln. Nach Gl. 3.11 muss  $\sin \theta / \cos \kappa \leq 1$  gelten. Für  $\Delta Y$  ergibt sich damit maximal  $R = \Delta Y_{max} = L \cdot \tan(90^\circ - \theta)$ , d.h. für  $\theta = 45^\circ$  maximal  $\Delta Y_{max} = L$  und für  $\theta = 28^\circ$  maximal  $\Delta Y = 1.88L$ . Damit ist der Radius des Kegelschnittes für größere Bragg-Winkel kleiner; da aber die Größe von Kristall und Detektor konstant ist, und damit bezüglich der Fläche immer ein gleich großer Teil des Kegelschnittes auf dem Detektor abgebildet wird, ist für größere Bragg-Winkel  $\theta$  die Linienkrümmung auf dem Detektor größer. Dies ist in Abb. 3.17 daran zu erkennen, dass die Linie stärker gekrümmt ist, d.h. dass alle Werte von  $\Delta Y$  für größere Bragg-Winkel  $\theta$  größer sind, so dass die Gesamtverschiebung  $K$  des Peakmaximums der Projektion der Röntgenlinie auf die wellenlängendisperse Achse des Detektors, d.h. der Mittelwert der einzelnen Funktionswerte  $\Delta Y$  sich ebenfalls erhöht. Außerdem ist ersichtlich, dass das detektierte Signal auf den äußeren Detektorpunkten  $l_j$  entlang der nicht-dispersiven Achse mehr zur Gesamtverschiebung  $K$  beiträgt als das der inneren Detektorpunkte.

Die Gesamtverschiebung  $K$  lässt sich als ein normiertes Integral über alle  $\Delta Y$  und damit als Integral über alle möglichen  $\kappa(l_j)$  ausdrücken, wobei sich diese als  $\kappa(l_j) = \arctan(l_j/L)$  mit möglichen Koordinaten  $l_j$  der Detektorpunkte des Detektors mit Ausdehnung  $l$  entlang einer Achse

senkrecht zur Streuebene (siehe Abb. 3.16) berechnen lassen:

$$K = \int_{-l/2}^{l/2} \frac{L}{l} \cdot \tan \left[ \arcsin \left( \frac{\sin \theta}{\cos \left( \arctan \left( \frac{l_j}{L} \right) \right)} \right) - \theta \right] dl_j . \quad (3.13)$$

$l_j$  kann dabei Werte zwischen  $l_{min} = -l/2$  und  $l_{max} = l/2$  annehmen. Um dieses Integral zu lösen und  $K$  zu bestimmen, sind einige Näherungen nötig. Mit mehrfacher Taylor-Entwicklung ergibt sich über die Beziehungen  $\arctan(l_j/L) \approx l_j/L$ ,  $1/\cos(l_j/L) \approx 1 + 1/2(l_j/L)^2$  und der allgemeinen Beziehung  $\arcsin(f) = 1/\sqrt{1-f^2}$  für den Ausdruck

$$\arcsin \left( \frac{\sin \theta}{\cos(\kappa(l_j))} \right) - \theta \approx \frac{1}{2} \cdot \tan \theta \cdot \left( \frac{l_j}{L} \right)^2 . \quad (3.14)$$

Setzt man Gl. 3.14 in Gl. 3.13 ein lässt sich die Gesamtverschiebung  $K$  als

$$K \approx \frac{1}{2} \frac{1}{L \cdot l} \cdot \tan \theta \int_{-l/2}^{l/2} l_j^2 dl_j . \quad (3.15)$$

ausdrücken. Die Lösung des Integrals führt dann auf

$$K \approx \frac{l^2}{24 \cdot L} \tan(\theta) . \quad (3.16)$$

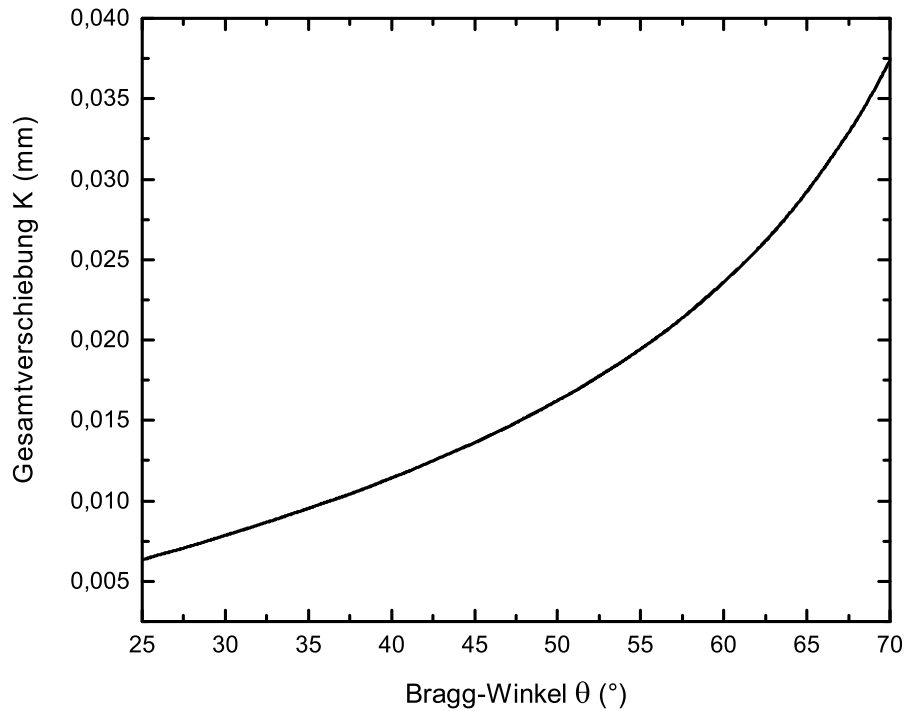
Abb. 3.18 zeigt die Abhängigkeit von  $K$  vom tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$ . Der Anstieg von  $K$  mit  $\tan(\theta)$  deckt sich mit den vorherigen Beobachtungen, dass die Verschiebungen  $\Delta Y(l_j)$  für größere Bragg-Winkel größer sind. Die Abnahme von  $K$  mit zunehmendem Abstand von Detektor und Quelle  $L$  ist auf die Zunahme des Radius  $R$  des Kegels (siehe Abb. 3.14) mit  $L$  zurückzuführen, die Zunahme von  $K$  mit  $l^2$ , wobei  $l$  die nicht-dispersive Detektorachsenlänge angibt, darauf, dass auf einem größeren Detektor ein größerer Teil dieses Kegels abgebildet werden kann.

Nach obigen Überlegungen ergibt sich, dass die Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor zu einer Änderung des  $a/b$ -Verhältnisses auf dem Detektor führt:

$$\left| \frac{a}{b}(\xi) \right| = \left| \frac{q + L \cdot \tan(\theta_i^* - \xi_i \pm K)}{p - L \cdot \tan(\theta_i^* - \xi_i \mp K)} \right| . \quad (3.17)$$

Konkret ändert sich, da sich bei der Kombination der  $a/b$ -Methode mit der Bond-Methode die Reihenfolge der Lichtreferenzlinien bezüglich der Röntgenquelle von einem zum anderen Detektor umkehrt (siehe Kap. 3.1.1),  $a$  für Detektor 1 zu  $a'_1 = a + K$  und  $b$  zu  $b'_1 = b - K$  und analog für Detektor 2  $a$  zu  $a'_2 = a - K$  und  $b$  zu  $b'_2 = b + K$ . Das Problem entsteht nun dadurch, dass die  $a/b$ -Methode gleiche Einfallsrichtung für Röntgenstrahlung, die in zwei verschiedenen Kristallstellungen auf den zwei verschiedenen Detektoren detektiert wird, wobei sich die Kristallstellungen um den Kristallrotationswinkel  $\gamma = 180^\circ - 2\theta$  (siehe Gl. 2.10) unterscheiden, normalerweise durch identische  $a/b$ -Verhältnisse für die beobachtete Strahlung auf beiden Detektoren festlegt. Für gekrümmte Röntgenlinien auf den Detektoren ändert sich dieses  $a/b$ -Verhältnis wie oben beschrieben für Detektor 1 zu dem gemessenen Verhältnis  $a'_1/b'_1 = (a + K)/(b - K)$  und für Detektor 2 zu  $a'_2/b'_2 = (a - K)/(b + K)$ , so dass die gleiche Einfallsrichtung der Röntgenstrahlung

### 3.3. Systematische Fehlerquellen



**Abbildung 3.18:** Abhängigkeit der Gesamtverschiebung  $K$  (vgl. Gl. 3.16), der Verschiebung des Peakmaximums der Projektion des Röntgensignals auf die wellenlängendispersive Achse des Detektors, vom tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$  für  $\theta = 25\text{-}70^\circ$  bei Einsatz einer Röntgenpunktquelle und einem Abstand von Quelle und Detektor von  $L = 2331$  mm.

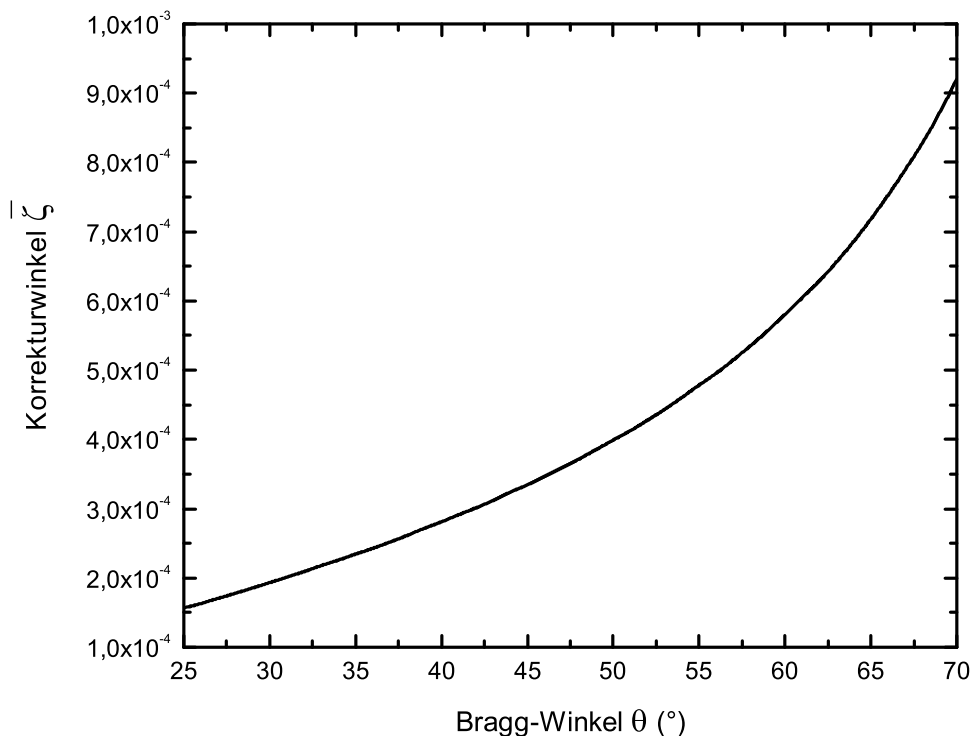
nicht mehr bei gleichem gemessenem  $a'/b'$ -Verhältnis vorliegt. Beim Auswerten der Daten muss dieser Tatsache Rechnung getragen werden, so dass die Kristallwinkel  $\xi_i$  für die Reflexion der Röntgenstrahlung auf die beiden Detektoren und damit der Drehwinkel  $\gamma$  und die Bragg-Winkel  $\theta$  ohne systematischen Fehler bestimmt werden können. Die dafür nötige Berücksichtigung der Linienkrümmung kann - wie in Kap. 4 vorgestellt wird - über die „Entkrümmung“ der Linie - oder aber über die Einführung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  in die Datenauswertung erfolgen, wobei  $\bar{\zeta}$  den Mittelwert der Winkel  $\zeta(\kappa)$  (siehe Gl. 3.14) für alle  $\kappa$  darstellt und für eine Punktquelle in idealer Geometrie durch

$$\bar{\zeta} = \frac{\left[ \int_{\arctan(-l/2/L)}^{\arctan(l/2/L)} (\arcsin(\sin \theta / \cos \kappa) - \theta) d\kappa \right]}{\left( \arctan\left(\frac{l/2}{L}\right) - \arctan\left(\frac{-l/2}{L}\right) \right)} \quad (3.18)$$

gegeben ist.  $\bar{\zeta}$  lässt sich also über ein normiertes Integral über den Winkel  $\kappa$  in den Grenzen von  $\kappa_{min} = \arctan((-l/2)/L)$  bis  $\kappa_{max} = \arctan((l/2)/L)$  berechnen. Der tatsächliche Bragg-Winkel  $\theta$  ist dann durch die Beziehung  $\theta = \theta' - \bar{\zeta}$  mit dem gemessenen Bragg-Winkel  $\theta'$  gegeben. Die Auswertung des Integrals bzw. die Verwendung der Relation  $K = L \cdot \arctan(\bar{\zeta})$  in Kombination mit Gl. 3.25 ergibt für  $\bar{\zeta}$ :

$$\bar{\zeta} \approx \arctan\left(\frac{\tan \theta \cdot l^2}{24L^2}\right) . \quad (3.19)$$

Abb. 3.19 zeigt die Abhängigkeit des Mittelwertes der Winkel  $\zeta(\kappa)$ , des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$ , vom tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$ . Es ist die Zunahme des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  mit dem tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$  zu erkennen. Außerdem lässt sich Gl. 3.19 entnehmen, dass - wie im Falle der Gesamtverschiebung  $K - \bar{\zeta}$  mit zunehmendem Abstand von Detektor und Quelle  $L$  abnimmt, was auf die Zunahme des Radius  $R$  des Kegels (siehe Abb. 3.14) mit  $L$  zurückzuführen ist. Die Zunahme mit größer werdender nicht-dispersiver Detektorachsenlänge  $l$  geht darauf zurück, dass auf einem größeren Detektor ein größerer Teil dieses Kegels abgebildet werden kann. Die Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  liegen im Bereich von  $\sim 10^{-4}$  °. Falls die Linienkrümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Verwendung einer Röntgenpunktquelle nicht berücksichtigt wird, ergibt sich damit ein systematischer relativer Fehler in Bereich von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 5 - 10$  ppm in der Wellenlängenmessung. Die Linienkrümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene muss daher in der Datenauswertung auf jeden Fall berücksichtigt werden. In Kap. 3.3.3 wird noch dazu deutlich werden, dass der Effekt bei Verwendung einer Röntgenlinienquelle - wie sie in den meisten Experimenten vorliegt - noch viel dramatischer ist. Tab. 3.1 listet abschließend mit Hilfe von Gl. 3.19 bestimmte Korrekturwin-



**Abbildung 3.19:** Abhängigkeit des Mittelwertes der Winkel  $\zeta(\kappa)$  (vgl. Gl. 3.19), des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$ , vom tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$  für  $\theta = 25-70^\circ$  bei Einsatz einer Röntgenpunktquelle und einem Abstand von Quelle und Detektor von  $L = 2331$  mm.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

Element	Übergang	Energie (eV)	$\theta$ (°)	$\bar{\zeta} \cdot 10^{-4}$ (°)
S <sup>14+</sup>	$w$	$\sim 2461$	53.5	4.52
S <sup>15+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 2623$	49.0	3.85
Ar <sup>16+</sup>	$w$	$\sim 3140$	39.0	2.71
Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 3323$	36.5	2.48
Fe <sup>24+</sup>	$w$	$\sim 6701$	28.8	1.84
Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 6973$	27.6	1.75

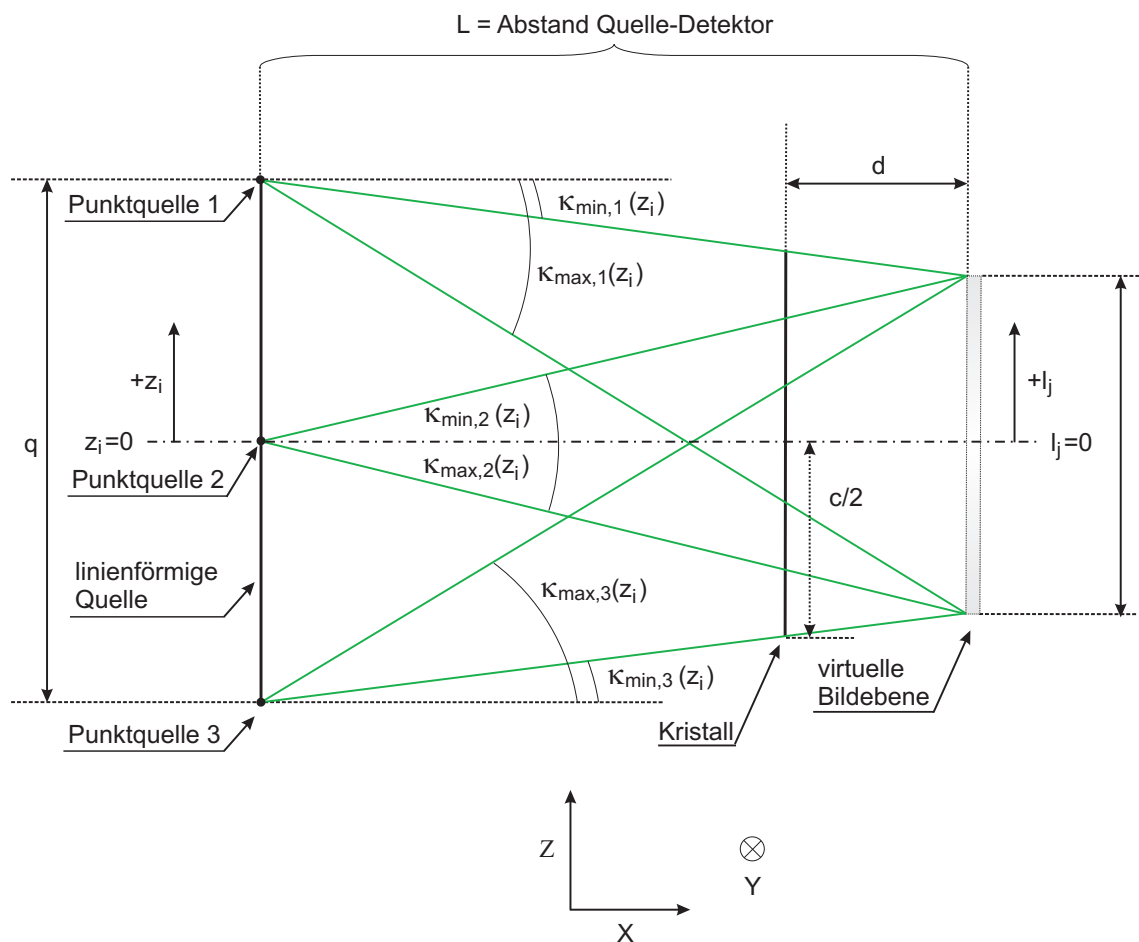
**Tabelle 3.1:** Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  (vgl. Gl. 3.19) bei Einsatz einer Röntgenpunktquelle für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$ , die sich auf Messung der Wellenlängen - außer im Falle der Messungen an Eisenionen - mit einem Si(111)-Kristall beziehen. Die Bragg-Winkel für die Röntgenstrahlung von Eisenionen wurden für eine experimentelle Anordnung mit einem Si(220)-Kristall berechnet.

kel  $\bar{\zeta}$  für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$  bei einer Detektorbreite  $l$  von 27.6 mm und einem Abstand von  $L = 2331$  mm zwischen Quelle und Detektor für eine punktförmige Quelle, die sich in der Streuebene befindet, auf.

#### 3.3.3 Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Verwendung einer ausgedehnten Röntgenquelle

In den Betrachtungen des vorangehenden Kapitels wurde zur Herleitung der Verschiebung der Peakmaxima der auf die wellenlängendispersive Detektorachse projizierten Röntgenlinien zum besseren Verständnis zunächst der einfache dreidimensionale Fall einer (monochromatischen) Punktquelle in Kombination mit einem ausgedehnten Kristall und Detektor betrachtet. Allerdings ist diese Annahme für die hier durchgeführten Experimente nicht zutreffend, da die Ionenwolke z.B. bei senkrechter Orientierung des Spektrometers bezüglich des Elektronenstrahls vom Kristall aus gesehen eine Ausdehnung von  $\sim 38.5$  mm besitzt. Die Quellregion der Röntgenstrahlung besteht aus einer Aneinanderreihung von Punktquellen in einer Ebene senkrecht zur Streuebene. Jeder dieser Punktquellen kann dann analog zum vorangehenden Kapitel behandelt werden, allerdings ist darauf zu achten, dass sich die Position jeder Punktquelle bezüglich des Kristall- und Detektormittelpunktes unterscheidet, d.h. dass nicht jede Punktquelle - wie im letzten Kapitel angenommen - in einer Ebene mit der Kristallgitternormale sowie dem Kristall- und Detektormittelpunkt liegt. Eine schematische Darstellung für die Geometrie im Falle einer ausgedehnten Quelle ist in Abb. 3.20 dargestellt. Dabei wird vorausgesetzt, dass Quelle, Detektor und Kristall so angeordnet sind, dass ihre Mittelpunkte auf einer Geraden, der Hauptachse des Spektrometers, liegen, also innerhalb der Streuebene, in der sich auch die Kristallgitternormale befindet. Weiterhin wird in dieser ersten einfachen Betrachtung angenommen, dass für die Ausdehnung des Kristalls  $c$ , die der Quelle  $q$  und des Detektors  $l$  senkrecht zur Streuebene und einen Abstand von Quelle zu Detektor  $L$  sowie von Kristall zu Detektor  $d$  die Beziehung  $((q - c)/2)/(L - d) \cdot L \leq (q - l)/2$  gilt. Dies bedeutet nichts anderes, als dass keine Röntgenstrahlung, die durch Bragg-Reflektion über den Kristall auf den Detektor gelangen könnte, aufgrund einer zu kleinen Ausdehnung des Kristalls

$c$  senkrecht zur Streuebene nicht auf dem Detektor trifft, d.h. dass der Detektor in voller Breite ausgeleuchtet wird. Dies ist im Experiment zwar nicht der Fall, wie in Kap. 3.3.8 noch eingehend diskutiert wird, stellt aber für die ersten Betrachtungen zur Geometrie unter Verwendung einer Röntgenlinienquelle eine sinnvolle Näherung dar. In Abb. 3.20 sind drei Punktquellen stellvertretend für die unendliche Anzahl von Punktquellen in der Darstellung besonders hervorgehoben. Für jede Punktquelle gibt es Grenzwinkel  $\kappa_{min}(z_i)$  und  $\kappa_{max}(z_i)$  des Winkels  $\kappa$  zwischen ursprünglicher Streuebene und neuer Ebene, in der die Röntgenstrahlung einfällt, unter denen die Röntgenstrahlung den Detektor noch erreichen kann. Diese Grenzwinkel  $\kappa_{min}(z_i)$  und  $\kappa_{max}(z_i)$  sind für



**Abbildung 3.20:** Darstellung der experimentellen Anordnung in einer Ebene senkrecht zur Streuebene für eine Ausdehnung  $q$  der Röntgenquelle sowie  $c$  des Kristalls und  $l$  des Detektors in dieser Ebene. Quelle, Detektor und Kristall sind so ausgerichtet, dass ihre Mittelpunkte auf einer Geraden, der Hauptachse des Spektrometers, liegen, also innerhalb der Streuebene, in der auch die Kristallgitternormale liegt. Drei Punktquellen der Linienquelle sind stellvertretend für die unendliche Anzahl von Punktquellen in der Darstellung besonders hervorgehoben. Für jede Punktquelle existieren Grenzwinkel  $\kappa_{min}(z_i)$  und  $\kappa_{max}(z_i)$  des Winkels  $\kappa$  zwischen ursprünglicher Streuebene und neuer Ebene, in der die Röntgenstrahlung einfällt, unter denen die Röntgenstrahlung den Detektor noch erreichen kann.  $z_i$  bezeichnet die Koordinate der Röntgenpunktquelle  $i$  auf einer senkrecht zur Streuebene verlaufenden Achse,  $l_j$  die Koordinate des Detektionspunktes  $j$  der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich der nicht-dispersiven Detektorachse.



### 3.3. Systematische Fehlerquellen

jede Punktquelle Größen, die beschreiben, welcher Teil des Kegelschnittes (siehe Abb. 3.14) auf dem Detektor abgebildet wird, und legen damit die durch diese Quelle verursachte Linienschwerpunktsverschiebung  $K(z_i)$  fest.  $z_i$  bezeichnet dabei die Koordinate der Röntgenpunktquelle  $i$  auf einer senkrecht zur Streuebene verlaufenden Achse (siehe Abb. 3.20). Ist  $l_j$  die Koordinate des Detektionspunktes  $j$  der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich der nicht-dispersiven Detektorachse, so lässt sich  $\overline{\zeta}(z_i)$  für jede Punktquelle über  $\zeta(z_i, l_j) = \arcsin(\sin \theta / \cos \kappa(z_i, l_j)) - \theta$  mit Hilfe der Formel

$$\overline{\zeta}(z_i) = \frac{\left[ \int_{\arctan\left(\frac{z_i-l/2}{L}\right)}^{\arctan\left(\frac{z_i+l/2}{L}\right)} (\arcsin(\sin \theta / \cos \kappa) - \theta) d\kappa \right]}{\left( \arctan\left(\frac{z_i+l/2}{L}\right) - \arctan\left(\frac{z_i-l/2}{L}\right) \right)}, \quad (3.20)$$

berechnen, die analog zu Gl. 3.18 durch Ersetzen von  $l/2$  durch  $z_i + l/2$  bzw.  $-l/2$  durch  $z_i - l/2$  hergeleitet werden kann. Damit ergibt sich  $\overline{\zeta}(z_i)$  als normiertes Integral über den Winkel  $\kappa$  in den Grenzen von  $\kappa_{min} = \arctan(z_i - l/2)/L$  bis  $\kappa_{max} = \arctan(z_i + l/2)/L$ , wobei  $L$ , wie oben eingeführt, den Abstand zwischen Quelle und Detektor und  $l$  die Ausdehnung des Detektors senkrecht zur Streuebene bezeichnet.

Das Integral für  $\overline{\zeta}(z_i)$  lässt sich analog zu den Betrachtungen für eine Punktquelle leicht lösen, wenn man die Verschiebungen  $\Delta Y(z_i, l_j)$  betrachtet, die von jeder Punktquelle  $i$  für jeden Detektorpunkt  $j$  verursacht werden. Diese  $\Delta Y(z_i, l_j)$  lassen sich für jedes  $\kappa = \arctan((z_i + l_j)/L)$  und jede einzelne Punktquelle  $i$  analog zu Gl. 3.12, die für den Fall einer Punktstrahlungsquelle gültig ist, über die Beziehung

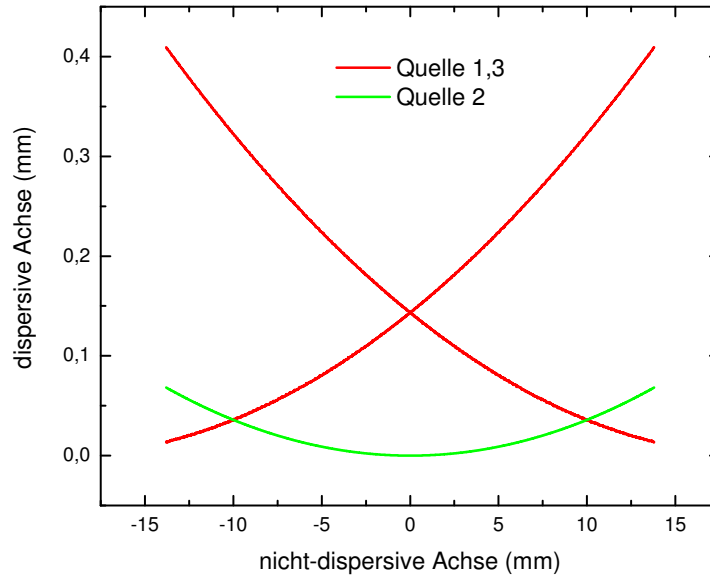
$$\Delta Y(z_i, l_j) = L \cdot \tan(\zeta(\kappa(z_i, l_j))) = L \cdot \tan \left[ \arcsin \left( \frac{\sin \theta}{\cos \left( \arctan \left( \frac{z_i + l_j}{L} \right) \right)} \right) - \theta \right] \quad (3.21)$$

berechnen.  $l_j$  kann dabei Werte zwischen  $l_{min} = -l/2$  und  $l_{max} = l/2$  mit der Länge  $l$  des Detektors (siehe Abb. 3.20) senkrecht zur Streuebene und  $z_i$  Werte zwischen  $z_{min} = -q/2$  und  $z_{max} = q/2$  mit der senkrecht zur Streuebene gemessenen Quelllänge  $q$  (siehe Abb. 3.20) annehmen. Will man damit die mittlere Verschiebung  $\Delta Y(l_j)$ , die für jeden Punkt auf dem Detektor  $l_j$  durch alle Punktquellen  $z_i$  verursacht wird, in Bezug auf eine durch einen Punkt, der durch eine Punktquelle mit  $z_i = 0$  bei  $l_j = 0$  in der Detektorebene generiert wurde, verlaufende Gerade berechnen, so ist das Integral von Gl. 3.21 über alle Quellpunkte zu bilden. Dies lässt sich analytisch leicht durch Vereinfachung von Gl. 3.21 lösen. Mit mehrfacher Taylor-Entwicklung ergibt sich über die Beziehungen  $\arctan((z_i + l_j)/L) \approx (z_i + l_j)/L$ ,  $1/\cos((z_i + l_j)/L) \approx 1 + 1/2((z_i + l_j)/L)^2$  und die allgemeine Beziehung  $\arcsin(f) = 1/\sqrt{1-f^2}$

$$\arcsin \left( \frac{\sin \theta}{\cos \kappa(z_i, l_j)} \right) \approx \theta + \frac{1}{2} \tan \theta \left( \frac{(z_i + l_j)}{L} \right)^2 \quad (3.22)$$

und somit lässt sich  $\Delta Y(z_i, l_j)$  als

$$\Delta Y(z_i, l_j) = L \cdot \tan(\zeta(\kappa(z_i, l_j))) \approx \frac{1}{2} L \tan \theta \left( \frac{(z_i + l_j)}{L} \right)^2 \quad (3.23)$$

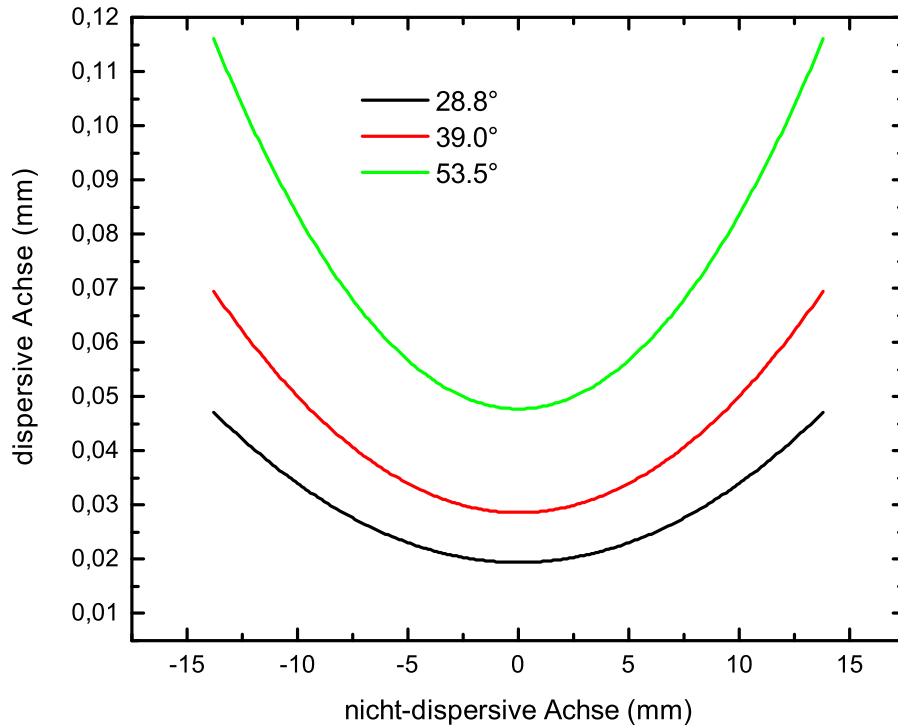


**Abbildung 3.21:** Linienform in der Detektorebene für die drei Punktquellen aus Abb. 3.20 für einen Bragg-Winkel  $\theta$  von  $53.5^\circ$ , eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und einen Abstand von Detektor und Quelle von 1886 mm.

ausdrücken. Abb. 3.21 zeigt die mit Hilfe von Gl. 3.23 berechnete Linienkrümmung auf dem Detektor für die drei Punktquellen aus Abb. 3.20 für einen Bragg-Winkel  $\theta$  von  $53.5^\circ$ , eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und einen Abstand von Detektor und Quelle von 1886 mm. Diese Werte entsprechen den tatsächlichen Werten in einigen Experimenten dieser Arbeit. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass die äußeren Quellpunkte viel mehr zur Linienkrümmung beitragen als die inneren Quellpunkte. Wird in Experimenten eine (nahezu-) Punktquelle eingesetzt, so kann die auf dem Detektor beobachtete Linienkrümmung und damit der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  im Vergleich zu Experimenten, in denen eine ausgedehnte Quelle verwendet wird, merklich reduziert werden. Dies ist eine wichtige Aussage in Hinblick auf die experimentellen Ansätze zur Reduktion der Linienkrümmung, die in Kap. 3.3.4 besprochen werden.

Mit Gl. 3.23 lässt sich die mittlere Verschiebung  $\Delta Y(l_j)$ , die für jeden Punkt auf dem Detektor durch alle Punktquellen  $z_i$  verursacht wird, durch das auf die Quelllänge  $2z_{max} = q$  normierte Integral über die Koordinaten  $z_i$

$$\Delta Y(l_j) = \int_{-q/2}^{q/2} \frac{\Delta Y(z_i, l_j) dz_i}{q} \approx \int_{-q/2}^{q/2} \frac{L \cdot \tan \theta \left( \frac{z_i + l_j}{L} \right)^2 dz_i}{2q} \quad (3.24)$$



**Abbildung 3.22:** Mittlere Verschiebung  $Y(l_j)$  (vgl. Gl. 3.25) für das Peakmaximum des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes für die einzelnen Punkte  $l_j$  in der Detektorebene in Abhängigkeit des Bragg-Winkels  $\theta$  für eine Röntgenlinienquelle. Diese ergibt sich für jeden Detektorpunkt als Mittelwert der Verschiebungen  $Y(z_i, l_j)$ , die durch jeden einzelnen Quellpunkt  $z_i$  für jeden dieser Punkte  $l_j$  verursacht werden. Für die Berechnung wurde eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und ein Abstand von Detektor und Quelle von 1886 mm angenommen.

mit den Grenzen  $z_{min} = -q/2$  und  $z_{max} = q/2$  ausdrücken, wobei  $q$  wiederum die senkrecht zur Streuebene gemessene Quelllänge bezeichnet. Die Lösung des Integrals führt dann auf

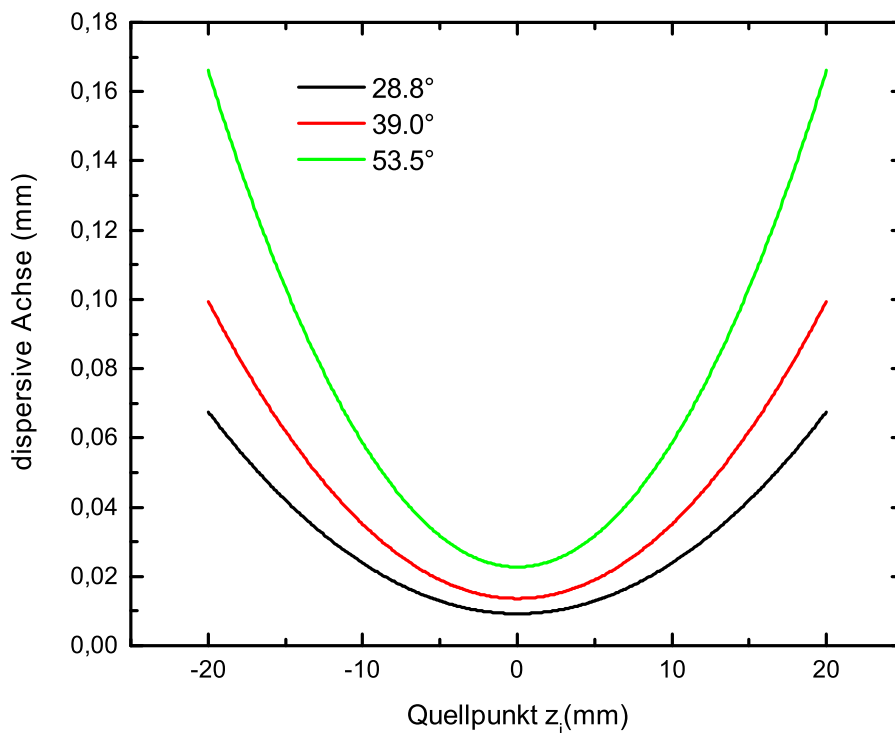
$$\Delta Y(l_j) \approx \frac{\left( (l_j + q/2)^3 - (l_j - q/2)^3 \right)}{6L \cdot q} \tan(\theta) = \frac{\left( 2 \left( \frac{q}{2} \right)^3 + 3ql_j^2 \right)}{6L \cdot q} \tan(\theta) . \quad (3.25)$$

Abb. 3.22 zeigt die mit Gl. 3.25 berechnete mittlere Linienkrümmung  $Y(l_j)$ , die durch alle Quellpunkte  $z_i$  für jeden einzelnen Detektorpunkt  $l_j$  verursacht werden. Dabei wurde eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und ein Abstand von Detektor und Quelle von 1886 mm angenommen. (Dies entspricht den in einigen Experimenten dieser Arbeit vorliegenden Werten). Es ergibt sich auch hier ein konsistentes Bild mit den vorangehenden

Abbildungen. Äußere Punkte auf dem Detektor tragen mehr zur Linienkrümmung bei als innere und die Linienkrümmung steigt mit dem Bragg-Winkel  $\theta$  an.

Analog zu  $\Delta Y(l_j)$  lässt sich die mittlere Verschiebung  $\Delta Y(z_i)$ , die jeder Quellpunkt für die gesamte Röntgenlinie, d.h. für alle Punkte  $l_j$  auf dem Detektor verursacht, in Bezug auf eine Gerade durch den durch eine Punktquelle mit  $z_i = 0$  generierten Punkt bei  $l_j = 0$  in der Detektorebene berechnen, indem durch Taylor-Entwicklung und Vereinfachung das Integral

$$\Delta Y(z_i) = \int_{-l/2}^{l/2} \frac{\Delta Y(z_i, l_j)}{l} \approx \int_{-l/2}^{l/2} \frac{L \cdot \tan \theta \left( \frac{(z_i + l_j)}{L} \right)^2}{2l} dl_j \quad (3.26)$$



**Abbildung 3.23:** Mittlere Verschiebung  $Y(z_i)$  (vgl. Gl. 3.27) für das Peakmaximum des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene, die durch die einzelnen Quellpunkte  $z_i$  einer Röntgenlinienquelle hervorgerufen wird, in Abhängigkeit des Bragg-Winkels  $\theta$ . Diese ergibt sich für jeden Quellpunkt als Mittelwert der Verschiebungen  $Y(z_i, l_j)$ , die für jeden einzelnen Detektorpunkt  $l_j$  für jeden dieser Quellpunkte  $z_i$  verursacht werden. Für die Berechnung wurde die Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse  $l = 27.6$  mm, die Quelllänge  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und der Abstand von Detektor und Quelle  $L=1886$  mm gesetzt.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

gefunden und zu

$$\Delta Y(z_i) \approx \frac{\left( (l/2 + z_i)^3 - (z_i - l/2)^3 \right)}{6L \cdot l} \tan(\theta) = \frac{\left( 2 \left( \frac{l}{2} \right)^3 + 3lz_i^2 \right)}{6L \cdot l} \tan(\theta) \quad (3.27)$$

gelöst wird. Die mit Gl. 3.27 berechnete mittlere Linienkrümmung auf dem Detektor, die durch die einzelnen Quellpunkte  $z_i$  hervorgerufen wird, ist in Abhängigkeit vom Bragg-Winkel  $\theta$  in Abb. 3.23 dargestellt. In den Rechnungen wurde wiederum eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und ein Abstand von Detektor und Quelle von 1886 mm vorausgesetzt. Neben der Zunahme der Linienkrümmung mit dem Bragg-Winkel  $\theta$  und dem größeren Beitrag von äußeren Quellpunkten zur Linienkrümmung lässt sich Abb. 3.23 durch Vergleich mit Abb. 3.21 entnehmen, dass der größte Einfluss auf die Linienkrümmung von den äußeren Quellpunkten  $q_i$  herrührt, wogegen die äußeren Detektorpunkte  $l_j$  eine geringe Rolle spielen. Will man die Linienkrümmung im Experiment daher reduzieren, so ist eine geringe Quelllänge  $q$  günstiger als eine geringe Detektorlänge  $l$ , die man ohnehin ungern reduzieren möchte, um den maximalen Raumwinkel für die Detektion von Röntgenphotonen zu erhalten.

Um die Gesamtverschiebung  $K$  des Peakmaximums des auf die disperse Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene bezüglich einer parallelen Linie zur nicht-dispersiven Detektorachse durch den Detektorpunkt mit  $l_j = 0$ , der von einem Röntgenstrahl mit  $z_i = 0$  generiert wird, zu erhalten, ist dann nach obigen Betrachtungen das Integral

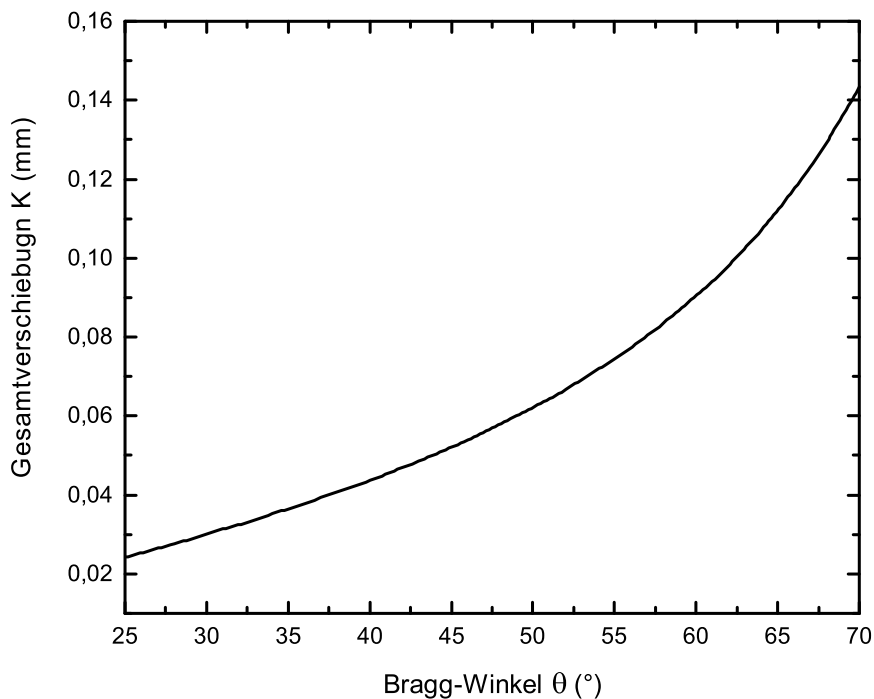
$$K = \frac{\int_{-q/2}^{q/2} \Delta Y(z_i) dz_i}{q} = \frac{\int_{-l/2}^{l/2} \Delta Y(l_j) dl_j}{l} \quad (3.28)$$

zu lösen. Setzt man Gl. 3.25 oder Gl. 3.27 ein, so ergibt sich

$$K \approx \frac{\left( l \left( \frac{q}{2} \right)^3 + q \left( \frac{l}{2} \right)^3 \right)}{3L \cdot l \cdot q} \tan(\theta), \quad (3.29)$$

wie zu erwarten war eine symmetrische Funktion in der Detektorlänge  $l$  und der Quelllänge  $q$ . Abb. 3.24 zeigt die mit Gl. 3.29 berechnete Gesamtkorrektur  $K$  als Funktion des Bragg-Winkels  $\theta$ , wobei  $l = 27.6$  mm,  $q = 40$  mm und  $L=1886$  mm gesetzt wurde. Die Abbildung entspricht Abb. 3.18 für eine Punktquelle (wobei  $L$  unterschiedlich gewählt wurde.) Es ist zu erkennen, dass ein Faktor  $\sim 5$  zwischen dem Wert für  $K$ , der sich für eine Röntgenpunktquelle ergibt und dem, der sich für eine Röntgenlinienquelle mit  $q = 40$  mm einstellt, liegt, d.h. dass durch den Einsatz einer Punktquelle im Experiment die Linienkrümmung erheblich reduziert werden kann. Dies ist in Hinblick auf die Ansätze zur Reduktion der Linienkrümmung, die in Kap. 3.3.4 besprochen werden, besonders interessant. Um dies zu verdeutlichen, kann der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta} = \arctan(K/L)$  herangezogen werden. Dieser ergibt sich mit Gl. 3.29 zu:

$$\bar{\zeta} \approx \arctan \left( \frac{\left( l \left( \frac{q}{2} \right)^3 + q \left( \frac{l}{2} \right)^3 \right)}{3L^2 \cdot l \cdot q} \tan(\theta) \right). \quad (3.30)$$



**Abbildung 3.24:** Berechnete Gesamtkorrektur  $K$  für das Peakmaximum des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene bezüglich einer parallelen Linie zur nicht-dispersiven Detektorachse durch den Detektorpunkt mit  $l_j = 0$ , der von einem Röntgenstrahl mit  $z_i = 0$  generiert wird, in Abhängigkeit des Bragg-Winkels  $\theta = 25\text{-}70^\circ$  für eine Röntgenlinienquelle. Für die Berechnung wurde wiederum  $l = 27.6$  mm,  $q = 40$  mm und  $L=1886$  mm gesetzt.

Dieser kann in die Datenauswertung über die Beziehung  $\theta = \theta' - \bar{\zeta}$  eingebracht werden und der Bragg-Winkel so unter Berücksichtigung der Linienkrümmung bestimmt werden (siehe auch Kap. 3.3.2).

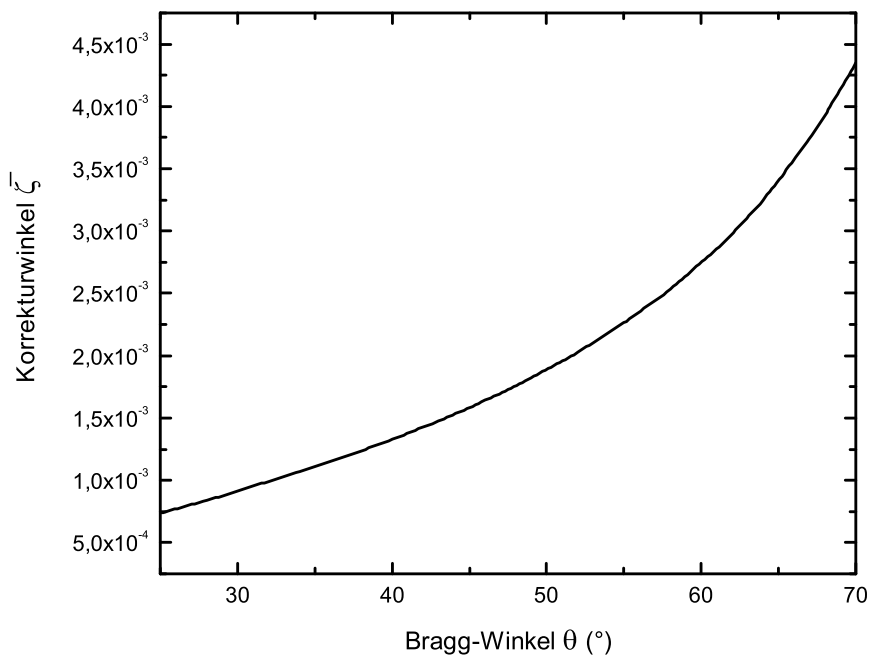
Tab. 3.2 gibt einen Überblick über mit Hilfe von Gl. 3.30 bestimmte Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$  für  $l = 27.6$  mm,  $L = 1886$  mm und senkrechter Anordnung des Spektrometers zum Elektronenstrahl, so dass die Ionenwolke vom Kristall aus gesehen eine Ausdehnung von  $\sim 40$  mm besitzt, was (nahezu) den experimentellen Gegebenheiten in einigen Messungen dieser Arbeit entspricht. Bei der Herleitung von Gl. 3.30 wurde dabei vorausgesetzt, dass sich die Mittelpunkte von Quelle, Detektor und Kristall innerhalb der Streuebene, in der auch die Kristallgitternormale liegt, befinden. Ist dies nicht der Fall, d.h. ist das Spektrometer nicht ideal ausgerichtet, so ergibt sich, wie sich in Kap. 3.3.3 zeigen wird, eine weitere Änderung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  im Vergleich zu dem für die hier besprochene ideale Spektrometeranordnung. Durch Tab. 3.2 und Abb. 3.25, die die mit Gl. 3.29 berechneten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  als Funktion des Bragg-Winkels zwischen  $\theta = 25 - 70^\circ$  darstellt, wobei die in die Berechnung eingehenden Werte

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

Element	Übergang	Energie (eV)	$\theta(\text{Si111, Si220})$ ( $^\circ$ )	$\bar{\zeta} \cdot 10^{-4}$ $^\circ$
S <sup>14+</sup>	w	$\sim 2461$	53.5	21.4
S <sup>15+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 2623$	49.0	18.2
Ar <sup>16+</sup>	w	$\sim 3140$	39.0	12.8
Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 3323$	36.5	11.7
Fe <sup>24+</sup>	w	$\sim 6701$	28.8	8.71
Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 6973$	27.6	8.29

**Tabelle 3.2:** Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  (vgl. Gl. 3.30) bei Einsatz einer Röntgenlinienquelle für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$ , die sich auf Messung der Wellenlängen - außer im Falle der Messungen an Eisenionen - mit einem Si(111)-Kristall beziehen. Die Bragg-Winkel für die Röntgenstrahlung von Eisenionen wurden für den Einsatz eines Si(220)-Kristalls berechnet.

der Variablen analog denen aus Abb. 3.24 sind, wird ersichtlich, dass die Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  im Bereich von  $\sim 10^{-3}$   $^\circ$  liegen. Bei Vernachlässigung dieses Korrekturwinkels entsteht damit ein systematischer relativer Fehler von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 25$  ppm in Röntgenwellenlängenmessungen. Vergleicht



**Abbildung 3.25:** Berechneter Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  als Funktion des Bragg-Winkels zwischen  $\theta = 25 - 70^\circ$  für eine Röntgenlinienquelle. Die in der Berechnung eingesetzten Werte der Variablen sind analog denen in Abb. 3.24.

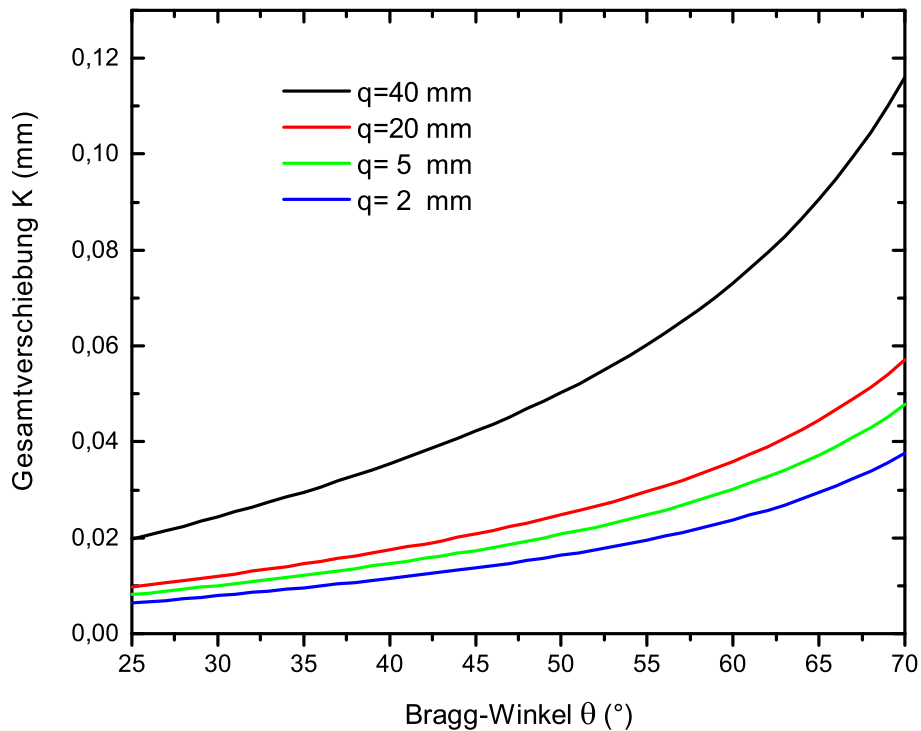
man Abb. 3.25 mit Abb. 3.19 für eine Punktquelle so ist - analog zu den Betrachtungen für die Gesamtverschiebung  $K$  - zu erkennen, dass der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für eine Linienquelle von 40 mm  $\sim 5$  mal größer ist als für eine Punktquelle und damit auch der resultierende systematische Fehler  $\Delta\lambda/\lambda$ , der sich in einer Wellenlängenmessung unter Vernachlässigung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  ergibt. Eine experimentelle Reduktion der Linienkrümmung ist durch Verkürzung der Ausdehnung der Röntgenquelle  $q$  in einer Ebene senkrecht zur Streuebene möglich. Optimal wäre dabei die Verwendung einer Punktquelle.

In den bisherigen Röntgenwellenlängenmessungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer und einigen Messungen dieser Arbeit wurde das Spektrometer stets senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert. Vom Kristall aus gesehen hat die Ionenwolke in  $z$ -Richtung (siehe Abb. 3.20) in dieser Konfiguration eine Ausdehnung von  $\sim 38.5$  mm. Die Quellregion der Röntgenstrahlung besteht aus einer Aneinanderreihung von Punktquellen in einer Ebene senkrecht zur Streuebene. Wie wir in diesem Kapitel gesehen haben, resultiert die Verwendung einer solchen Röntgenlinienquelle in einer erhöhten Linienkrümmung des Röntgenreflexes auf dem Detektor im Vergleich zu Experimenten, in denen eine Punktquelle verwendet wird, und damit in einem viel größeren Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$ . Daher wurde, um die Linienkrümmung zu verringern, für einige Messungen dieser Arbeit eine andere experimentelle Anordnung gewählt, unter der die Ionenwolke für den Kristall als eine Punktquelle mit einer Ausdehnung von  $\sim 100 \mu\text{m}$  erscheint, und bei der der Röntgenreflex in der Detektorebene damit weniger stark gekrümmt ist, d.h. bei der der resultierende Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für die Datenauswertung geringer ist. Das folgende Kapitel stellt diesen experimentellen Ansatz zur Verringerung der Linienkrümmung vor.

### 3.3.4 Experimenteller Ansatz zur Verringerung der Linienkrümmung

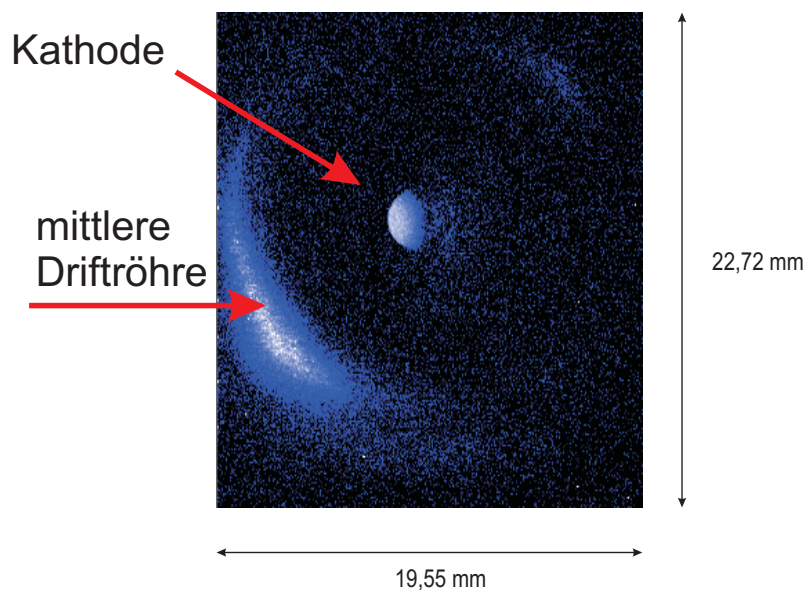
Wie im letzten Kapitel diskutiert, lässt sich dem Vergleich von Abb. 3.25 für eine Röntgenlinienquelle und Abb. 3.19 für eine Punktquelle entnehmen, dass der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  und damit auch die Krümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene für eine Linienquelle von  $q=40$  mm, wie sie im Falle der mit der Heidelberg-EBIT erzeugten Ionenwolke und gleichzeitiger Montage des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl vorliegt,  $\sim 5$  mal größer ist als für eine Punktquelle und damit auch der resultierende systematische Fehler  $\Delta\lambda/\lambda$ , der sich in einer Wellenlängenmessung unter Vernachlässigung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  ergibt. Abb. 3.26 stellt diese Situation noch einmal dar. Hier ist die Gesamtverschiebung  $K$  aufgrund der Krümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene für verschiedene Ausdehnungen  $q$  der Röntgenquelle und einen Abstand von Quelle und Detektor  $L = 2331$ , eine Ausdehnung des Detektors in nicht-dispersiver Richtung  $l = 27.6$  und einen Bragg-Winkel  $\theta$  von  $25-70^\circ$  aufgetragen. Um die große Gesamtverschiebung  $K$  des Röntgenreflexes in der Detektorebene und damit den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  zu minimieren, wurde das Spektrometer daher für einige Messungen dieser Arbeit zum ersten Mal parallel zum Elektronenstrahl aufgebaut, so dass die Kathode und die Elektronenkanone dem Kristall gegenüberliegen. Dies hat dabei den Vorteil, dass die Ausdehnung der Ionenwolke vom Kristall aus gesehen in dieser Konfiguration dann nur noch der radialen Ausdehnung der Wolke von einigen hundert  $\mu\text{m}$  entspricht und die induzierte Gesamtverschiebung  $K$  nahezu der von einer Linienquelle





**Abbildung 3.26:** Gesamtverschiebung  $K$  des Peakmaximums des Röntgenreflexes in der Detektorebene für verschiedene Ausdehnungen  $q$  der Röntgenquelle in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und  $L = 2331$ ,  $l = 27.6$  und einen Bragg-Winkel  $\theta$  von  $25$ - $70^\circ$ . Eine größere Ausdehnung  $q$  bedingt einen deutlich größeren Wert für die Gesamtverschiebung  $K$ .

verursachten Verschiebung gleicht. Für diese experimentelle Anordnung wurde das Spektrometer von der Kathode aus gesehen hinter dem Elektronenkollektor der FLASH-EBIT aufgebaut. Eine Montage des Spektrometers in dieser Konfiguration an der Heidelberg-EBIT war nicht möglich, da sich die Heidelberg-EBIT in einem temperaturstabilisierten Labor befindet, in dem das Spektrometer aufgrund der räumlichen Gegebenheiten bei paralleler Montage zum Elektronenstrahl hinter dem Kollektor keinen Platz gefunden hätte. Um dabei die Temperaturstabilisierung des Aufbaus zu gewährleisten, wurde die gesamte FLASH-EBIT und das Röntgenspektrometer, in einem temperaturstabilisierten  $\sim \pm 0.35^\circ\text{C}$ , mit Luftpolsterfolien isolierten Bierzelt in der Experimentierhalle aufgebaut. In dieser Anordnung ist weiterhin zu beachten, dass das Spektrometer sich hinter dem Elektronenkollektor befindet, also in einer Position, in der im Extraktionsmodus Ionen aus der Falle extrahiert werden können. Extraktion der Ionen kann durch Anlegen einer positiven Spannung am Extraktor verhindert werden. Wird dieses Extraktorpotential durch einen Benutzerfehler unabsichtlich gesenkt, so können die Ionen mit hoher kinetischer Energie auf die Spektrometerstrahlelemente wie z.B. das Beryllium-Fenster treffen und diese zerstören. Daher wurde hinter



**Abbildung 3.27:** Reales Abbild der Kathode in der Detektorebene, das mit Hilfe der Linsen für die Justage der Position des Lichtaufbaus bezüglich (siehe Abb. 3.7) erzeugt wurde. Der 440 nm Bandpassfilter befand sich im Strahlengang des Lichtes, um nur einen kleinen Teil des intensiven Kathodenlichtes zum Detektor gelangen zu lassen und so eine Überbelichtung zu vermeiden.

dem Kollektor, in ausreichendem Abstand zum Kollektorspulenfeld, mittels Permanentmagneten ein zusätzliches Magnetfeld von  $\sim 0.05$  T angebracht, das die Ionen auf einer Strecke von einigen wenigen cm gegen die Wand des Strahlrohres ablenkt, sollte das Extraktorpotential einmal fälschlicherweise gesenkt werden.

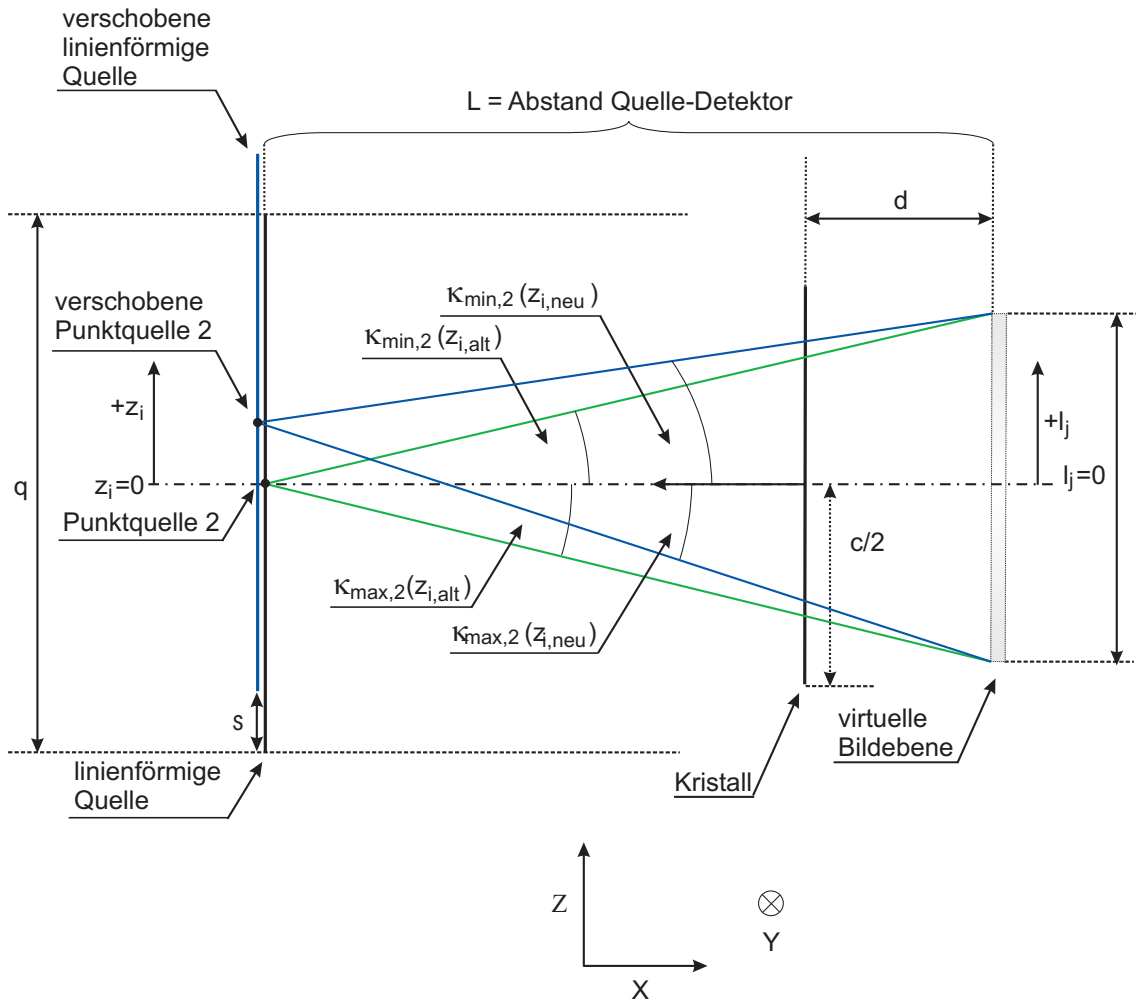
Die Ausrichtung des Spektrometers bezüglich der Ionenwolke, d.h. besonders des Ursprungs der Lichtreferenzlinien auf den Ursprung der Röntgenstrahlung, wird dabei, analog für den Fall einer Montage des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl, mit Hilfe der in Kap. 3.2.2 vorgestellten Justagemethode erreicht. Der einzige Unterschied besteht darin, dass das reale Abbild der Ionenwolke nicht mehr einer Linie wie in Abb. 3.8 gleicht, sondern einem Punkt. Darauf wird noch in Kap. 3.3.7 eingegangen. Eine grobe Ausrichtung des Röntgenspektrometers, so dass Röntgenstrahlung in Richtung des Kristalls gelangen und vom Detektor detektiert werden kann und die optische Sichtlinie nicht durch Komponenten der EBIT blockiert wird, ist allerdings nicht trivial. Eine Hilfe bietet (Streu)licht von der Kathode (siehe Abb. 3.27). Ein reales Abbild der Kathode in der Detektorebene lässt sich mit Hilfe der Linsen für die Justage der Position des Lichtaufbaus (siehe Abb. 3.7) erzeugen. Seine Position kann dann als Positionsreferenz für den Elektronenstrahl und damit auch für die Ionenwolke dienen. Das Spektrometer wird so justiert, dass das Kathodensignal mittig auf dem Detektor erscheint. Die Erfahrung zeigt, dass der optische Weg dann für die Röntgenstrahlung bzw. generell Licht der Ionenwolke frei ist und damit in dieser Position des Spektrometers später auch Röntgenstrahlung detektiert werden kann.

In den vorangehenden Betrachtungen zur Linienkrümmung wurde stets von einer idealen Ausrichtung des Spektrometers bezüglich der Ionenwolke ausgegangen. Schon in Kap. 3.3.3 wurde aber angedeutet, dass sich die Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  merklich ändern können, wenn diese ideale Positionierung experimentell nicht vorliegt. In den nachfolgenden Kapiteln soll der Fall einer Fehl- ausrichtung zunächst theoretisch mit seinen Folgen diskutiert werden, um dann experimentelle Ansätze aufzuzeigen, die eine ideale Positionierung des Spektrometers erlauben. Hierbei muss zwischen den eben beschriebenen Montagemöglichkeiten des Spektrometers senkrecht und parallel zum Elektronenstrahl unterschieden werden.

#### 3.3.5 Krümmung der Röntgenlinie auf dem Detektor bei Verwendung einer ausgedehnten, nicht ideal positionierten Röntgenquelle

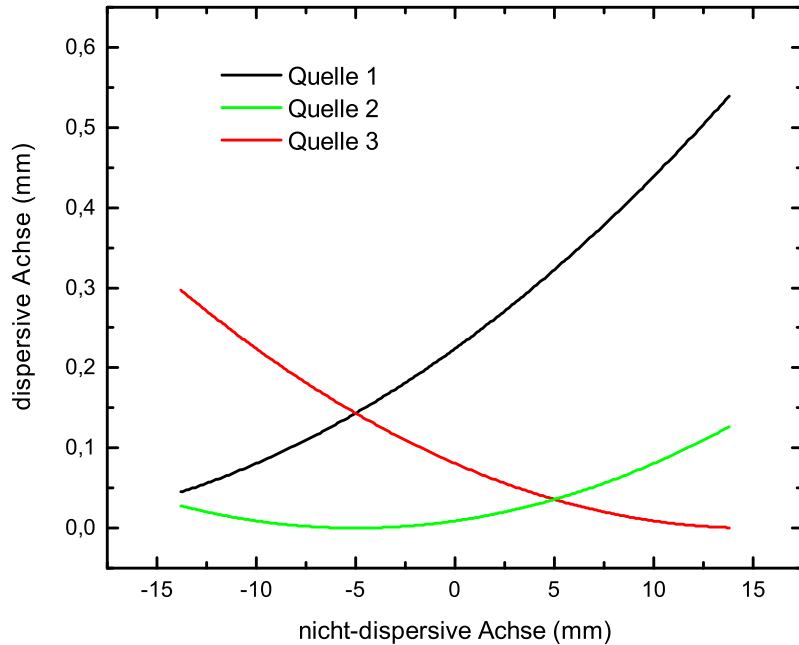
In den Betrachtungen von Kap. 3.3.3 wurde zur Herleitung der Verschiebung der Peakmaxima der auf die wellenlängendispersive Detektorachse projizierten Röntgenlinien der dreidimensionalen Fall einer Linienquelle, die in einer Ebene senkrecht zur Streuebene ausgedehnt ist, in Kombination mit einem in dieser Ebene ausgedehnten Kristall und Detektor betrachtet. Dabei wurde angenommen, dass Quelle, Detektor und Kristall so angeordnet sind, dass ihre Mittelpunkte auf einer Geraden, der Hauptachse des Spektrometers, liegen, also innerhalb der Streuebene, in der sich auch die Kristallgitternormale befindet. Ohne Ausrichtung des Spektrometers ist diese Voraussetzung aber nicht unbedingt erfüllt. In diesem Kapitel sollen daher die Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene unter Verwendung einer ausgedehnten, nicht ideal ausgerichteten Röntgenquelle besprochen und experimentelle Möglichkeiten zur Ausrichtung des Spektrometers auf die ideale Geometrie aufgezeigt werden.

Zunächst wird auf den Fall eingegangen, bei dem der Mittelpunkt der ausgedehnten Linienquelle nicht in der Ebene liegt, in der auch die Kristallnormale, der Mittelpunkt des Kristalls und des Detektors liegen, d.h. in der ursprünglichen Streuebene mit  $\kappa = 0$ , sondern bei dem die Linienquelle um den Wert  $s$  entlang einer  $z$ -Achse, die senkrecht zur Streuebene angeordnet ist, verschoben ist (siehe Abb. 3.28). In der Darstellung ist besonders Punktquelle 2 aus Abb. 3.20 hervorgehoben, die sich in der Mitte der Linienquelle mit der Länge  $|q|$  in  $z$ -Richtung befindet. In den folgenden Betrachtungen wird wiederum angenommen, dass für die Ausdehnung des Kristalls  $c$ , die der Quelle  $q$  und des Detektors  $l$  senkrecht zur Streuebene und einen Abstand von Quelle zu Detektor  $L$  sowie von Kristall zu Detektor  $d$  die Beziehung  $((q - c)/2)/(L - d) \cdot L \leq (q - l)/2$  gilt, d.h. das der Detektor komplett ausgeleuchtet wird. Durch Verschieben der Linienquelle entlang der  $z$ -Achse um  $s$  verschiebt sich auch die Punktquelle 2 um  $s$ , und ihre zugehörigen alten Grenzwinkel  $\kappa_{min,max}(z_{i,alt})$  ändern sich zu neuen Grenzwinkeln  $\kappa_{min,max}(z_{i,neu})$ . Die neue  $z$ -Koordinate  $z_{i,neu}$  der Punktquelle 2 ist dabei über  $z_{i,neu} = z_{i,alt} + s$  mit ihrer alten Koordinate  $z_{i,alt}$  verknüpft. Diese Aussage ist für alle Punktquellen gültig. Daher ist in allen Berechnungen des vorangehenden Kap. 3.3.3 die Koordinate  $z_i$  durch die Koordinate  $z_i + s$  zu ersetzen (auch in den Integrationsgrenzen der Integrale). Damit ergibt sich für die Verschiebungen  $\Delta Y(z_i, l_j)$ , die



**Abbildung 3.28:** Darstellung der experimentellen Anordnung in einer Ebene senkrecht zur Streuebene für eine Ausdehnung  $q$  der Röntgenquelle sowie  $c$  des Kristalls und  $l$  des Detektors in dieser Ebene. Detektor und Kristall sind so ausgerichtet, dass ihre Mittelpunkte auf einer Geraden, der Hauptachse des Spektrometers, liegen, also innerhalb der Streuebene, in der auch die Kristallgitternormale liegt. Zwei Positionen der Linienquelle sind dargestellt, diejenige, in der der Mittelpunkt der Linienquelle ebenfalls in der Streuebene liegt (alte Position) und die neue Position, bei der der Mittelpunkt der Linienquelle bezüglich dieser Ebene entlang der  $z$ -Achse um den Wert  $s$  verschoben ist. Punktquelle 2 (aus Abb. 3.20) der Linienquelle ist stellvertretend für die unendliche Anzahl von Punktquellen in der Darstellung besonders hervorgehoben. Jede Punktquelle mit den Grenzwinkeln  $\kappa_{min}(z_{alt,i})$  und  $\kappa_{max}(z_{alt,i})$  des Winkels  $\kappa$  zwischen ursprünglicher Streuebene und neuer Ebene, in der die Röntgenstrahlung einfällt, unter denen die Röntgenstrahlung den Detektor noch erreichen kann, wird durch die Verschiebung der Linienquelle auf eine neue  $z$ -Koordinate  $z_{i,neu} = z_{i,alt} + s$  verschoben, wobei sich die Grenzwinkel  $\kappa_{min,max}(z_{alt,i})$  in neue Winkel  $\kappa_{min,max}(z_{i,neu}, l_j)$  ändern.  $l_j$  bezeichnet die Koordinate des Detektionspunktes  $j$  der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich der nicht-dispersiven Detektorachse.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

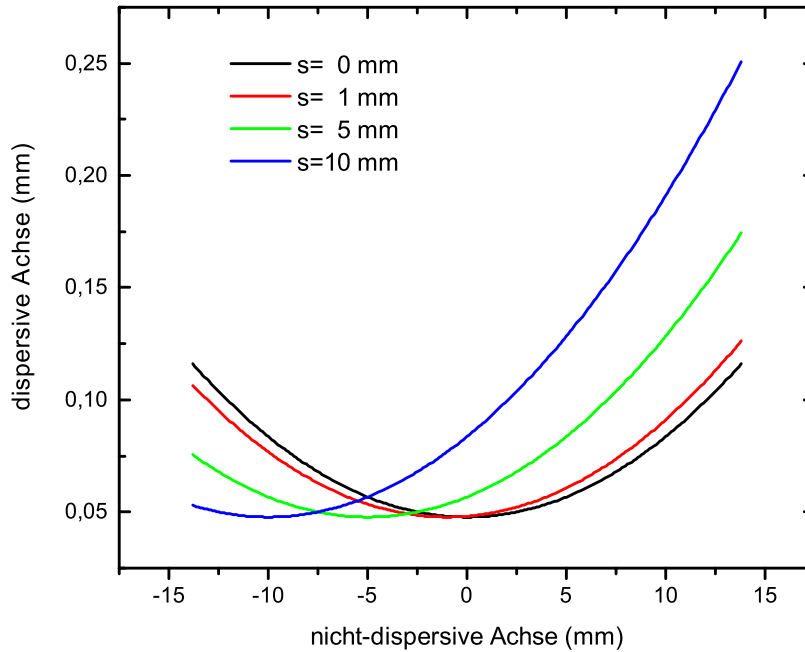


**Abbildung 3.29:** Linienform in der Detektorebene für die drei Punktquellen aus Abb. 3.20, wobei diese um  $s = 5$  mm entlang der  $z$ -Achse (siehe Abb. 3.28) verschoben wurden, für einen Bragg-Winkel  $\theta$  von  $53.5^\circ$ , eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.20) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und einen Abstand von Detektor und Quelle von 1886 mm.

von jeder Punktequelle  $i$  für jeden Detektorpunkt  $j$  verursacht werden,

$$\Delta Y(z_i, l_j) = L \cdot \tan(\zeta(\kappa(z_i, l_j))) \approx \frac{1}{2} L \tan \theta \left( \frac{(z_i + l_j + s)}{L} \right)^2. \quad (3.31)$$

Die mit Gl. 3.31 berechneten Werte für  $Y \Delta(z_i, l_j)$  sind stellvertretend für alle Punktquellen für die drei um  $s = 5$  mm entlang der  $z$ -Achse verschobenen Punktquellen aus Abb. 3.20 in Abb. 3.29 für  $q = 40$  mm,  $l = 27.6$  mm und  $L = 1886$  mm und einen Bragg-Winkel von  $53.5^\circ$  dargestellt. Vergleicht man diese Abbildung mit Abb. 3.21 für eine ausgedehnte, ideal ausgerichtete Linienquelle so ist zum einen klar ersichtlich, dass die gekrümmten Linien nun nicht mehr symmetrisch bezüglich der Quellmitte sind, d.h. das Röntgensignal, das durch Punktequelle 1 auf dem Detektor verursacht wird, ist nicht mehr identisch zu dem, welches von der Punktequelle 3 erzeugt wird. Zum anderen ist zu erkennen, dass die Linienkrümmung insgesamt, d.h. die Gesamtverschiebung  $K$ , größer sein wird, da insbesondere die Quellpunkte in der Nähe des Quellpunktes 1 einen stärker gekrümmten Röntgenreflex in der Detektorebene hervorrufen, als das vor ihrer Verschiebung um  $s$  der Fall war. So ist das maximale  $Y(z_i, l_j)$  für Quellpunkt 1 nach der Verschiebung um  $s = 5$  mm bereits um den Faktor 1.5 größer als vor der Verschiebung.

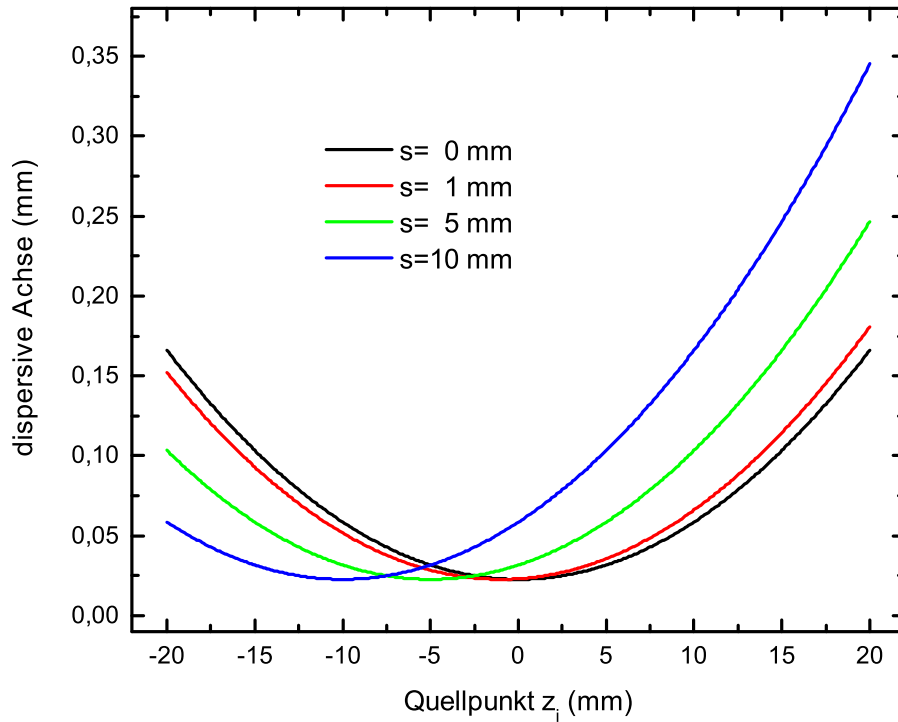


**Abbildung 3.30:** Verschiebung des Peakmaximums des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene für die einzelnen Punkte  $l_j$  auf dem Detektor, wobei  $l_j$  die nicht-dispersive Detektorcoordinate bezeichnet, bei einem Bragg-Winkel von  $\theta = 53.5^\circ$  in Abhängigkeit der Verschiebung  $s$  der Quellpunkte entlang der  $z$ -Achse (siehe Abb. 3.28). Die mittlere Verschiebung  $Y(l_j)$  für jeden Detektorpunkt ergibt sich als Mittelwert der Verschiebungen  $Y(z_i, l_j)$ , die durch jeden einzelnen Quellpunkt  $z_i$  für jeden dieser Punkte  $l_j$  verursacht werden. Für die Berechnung wurde eine Ausdehnung des Detektors entlang der nicht-dispersiven Achse von  $l = 27.6$  mm, eine Quelllänge von  $q = 40$  mm (siehe Abb. 3.28) in einer Ebene senkrecht zur Streuebene und ein Abstand von Detektor und Quelle von  $L = 1886$  mm angenommen.

Integriert man Gl. 3.31 analog zu Gl. 3.23 so erhält man die mittlere Verschiebung  $\Delta Y(l_j)$ , die für jeden Punkt auf dem Detektor  $l_j$  durch alle Punktquellen  $z_i$  verursacht wird, durch das auf die Quelllänge  $2z_{max} = q$  normierte Integral über die Koordinaten  $z_i$ , zu

$$\Delta(Y(l_j)) \approx \frac{\left( (q/2 + s + l_j)^4 - (-q/2 + s + l_j)^4 \right)}{6Lq} \tan(\theta). \quad (3.32)$$

Abb. 3.30 zeigt diese  $\Delta Y(l_j)$  bei einem Bragg-Winkel von  $\theta = 53.5^\circ$  für verschiedene Verschiebungen  $s$  der Linienquelle entlang der  $z$ -Achse (siehe Abb. 3.28) für  $q = 40$  mm,  $l = 27.6$  mm und  $L = 1886$  mm als Funktion der nicht-dispersiven Detektorcoordinate  $l_j$ . Auch diese Abbildung liefert im Vergleich mit Abb. 3.22 ein konsistentes Bild. Eine größere Verschiebung der Linienquelle um  $s$  führt demnach zu einem schnellen Anstieg des Mittelwertes der  $\Delta Y(l_j)$ , d.h. die mittlere Verschiebung des Röntgenreflexes entlang der dispersiven Detektorachse für die Detektorpunkte mit den Koordinaten  $l_j$  entlang der nicht-dispersiven Detektorachse, die durch alle



**Abbildung 3.31:** Mittlere Verschiebung  $Y(z_i)$  des Peakmaximums des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene, die durch die einzelnen Quellpunkte  $z_i$  der Röntgenlinienquelle hervorgerufen wird, bei einem Bragg-Winkel von  $\theta = 53.5^\circ$  in Abhängigkeit der Verschiebung  $s$  der Linienquelle entlang der  $z$ -Achse (siehe Abb. 3.28) als Funktion des ausgewählten Quellpunktes mit der  $z$ -Koordinate  $z_i$ . Diese Verschiebung  $Y(z_i)$  ergibt sich für jeden Quellpunkt  $z_i$  als Mittelwert der Verschiebungen  $Y(z_i, l_j)$ , die für jeden einzelnen Detektorpunkt  $l_j$  für jeden dieser Quellpunkte  $z_i$  verursacht werden. Die Variablen wurden für die Berechnung analog zu Abb. 3.30 gesetzt.

Quellpunkte  $z_i + s$  verursacht wird, wächst rapide, z.B. ergibt sich für  $s = 10$  mm ein um Faktor  $\sim 2$  größerer maximaler Wert von  $Y(z_i)$  als für  $s = 0$  mm.

Analog lässt sich durch Vergleich mit Gl. 3.27 die mittlere Verschiebung  $Y(z_i)$ , die für alle Punkte auf dem Detektor  $l_j$  durch die jeweilige Punktquellen  $z_i$  verursacht wird, als Integral über die Verschiebungen  $Y(z_i, l_j)$  zu

$$\Delta(Y(z_i)) \approx \frac{\left( (z_i + s + l/2)^4 - (z_i + s - l/2)^4 \right)}{6Lq} \tan(\theta) \quad (3.33)$$

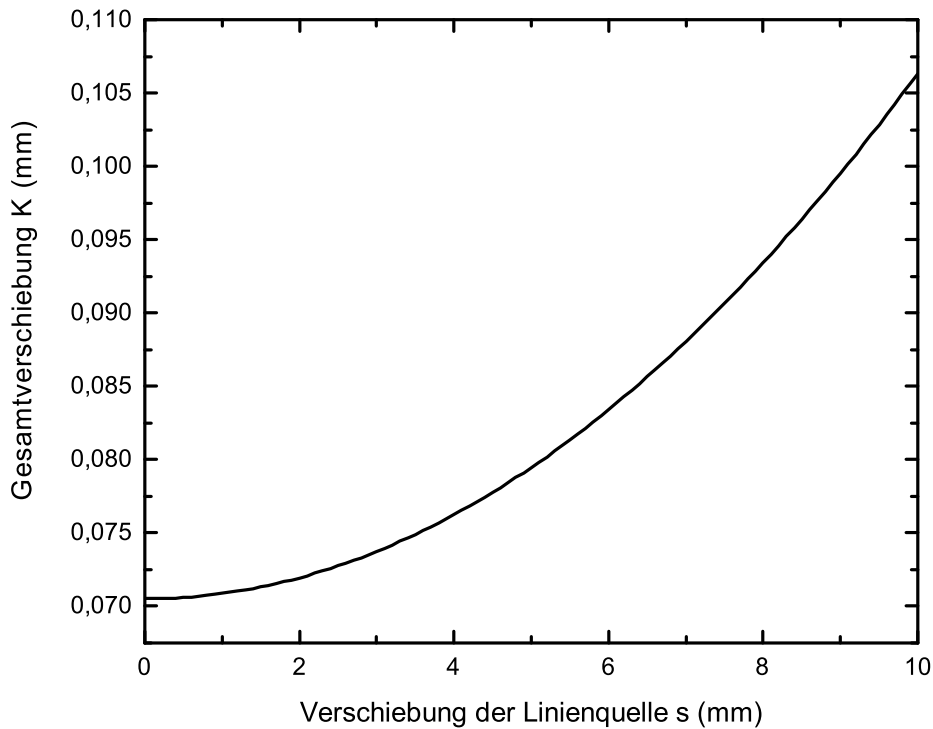
berechnen. Die so berechneten Werte für  $Y(z_i)$  sind in Abb. 3.31 in Abhängigkeit der Verschiebung  $s$  der Linienquelle entlang der  $z$ -Achse als Funktion des ausgewählten Quellpunktes mit der  $z$ -Koordinate  $z_i$  für  $q = 40$  mm,  $l = 27.6$  mm und  $L = 1886$  mm und einen Bragg-Winkel von  $53.5^\circ$  aufgetragen. Auch hier lässt sich erkennen, dass die Verschiebung  $s$  zu einem starken

Anstieg der Werte für  $Y(z_i)$  führt. Für die maximalen  $Y(z_i)$  ergeben sich für  $s = 10$  mm schon ungefähr doppelt so große Werte wie für den Fall mit  $s = 0$  mm, was sich mit vorangehenden Überlegungen deckt.

Damit erlauben obige Betrachtungen analog zu Gl. 3.29 eine Berechnung der Gesamtverschiebung  $K_{neu}$  des Peakmaximums des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene bezüglich einer parallelen Linie zur nicht-dispersiven Detektorachse durch den Detektorpunkt mit  $l_j = 0$ , der von einem Röntgenstrahl mit  $z_i = 0$  generiert wird. Diese lässt sich als eine Funktion der Verschiebung  $s$  der Quelle entlang der  $z$ -Achse (siehe Abb 3.28) ausdrücken:

$$K_{neu} \approx \frac{\left(\left(\frac{q}{2} + s + \frac{l}{2}\right)^4 - \left(-\frac{q}{2} + s + \frac{l}{2}\right)^4\right) - \left(\left(\frac{q}{2} + s - \frac{l}{2}\right)^4 - \left(-\frac{q}{2} + s - \frac{l}{2}\right)^4\right)}{24L \cdot l \cdot q} \tan(\theta) . \quad (3.34)$$

Abb. 3.32 stellt diese Gesamtverschiebung als Funktion der Verschiebung  $s=0-10$  mm der Quelle



**Abbildung 3.32:** Mit Gl. 3.34 berechnete Gesamtkorrektur  $K$  für das Peakmaximum des auf die dispersive Achse projizierten Röntgenreflexes in der Detektorebene bezüglich einer parallelen Linie zur nicht-dispersiven Detektorachse durch den Detektorpunkt mit  $l_j = 0$ , der von einem Röntgenstrahl mit  $z_i = 0$  generiert wird, bei einem Bragg-Winkel von  $\theta = 53.5^\circ$  für eine Verschiebung der Röntgenlinienquelle von  $s=0-10$  mm (siehe Abb. 3.28). Für die Berechnung wurden die Variablen analog zu Abb. 3.30 gesetzt.

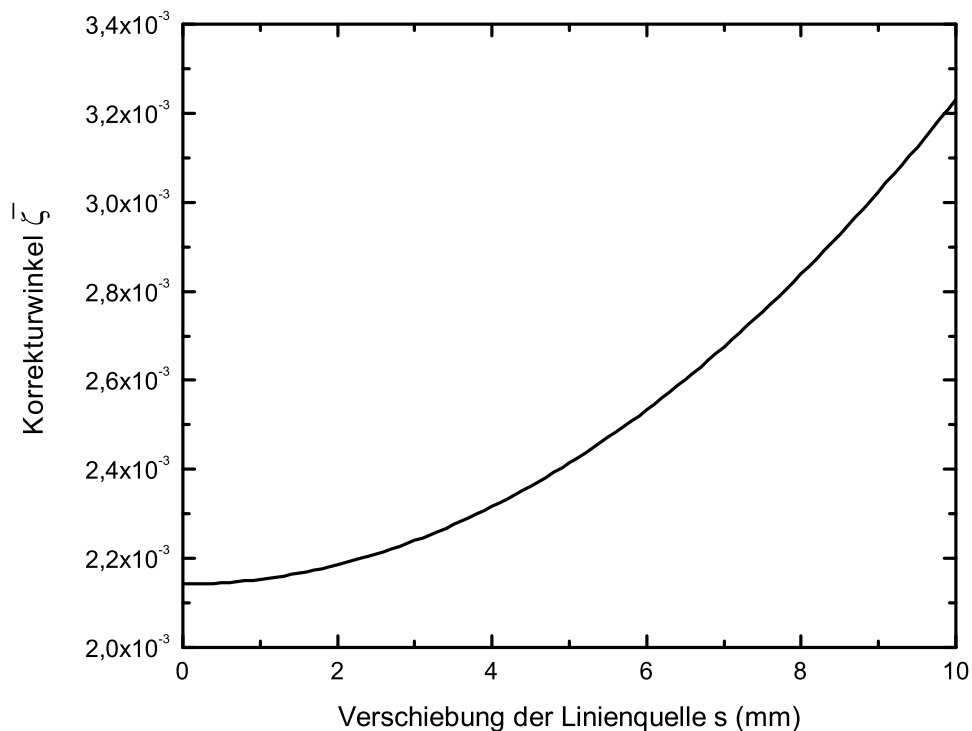


### 3.3. Systematische Fehlerquellen

für  $q = 40$  mm,  $l = 27.6$  mm und  $L = 1886$  mm sowie einen Bragg-Winkel von  $53.5^\circ$  dar. Es ergibt sich eine Gesamtverschiebung von  $K_{neu} = 0.07$  Pixel für  $s = 0$  mm. Dagegen hat  $K_{neu}$  für  $s = 10$  mm bereits einen Wert von  $K_{neu} = 0.11$  Pixel, d.h.  $K_{neu}$  ist um einen Faktor 1.3 größer. Dies bedeutet auch für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$ , dass er stark mit größer werdendem  $s$  ansteigt, denn der Korrekturwinkel ist über  $\bar{\zeta} = \arctan(K_{neu}/L)$  mit der Gesamtverschiebung  $K_{neu}$  verknüpft:

$$\bar{\zeta} \approx \arctan \left( \frac{\left( \left( \frac{q}{2} + s + \frac{l}{2} \right)^4 - \left( -\frac{q}{2} + s + \frac{l}{2} \right)^4 \right) - \left( \left( \frac{q}{2} + s - \frac{l}{2} \right)^4 - \left( -\frac{q}{2} + s - \frac{l}{2} \right)^4 \right)}{24L^2 \cdot l \cdot q} \tan(\theta) \right). \quad (3.35)$$

Dieser Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  ist eine wichtige Größe, da er in die Datenauswertung über die Beziehung  $\theta = \theta' - \bar{\zeta}$  eingebracht werden und der Bragg-Winkel so unter Berücksichtigung der Linienkrümmung bestimmt werden kann (siehe auch Kap. 3.3.2). Abb. 3.33 zeigt den mit Gl. 3.35 berechneten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  als Funktion der Verschiebung  $s$  der Linienquelle entlang der  $z$ -Achse (siehe Abb. 3.28). Die in der Berechnung eingesetzten Werte der Variablen sind analog denen aus Abb. 3.30. Abb. 3.33 lässt sich entnehmen, dass die Änderung der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$



**Abbildung 3.33:** Mit Gl. 3.35 berechneter Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  als Funktion der Verschiebung  $s = 0-10$  mm der Röntgenlinienquelle (siehe Abb. 3.28). Für die Variablen wurden die gleichen Werte wie in Abb. 3.30 verwendet.

für eine Verschiebung  $s$  der Linienquelle von bis zu 10 mm im Bereich von  $\sim 10^{-3}^\circ$  liegt. Für eine ideal positionierte Linienquelle von 40 mm ist  $\bar{\zeta} \sim 1.5$  mal kleiner als für eine Linienquelle, die um  $s = 10$  mm verschoben ist. Bei Vernachlässigung einer möglichen Fehlausrichtung des Spektrometers, kann damit ein systematischer relativer Fehler von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 15$  ppm in Röntgenwellenlängenmessungen für eine Verschiebung  $s$  von bis zu 10 mm entstehen. Das Spektrometer muss daher so ausgerichtet werden, dass die Mitte der Linienquelle innerhalb der Streuebene liegt, in der sich die Kristallgitternormale, der Mittelpunkt des Kristalls und des Detektors befinden (siehe Abb. 3.20). Wie diese Justage des Spektrometers durchgeführt wird, hängt vom experimentellen Aufbau ab, d.h. ob das Spektrometer für die Messung unter  $90^\circ$  zum Elektronenstrahl oder unter  $0^\circ$  montiert ist. Eine Diskussion dieser Justageprozesse findet sich in Kap. 3.3.6 und 3.3.7.

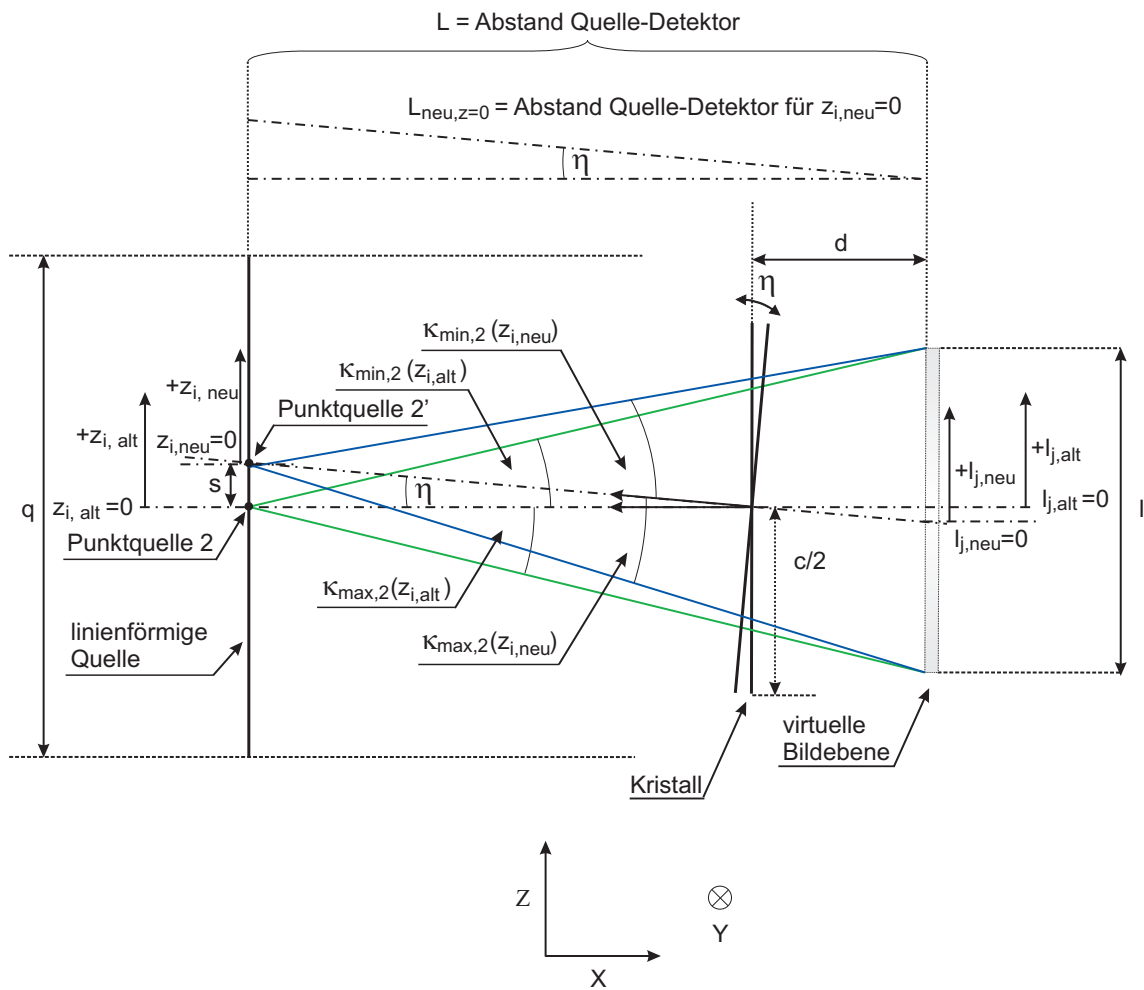
Abschließend sind für die obigen Überlegungen in Tab. 3.3 die mit Hilfe von Gl. 3.35 bestimmten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$  und eine Verschiebung der Linienquelle von  $s = 10$  mm entlang der  $z$ -Achse für  $l = 27.6$  mm,  $L = 1886$  mm und senkrechter Anordnung des Spektrometers zum Elektronenstrahl, so dass die Ionenwolke vom Kristall aus gesehen eine Ausdehnung von  $\sim 40$  mm besitzt, aufgelistet.

Hier soll noch kurz auf einen weiteren Fall einer nicht-idealen Positionierung des Kristalls bezüglich der Ionenwolke, d.h. der ausgedehnten Röntgenquelle, eingegangen werden, der im Experiment vorliegen kann. Es handelt sich dabei um eine Drehung des Kristalls um den Winkel  $\eta$  mit der  $y$ -Achse (siehe Abb. 3.34) als Drehachse. Unter gewissen (berechtigten) Annahmen lässt sich dieser Fall auf den eben beschriebenen Fall einer Verschiebung der Röntgenlinienquelle um  $s$  entlang der  $z$ -Achse zurückführen. Fig. 3.34 zeigt die experimentelle Anordnung für den Fall des ungedrehten und des um  $\eta$  gedrehten Kristalls schematisch in einer Ebene senkrecht zur Streuebene für eine Ausdehnung  $q$  der Röntgenquelle sowie  $c$  des Kristalls und  $l$  des Detektors in dieser Ebene.  $l_{j,alt}$  bezeichnet die alte  $z$ -Koordinate, d.h. vor der Drehung des Kristalls um  $\eta$ , des Detektionspunktes  $j$  der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich der nicht-dispersiven Detektorachse und  $l_{j,neu}$  die neue Koordinate, d.h. nach der Drehung des Kristalls

Element	Übergang	Energie (eV)	$\theta(\text{Si111, Si220}) (^\circ)$	$\bar{\zeta} \cdot 10^{-4} (^\circ)$
S <sup>14+</sup>	$w$	$\sim 2461$	53.5	32.3
S <sup>15+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 2623$	49.0	27.5
Ar <sup>16+</sup>	$w$	$\sim 3140$	39.0	19.4
Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 3323$	36.5	17.7
Fe <sup>24+</sup>	$w$	$\sim 6701$	28.8	13.1
Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 6973$	27.6	12.5

**Tabelle 3.3:** Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$  (vgl. Gl. 3.35) und eine Verschiebung der Linienquelle um  $s = 10$  mm. Die Bragg-Winkel beziehen sich auf Messung der Wellenlängen - außer im Falle der Messungen an Eisenionen - mit einem Si(111)-Kristall. Die Bragg-Winkel für die Röntgenstrahlung von Eisenionen wurden für den Einsatz eines Si(220)-Kristalls berechnet.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen



**Abbildung 3.34:** Schematische Darstellung der experimentellen Anordnung in einer Ebene senkrecht zur Streuebene für einen ideal ausgerichteten bzw. einen um  $\eta$  gedrehten Kristall bei einer Ausdehnung  $q$  der Röntgenquelle sowie  $c$  des Kristalls und  $l$  des Detektors in dieser Ebene.  $l_{j,alt}$  steht für die alte Koordinate, d.h. vor der Drehung des Kristalls um  $\eta$ , des Detektionspunktes  $j$  der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich der nicht-dispersiven Detektorachse und  $l_{j,neu}$  für die neue Koordinate, d.h. nach der Drehung des Kristalls um  $\eta$ . Analog bezeichnet  $z_{i,alt}$  die alte  $z$ -Koordinate der Punktquelle und  $z_{i,neu}$  die neue Koordinate. Alle Koordinaten beziehen sich auf das alte Koordinatensystem. Es sind zwei Kristallstellungen, die sich um den Drehwinkel  $\eta$  unterscheiden, und zwei korrespondierende Punktquellen (Punktquelle 2 und Punktquelle 2'), die jeweils in der Ebene liegen, die durch die Kristallgitternormale und die Mitte des Kristalls sowie die  $y$ -Achse aufgespannt wird, und die die Streuebene der Röntgenstrahlung darstellen, eingezeichnet. In einer Kristallstellung sind Quelle, Detektor und Kristall so ausgerichtet, dass ihre Mittelpunkte auf einer Geraden, der Hauptachse des Spektrometers, liegen, also innerhalb der Streuebene, in der auch die Kristallgitternormale liegt; in der zweiten Kristallstellung liegt nur der Mittelpunkt des Kristalls in der neuen Streuebene. Die  $z$ -Koordinate jeder Punktquelle mit den Grenzwinkeln  $\kappa_{min}(z_{i,alt})$  und  $\kappa_{max}(z_{i,alt})$  des Winkels  $\kappa$ , unter denen die Röntgenstrahlung den Detektor noch erreichen kann, wird unter der Koordinatentransformation durch Rotation des Kristalls um  $\eta$  von  $z_{i,alt}$  nach  $z_{i,neu}$  transformiert, wobei sich die Grenzwinkel  $\kappa_{min,max}(z_{i,alt})$  zu neuen Winkeln  $\kappa_{min,max}(z_{i,neu})$  ändern.

um  $\eta$ . Die Koordinaten sind beide bezüglich des alten Koordinatensystems angegeben. Analog steht  $z_{i,alt}$  für die alte  $z$ -Koordinate der Punktquelle und  $z_{i,neu}$  für die neue Koordinate. Beide Koordinaten beziehen sich auf das alte, ungedrehte Koordinatensystem. Zwei Kristallstellungen, die sich um den Drehwinkel  $\eta$  unterscheiden, sind eingezeichnet. Experimentell kann ohne gezielte Ausrichtung des Spektrometers nicht sichergestellt werden, dass tatsächlich von den beiden Ausrichtungen diejenige vorliegt, bei der eine Gerade durch den Mittelpunkt des Kristalls mit der Richtung der Kristallgitternormale die Linienquelle mittig schneidet. Ein geringer Winkel  $\eta$  von  $\eta = \arctan(6/1886) \approx 0.2^\circ$ , der bei einem Abstand von Quelle zu Detektor von  $\sim 1886$  mm zu einer Fehlansichtung der Kristallgitternormale bezüglich der Röntgenlinienquelle, d.h. zwischen der Position von Punktquelle 2 und 2', von lediglich 6 mm korrespondiert, kann bei gewöhnlicher Positionierung des Spektrometers mittels einfachen Abstandsmessern nicht vermieden werden. Eine gezielte Ausrichtung des Spektrometers auf die Idealposition ist vonnöten. In Abb. 3.34 ist für diese ideale Ausrichtung die Punktquelle 2 mit ihren Grenzwinkeln  $\kappa_{min,max}(z_{i,alt})$  angedeutet. Eine Punktquelle, die um  $s = L \cdot \tan \eta$  verschoben ist, Punktquelle 2', ist für den Fall des um  $\eta$  gedrehten Kristalls mit ihren Grenzwinkeln  $\kappa_{min,max}(z_{i,neu})$  skizziert. Gilt für den Abstand zwischen Kristall und Detektor  $d \ll L$ , was in den Experimenten dieser Arbeit der Fall ist, so kann man davon ausgehen, dass die Verschiebung zwischen  $l_{j,alt}$  und  $l_{j,neu}$ , d.h. zwischen alten und neuen  $z$ -Koordinaten der Detektorpunkte, gering ist (denn diese enthält  $d \cdot \tan \eta$ , was für kleine  $\eta$  gegen 0 geht) und man kann näherungsweise  $l_{j,alt} \approx l_{j,neu}$  setzen. Für die neuen Grenzwinkel  $\kappa_{min,max}(z_{i,neu})$  von Punktquelle 2' ergibt sich dann  $\kappa_{max} = (z_{i,neu} + l/2)/L_{neu,z=0}$  und  $\kappa_{min} = (z_{i,neu} - l/2)/L_{neu,z=0}$ . Dabei lässt sich  $L_{neu,z=0}$  für  $z_{i,neu} = 0$  zu  $L_{neu,z=0} = L/\cos \eta$  (siehe Abb. 3.34) berechnen (und allgemein für jedes  $z_{i,neu}$  zu  $L_{neu} = (L - \tan \eta \cdot z_{i,alt})/\cos \eta$ ) und entspricht damit in erster Näherung  $L$ .  $z_{i,neu}$  bezeichnet, wie oben erwähnt, die neuen Koordinaten der Röntgenpunktquelle in Bezug auf das alte Koordinatensystem und ist mit  $z_{i,alt}$ , d.h. der alten Koordinate der Röntgenpunktquelle im alten Koordinatensystem, über  $z_{i,neu} = z_{i,alt}/\cos \eta$  verknüpft. Die Koordinaten  $z_{i,neu}$  können dabei bezüglich des alten Koordinatensystems Werte zwischen  $z_{i,neu} = (\pm q/2 + L \tan \eta)/(1 + \tan^2 \eta) \cdot \cos \eta$  annehmen. Mit der Näherung für kleine  $\eta$ ,  $\tan^2 \eta \approx 0$  und  $\cos \eta \approx 1$  ergibt sich damit für alle Punktquellen  $i$   $z_{i,neu} \approx z_{i,alt} + L \cdot \tan \eta$ . Damit erhält man somit für  $\kappa(z_{i,neu}(z_{i,alt})) = (z_{i,alt} + L \tan \eta \pm l/2)/L$ . Bezeichnet man  $L \tan \eta$  als  $s$  so entspricht der Fall einer Fehlpositionierung des Kristalls um den Rotationswinkel  $\eta$  dem oben beschriebenen Fall einer Verschiebung der Röntgenlinienquelle um den Wert  $s$  entlang der  $z$ -Achse und die oben hergeleiteten Ergebnisse gelten auch für diesen Fall.

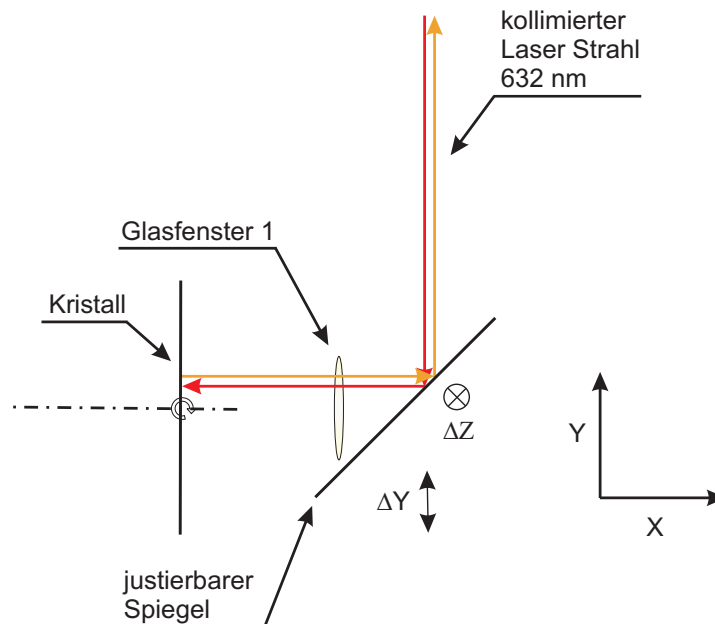
Aus den Betrachtungen dieses Kapitels ergibt sich, dass eine Ausrichtung des Spektrometers auf die ideale Geometrie, bei der sich der Mittelpunkt von Linienquelle, Kristall und Detektor wie auch die Kristallgitternormale in einer Ebene, der Streuebene der Röntgenstrahlung befinden, in jedem Falle erforderlich (oder positiv) ist. Ist die Linienkrümmung auf dem Detektor nicht experimentell aufzulösen, so ist es erforderlich  $\eta$  präzise zu kennen, um den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  berechnen und in der Datenauswertung berücksichtigen zu können. Ist die Ausrichtung des Spektrometers ideal, d.h.  $\eta = 0$ , so ist die Linienkrümmung dabei minimal, was in Hinblick auf einen geringeren Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  wünschenswert ist. Dies gilt auch, wenn die Linienkrümmung auf dem Detektor experimentell aufgelöst werden kann. Eine Verringerung der Linienkrümmung ist in jedem Falle

positiv.

Im folgenden Kapitel soll die dafür nötige Ausrichtung des Spektrometers auf die Idealposition mit  $\eta = 0$  besprochen werden. Diese Ausrichtung wird für die zwei verschiedenen Anordnungen des Spektrometers bezüglich der EBIT diskutiert, die beide in den Messungen dieser Arbeit verwendet wurden (siehe Kap. 3.3.4), für den Fall, bei dem das Spektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert ist und die Ionenwolke für den Kristall wie eine Linienquelle mit einer Länge  $q \approx 40$  mm erscheint, und für den Fall, bei dem das Spektrometer parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiert ist und die Ionenwolke vom Kristall aus gesehen eine Ausdehnung  $q$  von einigen  $100 \mu\text{m}$  besitzt. Zunächst wird auf ersteren Fall eingegangen.

#### 3.3.6 Ausrichtung des Spektrometers bei senkrechter Montage zum Elektronenstrahl

Wie im letzten Kapitel besprochen ist es notwendig und wünschenswert, das Spektrometer ideal auszurichten, d.h. so, dass für den Winkel  $\eta$  (siehe Abb. 3.34) zwischen Hauptachse des Spektrometers und der Gerade, die durch die Mitte des Kristalls und die Kristallgitternormale vorgegeben ist,  $\eta = 0$  gilt. Die dafür erforderliche Positionierung des Spektrometers soll in diesem Kapitel für eine Montage des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-

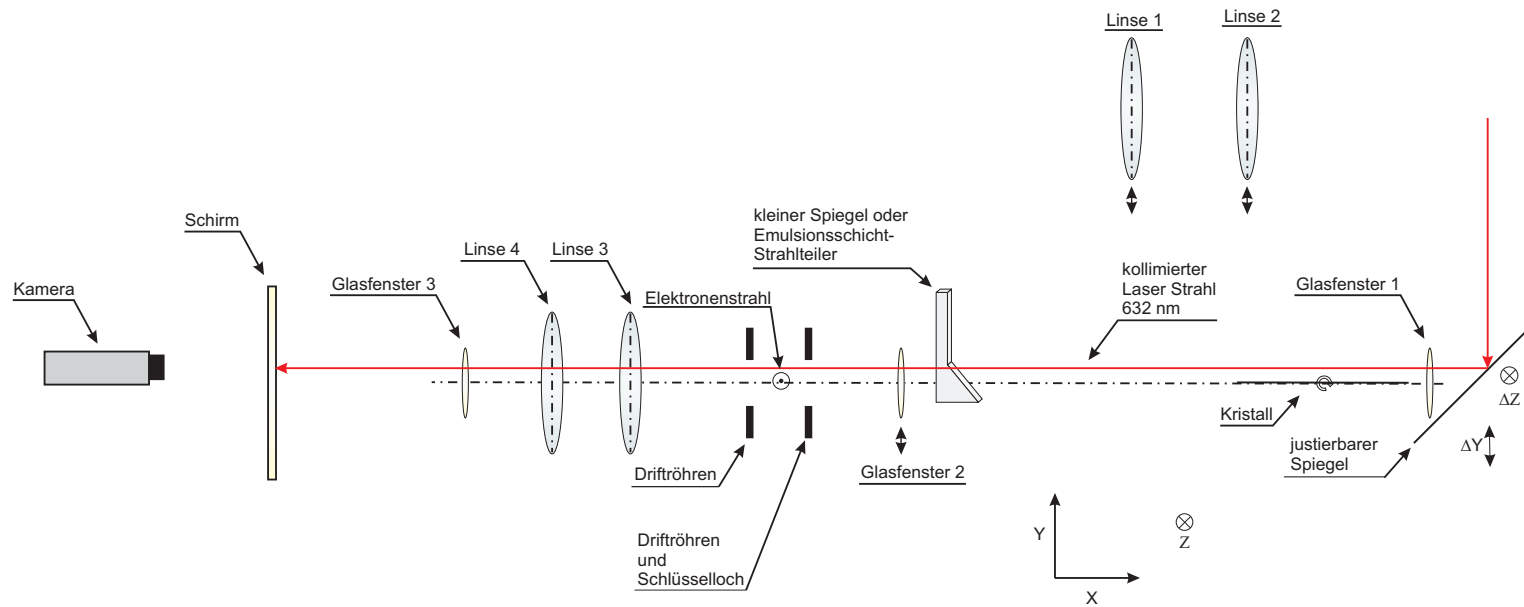


**Abbildung 3.35:** Experimentelle Anordnung zur Absolutbestimmung der  $z$ -Koordinate des Kristallmittelpunktes mittels eines parallel zur Kristalloberflächennormale einjustierten Lasers. Der Laser kann dabei mit Hilfe eines justierbaren optischen Tisches parallel zur  $z$ -Achse verschoben werden. Verschwindet der Rückreflex des Lasers, so ist (jeweils) eine Kante des Kristalls in nicht-dispersiver Richtung erreicht. Über den Mittelwert der so bestimmten  $z$ -Koordinaten der Kristallkanten lässt sich die Koordinate des Kristallmittelpunktes bestimmen. Zur besseren Darstellung sind Laserstrahl und Rückreflex in verschiedenen Farben dargestellt.

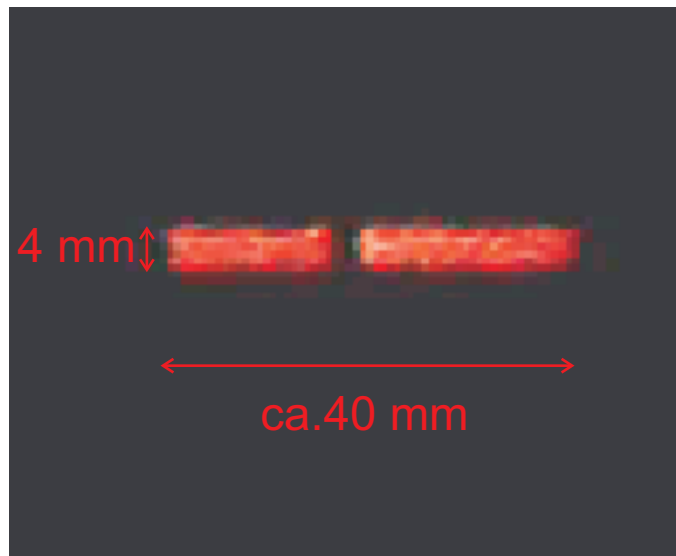
EBIT diskutiert werden. Dies ist die in allen früheren Röntgenwellenlängenmessungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer und in einigen Messungen dieser Arbeit verwendete Geometrie (siehe auch Kap. 3.3.4). Für diese Anordnung erscheint die Ionenwolke vom Kristall aus gesehen als Linienquelle mit einer Länge von  $q \approx 40$  mm.

Um das Spektrometer auszurichten, müssen die Positionen des Kristall- und Ionenwolkenmittelpunktes und damit des Linienquellenmittelpunktes absolut bezüglich der Kristallnormale bestimmt und in Überlapp gebracht werden. Um die Position des Kristallmittelpunktes absolut zu vermessen, wird zunächst ein handelsüblicher, durch zwei Blenden kollimierter He-Ne-Laserstrahl mit einer Wellenlänge von 632 nm über einen in  $y$ - und  $z$ -Richtung justierbaren Spiegel, durch das in Kap. 3.2 erwähnte Vakuumglasfenster (siehe Abb. 3.35 Glasfenster 1) in das Röntgenspektrometer eingeschossen, wo sein Strahlengang von dem Kristall, der sich unter einem Kristallwinkel (siehe Abb. 3.1) von  $\xi = 90^\circ$  befindet, umgekehrt wird. Der Laserstrahl wird so einjustiert, dass er vom Kristall in sich selbst zurückreflektiert wird, d.h. dass sein Strahlengang parallel zur Kristalloberflächennormale verläuft. Mit dem so ausgerichteten Laserstrahl wird anschließend die  $z$ -Koordinate der Kristallmitte absolut bestimmt. Dies geschieht mittels eines Justagespiegels, der auf einem kleinen optischen Tisch mit Mikrometerschraube montiert ist. Mit dessen Hilfe kann der Laser entlang der  $z$ -Achse parallel verschoben werden. Verschwindet der Rückreflex des Lasers vom Kristall in positiver Richtung der  $z$ -Achse, so ist die eine Kante des Kristalls entlang der nicht-dispersiven Achse erreicht; entsprechendes gilt für die negative  $z$ -Achse und die andere Kante des Kristalls. Die Koordinate  $z$  des Kristallmittelpunktes ergibt sich dann als Mittelwert der beiden über die Mikrometerschraube des Verschiebetisches absolut bestimmten  $z$ -Koordinaten der Kristallkanten.

Die so absolut bestimmte Position des Kristallmittelpunktes in Hinblick auf die Oberflächennormale des Kristalls muss mit der Position des Mittelpunktes der Ionenwolke verglichen werden, um das Spektrometer und den Kristall zu  $\eta = 0$  ausrichten zu können. Um den Mittelpunkt der Ionenwolke absolut zu vermessen, wird der Kristall zu  $\xi = 0$  rotiert. Der parallel zur Oberflächennormale einjustierte Laser wird über dem waagrecht stehenden Kristall in das Spektrometer eingeschossen (siehe Abb. 3.36). Dabei sind die beiden Linsen (Linse 1, 2) (siehe Kap. 3.2.1) im Strahlrohr des Spektrometers, die Justagezwecken dienen, aus dem Strahlengang entfernt, und anstatt des Interferenzfilters bzw. des Berylliumfensters ist ein Glasfenster (Glasfenster 2) in den Strahlengang eingefahren. Der Laser wird am Spiegel vorbei bzw. durch den Emulsionsschicht-Strahlteiler (siehe Abb. 3.1), die der Einkopplung der Lichtreferenzlinien in den Strahlengang der Röntgenstrahlung dienen, geschossen und passiert Glasfenster 2 und das so genannte „Schlüsselloch“, eine metallische Blende vor der Driftröhrenanordnung, die die Sicht auf das Fallenvolumen seitlich begrenzt. Nach Durchlaufen der Fallenregion tritt der Laser durch zwei Linsen (Linse 3, 4), die sich in dem dem Spektrometer gegenüberliegenden Port für optische Spektroskopie [94] befinden, und verlässt das EBIT Vakuum (Glasfenster 3). Mittels einer Kamera, Spiegelreflex, Webkamera etc., kann der auf einem Schirm auf der dem Spektrometer gegenüberliegenden EBIT-Seite abgebildete Laserpunkt detektiert werden. Der Schirm befindet sich dabei im Brennpunkt der zweiten Linse (Linse 4). Der Brennpunkt der ersten Linse (Linse 3) liegt im Fallenzentrum. Der Laserpunkt lässt sich nun als Funktion der  $z$ -Koordinate des justierbaren Spiegels beobach-



**Abbildung 3.36:** Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus zur absoluten Bestimmung der  $z$ -Koordinate des Driftröhren- und damit des Ionenwolkenmittelpunktes. Der Laser kann dabei mit Hilfe eines justierbaren optischen Tisches parallel zur  $z$ -Achse verschoben werden. Verschwindet der Rückreflex des Lasers, so ist (jeweils) eine Kante des Schlüssellochs und damit der dazu zentrisch ausgerichteten Driftröhre und Ionenwolke erreicht. Über die  $z$ -Koordinaten der Schlüssellochkanten lässt sich dann die  $z$ -Koordinate des Wolkenmittelpunktes bestimmen.



**Abbildung 3.37:** Abbild der Driftröhrenanordnung, das über die Aufweitung eines 632 nm He-Ne-Laserstrahls auf dem Schirm erzeugt wurde. Der schwarze Schatten in der Mitte wird dabei durch den kleinen Spiegel im Strahlengang des Lasers verursacht. Das Abbild ist bezüglich des kleinen Spiegels leicht asymmetrisch, da der Laser bzw. die Linsen bei der Aufnahme nicht ganz optimal ausgerichtet waren, so dass das Schlüsselloch leicht schräg und damit ungleichmäßig beleuchtet wurde. Die Skalen zeigen die Maße des Abbilds.

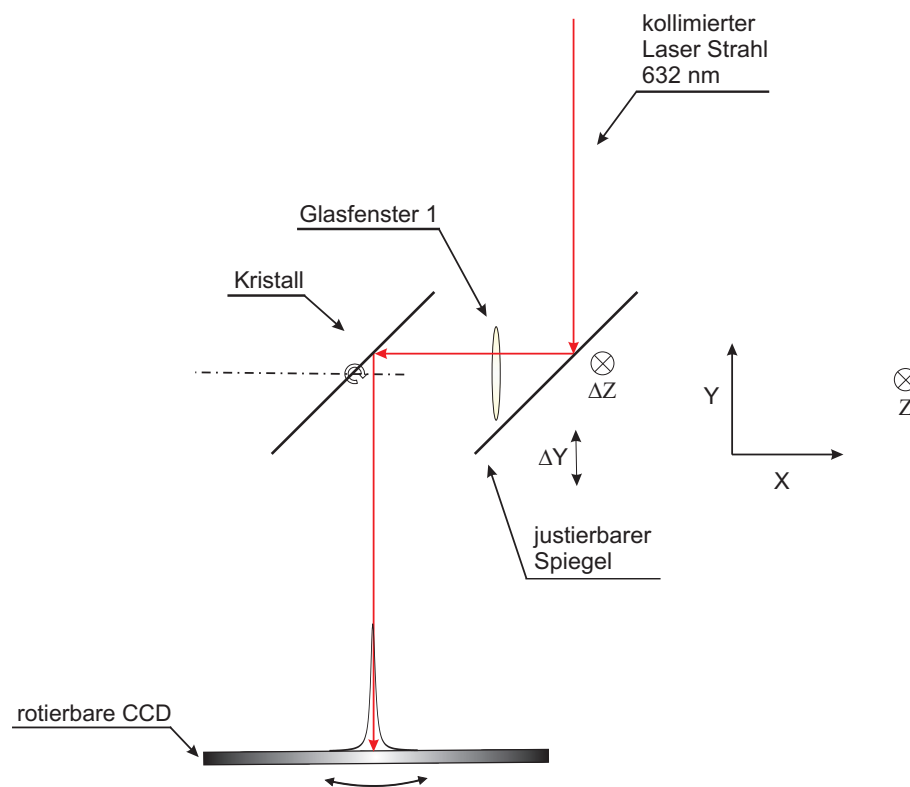
ten. Verschwindet der Laserpunkt, so trifft der Laser (jeweils) eine Kante des Schlüssellochs, die zentrisch zur Driftröhre und damit zur Ionenwolke ausgerichtet ist. Über die so bestimmten  $z$ -Koordinaten der Schlüssellochkanten lässt sich dann die  $z$ -Position des Wolkenmittelpunktes als Mittelwert dieser Koordinaten bestimmen. Durch Aufweiten des Laserstrahls mittels einer Linsenanordnung lässt sich zusätzlich ein Abbild der Driftröhrenkonstruktion erzeugen (siehe Abb. 3.37). Der kleine Schatten in der Mitte des Abbilds lässt sich durch den kleinen Spiegel, der normalerweise die Lichtreferenzlinien in den Strahlengang einkoppelt, und einen Teil des Laserlichtes blockiert, erklären. Einige Maße lassen sich über die Abbildung bestätigen, so z.B. die Höhe des Schlüssellochs mit 4 mm.

Sind die  $z$ -Koordinaten des Kristallmittelpunktes und des Wolkenmittelpunktes bezüglich der Oberflächennormale auf diese Art bestimmt worden, so kann das Spektrometer schrittweise verschoben werden, bis die ideale Position erreicht ist, d.h. die Mitte des Kristalls und der Wolke in Bezug zur Kristalloberflächennormale die gleiche  $z$ -Koordinate besitzen, wobei diese Position immer wieder sequentiell überprüft wird. Die Unsicherheit bezüglich der Positionierung des ausgerichteten Spektrometers lässt sich wie folgt abschätzen: Da sich die letzte Blende zur Kollimierung des Laserstrahls in einer Entfernung von ca. 1 m zum Kristall befindet und die Position des vom Kristall rückreflektierten Lasers mit einer Genauigkeit von ca. 1 mm bestimmt werden kann, ergibt sich ein möglicher Offset-Winkel zwischen Kristalloberflächennormale und Laserstrahl von 0.5 rad. Die Distanz zwischen Kristall und Falle beträgt  $\sim 1.5$  m. Die resultierende Unsicherheit in der Bestimmung der Position des Wolkenmittelpunktes beträgt damit  $\sim \pm 0.75$  mm. Dagegen

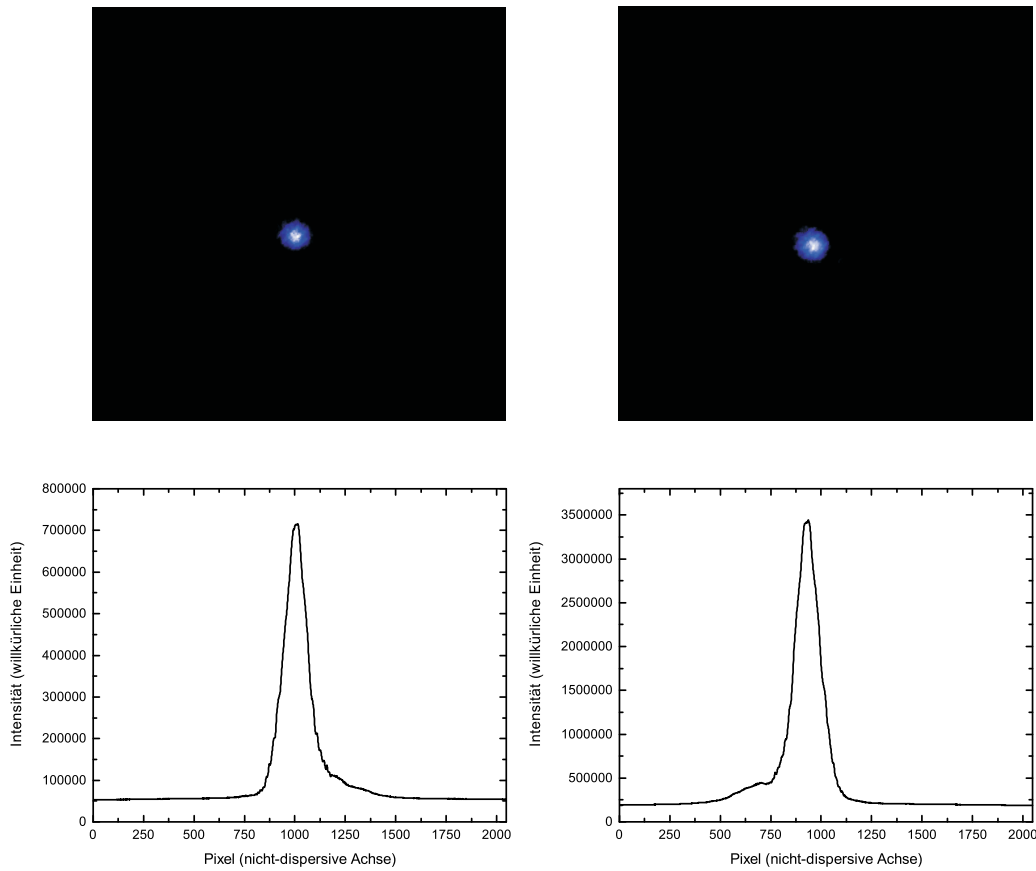


### 3.3. Systematische Fehlerquellen

wird die Unsicherheit in der Bestimmung der Position des Kristallmittelpunktes durch die Genauigkeit beeinflusst, mit der die Positionen der Kanten des Kristalls vermessen werden können. Die Unsicherheit in der Bestimmung der Kristallkantenpositionen wurde durch mehrmaliges Anfahren dieser Positionen mit dem Laserstrahl, der mittels des verschiebbaren optischen Tisches parallel zur  $z$ -Achse justiert werden kann, anhand der Standardabweichung des Mittelwertes der für die verschiedenen Messungen erhaltenen  $z$ -Koordinaten der Kristallkanten zu  $\sim \pm 0.3$  mm bestimmt. Damit kann die Ausrichtung des Spektrometers bzw. des Kristallmittelpunktes bezüglich des Ionenwolkenmittelpunktes auf  $\sim \pm 0.8$  mm genau bestimmt werden. Eine Fehlausrichtung  $s$  des Spektrometers von bis zu  $\sim \pm 0.8$  mm bezüglich der Idealposition ist somit während der Röntgenwellenlängenmessung nicht ausgeschlossen und hat nach Gl. 3.35 einen um bis zu  $\Delta\bar{\zeta} \approx 7 \cdot 10^{-6}^\circ$  größeren Korrekturwinkel für die Linienkrümmung zur Folge. Wird die Linienkrümmung des Röntgenreflexes auf dem Detektor nicht experimentell aufgelöst, so führt die nach der Justage des Spektrometers noch vorliegende Unsicherheit in der Ausrichtung des Spektrometers von  $s = \pm 0.8$  mm und die dazugehörige Unsicherheit im simulierten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  somit für die Wellenlängenbestimmung zu einem zusätzlichen Beitrag zum Gesamtfehler. Dieser



**Abbildung 3.38:** Schematische Darstellung zur Überprüfung der Ausrichtung der  $z$ -Koordinate des Kameramittelpunktes bezüglich der Kristallnormale. Ein kollimierter 632 nm He-Ne-Laserstrahl, der parallel zur Kristalloberflächennormale auf den Kristallmittelpunkt einjustiert ist, wird vom Kristall auf die CCD Kamera reflektiert und dort detektiert. Analog lässt sich der Laserreflex bei Drehung des Kristalls um  $90^\circ$  auf der zweiten CCD Kamera, die für die Anwendung der Bond-Methode benötigt wird, abbilden.



**Abbildung 3.39:** Spektren der von Detektor 1 (links), Detektor 2 (rechts) aufgenommenen Laserpunkte zusammen mit ihrer Projektion auf die nicht-dispersive Detektorachse (unten). Es ist eine Verschiebung des Chipmittelpunktes von Kamera 2 bezüglich des Kristallmittelpunktes von ca. 100 Pixeln entlang der nicht-dispersiven Achse zu erkennen.

ergibt sich aufgrund obiger Betrachtungen zu  $|\Delta\lambda/\lambda| \approx 0.3$  ppm, was eine Wellenlängenmessung mit einer relativen Genauigkeit von  $|\Delta\lambda/\lambda| \approx 1-1.5$  ppm noch ermöglicht. Kann die Linienkrümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene dagegen aufgelöst werden, so entfällt dieser zusätzliche Beitrag zum Gesamtfehler der Wellenlängenmessung. Auch aus diesem Grund ist es also erstrebenswert die Linienkrümmung in der Detektorebene experimentell aufzulösen.

Zusätzlich zu den Koordinaten des Kristall- und Ionenwolkenmittelpunktes kann die Koordinate der Mitte der Kamera in nicht-dispersiver, also in  $z$ -Richtung, und damit die Ausrichtung der Kamera, bezüglich der Ebene, in der sich Wolken-, Kristallmittelpunkt und die Kristalloberflächennormale befinden, absolut bestimmt werden. Dazu wird der auf die Mitte des Kristalls parallel zur Kristalloberflächennormale ausgerichtete Laserstrahl bei einer beliebigen Kristallstellung, hier bei einem Kristallwinkel von  $\xi = 45^\circ$ , auf die Kamera reflektiert (siehe Abb. 3.38). Analog lässt sich der Laserreflex bei Drehung des Kristalls um  $180^\circ$  auf der zweiten CCD Kamera, die für die Bond-Methode benötigt wird, abbilden. Die  $z$ -Koordinate des detektierten Laserpunktes in

der Kameraebene lässt sich anhand der Projektion seines Spektrums auf die nicht-dispersive Detektorachse und anschließenden Gaußfit an das so erhaltene Linienprofil über das Peakmaximum des Fits bestimmen. Abb. 3.39 zeigt die für beide Kameras aufgenommenen Laserpunkte zusammen mit ihrer Projektion auf die nicht-dispersive Detektorachse. Es ist zu erkennen, dass der Laserpunkt für CCD Kamera 1 nahezu mittig bei Pixel 1024 liegt, während der für CCD Kamera 2 um  $\sim 100$  Pixel zu niedrigeren Werten, auf ca. Pixel 920, verschoben ist, was einer Verschiebung von  $\sim 1.5$  mm entspricht. Nach Rücksprache mit dem Hersteller der CCD Kameras (Andor Technologies) muss es sich bei dieser Verschiebung durchaus nicht um eine Fehlpositionierung der Kamera als solches bezüglich des Spektrometers handeln. Diese kann vielmehr durch eine Verschiebung des Kamerachips bezüglich der Kameramitte, der bei der Fertigung der CCD Kamera nur mit einer Toleranz von  $\sim \pm 2$  mm genau auf die Kameramitte montiert werden kann, verursacht werden. Diese Tatsache ist in jedem Fall in Bezug auf die Linienform und die Datenauswertung zu berücksichtigen.

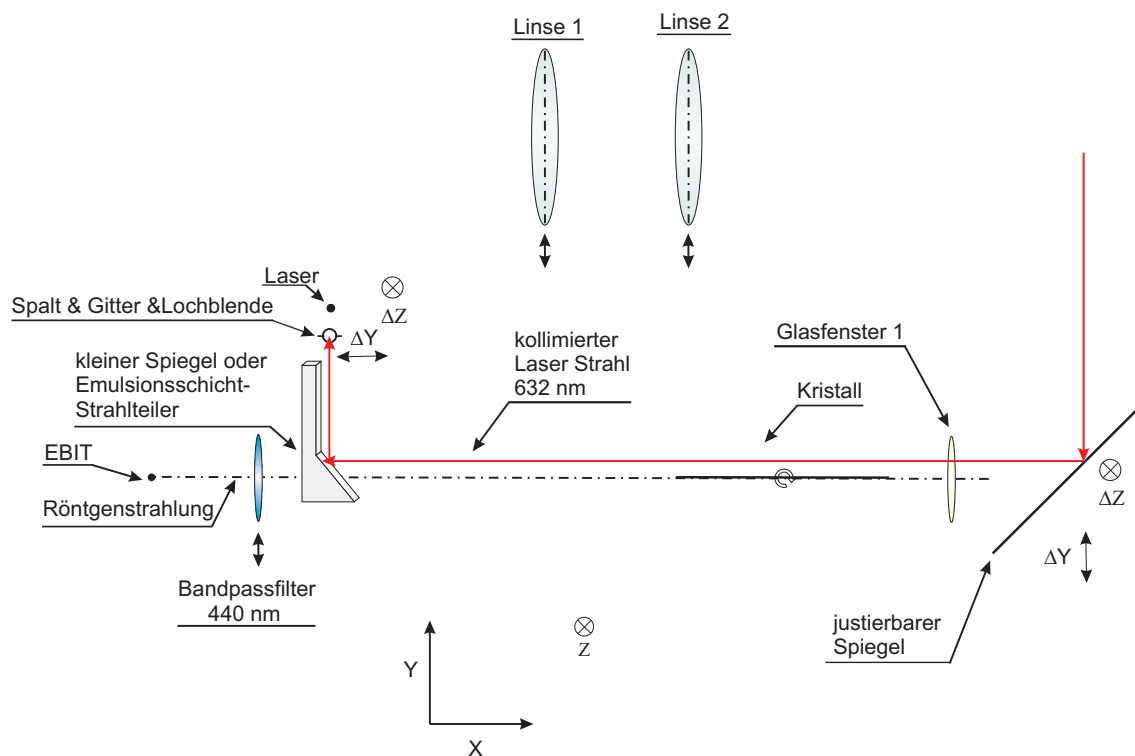
#### 3.3.7 Ausrichtung des Spektrometers bei paralleler Montage zum Elektronenstrahl

Nachdem im vorangehenden Kapitel die Ausrichtung des Spektrometers auf die Idealposition, die zur Minimierung der Linienkrümmung benötigt wird, bei senkrechter Montage des Spektrometers zum Elektronenstrahl besprochen wurde, soll hier auf die ideale Positionierung des Spektrometers bei paralleler Montage des Spektrometers zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT eingegangen werden. Dies ist die Geometrie, in der das Heidelberg-Röntgenspektrometer zum ersten Mal in einigen Messungen dieser Arbeit eingesetzt wurde. Die Vorteile, die eine Montage des Spektrometers in dieser Anordnung mit sich bringt, wurden bereits eingehend in Kap. 3.3.4 besprochen. Hier soll nur festgehalten werden, dass für diese Anordnung die Ionenwolke vom Kristall aus gesehen nahezu als eine Punktquelle ( $q \approx 100 \mu\text{m}$ ) erscheint.

Bei paralleler Montage des Spektrometers zum Elektronenstrahl ist das Spektrometer von der Kathode aus gesehen hinter dem Elektronenkollektor der EBIT montiert, so dass der Kristall sich auf einer Achse mit der Elektronenkanone und der Kathode befindet. Dem Spektrometerport liegt damit kein optischer Port gegenüber. Eine Bestimmung der Position des Wolkenmittelpunktes bezüglich der Kristalloberflächennormale mit der Methode, die bei senkrechter Montage des Spektrometers verwendet wird, ist aus diesem Grund nicht möglich. Um die Position der Ionenwolke, die nahezu einer Punktquelle entspricht, zu bestimmen, wurde daher eine andere Methode benutzt, die aber wiederum auf einen kollimierten, parallel zur Kristallnormale auf die  $z$ -Koordinate des Mittelpunktes des Kristalls ausgerichteten He-Ne-Laserstrahl mit einer Wellenlänge von 632 nm zurückgreift und voraussetzt, dass die Position des Einzelspalt, d.h. des Beugungsgitters zur Erzeugung der Lichtreferenzlinien, bereits auf die Ionenwolke ausgerichtet wurde (siehe Kap. 3.2.2). Die Position des Kristallmittelpunktes wird dabei analog zu den Betrachtungen für eine Montage des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl bestimmt. Der einjustierte Laserstrahl wird dann knapp über den auf  $0^\circ$  gedrehten Kristall gerichtet und mit Hilfe des (in einigen Messungen dieser Arbeit - anstatt des kleinen Spiegels - verwendeten) Emulsionsschicht-Strahlteilers (siehe Kap. 3.2.1), der der Einkopplung der Lichtreferenzlinien in den Strahlengang der Röntgenstrahl-

lung dient, in den Lichtaufbau zur Erzeugung der Lichtfernzlinien umgelenkt (siehe Abb. 3.40). Wie oben erwähnt, ist die Position des Lichtaufbaus, also des Einzelspalt, mit Hilfe der in Kap. 3.2.2 beschriebenen Methode auf die  $x$  und  $y$ -Koordinate der Ionenwolke ausgerichtet, d.h. der Einzelspalt überlappt bezüglich dieser Koordinaten mit der Ionenwolke. Die  $y$ -Koordinate des in  $y$ - und  $z$ -Richtung mittels eines optischen Tisches justierbaren Spiegels, der den Laser in das Strahlrohr des Spektrometers einkoppelt, wird nun so gewählt, dass der Laserstrahl im Lichtaufbau den Einzelspalt trifft, in dem das Beugungsgitter montiert ist. Für die hier vorgestellte Justagemethode ist in diesem Einzelspalt zusätzlich zum Beugungsgitter eine in  $z$ -Richtung justierbare Lochblende mit einem Radius  $r$  von 1 mm montiert. Diese wird entlang der  $z$ -Achse so lange verschoben, bis der Laserstrahl das Loch der Blende trifft. Die Lochblende ist damit auf die  $x$ - und  $y$ -Koordinate der Ionenwolke und die  $z$ -Koordinate des Auftreffpunktes des Laserstrahls, der parallel zur Kristalloberflächennormale bezüglich des Kristallmittelpunktes einjustiert ist, im Lichtaufbau ausgerichtet. Diese  $z$ -Koordinate sollte im Idealfall mit der  $z$ -Koordinate der Ionenwolke übereinstimmen.

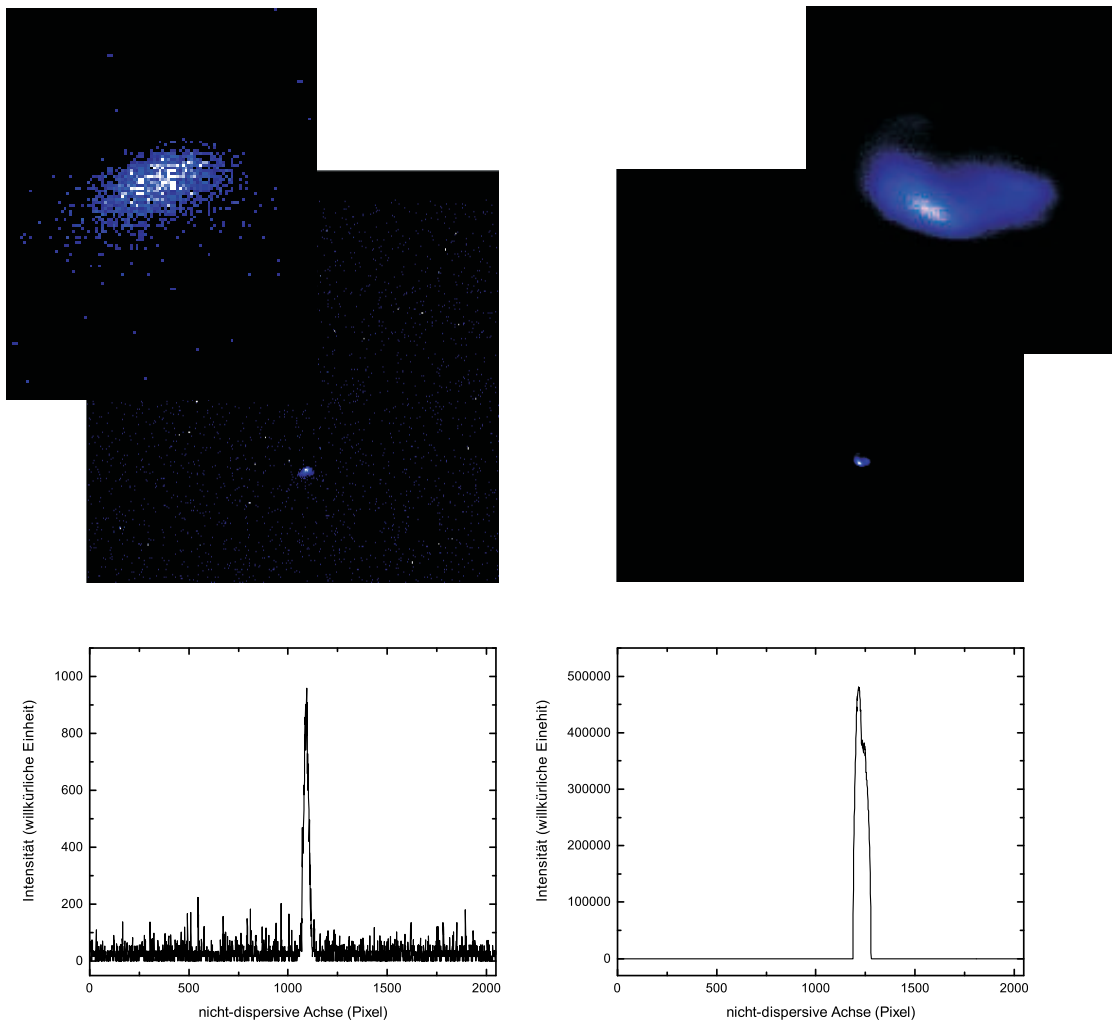
Um eine mögliche Abweichung  $s$  zwischen der  $z$ -Koordinate der Ionenwolke und des im Lichtauf-



**Abbildung 3.40:** Schematischer Aufbau zur Bestimmung der  $z$ -Position des Mittelpunktes der Ionenwolke bezüglich der Kristalloberflächennormale und der  $z$ -Koordinate des Kristallmittelpunktes bei Beobachtung entlang der Elektronenstrahlachse. Dazu wird ein parallel zur Kristallnormale einjustierter Laserstrahl knapp über den auf  $0^\circ$  gedrehten Kristall auf den Emulsionsschicht-Strahlteiler gerichtet, der den Laserstrahl auf eine im Einzelspalt montierte, entlang der  $z$ -Achse verschiebbare Lochblende umgelenkt. Die Lochblende wird so ausgerichtet, dass der Laserstrahl sie mittig trifft.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

bau eingeschossenen Laserstrahls zu vermessen, wird der Laserstrahl nach der Justage der Lochblende abgeschaltet. Linse 1 und Linse 2 werden in das Strahlrohr des Röntgenspektrometers eingebracht. Analog zu den Betrachtungen in Kap. 3.2.2 werden die Strahlparameter der EBIT so gewählt, dass sichtbares Licht einer Wellenlänge von 440 nm des  $2s^2 2P_{3/2} \rightarrow 2s^2 2P_{1/2}$  (M1) Übergangs in  $\text{Ar}^{13+}$  emittiert wird.



**Abbildung 3.41:** Links oben: Reales Abbild der Ionenwolke in der Detektorebene; der kleine Ausschnitt zeigt dieses Abbild vergrößert. Die leichte Asymmetrie der Wolke ist auf die nicht ganz ideale Ausrichtung der Linsen zurückzuführen. Links unten: Projektion des Ionenwolkenabbildes auf die nicht-dispersive Achse. Die Halbwertsbreite eines Gaußfits an das Wolkenprofil entspricht bei bekanntem Abbildungsmaßstab von  $\sim 1 : 1$  zwischen tatsächlicher Größe der Wolke und dem auf dem Detektor abgebildeten Wolkenabbild einer Wolkengröße von  $\sim 340 \mu\text{m}$ . Allerdings gilt diese Abschätzung nur für die Größe der Wolke in Hinblick auf die Emission von 440 nm Licht des metastabilen (M1)  $2s^2 2P_{3/2} \rightarrow 2s^2 2P_{1/2}$  Übergangs in  $\text{Ar}^{13+}$ . Rechts oben: Reales Abbild der Lochblende. Leider war der Einzelspalt nicht ganz durch die Lochblende abgedeckt. Daher ist besonders im kleinen Ausschnitt, der das Abbild vergrößert darstellt, Streulicht mit asymmetrischer Verteilung zu erkennen. Rechts unten: Projektion des Lochblendenabbildes auf die nicht-dispersive Achse.

Untersuchter Übergang	verwendeter Kristall	$s$ (mm)
Alle Übergänge in Schwefel-Ionen	Si(111)	$3.6 \pm 0.9$
Alle Übergänge in Eisen-Ionen	Si(220)	$1.7 \pm 0.9$

**Tabelle 3.4:** Experimentell gemessene Verschiebungen  $s$  zwischen der  $z$ -Koordinate des Kristall- und des Ionenwolkenmittelpunktes für den experimentellen Aufbau zur Röntgenwellenlängenmessung an Übergängen in verschiedenen hochgeladenen Ionen, wobei das Röntgenspektrometer parallel zum Elektronenstrahl ausgerichtet an der FLASH-EBIT montiert war.

Übergangs in  $\text{Ar}^{13+}$ -Ionen emittiert wird. In der richtigen Stellung von Kristall und Kamera zueinander erhält man über die Linsen (siehe Abb. 3.7) ein reales Abbild der Ionenwolke, wobei der Kristall das sichtbare Licht unter jedem Kristallwinkel reflektieren kann, da er für dieses wie ein Spiegel wirkt. Dieser Vorgang wurde bereits genauer in Kap. 3.2.2 diskutiert. Das erhaltene Bild wird auf die nicht-dispersive Achse der CCD Kamera projiziert (Abb. 3.41) und das Profil mittels eines Gaußfits gefittet, um das Peakmaximum und damit die Position der Ionenwolke entlang der nicht-dispersiven Detektorachse, d.h. ihre  $z$ -Koordinate zu bestimmen. Analog zu Kap. 3.2.2 wird anschließend der Einzelspalt mit dem 440 nm-Licht einer LED beleuchtet, wobei ein Großteil des Einzelspaltes durch die Lochblende abgedeckt ist, d.h. Licht kann nur durch das Loch der Lochblende in den Spektrometeraufbau gelangen. Das reale Abbild der Lochblende in der Detektorebene erhält man dann mit Hilfe von Linse 1 und 2, wobei sich der Fokus von Linse 1 wie in Kap. 3.2.2 innerhalb des Einzelspaltes und damit der Lochblende und der von Linse 2 in der Detektorebene befindet. Dieses Abbild ist zusammen mit seiner Projektion auf die nicht-dispersive Detektorachse in Abb. 3.41 dargestellt. Mit Hilfe eines Gaußfits an das Profil des projizierten Spektrums erhält man die  $z$ -Koordinate der einjustierten Lochblende im Lichtaufbau und über den Vergleich zwischen dieser Koordinate und der  $z$ -Koordinate des Wolkenabbildes lässt sich damit eine mögliche Verschiebung  $s$  der Absolutpositionen von Ionenwolke und Kristallmitte in Hinblick auf die Kristalloberflächennormale ermitteln. Tab. 3.4 listet die so für die experimentellen Anordnungen dieser Arbeit bestimmten Werte von  $s$  auf. Dabei wird zwischen der Anordnung für die Röntgenwellenlängenmessungen an Schwefel-Ionen mittels eines Si(111)-Kristalls auf der einen Seite und an Eisen-Ionen unter Verwendung eines Si(220)-Kristalls auf der anderen Seite unterschieden, da zwischen den beiden Messungen der Kristall gewechselt wurde und sich die Ausrichtung der Kristalle leicht veränderte.

Ist der Wert von  $s$  wie oben beschrieben ermittelt, wird die Lochblende aus dem Einzelspalt entfernt, so dass die Lichtreferenzlinien als erste zwei Maxima des Interferenzmusters, das entsteht, wenn Laserlicht auf das im Einzelspalt montierte Beugungsgitter fällt, erzeugt werden (siehe auch Kap. 3.2.2).

Der Fehler in der Bestimmung von  $s$  wird größtenteils durch den Fehler in der Bestimmung der Ausrichtung des Laserstrahls in Bezug auf die Kristalloberflächennormale von  $\pm 0.75$  mm (siehe Kap. 3.3.6) und den Fehler in der Bestimmung der  $z$ -Koordinate des Kristallmittelpunktes und der Lochblende von jeweils  $\pm 0.3$  mm bestimmt. Aus diesen beiden Fehlern ergibt sich ein Gesamtfehler von  $\pm 0.9$  mm, wogegen der Fehler, der aus der Bestimmung der Peakmaxima aus den Fits

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

Kristall	Winkel $\delta'$
Silizium 111	$2.29 \cdot 10^{-3} \text{ }^\circ$
Silizium 220	$1.87 \cdot 10^{-3} \text{ }^\circ$

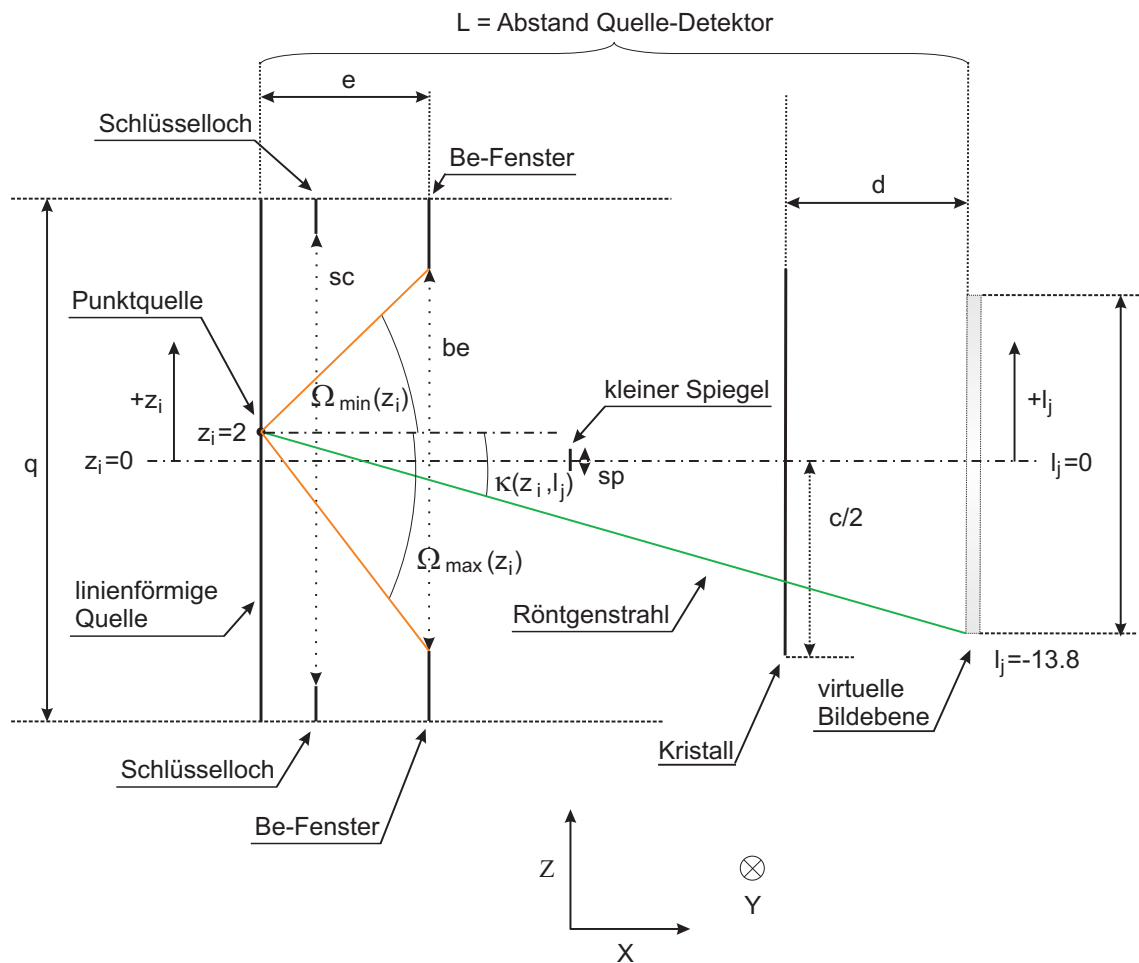
**Tabelle 3.5:** Maximal anzunehmender Beitrag der Verkipfungswinkel  $\delta'$  der in dieser Arbeit eingesetzten Kristalle innerhalb der Streuebene.

an die projizierten Spektren herrührt, mit 0.12 mm gering ausfällt. Die resultierende Unsicherheit in einem über Simulationen bestimmten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  beträgt damit  $\sim 6 \cdot 10^{-6} \text{ }^\circ$ . Diese Unsicherheit führt zu einem zusätzlichen Beitrag im relativen Fehler  $|\Delta\lambda/\lambda|$  von  $\approx 0.3 \text{ ppm}$ . Allerdings kann dieser zusätzliche Fehlerbeitrag vermieden werden, wenn die Linienkrümmung experimentell aufgelöst werden kann.

Abschließend sei hier noch angemerkt, dass der Laserstrahl in allen vorgestellten Justageprozessen eigentlich immer parallel zur Kristallgitternormale ausgerichtet sein müsste, da diese die Referenzachse für die Röntgenreflexion am Kristall darstellt und ihre Streuebene charakterisiert. Allerdings kann ein Laserstrahl mit einer Wellenlänge im sichtbaren Bereich anhand seines Rückreflexes lediglich parallel zur Kristalloberflächennormale ausgerichtet werden. Es ergibt sich somit ein Offset zwischen Kristallgitternormale und Strahlengang des Lasers. Bei bekanntem Winkel  $\delta'$  (siehe Tab. 3.5) zwischen Kristalloberflächen- und Kristallgitternormale - wie dies für die hier verwendeten Kristalle der Fall ist [51] - entsteht aus diesem Sachverhalt allerdings nur ein kleiner zusätzlicher Fehlerbeitrag. Die Unsicherheit in diesem Winkel  $\delta'$  muss in der Fehleranalyse berücksichtigt werden. Dieser zusätzliche Beitrag zur Unsicherheit in der Bestimmung der Röntgenwellenlänge ist für die in dieser Arbeit verwendeten Kristalle viel kleiner als der oben abgeschätzte Beitrag, der von der Ausrichtung des Laserstrahls herrührt.

#### 3.3.8 Simulation der Linienkrümmung auf dem Detektor

In den vorangehenden Kapiteln wurde die Linienkrümmung eines Bragg-reflektierten Röntgenreflexes in der Detektorebene eingehend für den Fall einer Röntgenpunktquelle und einer Röntgenlinienquelle diskutiert, wobei auch der Einfluss einer möglichen Fehlansrichtung dieser Röntgenquellen relativ zu Kristall und Detektor auf die in der Detektorebene entstehende Linienkrümmung untersucht wurde. Dabei konnten mittels Taylor-Entwicklung und Näherung analytische Ausdrücke für die Gesamtkorrektur  $K$ , die die mittlere Abweichung aller Schnittpunkte von Röntgenstrahlung und Detektorebene von einer senkrecht zur Streuebene, durch den Schnittpunkt des Röntgenstrahls mit  $\kappa = 0$  mit der Detektorebene verlaufenden Gerade bezeichnet, und die dazu korrespondierenden Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  bestimmt werden. Die Rechnungen führen zu ersten Erkenntnissen über den Einfluss experimenteller Größen wie z.B. der Ionenwolkengröße auf die Gesamtkorrektur  $K$  und geben ein in sich konsistentes Bild für die abgeschätzten Effekte. Für eine Hochpräzisionswellenlängenmessung sind die so erhaltenen quantitativen Ergebnisse allerdings nicht ausreichend, da die Rechnungen zum einen Näherungen beinhalten und die ihnen



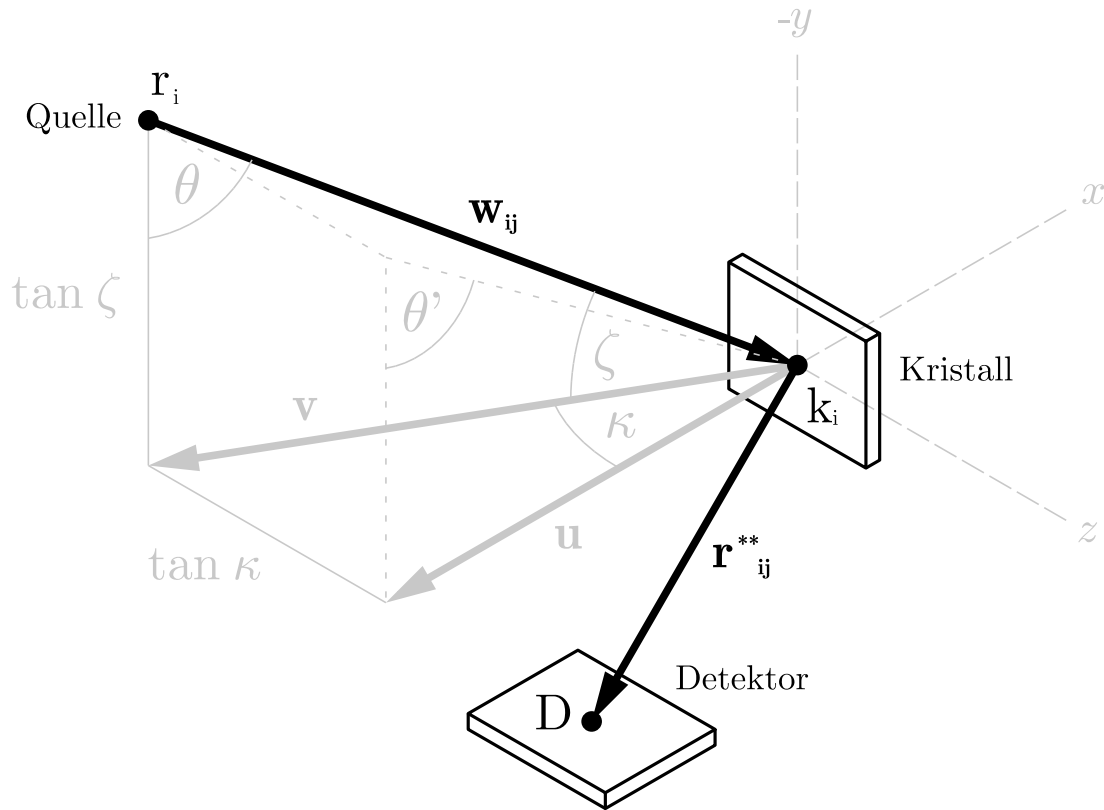
**Abbildung 3.42:** Schematische Darstellung zur Simulation der Linienkrümmung auf dem Detektor in der  $x$ - $z$ -Ebene, der zur Streuebene senkrechten Ebene. Neben Röntgenquelle, Kristall und Detektor befinden sich für die Röntgenwellenlängenmessung in senkrechter Montage des Spektrometers zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT der kleine Spiegel mit einer Ausdehnung  $sp$  in  $z$ -Richtung von  $sp = 2$  mm, das Beryllium-Fenster mit einer Breite  $be$  in  $z$ -Richtung von  $be = 30$  mm und zusätzlich das in Kap. 3.3.6 diskutierte Schlüsselloch, eine metallische Blende vor der Driftröhrenanordnung mit einer Breite  $sc$  in  $z$ -Richtung von  $sc = 33$  mm. Diese Elemente des Spektrometerstrahlrohres können den Strahlengang eines Teiles der Röntgenstrahlung, der in einer einfachen Geometrie mit Quelle, Kristall und Detektor auf den Detektor gelangen würde, blockieren. Das entstehende Röntgensignal auf dem Detektor kann dadurch insbesondere in Hinblick auf die entstehende Linienkrümmung modifiziert werden. Um dies in der Simulation zu berücksichtigen, wird der Winkel  $\kappa(z_i, l_j)$  für jeden Röntgenstrahl mit den Grenzwinkeln  $\Omega_{min,max}(z_i)$ , die hier für das Strahlelement Beryllium-Fenster eingezeichnet sind, verglichen. Liegt  $\kappa(z_i, l_j)$  zwischen diesen Grenzwinkeln  $\Omega_{min,max}(z_i)$ , so korrespondiert das  $\kappa(z_i, l_j)$  der Röntgenstrahlung zu einem Strahlengang, der nicht durch ein Strahlelement blockiert wird. Andernfalls gelangt die Röntgenstrahlung nicht auf den Detektor.

zugrunde liegenden Annahmen zum anderen nur durch ein unvollständiges Bild der tatsächlichen experimentellen Situation bestimmt sind. Im experimentellen Aufbau finden sich neben Röntgenquelle, Kristall und Detektor für die Röntgenwellenlängenmessung noch der kleine Spiegel mit einer Ausdehnung  $sp$  in  $z$ -Richtung von  $sp = 2$  mm (siehe Abb. 3.42) oder der Emulsionsschicht-



Strahlteiler (siehe auch Kap. 3.2.1) sowie das Beryllium-Fenster mit einer Breite  $be$  in  $z$ -Richtung von  $be=30$  mm und für eine Anordnung des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT zusätzlich das in Kap. 3.3.6 diskutierte Schlüsseloch, eine metallische Blende vor der Driftröhrenanordnung mit einer Breite  $sc$  in  $z$ -Richtung von  $sc = 33$  mm, sowie bei paralleler Ausrichtung des Spektrometers zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT die hintere Kollektoröffnung mit einem Radius von 6 mm. Diese Elemente des Spektrometerstrahlrohres können den Strahlengang eines Teiles der Röntgenstrahlung, der in einer einfachen Geometrie mit Quelle, Kristall und Detektor auf den Detektor gelangen würde, blockieren und damit das entstehende Röntgensignal auf dem Detektor insbesondere in Hinblick auf die entstehende Linienkrümmung modifizieren. Daher ist es notwendig, die in den vorangehenden Kapiteln erzielten quantitativen Resultate für die Gesamtverschiebung  $K$  und den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  durch Resultate zu ersetzen, die mittels Simulationen erzielt wurden, die die Spektrometer-Strahlrohrelemente und die daraus resultierenden Auswirkungen auf den Röntgenreflex in der Detektorebene berücksichtigen. Zu diesem Zweck wurden in dieser Arbeit zwei Simulationsprogramme mit der kommerziellen Software LabView (National Instruments) entworfen. Da den Simulationen sehr unterschiedliche Ansätze zu Grunde liegen, können ihre Resultate durch die jeweils andere Simulation stichhaltig (auf Übereinstimmung) geprüft werden, wodurch die Gültigkeit der Simulation verifiziert wird. Die beiden Simulationsansätze und deren jeweilige Ergebnisse sind Gegenstand dieses Kapitels.

Bei der ersten Simulation, die im Wesentlichen auf Gl. 3.11  $\zeta(\kappa) = \arcsin(\sin\theta \cdot \cos\kappa) - \theta$  beruht, wird  $\theta$  als feste, frei wählbare Variable betrachtet und die Grenzwinkel  $\kappa(z_i, l_j)$  für jede Punktquelle mit der  $z$ -Koordinate  $z_i$  analog zu den vorhergehenden Kapiteln, in denen  $\kappa(z_i, l_j)$  z.B. für eine Punktquelle über die Beziehung  $\tan\kappa(l_j) = (l_j/2)/L$  mit der  $z$ -Koordinate des Detektionspunktes  $l_j$  berechnet wird, mittels trigonometrischer Beziehungen in der  $x$ - $z$ -Ebene bestimmt. Die Elemente des Spektrometerstrahlrohres werden dabei berücksichtigt, indem für den Strahlengang jedes auslaufenden Röntgenstrahls überprüft wird, ob er durch ein Strahlelement blockiert wird. Dies geschieht ebenfalls anhand trigonometrischer Beziehungen und der Berechnung von Grenzwinkeln  $\Omega_{min,max}(z_i)$ . Beispielhaft ist diese Situation für einen Röntgenstrahl in Abb. 3.42 für die  $x$ - $z$ -Ebene und eine Spektrometeranordnung senkrecht zum Elektronenstrahl, so dass sich das Schlüsseloch im Spektrometerstrahlrohr befindet, dargestellt. Die Richtung des Röntgenstrahls  $i$  wird im Programm mittels der  $z$ -Koordinate der korrespondierenden Punktquelle  $z_i$  und die  $z$ -Koordinate des Detektionspunktes  $l_j$ , an dem der Röntgenstrahl auf dem Detektor eintrifft, charakterisiert. Anhand dieser Koordinaten  $z_i, l_j$  lässt sich auch das  $\kappa(z_i, l_j)$  des Röntgenstrahls  $i$  berechnen (im einfachsten Fall (siehe Kap. 3.3.3) zu  $\tan\kappa = (z_i + l_j)/L$ ). Der so berechnete Winkel  $\kappa(z_i, l_j)$  wird dann mit den Grenzwinkeln  $\Omega_{min,max}(z_i)$ , die hier für das Strahlelement Beryllium-Fenster mit einer Ausdehnung  $be$  senkrecht zur Streuebene eingezeichnet sind, verglichen. Diese Grenzwinkel  $\Omega_{min,max}(z_i)$  geben an, ob das  $\kappa(z_i, l_j)$  der Röntgenstrahlung zu einem Strahlengang korrespondiert, der durch ein Strahlelement blockiert wird oder nicht. Für den von  $z_i = 2$  mm nach  $l_j = -13.8$  mm eingezeichneten emittierten Röntgenstrahl ergibt sich ein Winkel  $\kappa(z_i = 2, l_j = -13.8)$  von  $\tan\kappa = (2 + 13.8)/L$ . Die Grenzwinkel  $\Omega_{min,max}(z_i)$  für das Beryllium-Fenster berechnen sich zu  $\tan\Omega_{min,max}(z_i) = (z_i \mp be/2)/e = (2 \pm 15)/e$ . Liegt  $\kappa(z_i, l_j)$  für den Strahlengang der Röntgenstrahlung zwischen diesen Grenzwinkeln, so kann



**Abbildung 3.43:** Darstellung der zur Monte-Carlo-Simulation der Linienkrümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene benötigten Punkte, Vektoren und Ebenen.  $\mathbf{r}_i$  bezeichnet den Punkt, an dem die jeweilige Röntgenstrahlung  $i$  generiert wird,  $\mathbf{k}_j$  die Koordinaten des Auftreffpunktes  $j$  der Röntgenstrahlung  $i$  auf dem Kristall.  $\mathbf{w}_{i,j}$  steht für die Geradengleichung des einlaufenden Röntgenstrahls,  $\mathbf{r}^{**}_{i,j}$  für die des auslaufenden Röntgenstrahls,  $\mathbf{u}$  für den Kristallgitternormalenvektor,  $\mathbf{v}$  für den um  $\kappa$  gedrehten Vektor  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{D}$  für die Ebenengleichung der Detektorebene.

die Röntgenstrahlung das Beryllium-Fenster passieren, was für den hier betrachteten Röntgenstrahl mit  $\tan \kappa_i = (2 + 13.8)/L (z_i - be/2)/e = (2 \pm 15)/L < \tan \kappa_i = (2 + 13.8)/L < (z_i \mp be/2)/L = (2 + 15)/e$  der Fall ist. Liegt der Winkel  $\kappa(z_i, l_j)$  der Röntgenstrahlung allerdings außerhalb der Grenzwinkel, d.h. gilt  $\tan \Omega_{min}(z_i) < \tan \kappa(z_i, l_j) < \tan \Omega_{max}(z_i)$  nicht, so wird der Strahlengang der Röntgenstrahlung durch das jeweilige Strahlrohrelement blockiert und die Röntgenstrahlung kann nicht auf den Detektor gelangen. Die zu diesem Fall korrespondierenden  $\kappa(z_i, l_j)$  der Röntgenstrahlung werden vom Programm aussortiert. Auf diese Art und Weise kann auch festgestellt werden, ob Röntgenstrahlung vom Kristall blockiert wird und nicht mehr auf den Detektor gelangt. Weiterhin können Verschiebungen  $s'$  der Strahlelemente in  $z$ -Richtung gegen die Röntgenquelle, andere Strahlelemente oder den Detektor in die Simulation leicht einflochten werden, indem diese Verschiebungen  $s'$  z.B. unter Verwendung der Beziehung  $\tan \Omega_{min,max}(z_i) = (z_i \mp s' + st)/e$  mit der halben Ausdehnung des jeweiligen verschobenen Strahlelementes  $st$  in  $z$ -Richtung in den Ausdruck für die Grenzwinkel  $\tan \Omega_{min,max}(z_i)$  einbezogen werden. Eine Drehung des Kristalls oder der Kamera lässt sich mit den einschlägigen

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

trigonometrischen Funktionen (siehe auch Kap. 3.3.5) berücksichtigen. Für die  $\kappa(z_i, l_j)$ , die nicht aussortiert wurden, werden durch die Bedingung  $\zeta(\kappa(z_i, l_j)) = \arcsin(\sin\theta \cdot \cos \kappa(z_i, l_j)) - \theta$  die Korrekturwinkel  $\zeta(\kappa(z_i, l_j))$  und mittels der Beziehung  $\Delta Y(z_i, l_j) = L \cdot \tan \zeta(z_i, l_j)$  die Verschiebungen  $\Delta Y(z_i, l_j)$  für jeden Auftreffpunkt der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich einer Senkrechten zur Streuebene durch den Punkt  $\Delta Y(0, 0)$  berechnet. Somit lässt sich das auf dem Detektor entstehende Bild der Röntgenreflexe mit Hilfe des Programms darstellen und Größen wie der Korrekturwinkel  $\zeta(\kappa(z_i, l_j))$  können berechnet werden.

Bei der zweiten Simulation handelt es sich um eine sogenannte Monte-Carlo-Simulation. Dieser Typ von Simulationen greift auf das stochastische Prinzip häufig durchgeführter Zufallsexperimente in Hinblick auf das Gesetz der großen Zahlen zurück und versucht mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitstheorie analytisch nicht oder nur aufwendig lösbare Probleme numerisch zu lösen. Die Zufallsexperimente können dabei durch die Erzeugung von Zufallszahlen simuliert werden. In der hier entwickelten Simulation, die auf dreidimensionalen Gleichungen der linearen Algebra beruht, werden die Koordinaten der Röntgenquellpunkte  $i$  mittels des Vektors  $\mathbf{r}_i$  (siehe Abb. 3.43) und die des Auftreffpunktes  $j$  des Röntgenstrahls auf dem Kristall mittels des Vektors  $\mathbf{k}_j$  ausgedrückt, wobei die Koordinaten innerhalb wählbarer Grenzen per Zufall generiert werden. Die Geradengleichung für den Röntgenstrahl  $\mathbf{w}_{i,j}$  (entspricht  $\mathbf{w}$  in Abb. 3.13) vor seiner Reflektion am Kristall ergibt sich damit zu:

$$\mathbf{w}_{i,j} = \mathbf{r}_i + a \cdot (\mathbf{k}_j - \mathbf{r}_i) . \quad (3.36)$$

$a$  stellt eine Variable dar. Zusätzlich können für jeden frei wählbaren, aber festen Bragg-Winkel  $\theta$  mittels der trigonometrischen Beziehungen der Kristallgitternormalenvektor  $\mathbf{u}$  und der um  $\kappa$  gedrehte Vektor  $\mathbf{v}$ , d.h. die Projektion von  $\mathbf{u}$  auf die jeweilige Streuebene der Röntgenstrahlung, (entsprechen Vektor  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{v}$  in Abb. 3.13) bestimmt werden. Über das Skalarprodukt zwischen dem Röntgenvektor  $\mathbf{w}$  und dem Vektor  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}$  lässt sich analog zu den Betrachtungen in Kap. 3.3.2 der Bragg-Winkel  $\theta^\bullet$  für die unter  $\mathbf{w}$  einlaufende Röntgenstrahlung in der jeweiligen Streuebene zu

$$\sin \theta^\bullet = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) / (|\mathbf{v}| \cdot |\mathbf{w}|) \quad (3.37)$$

bestimmen. In der Simulation muss dieser berechnete Bragg-Winkel  $\theta^\bullet$  der Röntgenstrahlung in einem festen, frei wählbaren Toleranzintervall um den tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$  der Röntgenstrahlung liegen, damit diese reflektiert werden kann, andernfalls wird der Strahl von der Simulation nicht weiter verfolgt. Der Vektor, der die Richtung des Strahlengangs der reflektierten Röntgenstrahlung beschreibt,  $\mathbf{r}^*_{i,j}$ , lässt sich über die Vektoren  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{w}$  zu

$$\mathbf{r}^*_{i,j} = \mathbf{w}_{i,j} - 2(\mathbf{w}_{i,j} \cdot \mathbf{v})\mathbf{v} \quad (3.38)$$

berechnen. Damit ergibt sich die Gleichung der Geraden, auf der sich der Röntgenstrahl nach der Reflektion im Raum bewegt,  $\mathbf{r}^{**}_{i,j}$  zu

$$\mathbf{r}^{**}_{i,j} = \mathbf{k}_j + b(\mathbf{w}_{i,j} - 2(\mathbf{w}_{i,j} \cdot \mathbf{v})\mathbf{v}) \quad (3.39)$$

mit der Variablen  $b$  und dem Punkt  $\mathbf{k}_j$ , an dem der Vektor  $\mathbf{w}_{i,j}$  auf dem Kristall auftrifft. Den Schnittpunkt zwischen diesem Vektor  $\mathbf{r}^{**}_{i,j}$  und der Detektorebene, die sich über ihre Ebenengleichung  $\mathbf{D}$  zu

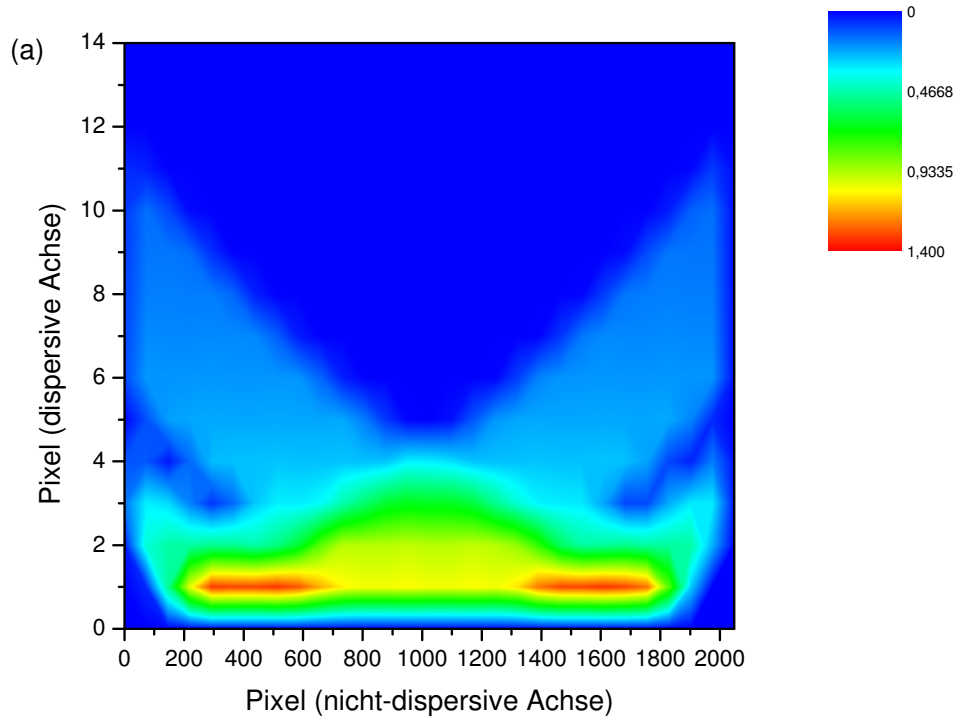
$$\mathbf{D} = \mathbf{m} + c \mathbf{d1} + e \mathbf{d2} \quad (3.40)$$

ausdrücken lässt, wobei  $\mathbf{m}$  den Mittelpunkt des Detektors und  $\mathbf{d1}$  und  $\mathbf{d2}$  zwei Vektoren in der Detektorebene sowie  $c$  und  $e$  Variablen bezeichnen, d.h. die Koordinaten des Auftreffpunktes des Röntgenstrahls auf dem Detektor erhält man dann über Gleichsetzen von Gl. 3.39 und 3.40.  $\mathbf{m}$ ,  $\mathbf{d1}$  und  $\mathbf{d2}$  können dabei leicht über trigonometrische Funktionen hergeleitet werden. Die Koordinaten der Röntgenquelle  $\mathbf{r}_i$  und des Auftreffpunktes  $j$  der Röntgenstrahlung  $i$  auf dem Kristall  $\mathbf{k}_j$  werden dabei per Zufallsgenerator generiert. Mit diesem Vorgehen liefert die Simulation ein Bild der Linienkrümmung auf dem Detektor. Damit lassen sich dann die Verschiebung  $\Delta Y(z_i, l_j)$  für jeden Auftreffpunkt der Röntgenstrahlung auf dem Detektor bezüglich einer Senkrechten zur Streuebene durch den Punkt  $\Delta Y(0, 0)$  und die Gesamtverschiebung  $K$  ermitteln und dann über  $\Delta Y(z_i, l_j) = L \tan(\zeta(z_i, l_j))$  auch die Korrekturwinkel  $\zeta(z_i, l_j)$  und die Gesamtkorrekturwinkel  $\bar{\zeta}$ . Strahlelemente, die den Strahlengang der Röntgenstrahlung wie oben angemerkt blockieren können, können als zusätzliche Ebenen mit festen, frei wählbaren räumlichen Grenzen in die Simulation eingefügt werden. Hat der einlaufende Röntgenstrahl  $i$  mit der Geradengleichung 3.36 einen Schnittpunkt mit der Ebene, so kann er nicht auf den Kristall gelangen und wird verworfen; anderenfalls wird er weiter bis zum Kristall verfolgt und dann wie oben beschrieben behandelt.

### Ergebnisse der Simulationen und Schlussfolgerungen für das Experiment

Die mit den oben beschriebenen Simulationen erzielten Ergebnisse für die Krümmung der Röntgenlinien auf dem Detektor stimmen in ihren Ergebnissen bezüglich aller Größen wie z.B. der Gesamtverschiebung  $K$  und dem Gesamtkorrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  überein. Dies bestätigt die Gültigkeit der Simulationen, die verschiedene Ansätze und Berechnungsmethoden nutzen. In diesem Abschnitt soll auf die Resultate der Simulationen näher eingegangen werden, insbesondere in Bezug auf die für das Experiment relevanten Ergebnisse. Es wird dabei nicht zwischen den Ergebnissen der einzelnen Simulationsmethoden unterschieden, da sie wie oben angemerkt die gleichen Resultate liefern.

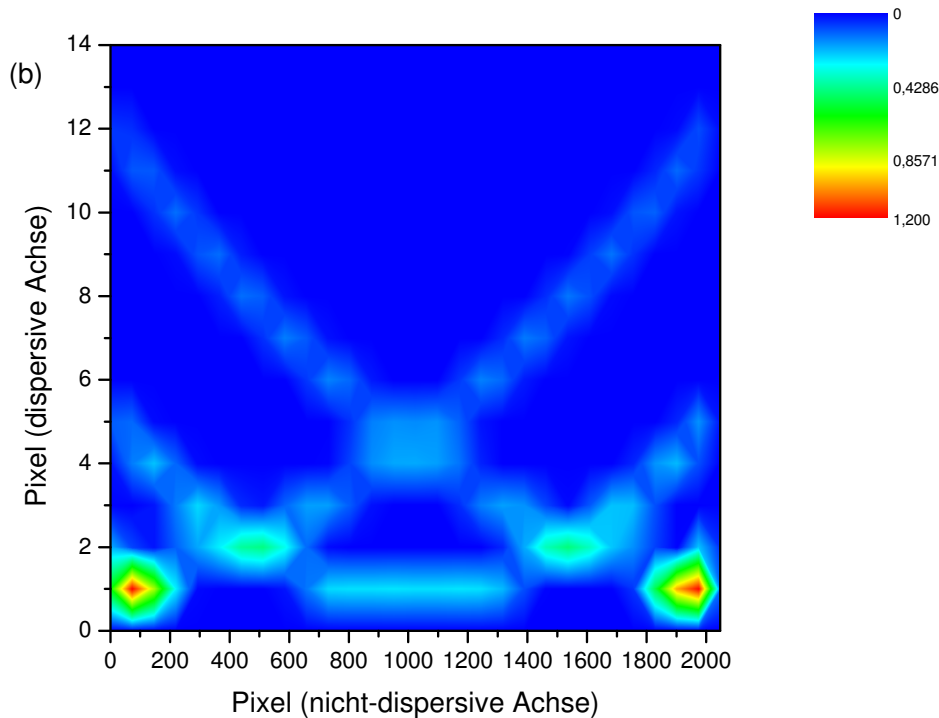
Zunächst soll hier auf die Ergebnisse zur Linienkrümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene für Simulationsparameter eingegangen werden, die den experimentellen Parametern in den Messungen dieser Arbeit, die an der Heidelberg-EBIT bei senkrecht zum Elektronenstrahl montiertem Röntgenspektrometer durchgeführt wurden, entsprechen. Die in die Simulation eingehenden Parameter sind dabei bei ideal ausgerichtetem Spektrometer, bis auf eine kleine Fehlausrichtung des CCD Chips, - wie es in den Messungen dieser Arbeit der Fall war - ein Abstand von Quelle und Detektor von  $L = 1886$  mm, von Quelle zu Kristall von 1523 mm, von Quelle zu kleinem Spiegel von 523 mm, von Quelle zu Beryllium-Fenster von 501 mm und von Quelle zu Schlüsseloch von 40 mm. Die Ausdehnung der Quelle in  $z$ -Richtung, d.h. in einer Ebene senkrecht zur Streuebene, beträgt  $q = 38.5$  mm, die des kleinen Spiegels 2 mm, die des Kristalls  $c = 23$  mm und die der CCD Kamera  $l=27.6$  mm. Die Öffnung des Schlüsselochs entlang der  $z$ -Achse hat eine Größe



**Abbildung 3.44:** Simuliertes Bild des Röntgensignals in der Detektorebene unter Berücksichtigung aller Strahlelemente für einen Bragg-Winkel von  $\theta = 36.5^\circ$  bei Verwendung von Simulationsparametern, die den experimentellen Gegebenheiten für die Messungen an Ar-Ionen in dieser Arbeit bei senkrecht zum Elektronenstrahl montiertem Kristallspektrometer entsprechen. Die leichte Asymmetrie bezüglich der Mitte der nicht-dispersiven Detektorachse des CCD Chips ist auf eine leichte Verschiebung des Kamerachips bezüglich der Kameramitte in der Simulation - wie sie den experimentellen Gegebenheiten entspricht - zurückzuführen.

von 33 mm und die des Beryllium-Fensters 30 mm. In Abb. 3.44 ist das mit Hilfe dieser Werte in den Simulationen erzielte Bild für die Röntgenstrahlung auf dem Detektor für einen Bragg-Winkel von  $\theta = 36.5^\circ$ , was ungefähr dem Bragg-Winkel für Röntgenstrahlung des Lyman- $\alpha$  Übergangs in  $\text{Ar}^{17+}$  entspricht, dargestellt, wobei die Intensität der Strahlung, die in jedem einzelnen Kanal detektiert wird, jeweils auf die Gesamtintensität der emittierten Röntgenstrahlung normiert wurde und in Prozent der Gesamtintensität dargestellt ist. Die Linie mit  $y = 0$ , die parallel zur nicht-dispersiven Detektorachse verläuft, stellt die ideale Röntgenlinie dar, bezüglich derer die Verschiebungen  $\Delta Y(z_i, l_j)$  und die Gesamtverschiebung  $K$  (siehe Kap. 3.3.3) vermessen werden. Der Abbildung sind besonders folgende Dinge zu entnehmen:

- Wie zu erwarten war, werden Pixel mit geringer Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  stärker belichtet (rote Pixel) als solche mit



**Abbildung 3.45:** Für die Detektorebene simuliertes Bild des Röntgensignals, das nicht auf den Detektor gelangt, da der Strahlengang der zugehörigen Röntgenstrahlung durch irgendeines der Strahlelemente (Schlüsselloch, Beryllium-Fenster, Spiegel, Kristall) blockiert wird, wobei Strahlen, die durch mehrere Strahlelemente abgeschirmt werden, nur einfach gezählt wurden. Rot stellt dabei die maximale Intensität an geblocktem Röntgensignal dar. Die Simulationsparameter entsprechen denen in 3.44.

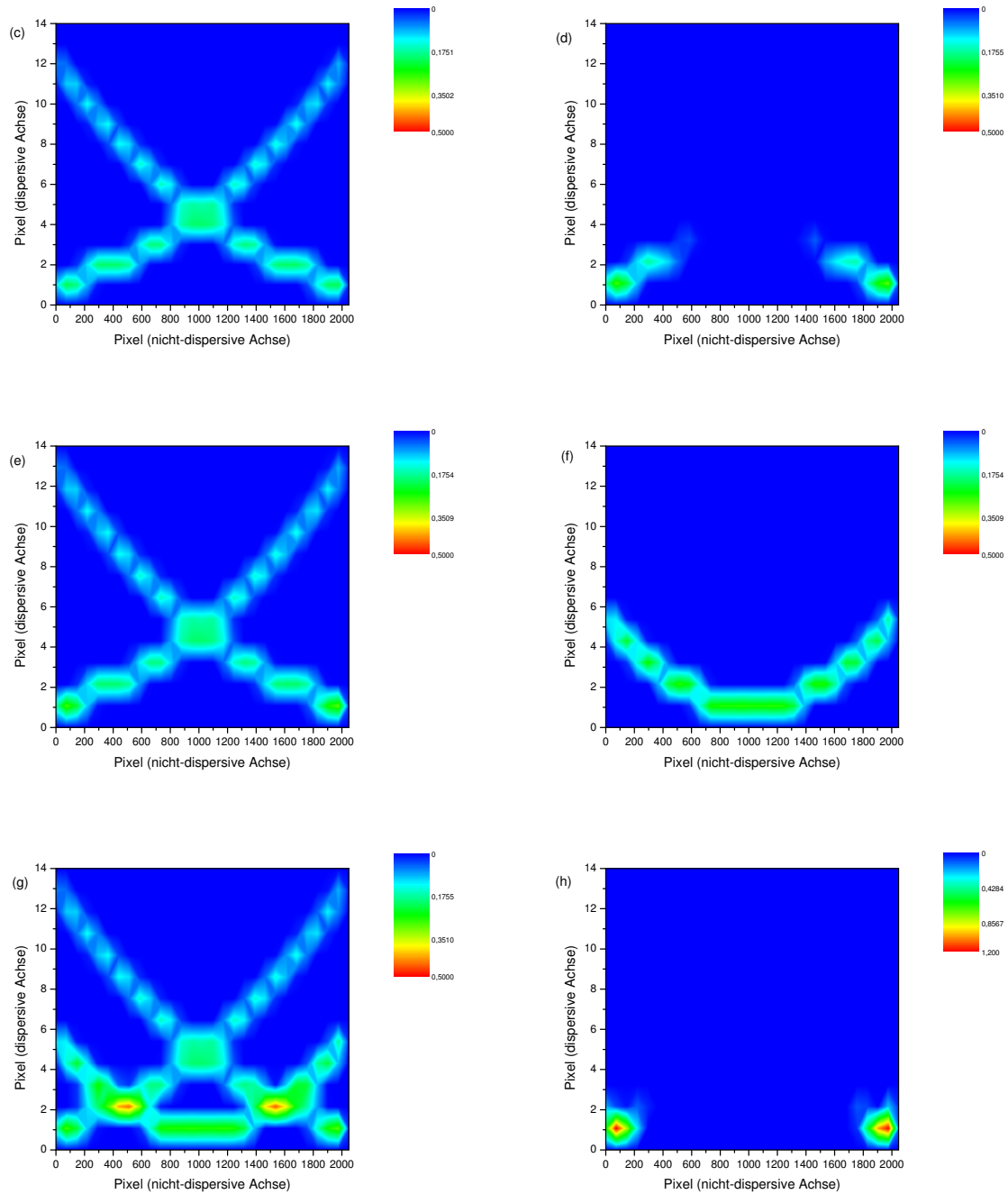
hoher Pixelverschiebung.

- Die maximale Verschiebung von Röntgensignal entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  beträgt  $\sim 11$  Pixel oder  $\sim 0.15$  mm, was gut mit den in Kap. 3.3.3 erzielten Resultaten übereinstimmt. Die geringe Abweichung zwischen den hier über die Simulation erhaltenen Resultaten und den Ergebnissen, die in Kap. 3.3.3 vorgestellt wurden, lassen sich auf die Tatsache zurückführen, dass in Kap. 3.3.3 die Spektrometerstrahlrohrelemente, wie Schlüsselloch etc., nicht berücksichtigt und Formeln zur Berechnung der Linienkrümmung nur mit Hilfe von Näherungen gelöst wurden.
- Bei hohen und niedrigen Pixelwerten entlang der nicht-dispersiven Detektorachse, d.h. kleiner Pixel  $\sim 200$  oder größer Pixel  $\sim 1800$ , und gleichzeitig geringen Werten der Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  von  $\sim 0$ -2 Pixeln, d.h. in den unteren Ecken des Bildes, fehlt Röntgensignal. Dies muss von

einem Strahlelement blockiert werden.

- Bei Pixelwerten kleiner 400 bzw. größer 1600 entlang der nicht-dispersiven Achse und einer Pixelverschiebung von  $\sim 3-4$  Pixeln entlang der dispersiven Achse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  bleibt das Röntgensignal auch aus. Auch hier ist eine Blockade von Strahlengängen durch eines der Strahlelemente zu vermuten.
- Ein verringertes Röntgensignal ist auch für Pixelwerte in der Mitte der nicht-dispersiven Achse zwischen Pixel  $\sim 600$  und  $1400$  und niedrige Pixelverschiebung von  $\sim 1$  Pixel entlang der dispersiven Achse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  zu beobachten. Anscheinend werden hier nur einige Strahlengänge der Röntgenstrahlung, die diese Pixel treffen können, von Strahlelementen nicht zugelassen.
- Das Gleiche ist im Falle von Pixelwerten zwischen  $400-600$  bzw.  $1400-1600$  entlang der nicht-dispersiven Achse und geringer Pixelverschiebung von  $\sim 2$  Pixel entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  zu erkennen.

Um näher zu beleuchten, warum an gewissen Chipstellen Röntgensignal fehlt, ist in Abb. 3.45 ein simuliertes Bild des Röntgensignals, welches nicht auf den Detektor gelangt, da der Strahlengang der zugehörigen Röntgenstrahlung durch irgendeines der Strahlelemente (Schlüsselloch, Beryllium-Fenster, Spiegel, Kristall) blockiert wird, in der Detektorebene dargestellt, wobei Strahlen, die durch mehrere Strahlelemente abgeschirmt werden, nur einfach gezählt wurden. Die Intensität der Strahlung, die in jedem einzelnen Kanal detektiert wird, ist jeweils auf die Gesamtintensität der emittierten Röntgenstrahlung normiert und wird in Prozent der Gesamtintensität dargestellt. Rot bezeichnet demnach die maximale Intensität des durch Strahlelemente blockierten Röntgensignals. Das Bild deckt sich mit Abb. 3.44 der Abbildung, in dem das simulierte, detektierte Röntgensignal zu sehen ist. Die Pixelbereiche, die in Abb. 3.44 nicht oder wenig belichtet sind und von denen oben angenommen wurde, dass dort Röntgensignal verloren gegangen ist, weisen in (3.45) hohe Intensität auf, d.h. der Strahlengang der Röntgenstrahlung, die das Röntgensignal in den fraglichen Pixelbereichen generieren würde, ist tatsächlich durch Strahlelemente blockiert. Sinnvoll ist es dabei, detailliert zu untersuchen, durch welches der Strahlelemente der Strahlengang verschiedener Röntgenstrahlen jeweils abgeschirmt wird. Die dieser Fragestellung entsprechenden Bilder, die man über die Simulationen erhält, sind in Abb. 3.46 dargestellt. (c) stellt dabei den Anteil von Röntgensignal dar, der aufgrund des Strahlelementes Schlüsselloch nicht auf den Detektor gelangt, (d) den, der durch das Beryllium-Fenster abgeschirmt wird und (e) den, der aufgrund von Beryllium-Fenster und Schlüsselloch nicht detektiert wird. (f) bezeichnet den Verlust von Röntgensignal auf dem Detektor, der durch den kleinen Spiegel verursacht wird, (g) den Anteil der Röntgenstrahlung, der durch Schlüsselloch, Beryllium-Fenster und Spiegel nicht auf den Detektor gelangt. (h) stellt schließlich das Signal an Röntgenstrahlung dar, das im Experiment nicht auftritt, da die Ausdehnung des Kristalls  $c$  in einer Ebene senkrecht zur Streuebene geringer ist als die des Detektors  $l$ . Für alle Abbildungen gilt wiederum, dass die Intensität der Strahlung, die in jedem einzelnen Kanal detektiert wird, auf die Gesamtintensität der emittierten Röntgenstrahlung normiert und in Prozent der Gesamtintensität angegeben ist. Die Farbskala, die zu den



**Abbildung 3.46:** Anteil der Röntgenstrahlung, die aufgrund des Schlüssellochs (c), des Beryllium-Fensters (d), des Beryllium-Fensters und Schlüssellochs (e), des kleinen Spiegels (f), des Schlüssellochs, Beryllium-Fensters und kleinen Spiegels (g) bzw. des Kristalls (h) nicht auf den Detektor gelangt, für eine Röntgenwellenlängenmessung unter einem Bragg-Winkel  $\theta = 36.5^\circ$  und eine Montage des Kristallspektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl. Die gewählten Simulationsparameter und die Definition der Intensität entsprechen Abb. 3.46.



### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

Prozent an Gesamtintensität der emittierten Röntgenstrahlung korrespondiert, unterscheidet sich von Bild zu Bild, um Effekte in Bildern mit schwacher Intensität deutlicher zu machen. Die diskreten Strukturen bezüglich der nicht-dispersiven Detektorachse in den simulierten Röntgensignalen in den Abbildungen ergeben sich aufgrund der Tatsache, dass einlaufende Röntgenstrahlen in Bezug auf ihren Detektionspunkt auf dem CCD Kamerachip entlang der nicht-dispersiven Achse in der Simulation nur in diskrete, mehrere Pixel umfassende Kanäle einsortiert werden. Es ergibt sich ein konsistentes Bild. Durch das Schlüsselloch (siehe Abb. 3.46 (c)) werden vor allem Röntgenstrahlen mit solchen Strahlengängen abgeschirmt, die von Punktquellen an den Rändern der Röntgenlinienquelle emittiert werden (siehe Punktquelle  $P1$  in Abb. 3.47 und dazugehörige grüne Strahlengänge der Röntgenstrahlung). Dabei können Strahlen, die sehr schräg verlaufen, d.h. unter großem  $\kappa(z_i)$  (siehe Abb. 3.42) emittiert werden, und ein Röntgensignal auf den äußeren Pixeln der nicht-dispersiven Detektorachse mit hoher Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse hervorrufen würden, den Detektor nicht erreichen, da die Winkel  $\kappa(z_i)$  dafür zu spitz sind. Daneben werden auch solche Strahlen, die unter  $\kappa(z_i) \approx 0$  emittiert werden und zu einem Röntgensignal an den Rändern der nicht-dispersiven Detektorachse mit keiner oder sehr geringer Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse führen würden, vom Schlüsselloch am Erreichen des Detektors gehindert. Entscheidend ist dabei der geringe Abstand zwischen Fallenzentrum und Schlüsselloch von 40 mm, der zu sehr geringen Beträgen der oben eingeführten Grenzwinkel  $\Omega_{min,max}(z_i)$  (siehe Abb. 3.42) für äußere Punktquellen führt, die zudem für diese Quellpunkte beide positiv oder negativ sind und damit Röntgenstrahlen mit Strahlengängen unter  $\kappa(z_i) \approx 0$  blockieren. (Die Bedingung  $\Omega_{min}(z_i) < \kappa(z_i) < \Omega_{max}(z_i)$  ist für diese Röntgenstrahlung nicht mehr erfüllt.) Da nicht nur eine Punktquelle vorliegt, sondern eine Reihe von Punktquellen an den Rändern der Röntgenlinienquelle existiert, ergibt sich ein Bild wie in Abb. 3.46 (c) dargestellt. Für das Beryllium-Fenster ist der Abstand zum Fallenzentrum mit 501 mm deutlich größer als für das Schlüsselloch. Es ergeben sich damit deutlich größere Grenzwinkel  $\Omega_{min,max}(z_i)$ , die jedoch für die Punktquellen am Rande der Linienquelle (siehe Abb. 3.47 Punktquelle  $P2$  mit dazugehörigem blauen Strahlengang für die Röntgenstrahlung) ebenfalls beide positiv oder beide negativ sind und damit Strahlen mit  $\kappa(z_i) \approx 0$ , die Röntgensignal auf den äußeren Pixeln der nicht-dispersiven Detektorachse mit keiner oder sehr geringer Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse hervorrufen würden, am Erreichen des Detektors hindern. Dies deckt sich mit den Beobachtungen in Abb. 3.46 (d). Besonders an den Rändern des simulierten Spektrums fehlt Röntgensignal mit geringer Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$ . Abb. 3.46 fasst diese beiden Resultate für Schlüsselloch und Beryllium-Fenster nochmals in einem Graphen zusammen, wobei Strahlen, die sowohl vom Schlüsselloch als auch von Beryllium-Fenster blockiert werden, nur einfach gezählt wurden. In Abb. 3.46 (f) schließlich ist die Situation für den kleinen Spiegel dargestellt, der sich in der Mitte des Strahlrohres in einem Abstand zum Fallenzentrum von 523 mm befindet und der Einkopplung der Lichtreferenzlinien in den Strahlengang der Röntgenstrahlung dient (siehe auch Kap. 3.2.2). Strahlen, die von der Mitte des Fallenzentrums mit  $\kappa(z_i) \approx 0$  auslaufen, können den Spiegel nicht passieren (siehe Punktquelle  $P5$  und dazugehörigen roten Strahlengang der Röntgenstrahlung). Das sind Strahlen, die in der Mitte des Detektors auftreffen und geringe bis keine Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Achse mit  $y = 0$  aufweisen würden. Außerdem werden auch



### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

Röntgensignal ist in der letzten Abbildung 3.46 (h) zu sehen. Der Kristall mit einer Ausdehnung von  $c = 23$  mm in  $z$ -Richtung, die geringer ist als die des Detektors mit  $l = 27.6$  mm, verhindert vor allem das Auftreffen von Röntgenstrahlung auf dem Detektor, die von Punktquellen am Rande der Röntgenlinienquelle stammt und unter geringen Winkeln um  $\kappa(z_i) \approx 0$  emittiert wurde (siehe Punktquelle  $P3$  und dazugehörigen orangenen Strahlengang der Röntgenstrahlung) und ein gering oder gar nicht entlang der dispersiven Detektorachse verschobenes Röntgensignal an den Rändern der nicht-dispersiven Detektorachse verursachen würde. Strahlen mit sehr hohem  $\kappa$  dagegen können aufgrund des geringen Unterschiedes zwischen Detektorausdehnung  $l$  und Kristallbreite  $c$  den Detektor bei einem Abstand von Kristall zu Detektor von  $\sim 300$  mm noch erreichen (siehe Punktquelle  $P3$  und dazugehörigen orangenen Strahlengang der Röntgenstrahlung). Dies deckt sich mit Abb. 3.46 (h), in der nur die äußeren Pixel entlang der nicht-dispersiven Detektorachse mit geringer Pixelverschiebung entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Gerade mit  $y = 0$  hohe Röntgensignalintensität aufweisen.

Zusammenfassend lässt sich in Bezug auf die experimentellen Größen daher folgendes sagen:

- Das Schlüsselloch mit einer Ausdehnung von  $sc = 33$  mm in  $z$ -Richtung und einem Abstand zum Fallenzentrum von 40 mm hindert sowohl Röntgenstrahlung, die eine große Verschiebung des Röntgensignals entlang der dispersiven Achse bedingt, als auch solche Strahlen, die auf dem Detektor fast unverschoben entlang der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Achse mit  $y = 0$  detektiert werden könnten, daran, den Detektor zu erreichen. Wie der Simulation zu entnehmen ist, wird der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  durch Entfernen des Schlüssellochs aus dem Strahlengang um  $\sim 1.5 \cdot 10^{-5}$  ° größer, was nicht erstrebenswert ist. Allerdings hat es auch Vorteile, dass Schlüsselloch aus dem Strahlengang zu nehmen, da seine Position und Größe dann keinen Einfluss mehr auf Simulation und Experiment haben. Außerdem wird das detektierte Röntgensignal um ca. 10% der Gesamtintensität erhöht; diese 10% gehen normalerweise am Schlüsselloch verloren.
- Das Beryllium-Fenster mit einer Größe von  $sc = 30$  mm in  $z$ -Richtung und einem Abstand zum Fallenzentrum von  $e = 501$  mm blockiert vor allem Röntgenstrahlung, welche fast unverschoben entlang der dispersiven Detektorachse in Bezug auf eine Achse mit  $y = 0$  in der Detektorebene eintreffen könnte, d.h. die Linienkrümmung in der Detektorebene wird durch das Vorhandensein des Beryllium-Fensters im Strahlengang erhöht. Die Konstruktion eines neuen, in  $z$ -Richtung vergrößerten Beryllium-Fensters kann dieser Tatsache entgegenwirken. Allerdings ist der Einfluss des Beryllium-Fensters auf die Linienkrümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene sehr gering, d.h. im Bereich einer Änderung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  von  $\sim 10^{-6}$  °, was wesentlich geringer ist als die Änderungen im Korrekturwinkel, die die anderen Strahlrohrelemente bewirken. Die Signalintensität der Röntgenstrahlung auf dem Detektor wird durch das Beryllium-Fenster im Vergleich zum Schlüsselloch um weitere 3% der Gesamtintensität verringert.
- Der kleine Spiegel führt vor allem für Strahlen mit  $\kappa(z_i) \approx 0$  dazu, dass diese den Detektor nicht erreichen können. Diese Strahlen tragen aber am wenigsten zur Linienkrümmung auf dem Detektor bei. Der kleine Spiegel verursacht damit eine größere Linienkrümmung des

Röntgenreflexes auf dem Detektor und führt zu einer Vergrößerung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  um  $\sim 2 \cdot 10^{-5} \text{ }^\circ$ . Beides ist nicht erwünscht. Es ist daher vorteilhaft den kleinen Spiegel mit einem Strahlrohrelement zu ersetzen, welches die Röntgenstrahlung durchdringen kann. Dadurch nimmt die detektierte Röntgensignalintensität zudem um ca. 7.5% der Gesamtintensität zu.

- Einige Strahlen, die bei einer größeren Ausdehnung des Kristalls entlang der  $z$ -Achse auf den Detektor gelangen könnten, können bei der in dieser Richtung für die Messungen dieser Arbeit vorliegenden Größe des Kristalls von  $c = 23 \text{ mm}$  den Detektor nicht erreichen. Es handelt sich vor allem um Strahlen, die wenig zur Linienkrümmung auf dem Detektor beitragen. Diese Tatsache führt zu einer Vergrößerung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  von  $\sim 5 \cdot 10^{-5} \text{ }^\circ$ . Dies ist nicht erstrebenswert. Es wäre demnach positiv einen größeren Kristall einzusetzen, was zudem eine Steigerung der Röntgenlinienintensität von ca. 6.5% zur Folge hätte. Dies entspricht dem Anteil an der gesamten emittierten Röntgenstrahlung, der aufgrund der zu kleinen Ausdehnung  $c$  des Kristalls entlang der  $z$ -Achse nicht auf den Detektor gelangen kann.

Aufgrund der oben diskutierten Simulationsergebnisse wurden einige Modifikationen am experimentellen Aufbau vorgenommen. Das Schlüsselloch, das sich im EBIT-Vakuum befindet, wurde nicht entfernt, da dazu eine komplette Belüftung und Außerbetriebnahme der EBIT nötig gewesen wäre. Dies war mit anderen Experimenten nicht vereinbar. Die Größe und Position des Schlüssellochs bezüglich des Spektrometers wurden allerdings sehr präzise vermessen. Dies wird im nächsten Abschnitt näher erläutert. Das Beryllium-Fenster hat den geringsten Einfluss aller Strahlrohrelemente auf die Linienkrümmung und Linienintensität der Röntgenstrahlung in der Detektorebene und wurde daher für weitere Messungen nicht ersetzt. Nach den obigen Betrachtungen führt die Montage des kleinen Spiegels in Spektrometerstrahlrohr zu einem stärker gekrümmten Röntgenreflex in der Detektorebene und einer großen Abnahme der Linienintensität. Will man den kleinen Spiegel durch ein anderes Strahlrohrelement ersetzen, um die Linienintensität zu erhöhen und Linienkrümmung zu verringern, so muss man darauf achten, dass das neue Strahlrohrelement in der Lage sein muss, die Lichtreferenzlinien aus dem Lichtaufbau in den Strahlengang der Röntgenstrahlung einzukoppeln. Diese Voraussetzung bietet ein handelsüblicher Emulsionsschicht-Strahlteiler, der eine Durchlässigkeit für Röntgenstrahlung im Energiebereich von 3-10 keV von 99% besitzt und sichtbare Strahlung im Verhältnis 92:8 transmittiert und reflektiert. Für die Messungen an der FLASH-EBIT und Montage des Spektrometers parallel zum Elektronenstrahl wurde der kleine Spiegel durch einen solchen Emulsionsschicht-Strahlteiler ersetzt. Dafür war es notwendig, eine vakuumtaugliche Halterung für den Emulsionsschicht-Strahlteiler zu konstruieren. Die Kristalle waren vor den Messungen bereits detailliert z.B. bezüglich der Ausrichtung der Gitterebenen vermessen worden. Zudem waren Kristallhalter und Hauptkammer des Spektrometers bereits unter Berücksichtigung der Größe der Kristalle konstruiert und gefertigt worden. Im Rahmen der zur Verfügung stehenden Zeit und den finanziellen Mitteln war es daher nicht möglich, die Kristalle durch Kristalle mit größerer Ausdehnung  $c$  zu ersetzen.

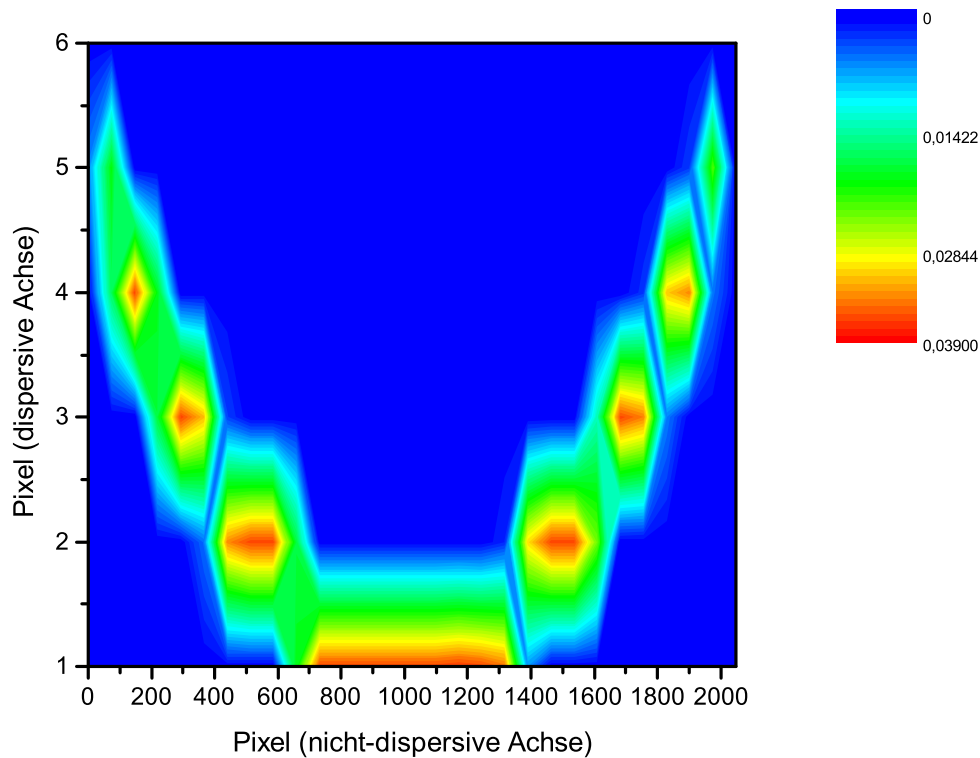
### 3.3. Systematische Fehlerquellen

Element	Übergang	Energie (eV)	$\theta(\text{Si111})$ ( $^\circ$ )	$\bar{\zeta} \cdot 10^{-4}$ ( $^\circ$ )
Ar <sup>16+</sup>	$w$	$\sim 3140$	39.0	10.50
Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 3323$	36.5	8.94

**Tabelle 3.6:** Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für die Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene für unterschiedliche Bragg-Winkel  $\theta$  für Röntgenstrahlung, die in dieser Arbeit spektroskopiert wurde. Die Bragg-Winkel beziehen sich auf die Messung der Wellenlängen der Röntgenstrahlung mit einem Si(111)-Kristall. Die Korrekturwinkel wurden dabei mit Hilfe der Simulationen, die für ein senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiertes Röntgenspektrometer entworfen wurden, bestimmt. Für alle Variablen, die in die Simulation eingehen, wurden die gleichen Werte wie für die Simulation in Abb. 3.44 genutzt.

Zusammenfassend sind in Tab. 3.6 noch die mit der Simulation erzielten Werte für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für ein senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiertes Röntgenspektrometer bei einem Bragg-Winkel  $\theta$  von  $36.5^\circ$  und  $39.0^\circ$  aufgelistet, die nahezu den Bragg-Winkeln  $\theta$  des Lyman- $\alpha_1$  Übergangs in Ar<sup>17+</sup> und des  $w$  ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) [63] Übergangs in Ar<sup>16+</sup> bei Verwendung eines Si(111)-Kristalls entsprechen. Alle experimentellen Gegebenheiten, wie die Verschiebung eines der beiden Kamerachips bezüglich der Chipmitte, wurden dabei in den Simulationen berücksichtigt. Für alle experimentellen Größen, die in die Simulation eingehen, wie z.B. für den Abstand  $L$  zwischen Quelle und Detektor, wurden die gleichen Werte wie für die Simulation von Abb. 3.44 verwendet.

Es soll an dieser Stelle noch kurz auf die Resultate der Simulationen zur Linienkrümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene für Simulationsparameter eingegangen werden, die den experimentellen Parametern in den Messungen dieser Arbeit, die an der FLASH-EBIT bei parallel zum Elektronenstrahl montiertem Röntgenspektrometer durchgeführt wurden, entsprechen. Die Simulationen unterscheiden sich von den oben beschriebenen Simulationen zur Linienkrümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene für einen experimentellen Aufbau, bei dem das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert ist, lediglich durch die Wahl der Simulationsparameter. So besitzt die Ionenwolke bei parallel zum Elektronenstrahl montiertem Röntgenspektrometer vom Kristall aus gesehen nur eine Ausdehnung in  $z$ -Richtung von  $\sim 0.1$  mm. Daneben muss für die Simulation berücksichtigt werden, dass, wie oben erwähnt, bei parallel zum Elektronenstrahl ausgerichtetem Spektrometer zur Einkopplung der Lichtreferenzlinien in den Strahlengang der Röntgenstrahlung anstelle des kleinen Spiegels ein Emulsionsschicht-Strahlteiler verwendet wurde, der die Röntgenstrahlung nicht daran hindert den Detektor zu erreichen. Weiter ist zu beachten, dass sich für diese Anordnung auch kein Schlüsseloch im Strahlengang der Röntgenstrahlung befindet. Der Abstand von Röntgenquelle zu Beryllium-Fenster in den Simulationen wurde dabei entsprechend den experimentellen Gegebenheiten zu 958 mm, von Röntgenquelle zu Kristall zu 1992 mm und von Röntgenquelle zu Detektor zu 2331 mm gesetzt. Der über die Simulation auf der Kamera erhaltene Röntgenreflex ist in Abb. 3.48 für einen Bragg-Winkel von  $\theta = 53.5^\circ$  dargestellt. In der Simulation wurden eine Verschiebung des Kamerachips bezüglich der Kameramitte (siehe Kap. 3.3.6) und eine Drehung



**Abbildung 3.48:** Simuliertes Röntgensignal in der Detektorebene für Röntgenstrahlung mit einem Bragg-Winkel von  $53.5^\circ$  bei einem parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiertem Röntgenspektrometer. Die Abstände zwischen Röntgenquelle und Beryllium-Fenster bzw. Quelle und Kristall bzw. Quelle und CCD Kamera wurden dabei dem experimentellen Aufbau entsprechend zu 958 mm bzw. 1992 mm bzw. 2331 mm gewählt.

des Kristalls um einen experimentell vermessenen Winkel  $\eta \approx 0.1^\circ$  (siehe Kap. 3.3.7) gegenüber der Ionenwolkenmitte berücksichtigt.  $\eta$  wurde dabei mit der in Kap. 3.3.7 beschriebenen Methode für den experimentellen Aufbau zur Messung der Röntgenwellenlänge des  $w$ -Übergangs an  $S^{14+}$ -Ionen bestimmt. Aufgrund dieser nicht ganz idealen Ausrichtung des Spektrometers in Hinblick auf die Röntgenquelle für die Simulationen (und das Experiment) ist Abb. 3.48 leicht asymmetrisch bezüglich einer Parallelen zur dispersiven Achse durch den Kameramittelpunkt. Die in der Abbildung angegebenen farbkodierten Intensitäten sind auf die Gesamtintensität der ausgesandten Röntgenstrahlung normiert und in % an Gesamtintensität angegeben. Die diskreten Strukturen im simulierten Röntgensignal entlang der nicht-dispersiven Detektorachse ergeben sich aufgrund der Tatsache, dass einlaufende Röntgenstrahlen in Hinblick auf ihren Detektionspunkt auf dem Kamerachip entlang der nicht-dispersiven Achse in der Simulation nur in diskrete, mehrere Pixel umfassende Signalkanäle einsortiert werden. Es ergibt sich ein konsistentes Bild mit den vorangehenden Simulationen. Das Röntgensignal ist entlang der dispersiven Achse auf eine geringe Anzahl von Pixeln mit geringerer Differenz zu einer Geraden mit  $y = 0$  verteilt. Die Linienkrümmung

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

Element	Übergang	Energie (eV)	$\theta(\text{Si111, Si220})$ (°)	$\bar{\zeta} \cdot 10^{-4}$ (°)
S <sup>14+</sup>	$w$	$\sim 2461$	53.5	4.21
S <sup>15+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 2623$	49.0	3.76
Fe <sup>24+</sup>	$w$	$\sim 6701$	28.8	2.04
Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 6973$	27.6	1.89

**Tabelle 3.7:** Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für die Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$  für Röntgenstrahlung, die in dieser Arbeit untersucht wurde. Die Bragg-Winkel beziehen sich dabei auf die Messung der Wellenlängen der Röntgenstrahlung mit einem Si(111)-Kristall - außer für Eisenionen, Si(220)-Kristall. Die Korrekturwinkel wurden dabei mit Hilfe der Simulationen, die für ein parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiertes Röntgenspektrometer entwickelt wurden, bestimmt. Für alle Variablen, die in die Simulation eingehen, wurden die gleichen Werte wie für die Simulation in Abb. 3.48 genutzt.

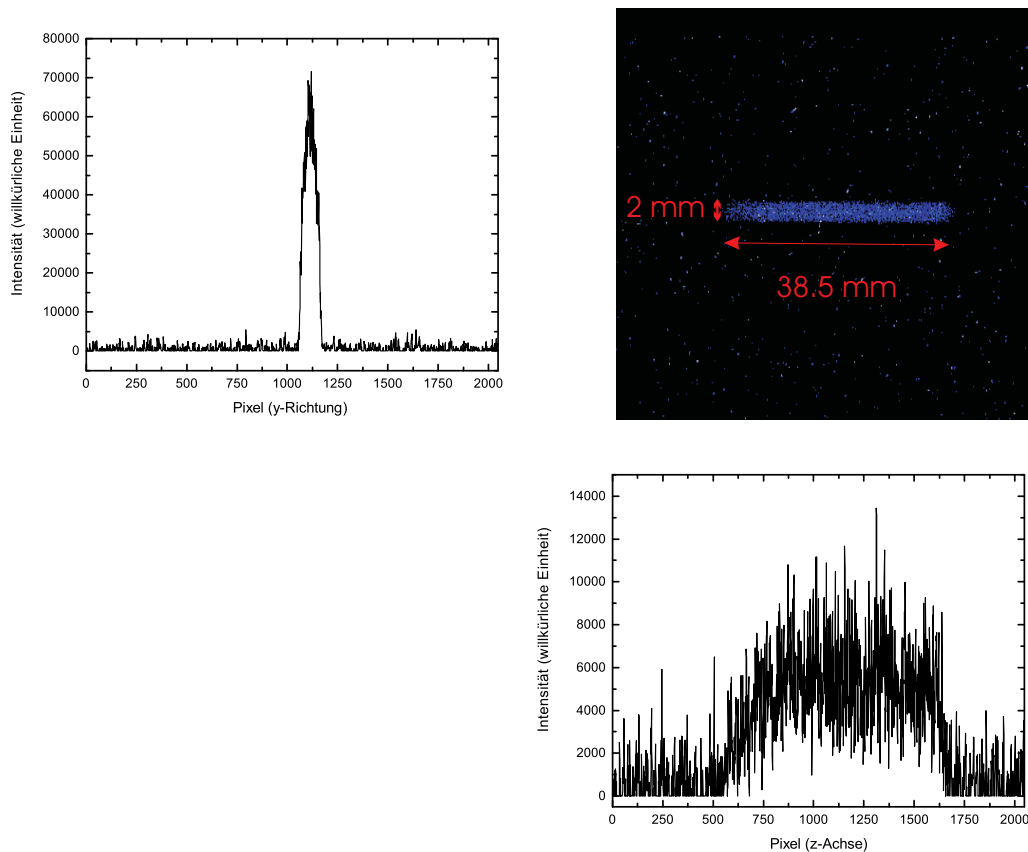
des simulierten Röntgensignals in der Detektorebene ist damit, wie erwartet, deutlich geringer als die der oben vorgestellten Simulation für eine Anordnung des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl. Die maximale Verschiebung des Röntgensignals entlang der dispersiven Detektorachse gegenüber einer Gerade mit  $y = 0$  beträgt  $\sim 5.5$  Pixel, was  $\sim 0.075$  mm entspricht. Dies stimmt gut mit den Resultaten aus Kap. 3.3.2 überein, wobei sich die Abweichung zwischen den dort vorgestellten Ergebnissen und den hier präsentierten Werten durch die Tatsache erklären lässt, dass die Ionenwolke nur näherungsweise einer Punktquelle entspricht und eine gewisse Ausdehnung hat und dass die Ergebnisse in Kap. 3.3.2 über Gleichungen bestimmt wurden, die lediglich Näherungen darstellen. Abb. 3.48 ist zu entnehmen, dass das Röntgensignal für kleine und große Pixelwerte entlang der nicht-dispersiven Detektorachse viel größere Verschiebungen entlang der dispersiven Detektorachse aufweist als für die Pixelwerte um das Zentrum der nicht-dispersiven Achse. Dies ist durch den großen Winkel  $\kappa(z_i)$  zu erklären, unter dem ein Röntgenstrahl  $i$ , der von einer Punktquelle emittiert wird, auf den Kristall treffen muss, um an den Rändern des Detektors entlang der nicht-dispersiven Detektorachse detektiert werden zu können.

Tab. 3.7 zeigt abschließend die mit der Simulation erzielten Werte für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für ein parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiertes Röntgenspektrometer für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$ , die den Bragg-Winkeln für der in dieser Spektrometerkonfiguration untersuchten Röntgenlinien entsprechen. Wie auch für Abb. 3.48 wurden alle Simulationsparameter den in unabhängigen Messungen bestimmten experimentellen Parametern gleichgesetzt.

#### Bestimmung von experimentellen Größen

Wie oben angedeutet mussten die Maße aller Strahlrohrelemente und der Ionenwolke und ihre Abstände zum Kristallmittelpunkt für die Simulation experimentell präzise vermessen werden, um die Simulationsparameter den experimentellen Gegebenheiten anpassen zu können. Zu diesem Zweck wurden die Abstände der einzelnen Strahlrohrkomponenten untereinander und zum Fallenzentrum, die bereits aufgrund geringer mechanischer Fertigungstoleranzen der EBIT-Fallenkammer, des Strahlrohres und der Halterungen für die einzelnen Komponenten mit einer

Unsicherheit von  $\sim \pm 2.0$  mm bekannt waren, unabhängig mit Hilfe von Abstandsmessern mit einer Unsicherheit von  $\sim \pm 2.0$  mm (Ableseungenauigkeit) vermessen. (Für die Ionenwolke wurde dabei angenommen, dass sie sich in der Mitte der Driftröhren befindet, d.h. um den Abstand der Ionenwolke zum Kristall zu bestimmen, wurde der Abstand der Driftröhre in Bezug auf den Kristall gemessen.) Die Abstandsbestimmung wurde sowohl für eine experimentelle Anordnung durchgeführt, bei der das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der HD-EBIT montiert war, als auch für eine experimentelle Konfiguration mit parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiertem Spektrometer. Innerhalb ihrer Fehlerbalken stimmen die so jeweils experimentell vermessenen und die durch Konstruktion festgelegten Abstände der Komponenten zum Kristallmittelpunkt gut überein, wobei die gemessenen Abstände mit einer Unsicherheit von



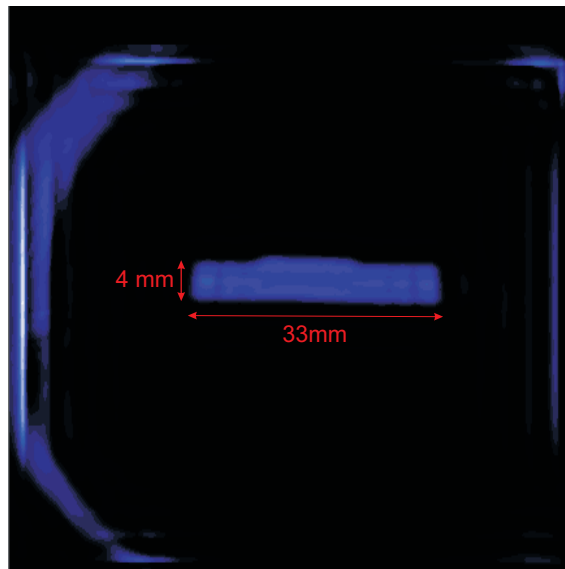
**Abbildung 3.49:** Rechts oben: Mit der Lochkamera aufgenommenes Abbild der Ionenwolke im Röntgenbereich. Als Lochblende diente dabei ein Edelstahl-Plättchen mit einem Loch mit Durchmesser von 1 mm. Als Detektor wurde eine der auch in den Röntgenwellenlängenmessungen eingesetzten CCD Kameras verwendet. Die Skala gibt dabei bereits die durch Multiplikation der aus der Abbildung bestimmten Größen mit dem Abbildungsmaßstab der Lochkamera von 2.24:1 berechneten Maße der Wolke wieder. Links oben: Projektion des Wolkenabbildes auf die eine Achse der CCD Kamera. Es ergibt sich eine Höhe des Wolkenabbildes von  $\sim 2.00 \pm 0.03$  mm. Rechts unten: Projektion auf die andere Achse der CCD Kamera. Es ergibt sich eine Ausdehnung der Ionenwolke entlang der  $z$ -Achse von  $38.49 \pm 0.05$  mm.



### 3.3. Systematische Fehlerquellen

---

$\sim \pm 2$  mm als Simulationsparameter verwendet wurden. Wie man der Simulation entnimmt kann der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  bei einer solch relativ großen Unsicherheit in der Abstandsbestimmung noch immer mit hoher Genauigkeit ( $\Delta\bar{\zeta} \approx 10^{-10}$  °) bestimmt werden, d.h. sie führt zu einem vernachlässigbaren Effekt auf die relative Unsicherheit  $\Delta\lambda/\lambda$  der Röntgenwellenlängenmessungen. Die Maße von Kristall, Beryllium-Fenster und Spiegel konnten außerhalb des Vakuums mit handelsüblichen Abstandsmessern auf  $\sim \pm 0.01$  mm genau gemessen werden. Der Einfluss dieser Größen auf den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  beschränkt sich damit (ebenfalls) auf ein vernachlässigbares Niveau von  $\Delta\bar{\zeta} \sim 10^{-10}$  °. Die Größe der Ionenwolke erhält man bei parallel zum FLASH-EBIT-Elektronenstrahl ausgerichtetem Spektrometer über das mit Hilfe der im Spektrometerstrahlrohr montierten Linsen erzeugte reale Abbild der Ionenwolke (siehe Kap. 3.3.7). Für diese experimentelle Konfiguration sind damit - unter Berücksichtigung der vorangehenden Überlegungen - alle für die Simulation benötigten Parameter bekannt. Die Maße der Ionenwolke und des Schlüsselochs für ein senkrecht zum Elektronenstrahl an der HD-EBIT montiertes Spektrometer allerdings müssen mit Hilfe komplizierterer Techniken bestimmt werden, da die Ionenwolke und das Schlüsseloch in  $z$ -Richtung (siehe Abb. 3.42) eine Ausdehnung besitzen, die größer als die Ausdehnung des Kamerachips in dieser Richtung ist. Das reale Abbild von Wolke und Schlüsseloch kann daher bei einem Abbildungsmaßstab von 1:1, wie er bei gegebenem Fokus der Linsen (siehe Kap. 3.2.2) und ihrer Position im Spektrometerstrahlrohr vorliegt, nicht vollständig abgebildet werden (siehe Abb. 3.8), so dass die Abmessungen von Wolke und Schlüsseloch entlang der  $z$ -Achse nicht einfach über dieses Abbild bestimmt werden können. Allerdings kann die Bestimmung der Größe der Ionenwolke in  $z$ -Richtung auf andere Art und Weise mit Hilfe des Signals, das durch den  $2s^2 2P_{3/2} \rightarrow 2s^2 2P_{1/2}$  (M1) Übergang einer  $\text{Ar}^{13+}$ -Ionenwolke im sichtbaren Bereich bei 440 nm emittiert wird, erfolgen. So wurde von V. Mäckel [137] unter Verwendung eines 440 nm Interferenzfilters und einer Spiegelreflexkamera vom optischen Port aus, der dem Röntgenspektrometerport (siehe Kap. 3.3.6) gegenüberliegt, ein Abbild der Ionenwolke in diesem Strahlungsbereich aufgenommen. Es ergibt sich, dass die Ionenwolke bei der in den Experimenten dieser Arbeit typischerweise vorliegenden Fallenkonfiguration von 100-200 V an den Driftröhren links und rechts der zentralen Driftröhre (siehe Kap. 2.1.3) „das Sichtfenster“ der Driftröhren mit einer Länge von 38.5 mm in  $z$ -Richtung komplett „ausfüllt“. Physikalisch gesehen gibt es keinen Grund, warum dieses Resultat, das man für die Größe der axialen Ausdehnung der Ionenwolke über Spektroskopie im sichtbaren Bereich bei 440 nm erhält, nicht auch für den Röntgenbereich gültig sein sollte. Um für diese Vermutung eine experimentelle Grundlage zu schaffen, wurde die Ausdehnung der Ionenwolke im Röntgenbereich in einer unabhängigen Messung vermessen. Dazu wurde eine Lochkamera mit einer Lochblende aus Edelstahl mit einem Durchmesser von 1 mm und einer Dicke von 0.5 mm verwendet, die Röntgenstrahlung bis zu 30 keV nahezu nicht durchdringen kann. Diese befand sich in einem Abstand von 507.35 mm zur Ionenwolke und 228.2 mm zum Detektor. Als Detektor wurde dabei eine der beiden auch in den Röntgenwellenlängenmessungen eingesetzten CCD Kameras verwendet. Abb. 3.49 zeigt das in dieser Konfiguration erhaltene Abbild der Ionenwolke zusammen mit den Projektionen dieses Abbildes auf die beiden Achsen des Detektors. Bei bekannter Pixelgröße von  $13.8 \times 13.8$  mm<sup>2</sup> ergibt sich über den Fit einer Heavyside-Step-Funktion an das auf die  $z$ -Achse projizierte Wolkenabbild (siehe Abb. 3.50 rechts unten) unter Berücksichtigung des Abbildungsmaßstabes der Lochkamera für die Ionenwolke eine Ausdeh-



**Abbildung 3.50:** Mit der Lochkamera aufgenommenes Abbild des „Schlüssellochs“, welches von sichtbarem, parallelisiertem Licht einer Punktquelle beleuchtet wurde. Das Abbild wurde bereits mit dem Lochblendenabbild entfaltet. Die Skala gibt dabei die durch Multiplikation der aus der Abbildung bestimmten Größen mit dem Abbildungsmaßstab der Lochkamera von 2.24:1 berechneten Maße des Schlüssellochs wieder.

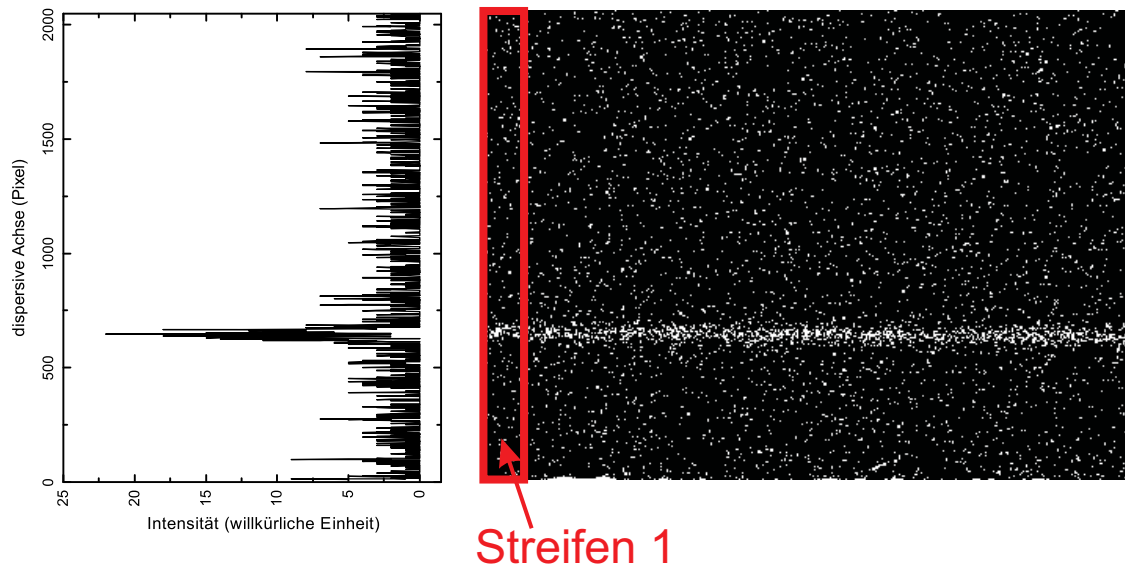
nung in  $z$ -Richtung von  $38.49 \pm 0.05$  mm, was sehr gut mit der axialen Ausdehnung des zentralen „Driftröhrenfensters“, durch welches die Spektroskopie erfolgt, von 38.5 mm übereinstimmt. Eine solche Unsicherheit in der axialen Ausdehnung der Ionenwolke von nur 0.05 mm ist ausreichend, um den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  über die Simulation mit einer Unsicherheit von  $10^{-10}^\circ$  zu berechnen, und limitiert die erreichbare Genauigkeit in einer Röntgenübergangswellenlängenmessung, die den simulierten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  in der Datenanalyse berücksichtigt, nur auf dem sub-ppm Niveau. Es ist hier noch zu bemerken, dass die über das Wolkenabbild bestimmte Höhe der Ionenwolke bei  $\sim 2.00 \pm 0.03$  mm liegt und dass am linken Rand entlang der  $z$ -Achse dieses Abbildes das Röntgensignal ein wenig „ausgedünnt“ erscheint. Diese Tatsache lässt sich möglicherweise dadurch erklären, dass die Lochkamera nicht optimal auf die Achse Driftröhre-Schlüsselloch ausgerichtet war und das Schlüsselloch somit von der Lochkamera aus gesehen möglicherweise leicht asymmetrisch lag und einen Teil der Strahlengänge der Röntgenstrahlung blockierte. Um die Größe des Schlüssellochs, die aufgrund seiner Fertigungstoleranzen zu  $33.0 \pm 0.5$  mm bekannt ist, zu überprüfen, wurde der dem Röntgenspektrometerport gegenüberliegende optische Port mit sichtbarem, parallelisiertem Licht einer Punktquelle beschienen, so dass die Fallenmitte und mit ihr das Schlüsselloch beleuchtet wurden. Mit Hilfe der Lochkamera erhielt man auf diese Weise ein Abbild des Schlüssellochs, wobei es für die Aufnahmen von Vorteil war, dass das Schlüsselloch von allen EBIT-Strahlrohrkomponenten der Lochblende der Lochkamera am nächsten lag, und von ihnen die geringsten Ausmaße besitzt. Abb. 3.50 zeigt dieses so erzeugte Abbild des Schlüssellochs nach Entfaltung mit dem Lochblendenabbild. Die leichte Asymmetrie in der Abbildung ist entweder durch die leicht „schräge“ Beleuchtung des Schlüssellochs mit dem parallelisierten

Licht der Punktquelle zu erklären oder aber in einer möglichen leichten Asymmetrie der Lochkamera bezüglich der Achse Schlüsseloch-Fallenmitte zu suchen. Für die Größe des Schlüsselochs in  $z$ -Richtung ergibt sich - wiederum bei bekannter Pixelgröße und bekanntem Abbildungsmaßstab -  $33.02 \pm 0.05$  mm, für seine Höhe  $3.97 \pm 0.03$  mm, was innerhalb der Fertigungstoleranzen mit den Konstruktionsgrößen des Schlüsselochs übereinstimmt. Damit ist auch der Einfluss der Unsicherheit in der Bestimmung der Schlüsselochgröße auf den simulierten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  kleiner  $10^{-10}^\circ$ .

Abschließend bleibt damit festzuhalten, dass die Summe der Unsicherheiten in der experimentellen Bestimmung der in diesem Kapitel diskutierten Größen eine Berechnung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  in der Simulation mit einer Genauigkeit von  $10^{-10}^\circ$  zulässt. Die bei Verwendung dieses simulierten Korrekturwinkels in der Datenanalyse von Röntgenwellenlängenmessungen entstehende zusätzliche Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung  $\Delta\lambda$  ist damit vernachlässigbar klein.

#### 3.3.9 Experimentelle Beobachtung der Linienkrümmung

Nach den bisherigen theoretischen Überlegungen zur Herleitung der Formeln (siehe Kap. 3.3.2, 3.3.3 bzw. 3.3.5) und den Simulationen (siehe Kap. 3.3.8) für die Linienkrümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene soll in diesem Kapitel abschließend auf die Möglichkeiten zur experimentellen Bestimmung dieser Linienkrümmung eingegangen werden. In den bisherigen Experimenten zur Bestimmung von Röntgenwellenlängen an hochgeladenen Ionen mittels des Heidelberg-Röntgenspektrometers war es nicht gelungen, diese Krümmung des Röntgensignals in der Detektorebene aufzulösen. Die Ursache dafür ist darin zu suchen, dass die Ansätze, die zu diesem Zweck verfolgt wurden, sich darauf beschränkten, Röntgeneinzelspektren oder rohe Summenspektren zu untersuchen. Um in diesen Spektren die Linienkrümmung experimentell zu beobachten, wurden dabei sowohl bei einer Analyse der Röntgeneinzelspektren als auch der rohen Summenspektren die jeweiligen Spektren in  $N$  Pixelstreifen mit Streifennummer  $M$  entlang der dispersiven Detektorachse zerlegt (siehe Abb. 3.51). In jedem Streifen befindet sich dann ein Anteil des Röntgensignals. Durch Projektion des Signals im jeweiligen Streifen auf die disperse Detektorachse erhält man für jeden Pixelstreifen ein Röntgenlinienprofil, welches sich mit Hilfe eines Voigt-Fits fitten lässt. Mit dieser Vorgehensweise lässt sich für jeden Pixelstreifen der Wert des Peakmaximums für sein Röntgenlinienprofil angeben. Die Krümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene sollte sich dann in einem Graphen, in dem man die so bestimmten Werte für die Peakmaxima  $x_c$  als Funktion der Streifennummer  $M$  aufträgt, in Form eines parabelförmigen Verlaufes der  $x_c$  mit  $M$  äußern. Dies ergibt sich aus den in den Kapiteln 3.3.2, 3.3.3 bzw. 3.3.5 hergeleiteten Gleichungen und den Simulationen aus Kap. 3.3.8. Allerdings konnte dieser parabelförmige Verlauf in früheren Analysen von Einzelspektren und rohen Summenspektren nicht beobachtet werden. Für die Analyse von Einzelspektren liegt dies daran, dass die Statistik in diesen Spektren sehr gering ist. Statistische Fluktuationen dominieren die Spektren und führen für die Zerlegung jedes Einzelspektrums in  $N$  Streifen jeweils zu einem anderen Verlauf des Graphen, in dem die Werte für die Peakmaxima  $x_c$  in Abhängigkeit von der Streifennummer  $M$  aufgetragen sind. Im Falle der Analyse der rohen Summenspektren wurde vermutet, dass die Linienkrümmung



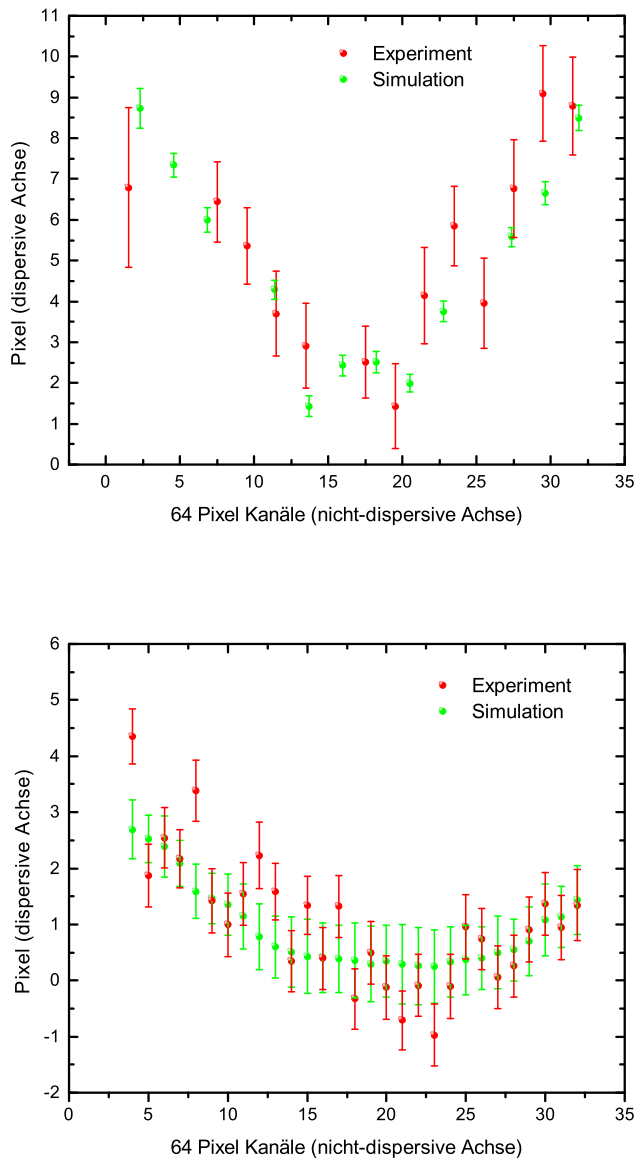
**Abbildung 3.51:** Typisches Einzelspektrum der  $w$ -Linie [153], die vom  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergang in  $S^{14+}$ -Ionen herrührt und mit Hilfe des Heidelberg-Röntgenspektrometers spektroskopiert wurde. Für die Auflösung der Linienkrümmung wurden Einzelspektren in früheren Messungen, die mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer durchgeführt wurden, in  $N$  Streifen parallel zur dispersiven Achse zerlegt. Der rote Streifen stellt den Streifen mit der Streifennummer  $M = 1$  stellvertretend für alle Streifen dar. Mit Hilfe einer solchen Analyse der Einzelspektren konnte die Linienkrümmung in diesen früheren Messungen nicht experimentell beobachtet werden. Dieselbe Analyse voranalysierter Summenspektren ermöglichte allerdings für die Messungen dieser Arbeit, die mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer durchgeführt wurden, zum ersten Mal einen experimentellen Nachweis der Linienkrümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene für die in diesem Experimenten verwendete Geometrie.

deshalb nicht zu beobachten war, weil sie intrinsisch ist, d.h. weil sie geringer ausfällt als die Halbwertsbreite der untersuchten Röntgenlinie. Diese Analyse ist leicht fehlerhaft. Die Ursache dafür, dass die Linienkrümmung in den rohen Summenspektren mit der oben beschriebenen Methode nicht aufzulösen war, liegt vielmehr darin, dass der Effekt der Linienkrümmung in diesen Spektren durch einen anderen Effekt überlagert wird, der eine Beobachtung der Krümmung (nahezu) unmöglich macht. Wie in Kap. 4.2 noch eingehend beschrieben wird, können die als Detektoren eingesetzten CCD Kameras bezüglich ihrer dispersiven Achse bei der Montage am Röntgenspektrometer mittels Standard-Positionierungssystemen, wie z.B. Winkelmessern, nur auf 1 mm genau auf die Kristallkante, und damit auch auf die Kristallgitternormale und die Streuebene der Röntgenstrahlung ausgerichtet werden. Damit ergibt sich ein möglicher Winkel  $\nu$  zwischen Streuebene und dispersiver Detektorachse von bis zu  $\arctan(1/27.6) \approx 2^\circ$ . Will man Röntgenlinienprofile aus Einzelspektren erhalten, so ist es daher nicht ausreichend, die Spektren auf die dispersive Detektorachse zu projizieren. Vielmehr sind die Spektren auf eine parallel zur Streuebene orientierte Achse, die in der Detektorebene liegt, zu projizieren. Um diese Projektion zu erhalten, wird jedes

### 3.3. Systematische Fehlerquellen

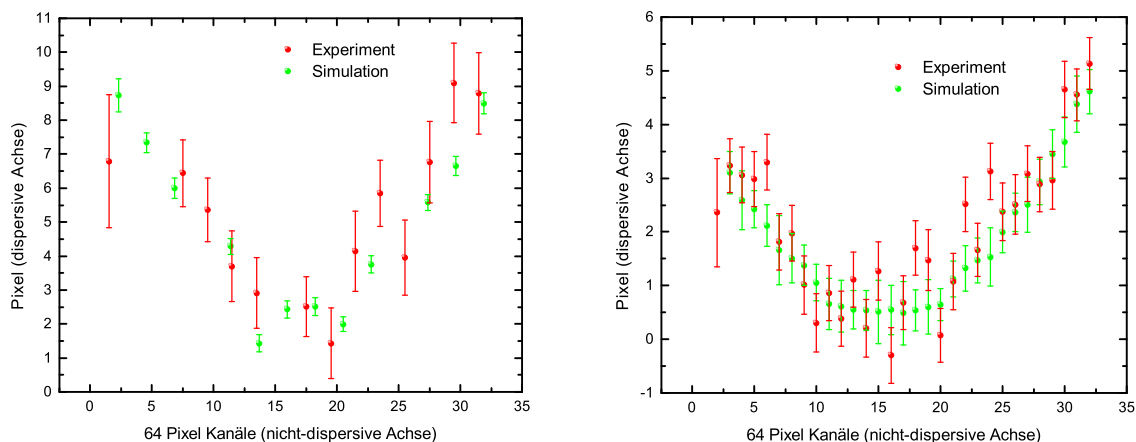
---

Einzelnspektrum entsprechend dem experimentell bestimmten Winkel  $\nu$  gedreht und anschließend auf die dispersive Detektorachse projiziert (siehe Kap. 4.2). Es ist damit auch ersichtlich, warum die Linienkrümmung über die Zerlegung roher Summenspektren in Streifen parallel zur dispersiven Detektorachse und anschließende Projektion der so erhaltenen Spektren auf diese Achse, wobei die Peakmaxima der erhaltenen Röntgenlinienprofile über einen Fit ermittelt werden, nicht zu beobachten ist: Die Linienkrümmung, die in unseren Experimenten eine Verschiebung der Werte der Peakmaxima  $x_c$  der Röntgenlinienprofile der einzelnen Streifen gegeneinander von maximal ca. 10 Pixeln, d.h. 0.13 mm, verursacht, kann nicht aufgelöst werden, da der erwartete parabelförmige Verlauf der Verschiebung selbst mit der Streifennummer  $M$  nicht beobachtet werden kann. Er wird von einem linearen Anstieg oder Abfall der Werte der Peakmaxima  $x_c$  mit der Streifennummer  $M$  überlagert, der durch den Drehwinkel  $\nu$  verursacht wird und eine Verschiebung der Werte der Peakmaxima  $x_c$  der Röntgenlinienprofile der einzelnen Streifen gegeneinander von maximal ca. 80 Pixeln bedingt. Daher wurde für die Auflösung der Linienkrümmung in dieser Arbeit ein anderer Ansatz gewählt. Dieser geht nicht von einer Zerlegung des rohen Summenspektrums in Streifen parallel zur dispersiven Detektorachse aus, sondern von einer solchen Zerlegung des um  $\nu$  gedrehten Summenspektrums. Die Peakmaxima  $x_c$  der durch Projektion auf die dispersive Detektorachse erzeugten Röntgenlinienprofile der einzelnen Streifen werden dann analog zu den obigen Betrachtungen durch Voigt-Fits an diese Profile bestimmt. Anschließend lassen sich diese Peakmaxima  $x_c$  als Funktion der Streifennummer  $M$  darstellen. Abb. 3.52 zeigt zwei auf diese Weise für Röntgensummenspektren der  $w$ -Linie, die vom  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergang in  $\text{Ar}^{16+}$  herrührt, erzeugte Graphen (rote Punkte), in denen die Werte der Peakmaxima als Pixelverschiebungen gegenüber einer Parallelen zur nicht-dispersiven Achse durch den Auftreffpunkt für einen Röntgenstrahl mit  $\kappa = 0$ , dessen Quellpunkt sich in der ursprünglichen Streuebene befindet (siehe Abb. 3.16), aufgetragen sind. Auf der Abszisse ist die Streifennummer  $M$  jedes der 16 Streifen, die jeweils aus 128 Pixeln entlang der nicht-dispersiven und 2048 Pixeln entlang der dispersiven Achse bestehen, - (für spätere Betrachtungen) skaliert auf eine Skala mit 32 Streifen a 64 Pixeln - zu sehen. Die grünen Punkte der Abbildung bezeichnen dabei die Pixelverschiebungen der Peakmaxima, die man erhält, indem man ein simuliertes Spektrum analog zu obigen Betrachtungen in Streifen parallel zur dispersiven Achse aufteilt, das Signal in den Streifen auf die dispersive Achse projiziert und die so erhaltenen Röntgenlinienprofile fittet. Kurz gesagt handelt es sich also bei den roten Datenpunkten um Punkte, die aus den experimentell ermittelten Summenspektren extrahiert wurden, bei den grünen Datenpunkten um solche, die aus simulierten Spektren gewonnen wurden. Die Fits zur Erzeugung der Datenpunkte wurden dabei mittels eines in der Programmiersprache Labview entworfenen Programms durchgeführt, welches in Kap. 4.3 noch näher vorgestellt wird. Aufgrund des schwachen Signals konnte das Programm dabei für einige wenige Streifen das Peakmaximum  $x_c$  nicht oder nicht mit ausreichender Genauigkeit bestimmen. Diese Datenpunkte sind in der Darstellung nicht enthalten. In Abb. 3.52 zeigt die obere Darstellung die über experimentell ermittelte Spektren und über Simulation bestimmten Datenpunkte für eine Anordnung, bei dem das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert war/ist und sich Schlüsselloch, Beryllium-Fenster und kleiner Spiegel im Spektrometerstrahlrohr befanden/befinden, wobei der Abstand von Ionenwolke zu Schlüsselloch 40 mm, bzw. zu Beryllium-Fenster 501 mm, bzw. zu kleinem Spiegel 523 mm, bzw. zum Kristall 1523 mm



**Abbildung 3.52:** Peakmaxima  $x_c$  als Funktion der Streifennummer  $M$  in Einheiten von 64 Pixel Kanälen. Die aus experimentellen Daten bestimmten Peakmaxima  $x_c$  (rot) ermittelt man dabei durch Voigt-Fits an die Röntgenlinienprofile, die man erhält, wenn man ein um  $\nu$  (siehe Kap. 4.2) gedrehtes Summenpektrum in  $N$  Streifen zerlegt und die so erhaltenen Spektren auf die dispersive Detektorachse projiziert. Ein analoges Vorgehen für simulierte Summenspektren liefert die grünen Datenpunkte. Bei den Röntgensummenspektren handelt es sich für beide Abbildungen um Spektren der  $w$ -Linie, die vom ( $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$ ) Übergang in  $\text{Ar}^{16+}$  herrührt. Oben: Aus experimentell ermittelten Spektren und über Simulation bestimmte Datenpunkte für eine Anordnung, bei dem das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert war/ist. Unten: Wie die obere Abbildung, nur bei parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiertem Spektrometer.

### 3.3. Systematische Fehlerquellen



**Abbildung 3.53:** Peakmaxima  $x_c$  als Funktion der Streifennummer  $M$  in Einheiten von 64 Pixel Kanälen. Bei den roten Datenpunkten handelt es sich um experimentell bestimmte Datenpunkte, bei den grünen um über Simulation ermittelte. Alle Datenpunkte wurden analog dem Vorgehen für Abb. 3.52 erzeugt. Links: Bei den Röntgensummenspektren, die den Datenpunkten zugrunde liegen, handelt es sich um Spektren der Lyman- $\alpha_1$  Linie von  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen für eine Anordnung, bei dem das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert war. Rechts: Bei den Röntgensummenspektren, auf denen die Datenpunkte basieren, handelt es sich um Spektren der  $w$ -Linie, die vom  $(1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0)$  Übergang in  $\text{S}^{14+}$  herrührt, wobei das Röntgenspektrometer für die Aufnahme der Spektren parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiert war.

sowie zu den Detektoren 1886 mm betrug/beträgt. Die untere Darstellung zeigt dagegen die über experimentell ermittelte Spektren und über Simulation bestimmten Datenpunkte für einen Aufbau, bei dem das Röntgenspektrometer parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiert war/ist und sich nur das Beryllium-Fenster im Strahlengang befand/befindet, wobei der Abstand von Ionenwolke zu Beryllium-Fenster 958 mm, bzw. zum Kristall 1992 mm sowie zu den Detektoren 2331 mm betrug/beträgt. Es ist zu erkennen, dass die Linienkrümmung experimentell aufgelöst werden kann, d.h. es ergibt sich ein parabelförmiger Verlauf der Werte der Peakmaxima  $x_c$  mit der Kanalnummer der 64 Pixel Kanäle. Auch für die Simulation ist dieser Verlauf zu erkennen, was nach den Betrachtungen von Kap. 3.3.8 auch zu erwarten war. Weiterhin lässt sich der Abbildung entnehmen, dass sich innerhalb der Fehlerbalken für beide Abbildungen eine gute Übereinstimmung zwischen den Datenpunkten, die aus experimentell ermittelten und simulierten Spektren gewonnen wurden, ergibt, d.h. die in den Experimenten vorliegende Linienkrümmung des Röntgenreflexes in der Detektorebene lässt sich mit Hilfe der Simulationen in ausreichendem Maße beschreiben. Dabei ist anzumerken, dass die Datenpunkte der oberen Abbildung für ein senkrecht zum Elektronenstrahl, die unteren für ein parallel zum Elektronenstrahl montiertes Röntgenspektrometer bestimmt wurden, d.h. für die obere Abbildung beträgt die Größe der Ionenwolke in  $z$ -Richtung (siehe Abb. 3.20) 38.5 mm, für die untere Abbildung einige hundert  $\mu\text{m}$ . Durch Vergleich der experimentellen Datenpunkte der oberen und unteren Abbildung miteinander wird somit zudem die mit Hilfe der Simulationen und geometrischen Überlegungen aufgestellte These bestätigt, dass die Linienkrümmung in der Detektorebene bei Verringerung der Ausdehnung der Ionenwolke deutlich abnimmt. Abb. 3.53 zeigt die gleiche Darstellung wie in Abb. 3.52 für ein Summenspektrum der Lyman- $\alpha_1$  Linie von  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen (links), das bei senkrecht zum Elek-

Element	Übergang	Energie (eV)	$\theta(\text{Si111, Si220})$ (°)	$\bar{\zeta} \cdot 10^{-4}$ (°)
S <sup>14+</sup>	$w$	$\sim 2461$	53.5	$4.18 \pm 0.05$
S <sup>15+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 2623$	49.0	$3.73 \pm 0.02$
Ar <sup>16+</sup>	$w$	$\sim 3140$	39.0	$11.00 \pm 0.64$
Ar <sup>17+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 3323$	36.5	$9.00 \pm 0.90$
Fe <sup>24+</sup>	$w$	$\sim 6701$	28.8	$2.38 \pm 0.30$
Fe <sup>25+</sup>	Lyman- $\alpha_1$	$\sim 6973$	27.6	$2.21 \pm 0.30$

**Tabelle 3.8:** Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für die Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene für verschiedene Bragg-Winkel  $\theta$  für Röntgenstrahlung, die in dieser Arbeit untersucht wurde. Die Bragg-Winkel beziehen sich dabei auf die Messung der Wellenlängen der Röntgenstrahlung mit einem Si(111)-Kristall - außer an Eisenionen, Si(220)-Kristall. Die Korrekturwinkel wurden aus zu Abb. 3.52 analogen Abbildungen aus den Mittelwerten der experimentell bestimmten Peakmaxima  $x_c$  bzw. über einen Fit der in Kap. 3.3.3 hergeleiteten näherungsweise gültigen Funktion 3.25 für die Verschiebung  $\Delta Y(l_j)$  entlang der  $z$ -Achse des Detektors in Abhängigkeit des betrachteten Detektionspunktes  $l_j$  an die experimentellen Datenpunkte der jeweiligen Abbildung berechnet. Für die Messungen an den Ar-Ionen war das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT, für die Experimente an den anderen Ionen parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiert.

tronenstrahl an der HD-EBIT montiertem Röntgenspektrometer aufgenommen wurde, und für ein Summenspektrum der  $w$ -Linie (rechts), die vom  $1s2p \ ^1P_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$  Übergang in S<sup>14+</sup> herrührt und bei parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT montiertem Spektrometer beobachtet wurde. Die Abstände von der Ionenwolke zu den Strahlrohrelementen wie Beryllium-Fenster etc. sind dabei analog denen für Abb. 3.52. Auch für die beiden Graphen in Abb. 3.53 lässt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment und die Abnahme der Linienkrümmung bei Verringerung der Ausdehnung der Ionenwolke in  $z$ -Richtung erkennen.

Aufgrund der Tatsache, dass die Linienkrümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene für einen experimentellen Aufbau, der auf das Heidelberg-Röntgenspektrometer zurückgreift, in dieser Arbeit mit der oben beschriebenen Methode zum ersten Mal experimentell aufgelöst werden konnte, ergibt sich für die Messungen dieser Arbeit zum ersten Mal die Möglichkeit, den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$ , der die Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene beschreibt, mit Hilfe experimenteller Daten bestimmen zu können. Die aus den Graphen über den Mittelwert der Peakmaxima  $x_c$  bzw. über einen Fit der in Kap. 3.3.3 bestimmten näherungsweise gültigen Formel 3.25 für die Verschiebung  $\Delta Y(l_j)$  an die Datenpunkte ermittelten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  finden sich abschließend in Tab. 3.8. Die angegebenen Fehler für  $\bar{\zeta}$  beziehen sich auf die Standardabweichung, mit der  $\bar{\zeta}$  bestimmt werden kann. Diese spiegelt die Tatsache wider, dass alle Peakmaxima  $x_c$ , die für die Graphen über einen Fit bestimmt wurden, fehlerbehaftet sind.

Es bleibt noch festzuhalten, dass die in Tab. 3.8 aufgelisteten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  auch diejenigen sind, die in der Datenauswertung für die Röntgenübergangswellenlängen berücksichtigt wurden.



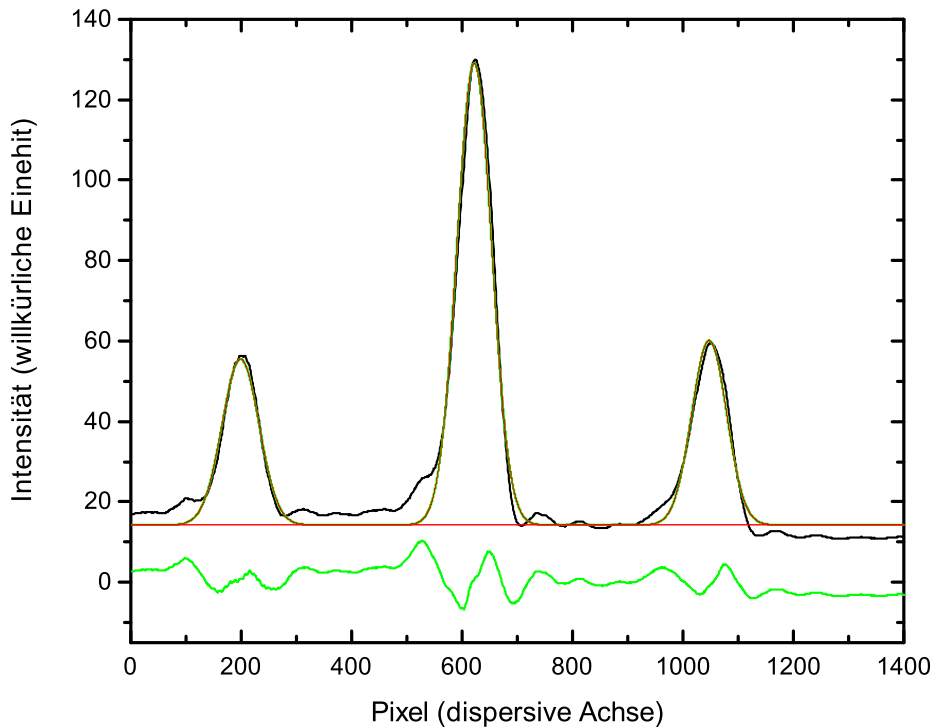
## Kapitel 4

# Datenanalyse und Ergebnisse

In dieser Arbeit wurden hochpräzise Wellenlängenmessungen an verschiedenen Übergängen in unterschiedlichen hochgeladenen Ionen, die in einer Elektronenstrahlionenfalle erzeugt wurden, mit Hilfe einer Kombination aus  $a/b$ -Methode und Bond-Technik durchgeführt. Die in den Messungen vorliegende (geringe) Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene (siehe Kap. 3.3), die in früheren Messungen über analytische Rechnungen abgeschätzt wurde, konnte dabei experimentell für diesen Messaufbau zum ersten Mal aufgelöst werden. Damit ist die relative Genauigkeit  $\Delta\lambda/\lambda$  in der Bestimmung der Röntgenwellenlänge  $\lambda$  in den Messungen, die in dieser Arbeit durchgeführt wurden, nicht mehr durch eventuelle Unterschiede zwischen experimentellem und simuliertem Wert für die Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene begrenzt. Dieses Kapitel gibt zunächst eine detaillierte Beschreibung der Eigenschaften der Lichtreferenzlinien, die als Positionsreferenzen für die Röntgenstrahlung fungieren. Danach wird auf die Analyse der Röntgenspektren eingegangen. Der letzte Teil dieses Kapitels widmet sich den Resultaten der Wellenlängenmessungen, die ohne Rückgriff auf Referenzwellenlängen an  $w$  Übergängen ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) in heliumartigen  $S^{14+}$ - und  $Ar^{16+}$ -Ionen und an Lyman- $\alpha_1$  Übergängen in wasserstoffartigen  $S^{15+}$ - und  $Ar^{17+}$ -Ionen durchgeführt wurden. Außerdem wird das Ergebnis der Relativmessung der Wellenlänge der  $w$  Linie von  $Fe^{24+}$  vorgestellt, die relativ zu den Lyman- $\alpha$  Wellenlängen von  $Fe^{25+}$  vermessen wurde. Daneben werden die experimentell bestimmten Werte für Wellenlängen von weiteren Linien von heliumartigen Ionen und von ausgewählten dielektronischen Satelliten-Linien von lithium- und berylliumartigen Eisenionen diskutiert, die relativ zur jeweiligen  $w$ -Linie oder/und zu ausgesuchten Linien des korrespondierenden lithiumartigen Ions vermessen wurden.

### 4.1 Analyse der Lichtreferenzlinien

Im Gegensatz zum Linienprofil der Röntgenlinien lässt sich die Funktion, die das Profil der sichtbaren Lichtreferenzlinien beschreibt, nicht von elementaren Prozessen ableiten, da die Lichtreferenzlinien mittels eines optischen Verfahrens erzeugt werden und das Linienprofil deshalb nicht direkt über eine vordefinierte analytische Funktion beschrieben werden kann. Allerdings ist es

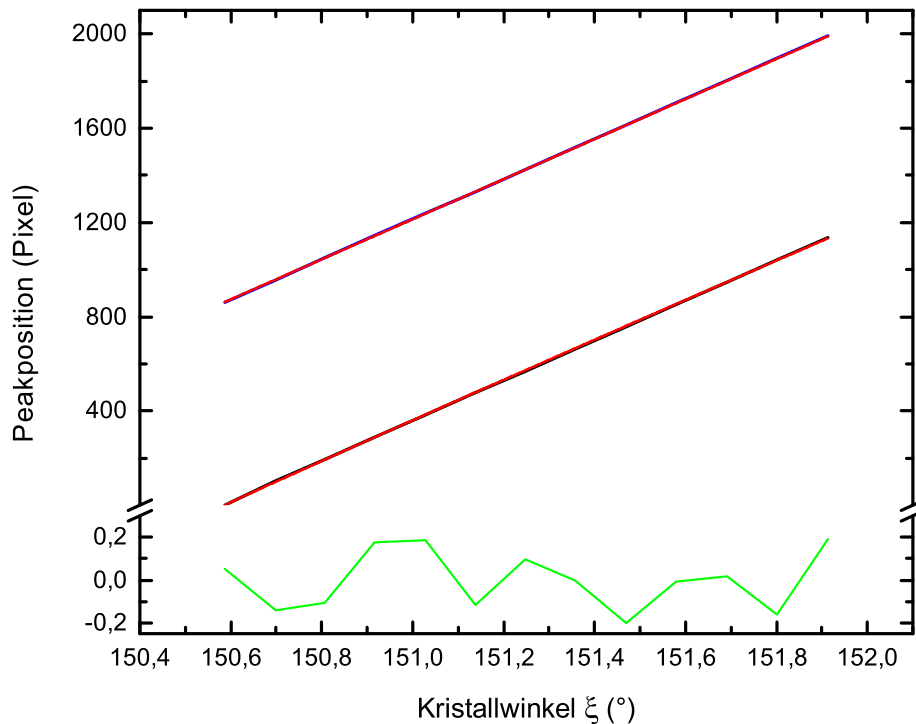


**Abbildung 4.1:** Projektion der Lichtreferenzlinien auf die dispersive Achse des Detektors und zugehörige Gaußfits. Die untere Kurve zeigt das Residuum.

auch nicht wichtig, ob das Linienprofil der Lichtreferenzlinien über einen Fit einer analytischen Funktion reproduziert werden kann, solange es experimentell reproduzierbar ist und somit eine stabile Position über längere Zeiträume gewährleistet werden kann. Daher kann die Funktion, die für einen Fit an die Profile der Lichtreferenzlinien genutzt wird und mit deren Hilfe die Peakposition der Lichtreferenzlinien auf der dispersiven Detektorachse bestimmt wird, eher willkürlich gewählt werden, solange die Abweichung zwischen dem experimentellen Linienprofil und dem Profil der Fitfunktion immer die gleiche ist.

Eine Projektion der sichtbaren Lichtreferenzlinien auf die dispersive Detektorachse findet sich zusammen mit den dazugehörigen Gaußfits und dem Residuum dieses Fits, d.h. der Abweichung zwischen Gaußfit und Linienprofil, in Abb. 4.1. Es ist klar zu erkennen, dass das Linienprofil der Lichtreferenzlinien nicht durch ein Gaußprofil repräsentiert werden kann.

Um die Verlässlichkeit der  $a/b$ -Methode zu überprüfen, ist es notwendig zu zeigen, dass die Peakpositionen der auf die dispersive Detektorachse projizierten Lichtreferenzlinien durch die oben beschriebenen Gaußfits in verschiedenen Positionen des Kristalls reproduzierbar bestimmt werden können. Um dies zu testen wurde eine große Anzahl von Lichtreferenzlinien aufgenommen,

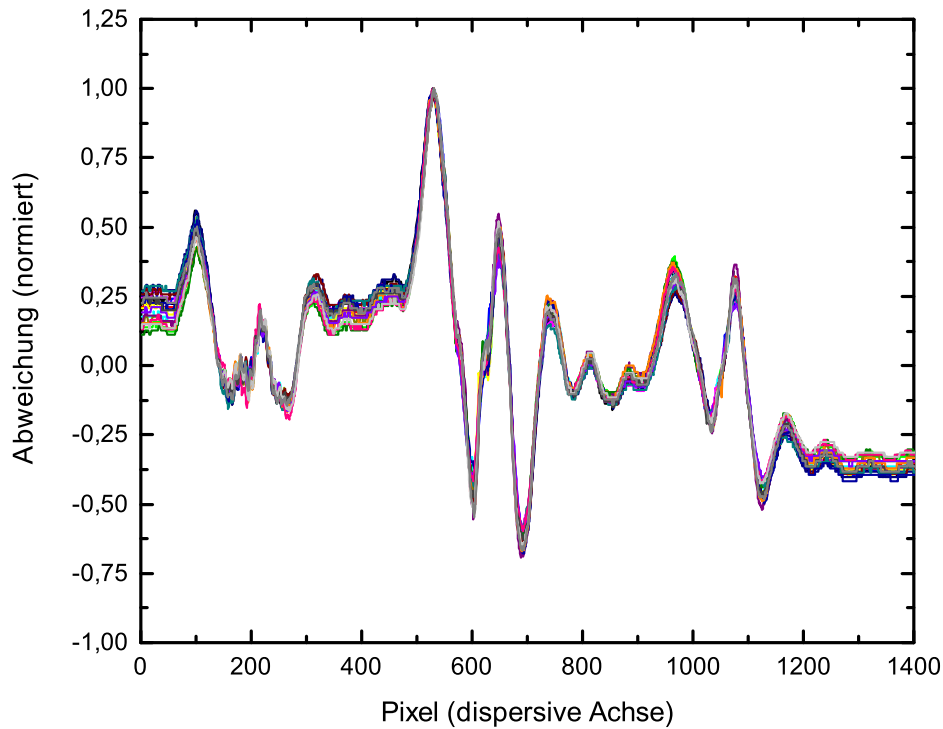


**Abbildung 4.2:** Position der Lichtreferenzlinien auf der dispersiven Achse als Funktion des Kristallwinkels  $\xi$ . Der untere Graph zeigt das Residuum des Fits von Polynomen zweiter Ordnung an die oberen Graphen.

wobei die Kameraposition nicht verändert wurde und der Kristallwinkel zwischen den Aufnahmen um  $0,11^\circ$  variiert wurde, so dass sich die Lichtreferenzlinien entlang der dispersiven Detektorachse entlang des Kamerachips bewegten. Das Resultat der Messung ist in Abb. 4.2 zu sehen. Ein Polynom zweiter Ordnung wurde an die Daten gefittet, um die Abhängigkeit der Position vom Winkel in Form eines Sinus zu nähern.

Die Unsicherheit in der Bestimmung der Positionen der Lichtreferenzlinien kann aus Abb. 4.2 zu  $\pm 0,2$  Pixel bestimmt werden. Diese Unsicherheit beinhaltet auch Fluktuationen, die durch die Positionierung von Kamera und Kristall verursacht werden. Im Vergleich dazu ist die Unsicherheit in der Bestimmung der Peakpositionen der Lichtreferenzlinien über den Gaußfit  $\pm 0,5$  Pixel und damit größer als die Fluktuation von  $\pm 0,2$  Pixel. Damit ist die Unsicherheit in der Bestimmung der Positionen der Lichtreferenzlinien ein zu vernachlässigender Beitrag zum Gesamtfehler in der Bestimmung des  $a/b$ -Verhältnisses.

Vergleicht man die Residuen einer großen Anzahl von Gaußfits an die Profile von Lichtreferenzlinien in einer großen Anzahl von Spektren, so lässt sich auch ein qualitatives Argument für die oben getroffene Aussage finden. In einem solchen Vergleich lässt sich neben den Unterschieden in



**Abbildung 4.3:** Residuen von Gaußfits an Lichtreferenzlinien von 40 verschiedenen Spektren. Die Residuen wurden für die Darstellung entlang der Abszisse verschoben und auf den Punkt höchster Abweichung normiert.

der Struktur der Lichtreferenzlinien auch die Reproduzierbarkeit des Fitalgorithmus überprüfen. Außerdem sind die Substrukturen der Linien besser zu erkennen und damit auch kleinstmögliche Unterschiede in ihrem Linienprofil.

Um die Residuen der Lichtreferenzlinien vergleichen zu können, muss man zunächst berücksichtigen, dass die Lichtreferenzlinien bei den im Experiment vorliegenden unterschiedlichen Kristallpositionen auf einer leicht anderen Position auf der Kamera abgebildet werden. Da die zeitliche Steuerung des An- und Abschaltens des Lasers zur Erzeugung der Lichtreferenzlinien nur auf einer Skala von einigen hundert Millisekunden kontrolliert wird, ist es weiterhin nicht verwunderlich, dass die Intensität der Linien von Spektrum zu Spektrum variiert. Daher müssen die Linien verschoben und ihre Peakhöhe skaliert werden, um sie in Überlapp zu bringen. Diese Prozedur wurde für die Residuen von Gaußfits an Lichtreferenzlinienprofile von 40 verschiedenen Spektren in unterschiedlichen Kristallstellungen durchgeführt. Die Winkel des Kristalls wurden dabei entsprechend den Winkeln in einer typischen Röntgenwellenlängenmessung gewählt, d.h. nahe den Bragg-Winkeln der zu vermessenden Linien. Eine kleine Änderung des Kristallwinkels zwischen den Messungen simulierte dabei die Verschiebung des Reflektionspunktes der Röntgenstrahlung

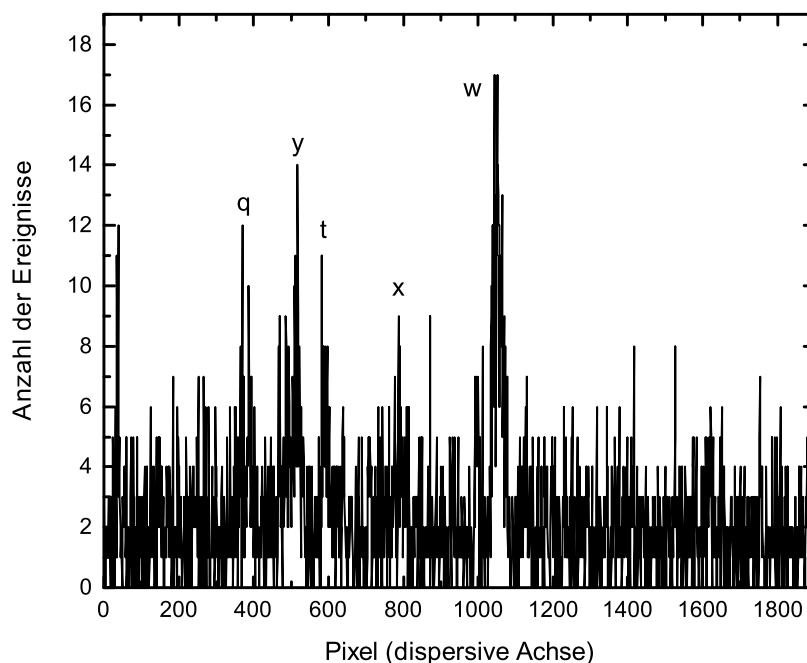
auf dem Kristall, die in Röntgenwellenlängenmessungen mit der  $a/b$ -Methode vorliegt. Alle 40 verschobenen und normierten Residuen sind in Abb. 4.3 dargestellt. Es lässt sich der Abbildung entnehmen, dass die Substruktur der Lichtreferenzlinien, d.h. ihre Abweichung vom Gaußfit, sehr reproduzierbar ist. Die Näherung des Profils der Lichtreferenzlinien mit einem Gaußprofil resultiert also immer in der gleichen systematischen Verschiebung in der Bestimmung des Peakmaximums. Dies stimmt mit den vorangegangenen Experimenten zur Verschiebung der Lichtreferenzlinien entlang der dispersiven Detektorachse auf dem Kamerachip als Funktion des Kristallwinkels  $\xi$  überein. Es ergibt sich somit, dass das  $a/b$ -Verhältnis durch die Wahl der Fitfunktion nur in vernachlässigbarer Weise beeinflusst wird. Mit Hilfe dieser qualitativen und der vorher beschriebenen quantitativen Betrachtung ist somit ersichtlich, dass die Peakpositionen der Gaußfits an die Lichtreferenzlinien sehr zuverlässig für die Bestimmung der Position der Lichtreferenzlinien eingesetzt werden können.

## 4.2 Analyse der Röntgenspektren

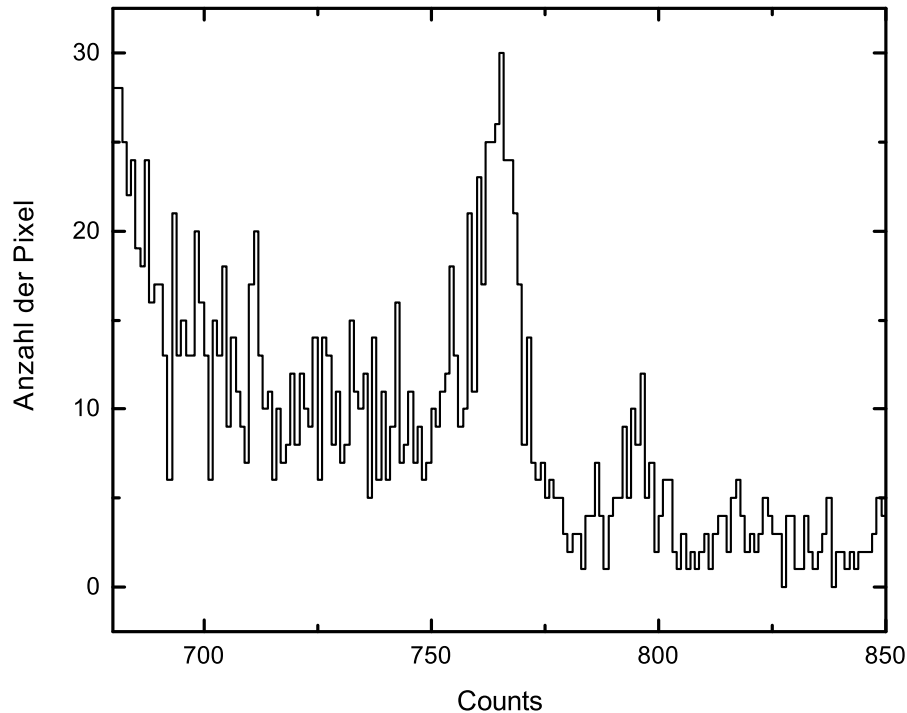
Die Analyse der Röntgenspektren wurde in [97] schon eingehend in Bezug auf das Röntgenlinienprofil, das durch einen Voigtfit beschrieben werden kann, diskutiert. Hier soll nur kurz auf die Datenanalyse in Hinblick auf die Bestimmung der Diskriminatorgrenzen für die Röntgenspektren sowie auf die Berücksichtigung einer Schrägstellung der dispersiven Achse der CCD Kamera bezüglich der Streuebene der Röntgenstrahlung eingegangen werden.

Um die untere Diskriminatorgrenze zu finden, und damit zwischen Röntgensignal und thermischem sowie Ausleserauschen des Vorverstärkers zu unterscheiden, wurde zunächst an repräsentativen Röntgenspektren eine Pulshöhenanalyse durchgeführt. Eines dieser typischen Einzelspektren, hier der  $w$ -Linie ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) in  $\text{Fe}^{24+}$ , ist in Abb. 4.4 dargestellt. Neben der  $w$ -Linie sind weitere Linien des helium- und lithiumartigen Eisens zu erkennen, die nach Gabriel Notation benannt sind [153]. Die Bezeichnungen der korrespondierenden Übergänge finden sich in Tab. 4.1. Der zum Spektrum zugehörige Graph für die Pulshöhenanalyse ist in Abb. 4.5 zu sehen. Der Photonenpeak der Röntgenstrahlung ist ungefähr bei einer Anzahl von Ereignissen (Counts) von  $\sim 760$  auszumachen. Für das beste Signal-zu-Rausch-Verhältnis ist es notwendig, die untere Diskriminatorgrenze nur leicht oberhalb des Signals des Untergrundrauschens, welches für die Messungen dieser Arbeit eingehend analysiert wurde, zu setzen. Die obere Diskriminatorgrenze wurde auf Grundlage der Pulshöhenanalyse (siehe Abb. 4.5) jeweils so gewählt, dass sie direkt oberhalb des Photonenpeaks liegt. Für die Datenanalyse wurden dann alle Pixel, die nur Untergrundrauschen aufweisen (Signal unterhalb der unteren Diskriminatorgrenze) und solche, bei denen man annehmen kann, dass sie von kosmischen Teilchen getroffen worden (Signal oberhalb der oberen Diskriminatorgrenze), vernachlässigt. Alle anderen Pixel wurden gleichwertig behandelt, d.h. so als wären sie nur von einem Photon getroffen worden. Dies ist zulässig, da es sehr unwahrscheinlich ist, dass ein Pixel von zwei Photonen getroffen wird, und der Anteil dieser zwei-Photonen-Ereignisse am Gesamtsignal damit äußerst gering ist, so dass durch eine solche Datenanalyse wenig Signal verloren geht.

Die von der Kamera aufgenommenen, nunmehr diskriminierten Spektren müssen für die weitere Datenanalyse und die Bestimmung der  $a/b$ -Verhältnisse in Bezug auf die Schnittachse der Streuebene der Röntgenstrahlung mit der Detektoroberfläche als Referenzachse projiziert werden. Da die Ausrichtung der dispersiven Kameraachse parallel zu dieser Referenzachse, die in der Streuebene liegt, im Experiment nur mit Hilfe von Standard-Positionierungssystemen, wie z.B. Winkelmessern, erfolgt, ergibt sich für diese Ausrichtung nur eine Genauigkeit von  $\sim \pm 1$  mm. Die disperse Detektorachse liegt also nicht unbedingt zur Referenzachse parallel. Um eine Hochpräzisionswellenlängenmessung durchzuführen, kann der Röntgenreflex auf der Kamera daher nicht einfach auf die disperse Detektorachse projiziert werden, da auf Grund der oben beschriebenen Ausrichtung der CCD Kamera ein Winkel von bis zu  $\nu = \arctan(1/27.6) \approx 2^\circ$  zwischen der dispersiven Detektorachse der CCD und der Referenzachse liegen kann. Projiziert man die Röntgenlinien dennoch auf die disperse Detektorachse können die Linienprofile der Röntgenlinien asymmetrisch sein. Daher muss der Winkel  $\nu$  für jede einzelne Messung sehr genau ermittelt werden. Die Projektion der Röntgenlinien kann dann erfolgen, indem die Röntgenspektren zunächst um den Winkel  $\nu$  gedreht werden und dann auf die disperse Achse projiziert werden.



**Abbildung 4.4:** Typisches Röntgeneinzelspektrum der  $w$ -Linie ( $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) in  $\text{Fe}^{24+}$ . Neben der  $w$ -Linie sind weitere Linien des helium- und lithiumartigen Eisens zu erkennen, die nach Gabriel Notation bezeichnet sind [153]. Die zu der Notation korrespondierenden Bezeichnungen der Übergänge finden sich in Tab. 4.1. In Abb. 4.5 ist der Graph zur Pulshöhenanalyse dieses Spektrums abgebildet.

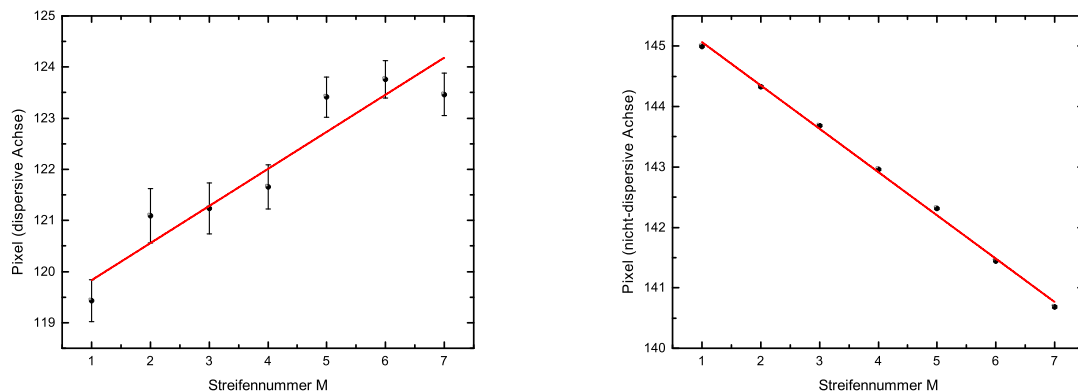


**Abbildung 4.5:** Pulshöhe: Anzahl der Pixel in Abhängigkeit von der Countzahl für ein repräsentatives Einzelspektrum (siehe Abb. 4.4) der  $w$  Linie ( $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$ ) in heliumartigem  $\text{Fe}^{24+}$ .

Der Winkel  $\nu$  lässt sich experimentell über zwei Verfahren genauest bestimmen. Zum einen ist es möglich, analog zur experimentellen Bestimmung der Linienkrümmung in Kap. 3.3.4, ein Röntgenspektrum mit extrem langer Belichtung aufzunehmen, und das so erhaltene Spektrum in  $N$  Streifen der Breite  $b$  parallel zur dispersiven Detektorachse zu zerlegen (siehe Abb. 3.51 in Kap. 3.3.4). Alle der  $N$  Streifen enthalten dann einen Teil des Röntgensignals. Jedes der „Streifenpektren“ wird auf die energiedispersive Detektorachse projiziert und das Röntgenlinienprofil für jeden Streifen mittels eines Voigtfits gefittet. Die Werte der Peakmaxima dieser Fits werden als Funktion der Streifennummer  $M$ , die Werte zwischen 1- $N$  annehmen kann, aufgetragen (siehe Abb. 4.6). Über die Steigung  $h$  eines linearen Fits an die Datenpunkte lässt sich der Winkel  $\nu$  dann als  $\nu = \arctan(h/2048)$  ( $h$  in Pixel) bestimmen. In Abb. 4.6 beträgt die Steigung  $(0.70 \pm 0.11)$  (Pixel/Streifen), wobei innerhalb jedes Streifens die Pixel 8-fach gebinnt wurden. Für  $h$  ergibt sich demnach  $h \approx (44.92 \pm 6.90)$  Pixel und  $\nu$  lässt sich damit zu  $\nu = (1.25 \pm 0.2)^\circ$  berechnen.

Eine andere Möglichkeit zur experimentellen Bestimmung des Winkels  $\nu$  bietet ein auf die Kristalloberflächennormale einjustierter Laserstrahl. Diese Methode ist eigentlich fehlerbehaftet, da die Laserstrahlung an der Oberfläche des Kristalls reflektiert wird, also bezüglich der Oberflächen-

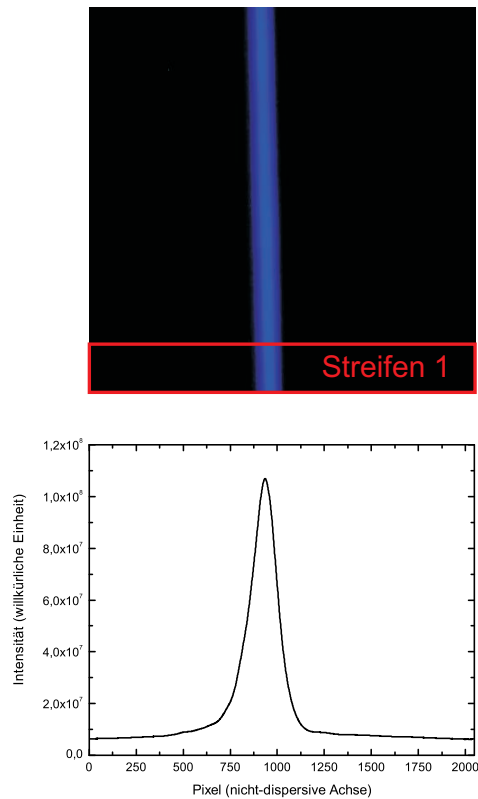
normale und nicht wie die Röntgenstrahlung in Hinblick auf die Gitternormale, allerdings kann sie bei bekanntem Winkel zwischen Oberflächen- und Gitternormale zur Überprüfung der oben beschriebenen Methode und zur genaueren Bestimmung von  $v$  eingesetzt werden. Dafür wird ein parallel zur Oberflächennormale einjustierter Laser auf den Kristall gelenkt. Der Kristall wirkt für die Laserstrahlung wie ein Spiegel. Steht der Kristall unter dem richtigen Winkel zur Kamera, so kann der reflektierte Laserreflex auf der Kamera abgebildet werden. Bei gleichzeitiger Rotation des Kristalls kann damit auf die CCD Kamera eine Laserlinie gezogen werden, die um den Winkel  $v$  bezüglich der dispersiven Detektorachse geneigt ist (siehe Abb. 4.7). Zerlegt man die so gewonnene Aufnahme der Laserlinie in  $N$  Streifen mit Breite  $b$  parallel zur nicht-dispersiven Achse und fittet die Einzellaserprofile mit einem Gaußfit, so lassen sich analog zur Zerlegung des Röntgenspektrums Peakmaxima als Funktion der Streifennummer  $M$  auftragen (siehe Abb. 4.6). Die Steigung beträgt  $(-0.72 \pm 0.01)$  (Pixel/Streifen), wobei innerhalb jedes Streifens die Pixel 8-fach gebinnt wurden. Für  $h$  ergibt sich demnach  $h \approx (-46.01 \pm 0.64)$  Pixel und  $v$  lässt sich damit zu  $v \approx -(1.29 \pm 0.02)^\circ$  berechnen. Der Abbildung ist weiterhin zu entnehmen, dass die Steigungen  $h$ , die über die beiden Methoden zur Bestimmung des Winkels  $v$  zwischen dispersiver Detektorachse und Referenzachse vom Betrag her nahezu identisch sind, sich aber im Vorzeichen unterscheiden. Dies liegt an der Tatsache, dass der Röntgenreflex in Streifen entlang der dispersiven Detektorachse zerlegt wird, der der Laserlinie entlang der nicht-dispersiven Achse, bzw. dass Röntgenlinie und Laserlinie senkrecht aufeinander stehen (und hängt auch von der Reihenfolge der Zerlegung der Linien in Streifen ab).



**Abbildung 4.6:** Linke Abbildung: Werte der Peakmaxima der Fits an ein in  $N = 8$  Streifen parallel zur dispersiven Detektorachse zerlegtes Röntgenlinienprofil als Funktion der Streifennummer  $M$ , die Werte zwischen 1-8 annehmen kann. (An das Linienprofil des 8ten Streifens konnte der Voigtfit auf Grund sehr geringer Statistik mit Hilfe einer automatisierten Fitroutine nicht mehr gefittet werden und daher ist für den 8ten Streifen kein Wert angegeben.) Über die Steigung  $h$  eines linearen Fits an die Datenpunkte lässt sich der Winkel  $v$  dann als  $v = \arctan(h/2048) \approx (1.25 \pm 0.2)^\circ$  ( $h$  in Pixel) bestimmen. Die Abweichung der Datenpunkte von dem linearen Fit lässt sich durch die Überlagerung der Drehung der dispersiven Achse bezüglich der Referenzachse mit der Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene (siehe Kap. 3.3) und geringer Statistik des Röntgensignals erklären. Rechte Abbildung: Werte der Peakmaxima der Fits an ein in  $N = 8$  Streifen parallel zur nicht-dispersiven Detektorachse zerlegtes Laserlinienprofil als Funktion der Streifennummer  $M = 1-8$ . Es ergibt sich über die Steigung  $h$   $v = \arctan(h/2048) \approx (-1.29 \pm 0.02)^\circ$ .



### 4.3. Bestimmung der a/b-Verhältnisse



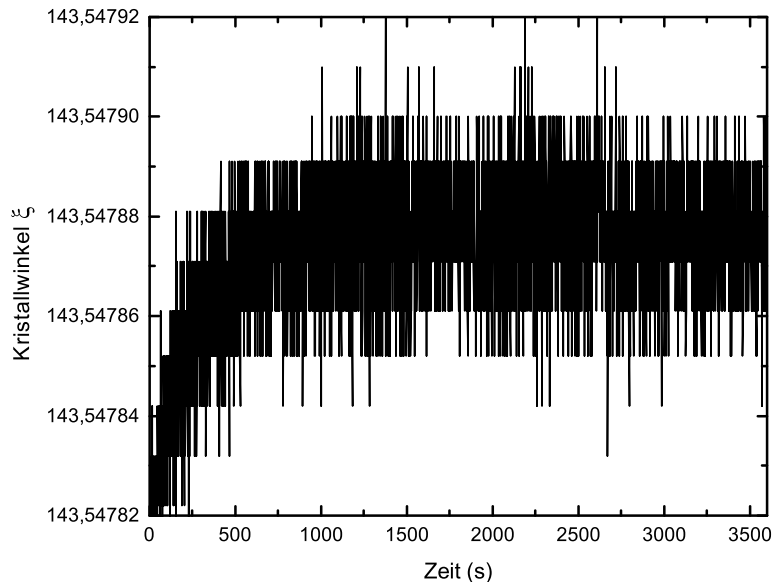
**Abbildung 4.7:** Oberes Bild: Laserlinie, die um den Winkel  $\nu$  gedreht zur dispersiven Detektorachse liegt. Der rote Streifen stellt den Streifen mit  $M = 1$  parallel zur nicht-dispersiven Detektorachse dar, in den die Aufnahme für die Bestimmung des Winkels  $\nu$  zerlegt wird. Unteres Bild: Projektion der Laserlinie auf die nicht-dispersive Detektorachse.

Ist der Winkel  $\nu$  bestimmt, werden alle Spektren, sowohl die Röntgenspektren als auch die der Lichtreferenzlinien, mit Hilfe eines Programms, welches auf Rotationsmatrizen zurückgreift, gedreht. Danach können die  $a/b$ -Abstandsverhältnisse ermittelt werden.

### 4.3 Bestimmung der a/b-Verhältnisse

Insgesamt werden vier Werte für die Bestimmung eines einzigen Datenpunktes im Graphen für das  $a/b$ -Abstandsverhältnis benötigt: zum einen die beiden Positionen der Lichtreferenzlinien und der Röntgenlinie, zum anderen der während der Aufnahmen gemessene Kristallwinkel.

Wie schon vorher beschrieben werden die Referenzpositionen für die Röntgenlinien als Peakmaxima von Gaußfits an die Lichtreferenzlinienprofile, die in einer 5 s Aufnahme vor und nach der Röntgenaufnahme generiert wurden, bestimmt. Trotz der Verwendung eines einseitig aufgehängten Kristallhalters [51] und der damit einhergehenden Reduktion der Relaxation der durch mechanische Spannungen verursachten Verdrehung der Kristallorientierung, ist der Kristallwinkel während der Messungen, d.h. einer Periode von 60-120 Minuten, nicht konstant (siehe Abb. 4.8),



**Abbildung 4.8:** Änderung des Kristallwinkels  $\xi$  als Funktion der Zeit in Sekunden.

sondern ändert sich auf einer Skala von bis zu  $10^{-4}$  °. Diese kleine Änderung des Kristallwinkels rührt wahrscheinlich immer noch von einer kleinen Verdrehung der Kristallhalterung nach der Positionierung des Kristalls und der dazugehörigen Relaxation her. Eine Änderung von  $10^{-4}$  ° im Kristallwinkel führt zu einer Änderung in der Position der Lichtreferenzlinien von  $\sim 0.05$  Pixeln. Um Fehler zu vermeiden, wurden für die Messungen die Positionen der Lichtreferenzlinien zu den Positionen, die sie bei den mittleren Kristallwinkeln während der Röntgenmessung gehabt hätten, interpoliert.

Für jeden Datenpunkt wurden also drei Aufnahmen gemacht ( $2 \times$  Lichtreferenzlinien,  $1 \times$  Röntgenlinie). Eine Messung besteht aus bis zu 100 Spektren. Alle Fitroutinen sind daher mittels eines Levenberg-Marquardt Algorithmus, der in ein Labview-Programm implementiert ist, automatisiert. Nur der letzte Fit an die  $a/b$ -Abstandsverhältnisse wurde mit Hilfe der kommerziellen Software Origin 7(8) durchgeführt. Eine detaillierte Überprüfung bezüglich der Verlässlichkeit der Fitresultate, die mit dem Labview Programm erzielt wurden, findet sich bereits in [97].

Zusammenfassend lässt sich die Bestimmung der  $a/b$ -Abstandsverhältnisse damit wie folgt beschreiben: Zunächst wird eine Pulshöhenanalyse der Röntgenspektren durchgeführt, um die optimale Untergrund-Diskriminatorgrenze zu finden. Zugleich werden einige ausgewählte Röntgenspektren untersucht, um die Diskriminatorgrenze für kosmische Teilchen zu bestimmen. Danach werden die Röntgen- und Richtreferenzlinien entsprechend dem Winkel  $\nu$  (siehe Kap. 4.2) gedreht, wobei die Röntgenspektren vorher diskriminiert werden. Alle Spektren werden auf die dispersive Detektorachse projiziert und die automatisierte Datenanalyse liest die Röntgenspektren

#### 4.4. Experimentelle Resultate

---

und die zugehörigen Spektren der Lichtreferenzlinien sowie die zugehörigen Kristallwinkel nacheinander ein. Dann werden Gaußfits an die Lichtreferenzlinienprofile gefittet, um die Position der Lichtreferenzlinien über die Peakmaxima des Fits zu erhalten. Röntgenlinienpositionen werden über den Fit von Gaußfunktionen bestimmt, wobei so viele Gaußfits durchgeführt werden wie es klar erkennbare Linien im Spektrum gibt. Aus den Positionen der Lichtreferenzlinien  $P(L)_{r,z}$  mit dem Index  $r$ , der angibt, um welche Lichtreferenzlinie es sich handelt, d.h. Lichtreferenzlinie 1 oder 2 ( $r=\{1,2\}$ ), und der Index  $t$ , der den Zeitpunkt der Aufnahme der Lichtreferenzlinie charakterisiert, d.h. ob sie vor (1) oder nach der Röntgenaufnahme (2) stattfand, wurden die interpolierten Referenzpositionen  $P(R)_r$  gemäß

$$P(R)_r = P(L)_{r,1} + (\bar{\xi}(X) - \bar{\xi}(L)_1) \frac{(P(L)_{r,2} - P(L)_{r,1})}{(\bar{\xi}(L)_2 - \bar{\xi}(L)_1)}, \quad (4.1)$$

bestimmt.  $\bar{\xi}(X)$  und  $\bar{\xi}(L)_z$  bezeichnen dabei den gemittelten Kristallwinkel während der Röntgen- und den Lichtreferenzlinienaufnahmen. Die  $a/b$ -Verhältnisse ergeben sich dann mit der Röntgenlinienposition  $P(X)$  zu

$$\left| \frac{a}{b} \right| = \left| \frac{(P(X) - P(R)_1)}{(P(X) - P(R)_2)} \right| \quad (4.2)$$

Die Fehler in der Bestimmung der Peakmaxima sind dabei unabhängig von den Fehlern, die sich in der Winkelmessung ergeben. Daher lässt sich der Fehler  $\Delta a/b$  in der Bestimmung des Verhältnisses  $a/b$  in Abhängigkeit seiner einzelnen Parameter  $P(X)$ ,  $P(L)_{r,1}$ ,  $P(L)_{r,2}$ ,  $\bar{\xi}(X)$ ,  $\bar{\xi}(L)_1$  und  $\bar{\xi}(L)_2$ , die im folgenden als Parameter  $k_i$  mit  $i = 1, 2 \dots 6$  bezeichnet werden, mit dem Fehlerfortpflanzungsgesetz berechnen:

$$\Delta \left| \frac{a}{b} \right| (k_1, k_2 \dots k_6) = \left[ \sum_{i=1}^6 \left( \frac{\delta |a/b|}{\delta k_i} \Delta k_i \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (4.3)$$

Der typischer Fehler eines  $a/b$ -Abstandsverhältnisses wird damit durch die Unsicherheit in der Bestimmung der Röntgenposition  $\Delta P(X)$  dominiert. Die Fehler im  $a/b$ -Verhältnis von Datenpunkten, bei denen die mittleren Kristallwinkel  $\bar{\xi}(L)_1$  und  $\bar{\xi}(L)_2$  beide größer oder kleiner als der mittlere Kristallwinkel  $\bar{\xi}(X)$  während der Röntgenmessung sind, werden durch die Unsicherheit in den interpolierten Referenzposition  $P(R)_r$  dominiert und in der weiteren Datenanalyse nicht beachtet.

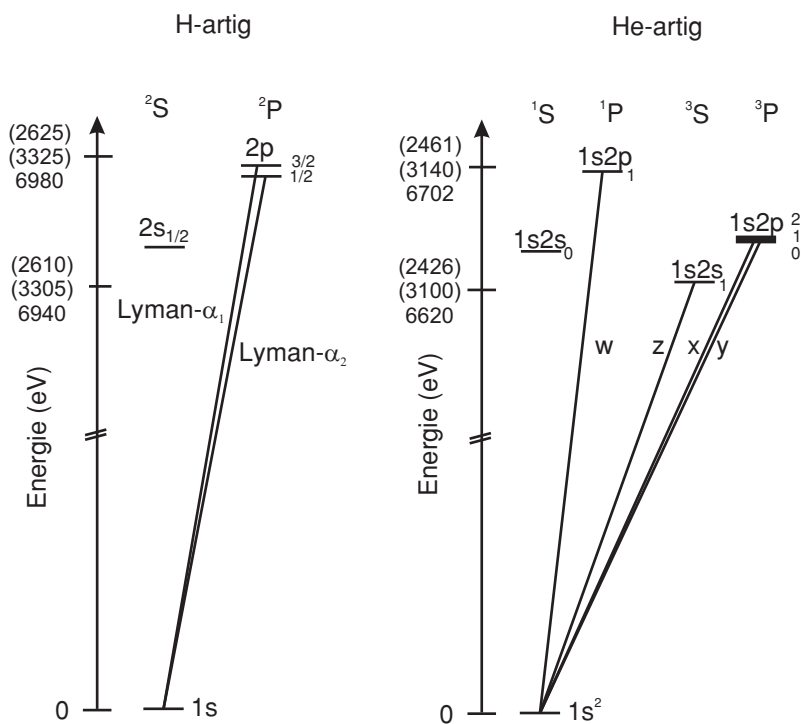
## 4.4 Experimentelle Resultate

In den Messungen dieser Arbeit wurden mit Hilfe einer Kombination aus  $a/b$ -Methode und Bond-Methode die Energien des  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  Übergangs von wasserstoffartigem  $\text{Ar}^{17+}$  und  $\text{S}^{15+}$  und des  $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$  Übergangs von heliumartigen  $\text{Ar}^{16+}$ - und  $\text{S}^{14+}$ -Ionen ohne Rückgriff auf Referenzwellenlängen vermessen. Daneben konnten die Energien des  $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$  Übergangs von heliumartigen  $\text{Fe}^{24+}$  und weiterer Linien des heliumartigen Ions relativ zu den Energien der  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  und  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  Übergänge in  $\text{Fe}^{25+}$ , und relativ zu den so

ermittelten Energien des  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergangs die Energien ausgewählter Übergänge in lithium- und berylliumartigem Eisenionen (siehe auch Tab. 4.1) experimentell bestimmt werden. Eine Absolutbestimmung der Röntgenenergien der Übergänge in den Eisenionen wurde in der Datenauswertung verworfen, da sich in der Datenanalyse zeigte, dass die absolut bestimmten Energien des  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  Übergangs in  $\text{Fe}^{25+}$  und des  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergangs in  $\text{Fe}^{24+}$  beide eine systematische Verschiebung von  $\sim 500$  meV gegenüber den theoretischen Werten aufweisen. Für diese Energieverschiebung wird angenommen, dass sie eine experimentelle Ursache hat, da die Übergangsennergien in wasserstoffartigen Ionen mit hoher Präzision zu berechnen sind (siehe auch Kap. 1.3) und daher kein Fehler der Theorie für diese Systeme im Bereich der oben angegebenen Energieverschiebung zu erwarten ist. Die Verschiebung wird daher der Tatsache zugeschrieben, dass der Si(111)-Kristall, der in den Messungen an Schwefel- und Argonionen eingesetzt wurde, für die Experimente an den Eisenionen durch einen Si(220)-Kristall ersetzt wurde. Dabei kann sich zum einen eine mechanische Verschiebung im Spektrometernaufbau ergeben haben, zum anderen ist es möglich, dass der Kristall falsch ausgerichtet worden ist (vgl. Tab. 3.5). Die Ursache der Energieverschiebung, d.h. eines möglichen systematischen Fehlers, ist bis jetzt noch nicht restlos geklärt und Gegenstand noch anhaltender Fehleranalyse. Da die Bragg-Winkel von Referenz- und untersuchter Linie allerdings gleichermaßen durch diesen möglichen systematischen Fehler beeinflusst werden und die Relativmessung daher nicht von diesem Fehler betroffen ist, können für die Energien der Eisenlinien aber weiterhin Relativwerte angegeben werden.

Die zum  $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  bzw.  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  Übergang korrespondierende Röntgenlinie bezeichnet man als Lyman- $\alpha_1$  bzw. Lyman- $\alpha_2$  Linie, die Röntgenlinie, die durch den  $1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergang hervorgerufen wird, entsprechend der Gabriel Notation [153] als  $w$  Linie. Neben der Energie des  $w$  Übergangs von  $\text{Ar}^{16+}$ - und  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen konnten relativ zur Wellenlänge der jeweiligen  $w$  Linie bei bekannter Dispersionsrelation des Spektrometers auch die Energien der  $1s2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  bzw.  $1s2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$  Übergänge, d.h. der  $x$ - bzw.  $y$ -Röntgenlinien [153], von  $\text{Ar}^{16+}$ - und  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen bestimmt werden. Dies ist möglich, da die  $x$ - und  $y$ -Röntgenlinien auf dem Detektor simultan zur  $w$  Linie beobachtet werden können, ohne dass ein Drehung des Kristalls oder der Kamera vonnöten ist, da sich die Energien dieser Linien nur um ca. 15 eV bzw. 30 eV von der der  $w$  Linie unterscheiden. Analog wurden die Energien verschiedener beryllium- und lithiumartiger dielektronischer Satelliten-Linien von  $\text{Fe}^{22+}$  bzw.  $\text{Fe}^{23+}$  relativ zu den Energien der  $r$  und  $t$  Linien (siehe Abb. 4.9) von  $\text{Fe}^{23+}$ , die relativ zur Energie der  $w$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  ermittelt wurden, bestimmt. Damit sind die Wellenlängen der so vermessenen Satelliten-Linien an die der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Fe}^{25+}$  gekoppelt. Abb. 4.9 zeigt das Grotrian-Diagramm für die in den Experimenten dieser Arbeit vermessenen Übergänge in wasserstoff- und heliumartigen Ionen, wobei die Übergänge nach der oben erwähnten Gabriel-Notation [153] bezeichnet sind. Die theoretisch berechneten Übergangsennergien für alle Übergänge, die in den Messungen dieser Arbeit untersucht wurden, sind in Tab. 4.1 aufgelistet. Für die Röntgenwellenlängenmessungen an Übergängen in S- und Ar-Ionen wurde ein Si-(111) Kristall eingesetzt, für die Messungen an Übergängen in Fe-Ionen ein Si-(220) Kristall. Damit liegen die Bragg-Winkel der in dieser Arbeit vermessenen Röntgenlinien in einem Bereich von  $\sim 28.8$ - $53.5^\circ$  und sind innerhalb der Positionierungsbereiche von Kristall und Kameras für eine Messung zugänglich.

#### 4.4. Experimentelle Resultate



**Abbildung 4.9:** Links: Termschema der  $n = 2$ - und  $n = 1$ -Niveaus für wasserstoffartige  $\text{Fe}^{25+}$ -Ionen (im Klammern sind von oben nach unten die Energieskalen für  $\text{S}^{15+}$ - und  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen angegeben). Rechts: Termschema der  $n = 2$ - und  $n = 1$ -Niveaus für heliumartige  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen (in Klammern sind von oben nach unten die Energieskalen für  $\text{S}^{14+}$ - und  $\text{Ar}^{16+}$ -Ionen dargestellt). Alle Übergänge, die in der Gabriel Notation [153] bezeichnet sind, sind, außer dem  $z$ -Übergang, der ein  $M1$ -Übergang ist,  $E1$ -Übergänge.

Die obigen Systeme bzw. Übergänge wurden aus unterschiedlichen Gründen für eine Hochpräzisionsröntgenwellenlängenmessung ausgewählt. Die Lyman- $\alpha_1$  Übergangenergien in wasserstoffartigen  $\text{S}^{15+}$ ,  $\text{Ar}^{17+}$  und  $\text{Fe}^{25+}$ -Ionen wurden zum einen deshalb vermessen, weil die Energien dieser Übergänge, wie in Kap. 1.3 beschrieben, theoretisch mit höchster Präzision berechnet werden können, da es sich bei diesen Ionen um Zwei-Körper-Systeme bestehend aus dem Atomkern und einem Elektron handelt, d.h. eine Wechselwirkung zwischen Elektronen ist in den Berechnungen nicht zu berücksichtigen. Damit erlaubt die Messung dieser Übergänge einen Test des Messaufbaus. Weicht die experimentell ermittelte zu stark von der theoretisch berechneten Übergangenergie ab, d.h. um mehr als  $1\sigma$ , so ist es wahrscheinlich, dass das Experiment mit systematischen Fehlern behaftet ist. Zum anderen kann die absolute Vermessung mit einer relativen Unsicherheit auf ppm-Niveau dieser theoretisch präzise zu berechnenden Lyman- $\alpha_1$  Übergangenergien zur Etablierung der Lyman- $\alpha_1$  Wellenlängen als Wellenlängenstandards im Röntgenbereich beitragen. Dies ist wünschenswert, da die bisher als Wellenlängenstandards im Röntgenbereich genutzten Wellenlängen von  $K_\alpha$  Übergängen in  $3d$ -Übergangsmetallen über Spektren gewonnen werden, die durch Satelliten kontaminiert sind [37]. Wie in Kap. 1.3.6 angedeutet, ist es durch Messung von Lyman- $\alpha_1$  Übergangenergien zudem möglich, die durch die QED induzierten Verschiebungen der Energieniveaus in wasserstoffähnlichen Systemen, d.h. Beiträge zur Lamb Verschiebung,

zu messen und damit die theoretischen Berechnungen zu überprüfen. Die  $w$  Übergangsenergien bzw. die Übergänge in lithium- und berylliumartigen Ionen wurden für Hochpräzisionswellenlängenmessungen ausgewählt, um experimentell zu überprüfen, welche der für helium-, lithium- oder berylliumartige Systeme, bei denen es sich um Drei-, Vier- bzw. Fünf-Körper-Systeme mit Elektron-Elektron-Wechselwirkung handelt, vorliegenden Theorien, die sich in ihrem Ansatz, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu berücksichtigen, unterscheiden, die Energien der Niveaus in welchem Bereich der Kernladungszahl  $Z$  am besten wiedergibt. Dabei wird das Spektrum der Kernladungszahl  $Z$  in den Theorien oft in einen Bereich niedriger und einen Bereich hoher Kernladungszahl eingeteilt, wobei die Grenze zwischen niedrigem und hohem  $Z$  bei ungefähr  $Z = 26$  liegt. Durch die Messung von Röntgenwellenlängen von Elementen mit unterschiedlicher Kernladungszahl  $Z$  lassen sich also QED-Effekte bzw. die Theorien, die diese beschreiben, mit hoher Präzision über einen großen Bereich von  $Z$  testen. Für die Messungen dieser Arbeit wurden drei Systeme mit unterschiedlicher Kernladungszahl  $Z$  gewählt,  $S^{14+}$ -,  $Ar^{16+}$ - und  $Fe^{22+}$ - bzw.  $Fe^{23+}$ - bzw.  $Fe^{24+}$ -Ionen.  $S^{14+}$ - und  $Ar^{16+}$ -Ionen haben nach der obigen Klassifizierung eher niedrige Kernladungszahl,  $Fe^{22+}$ -,  $Fe^{23+}$ - und  $Fe^{24+}$ -Ionen sind im Grenzbereich zwischen niedriger und hoher Kernladungszahl angesiedelt. Die Messung der Wellenlänge des  $w$  Übergangs von  $Ar^{16+}$ -Ionen hat allerdings daneben noch einen anderen Hintergrund. Ihre Energie wurde mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer im Jahr 2006 bereits mit einer relativen Unsicherheit von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 2$  ppm [43] vermessen. Mit der erneuten Messung dieser Übergangsenergie zweieinhalb Jahre nach dem erfolgreichen Experiment von 2006 lässt sich die Langzeitstabilität des Spektrometersaufbaus bzw. die Qualität der Positionierungsmechanismen für das Spektrometer auf hohem Niveau überprüfen. Besonders interessant erscheint auch die Messung der Wellenlänge des  $w$  Übergangs von  $Fe^{24+}$ -Ionen. Für die  $w$  Übergangsenergien in Ionen mit  $Z \geq 26$  liegt eine deutliche Diskrepanz zwischen experimentellen und theoretischen Werten vor (siehe auch Kap. 1.7), vor allem im Falle des  $Fe^{24+}$ , bei dem in zwei unabhängigen Messungen [64, 115] eine um 295 bzw. 465 meV höhere  $w$  Übergangsenergie bestimmt wurde als von der Theorie [30] vorhergesagt. In diesem Bereich von  $Z$  ergibt sich für einige Messungen eine  $1-2\sigma$ -Diskrepanz zwischen den Werten der experimentellen Messungen und den theoretisch berechneten Übergangsenergien.

#### 4.4.1 Experimenteller Aufbau und Datenaufnahme

Wie aus früheren Messungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer hervorging [97], können die Lyman- $\alpha$  Linien, die z.B. von Übergängen in  $Ar^{17+}$ -Ionen herrühren, nicht komplett aufgelöst werden, wenn das Spektrometer direkt am EBIT-Port montiert ist, d.h. wenn die Distanz zwischen Fallenmitte und Kristall nur  $\sim 65$  mm beträgt. Zudem ist es in dieser Konfiguration schwierig, einen experimentellen Aufbau zu schaffen, der den in Kap. 3.2.2 geforderten virtuellen Überlapp zwischen dem Quellvolumen der Röntgenstrahlung und dem Ursprung der Lichtreferenzlinien gewährleisten kann und die Montage der für Justagezwecke benötigten Spektrometerstrahlrohrkomponenten, wie z.B. der in Kap. 3.2.2 erwähnten Linsen und des Beryllium-Fensters, zulässt. Daher wurde das Spektrometer für die Messungen dieser Arbeit wie auch für die Messungen in [43] auf Kosten des Photonenflusses in einem größerem Abstand zum Fallenzentrum aufgebaut.

#### 4.4. Experimentelle Resultate

Ion	Übergang	Bezeichnung	Energie
S <sup>14+</sup>	$1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>w</i>	2460.629 [30]
S <sup>15+</sup>	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	Lyman- $\alpha_1$	2622.699 [26]
Ar <sup>16+</sup>	$1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>w</i>	3139.582 [30]
Ar <sup>16+</sup>	$1s2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>x</i>	3126.290 [30]
Ar <sup>16+</sup>	$1s2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>y</i>	3123.534 [30]
Ar <sup>17+</sup>	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	Lyman- $\alpha_1$	3322.992 [26]
Fe <sup>24+</sup>	$1s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>w</i>	6700.435 [30]
Fe <sup>24+</sup>	$1s2p\ ^3P_2 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>x</i>	6682.334 [30]
Fe <sup>24+</sup>	$1s2p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$	<i>y</i>	6667.579 [30]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2p_{3/2}^2\ ^2S_{1/2} \rightarrow 1s^22p_{3/2}\ ^2P_{3/2}$	<i>m</i>	6679.463 [30]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2s_{1/2}2p_{3/2}\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^22s_{1/2}\ ^2S_{1/2}$	<i>t</i>	6676.226 [154]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2s_{1/2}2p_{3/2}\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^22s_{1/2}\ ^2S_{1/2}$	<i>q</i>	6662.235 [154]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2p_{3/2}^2\ ^2P_{3/2} \rightarrow 1s^22p_{3/2}\ ^2P_{3/2}$	<i>a</i>	6659.372 [30]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2s_{1/2}2p_{3/2}\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^22p_{1/2}\ ^2P_{1/2}$	<i>d</i>	6657.584 [30]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2s_{1/2}2p_{1/2}\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^22s_{1/2}\ ^2S_{1/2}$	<i>r</i>	6653.297 [154]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2p^2\ ^2D_{5/2} \rightarrow 1s^22p_{3/2}\ ^2P_{3/2}$	<i>j</i>	6645.451 [30]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2s_{1/2}2p_{3/2}\ ^2P_{1/2} \rightarrow 1s^22p_{3/2}\ ^2P_{3/2}$	<i>c</i>	6641.891 [30]
Fe <sup>23+</sup>	$1s_{1/2}2p_{1/2}2p_{3/2}\ ^2P_{5/2} \rightarrow 1s^22s_{1/2}\ ^2P_{3/2}$	<i>e</i>	6622.733 [30]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3P_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	5	6641.358 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	6	6637.447 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3S_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_1$	6	6636.026 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3S_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	1	6624.680 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3D_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_1$	1	6622.203 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3P_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_0$	1	6620.081 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3D_2 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_1$	1*	6617.608 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3P_2 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	1*	6616.548 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3P_2 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^1P_1$	4	6613.548 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3D_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	2	6609.846 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3D_3 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	2	6609.494 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3D_2 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	3	6606.324 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^3P_1 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^3P_2$	3	6604.916 [155]
Fe <sup>22+</sup>	$1s2s2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 1s2s2p^2\ ^1P_1$	3	6601.435 [155]

**Tabelle 4.1:** Theoretisch berechnete Übergangenergien für die Übergänge, die in den Messungen dieser Arbeit untersucht wurden.

Die Resultate dieser Arbeit wurden in zwei unterschiedlichen Strahlzeiten an zwei verschiedenen Elektronenstrahlionenfallen, der Heidelberg- und der FLASH-EBIT, erzielt. In der ersten Strahlzeit vom Dezember 2008 wurde das Heidelberg-Röntgenspektrometer am Ende des evakuierten Röntgenspektrometerstrahlrohres senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert. Der Abstand zwischen dem Fallenzentrum und den Strahlrohrelementen betrug dabei für das Schlüsselloch 40(2) mm, für das Beryllium-Fenster 501(2) mm, für den kleinen Spiegel, der die Lichtreferenzlinien in den Strahlengang der Röntgenstrahlung einkoppelt (siehe Kap. 3.2.2), 523(2) mm, für den Kristall 1523(2) mm und für die CCD Detektoren schließlich 1886(2) mm. In dieser Strahlzeit wurden die Wellenlängen der Lyman- $\alpha_1$  und der  $w$  Röntgenlinie (siehe auch Abb. 4.9), die von Übergängen in  $\text{Ar}^{17+}$  bzw.  $\text{Ar}^{16+}$  herrühren, ohne Rückgriff auf Referenzwellenlängen und relativ zur Wellenlänge der  $w$  Linie auch die Wellenlängen der  $x$ - und  $y$ -Linie von  $\text{Ar}^{16+}$  vermessen. In der zweiten Strahlzeit in Zeitraum zwischen Mai und Dezember 2009 wurde das Spektrometer dann, motiviert durch die Überlegungen in Kap. 3.3.4, an der FLASH-EBIT parallel zum Elektronenstrahl aufgebaut. Da der Port hinter dem Kollektor im Vergleich zu einem der Ports, die unter  $90^\circ$  zum Elektronenstrahl montiert sind, zum Fallenzentrum einen größeren Abstand besitzt, ergab sich dabei für das Spektrometer gezwungenermaßen ein größerer Abstand zum Fallenzentrum. Um den virtuellen Überlapp zwischen Röntgenquelle, d.h. EBIT-Fallenzentrum, und dem Ursprung der Lichtreferenzlinien für beide experimentellen Konfigurationen aufrechtzuerhalten, musste für das parallel zum Elektronenstrahl montierte Spektrometer ein zusätzlicher Abstandshalter für den Lichtaufbau (siehe Kap. 3.2.2) in Form eines präzise konstruierten Strahlrohres eingesetzt werden. Außerdem mussten die Linsen, die für die Abbildung der Ionenwolke im optischen Bereich in der Kameraebene genutzt werden, die benötigt wird, um das Spektrometer präzise ausrichten zu können, besonders Linse 2 (siehe Abb. 3.7), durch Linsen mit längerer Brennweite ersetzt werden, was eine Konstruktion neuer Linsenhalter erforderte. Der Abstand zwischen Fallenzentrum und Beryllium-Fenster betrug für diese zweite Strahlzeit 958 mm, bzw. für den Kristall 1992 mm und für die CCD Detektoren 2331 mm. In dieser experimentellen Konfiguration wurden die Wellenlängen der Lyman- $\alpha_1$  und der  $w$  Röntgenlinie (siehe auch Abb. 4.9) von Übergängen in  $\text{S}^{15+}$ - und  $\text{S}^{14+}$ -Ionen ohne Rückgriff auf Referenzlinien bestimmt. Daneben konnten relativ zu den Wellenlängen der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Fe}^{25+}$  die Wellenlängen der  $w$ ,  $x$  und  $y$  Linien von  $\text{Fe}^{24+}$  und relativ zur  $w$  Linie die Wellenlängen ausgewählter Linien von Übergängen in lithium- und berylliumartigen Eisenionen (siehe Tab. 4.1) vermessen werden. Wie bereits in Kap. 2.1.3 angedeutet, betrug die Strahlenergie im Falle der Messungen an S-Ionen ca. 7.5 keV, für die Messungen an Ar-,  $\text{Fe}^{24+}$ - und  $\text{Fe}^{25+}$ -Ionen ca. 9.5 keV. Für die Experimente an  $\text{Fe}^{23+}$ - und  $\text{Fe}^{22+}$ -Ionen wurde die Strahlenergie zwischen 5.13 und 5.29 keV variiert (siehe auch Kap. 4.4.8). Der Strahlstrom wurde für die Messungen auf 360-450 mA gesetzt und die Spannungen an den Driftröhren links und rechts der zentralen Driftröhre wurden auf 0-250 V eingestellt. Auf diese Art und Weise konnten ausreichende Zählraten für das Signal der Röntgenlinien erreicht werden (für eine detailliertere Diskussion von Ionisierungsquerschnitten, Ionisations- und Übergangsraten siehe auch [36]). Die CCD Detektoren wurden während den Messungen nicht bewegt, um ein resultierendes Drehmoment zu vermeiden. Allein der Kristall wurde in verschiedene Positionen gebracht. Die Kristallwinkel  $\xi$  (siehe auch Kap. 3.1.1) wurden dabei so gewählt, dass die  $a/b$ -Verhältnisse ungefähr das Intervall  $a/b = [0, 2 \dots 4]$  überstreichen.



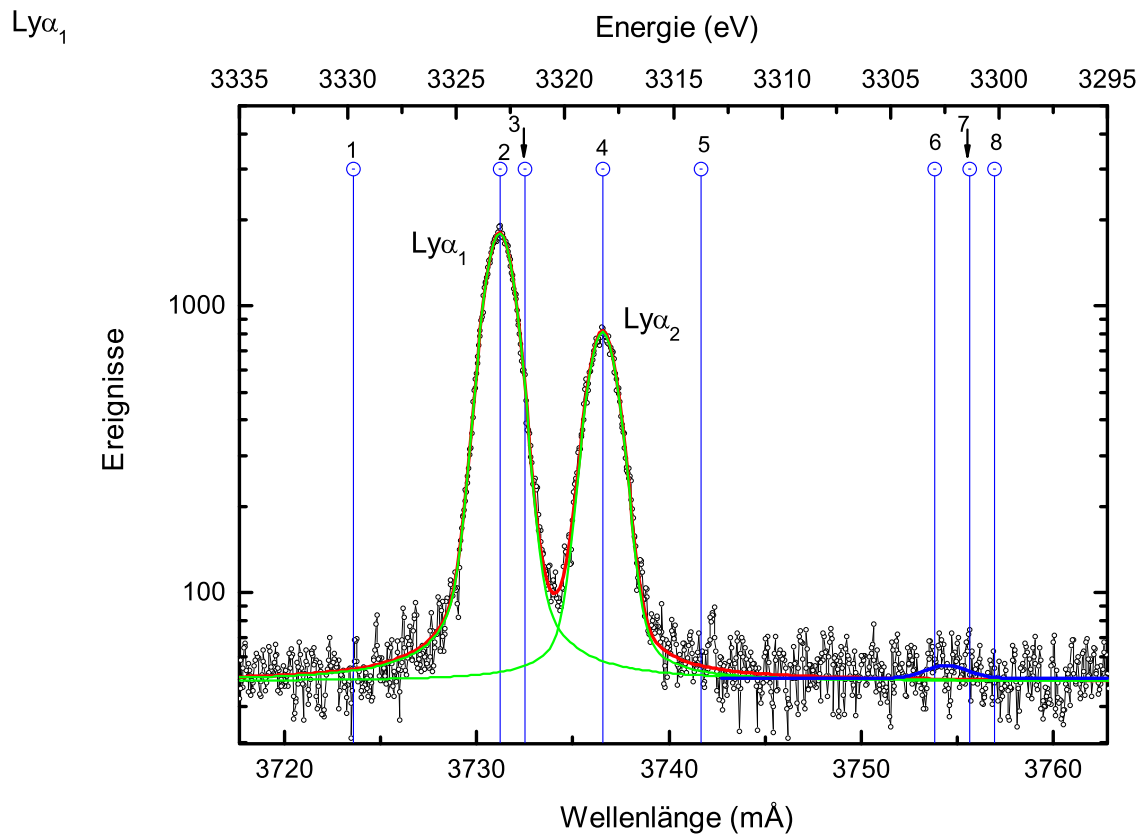
Dabei nähern sich die Messpunkte von beiden Seiten, d.h.  $a/b \geq 1$  und  $a/b \leq 1$  alternierend dem Verhältnis  $a/b \approx 1$ . Dies soll sicherstellen, dass jegliche Veränderung in den äußeren Gegebenheiten, wie z.B. eine Änderung der Temperatur, sich gleichmäßig auf beide Bereiche, die mit  $a/b \geq 1$  und die mit  $a/b \leq 1$  auswirkt, so dass eine systematische Veränderung der Krümmung der  $a/b$ -Kurve ausgeschlossen werden kann. Zudem wurden die Spektren abwechselnd mit Detektor 1 und 2 aufgenommen, so dass die Messergebnisse beider Detektoren möglichst gleich durch äußere Gegebenheiten beeinflusst werden und das Resultat der Messung so unbeeinflusst bleibt. Ein Messzyklus besteht für jede Messung immer aus einer einstündigen, bzw. für Montage des Röntgenspektrometers an der FLASH-EBIT zweistündigen, Röntgenaufnahme, der eine  $\sim 5$ -sekündige Aufnahme der Lichtreferenzlinien vorangeht und folgt. Während der Messungen wurde der Winkel des Kristalls sekundlich ausgelesen (siehe Abb. 4.8). Die Raumtemperatur wurde alle 20 s aufgezeichnet. Für die Lyman- $\alpha_1$  Linie vom Übergang in  $\text{Ar}^{17+}$  bzw.  $\text{S}^{15+}$  bzw.  $\text{Fe}^{25+}$  wurden insgesamt 39 bzw. 43 bzw. 28 Spektren, für die  $w$  Linie vom Übergang in  $\text{Ar}^{16+}$  bzw.  $\text{S}^{14+}$  bzw.  $\text{Fe}^{24+}$  39 bzw. 84 bzw. 54 Spektren aufgenommen. Für die Relativmessungen der Linien des berylliumartigen und lithiumartigen Eisens wurden zusätzlich 16 Spektren akkumuliert.

#### 4.4.2 Details der Röntgenspektren

Für die Lyman- $\alpha$  Spektren wurde mit Hilfe des in Kap. 4.3 vorgestellten automatisierten Datenanalyseprogramms an jedes Röntgenlinienprofil ein Gaußfit gefittet. In den  $w$  Spektren wurde nur ein Gauß an das Profil der  $w$  Linie gefittet. Aufgrund des großen Abstandes zwischen der Position der  $w$  Linie und den Positionen der  $x$ - und der  $y$ -Linie wurde unter Vernachlässigung der  $x$ - und  $y$ -Linie kein Effekt auf die Position der  $w$  Linie beobachtet.

Aus den Fit-Resultaten wurden die  $a/b$ -Verhältnisse und ihre Fehler nach Gl. 3.2 und Gl. 4.3 bestimmt. Bevor die  $a/b$ -Verhältnisse berechnet wurden, wurden Summenspektren gebildet, um die Symmetrie der Röntgenlinien zu überprüfen. Da die Röntgenlinien in allen Spektren einer Messung, die in verschiedenen Kristallstellungen aufgenommen werden, auf unterschiedlichen Positionen liegen, mussten die Spektren, um ein Summenspektrum bilden zu können, bezüglich der Röntgenlinien zunächst in Überlapp gebracht und dafür gegeneinander verschoben werden. Dieser Vorgang wurde mittels eines Labview-Programms durchgeführt. Eine genaue Beschreibung des Programms findet sich in [97]. Abb. 4.10 zeigt ein auf diese Weise erzeugtes Summenspektrum der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Ar}^{17+}$ .

Die Summenspektren zeigen bisher keinen Hinweis auf Satelliten-Linien (siehe auch Kap. 2.1.3), so dass die Röntgenwellenlängenmessungen prinzipiell nicht durch einen systematischen Fehler, der durch Satelliten-Linien verursacht wird, in ihrer erreichbaren relativen Genauigkeit  $\Delta\lambda/\lambda$  limitiert sind. Diese Aussage wird durch eine eingehende Betrachtung von Abb. 4.10 gestützt. Die vertikalen, blauen, nummerierten Linien in der Abbildung kennzeichnen jeweils die Positionen möglicher Satelliten-Linien (Linien 1, 3, 5, 6, 7 und 8) [156], die von Übergängen in heliumartigem  $\text{Ar}^{16+}$ -Ionen herrühren, und deren Energie nahe an den Energien der Lyman- $\alpha$  Linien liegen, sowie die Positionen der Lyman- $\alpha$  Linien (Linie 2 und 4). Die Nummerierung der Linien bezieht sich dabei auf die in Tab. 4.2 angegebene Bezeichnung der Übergänge. Der Abbildung ist zu ent-



**Abbildung 4.10:** Summensektren der Lyman- $\alpha$  Übergänge in  $\text{Ar}^{17+}$ . Die vertikalen blauen Linien repräsentieren berechnete Peakpositionen möglicher theoretisch vorhergesagter Satelliten-Linien [156] bezüglich ihrer Energie. Die Lyman- $\alpha_{1,2}$  Linienprofile (Peak 2 und Peak 4) sowie das Satelliten-Linienprofil, das zu Peak 7 korrespondiert, wurden mit Hilfe von Voigtfits gefittet [86].

nehmen, dass lediglich die Satelliten-Linie mit der Nummer 3 einen Einfluss auf die Peakposition und damit auf die Energie der Lyman- $\alpha_1$  Linie haben könnte. Um den möglichen Einfluss von

Nummer	Übergang
1	$2p^2\ ^1S_0 \rightarrow 1s2p\ ^3P_1$
2	$2p^2\ P_{3/2} \rightarrow 1s\ ^1S_{1/2}$
3	$2s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$
4	$2p^2\ P_{1/2} \rightarrow 1s\ ^2S_{1/2}$
5	$2p^2\ ^1S_0 \rightarrow 1s2p\ ^1P_1$
6	$2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 1s2p\ ^3P_1$
7	$2s2p\ ^1P_1 \rightarrow 1s2s\ ^1S_0$
8	$2p^2\ ^1D_2 \rightarrow 1s2p\ ^3P_2$

**Tabelle 4.2:** Übergänge, die zu den in Abb. 4.10 dargestellten nummerierten Röntgenlinien korrespondieren.

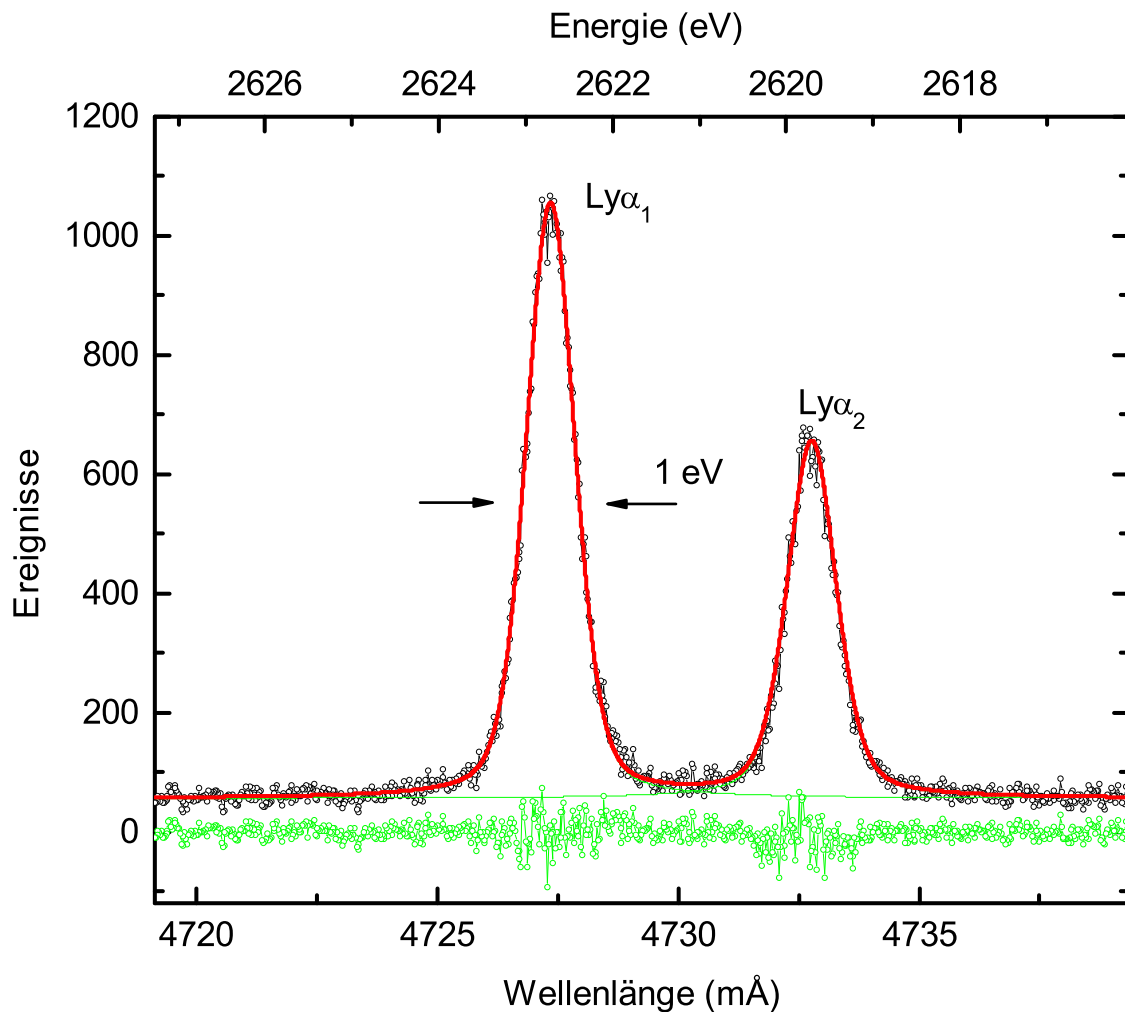
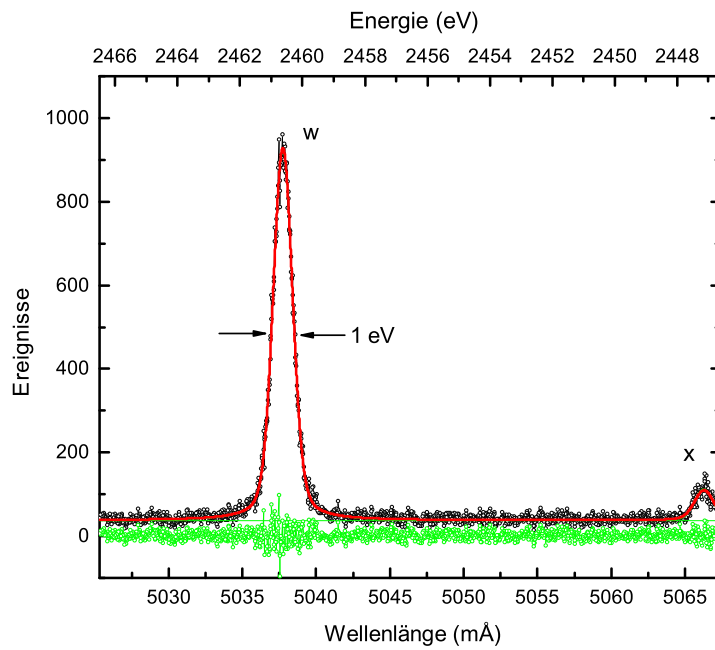
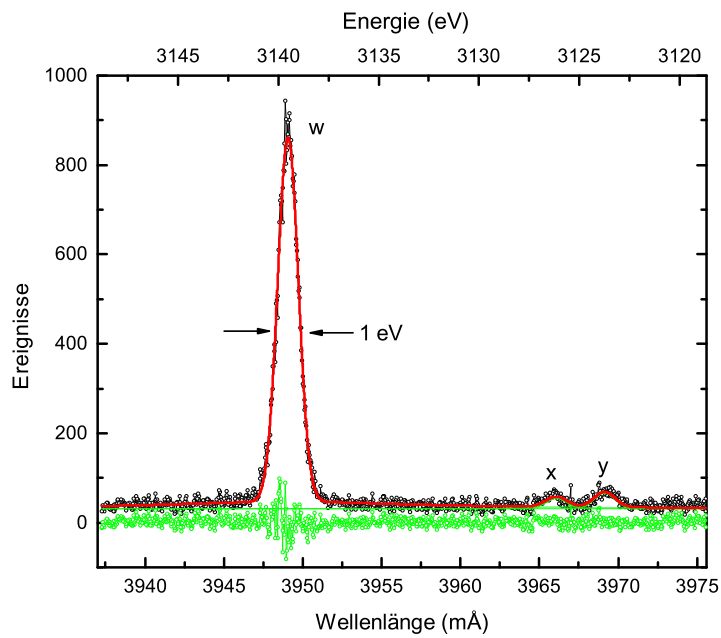


Abbildung 4.11: Summumspektrum der Lyman- $\alpha$  Linien von  $S^{15+}$ -Ionen mit Voigtfit und Residuen.

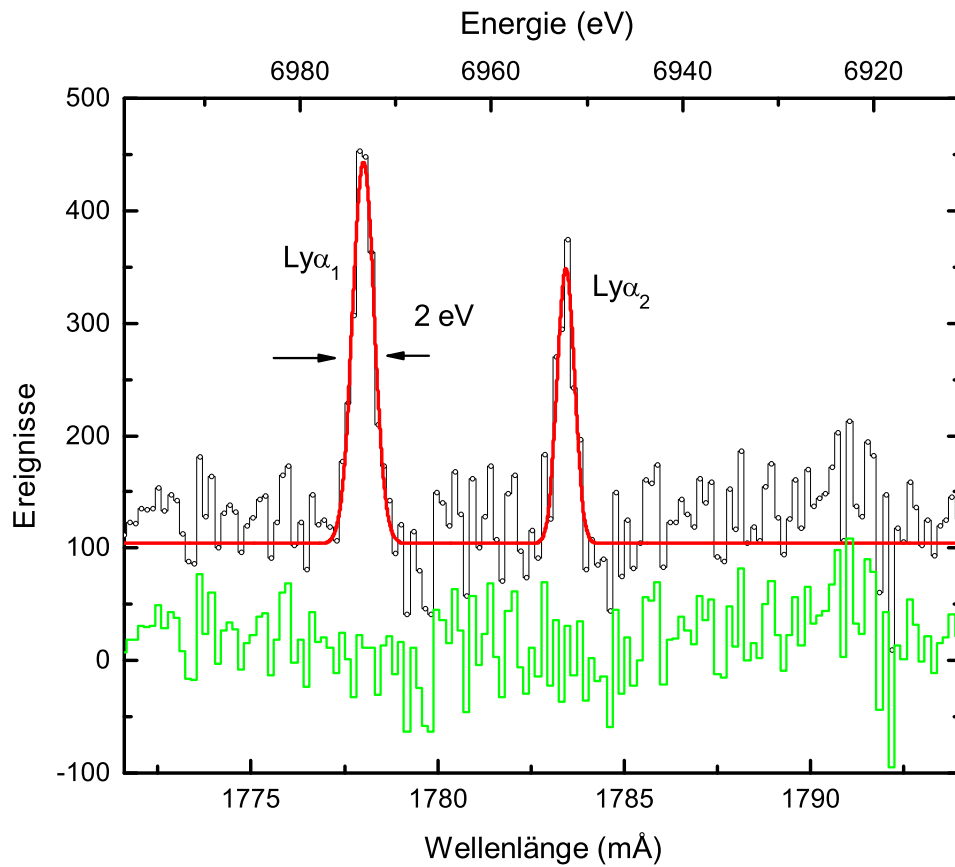
Satellit 3, d.h. die Linienintensität von Linie 3, abzuschätzen, kann Satelliten-Linie 7 herangezogen werden. Diese wird durch einen Übergang in einem heliumartigen Ar-Ion verursacht, der das gleiche Ausgangsniveau hat, wie der Übergang in einem Ar<sup>17+</sup>-Ionen, der Satelliten-Linie 2 bedingt. Dabei ist zu beachten, dass Satelliten-Linie 7 eine  $\sim 100$ -mal stärkere Intensität aufweisen sollte als Satelliten-Linie 3, da erstere von einem  $E1$ -Übergang herrührt, der eine  $\sim 100$ -mal stärkere Übergangswahrscheinlichkeit als der  $M1$ -Übergang, von dem letztere Linie stammt, aufweist. Die Intensität bzw. Amplitude der Satelliten-Linie 7 wurde über einen Voigtfit (eine genauere Analyse der Röntgenlinienprofile findet sich in [97]) an eine Peakposition bezüglich der Energie, die annähernd der theoretisch vorhergesagten Energie der Satelliten-Linie entspricht, bestimmt. Vergleicht man diese Amplitude mit der Peakamplitude für die Lyman- $\alpha_1$  Linie, so ergibt sich für die Intensitäten der beiden Linien ein Verhältnis von 0.4%, d.h. die Intensität der Lyman- $\alpha_1$  Linie ist etwa  $\sim 250$ -mal stärker als die der Satelliten-Linie 7. Daraus lässt sich für Satelliten-



**Abbildung 4.12:** Summenspektrum der  $w$  und  $x$ -Linien (siehe auch Abb. 4.9) von  $S^{14+}$ -Ionen mit Voigtfit und Residuen.



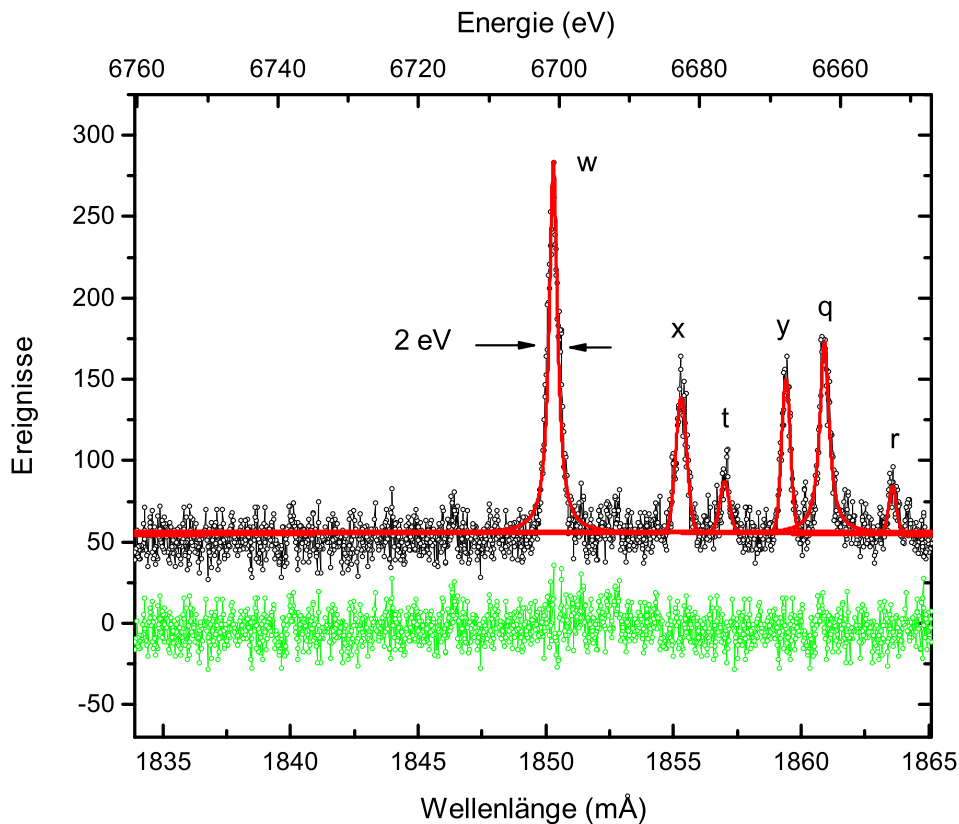
**Abbildung 4.13:** Summenspektrum der  $w$ ,  $x$ - und  $y$ -Linien (siehe auch Abb. 4.9) von  $Ar^{16+}$ -Ionen mit Voigtfit und Residuen.



**Abbildung 4.14:** Achtfach gebinntes Summenspektrum der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Fe}^{25+}$ -Ionen mit Voigtfit und Residuen.

Linie 3 schließen, dass die Intensität dieser Linie nur 0.004% der Intensität der Lyman- $\alpha_1$  Linie beträgt, d.h. dass die Intensität der Lyman- $\alpha_1$  Linie ungefähr  $\sim 25000$ -mal größer ist als die der möglichen Satelliten-Linie 7. Nach diesen Betrachtungen sind die Wellenlängenmessungen dieser Arbeit in ihrem relativen Fehler  $\Delta\lambda/\lambda$  somit nicht durch einen systematischen Fehler limitiert, der durch Kontamination der Röntgenspektren mit Satelliten-Linien verursacht wird. Will man den Einfluss von Satelliten-Linien auf das Messergebnis im Bereich einer möglichen Verschiebung der Röntgenlinienenergien von ca. 0.1 ppm untersuchen, so ist es in Zukunft allerdings notwendig, Summenspektren mit höherer Zählstatistik zu generieren, so dass das Vorhandensein möglicher Satelliten-Linien vollständig ausgeschlossen werden kann.

Abb. 4.11, 4.12, 4.13, 4.14 und 4.15 zeigen weitere Summenspektren für in dieser Arbeit spektroskopierte Röntgenlinien mit den korrespondierenden Voigtfits und Residuen. Die Bezeichnung der Linien in den Spektren bezieht sich auf Tab. 4.1. Auch in diesen Spektren ist keine Kontamination durch Satelliten-Linien erkennbar, besonders wenn man die Spektren mit den Satelliten-behafteten Spektren aus Kap. 2.1 vergleicht. Alle Linienprofile werden durch Voigtprofile sehr gut wiedergegeben, während die Peakhöhe und die Flanken durch einen Gaußfit unterrepräsentiert werden.

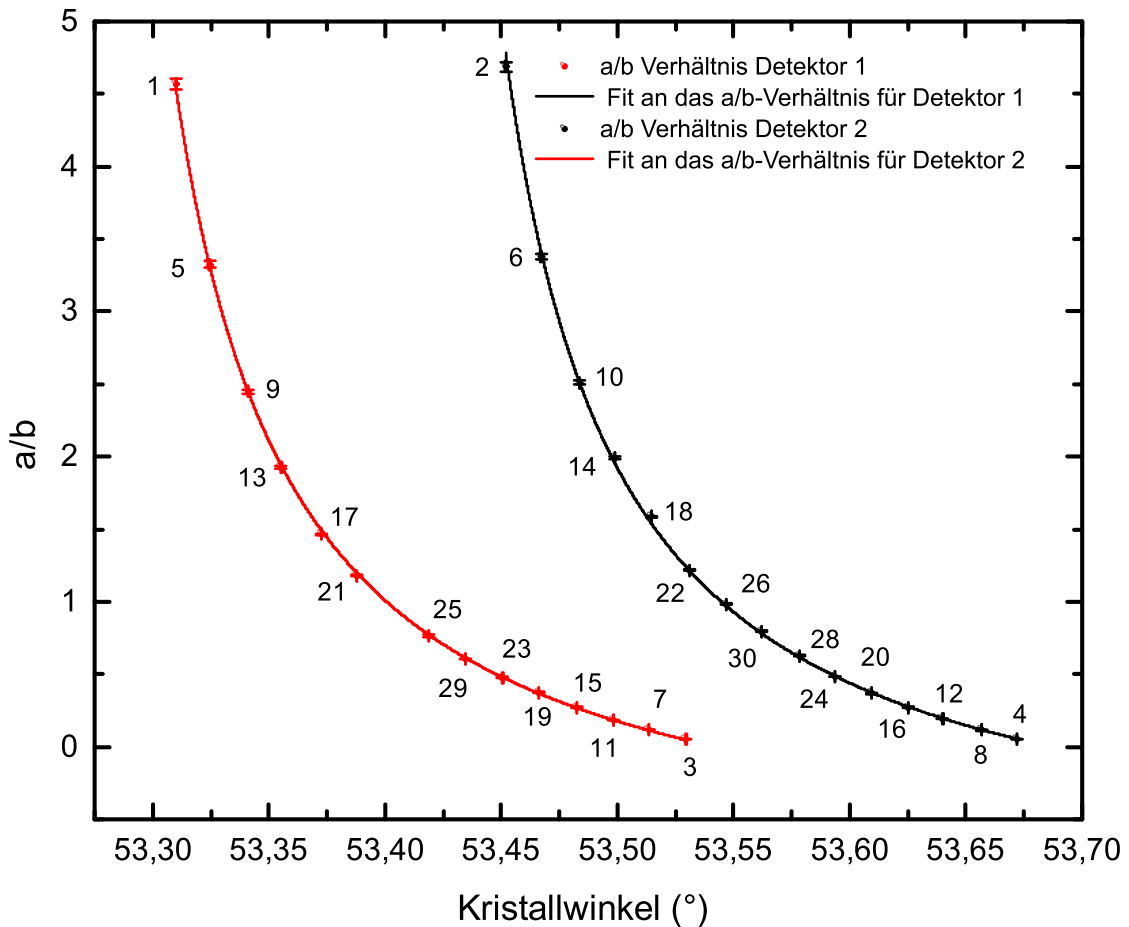


**Abbildung 4.15:** Sumpenspektrum der  $w$ ,  $x$ - und  $y$ -Linien (siehe auch Abb. 4.9) von  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen mit Voigtfit und Residuen.

Dies deckt sich mit der Erwartung, dass das Lorentzprofil in den Sumpenspektren aufgrund der höheren Statistik im Vergleich zu den Einzelspektren klarer zu erkennen sein sollte.

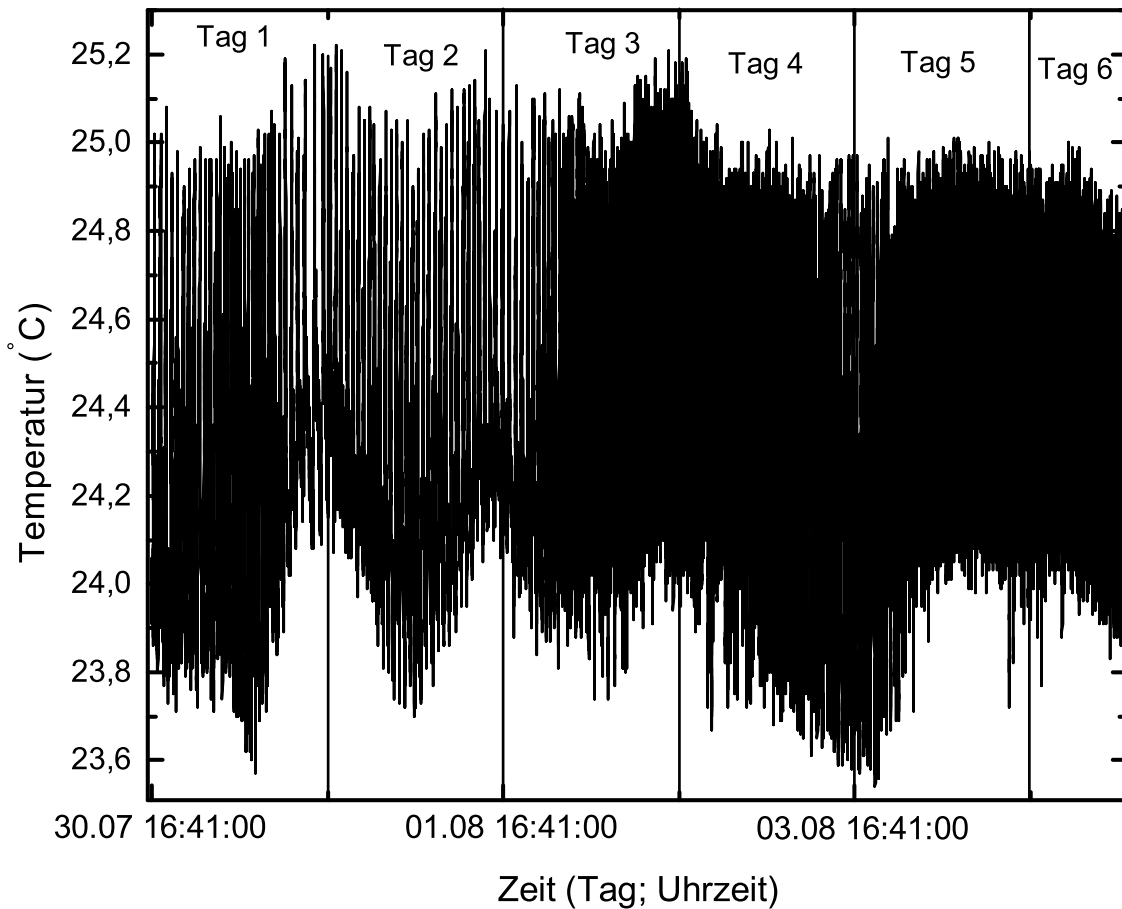
#### 4.4.3 Analyse der $a/b$ -Abstandsverhältnisse

Nachdem die Röntgenspektren wie im letzten Kapitel besprochen auf dem jetzigen Niveau der relativen Unsicherheit in einer Wellenlängenmessung  $\Delta\lambda/\lambda$  nicht durch Satelliten-Linien beeinflusst werden, kann eine weitere Analyse der Daten vorgenommen werden, die dann wie in Kap. 4.2 besprochen, die  $a/b$ -Verhältnisse für die Röntgenlinien auf beiden Detektoren liefert. Abb. 4.16 stellt das so ermittelte Verhältnis für beide Detektoren für die  $w$  Linie (siehe auch Abb. 4.9) von  $\text{S}^{14+}$ -Ionen als Funktion des Kristallwinkels  $\xi$  zusammen mit den Fits der jeweiligen  $a/b$ -Funktion (Gl. 3.2) beispielhaft dar. Für die Fits wurden die beiden  $a/b$ -Verhältnisse für die beiden Detektoren unabhängig voneinander gefittet, da die Fitparameter  $p$ ,  $q$  und  $L$  (Gl. 3.2) zwischen den beiden Detektoren variieren können, weil der Abstand der Detektoren zum Fallenzentrum  $L$  aufgrund der Fertigungstoleranzen des Spektrometers leicht unterschiedlich sein kann. Für beide Detektoren wurden dabei  $p$  und  $q$  zu  $p = q = (a + b)/2$  gesetzt. Obwohl  $L$  in einer unabhängigen



**Abbildung 4.16:**  $a/b$ -Verhältnisse aus der Analyse der  $w$  Röntgenspektren von  $S^{14+}$ -Ionen. Jedes Diagramm ist durch eine Ordnungszahl gekennzeichnet.

Messung bestimmt worden war (siehe Kap. 3.3.8), ging dieser Parameter als freier Parameter in den Datenfit ein. Damit ließ sich überprüfen, ob man über die Fits der  $a/b$ -Funktion an die  $a/b$ -Verhältnisse für die beiden Detektoren innerhalb der Fehlerbalken gleiche Werte für den Parameter  $L$  erhält, d.h. ob die Detektoren im Experiment gleich weit vom Fallenzentrum entfernt sind. Diese Analyse ergab innerhalb der Fehlerbalken eine Übereinstimmung von  $L$  für die beiden Detektoren. Dieses Resultat stimmt mit den Ergebnissen der Messungen von  $L$  für die beiden Detektoren (siehe Kap. 3.3.8) überein. Die Fehler im  $a/b$ -Verhältnis und im Kristallwinkel  $\xi$  sind sehr gering, d.h. geringer als die Datenpunktgröße, und sind daher in Abb. 4.16 kaum oder gar nicht zu erkennen. Die Zahlen an den Datenpunkten spiegeln die Messabfolge, mit der die Datenpunkte aufgenommen wurden, wider. Wie bereits in Kap. 4.4.1 besprochen wurden die Datenpunkte abwechselnd für die Bereiche  $a/b \leq 1$  und  $a/b \geq 1$  aufgenommen, wobei die Messung alternierend zwischen den Detektoren 1 und 2 erfolgte. Die Messpunkte liegen so in einem Bereich von  $\Delta a/b = 2.00$  um  $a/b = 2.25$ . Der Datenpunkt 27 ist nicht in der Darstellung enthalten, da während der Aufnahme dieses Spektrums der Elektronenstrahl der EBIT über einen größeren Zeitraum ausgefallen



**Abbildung 4.17:** Temperatur während der Messung der  $w$  Übergangsenergie von  $S^{14+}$  (Tag 1-3) und danach (Tag 4-6). Die Temperatur wurde alle 20 s ausgelesen. Die vertikalen Linien zeigen Tage an.

war, so dass die Zählstatistik des Spektrums nur einen Gaußfit an das Röntgenlinienprofil mit sehr großem Fehler in der Peakmaximumbestimmung zulässt. Die Auswertung der jeweiligen  $a/b$ -Graphen ergibt dann nach Gl. 3.3 die Bragg-Winkel  $\theta'$  der vermessenen Linien. Dies gilt auch für Relativmessungen, die den  $a/b$ -Plot der Referenzlinie und der untersuchten Linie verwenden.

Abb. 4.17 zeigt die Temperaturentwicklung während der Messsequenz (Tag 1-3) und danach (Tag 4-6). Die Temperatur während der Sequenz variiert auf einer Skala von  $\sim \pm 0.6^\circ$  mit einer Standardabweichung von  $\sim \pm 0.3^\circ$ . Eine frühere Messung der  $a/b$ -Verhältnisse bei verschiedenen Temperaturen und gleichem Kristallwinkel hatte bereits gezeigt, dass die in einer solchen Messung bestimmten  $a/b$ -Verhältnisse innerhalb ihrer Fehlerbalken überlappen [97]. Daher wurden die  $a/b$ -Verhältnisse nicht für die Temperatur während der Aufnahme der zugehörigen Spektren korrigiert. Eine solche Korrektur führt eher zu zusätzlichen Fehlern in der Datenanalyse als dass sie die Präzision der Wellenlängenmessung erhöht, da die Temperaturabhängigkeit der Datenpunkte eher willkürlich modelliert werden müsste. Die Temperatur geht daher lediglich über die Kristallgitterkonstante in die Datenauswertung ein.



##### 4.4.4 Bestimmung der Röntgenwellenlängen

Wie angemerkt können die Bragg-Winkel  $\theta'$  der vermessenen Röntgenlinien entweder ohne Rückgriff auf Referenzlinien aus den zugehörigen  $a/b$ -Graphen der beiden Detektoren für die jeweilige Röntgenlinie selbst oder aber für Relativmessungen mit Referenzlinien über die  $a/b$ -Graphen der Referenz- und der untersuchten Linie auf ein und demselben Detektor nach Gl. 3.3 bestimmt werden. Die so ermittelten Werte für die Bragg-Winkel  $\theta'$  müssen dann mit Hilfe der in Kap. 3.3.9 bestimmten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  für die Linienkrümmung entsprechend Gl. 3.11 korrigiert werden, so dass man die tatsächlichen Bragg-Winkel  $\theta$  erhält. Für Messungen mit Referenzlinien ist dabei zu beachten, dass die Referenz- und die untersuchte Linie unterschiedliche Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  aufweisen und für die Datenanalyse lediglich die Differenz in den Korrekturwinkeln eine Rolle spielt. Tabellen 4.3 und 4.4 listen die gemessenen Bragg-Winkel  $\theta'$  (ohne Linienkrümmung) und die tatsächlichen, für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  korrigierten Bragg-Winkel  $\theta$  (mit Linienkrümmung) für die Röntgenwellenlängenmessungen an Übergängen von S- und Ar-Ionen auf. Tab. 4.5 gibt die gemessenen Energien für Übergänge in Eisenionen wieder. Wie schon erwähnt wurden die Bragg-Winkel  $\theta'$  für die Lyman- $\alpha_1$  Linien von  $S^{15+}$ - und  $Ar^{17+}$ -Ionen und für die  $w$  Linien (siehe Abb. 4.9) von  $S^{14+}$ - und  $Ar^{16+}$ -Ionen ohne Rückgriff auf Referenzlinien bestimmt. Den Bragg-Winkel  $\theta'$  der  $w$  Linie von  $Fe^{24+}$  erhielt man mittels  $a/b$ -Graphen relativ zu den Bragg-Winkeln der Lyman- $\alpha$  Linien von  $Fe^{25+}$ . Die Bragg-Winkel  $\theta'$  für die  $x$  und  $y$  Linien (siehe Abb. 4.9) von  $Ar^{16+}$ - und  $Fe^{24+}$ -Ionen und für die Linien lithium- und berylliumartiger Eisenionen (siehe auch Tab. 4.1) wurden mit Hilfe der Dispersionsrelation relativ zur jeweiligen  $w$  Linie bzw. ausgewählten Linien von  $Fe^{23+}$  ( $t$  und  $r$ ) ermittelt. Die Linien  $t$  und  $r$  selbst wurden relativ zur  $w$  Linie vermessen. Außer für die Messungen an den Fe-Ionen, Si(220)-Kristall, wurde ein Si(111)-Kristall verwendet. Die Eigenschaften dieser Kristalle, d.h. ihre Oberflächenbeschaffenheit, der Winkel  $\delta$  zwischen Oberflächen- und Gitternormale etc., wurden von der röntgenoptischen Abteilung der Universität Jena unter der Leitung E. F. Förster vermessen. Die Resultate dieser Messung sowie ihre Implikationen für das Experiment finden sich in [51]. Dort wird auch der durch den Winkel  $\delta$  zwischen Oberflächen- und Gitternormale hervorgerufene systematische Fehler für die Röntgenwellenlängenmessungen diskutiert. Somit können für die Berechnung der Übergangsenergien die von CODATA [50] empfohlenen Werte für die Si(111)- und die Si(220)-Gitterkonstante verwendet werden, die direkt an optische Standards und damit die SI-Einheiten gekoppelt sind. Für die Si(111)-Gitterkonstante gilt im Vakuum bei  $22.5^\circ$   $2d = 6.27120246(16)\text{\AA}$ , für die des Si(220)-Kristalls  $2d = 3.84031152(10)\text{\AA}$ . Diese Werte für die Gitterkonstanten müssen mit Hilfe des Temperaturausdehnungskoeffizienten für Silizium bei Raumtemperatur  $2.60 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  [50] korrigiert werden. Die mittleren Temperaturen während den Messungen sind dabei zusammen mit ihren Fehlern, die sich auf die Standardabweichung von diesem Mittelwert beziehen, und den dazugehörigen Werten für die zweifachen Gitterkonstanten  $2d$  in Tab. 4.6 angegeben. Dabei bezieht sich die Nummer der Messung auf die Bezeichnungen in Tab. 4.3, 4.4 und 4.5. Die Fehler für die Werte von  $2d$  ergeben sich aus den Fehlern in der Temperaturbestimmung während des Messzyklus.

Bei der Berechnung der Übergangsenergien aus den Bragg-Winkeln ist das modifizierte Bragg-Gesetz (siehe Gl. 2.7) zu verwenden, das die Brechungsindizes der Kristalle (siehe Tab. 2.6) be-

rücksichtigt. Die Umrechnung der ermittelten Wellenlänge  $\lambda$  in die entsprechende Übergangsenergie erfolgt mit der Konstante  $hc = 1.239841875 \cdot 10^{-6}$  eVm [50]. Die Übergangsenergien für die parallel zu den Lyman- $\alpha_1$  in den Spektren detektierten Lyman- $\alpha_2$  Linien wurden nicht bestimmt, da die Linien nicht immer zwischen den sichtbaren Lichtreferenzlinien lagen und die Intensität des Signals für diese Linien deutlich geringer war als für die Lyman- $\alpha_1$  Linien.

Die Fehlerangaben für die Übergangsenergien wurden nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz aus den einzelnen Fehlerbeiträgen  $\Delta E$ , die in Tab. 4.7 einzeln aufgelistet sind, für jeden Messzyklus berechnet. Die statistische Unsicherheit bezeichnet dabei den Anteil an der Gesamtunsicherheit in der Bestimmung der Übergangsenergie, der durch die Unsicherheit in der Bestimmung des Bragg-Winkels  $\theta$  über den Fit von Gl. 3.2 an die  $a/b$ -Verhältnisse zustande kommt. Diese Unsicherheit wird damit durch die Unsicherheit in der Bestimmung der Peakpositionen der Lichtreferenzlinien und der Röntgenlinien und die Ungenauigkeit, mit der das Winkelmessgerät ausgelesen werden kann, sowie die Stabilität der Winkelmessung bedingt. Der Fehlerbeitrag, der als Kristallgitterkonstante bezeichnet ist, rührt von der Unsicherheit her, mit der die Kristallgitterkonstante aufgrund der Temperaturschwankungen während der Messzyklen bekannt ist. Der Fehlerbeitrag, der unter Linienkrümmung aufgelistet ist, bezieht sich auf die in Tab. 3.8 angegebenen Unsicherheiten  $\Delta \bar{\zeta}$  für die experimentell bestimmten Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$ , die sich über Fits von Gl. 3.25 an die Graphen zur Linienkrümmung (siehe z.B. Abb. 3.52) ergeben. In der Tabelle ist ferner unter Lichtreferenzlinien der Fehlerbeitrag aufgelistet, der sich über die Unsicherheit im  $a/b$ -Verhältnis ergibt, die durch eine mögliche Differenz zwischen den Abständen des Fallenzentrums zu den beiden Detektoren von kleiner 1 mm, wie sie aufgrund der mechanischen Fertigungstoleranzen des Spektrometers und seines Strahlrohres vorliegen kann, bei gleichzeitiger maximal möglicher Fehlausrichtung des Lichtaufbaus von  $\Delta y \approx 0.5$  mm (siehe Abb. 3.7) hervorgerufen werden kann. Referenzlinie bezeichnet schließlich den Beitrag zur Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung, der sich für

Messungen	Übergang	$\theta$ (°)	Energie <sub>exp</sub> (eV)	Energie <sub>theo</sub> (eV)
(1) ohne Linienkr.	Lyman- $\alpha_1$	36.515755(3)	3322.930(5)	
(1) mit Linienkr.	Lyman- $\alpha_1$	36.514854(3)	3322.993(5)	3322.992 [26]
(2) ohne Linienkr.	$w$	39.03587(1)	3139.507(5)	
(2) mit Linienkr.	$w$	39.03478(1)	3139.581(5)	3139.582 [30]
(2) mit Linienkr.	$x$	39.23237(6)	3126.302(54)	3126.290 [30]
(2) mit Linienkr.	$y$	39.27198(6)	3123.658(42)	3123.534 [30]
	s,t			3123.890 [157]

**Tabelle 4.3:** Ergebnisse der Messungen an Ar<sup>17+</sup>- und Ar<sup>16+</sup>-Ionen für die Bragg-Winkel  $\theta$  und Übergangsenergien der spektroskopierten Lyman- $\alpha_1$ ,  $w$ ,  $x$  und  $y$  Röntgenlinien. Die  $y$  Linie wird von den Linien  $s$  ( $1s2s2p^2P_{3/2} \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) und  $t$  ( $1s2s2p^2P_{1/2} \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ ) überlagert. Die Übergangsenergien der  $x$  und  $y$  Linie wurden über die Dispersionsrelation des Detektors relativ zur Energie der  $w$  Linie bestimmt. Für die Messung wurde ein Si(111)-Kristall verwendet. Zum Vergleich sind sowohl die Resultate bei Vernachlässigung der Linienkrümmung (ohne Linienkr.) der Röntgenlinien in der Detektorebene als auch für die Berücksichtigung dieser Krümmung (mit Linienkr.) angegeben.

#### 4.4. Experimentelle Resultate

	Bragg-Winkel $\theta$ (°)	Lyman- $\alpha_1$ (eV)	$w$ (eV)
Theorie	-	2622.699 [26]	2460.629 [30]
Messungen			
(3) ohne Linienkrümmung	48.930655(1)	2622.678(5)	-
(3) mit Linienkrümmung	48.930282(1)	2622.693(5)	-
(4) ohne Linienkrümmung	53.472625(1)	-	2460.612(4)
(4) mit Linienkrümmung	53.472208(1)	-	2460.625(4)
(5) ohne Linienkrümmung	53.472160(3)	-	2460.613(3)
(5) mit Linienkrümmung	53.471743(3)	-	2460.627(3)
Mittelwert mit Linienkrümmung	-	-	2460.626(3)

**Tabelle 4.4:** Resultate der Messungen an  $S^{15+}$ - und  $S^{14+}$ -Ionen für die Bragg-Winkel  $\theta$  und Übergangsenergien der spektroskopierten Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  Röntgenlinien. Für die Experimente wurde ein Si(111)-Kristall eingesetzt. Es sind sowohl die Ergebnisse bei Vernachlässigung der Linienkrümmung (ohne Linienkrümmung) der Röntgenlinien in der Detektorebene als auch für die Berücksichtigung dieser Krümmung (mit Linienkrümmung) aufgelistet. Für die Messung der  $w$  Übergangsenergien ist zudem der Mittelwert der Ergebnisse aus Messung 4 und 5 angegeben.

Relativmessungen aufgrund der Unsicherheit in der Bestimmung des Bragg-Winkels der Referenzlinie ergibt. Mögliche andere Beiträge zum Gesamtfehler der ermittelten Übergangsenergie wurden im Experiment durch geschickten experimentellen Aufbau und Justage des Spektrometers vermieden. So werden die CCD Detektoren während den Messungen nicht bewegt, so dass ein mögliches durch die Kamerarotation entstehendes variierendes Drehmoment auf den Kristallhalter, was zu einer Änderung des Kristallwinkels während der Messungen führen kann, minimiert wird. Der Kristall wurde, wie in [51] eingehend diskutiert, so montiert, dass der Einfluss des Winkels  $\delta$  zwischen Kristalloberflächennormale und Kristallgitternormale auf die  $a/b$ -Verhältnisse auf den beiden Detektoren minimiert wird. Zudem beeinflusst dieser Effekt das  $a/b$ -Verhältnis für beide Detektoren ohnehin entgegengesetzt, und spielt damit eine untergeordnete Rolle. Andere Beiträge zum Gesamtfehler wie z.B. die Beiträge, die durch eine mögliche Instabilität der Lichtreferenzlinien, durch Positionierung der LED über dem Einzelspalt (siehe Abb. 3.7) oder eine mögliche Verschiebung der Ionenwolkenposition mit der Strahlenergie verursacht werden, wurden bereits in [51] und [86] diskutiert. Es bleibt damit festzuhalten, dass alle bekannten Fehlerbeiträge, die in Tab. 4.7 nicht angegeben sind, mit einem Beitrag kleiner 0.1 ppm zum Gesamtfehler der Übergangsenergiebestimmung beitragen und daher für die Berechnung des Gesamtfehlers eine untergeordnete Rolle spielen. Die Fehler in der Bestimmung der Übergangsenergien der  $x$ - und  $y$ -Linien von  $Ar^{16+}$ - und  $Fe^{24+}$ -Ionen bzw. der Übergangsenergien der Linien des lithium- und berylliumartigen Eisens ergeben sich nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz aus den Fehlern in der Bestimmung der Energie der jeweiligen  $w$  Linie bzw./und der  $t$  und  $r$  Linie, der Unsicherheit in der Dispersionsrelation und den zu Tab. 4.7 analogen Fehlern für die Linien selbst (siehe auch Kap. 4.4.8).

Übergang	$E_{\text{exp}}$ (eV)	$E_{\text{theo}}$ (eV)	$E_{\text{exp1}}$ (eV)	$E_{\text{exp2}}$ (eV)	$E_{\text{exp3}}$ (eV)
$w$	6700.424(22)	6700.435	6700.725(201)	6700.900(250)	-
$x$	6682.237(53)	6682.334	-	6681.648(360)	6682.513(288)
$y$	6667.508(55)	6667.579	-	6667.275(360)	6667.634(789)
$m$	6677.285(82)	6679.463	-	-	6677.150
$t$	6675.927(55)	6676.226	6676.420	6676.251(360)	6675.388(251)
$q$	6662.092(51)	6662.235	6662.244	6661.543(360)	6662.186(480)
$a$	6657.962(69)	6659.372	-	6658.310(360)	6657.595(605)
$d$	6654.663(67)	6657.584	-	-	-
$r$	6652.656(46)	6653.297	6652.536	6652.965(360)	6653.714
$j$	6644.570(63)	6645.451	-	6644.050(360)	6644.692(425)
$c$	6639.019(78)	6641.891	-	-	-
$e$	6620.239(78)	6622.733	-	-	-
5	6640.960(81)	6641.358	-	-	-
6	6636.257(96)	6637.447	-	-	-
		6636.026	-	-	-
1	6622.016(60)	6624.680	-	-	-
		6622.203	-	-	-
		6620.081	6619.880(1.248)	-	-
1*	6617.445(60)	6617.608	-	-	-
		6616.548	6616.312(1.247)	-	-
4	6613.197(91)	6613.548	-	-	-
2	6609.851(60)	6609.846	-	-	-
		6609.494	6608.835(715)	-	-
3	6601.711(340)	6606.324	-	-	-
		6604.916	-	-	-
		6601.435	6601.171(713)	-	-

**Tabelle 4.5:** Ergebnisse der Messungen (Nummer 6 in Tab. 4.6) an  $\text{Fe}^{24+}$ -,  $\text{Fe}^{23+}$ - und  $\text{Fe}^{22+}$ -Ionen für die Übergangsenergien der spektroskopierten Linien. Die Übergangsenergien der  $x$ ,  $y$ ,  $t$ ,  $q$  und  $r$  Linien wurden über die Dispersionsrelation des Detektors relativ zur Energie der  $w$  Linie bestimmt. Die Energien von weiteren Übergängen in lithium- und berylliumartigen Ionen wurden dann relativ zu den so bestimmten Energien der Linien  $t$  und  $r$  vermessen. Die Bezeichnung der Übergänge ist entsprechend Tab. 4.1. In den Messungen wurde ein Si(220)-Kristall verwendet. Zum Vergleich sind theoretisch berechnete (für Linien 1, 1\*, 2, 3, 4, 5, 6 [155];  $m$ ,  $a$ ,  $d$ ,  $j$ ,  $c$ ,  $e$  [158];  $t$ ,  $q$ ,  $r$  [154];  $w$ ,  $x$ ,  $y$  [30]) und weitere experimentell bestimmte Werte (für Linien  $x$ ,  $y$ ,  $t$ ,  $q$ ,  $r$ ,  $m$ ,  $a$ ,  $j$ : Exp1: [159, 160]; Exp2: [161, 162]; Exp3: [163];  $w$ : Exp1: [64]; Exp2: [111]; 1, 1\*, 2, 3: Exp1: [164]) in die Tabelle aufgenommen. Die experimentellen Werte wurden in allen Messungen von anderen Gruppen relativ zur  $w$  Wellenlänge bestimmt und für diese Tabelle auf den in dieser Arbeit ermittelten Wert für die  $w$  Wellenlänge kalibriert.

#### 4.4. Experimentelle Resultate

Nummer der Messung	Temperatur (°C)	zweifache Gitterkonstante $2d$ (Si(111), Si(220))
1	23.6(3)	6.271219(3)
2	23.6(3)	6.271219(3)
3	22.2(6)	6.271200(7)
4	23.7(3)	6.271222(5)
5	24.3(3)	6.271231(5)
6	24.3(2)	3.840314(2)

**Tabelle 4.6:** Temperatur während der Messzyklen und für diese Temperaturen berechnete Werte der zweifachen Gitterkonstanten  $2d$  des Si(111)-Kristalls bzw. für Messung 6 des Si(220)-Kristalls.

Fehlerquelle	$\Delta E$ (meV)				
	S <sup>14+</sup> ( $w$ )	S <sup>15+</sup> (Lya)	Ar <sup>16+</sup> ( $w$ )	Ar <sup>17+</sup> (Lya)	Fe <sup>24+</sup> ( $w$ )
Statistische Unsicherheit	1.45	0.90	0.50	2.00	2.12
Kristallgitterkonstante	2.71	2.00	2.50	2.50	3.50
Linienkrümmung	0.17	0.08	4.00	3.50	1.00
Lichtreferenzlinien	0.03	0.40	1.00	1.00	0.30
Referenzlinie	-	-	-	-	21.95
Gesamt	3.08	4.58	4.85	4.85	22.35
Relative Unsicherheit (ppm)	1.22	1.75	1.54	1.46	3.34

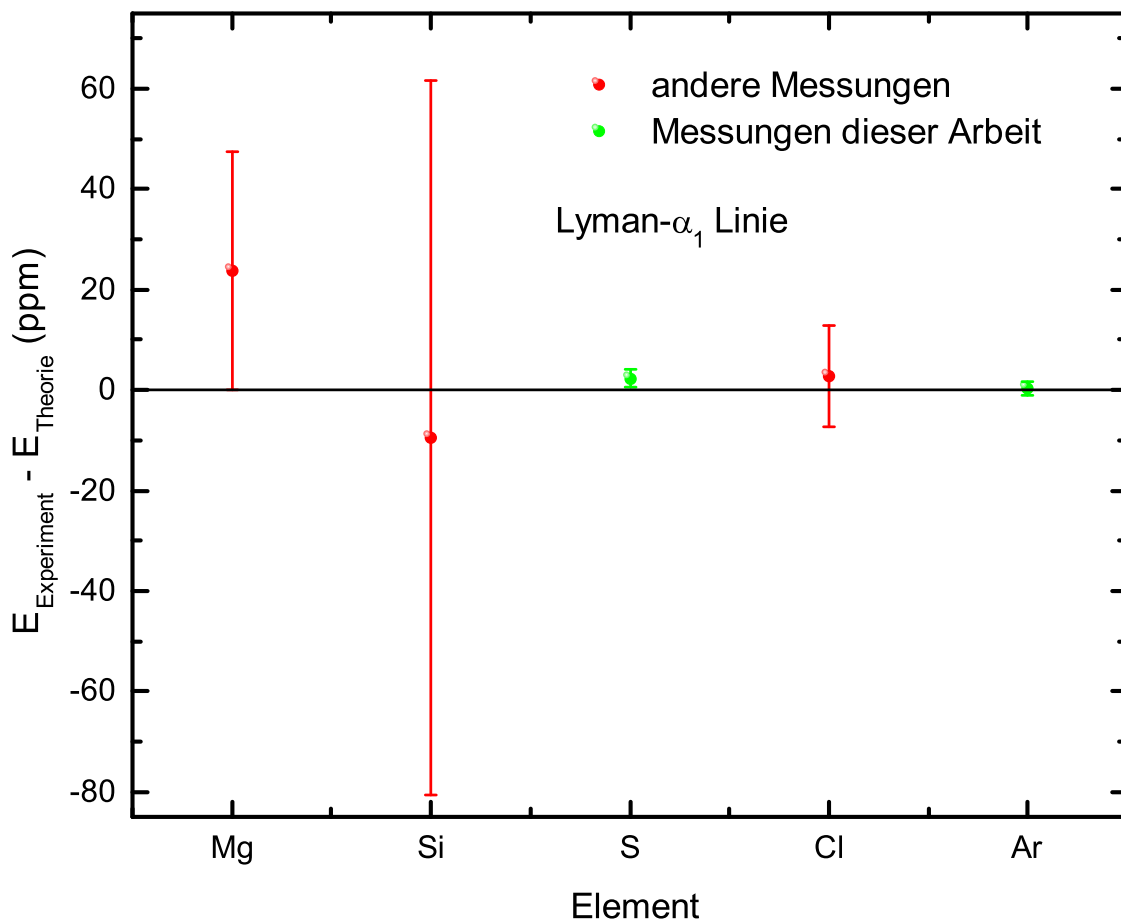
**Tabelle 4.7:** Fehlerquellen und ihr Beitrag  $\Delta E$  zur relativen Unsicherheit  $\Delta E/E$  für die Messungen der Lyman- $\alpha_1$  (Lya) und  $w$  Übergangsenergien  $E$  von Übergängen in S<sup>14+</sup>-, S<sup>15+</sup>-, Ar<sup>16+</sup>-, Ar<sup>17+</sup>- und Fe<sup>24+</sup>-Ionen. Alle Angaben, bis auf die der letzten Zeile, in meV.

#### 4.4.5 Diskussion der experimentellen Ergebnisse

Wie in Kap. 1 ausführlich diskutiert, sind die theoretischen Vorhersagen für die Energieniveaus in wasserstoffartigen Ionen, d.h. auch für die in den Messungen dieser Arbeit untersuchten Ionen mit niedriger und mittlerer Kernladungszahl  $Z$ , sehr präzise. Daher sollten die Resultate der Messungen der S<sup>15+</sup> und Ar<sup>17+</sup> Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien zunächst diskutiert werden, da sie einen Hinweis darauf geben, ob diese Experimente erfolgreich waren, d.h. ob für die Messungen eventuell systematische Fehlerquellen übersehen wurden oder nicht etc.. Wie bereits angemerkt, zeigen die Ergebnisse der Messungen für die Lyman- $\alpha_1$  Linie von Fe<sup>25+</sup>, dass bei allen Messungen der Energien von Eisenlinien eine systemische Fehlerquelle vorlag, die zu einer Energieverschiebung der absolut bestimmten Übergangsenergien führt. Da in einer Relativmessung aber sowohl der Bragg-Winkel der Referenzlinie als auch der der untersuchten Linie von dieser Fehlerquelle gleichermaßen beeinflusst werden, ändert sich das Ergebnis einer solchen Relativmessung nicht. Die Energien der Linien von helium-, lithium- und berylliumartigen Eisenionen konnten daher, wenn auch nicht absolut so doch relativ vermessen werden und es werden in den folgenden Kapiteln für diese Linien nur die Resultate dieser Relativmessungen diskutiert.

#### 4.4.6 Röntgenwellenlängenmessungen an wasserstoffartigen Ionen ohne Rückgriff auf Referenzlinien

Ein direkter Vergleich der in den Messungen dieser Arbeit erzielten Resultate für die Lyman- $\alpha_1$  und  $w$  Übergangsenergien von  $S^{15+}$ -,  $Ar^{17+}$ - und  $S^{14+}$ - sowie  $Ar^{16+}$ -Ionen mit weiteren experimentellen Ergebnissen für diese Übergangsenergien, die mit Mess schemata ermittelt wurden, welche eine Bestimmung von Übergangsenergien im Röntgenbereich ohne den Rückgriff auf Referenzlinien erlauben, ist nur für die  $w$  Übergangsenergien von  $S^{14+}$  und  $Ar^{16+}$ -Ionen möglich. Für die anderen Übergangsenergien liegen solche Resultate nicht vor. Überhaupt gibt es weltweit bis heute außer den hier vorgestellten Resultaten nur 5 weitere, publizierte Messergebnisse für Röntgenübergangsenergien in hochgeladenen Ionen, die zur Bestimmung dieser Energien nicht auf Referenzlinien zurückgreifen, nämlich die Werte für die Lyman- $\alpha_{1,2}$  Übergangs-



**Abbildung 4.18:** Relative Abweichungen der in den Messungen dieser Arbeit experimentell, ohne Rückgriff auf Referenzlinien ermittelten Werte für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien von  $S^{15+}$ - und  $Ar^{17+}$ -Ionen und der Werte für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien, die in den einzigen drei weiteren Absolutmessungen an  $Mg^{11+}$  [57],  $Si^{13+}$  [58] und  $Cl^{16+}$  [43] bestimmt wurden, von den theoretisch berechneten Werten [26] für diese Übergangsenergien.

#### 4.4. Experimentelle Resultate

---

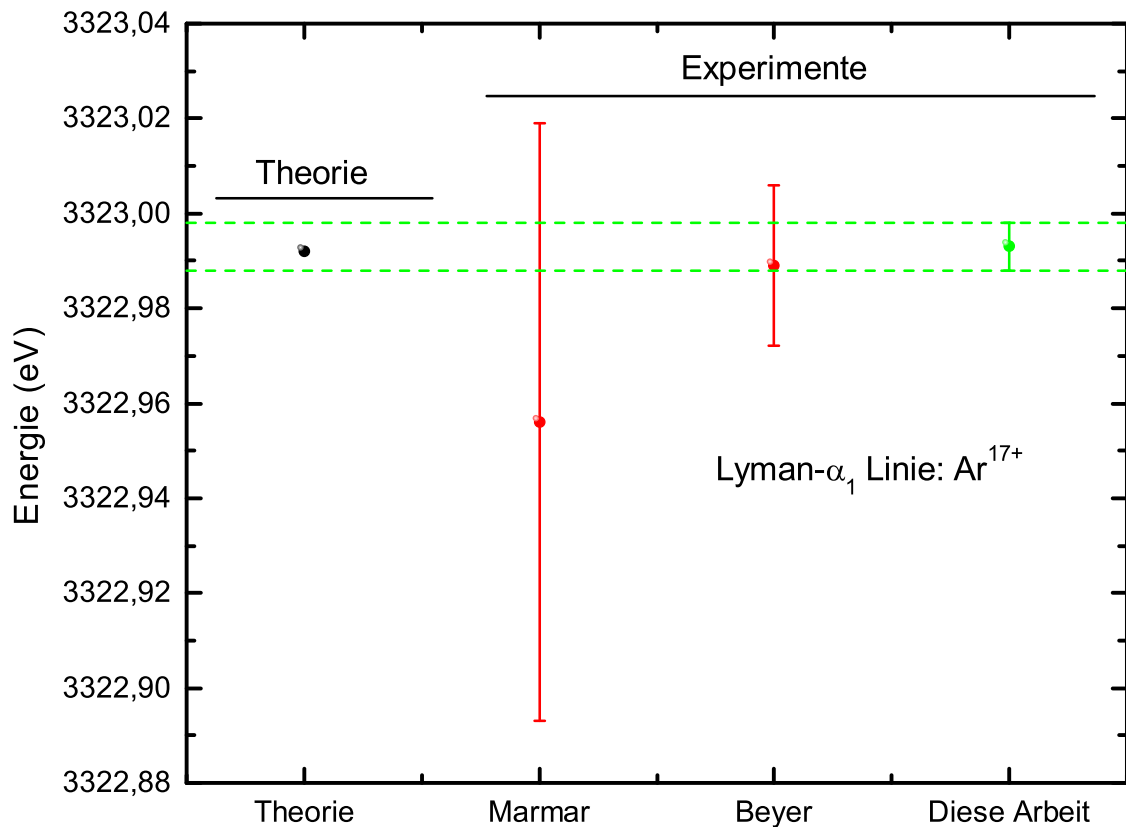
energien von  $\text{Mg}^{11+}$  [57],  $\text{Si}^{13+}$  [58] und  $\text{Cl}^{16+}$  [43] sowie für die  $w$  Übergangsenergien von  $\text{Ar}^{16+}$  [43] und  $\text{S}^{14+}$  [107]. Die letzteren drei Übergangsenergien wurden dabei in Experimenten mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer bestimmt, wobei ein Skalierungsgesetz zur Berechnung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  (siehe Kap. 3.3.1) eingesetzt wurde. Weitere Resultate, die auf Messschemata beruhen, die nicht auf Referenzlinien basieren, liegen für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien von  $\text{S}^{15+}$  und  $\text{Ar}^{17+}$  [86] vor. Diese wurden ebenfalls in Messungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer erzielt. Sie werden in die folgenden Betrachtungen nicht mit einbezogen, da ihre Ergebnisse, will man sie mit denen der übrigen Messungen vergleichen, in Bezug auf die Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene noch detailliert untersucht werden müssen. Es ergibt sich somit, dass ausschließlich die Ergebnisse der 5 oben erwähnten Wellenlängenmessungen und die in dieser Arbeit für S- und Ar-Ionen vorgestellten Resultate direkt an die SI-Einheit Meter gekoppelt sind. Damit handelt es sich nur bei diesen Messungen um Absolutmessungen im eigentlichen Sinne, deren relative Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung  $\Delta\lambda/\lambda$  bzw. in der Bestimmung der Übergangsenergie  $\Delta E/E$  nicht mehr von der Unsicherheit abhängig ist, mit der die Wellenlänge der Referenzlinie bekannt ist. Die Ergebnisse der Messungen werden damit in ihrer erreichbaren Präzision nicht durch die Verwendung Satelliten-behafteter Röntgenstandards (siehe auch Kap. 2.1) beschränkt. Diese Wellenlängenmessungen mit einer erreichbaren Präzision von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 1$  ppm stellen zudem bis heute die einzige Möglichkeit dar, z.B. über die Messung der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien, einen neuen Röntgenstandard zu definieren, der nicht auf der Spektroskopie Satelliten-behafteter Röntgenlinien beruht und dessen Übergangsenergie theoretisch hoch genau berechnet werden kann (siehe auch Kap. 1).

Um die Güte der in dieser Arbeit erzielten Resultate für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien von  $\text{S}^{15+}$ - und  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen (siehe Tab. 4.4 und 4.3) zu untersuchen, sind diese Ergebnisse in Abb. 4.18 zusammen mit den oben erwähnten 3 anderen Absolutmessungen von Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien dargestellt. Aus der Abbildung geht hervor, dass das hier erzielte Ergebnis der absoluten Wellenlängenmessung in seinem relativen Fehler  $\Delta\lambda/\lambda$  die drei bisher vorliegenden Messwerte klar unterbietet, um genau zu sein um einen Faktor von 7 bis 45. Damit liefern die Absolutmessungen der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien von  $\text{S}^{15+}$ - und  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen, die in dieser Arbeit durchgeführt wurden, Werte für diese Übergangsenergien, die den kleinsten jemals für Absolutmessungen von Röntgenübergangsenergien an wasserstoffartigen Ionen erreichten Fehlerbalken aufweisen. Es ist dabei hervorzuheben, dass der Beitrag zur relativen Unsicherheit  $\Delta\lambda/\lambda$  in der Wellenlängenbestimmung, der beim jetzigen Niveau dieser Unsicherheit von  $\sim 1.5$  ppm in zukünftigen Messungen noch signifikant reduziert werden kann, der Beitrag ist, der in Tab. 4.7 als Kristallgitterkonstante bezeichnet wird. Dieser Beitrag wird durch die Unsicherheit in der Kristallgitterkonstante (siehe Tab. 4.6) aufgrund der Temperaturschwankungen während der Messzyklen verursacht und lässt sich durch weitere Temperaturstabilisierung des experimentellen Aufbaus vermindern. Ein realistischer Wert für die Temperaturstabilisierung von  $\pm 0.1$  K führt dabei zu einer Verringerung des als Kristallgitterkonstante bezeichneten Fehlerbeitrages um den einen Faktor  $\sim 2.5$ . Damit könnte die relative Unsicherheit in der Bestimmung der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von  $\text{S}^{15+}$  bzw.  $\text{Ar}^{17+}$  von 1.75 ppm nach  $\sim 0.48$  ppm bzw. 1.45 ppm nach 1.29 ppm reduziert werden. Dies zeigt, dass eine Messung von Übergangsenergien  $E$  in hochgeladenen Ionen mit einer relativen

Unsicherheit von  $\Delta E/E$  von  $\sim 0.5$  ppm, d.h. im sub-ppm Bereich, mit dem hier vorgestellten experimentellen Aufbau grundsätzlich möglich sein sollte. Dabei ist durch einen Vergleich der Beiträge zur relativen Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung  $\Delta\lambda/\lambda$  für die Messungen an  $S^{15+}$  und  $Ar^{17+}$  (siehe Tab. 4.7) ersichtlich, dass der Fehler, der sich aufgrund der Unsicherheit in der Bestimmung der Linienkrümmung ergibt, durch die Montage des Spektrometers parallel zum Elektronenstrahl an der FLASH-EBIT, wie in den Messungen an  $S^{15+}$  geschehen, im Vergleich zur Montage des Spektrometers senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT für die Experimente an  $Ar^{17+}$ , bereits signifikant reduziert werden konnte. Dies liegt daran, dass die Linienkrümmung selbst für diese Anordnung wie in Kap. 3.3.1 besprochen deutlich geringer ausfällt. Eine Konfiguration mit parallel zum Elektronenstrahl ausgerichtetem Spektrometer ist daher einem Aufbau mit senkrecht zum Elektronenstrahl montiertem Spektrometer vorzuziehen. Zusammenfassend ergibt sich damit, dass allein für den Fehlerbeitrag, der durch die Unsicherheit in der Gitterkonstante aufgrund der Temperaturschwankungen verursacht wird, im Zukunft noch eine Verringerung zu erwarten ist. Dagegen ist (bei parallel zum Elektronenstrahl montiertem Spektrometer) für den Fehlerbeitrag zum Gesamtfehler der Wellenlängenmessung, der durch die Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene verursacht wird, wie auch für den statistischen Fehler der Zählrate der Röntgenphotonen und den Fehlerbeitrag, der durch eine mögliche fehlerhafte Ausrichtung des Ursprungs der Lichtreferenzlinien von  $\Delta y = \pm 0.5$  mm verursacht werden kann, keine weitere Reduktion zu erwarten.

Um die Güte der in dieser Arbeit erzielten Resultate genauer zu überprüfen, ist in Abb. 4.19 die von der Theorie vorhergesagte Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie [26] (siehe Tab. 4.3) zusammen mit den Resultaten für diese Energie, die in früheren Experimenten von Marmar *et al.* [129] und Beyer *et al.* [53] erzielt wurden, im Vergleich zu den Ergebnissen dieser Arbeit dargestellt. Es ist dabei anzumerken, dass es sich bei den zwei früheren Experimenten um Messungen handelt, die zur Bestimmung des Bragg-Winkels der spektroskopierten Röntgenlinien auf Referenzlinien zurückgreifen, in beiden Fällen auf die  $K\alpha$  Linien von KCl. Solche Messungen ohne Rückgriff auf Referenzlinien sind zumeist einfacher als Absolutmessungen, da sie, wie in Kap. 3.1.1 besprochen, auf der Messung von Winkeldifferenzen beruhen und daher in solchen Experimenten eine Vielzahl von systematischen Fehlerquellen einfach zu vermeiden sind. Frühere Werte für diese Übergangsenergie und weitere Energien z.B. für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von  $S^{15+}$  [51, 86], die in Messungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer ermittelt wurden, wurden in diese und analoge Darstellungen für die anderen Übergangsenergien nicht aufgenommen, da für die Spektren dieser Messungen, sollen die Werte für die Übergangsenergien dieser Messungen mit den in dieser Arbeit erzielten Werten verglichen werden, zunächst noch eine detaillierte Analyse bezüglich der Krümmung der Röntgenlinien in der Detektorebene (siehe Kap. 3.3.9) durchgeführt werden muss. Wie Abb. 4.18 und Abb. 4.19 zu entnehmen ist, stimmt die in dieser Arbeit gemessene Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von  $Ar^{17+}$  innerhalb der Fehlerbalken exzellent mit der theoretisch vorhergesagten Energie, die sich im Falle von wasserstoffartigen Ionen hochpräzise berechnen lässt (siehe auch Kap. 1), überein. Dies zeigt, dass es sehr unwahrscheinlich ist, dass irgendeine relevante systematische Fehlerquelle in den Messungen dieser Arbeit nicht berücksichtigt worden ist, bzw. das Justageprozesse etc. korrekt durchgeführt worden sind. Daneben ist aus Abb. 4.19 ersichtlich,





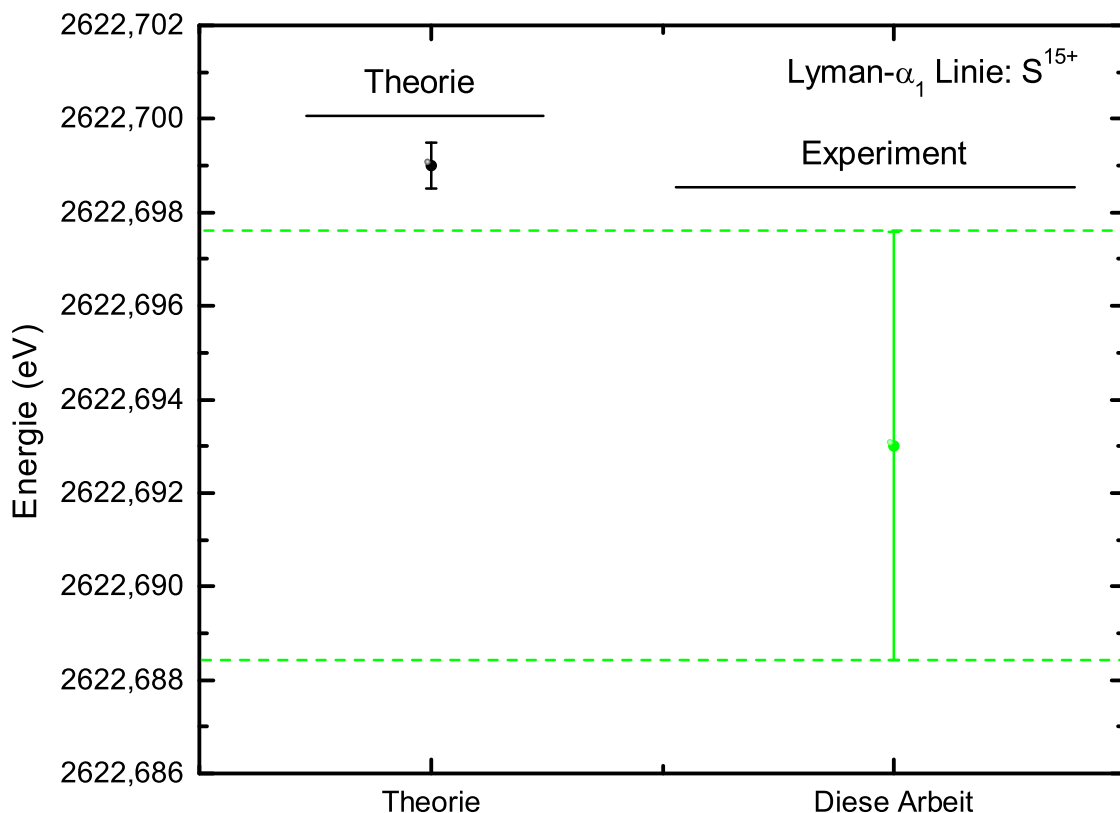
**Abbildung 4.19:** Vergleich der experimentell bestimmten Werte für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie in wasserstoffartigem Argon, [53, 129] und diese Arbeit, mit dem theoretisch berechneten Wert [26]. Die einzige experimentelle Messung der Übergangsenergie, die nicht auf eine Referenzlinie zurückgreift, ist dabei die Messung dieser Arbeit. Marmar *et al.* [129] und Beyer *et al.* verwenden die  $K\alpha$ -Linie von KCl als Referenzlinie.

dass das Resultat für die Übergangsenergie einen Faktor 3.5 präziser als das genaueste bisherige Ergebnis [53] für diese Übergangsenergie ist und innerhalb der Fehlerbalken mit den Resultaten aller vorangehenden Messungen übereinstimmt.

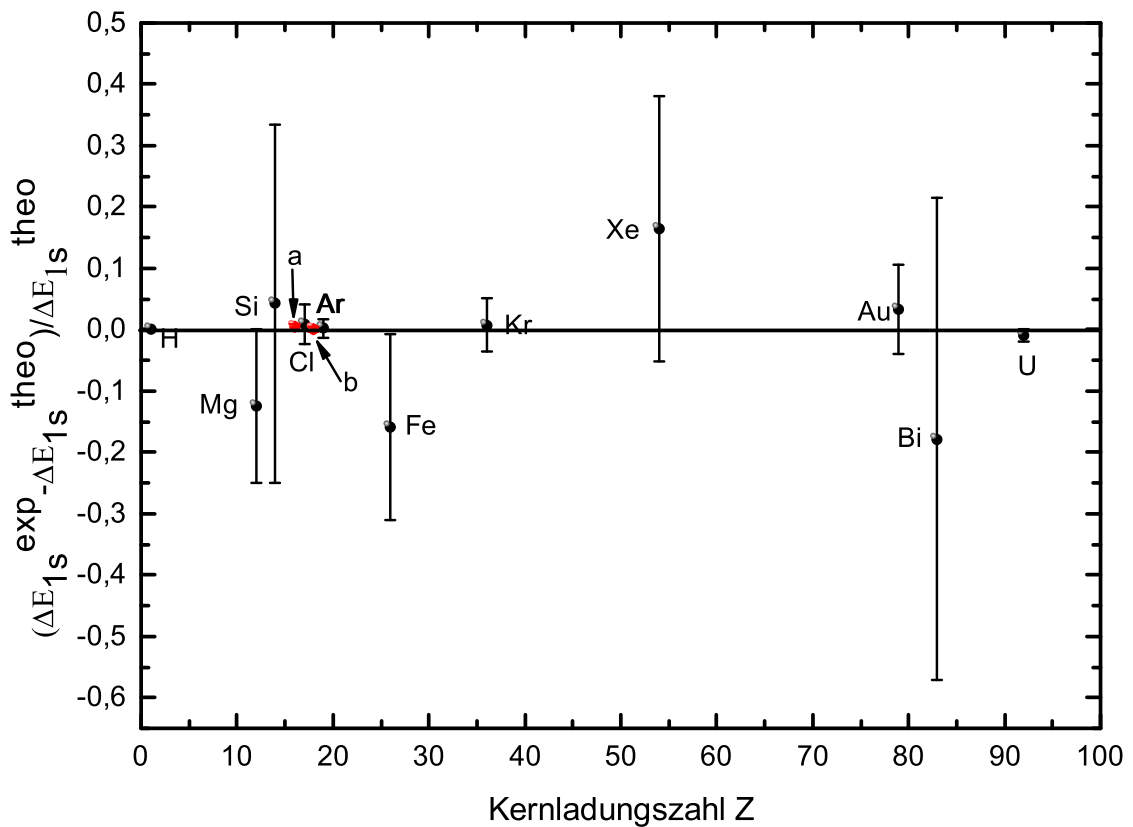
Für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von  $S^{15+}$  ergibt sich ein ähnliches Bild (siehe Abb. 4.20). Ein Vergleich mit experimentellen Werten anderer Gruppen ist für diese Energie nicht möglich, da solche Werte nicht vorliegen. Daher ist in der Abbildung neben dem in dieser Arbeit für die Übergangsenergie bestimmten Wertes allein der theoretisch vorhergesagte [26] dargestellt. Es ergibt sich, dass der experimentell ermittelte Wert für die Übergangsenergie leicht unterhalb dem theoretisch berechneten liegt, wobei sich dieser am Rande der experimentell ermittelten Fehlerbalken befindet. Damit ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von  $S^{15+}$  schlechter als für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von  $Ar^{17+}$ . Jedoch ist auch im Falle von  $S^{15+}$  keine signifikante Abweichung zwischen Theorie und Experiment, die auf eine zusätzliche systematische Fehlerquelle im Experiment hindeuten würde, zu erkennen. Es muss hierbei hervorgehoben werden, dass die Messung der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie von

$\text{Ar}^{17+}$  im Dezember 2008 an der Heidelberg-EBIT stattfand, während die Lyman- $\alpha_1$  Linie von  $\text{S}^{15+}$  im Sommer 2009 an der FLASH-EBIT spektroskopiert wurde. Dabei war das Spektrometer für die Messungen an der Heidelberg-EBIT senkrecht zum Elektronenstrahl, für die Messungen an der FLASH-EBIT parallel zum Elektronenstrahl montiert. Die Tatsache, dass sich für die Messungen beider Übergangsenergien innerhalb der Fehlerbalken eine Übereinstimmung der erzielten Ergebnisse mit den Werten der Theorie ergibt, deutet das Potential des Spektrometernaufbaus und der Justageprozesse an: Die Ergebnisse, die mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer in zwei völlig unterschiedlichen Konfigurationen, z.B. bezüglich Abstände der Strahlrohrkomponenten, der Montage des Lichtaufbaus, der Anordnung des Elektronenstrahls relativ zum Kristall sowie der Ausrichtung des Spektrometers etc., zeitlich anderthalb Jahre voneinander getrennt erzielt wurden, weisen die gleiche Güte auf.

Für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien von  $\text{S}^{15+}$  und  $\text{Ar}^{17+}$  betragen die angegebenen Unsicherheiten der theoretischen Rechnungen dabei  $\sim 0.25$  ppm. Die Unsicherheiten der in dieser Arbeit bestimmten Werte für diese Übergangsenergien sind in Tab. 4.7 zu 1.75 ppm bzw. 1.46 ppm angegeben. Damit ergibt sich, dass bei einer Messunsicherheit von  $\sim 1.5$  ppm theoretische und experimentelle Werte für diese Übergangsenergien übereinstimmen, so dass die Messungen keine



**Abbildung 4.20:** Vergleich des in dieser Arbeit experimentell, ohne Rückgriff auf Referenzlinien bestimmten Wertes für die Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergie in wasserstoffartigem Schwefel mit dem theoretisch berechneten Wert [26].



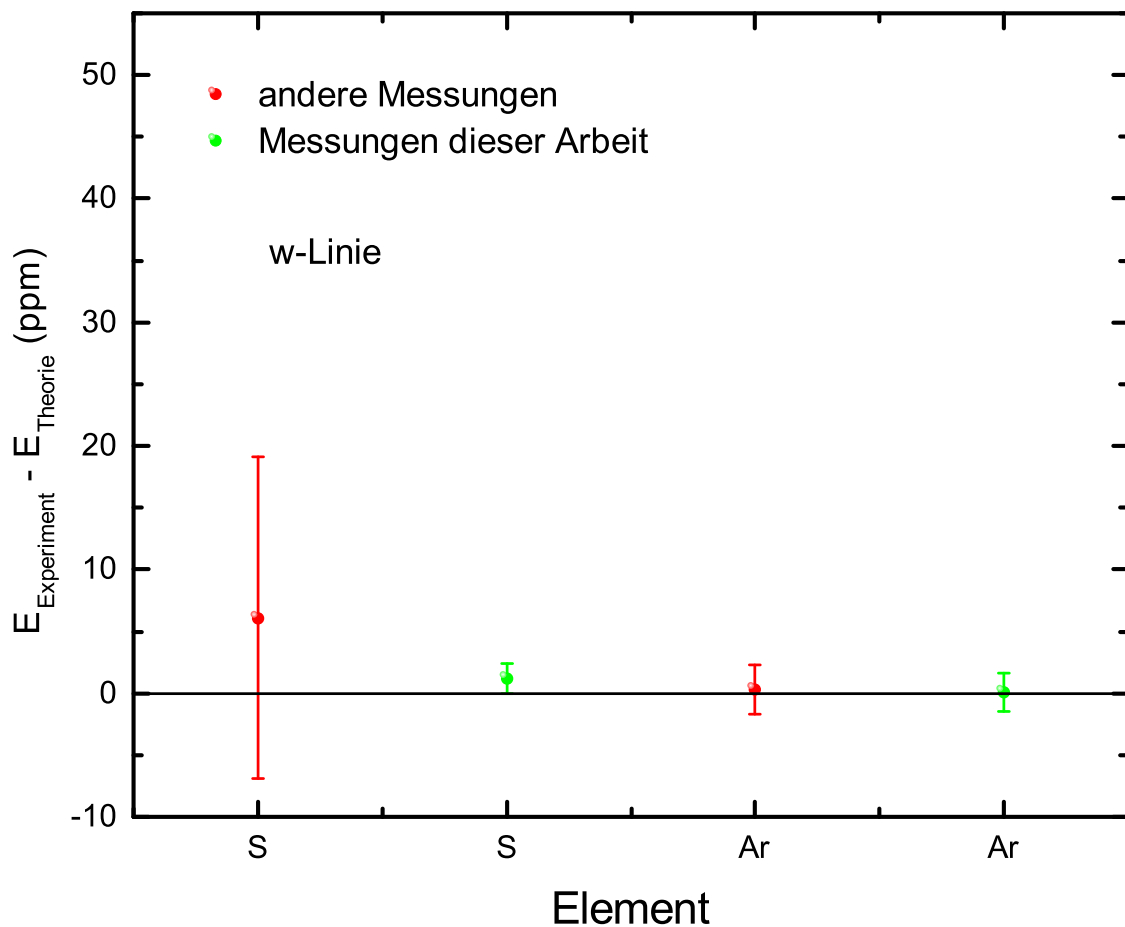
**Abbildung 4.21:** Vergleich zwischen theoretisch berechneter [26] und experimentell gemessener Grundzustands-Lamb-Verschiebung für wasserstoffartige Ionen. H: (Z=1) [46], Mg: (Z=12) [57], Si: (Z=14) [58], Cl: (Z=17) [43], Ar: (Z=18) [53], Fe: (Z=26) [98], Kr: (Z=36) [54], Xe: (Z=54) [99], Au: (Z=79) [56], Bi: (Z=83) [55], U: (Z=92) [61], a: S (Z=16) diese Arbeit, b: Ar (Z=18) diese Arbeit. Die einzigen Absolutwellenlängenmessungen ohne Verwendung von Röntgenreferenzwellenlängen sind hier die Messung an Magnesium [57], Silizium [58], Chlor [43] und die Messungen dieser Arbeit.

neue Herausforderungen an die Berechnung von Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien in wasserstoffartigen Ionen stellen. Diese Aussage wird auch durch Abb. 4.21 gestützt. Wie in Kap. 1.3.6 besprochen, wurden, um theoretisch berechnete Lamb-Verschiebungen in wasserstoffartigen Ionen zu überprüfen, bisher eine Vielzahl von Experimenten an solchen Ionen mit unterschiedlichen Kernladungszahlen  $Z$  durchgeführt, wobei die beste Präzision im Wasserstoffatom selbst mit einer Genauigkeit von  $1,8 \cdot 10^{-14}$  [47, 48] erreicht wurde. Abb. 4.21 zeigt analog zu Abb. 1.6 in Kap. 1.3.6 die relative Abweichung der experimentell gemessenen  $\Delta E_{1s}^{exp}$  und der theoretisch berechneten  $\Delta E_{1s}^{theo}$  Grundzustands-Lamb-Verschiebung [26] in wasserstoffartigen Ionen als Funktion der Kernladungszahl  $Z$ , wobei auch die in den Messungen dieser Arbeit erzielten Werte in der Abbildung aufgetragen sind (rot). Neben dem Experiment an Wasserstoff ist das Experiment mit der höchsten relativen Genauigkeit für die gemessene Grundzustands-Lamb-Verschiebung das dieser Arbeit an  $\text{Ar}^{17+}$  mit einer relativen Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 1,46$  ppm. Da innerhalb des  $1\sigma$ -Bereiches alle experimentellen Resultate mit den theo-

retischen Berechnungen übereinstimmen und die Ergebnisse der Absolutmessungen dieser Arbeit eine Genauigkeit von  $\sim 1.5$  ppm in der Wellenlängenbestimmung aufweisen, rückt das Ziel, Lyman- $\alpha_1$  Übergangswellenlängen als Referenzstandards für Wellenlängenmessungen im Röntgenbereich verwenden zu können [41, 42, 51], in greifbare Nähe.

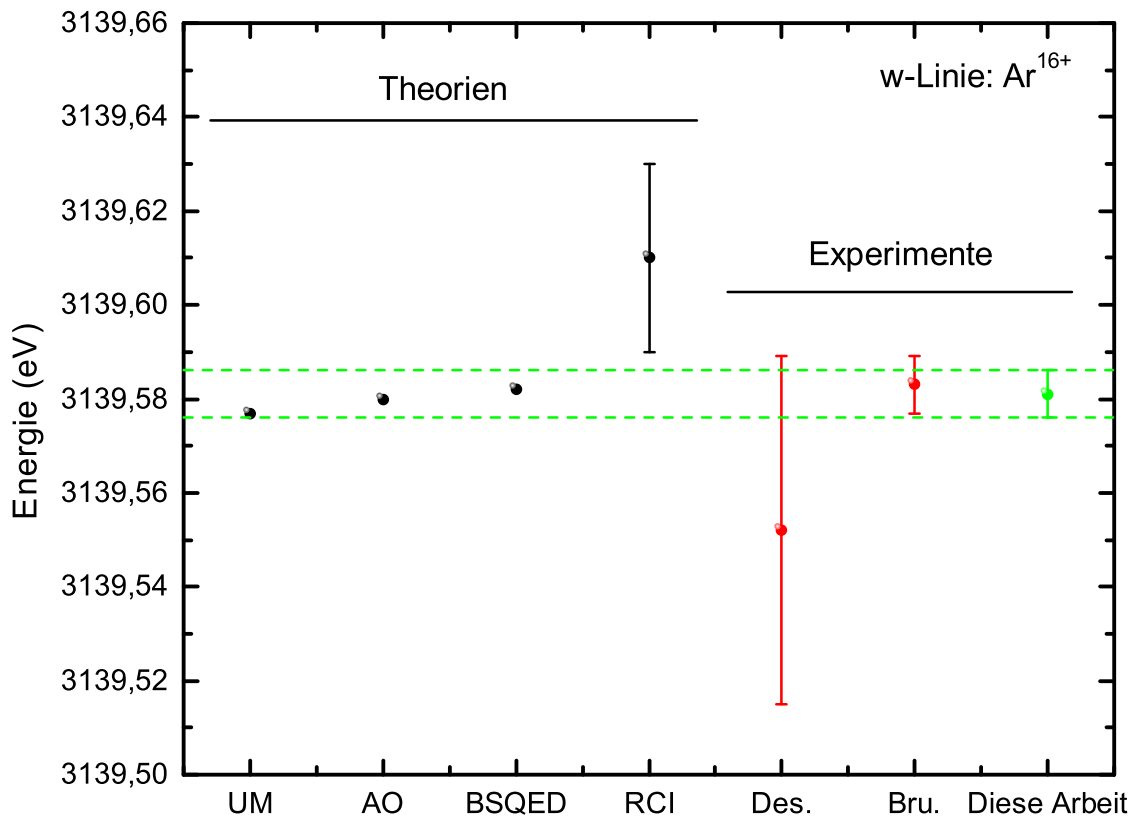
#### 4.4.7 Relativ- und Absolutmessungen von Röntgenwellenlängen an heliumartigen Ionen

Ein direkter Vergleich der in den Messungen dieser Arbeit erzielten Resultate für die  $w$  Übergangsenergien von  $S^{14+}$ - und  $Ar^{16+}$ -Ionen mit weiteren experimentellen Ergebnissen für diese Übergangsenergien, die mit Verfahren ermittelt wurden, welche eine Bestimmung von Übergangsenergien im Röntgenbereich ohne den Rückgriff auf Referenzlinien erlauben, ist, wie bereits erwähnt, für beide  $w$  Übergangsenergien [43, 107] möglich. Für andere  $w$  Übergangsenergien liegen solche Resultate nicht vor. Abb. 4.22 stellt die relativen Abweichungen aller dieser experimentell, ohne Rückgriff auf Referenzlinien ermittelten Werte von den mit Hilfe des BSQED-Ansatzes (siehe Kap. 1) theoretisch berechneten Werten [30] für diese Übergangsenergien dar. Es ist dabei hervorzuheben, dass alle experimentellen Werte mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer erzielt wurden. Der Abbildung ist zum einen zu entnehmen, dass die Ergebnisse dieser Arbeit von allen Absolutmessungen der  $w$  Übergangsenergie die geringste Unsicherheit  $\Delta\lambda/\lambda$  in der Wellenlängenbestimmung aufweisen; im Falle der präzisesten Messung an  $S^{14+}$  beträgt  $\Delta\lambda/\lambda$  nur 1.22 ppm. Zum anderen kann man der Abbildung entnehmen, dass die Ergebnisse der Messungen dieser Arbeit an  $S^{14+}$ - und  $Ar^{16+}$ -Ionen mit den früheren Messungen an diesen Systemen, die mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer durchgeführt wurden, innerhalb der Fehlerbalken überlappen. Dies ist besonders hervorzuheben, da bis zu drei Jahre zwischen den jeweiligen Messzyklen liegen und das Spektrometer zwischen den Experimenten mehrfach umgebaut wurde. Zudem gilt hier analog zu den Messungen der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien, dass das Resultat dieser Arbeit für die  $w$  Übergangsenergie von  $Ar^{16+}$  und alle Ergebnisse früherer Experimente für die  $w$  Übergangsenergien von heliumartigen Ionen in einer Konfiguration erzielt wurden, bei dem das Röntgenspektrometer senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT montiert war, während der Wert für die  $w$  Übergangsenergie an  $S^{14+}$ , der in den Messungen dieser Arbeit ermittelt wurde, mit einem Aufbau gemessen wurde, bei dem das Spektrometer parallel zum Elektronenstrahl der FLASH-EBIT ausgerichtet war. Damit ergibt sich, dass die experimentellen Resultate, die man mit Hilfe des Heidelberg-Röntgenspektrometers erhält, eine hohe Reproduzierbarkeit aufweisen, auch wenn der experimentelle Aufbau sich für die Messungen bezüglich der Länge des Strahlrohres, der Position des Lichtaufbaus, der Position der Fallenmitte relativ zum Kristall etc. drastisch unterscheidet. Daneben ist festzustellen, dass die Ergebnisse der Messungen an  $S^{14+}$ - und  $Ar^{16+}$ -Ionen dieser Arbeit innerhalb ihrer Fehlerbalken mit den über den BSQED-Ansatz theoretisch berechneten Werten [30] übereinstimmen. Auf den Vergleich mit anderen theoretischen Werten, die für diese  $w$  Übergangsenergien in heliumartigen Ionen mit verschiedensten Ansätzen ermittelt wurden, wird noch detailliert in den folgenden Abschnitten eingegangen.



**Abbildung 4.22:** Relative Abweichungen der in den Messungen dieser Arbeit experimentell, ohne Rückgriff auf Referenzlinien ermittelten Werte der  $w$  Übergangsenergien von  $S^{14+}$ - und  $Ar^{15+}$ -Ionen und der Werte für die  $w$  Übergangsenergien, die in den einzigen zwei weiteren Absolutmessungen an  $S^{14+}$  [107] und  $Ar^{15+}$  [43] bestimmt wurden, von den mit Hilfe des BSQED-Ansatzes theoretisch berechneten Werten [30] für diese Übergangsenergien. Alle experimentellen Ergebnisse wurden mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer erzielt.

Um die in den Messungen dieser Arbeit ermittelten Werte für die  $w$  Übergangsenergien mit den unterschiedlichen Werten, die über verschiedenste theoretische Methoden zur Berechnung dieser Energien ermittelt wurden, vergleichen und Aussagen über die Güte der Theorien treffen zu können, ist es zunächst notwendig, die Unterschiede in den Ansätzen dieser Methoden aufzuzeigen (siehe auch Kap. 1.6). Man stellt fest, dass die Theorien sich besonders bezüglich der Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung unterscheiden. Die von Drake eingesetzte vereinheitlichte Methode (unified method: UM) nutzt hochkorrelierte nichtrelativistische Wellenfunktionen [27] und die von Plante *et al.* [28] verwendete All-order (AO) Methode und der von K.T. Cheng *et al.* [29] genutzte RCI Ansatz berücksichtigen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch die Breit-Wechselwirkung. A. Artemyev *et al.* berechnen die Bindungsenergiebeiträge mit dem BSQED-Ansatz [30], wobei nichtkorrelierte relativistische Wellenfunktionen für die Berechnung



**Abbildung 4.23:** Vergleich des in dieser Arbeit experimentell ermittelten Wertes für die  $w$  Übergangsenergie in heliumartigen Argon mit theoretischen Vorhersagen und anderen experimentellen Resultaten. Theoretische Werte: UM [27], AO: [28], RCI: [29], BSQED: [30]. Experimentelle Werte: Des. [109], Bru. [43] und der Wert dieser Arbeit. Bei dem experimentell bestimmten Wert von Deslattes *et al.* handelt es sich um eine Messung mit Rückgriff auf die  $K_{\alpha}$  Linie von Cd als Referenzlinie. Der Wert von Bruhns *et al.* wurde mit Hilfe des Heidelberg-Röntgenspektrometers ohne Rückgriff auf Referenzlinien ermittelt. Allerdings wurde ein Skalierungsgesetz zur Bestimmung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  (siehe Kap. 3.3.1) verwendet, d.h. der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  wurde für diese Messung nicht explizit experimentell bestimmt. Einzig bei den Experimenten dieser Arbeit handelt es sich um Messungen der  $w$  Übergangsenergie, die nicht auf Referenzlinien oder ein Skalierungsgesetz für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  zurückgreifen.

von Ein-Elektronen Energieniveaus eingesetzt werden und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch den Austausch von einem oder zwei virtuellen Photonen berücksichtigt wird.

Für heliumartige Ionen mit niedrigem  $Z$  ist die Verschiebung der Energieniveaus aufgrund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung viel größer als die Verschiebung, die sich aufgrund relativistischer Effekte ergibt. Daher ist Drakes Methode, die relativistische Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt, besonders für die Beschreibung dieser Systeme geeignet.

Die anderen Methoden [28–30] dagegen, die relativistische Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung einschließen, beschreiben heliumartige Ionen mit hohem  $Z$  besser, bei denen der Einfluß der Relativistik auf die Energien der Niveaus bedeutender wird und

der der Elektron-Elektron-Wechselwirkung sinkt. Dabei meint niedriges  $Z$   $Z \leq 26$ , hohes  $Z$   $Z \geq 26$ .

Ein Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Werten für die  $w$  Übergangsenergien kann es ermöglichen, diese theoretisch begründete Aussage darüber, welche Theorie die Energien der Niveaus in welchem Bereich der Kernladungszahl  $Z$  am besten wiedergibt, experimentell zu überprüfen. Zu diesem Zweck stellt Abb. 4.23 den in dieser Arbeit experimentell ermittelten Wert für die  $w$  Übergangsenergie in heliumartigen Argon zusammen mit den oben diskutierten theoretischen Vorhersagen [27–30] und anderen experimentellen Ergebnissen [43, 109] für diese Übergangsenergie dar. Bei den Messungen dieser Arbeit wie auch bei denen von Bruhns *et al.*, die ebenfalls mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer durchgeführt wurden, handelt es sich um Wellenlängenmessungen ohne Rückgriff auf Referenzlinien. Für die Messungen von Bruhns *et al.* wurde im Gegensatz zu den Messungen dieser Arbeit allerdings ein Skalierungsgesetz zur Bestimmung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  (siehe Kap. 3.3.1) verwendet, d.h. der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  wurde für diese Messung nicht explizit experimentell ermittelt. Bei den Experimenten von Deslattes *et al.* [109] handelt es sich um Messungen mit Rückgriff auf die  $K_\alpha$  Linie von Cd als Referenzlinie. Der Abbildung ist zum einen zu entnehmen, dass alle experimentellen Ergebnisse innerhalb ihrer Fehlerbalken übereinstimmen. Dabei ist besonders hervorzuheben, dass sich das Resultat der Messung von Bruhns *et al.* [43] von dem Ergebnis des Experimentes dieser Arbeit bei einer relativen Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung  $\Delta\lambda/\lambda$  für diese beiden Messungen von 1.5-2 ppm lediglich um 0.6 ppm unterscheidet, d.h. im sub-ppm Bereich reproduzierbar ist. Die Resultate der beiden Experimente weisen dabei einen um Faktor  $\sim 7$  kleineren Fehler auf als die das Messung von Deslattes *et al.* [109], was auch deshalb bemerkenswert ist, da es sich bei [109] um eine Relativmessung unter Rückgriff auf eine Referenzwellenlänge handelt.

Über die Abbildung ergibt sich durch Vergleich des in dieser Arbeit erzielten Wertes für die  $w$  Übergangsenergie mit den theoretischen Vorhersagen weiterhin, dass der RCI Ansatz von K. T. Cheng [29] höchstwahrscheinlich nicht geeignet ist, um die Bindungsenergiebeiträge in  $\text{Ar}^{16+}$  hochpräzise zu beschreiben. Die RCI Rechnungen ergeben einen Wert für die  $w$  Übergangsenergie in  $\text{Ar}^{16+}$ , der im Vergleich zu dem in dieser Arbeit ermittelten Wert  $6\sigma$  höher liegt, wobei  $\sigma$  sich auf den Fehlerbalken für das Ergebnis der Experimente dieser Arbeit bezieht. Damit stimmt das über den RCI Ansatz ermittelte Ergebnis innerhalb der Fehlerbalken sowohl mit den Resultaten in [43] als auch mit den Ergebnissen der Experimente dieser Arbeit nicht überein. Für die anderen Theorien lässt sich nicht einwandfrei entscheiden, welche die Energien der Niveaus in  $\text{Ar}^{16+}$  am besten beschreibt. Bestenfalls lässt sich eine Tendenz ableiten. Sowohl die Werte von [43] als auch die hier vorgestellten Resultate sind lediglich  $\sim 1$  meV von den theoretischen Werten, die sich über die AO-Methode [28] und die BSQED-Methode ergeben, entfernt, während der Wert, der sich über die UM-Methode [27] berechnet, um bis zu 6 meV niedriger als die experimentellen Ergebnisse liegt und damit am Rande der experimentell ermittelten Fehlerbalken. Diese eher kleine Diskrepanz lässt sich eventuell auf eine unvollständige Beschreibung der relativistischen Effekte für  $Z = 18$  in der UM-Methode zurückführen. Allerdings stimmen die Werte der UM-Methode, wenn man die QED Korrekturen der UM für die UM durch die der neueren BSQED Rechnungen ersetzt, mit denen der BSQED Rechnungen innerhalb von 1.5 ppm überein, obwohl

Zustand	Ges. 1-el.	Abs. SE	Abs. VP	2-Ph. Aust.	Ges. 2-el.	Höh. Ordn.
$^1S_0$	1.1310	-0.1116	0.0072	0.0091	-0.0953	0.0009
$^1P_1$	0.0062	-0.0031	0.0001	-0.0001	-0.0031	0.0001

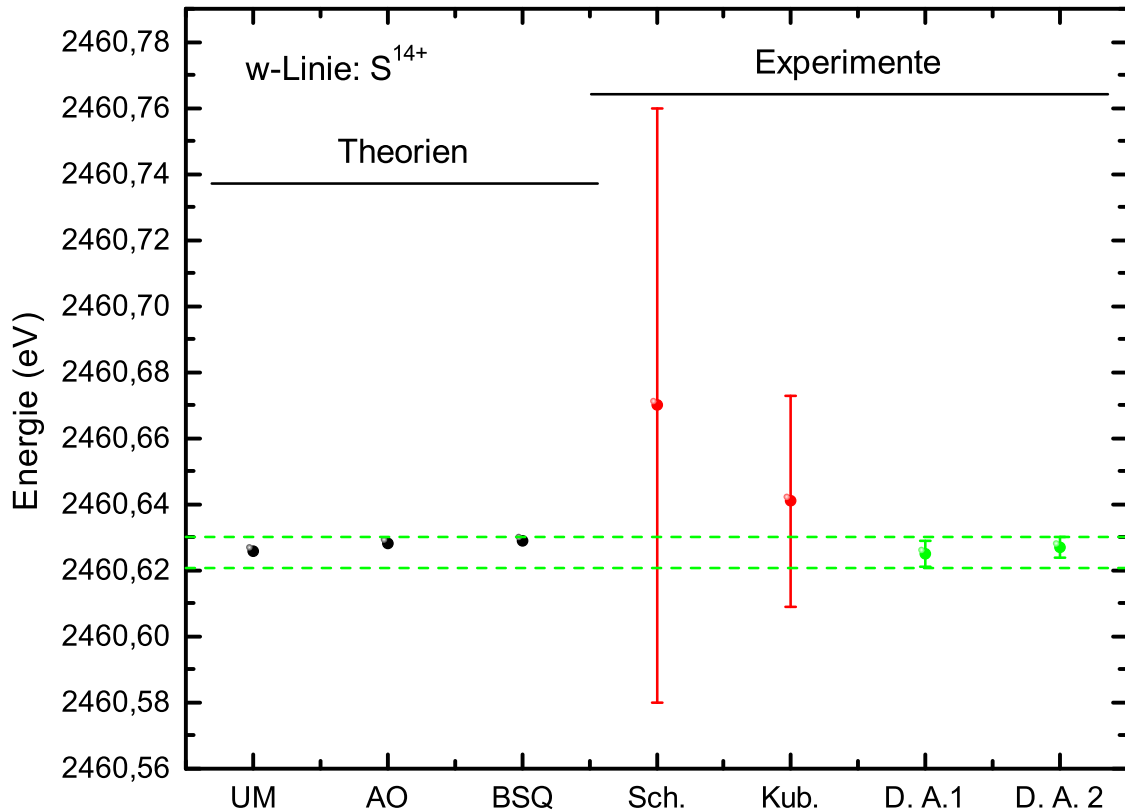
**Tabelle 4.8:** Übersicht über die theoretisch, nach dem BSQED-Ansatz berechneten [30] Ein- und Zwei-Elektronen-QED-Korrekturen für verschiedene Zustände in  $\text{Ar}^{16+}$ . Ges. 1-el.: gesamter 1-Elektronen-QED-Beitrag; Abs. SE: Abgeschirmte Selbstenergie; Abs. VP: Abgeschirmte Vakuumpolarisation; 2-Ph. Aust.: QED Beiträge durch Austausch von 2 virtuellen Photonen; Ges. 2-el.: Summe aller dieser 2-Elektronen-Effekte; Höh. Ordn.: Effekte höherer Ordnung. Alle Angaben in eV.

die UM relativistische Effekte angeblich unvollständig beschreibt. Das gleiche Verfahren ergibt für die AO Rechnungen, wobei die UM QED Korrekturen verwendet wurden, dass sich die vorher perfekte Übereinstimmung zwischen den Resultaten der AO und BSQED Rechnungen (wie auch die Übereinstimmung mit den experimentellen Resultaten dieser Arbeit) verschlechtert. Aufgrund dieser Überlegungen erscheinen die BSQED QED Korrekturen besser als die der UM und der BSQED-Ansatz, die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu behandeln, kompletter als der der AO zu sein.

Aus den in Tab. 4.8 (analog zu Tab. 1.4) angegebenen Werten ist ersichtlich, dass eine sehr hohe Präzision erforderlich ist, um Effekte, die für die moderne Atomphysik interessant sind, zu testen. Die Messung der  $w$  Übergangsenergie von  $\text{Ar}^{16+}$  dieser Arbeit weist eine relative Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 1.54 \text{ ppm} \hat{=} 5 \text{ meV}$  (siehe auch Tab. 4.7) auf. Damit handelt es sich bei diesem Ergebnis und allgemein den Resultaten dieser Arbeit bis heute um die präzisest bestimmten Röntgenwellenlängen für hochgeladene Ionen. Diese erlauben es, die neuesten Vorhersagen über Zwei-Elektronen und Zwei-Photonen radiative QED-Korrekturen für heliumartige Ionen zu überprüfen. Wie in Tab. 4.8 dargestellt, ist das Resultat dieser Arbeit für die  $w$  Übergangsenergie von  $\text{Ar}^{16+}$  auf einem Niveau von 5% des Gesamtbetrages aller Zwei-Elektronen-QED-Effekte auf diese Effekte für die  $^1S_0$ -Grundzustandsenergie sensitiv, d.h. auch auf den Beitrag der „abgeschirmten“ Selbstenergie, der „abgeschirmten“ Vakuumpolarisation und die QED Beiträge durch Austausch von 2 virtuellen Photonen. Außerdem lässt sich der gesamte 1-Elektronen-QED-Beitrag zum angeregten  $^1P_1$  Niveau überprüfen, wobei die experimentelle Genauigkeit hier zu gering ist, um den 3 meV Beitrag der Summe aller 2-Elektronen-Effekte zu testen. Allerdings sind die QED Beiträge durch Austausch von 2 virtuellen Photonen (9 meV) bloß einen Faktor  $\sim 2$  größer als die jetzige experimentelle Unsicherheit.

Abb. 4.24 stellt analog zu Abb. 4.23 den in dieser Arbeit experimentell ermittelten Wert für die  $w$  Übergangsenergie in heliumartigen Schwefel zusammen mit theoretischen Vorhersagen [27,28,30] und anderen experimentellen Ergebnissen [107, 108] für diese Übergangsenergie dar. Die Experimente dieser Arbeit wie auch die von Kubiček *et al.* mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer durchgeführten Messungen sind dabei Wellenlängenmessungen ohne Rückgriff auf Referenzlinien. Für die Messungen von Kubiček *et al.* wurde im Gegensatz zu den Messungen dieser Arbeit ein Skalierungsgesetz zur Bestimmung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  (siehe Kap. 3.3.1) genutzt, d.h.





**Abbildung 4.24:** Vergleich des in dieser Arbeit experimentell ermittelten Wertes für die  $w$  Übergangsenergie in heliumartigen Schwefel mit theoretischen Vorhersagen und anderen experimentellen Resultaten. Theoretische Werte: UM [27], AO: [28], BSQED: [30]. Experimentelle Werte: Sch. [108], Kub. [107] und die Werte dieser Arbeit (D.A.1, D.A.2). Bei dem experimentell bestimmten Wert von Schleinkofer *et al.* handelt es sich um eine Messung mit Rückgriff auf die Lyman- $\alpha$  Linien von  $S^{15+}$  als Referenzlinien. Der Wert von Kubiček *et al.* wurde ohne Rückgriff auf Referenzlinien mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer ermittelt. Dabei wurde ein Skalierungsgesetz zur Bestimmung des Korrekturwinkels  $\bar{\zeta}$  (siehe Kap. 3.3.1) verwendet, d.h. der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  wurde für dieses Experiment nicht explizit experimentell bestimmt. Allein bei der Experimenten dieser Arbeit handelt es sich um Messungen der  $w$  Übergangsenergie, die nicht auf Referenzlinien oder ein Skalierungsgesetz für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  zurückgreifen.

der Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  wurde für diese Messung nicht explizit experimentell bestimmt. Die Experimente von Schleinkofer *et al.* [109] sind Messungen mit Rückgriff auf die Lyman- $\alpha$  Linien von  $S^{15+}$  als Referenzlinien. Alle experimentellen Resultate stimmen innerhalb ihrer Fehlerbalken überein. Besonders gut ist die Übereinstimmung für die Messungen dieser Arbeit, die zeitlich  $\sim 1$  Monat voneinander entfernt stattfanden. Bei einer relativen Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung  $\Delta\lambda/\lambda$  für diese beiden Messungen von  $\sim 1.5$  ppm unterscheiden sich die Messergebnisse um lediglich 0.8 ppm, d.h. die Ergebnisse sind im sub-ppm Bereich reproduzierbar. Weiterhin fällt auf, dass der frühere Wert für die Übergangsenergie, der mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer bestimmt wurde, höher als die jetzigen Werte liegt. Dies kann möglicherweise dadurch erklärt werden, dass zur Ermittlung dieses Wertes ein Skalierungsgesetz für den Korrekturwinkel  $\bar{\zeta}$  eingesetzt wurde, welches die Blockade von Röntgenstrahlen durch Spekto-

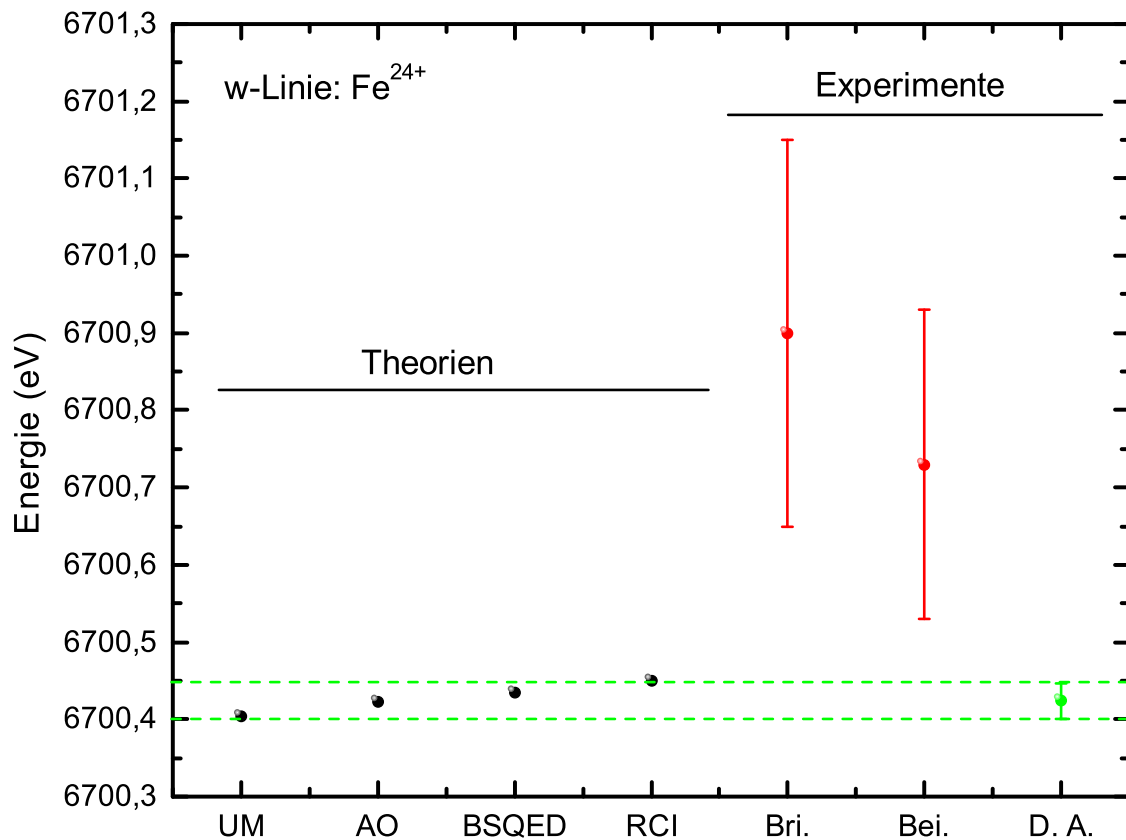
Zustand	Ges. 1-el.	Abs. SE	Abs. VP	2-Ph. Aust.	Ges. 2-el.	Höh. Ordn.
$^1S_0$	0.7562	-0.0832	0.0051	0.0066	-0.0715	0.0009
$^1P_1$	0.0038	-0.0022	0.0001	0.0000	-0.0022	0.0001

**Tabelle 4.9:** Übersicht über die theoretisch, nach dem BSQED-Ansatz berechneten [30] Ein- und Zwei-Elektronen-QED-Korrekturen für verschiedene Zustände in  $S^{16+}$  in eV. Ges. 1-el.: gesamter 1-Elektronen-QED-Beitrag; Abs. SE: Abgeschirmte Selbstenergie; Abs. VP: Abgeschirmte Vakuumpolarisation; 2-Ph. Aust.: QED Beiträge durch Austausch von 2 virtuellen Photonen; Ges. 2-el.: Summe aller dieser 2-Elektronen-Effekte; Höh. Ordn.: Effekte höherer Ordnung.

meterstrahlrohrelemente nicht berücksichtigt. Für diese frühere Messung ist daher eine detaillierte Untersuchung der Krümmung der Röntgenlinie in der Detektorebene, wie in Kap. 3.3.9 vorgestellt, geplant. Der Wert für die  $w$  Übergangsenergie, der in den Messungen dieser Arbeit ermittelt wurde, weist einen um Faktor  $\sim 10$ -30 kleineren Fehler auf als die früheren Messungen. Besonders in Hinblick auf die Messungen von Schleinkofer *et al.* ist dies bemerkenswert, da es sich bei [108] lediglich um eine Relativmessung unter Rückgriff auf die Lyman- $\alpha$  Wellenlängen als Referenzwellenlängen handelt.

Ein Vergleich der in dieser Arbeit ermittelten Werte für die  $w$  Übergangsenergie mit den theoretischen Vorhersagen lässt keine einwandfreie Aussage darüber zu, welche Theorie die Energien der Niveaus in  $S^{14+}$  am besten wiedergibt. Bestenfalls lässt sich ein schwacher Trend erkennen. Der Mittelwert der Werte der hier vorgestellten Messungen stimmt präzise mit dem theoretischen Wert der UM [27] überein, während die Ergebnisse der AO-Methode [28] und besonders der BSQED-Methode bis zu 3 meV höher liegen als der experimentelle Wert. Dies deckt sich mit den oben getroffenen Aussagen, dass für heliumartige Ionen mit niedrigem  $Z$  die Verschiebung der Energieniveaus aufgrund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung größer ist als die Verschiebung, die sich aufgrund der Relativistik ergibt und die UM, die relativistische Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt, daher besonders für die Beschreibung dieser Systeme geeignet ist.

Tab. 4.9 gibt analog zu Tab. 1.4 und 4.8 die theoretischen, nach dem BSQED-Ansatz berechneten [30] Ein- und Zwei-Elektronen-QED-Korrekturen für verschiedene Zustände in  $S^{16+}$  an. Der Mittelwert des Wertes für die  $w$  Übergangsenergie der Messungen dieser Arbeit an  $S^{14+}$  besitzt eine relative Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung von  $\Delta\lambda/\lambda \approx 1.22$  ppm  $\hat{=} 3$  meV (siehe auch Tab. 4.7). Wie im Falle der  $w$  Übergangsenergie von  $Ar^{16+}$  ist es damit möglich, die neuesten theoretischen Werte für Zwei-Elektronen und Zwei-Photonen radiative QED-Korrekturen für heliumartige Ionen experimentell zu überprüfen. Tab. 4.9 ist zu entnehmen, dass das Resultat dieser Arbeit für die  $w$  Übergangsenergie von  $S^{14+}$  auf einem Niveau von 4% des Gesamtbetrages aller Zwei-Elektronen-QED-Effekte auf diese Effekte für die  $^1S_0$ -Grundzustandsenergie sensitiv ist. Außerdem lässt sich der gesamte 1-Elektronen-QED-Beitrag zum angeregten  $^1P_1$  Niveau testen. Daneben können die QED Beiträge, die durch den Austausch von 2 virtuellen Photonen entstehen und sich auf ( $\sim 7$  meV) belaufen, da sie einen Faktor  $\sim 3$  größer als die jetzige experimentelle Unsicherheit sind, überprüft werden. Der Beitrag (2 meV) der Summe aller 2-Elektronen-Effekte



**Abbildung 4.25:** Vergleich des in dieser Arbeit experimentell, relativ zu den Werten für die Lyman- $\alpha$  Übergangsenergien in  $\text{Fe}^{25+}$  ermittelten Wertes für die  $w$  Übergangsenergie in heliumartigen Eisenionen mit theoretischen Vorhersagen und anderen experimentellen Resultaten. Theoretische Werte: UM [27], AO: [28], RCI: [29], BSQED: [30]. Experimentelle Werte: Bri. [115], Bei. [64] und der Wert dieser Arbeit (D.A.). Auch bei den anderen experimentell bestimmten Werten von Briand *et al.* und Beiersdorfer *et al.* handelt es sich um Messungen mit Rückgriff auf die Lyman- $\alpha$  Linien in wasserstoffartigem Eisen als Referenzlinien.

ist allerdings nicht experimentell zugänglich, da die experimentelle Genauigkeit dafür zu gering ist.

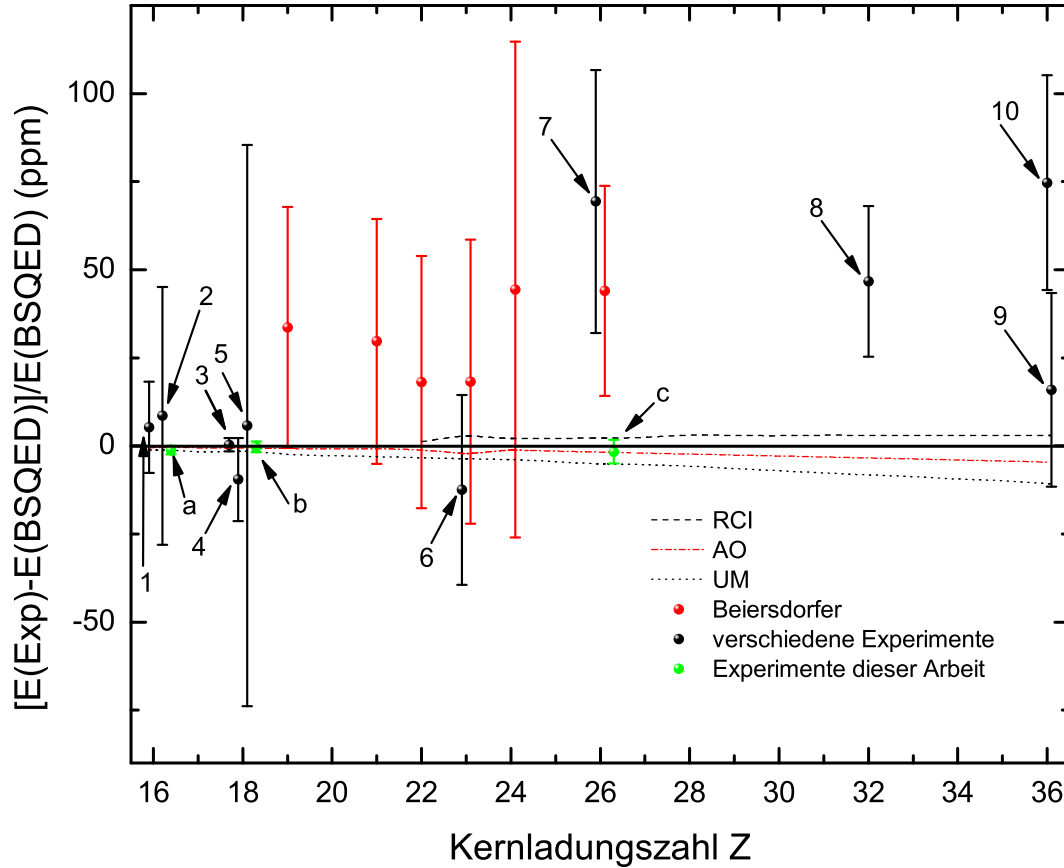
In Abb. 4.25 ist analog zu Abb. 4.24 und Abb. 4.23 der in dieser Arbeit experimentell, relativ zu den Werten für die Lyman- $\alpha$  Übergangsenergien in  $\text{Fe}^{25+}$  mittels eines Si(220)-Kristalls bestimmte Wert für die  $w$  Übergangsenergie in heliumartigen Eisen zusammen mit theoretischen Vorhersagen [27–30] und anderen experimentellen Ergebnissen [64, 115] für diese Übergangsenergie eingezeichnet. Auch bei den Experimenten anderer Gruppen, Briand *et al.* [115] und Beiersdorfer *et al.* [64], handelt es sich um Relativmessungen, die auf die Lyman- $\alpha$  Linien in wasserstoffartigem Eisen als Referenzlinien zurückgreifen.

Eine interessante Beobachtung ergibt sich durch den Vergleich der in dieser Arbeit experimentell ermittelten Resultate mit weiteren experimentellen Werten. Alle hier vorgestellten experimentel-

len Werte anderer Gruppen [64, 115], die die gleiche Referenzlinie nutzen wie die Experimente dieser Arbeit, liegen um ca.  $15\sigma$ , d.h. mehr als  $\sim 300$  meV höher als der in dieser Arbeit ermittelte experimentelle Wert, wobei  $\sigma$  die im Vergleich zu früheren Experimenten um Faktor  $\sim 7$  kleinere experimentelle Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung dieser Arbeit darstellt. Dagegen stimmt der in dieser Arbeit ermittelte Wert innerhalb seines Fehlerbalkens mit den Vorhersagen aller theoretischen Ansätze, UM [27], AO [28], RCI [29], BSQED [30], überein. Bezüglich der in Kap. 1.7 aufgestellten Fragestellung, ob die theoretischen Ansätze für heliumartige Systeme grundsätzlich in der Lage sind, die Energien der Niveaus in Systemen mit  $Z = 26$ , den Grenzbereich zwischen hoher und niedriger Kernladungszahl  $Z$ , mit ausreichender Genauigkeit zu beschreiben, kann damit geschlossen werden, dass die Theorien auch für  $Z = 26$  grundsätzlich nicht grob fehlerbehaftet sind, wie dies durch die anderen experimentellen Werte [64, 115] eventuell nahegelegt werden könnte. Es ergibt sich eher die Vermutung, dass die anderen Messungen mit vergleichsweise hohen relativen Unsicherheiten in der Wellenlängenbestimmung von  $\sim 30$  ppm systematische Fehler aufweisen könnten. Da die Experimente die Bragg-Winkel mittels unterschiedlicher Kristalle bestimmen, wobei Beiersdorfer *et al.* [64] die Linien in zweiter Ordnung der Bragg-Reflektion mit einem Quarz(11 $\bar{2}$ 0)-Kristall und Briand *et al.* [115] in erster Ordnung der Bragg-Reflektion mit einem Si(220)-Kristall beobachten, kann der mögliche systematische Fehler für die Messungen nicht auf eine globale Eigenschaft eines bestimmten Kristallgitters zurückgeführt werden. Eher wird vermutet, dass die Spektren der  $w$  Linien von  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen, die von Beiersdorfer *et al.* am Princeton Large Torus und von Briand *et al.* mittels der Strahl-Folien-Methode am SuperHilac in Berkeley erzeugt wurden, aufgrund der jeweiligen Methode zur Ionenproduktion Satelliten-behaftet sind und die Satelliten-Linien nicht getrennt von den Hauptlinien aufgelöst werden konnten, was die beobachtete Energieverschiebung der experimentellen relativ zu den theoretischen Werten erklären könnte.

Die Genauigkeit der Messung dieser Arbeit reicht noch nicht aus, um eindeutig zu entscheiden, ob die UM, die relativistische Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigt, und eigentlich besonders für die Beschreibung heliumartiger Systeme mit niedrigem  $Z$  geeignet sein sollte, oder die anderen Methoden [28–30], die relativistische Korrekturen höherer Ordnung zur Elektron-Elektron-Wechselwirkung einschließen, und damit für heliumartige Ionen mit hohem  $Z$  besser geeignet sind, die Energieniveaus der heliumartigen Ionen in einer Region um  $Z = 26$  besser beschreiben können. Der über die UM Methode berechnete Wert liegt am Rande der  $1\text{-}\sigma$ -Umgebung des experimentell ermittelten Wertes. Um zweifelsfrei zu klären, ob die UM die Energien der Niveaus im heliumartigen  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen mit vergleichsweise hohem  $Z$  nicht mit ausreichender Genauigkeit beschreibt, muss die Unsicherheit in der Wellenlängenbestimmung in künftigen Experimenten weiter gesenkt werden. Der Abbildung ist daneben zu entnehmen, dass sich die geringste Abweichung zu einer theoretischen Vorhersage mit 1 meV für die AO Methode von Plante *et al.* [28] ergibt. Weiterhin ist analog zu der Bestimmung der  $w$  Übergangsenergie von  $\text{Ar}^{16+}$  auch hier festzustellen, dass der Wert der durch die RCI Methode [29] vorhergesagt wird, am Rande der experimentell bestimmten Fehlerbalken liegt und der RCI Ansatz somit eventuell auch für die Beschreibung der Niveaus in  $\text{Fe}^{24+}$  nicht geeignet ist.

Um näher zu untersuchen, welche Schlussfolgerungen sich in einem größeren Kontext aus der



**Abbildung 4.26:** Vergleich von experimentellen  $w$  ( $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$ ) Übergangsenergien in heliumartigen Ionen mit Kernladungszahl  $Z$  mit theoretisch berechneten Werten. Alle experimentellen Daten wurden auf die theoretisch berechneten Übergangsenergien von Artemyev *et al.* [30] (BSQED) normiert. RCI: relativistische Konfigurations-Wechselwirkungs-Methode [29]; AO: All-order-Methode [28]; UM: vereinheitlichte Methode [27]; Beiersdorfer (rot): Princeton Large Torus (PLT) K: ( $Z=19$ ), Sc: ( $Z=21$ ), Ti: ( $Z=22$ ), V: ( $Z=23$ ), Cr: ( $Z=24$ ), Fe: ( $Z=26$ ) [64]; verschiedene Experimente (schwarz): (1) S: ( $Z=16$ ) [107]; (2) S: ( $Z=16$ ) [108]; (3) Ar: ( $Z=18$ ) [43]; (4) Ar: ( $Z=18$ ) [109]; (5) Ar: ( $Z=18$ ) [52]; (6) V: ( $Z=23$ ) [110]; (7) Fe: ( $Z=26$ ) [111]; (8) Ge: ( $Z=32$ ) [66]; (9) Kr: ( $Z=36$ ) [112], (10) Kr: ( $Z=36$ ) [113]; Experimente dieser Arbeit (grün) (a): S: ( $Z=16$ ); (b): Ar: ( $Z=18$ ); (c): Fe: ( $Z=26$ ).

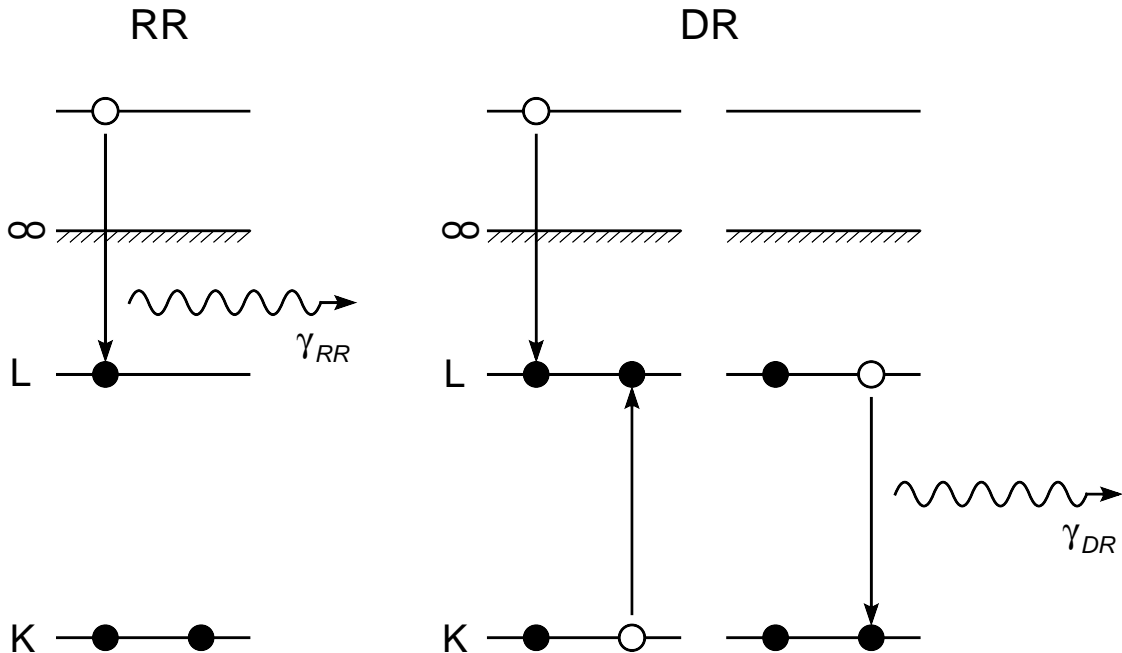
Messung der  $w$  Übergangsenergie in  $\text{Fe}^{24+}$  ergeben, sind in Abb. 4.26 alle gemessenen  $w$  Übergangsenergien in heliumartigen Ionen mit Kernladungszahl  $Z$  zusammen mit theoretisch berechneten Werten aufgetragen, wobei die experimentellen Daten auf die theoretisch berechneten Übergangsenergien von Artemyev *et al.* [30] (BSQED) normiert wurden. Die grünen Datenpunkte a und b geben dabei die Ergebnisse der Absolutmessungen dieser Arbeit für die Energie der  $w$  Linie von  $\text{S}^{14+}$  und  $\text{Ar}^{16+}$  wieder, c stellt das Resultat für die in dieser Arbeit durchgeführte Relativmessung zur Bestimmung der Energie der  $w$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  dar. Im Bereich bis ca.  $Z = 24$  sind alle gemessenen Übergangsenergien innerhalb ihrer  $1\sigma$ -Umgebung mit den theoretisch berechneten in Einklang. Für die  $w$  Übergangsenergien in Ionen mit  $Z \geq 26$  ergibt sich dagegen

für einige Messungen eine deutliche Abweichung zwischen experimentellen und theoretischen Werten in der Größenordnung von  $\sim 50$  ppm, nicht nur im Falle des schon diskutierten  $\text{Fe}^{24+}$ , sondern auch für die Messungen an  $\text{Ge}^{30+}$  [66] und  $\text{Kr}^{34+}$  [113]. Diese Abweichung in der mittleren  $Z$ -Region für heliumartige Ionen legt entweder einen Fehler bzw. unzureichende Ansätze oder Näherungen der Theorie, wie in [49, 64, 110] vermutet, oder einen systematischen Fehler in den Experimenten nahe. Nach den vorangehenden Überlegungen und Vergleich mit dem in dieser Arbeit bestimmten Datenpunkt  $c$  wird zweite Erklärung, dass die Abweichung durch systematische Fehler in den Experimenten verursacht wird, wieder wahrscheinlicher. Auch die Ergebnisse der Messung der  $w$  Übergangsenergie von  $\text{Kr}^{34+}$  von Widmann *et al.* [112] stützen diese Vermutung, da sie innerhalb der Fehlerbalken mit den theoretischen Vorhersagen, nicht aber mit einem weiteren experimentellen Wert für diesen Übergang [113] übereinstimmen. Um zweifelsfrei herauszufinden, ob die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment tatsächlich durch systematische Fehler in den Experimenten verursacht wird, ist es erforderlich, weitere  $w$  Übergangsenergien in heliumartigen Ionen mit unterschiedlicher mittlerer Kernladungszahl  $Z$  experimentell präzise zu vermessen. Dadurch kann auch die  $Z$ -Abhängigkeit der Abweichung zwischen theoretischen und experimentellen Werten untersucht werden und, sollte es sich um systematische Fehler in den Experimenten handeln, können es weitere unabhängige Messungen ermöglichen, diese systematischen Fehler genauer zu identifizieren. Wir hoffen daher, dass unsere Resultate andere Gruppen ermutigen, Hochpräzisionsröntgenwellenlängenmessungen durchzuführen, um die Theorien für heliumartige Ionen mittlerer Kernladungszahl  $Z$  unabhängig zu überprüfen.

#### 4.4.8 Röntgenwellenlängenmessungen an lithiumartigen Ionen

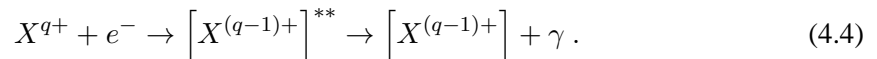
Wie oben bereits erwähnt wurden in dieser Arbeit nicht nur Übergänge in wasserstoff- und heliumartigen Schwefel-, Argon- und Eisenionen spektroskopiert, sondern auch dielektronische Satelliten-Linien lithium- und berylliumartiger Eisenionen. Die relativ zur Wellenlänge der  $w$ -Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  bestimmten Wellenlängen der  $r$  und  $t$  Linie von  $\text{Fe}^{23+}$  (siehe auch Tab. 4.1) wurden bei diesen Relativmessungen als Referenzwellenlängen verwendet. Um die lithiumartigen und berylliumartigen dielektronischen Satelliten-Linien von  $\text{Fe}^{23+}$  bzw.  $\text{Fe}^{22+}$  mit ausreichender Intensität zu erzeugen, und möglichst viele Linien gleichzeitig relativ zu den Referenzlinien vermessen zu können, wurde ein leicht verändertes Messschema gewählt wie für die Messungen an wasserstoff- und heliumartigen Ionen.

Es wurde dafür der Prozess der dielektronischen Rekombination (DR) ausgenutzt. Von Rekombination spricht man dabei allgemein, wenn ein positiv geladenes Ion auf ein freies Elektron trifft und dieses einfängt, wodurch die Ladung des Ions sich um eins erniedrigt. Damit ein solcher Prozess stattfinden kann, muß das Elektron Energie abgeben, die von einem anderen Elektron oder einem Photon übernommen werden muss. Als radiative Rekombination (RR) bezeichnet man dabei den Prozess, bei dem ein freies Elektron mit einem Ion der Ladung  $q + 1$  zu einem der Ladung  $q$  rekombiniert, wobei die frei werdende Energie in Form eines Photons abgegeben wird. Dieser Prozess kann bei beliebigen Elektronenergien stattfinden. Unter der dielektronischen Rekombination (DR) versteht man im Unterschied dazu, den Vorgang, bei dem ein freies Elektron in ein



**Abbildung 4.27:** Dielektronische Rekombination eines heliumartigen Ions (KLL-Resonanzen). Skizziert sind der Ausgangszustand mit zwei Elektronen in der K-Schale und einem Kontinuumsselektron sowie der doppelt angeregte Zwischenzustand mit zwei Elektronen in der L-Schale, und die mögliche radiative Abregung des angeregten Zustandes. Die ersten zwei Buchstaben bezeichnen in dieser Notation die bei der Anregung des gebundenen Elektrons beteiligten Schalen, der letzte die Schale, in die das freie Elektron eingefangen wird.

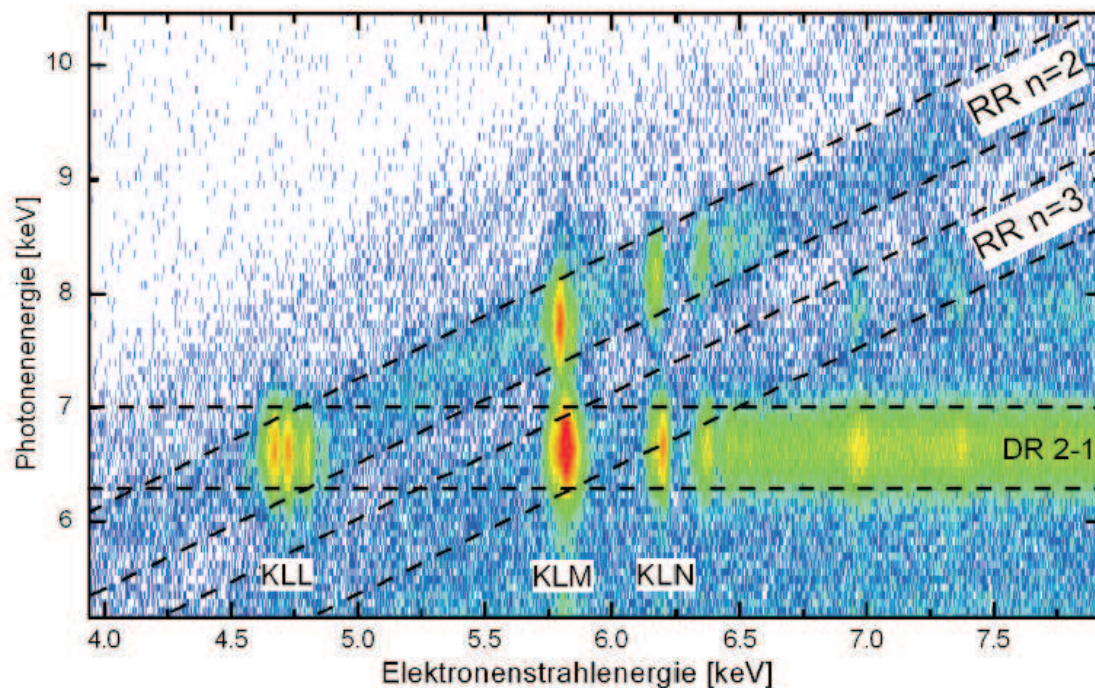
Atom oder Ion eingefangen wird und die dabei frei werdende Energie auf ein gebundenes Elektron überträgt, welches resonant auf ein höheres Niveau angeregt wird. DR kann nur dann stattfinden, wenn die Summe aus der kinetischen Energie des eingefangenen Elektrons und der frei werdenden Bindungsenergie genau so groß ist, wie dafür benötigt. Dieser Vorgang kann zur theoretischen Beschreibung als zweistufiger Prozess aufgefasst werden. Ein Beispiel ist in Abb. 4.27 gezeigt. Im ersten Schritt rekombiniert ein Ion der Ladung  $q$  mit einem freien Elektron zu einem zweifach angeregten Ion der Ladung  $q - 1$ . Dieser Vorgang, der dielektronische Einfang, ist der Zeitumkehrprozess des Auger-Zerfalls. Im zweiten Schritt wird autoionisierende Zwischenzustand unter Aussendung von Photonen abregert:



Dieser Ablauf ist energetisch nur dann möglich, wenn die Elektronenenergie  $E_e$  genau der Differenz aus der Energie  $E_A$  des Ausgangszustandes und der Energie des (doppelt) angeregten Zwischenzustandes  $E_Z$  entspricht.

$$E_e = E_Z - E_A. \quad (4.5)$$

In Abb. 4.28 sind die mit Hilfe eines Germanium-Detektors detektierten Photonenergebnisse von hochgeladenem Eisen bei verschiedenen Elektronenstrahlenergien gezeigt. In dem zweidimensionalen Diagramm ist die Häufigkeit der Photonemission als Funktion der Elektronenstrahlenergie

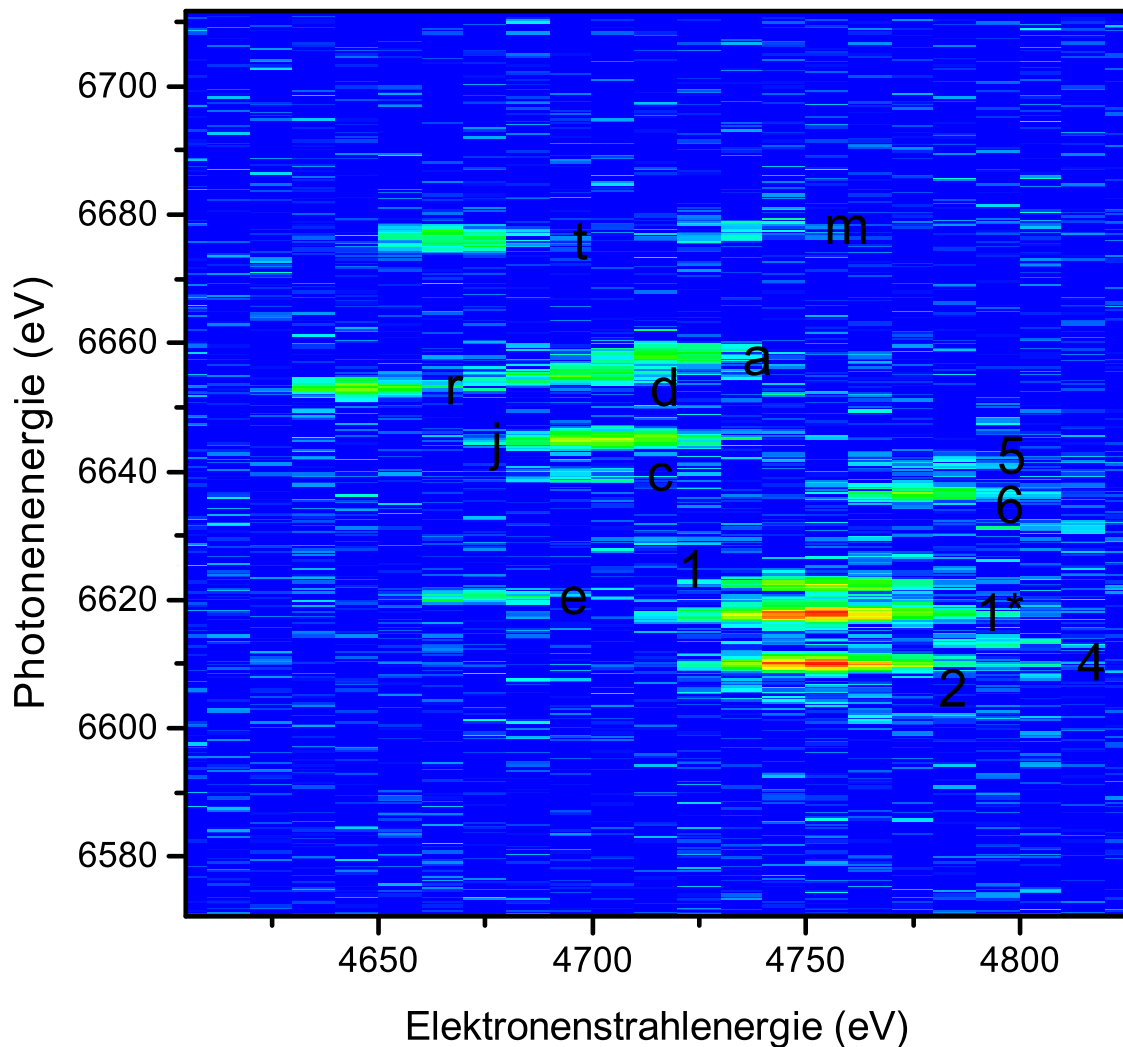


**Abbildung 4.28:** Zweidimensionale Darstellung der Photorekombination hochgeladener Eisenionen (vorwiegend  $\text{Fe}^{24+}$  bis  $\text{Fe}^{22+}$ ). Linienintensitäten und Photonenergien wurden mit einem Germanium-Detektor ermittelt. Es sind zwei diagonale Bänder aufgrund der radiativen Rekombination in die Schalen  $n = 2$  und  $n = 3$  sichtbar. Das horizontale Band entsteht durch direkte Anregung von  $n = 2$  zu  $n = 1$  Übergängen. Die DR-Resonanzen sind als einzelne helle Maxima erkennbar. Bild aus [165].

(x-Achse) und der Photonenergie (y-Achse) in Form einer logarithmischen Farbskala gezeigt. Bei der direkten Rekombination ist wie oben besprochen die Energie der Rekombinationsphotonen gleich der Summe aus der kinetischen Energie des freien Elektrons und dem konstanten Beitrag der freiwerdenden Bindungsenergie. Die Energie dieser Photonen wächst daher linear mit der Elektronenstrahlenergie an. Im Plot sind zwei diagonale Bänder gekennzeichnet (RR2, RR3). Das obere Band, das bei höheren Photonenergien liegt, entsteht durch Elektroneneinfang in die zweite Schale, während das untere Band durch den Einfang in die dritte Schale erzeugt wird. Auf diesen Bändern sieht man abgegrenzte Bereiche hoher Photonenergieintensität; diese werden durch die dielektronischen Resonanzen erzeugt. Gekennzeichnet sind die KLL-, KLM- und KLN- Resonanzen. Die ersten zwei Buchstaben bezeichnen in dieser Notation die bei der Anregung des gebundenen Elektrons beteiligten Schalen, der letzte die Schale, in die das freie Elektron eingefangen wird.

Für die Messungen dieser Arbeit wurde der starke Anstieg der Photonenanzahl der dielektronischen Satelliten-Linien lithium- und berylliumartiger Ionen im Bereich der KLL-DR-Resonanzen ausgenutzt. Die Elektronenstrahlenergie wurde für jede Aufnahme eines Röntgenspektrums im Bereich der Resonanzenergien auf einen festen Wert gesetzt. Nach jeder dieser 2-stündigen Auf-





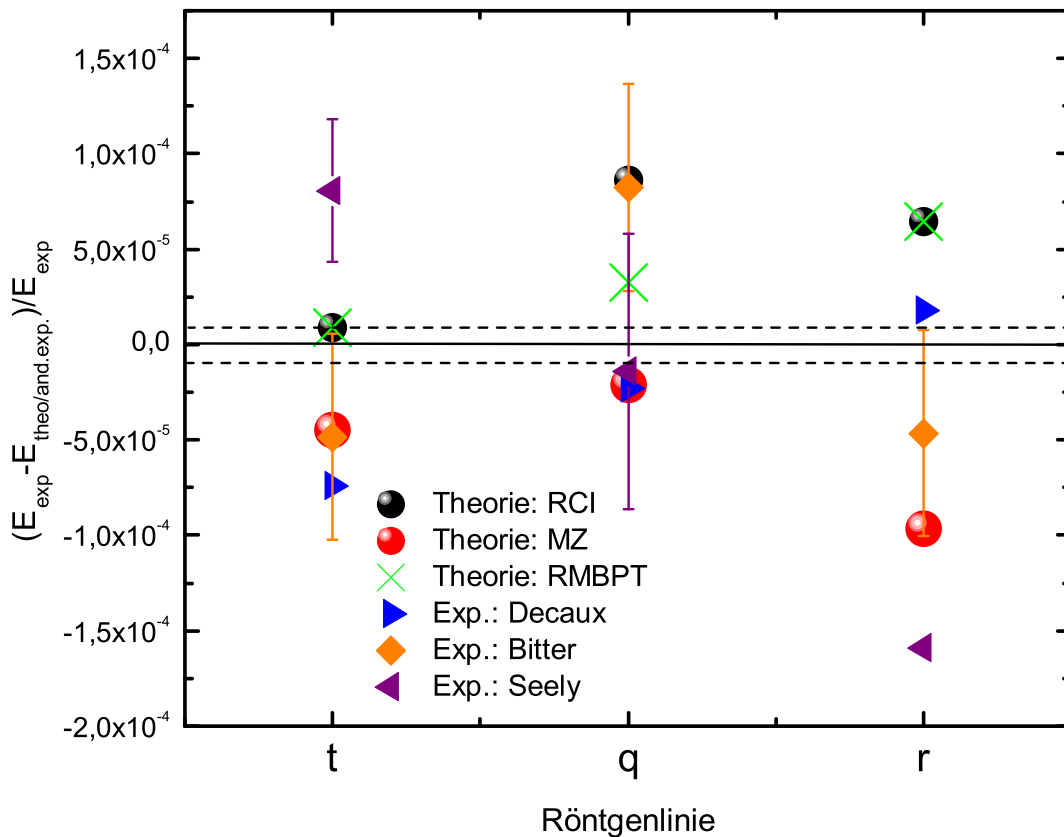
**Abbildung 4.29:** Zweidimensionale Darstellung der Photorekombination hochgeladener Eisenionen ( $\text{Fe}^{23+}$  und  $\text{Fe}^{22+}$ ). Bezeichnung der Linien analog zu Tab. 4.1. Die Intensität der Photonemission ist als Funktion der Elektronenstrahlenergie (x-Achse) und der Photonenergie (y-Achse) in Form einer logarithmischen Farbskala gezeigt. Linienintensitäten und Photonenergien wurden mit dem Kristallspektrometer aufgezeichnet. Die Intensität in den Röntgenlinien variiert als Funktion der Strahlenergie, da die Linien nur dann resonant angeregt werden, wenn die Elektronenstrahlenergie der Differenz aus der Energie  $E_A$  des Ausgangszustandes und der Energie des (doppelt) angeregten Zwischenzustandes  $E_Z$  entspricht (siehe auch Gl. 4.5).

nahmen wurde die Elektronenstrahlenergie beginnend bei 5120 V um 10 V erhöht. Jedes Röntgenspektrum wurde damit bei einer anderen Strahlenergie aufgenommen. So erhielt man sequentiell 22 Röntgenspektren bei fixen Kristall- und Kamerawinkeln. Über die Dispersionsrelation des Spektrometers und die Fits an die beobachteten Röntgenlinien und die Referenzlinien, die relativ zur  $w$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  vermessenen Linien  $t$  und  $r$  von lithiumartigen Eisenionen, konnten dann die Bragg-Winkel der Satelliten-Linien bestimmt und in Übergangsenergien übersetzt werden (siehe Tab. 4.5). Trägt man die Intensität der mit dem Kristallspektrometer vermessenen Röntgenlinien

als Funktion ihrer Photonenenergien und der angelegten Elektronenstrahlenergie auf, so ergibt sich eine Darstellung wie in Abb. 4.29. Die Bezeichnung der Linien in der Abbildung ist dabei analog zu Tab. 4.1 gewählt. Die Intensität der Röntgenlinien variiert als Funktion der Strahlenergie, da die Linien nur dann resonant angeregt werden, wenn die Elektronenstrahlenergie der Differenz aus der Energie  $E_A$  des Ausgangszustandes und der Energie des (doppelt) angeregten Zwischenzustandes  $E_Z$  entspricht (siehe auch Gl. 4.5). Durch Vergleich mit Abb. 4.29, für die die dargestellten Intensitäten und Photonenenergien mit einem Germanium-Detektor ermittelt wurden, ist ferner ersichtlich, dass die Auflösung in der Elektronenstrahlenergie für die Abb. 4.29 niedriger ist, die Auflösung in der Photonenenergie aber um bis zu Faktor 40 höher. Bei einem Experiment mit Germanium-Detektor und Kristallspektrometer kann daher sowohl die Elektronenstrahlenergie als auch die Photonenenergie mit hoher Genauigkeit bestimmt werden. Der Vorteil für die Messung der Röntgenwellenlängen in Kombination mit der resonanten Anregung der Übergänge der spektroskopierten Linien besteht ferner darin, dass die Linien selektiv angeregt werden können und so auch benachbarte Linien, deren Wellenlängen normalerweise so nahe beieinander liegen, dass sie aufgrund des beschränkten Auflösungsvermögens des Röntgenspektrometers nicht getrennt aufgelöst werden können, getrennt werden können.

Durch einen Vergleich zwischen theoretischen und experimentellen Werten der Übergangsenergien in lithiumartigen  $\text{Fe}^{23+}$ -Ionen kann überprüft werden, welche der Theorien, die Energien der Niveaus in diesen Systemen am besten vorhersagt. Zu diesem Zweck stellt Abb. 4.30 die Abweichungen der in dieser Arbeit experimentell, relativ zur Wellenlänge der  $w$  Linie ermittelten Werte für die  $t$ ,  $r$  und  $q$  Übergangsenergien von lithiumartigen Eisenionen  $E_{exp}$  von den theoretischen Vorhersagen  $E_{theo}$  [154, 166] und anderen experimentellen Ergebnissen  $E_{and.exp.}$  [159–163] dar. Zum besseren Vergleich wurden die experimentellen Ergebnisse anderer Gruppen, für die die Wellenlängen relativ zu der  $w$  Linie ermittelt wurden und die unterschiedliche Werte für diese Wellenlänge angeben, bezüglich des in dieser Arbeit relativ zu den Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Fe}^{25+}$  bestimmten Wertes der Wellenlänge der  $w$  Linie korrigiert. Sofern angegeben wurden die Fehlerangaben für die experimentellen Werte in die Abbildung übernommen. Im Allgemeinen ergibt sich folgendes Bild. Die Werte, die mit der RCI Methode berechnet wurden [166] und diejenigen, die mittels des RMBPT (relativistische Vielkörper-Störungstheorie, engl.: relativistic many-body perturbation theory) Ansatzes bestimmt wurden, liegen im Vergleich zu den in dieser Arbeit ermittelten Werten allgemein niedriger, maximal um  $\sim 450$  meV. Dagegen sind die von den MZ Berechnungen, die die nichtrelativistische Variante der RMBPT Berechnungen darstellen [154], vorhergesagten Werte alle höher als die in dieser Arbeit bestimmten Werte, maximal um  $\sim 700$  meV. Eine Übereinstimmung mit theoretischen Werten ergibt sich für die Resultate dieser Arbeit innerhalb ihrer Fehlerbalken nur für die  $t$  Linie und die RCI und RMBPT Berechnungen. Vergleicht man die experimentellen Werte dieser Arbeit mit denen anderer Gruppen, so stimmen diese für die  $t$  und die  $r$  Linien innerhalb der Fehlerbalken nur mit den experimentellen Werten von Bitter *et al.* [161, 162] überein, wobei für die Werte von Decaux *et al.* [159, 160] kein Fehlerbalken angegeben war. Für die  $q$  Linie dagegen ergibt sich innerhalb der  $1-\sigma$  Umgebung eine Übereinstimmung mit den Experiment von Seely *et al.* [163], wobei auch der Wert von Decaux *et al.* [159, 160] vergleichsweise nahe an dem experimentellen Wert unserer Arbeit liegt. Hervorzuheben ist hierbei,

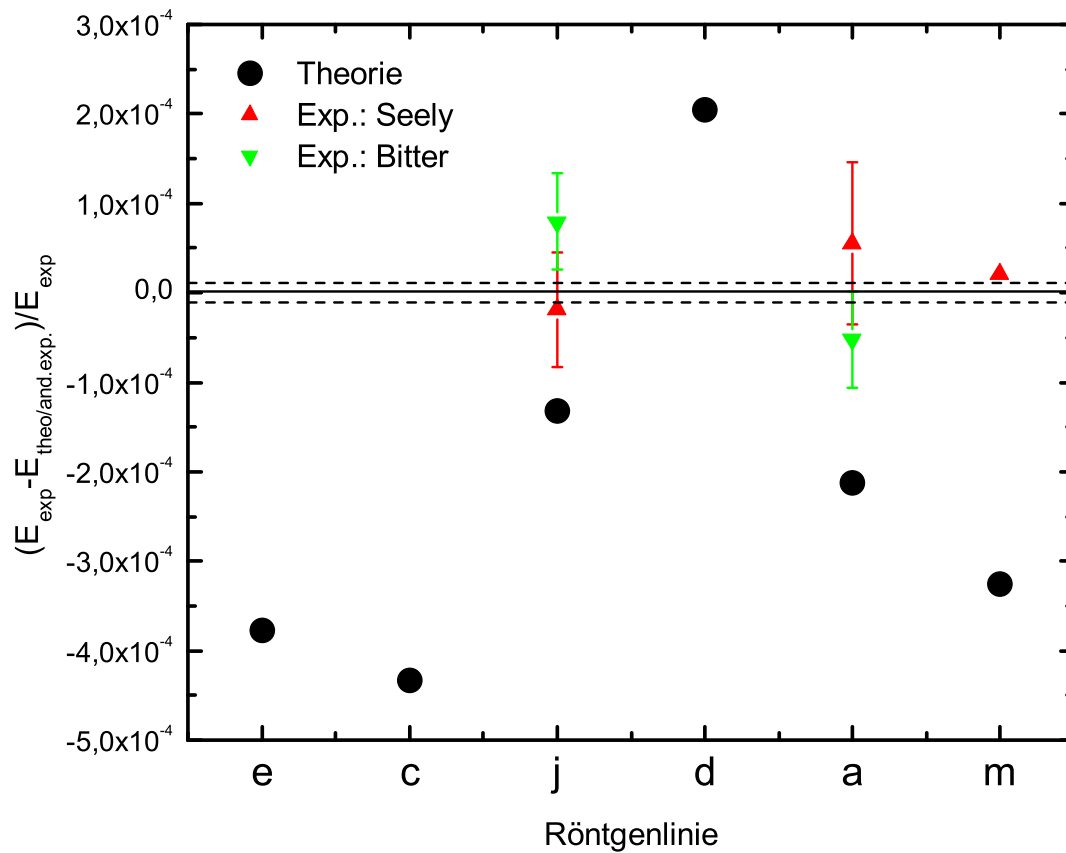
#### 4.4. Experimentelle Resultate



**Abbildung 4.30:** Abweichung der in dieser Arbeit experimentell ermittelten Werte für die  $t$ ,  $r$  und  $q$  Übergangsenergien  $E_{exp}$  in lithiumartigem Eisen von den Werten  $E_{theo}$  theoretischer Vorhersagen: RCI [166], MZ und RMBPT [154] sowie von anderen Experimenten  $E_{and.exp.}$  (Decaux *et al.*: [159, 160]; Bitter *et al.* [161, 162]; Seely *et al.*: [163]). Der MZ Code stellt dabei die nichtrelativistische Version des RMBPT Codes dar [154]. Die gestrichelte Linie gibt das mittlere Unsicherheitsband unserer Messungen an.

dass unsere Unsicherheiten um einen Faktor  $\sim 5$  kleiner sind als die der anderen Experimente.

In Abb. 4.31 ist analog zu Abb. 4.30 die Abweichung der hier experimentell ermittelten Werte für die  $e$ ,  $c$ ,  $j$ ,  $d$ ,  $a$  und  $m$  Übergangsenergien  $E_{exp}$  in lithiumartigem Eisen von den Werten  $E_{theo}$  der theoretischen Vorhersage [158] und denen  $E_{and.exp.}$  anderer Experimente (Bitter *et al.* [161, 162]; Seely *et al.*: [163]) dargestellt. In unseren Messungen wurden die Bragg-Winkel dieser Linien relativ zu denen der  $r$  und  $t$  Linien von  $Fe^{23+}$  bestimmt. Die von anderen Gruppen relativ zur  $w$  Linie vermessenen Werte für die Übergangsenergien wurden für die Darstellung wiederum bezüglich des Wertes korrigiert, der in dieser Arbeit für die  $w$  Energie ermittelt wurde. Über die Güte der Theorie lässt sich hier keine allgemeingültige Aussage treffen. Die verschiedenen Theorien sagen größtenteils höhere Werte für die Übergangsenergien mit Differenzen im Bereich von 1 bis 3 eV zu den in dieser Arbeit ermittelten Werten voraus. Die Resultate dieser Arbeit für die Energien der  $j$ ,  $m$  und  $a$  Übergänge, für die auch Messungen anderer Gruppen vorliegen, Seely *et al.* [163] und Bitter *et al.* [161, 162], stimmen allerdings gut mit diesen weiteren experimentellen Werten



**Abbildung 4.31:** Abweichung der in dieser Arbeit experimentell ermittelten Werte für die  $e$ ,  $c$ ,  $j$ ,  $d$ ,  $a$  und  $m$  Übergangsenergien  $E_{exp}$  in lithiumartigem Eisen von den Werten  $E_{theo}$  der theoretischen Vorhersage [158] und denen  $E_{and.exp.}$  anderer Experimente (Bitter *et al.* [161, 162]; Seely *et al.*: [163]). Die gestrichelte Linie gibt das mittlere Unsicherheitsband unserer Messungen an.

überein.

Insgesamt ist damit zu erkennen, dass die theoretischen Werte für die dielektronischen Satelliten-Linien des  $\text{Fe}^{23+}$  stark streuen, wobei sie größtenteils von den experimentellen Werten weit abweichen. Daher sind weitere unabhängige Messungen notwendig, um ihre Güte zu überprüfen. Die hier vorgestellten Messungen weisen insgesamt eine signifikant verbesserte Genauigkeit auf, und zeigen eine inkonsistente und zum Teil zufällig streuende Qualität der Vorhersagen auf.

# Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit war es, absolute und relative hochpräzise Messungen der Anregungsenergien der wichtigsten elektronischen Übergänge in wasserstoff-, helium- und lithiumartigen Ionen mittlerer Kernladungszahl  $Z$  durchzuführen. Viele der interessantesten atomphysikalischen Effekte wie z.B. relativistische oder QED-Beiträge zu den Energien der Niveaus lassen sich an solchen Systemen, für die diese Effekte mit  $Z^n$  ( $n > 2$ ) skalieren, gut untersuchen. Helium- und lithiumartige Ionen stellen zudem die einfachsten Viel-Körper-Systeme dar, an denen sich die Gültigkeit der verschiedenen theoretischen Ansätze [26–30, 154, 155, 158], die sich besonders in der Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung unterscheiden, überprüfen lassen. Für lithiumartige dielektronische Satelliten-Linien liegen die Werte der theoretischen Vorhersagen um einige hundert meV [154, 166] voneinander entfernt, so dass hier mit Hilfe von präzisen Experimenten eindeutige Schlussfolgerungen möglich sein sollten.

In den Experimenten dieser Arbeit wurde ein Kristallspektrometer mit ebenen Kristallen eingesetzt, wobei die Bond-Methode [40] mit der  $a/b$ -Methode [39] kombiniert wurde. Diese Anordnung erlaubt es, hochpräzise Wellenlängenmessungen ohne und mit Rückgriff auf Referenzlinien, d.h. absolut und relativ, durchzuführen, ohne die einfallende Röntgenstrahlung zu kollimieren, so dass die Intensität der Röntgenstrahlung nicht verringert wird. Um eine Präzision in den Wellenlängenmessungen von 1-2 ppm zu erreichen und damit signifikante Aussagen über die Güte der Theorien treffen zu können, wurden mögliche systematische Fehlerquellen untersucht und minimiert bzw. vermieden. Während in früheren, z.T. eigenen, Arbeiten [51, 86] besonders die Auswirkungen kleiner Abweichungen von der Idealgeometrie auf die Präzision der Wellenlängenmessung detailliert untersucht und diese Fehlerquellen minimiert wurden, wurden jetzt die noch verbleibenden systematischen Fehlerquellen analysiert und verringert. Ein besonderer Schwerpunkt lag hierbei auf der detaillierten Analyse der Linienform in der Detektorebene, welche in früheren Messungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer experimentell nicht bestimmt werden konnte [51] und in die Datenanalyse für alle Linien mit Hilfe eines Skalierungsgesetzes und den theoretisch berechneten Wert für die Lyman- $\alpha_1$  Linie in  $\text{Ar}^{17+}$  [26] einbezogen wurde. Dadurch ergab sich für diese Wellenlängenmessungen selbst bei bekannter Ausrichtung des Kristalls bezüglich der Ionenwolke ein zusätzlicher systematischer Fehler von bis zu  $\sim 4$  ppm bzw. bei unbekannter Ausrichtung des Spektrometers sogar von  $\sim 15$  ppm. In dieser Arbeit konnte von theoretischer Seite aus ein analytischer Ausdruck für die Linienform hergeleitet werden. Dies gelang sowohl für eine Röntgenpunktquelle als auch für eine Röntgenlinienquelle. Der Ausdruck zeigt, dass eine Anordnung mit einer Röntgenpunktquelle einer mit einer Röntgenlinienquelle vorzuziehen ist,

da auf diese Weise die Verschiebung des Peakmaximums des Röntgenreflexes um bis zu Faktor 5, und damit auch die Unsicherheit in dieser und in der Wellenlängenbestimmung reduziert werden können. Um die Linienkrümmung zu minimieren, wurde das Spektrometer daher nicht mehr wie vorher üblich senkrecht zum Elektronenstrahl an der Heidelberg-EBIT, sondern parallel dazu an der FLASH-EBIT montiert. Die Größe der Ionenwolke senkrecht zur Streuebene kann damit vom Kristall aus gesehen von 40 mm auf einige hundert  $\mu\text{m}$  verringert werden. Um den Überlapp zwischen dem Ursprung der Lichtreferenzlinien und der Röntgenlinien in dieser neuen experimentellen Konfiguration weiterhin gewährleisten zu können, musste das Spektrometerstrahlrohr umkonstruiert und einige Komponenten wie z.B. Linsen ausgetauscht und deren Halterungen neu entworfen werden. Um die Linienform für die verwendeten experimentellen Anordnungen, die unterschiedliche Strahlrohrkomponenten nutzen, genaust vorhergesagen zu können, wurde eine Monte-Carlo-Simulation der Bragg-Reflektion der Röntgenstrahlung am Kristall durchgeführt. Für diese wurden die Größen aller Strahlrohrelemente und ihre Abstände zum Fallenzentrum sowie die Größe der Ionenwolke präzise vermessen. Diese gehen als Parameter in die Simulation ein. Die daraus ermittelten weichen von den analytisch hergeleiteten Korrekturwinkeln um bis zu  $\sim 20\%$  voneinander ab, was daran liegt, dass die analytischen Ausdrücke die Strahlrohrelemente nicht berücksichtigen. Verwendet man daher die analytischen Ausdrücke um die Linienform zu bestimmen, verbleibt ein systematischer Fehler in der Wellenlängenbestimmung von bis zu 5 ppm. Die Simulation ergab weiterhin, dass die Verschiebung des Peakmaximums des Röntgenlinienprofils aufgrund der Linienform der Röntgenlinie um  $\sim 10\text{-}20\%$  reduziert werden kann, wenn der kleine Spiegel, der zur Einkopplung der in der  $a/b$ -Methode verwendeten Lichtreferenzlinien in den Strahlengang dient, gegen einen Emulsionsschicht-Strahlteiler, der für Röntgenstrahlung durchlässig ist, ausgetauscht wird. Aus den analytischen Ausdrücken und der Simulation erschloss sich ferner, dass die Verschiebung des Peakmaximums bei nicht idealer Positionierung des Spektrometers deutlich größer ausfällt als bei idealer Ausrichtung. Bei nicht bekannter Position des Kristalls bezüglich der Ionenwolke ergibt sich damit, sofern die Linienform nicht experimentell aufgelöst werden kann, ein systematischer Fehlerbeitrag von bis zu 15 ppm. Um das Spektrometer ideal auszurichten, wurden Laserjustagemethoden entwickelt und eingesetzt. Darüber hinaus wurde von der experimentellen Seite aus das Ziel verfolgt, die Linienform aufzulösen, um die Ungenauigkeit von 0.3 ppm, die aufgrund der nach der Justage noch vorliegenden Unsicherheit in der Spektrometerposition entsteht, weiter zu reduzieren. Dafür war es notwendig, den Drehwinkel der dispersiven Detektorachse bezüglich einer Parallelen zur in die Detektorebene projizierten Gitternormalen zu ermitteln, was durch Analyse von Röntgensummenspektren bzw. über Laserjustagemessungen gelang. So konnte die Linienkrümmung zum ersten Mal experimentell aufgelöst werden, so dass die Ergebnisse der Messungen damit nicht mehr von den theoretisch berechneten Korrekturen zu den Lyman- $\alpha_1$  Wellenlängen und dem oben erwähnten theoretisch hergeleiteten Skalierungsgesetz abhängig sind. Damit konnte der bisherige Beitrag zur relativen Unsicherheit in die Wellenlängenmessung aufgrund der Unsicherheit in der Linienkrümmung von bis zu  $\sim 4$  ppm bis auf  $\sim 0.1$  ppm reduziert werden, was eine Wellenlängenmessung im 1-ppm-Bereich ermöglicht.

Nachdem der Einfluss aller bekannten systematischen Fehlerquellen auf die experimentellen Er-

#### 4.4. Experimentelle Resultate

---

gebnisse abgeschätzt und minimiert werden konnte, wurden mit dem (nahezu) ideal ausgerichteten Spektrometer die Lyman- $\alpha_1$  Wellenlängen des wasserstoffartigen Argons und Schwefels und die  $w$  Wellenlängen des heliumartigen Argons und Schwefels absolut vermessen. Darüber hinaus konnte die Wellenlänge der  $w$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  relativ zu denen der Lyman- $\alpha$  Linien von  $\text{Fe}^{25+}$  bestimmt werden. Außerdem konnten relativ zu den Wellenlängen der  $r$  und  $t$  Linien von  $\text{Fe}^{23+}$ , die relativ zu der  $w$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  ermittelt wurden, die Wellenlängen weiterer dielektronischer Satelliten-Linien des lithiumartigen und berylliumartigen Eisens vermessen werden. Die Ergebnisse der Absolutmessungen der Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien von  $\text{S}^{15+}$ - und  $\text{Ar}^{17+}$ -Ionen, die in dieser Arbeit erzielt wurden, sind mit einem relativen Fehler von 1.75 bzw. 1.46 ppm die präzisesten Absolutmessungen von Röntgenübergangsenergien an wasserstoffartigen Ionen. Für die Lyman- $\alpha_1$  Linie von  $\text{Ar}^{17+}$  unterbietet das Resultat die bis jetzt präziseste an diesen Systemen durchgeführte Messung [53], die auf Referenzlinien zurückgreift, um den Faktor 3.5 in ihrem relativen Fehler. Bei der geringen Messunsicherheit von  $\sim 1.5$  ppm stimmen theoretische und experimentelle Werte für diese Übergangsenergien überein, so dass die Messungen eine erstmalige Überprüfung von Lyman- $\alpha_1$  Übergangsenergien bei dieser hohen Genauigkeit ermöglichen und ihre Verwendung als Referenzstandards im Röntgenbereich nicht nur theoretisch, sondern auch experimentell untermauern.

Für heliumartige Systeme ist festzustellen, dass die Messung der  $w$  Übergangsenergie in  $\text{S}^{14+}$ -Ionen mit einem relativen Fehler von 1.22 ppm bis heute die präziseste Röntgenwellenlängenmessung an hochgeladenen Ionen darstellt. Die Messungen an diesem Übergang in  $\text{Ar}^{16+}$ - und  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen weisen mit 1.54 bzw. 3.34 ppm im Vergleich zu den präzisesten bisherigen Experimenten [43, 64, 115] für diese Systeme um Faktor 1.3 bzw. 9 geringere Fehlerbalken auf. Die Ergebnisse dieser Arbeit für die  $w$  Übergangsenergien in  $\text{S}^{14+}$ ,  $\text{Ar}^{16+}$  und  $\text{Fe}^{24+}$  stimmen innerhalb ihrer Fehlerbalken mit den mittels der UM-, den AO- und den BSQED-Ansätze theoretisch berechneten Werten [27, 28, 30] überein, wogegen sich für den RCI Ansatz von K. T. Cheng [29] ergibt, dass dieser höchstwahrscheinlich nicht geeignet ist, um die Bindungsenergiebeiträge in  $\text{Ar}^{16+}$  und  $\text{Fe}^{24+}$  zu beschreiben. Für die  $w$  Übergangsenergie von  $\text{Fe}^{24+}$ -Ionen ergibt sich experimentell ein um  $\sim 15\sigma$  niedrigerer Wert als in anderen Experimenten, wobei diese Messergebnisse wesentlich höhere Unsicherheiten aufweisen. Diese Tatsache kann eventuell auf systematische Fehler - wie z.B. Kontamination der Röntgenspektren mit Satelliten-Linien - in diesen Experimenten zurückgeführt werden. Die Ergebnisse dieser Arbeit erlauben es, die neuesten Vorhersagen über Zwei-Elektronen und Zwei-Photonen radiative QED-Korrekturen für heliumartige Ionen zu überprüfen. Die Resultate für die  $w$  Übergangsenergie von  $\text{Ar}^{16+}$  bzw.  $\text{S}^{14+}$  sind auf einem Niveau von 5% bzw. 4% des Gesamtbetrages aller Zwei-Elektronen-QED-Effekte auf diese Effekte für die  $^1S_0$ -Grundzustandsenergie sensitiv, d.h. auch auf den Beitrag der „abgeschirmten“ Selbstenergie, der „abgeschirmten“ Vakuumpolarisation und die QED Beiträge durch Austausch von zwei virtuellen Photonen. Außerdem lässt sich der gesamte 1-Elektronen-QED-Beitrag zum angeregten  $^1P_1$  Niveau überprüfen, wobei die experimentelle Genauigkeit hier noch zu gering ist, um den (3 meV bzw. 2 meV großen) Beitrag der Summe aller 2-Elektronen-Effekte zu überprüfen.

Neben den wasserstoff- und heliumartigen Ionen wurden in dieser Arbeit auch dielektronische Satelliten-Linien des lithium- und berylliumartigen Eisens untersucht, wobei die Elektronenstrah-

lenergie von Aufnahme zu Aufnahme variiert wurde. Damit konnten relativ zu der hier vermessenen  $w$  Linie von  $\text{Fe}^{24+}$  bzw. den  $r$  und  $t$  Linien von  $\text{Fe}^{23+}$  die Übergangsenergien von 9 lithiumartigen und 6 berylliumartigen Linien mit einer relativen Unsicherheit im Bereich von  $\sim 12$  ppm bestimmt werden. Es ergibt sich innerhalb der Fehlerbalken jeweils mit einigen experimentellen Werten [159–163] eine gute Übereinstimmung, allerdings weisen jene zumeist vergleichsweise große Unsicherheiten von bis zu  $\sim 90$  ppm auf. Trotzdem sind signifikante, deutliche Diskrepanzen zwischen theoretisch vorhergesagten und experimentell vermessenen Übergangsenergien klar zu erkennen, wobei die für die  $t$ ,  $q$  und  $r$  Übergangsenergien vorliegenden theoretischen Werte der RCI [166] und RMBPT Methode [154] alle niedriger liegen, genauer um bis zu  $\sim 450$  meV. Dies legt die Schlussfolgerung nahe, dass bereits ab einer Kernladungszahl von  $Z = 26$  lithiumartige Ionen nicht zureichend durch die Theorie beschrieben werden. Dies ist ein wichtiges Ergebnis, welches bisherige Beobachtungen aufgrund wesentlich höherer Meßunsicherheiten zwar nahelegten, aber nicht eindeutig beweisen konnten.

Es ist hervorzuheben, dass die Präzision in den Wellenlängenmessungen mit dem Heidelberg-Röntgenspektrometer in zukünftigen Experimenten weiter erhöht werden kann, so dass die Ergebnisse schließlich relative Unsicherheiten im sub-ppm Bereich aufweisen. Der vielversprechendste Ansatz ergibt sich dabei über eine weitere Temperaturstabilisierung des experimentellen Aufbaus, da die Unsicherheit in der Temperatur mit bis zu 1.2 ppm in dieser Arbeit den größten Beitrag zur Unsicherheit liefert. Nichts destotrotz bietet das Röntgenspektrometer auch in seiner jetzigen Konfiguration die Möglichkeit, eine Vielzahl von Ionenspezies absolut und hochpräzise zu vermessen und als Referenzwellenlängen für Relativmessungen bzw. für Mikrokalorimeter zur Verfügung zu stellen. Diese Mikrokalorimeter werden aufgrund ihres großen simultan erfassbaren Spektralbereiches und erwarteter zukünftiger Vergrößerung ihrer Detektorfläche die Möglichkeiten der Röntgenspektroskopie entscheidend erweitern. Für zukünftige röntgenspektroskopische Experimente werden zudem durch die in Deutschland, den USA und Japan aufgebauten Freien-Elektronen-Lasern (FEL) X-FEL [33], LCLS [34] und Spring-8 [35] zum ersten Mal Laser für den Röntgenbereich entwickelt und zugänglich gemacht. Es ist bereits am FLASH FEL gelungen, durch eine Kombination aus einem FEL für weiche Röntgenstrahlen, kurz FLASH, mit einer speziell für diesen Einsatz konstruierten EBIT, FLASH-EBIT, einen inneratomaren Ein-Elektronen-Übergang in  $\text{Fe}^{23+}$  im weichen Röntgenbereich, bei 48.6 eV, durch resonante Ein-Photonen Laserspektroskopie zu untersuchen [36]. Bei schmalbandigem Strahl des Röntgen-Freien-Elektronen-Lasers sind solche Experimente mit hoher Präzision auch im Röntgenbereich denkbar und wünschenswert.

Zusammengefasst stellen die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen die insgesamt präzisesten atomphysikalischen Absolut- und Relativmessungen im Röntgenbereich dar. Sie haben dadurch signifikante Diskrepanzen zur Theorie lithiumartiger Systeme mit  $Z = 26$  aufgedeckt, bzw. die Genauigkeit der Voraussagen für wasserstoffartige und teilweise auch heliumartige Systeme mit einer Unsicherheit unter 2 ppm bestätigt.



# Literaturverzeichnis

- [1] W. Röntgen. *Annalen der Physik und Chemie*. vol. 64 (Johann Ambrosius Barth, 1898).
- [2] M. von Laue. Kritische Bemerkungen zu den Deutungen der Photoframme von Friedrich und Knipping. *Physikalische Zeitschrift* **14**, 421 (1913).
- [3] W. H. Bragg, W. Bragg. The reflection of x-rays by crystals. *Proc. Roy. Soc. A* **88**, 428 (1913).
- [4] European Space Agency. <http://xmm.esac.esa.int/>.
- [5] C. R. Canizares. HETG.  
[http://space.mit.edu/HETG/instrument\\_description.html](http://space.mit.edu/HETG/instrument_description.html).
- [6] National Aeronautics and Space Administration. [http://www.nasa.gov/mission\\_pages/astro-e2/main/index.html](http://www.nasa.gov/mission_pages/astro-e2/main/index.html).
- [7] N. Bohr. On the Constitution of Atoms and Molecules. *Philosophical Magazine* **26**, 1 (1913).
- [8] N. Bohr. The spectra of helium and hydrogen. *Nature* **92**, 231 (1914).
- [9] M. Born. Die statistische Deutung der Quantenmechanik (Nobel-Vortrag 1934). *Physikalische Blätter* **5**, 193 (1955).
- [10] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.* **28**, 1049 (1926).
- [11] W. Heisenberg. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Bewegungen. *Zeitschrift f. Physik* **33**, 879 (1926).
- [12] L. de Broglie. *Untersuchungen zur Quantentheorie*. vol. 10 (Akadem. Verlagsges., 1927).
- [13] W. Heisenberg. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Zeitschrift f. Physik* **43**, 172 (1927).
- [14] P. Dirac. The Quantum Theory of the Electron. *Proc. Roy. Soc.* **A117**, 610 (1928).
- [15] L. de Broglie. *Einführung in die Wellenmechanik* (Akadem. Verlagsges., 1929).

- 
- [16] P. Dirac. A Theory of Electrons and Protons. *Proc. Roy. Soc.* **A126**, 360 (1930).
- [17] P. Dirac. *The principles of quantum mechanics* (Clarendon Press, 1947).
- [18] W. Lamb, R. C. Retherford. Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method. *Phys. Rev.* **72**, 241 (1947).
- [19] F. Dyson. The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman. *Phys. Rev.* **75**, 486 (1949).
- [20] S. Schweber, H. Bethe, F. de Hoffmann. *Mesons and fields*. vol. I (Row, Peterson and Co., 1955).
- [21] J. Jauch, F. Rohrlich. *Theory of photons and electrons* (Addison-Wesley, 1955).
- [22] R. Feynman. *Quantum Electrodynamics* (Addison Wesley, 1962).
- [23] G. Källén. *Quantum Electrodynamics* (Springer-Verlag, 1972).
- [24] J. Schwinger. Quantum Electrodynamics-An Individual View. *J. Physique* **43** p. 409 (1982).
- [25] S. Schweber. *QED and the men who made it. Dyson, Feynman, Schwinger and Tomonaga* (Princeton University Press, Princeton, 1994).
- [26] W. Johnson, G. Soff. The Lamb shift in hydrogen-like atoms,  $1 < Z < 110$ . *At. Data Nucl. Data Tables* **33**, 405 (1985).
- [27] G. Drake. Theoretical energies for the  $n = 1$  and 2 states of the helium isoelectronic sequence up to  $Z=100$ . *Can. J. Phys.* **66**, 586 (1988).
- [28] D. Plante, W. Johnson, J. Sapirstein. Relativistic all-order many-body calculations of the  $n = 1$  and  $n = 2$  states of heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **49**, 3519 (1994).
- [29] K. Cheng, M. H. Chen. Energy levels of the low-lying states of mid- $Z$  heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **61**, 044503 (2000).
- [30] A. Artemyev, V. Shabaev, V. Yerokhin, G. Plunien, G. Soff. QED calculation of the  $n = 1$  and  $n = 2$  energy levels in He-like ions. *Phys. Rev. A* **71**, 062104 (2005).
- [31] P. Mokler, *et al.*. Highly ionized, decelerated heavy ions. *Nuc. Inst. Meth. in Phys. Res. B* **10**, 58 (1985).
- [32] J. D. Gillaspay. Highly charged ions. *J. Phys. B* **34**, R93 (2001).
- [33] <http://xfel.desy.de/>.
- [34] <http://lcls.slac.stanford.edu/>.
- [35] <http://www-xfel.spring8.or.jp/>.

- [36] S. W. Epp, *et al.*. Soft X-Ray Laser Spectroscopy on Trapped Highly Charged Ions at FLASH. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 183001 (2007).
- [37] G. Hölzer, M. Fritsch, M. Deutsch, J. Härtwig, E. Förster.  $K \alpha_{1,2}$  and  $K \beta_{1,3}$  emission lines of the  $3d$  transitionmetals. *Phys. Rev. A* **56**, 4554 (1997).
- [38] N. Shigeoka, *et al.*. Experimental investigation of the origin of the Ti  $K\alpha$  satellites. *Phys. Rev. A* **69**, 052505 (2004).
- [39] J. Braun, H. Bruhns, M. Trinczek, J. Crespo López-Urrutia, J. Ullrich. Novel technique for high-precision Bragg-angle determination in crystal x-ray spectroscopy. *Rev. Sci. Instrum.* **76**, 073105 (2005).
- [40] W. Bond. Precision lattice constant determination. *Acta Cryst.* **13**, 814 (1960).
- [41] J. Flowers, H. A. Klein, D. Knight, H. Margolis. Hydrogenic Systems for Calculable Frequency Standards: Status and Options. NPL Report CBTLM 11 (2001).
- [42] D. Anagnostopoulos, D. Gotta, P. Indelicato, L. Simons. Low-Energy X-Ray Standards from Hydrogenlike Pionic Atoms. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 240801 (2003).
- [43] H. Bruhns, J. Braun, K. Kubicek, J. Crespo López-Urrutia, J. Ullrich. Testing QED Screening and Two-Loop Contributions with He-Like Ions. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 113001 (2007).
- [44] N. Bohr. On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine* **26**, 1 (1913).
- [45] N. Bohr. The spectra of helium and hydrogen. *Nature* **92**, 231 (1914).
- [46] M. Fischer, *et al.*. New Limits on the Drift of Fundamental Constants from Laboratory Measurements. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 230802 (2004).
- [47] M. Fischer. “Höchstauflösende Laserspektroskopie an atomarem Wasserstoff”. Ph.D. thesis. LMU München (2004).
- [48] M. Niering, *et al.*. Measurement of the Hydrogen  $1S - 2S$  Transition Frequency by Phase Coherent Comparison with a Microwave Cesium Fountain Clock. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5496 (2000).
- [49] C. Chantler. Discrepancies in quantum electrodynamics. *Radiation Physics and Chemistry* **71**, 611 (2004).
- [50] P. Mohr, B. Taylor, D. Newell. CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2008. *Reviews of Modern Physics* **80**, 635 (2008).
- [51] J. Braun. “Präzisionsröntgenspektroskopie zur absoluten Wellenlängenbestimmung an hochgeladenen Ionen”. Diss. Max-Planck-Institut für Kernphysik (2006).
- [52] J. Briand, *et al.*. Spectroscopy of hydrogenlike and heliumlike argon. *Phys. Rev. A* **28**, 1413 (1983).

- [53] H. Beyer, R. Deslattes, F. Folkmann, R. LaVilla. Determination of the  $1s$  Lamb shift in one-electron argon recoil ions. *J.Phys.B: At. Mol. Phys.* **18**, 207 (1985).
- [54] M. Tavernier, J. P. Briand, P. Indelicato, D. Liesen, P. Richard. Measurement of the ( $1s$ ) Lamb shift of hydrogen-like krypton. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18**, L327 (1985).
- [55] T. Stöhlker, *et al.*. Ground state transitions in one- and two-electron Bi projectiles. *Phys. Lett. A* **168**, 285 (1992).
- [56] H. Beyer, *et al.*. X-rays from radiative electron capture of free cooling electrons for precise Lamb-shift measurements at high  $Z$ :  $\text{Au}^{78+}$ . *Phys. Lett. A* **184**, 435 (1994).
- [57] G. Hölzer, *et al.*. Absolute wavelength measurement of the Lyman- $\alpha$  transitions of hydrogenic  $\text{Mg}^{11+}$ . *Phys. Rev. A* **57**, 945 (1998).
- [58] J. Tschischgale, *et al.*. Absolute wavelength measurement of the Lyman- $\alpha$  transition of hydrogen-like silicon. *Can. J. Phys.* **80**, 867 (2002).
- [59] A. Gumberidze, *et al.*. Electron-Electron Interaction in Strong Electromagnetic Fields: The Two-Electron Contribution to the Ground-State Energy in He-like Uranium. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 203004 (2004).
- [60] T. Stöhlker, *et al.*.  $1s$  Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium Measured on Cooled, Decelerated Ion Beams. *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000).
- [61] A. Gumberidze, *et al.*. Quantum Electrodynamics in Strong Electric Fields: The Ground-State Lamb Shift in Hydrogenlike Uranium. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 223001 (2005).
- [62] T. Stöhlker, *et al.*. Quantum Electrodynamics in Extreme Fields: Precision Spectroscopy of High- $Z$  H-like Systems. *Lect. Notes Phys.* **745**, 157 (2008).
- [63] A. Gabriel. Dielectronic satellite spectra for highly-charged helium-like ion lines. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **160** (1972).
- [64] P. Beiersdorfer, M. Bitter, S. von Goeler, K. Hill. Experimental study of the x-ray transitions in the heliumlike isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A* **40**, 150 (1989).
- [65] P. Beiersdorfer, T. W. Phillips, K. L. Wong, R. E. Marrs, D. A. Vogel. Measurement of level-specific dielectronic-recombination cross sections of heliumlike Fe xxv. *Phys. Rev. A* **46**, 3812 (1992).
- [66] S. MacLaren, *et al.*. Precision measurement of the  $K\alpha$  transitions in heliumlike  $\text{Ge}^{30+}$ . *Phys. Rev. A* **45**, 329 (1992).
- [67] H. Haken, H. Wolf. *Atom- und Quantenphysik: Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*. vol. 8., aktualisierte u. erw. Aufl. (Springer-Lehrbuch, 2004).
- [68] G. Kirchhoff, R. Bunsen. Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung. *Dtsch. phys. Ges.* **2**, 202 (1900).

- [69] M. Planck. Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspektrum. *Ann. Phys.* **4**, 553 (1901).
- [70] G. Kirchhoff. *Abhandlungen über Emission und Absorption*. vol. 1. unveränd. Abdr. (Akademische Verlagsges., 1921).
- [71] G. Kirchhoff, R. Bunsen. *Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen : (1860)*. vol. 2. Aufl., Reprint [der Ausg.] Leipzig, Engelmann (Thun, 1996).
- [72] G. Kirchhoff, R. Bunsen. Über zwei neue durch die Spectralanalyse aufgefundenene Alkalimetalle, das Caesium und Rubidium. *Sitzungsberichte der kaiserl. Akademie der Wissensch. Mathematisch-naturwissenschaftl. Classe* **43** (1861).
- [73] J. Balmer. Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffes. *Verhandlungen der Naturforschenden Gesellschaft* **7** (1885).
- [74] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë. *Quantenmechanik 1* (De Gruyter, Berlin, 1999). second edn.
- [75] A. Sommerfeld. *Atombau und Spekrallinien* (Vieweg und Sohn Verlagsgesellschaft, Braunschweig, 1978).
- [76] B. Brandsen, C. Joachain. *Physics of atoms and molecules* (Pearson Education Limited, 2004). second edn.
- [77] M. Eides, H. Grotch, V. Shelyuto. Theory of light hydrogenlike atoms. *Physics Reports* **342**, 63 (2001).
- [78] W. Pauli. Zur Frage der theoretischen Deutung der Satelliten einiger Spektrallinien und ihrer Beeinflussung durch magnetische Felder. *Naturwissenschaften* **12**, 741 (1924).
- [79] S. Goudsmit. Theory of Hyperfine Structure Separations. *Phys. Rev.* **37**, 663 (1931).
- [80] S. Goudsmit. Nuclear Magnetic Moments. *Phys. Rev.* **43**, 636 (1933).
- [81] E. Fermi, E. Segrè. Zur Theorie der Hyperfeinstruktur. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **82**, 729 (1933).
- [82] G. E. Uhlenbeck, S. Goudsmit. Spinning Electrons and the Structure of Spectra. *Nature* **117**, 264 (1926).
- [83] C. Anderson. The Positive Electron. *Physical Review* **43**, 491 (1933).
- [84] R. Krüken. <http://www.e12.physik.tu-muenchen.de/stud/vorlesungen/kruecken/KT-Skript/14-QED.pdf>.
- [85] P. Mohr, G. Plunien, G. Soff. QED corrections in heavy atoms. *Phys. Rep.* **293**, 227 (1998).

- 
- [86] K. Kubicek. Absolute determination of the  $n = 1$  to  $n = 2$  transition energies in hydrogen- and helium-like  $S^{14+}$ ,  $S^{15+}$ ,  $Ar^{16+}$  and  $S^{17+}$  ions. Master's thesis. Universität Göttingen (2006).
- [87] J. Sapirstein. Higher-Order Binding Corrections to the Lamb Shift. *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1723 (1981).
- [88] P. Mohr. Quantum electrodynamics of high-Z few-electron atoms. *Phys. Rev. A* **32**, 1949 (1985).
- [89] W. Hollik. [www.uniskripte.de/skripte/physik/phy\\_dok001.ps.gz](http://www.uniskripte.de/skripte/physik/phy_dok001.ps.gz).
- [90] E. A. Uehling. Polarization Effects in the Positron Theory. *Phys. Rev.* **48**, 55 (1935).
- [91] R. Serber. Linear Modifications in the Maxwell Field Equations. *Phys. Rev.* **48**, 49 (1935).
- [92] E. Wichmann, N. M. Kroll. Vacuum Polarization in a Strong Coulomb Field. *Phys. Rev.* **96**, 232 (1954).
- [93] V. Shabaev. Finite nuclear size corrections to the energy levels of the multicharged ions. *J. Phys. B* **26**, 1103 (1993).
- [94] R. Soria Orts. "Isotopic effect of B-like and Be-like argon ions". Ph.D. thesis. Universität Frankfurt (2005).
- [95] V. Shabaev, *et al.*. Recoil correction to the ground-state energy of hydrogenlike atoms. *Phys. Rev. A* **57**, 4235 (1998).
- [96] G. Plunien, B. Müller, W. Greiner, G. Soff. Nuclear polarization contribution to the Lamb shift in heavy atoms. *Phys. Rev. A* **39**, 5429 (1989).
- [97] H. Bruhns. High precision x-ray spectroscopy on highly charged argon ions. Ph.D. thesis. Universität Heidelberg. Germany (2005).
- [98] J. P. Briand, M. Tavernier, P. Indelicato, R. Marrus, H. Gould. High-Precision Spectroscopic Studies of Lyman  $\alpha$  Lines of Hydrogenlike Iron: A Measurement of the 1s Lamb Shift. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 832 (1983).
- [99] J. Briand, *et al.*. Spectroscopic study of hydrogenlike and heliumlike xenon ions. *Europhys. Lett.* **9**, 225 (1989).
- [100] W. Pauli. *Nobel Lecture (The Nobel Prize in Physics 1945)* (1946).
- [101] K. S. E. Eikema, W. Ubachs, W. Vassen, W. Hogervorst. Lamb shift measurement in the  $1^1S$  ground state of helium. *Phys. Rev. A* **55**, 1866 (1997).
- [102] S. D. Bergeson, *et al.*. Measurement of the He Ground State Lamb Shift via the Two-Photon  $1^1S - 2^1S$  Transition. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3475 (1998).

- [103] G. Drake, W. Martin. Ionization energies and quantum electrodynamic effects in the lower  $1sns$  and  $1snp$  levels of neutral helium ( $4\text{He I}$ ). *Can. J. Phys.* **76**, 679 (1998).
- [104] H. Bethe, E. Salpeter. *Quantum Mechanics of One- And Two-Electron Atoms* (Dover Publ Inc, Dover, 2008). dover 2008 edn.
- [105] P. Indelicato, *et al.*. Relativistic Calculations for Trapped Ions. *Hyperfine Interactions* **132**, 347 (2001).
- [106] K. Cheng, M. Chen, W. Johnson, J. Sapirstein. Relativistic configuration-interaction calculations for the ground state and  $n = 2$  singlet states in heliumlike ions. *Phys. Rev. A* **50**, 247 (1994).
- [107] K. Kubicek, H. Bruhns, J. Braun, J. C. López-Urrutia, J. Ullrich. Two-loop QED contributions tests with mid-Z He-like ions. *Jour. Phys. Conf. Ser.* **163**, 012007 (2009).
- [108] L. Schleinkofer, F. Bell, H.-D. Betz, G. Trollmann, J. Rothermel. Precision wavelength determination of  $2^1P_1 - 1^1S_0$  and  $2^3P_1 - 1^1S_0$  transitions in helium-like sulfur ions. *Phys. Scr.* **25**, 917 (1982).
- [109] R. Deslattes, H. Beyer, F. Folkmann. Precision x-ray wavelength measurements in helium-like argon recoil ions. *J.Phys.B: At. Mol. Phys.* **17**, L689 (1984).
- [110] C. Chantler, *et al.*. Absolute measurement of the resonance line in heliumlike vanadium on an electron beam ion trap. *Phys. Rev. A* **62**, 042501 (2000).
- [111] J. Briand, M. Tavernier, R. Marrus, J. Declaux. High precision spectroscopic study of heliumlike iron. *Phys. Rev. A* **29**, 3143 (1984).
- [112] K. Widmann, P. Beiersdorfer, V. Decaux. Measurements of the  $K\alpha$  transition energies of heliumlike krypton. *Phys. Rev. A* **53**, 2200 (1996).
- [113] P. Indelicato, J. P. Briand, M. Tavernier, D. Liesen. Experimental study of relativistic correlations and QED effects in heliumlike krypton ions. *Z. Phys. D* **2**, 249 (1986).
- [114] E. Aglitsky, P. Antsiferov, S. Mandelstam, A. P. and U.I. Safronova, S. Ulitin. Comparison of Calculated and Measured Wavelengths of Resonance Transitions in He-Like Ions for  $Z = 16 - 39$ . *Phys. Scr.* **38**, 136 (1988).
- [115] J.P.Briand, M.Tavernier, R. Marrus, J. Desclaux. High precision spectroscopic study of heliumlike iron. *Phys. Rev. A* **29**, 3143 (1984).
- [116] P. Mokler. Spectroscopy of Heavy Few-Electron Ions. *Phys. Scr.* **36**, 715 (1987).
- [117] H. Berry, M. Hass. Beam-Foil Spectroscopy. *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **32**, 1 (1982).
- [118] S. Bashkin. Optical Spectroscopy with Van de Graaff Accelerators. *Nucl. Instr. Meth.* **28**, 88 (1964).

- [119] N. Bohr. Scattering and stopping of fission fragments. *Phys. Rev.* **58**, 654 (1940).
- [120] S. Bashkin. Beam Foil Spectroscopy. *Appl. Optics* **7**, 2341 (1968).
- [121] P. H. Heckmann, *et al.*. Lifetimes of O VI, O VII and O VIII states by the beam-foil technique. *Physics Letters A* **57**, 126 (1976).
- [122] H.-D. Betz, D. Rösenthaller, J. Rothermel. Production of Highly Excited States of Fast Ions Emerging from Solid Targets. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 34 (1983).
- [123] E. Trabert, B. C. Fawcett. Identification of satellite lines in the X-ray spectrum of foil-excited silicon. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **12**, L441 (1979).
- [124] P. Richard, *et al.*. Measurement of the  $1s$  Lamb shift in hydrogenlike chlorine. *Phys. Rev. A* **29**, 2939 (1984).
- [125] H. F. Beyer, R. Mann, F. Folkmann, P. H. Mokler. X-ray and Auger transitions in highly ionised argon recoil ions. *J. Phys. B* **15**, 3853 (1982).
- [126] S. Kelbch, *et al.*. Multiple ionisation of Ne, Ar, Kr and I by nearly relativistic U ions. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **19**, L47 (1986).
- [127] R. Deslattes, R. Schuch, E. Justiniano. Application of decelerated bare nuclei to precision spectroscopy of one-electron ions. *Phys. Rev. A* **32**, 1911 (1985).
- [128] E. Källne, J. Källne, P. Richard, M. Stöckli. Precision measurement of the H-like x-ray spectrum of Cl and the  $1s$  Lamb shift. *J. Phys. B.: At. Mol. Phys.* **17**, L115 (1984).
- [129] E. Marmar, J. Rice, E. Källne, J. Källne, R. LaVilla. Precision measurement of the  $1s$  Lamb shift in hydrogenlike argon. *Phys. Rev. A* **33**, 774 (1986).
- [130] D. Klöpfel, G. Hölzer, E. Förster, P. Beiersdorfer. A quartz quasimonolith for absolute x-ray wavelength measurements. *Rev. Sci. Instrum.* **68**, 3669 (1997).
- [131] S. Knoop, *et al.*. Single-electron capture in keV  $\text{Ar}^{15+} \dots^{18+} + \text{He}$  collisions. *J. Phys. B* **41**, 195203 (2008).
- [132] W. Meissl, *et al.*. Highly Charged Ion-Induced Potential Electron Emission from Clean Au(111): Dependence on the Projectile Angle of Incidence. *Nucl. Instr. Meth. B* **256**, 520 (2007).
- [133] A. El-Said, *et al.*. Creation of Surface Nanostructures by Irradiation with Slow, Highly Charged Ions. *Radiation Effects and Defects in Solids* **162**, 467 (2007).
- [134] W. Meissl, *et al.*. Electron Emission from Insulating Targets Irradiated by Slow Highly Charged Ions. *Surf. Sci. Nanotech* **6**, 54 (2008).
- [135] M. Simon, *et al.*. Photoionization of ions in arbitrary charge states by synchrotron radiation in an electron beam ion trap. *Jour. Phys. Conf. Ser.* **194**, 012009 (2009).



- [136] M. C. Simon, *et al.*. Photoionization of  $N^{3+}$  and  $Ar^{8+}$  in an electron beam ion trap by synchrotron radiation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **43**, 065003 (2010).
- [137] V. Mäckel. Unbekannt. Ph.D. thesis. Universität Heidelberg (2010).
- [138] S. Moseley, J. C. Mather, D. McCammon. Thermal detectors as x-ray spectrometers. *J. Appl. Phys.* **56**, 1257 (1984).
- [139] I. Kink, *et al.*. Microcalorimeter/EBIT Measurements of X-ray Spectra of Highly Charged Ions. *Physica Scripta* **2001**, 454 (2001).
- [140] A. Fleischmann, M. Linck, T. Daniyarov, H. Rotzinger, C. E. G. Seidel. Metallic magnetic calorimeters: detectors for high resolution x-ray spectroscopy. *Nucl. Instrum. Meth. A* **520**, 27 (2004).
- [141] C. Enss. Calorimetric Detection of X-Rays. *Journal of Low Temperature Physics* **124**, Nos. 1/2 (2001).
- [142] J. Braun. "Entwicklung eines Kristallspektrometers für röntgenspektroskopische Untersuchungen an hochgeladenen Ionen". Diplomarbeit. Universität Heidelberg (2003).
- [143] B. Henke, E. Gullikson, J. Davis. X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at  $E=50-30000$  eV,  $Z=1-92$ . *At. Data Nucl. Data Tables* **54**, 181 (1993).
- [144] P. Ewald. *Advances in X-Ray Spectroscopy* (Pergamon, 1982).
- [145] H. H. Johann. Die Erzeugung lichtstarker Röntgenspektren mit Hilfe von Konkavkristallen. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei. Z. Phys.* **69**, 185 (1931).
- [146] D. F. Anagnostopoulos, *et al.*. *Lecture Notes in Physics The Hydrogen Atom Charged Pion Mass Determination and Energy - Calibration Standards Based on Pionic X-ray Transitions* (Springer, 2001).
- [147] R. Deslattes, R. Schuch, E. Justitano. Application of decelerated bare nuclei to precision spectroscopy of one-electron ions. *Phys. Rev. A* **32**, 1911 (1985).
- [148] <http://www.fz-juelich.de/ikp/exotic-atoms/index.php>.
- [149] D. Gotta, *et al.*. Precision Measurements in Pionic Hydrogen Paul Scherrer Institut, CH-5232 Villigen, Switzerland. *Physica Scripta* **2003**, 94 (2003).
- [150] L. von Hámos. Röntgenspektroskopie und Abbildung mittels gekrümmter Kristallreflektoren I. Geometrisch-optische Betrachtungen. *Ann. Phys.* **17(5)**, 717 (1933).
- [151] L. von Hámos. Röntgenspektroskopie und Abbildung mittels gekrümmter Kristallreflektoren II. Beschreibung eines fokussierenden Spektrographen mit punktgetreuer Spaltabbildung. *Ann. Phys.* **19(5)**, 253 (1934).

- [152] J. Flowers, H. Klein, H. Klein, D. Knight, H. Margolis. Hydrogenic Systems for Calculable Frequency Standards: Status and Options. *NPL Report CBTLM* **11** (2001).
- [153] A. Gabriel. Dielectronic satellite spectra for highly-charged helium-like ion lines. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **160**, 99 (1972).
- [154] U. Safronova, A. Safronova, W. Johnson. Relativistic many-body calculations of dielectronic satellite spectra created by autoionizing  $1s2l2l'$  states in Li-like ions. *J.Phys.B.: At. Mol. Phys.* **43**, 1 (2010).
- [155] A. S. Shlyaptseva, *et al.*. Polarization-dependent spectra of x-ray dielectronic satellite lines of Be-like Fe. *Phys. Rev. A* **57**, 888 (1998).
- [156] L. A. Vainshtein. Wavelengths and transition probabilities of satellites to resonance lines of H- and He-Like Ions. *Atomic Data and Nuclear Tables* **21** (1978).
- [157] M. Tarbutt, R. Barnsley, N. Peacock, J. Silver. Wavelength measurements of the satellite transitions to the  $n = 2$  resonance lines of helium-like argon. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34**, 3979 (2001).
- [158] L. A. Vainshtein, U. I. Safronova. Wavelengths and transition probabilities of satellites to resonance lines of H- and He-like ions. *At. Data Nucl. Data Tables* **21**, 49 (1978).
- [159] V. Decaux, P. Beiersdorfer, S. Kahn, V. Jacobs. High resolution measurement of the  $K\alpha$  spectrum of Fe XXVXXVIII : New spectral diagnostics of nonequilibrium astrophysical plasmas. *Astrophys. J.* **482**, 1076 (1997).
- [160] V. Decaux, V. L. Jacobs, P. Beiersdorfer, D. A. Liedahl, S. M. Kahn. Modeling of high-resolution  $K\alpha$  emission spectra from Fe XVIII through Fe XXIV. *Phys. Rev. A* **68**, 012509 (2003).
- [161] M. Bitter, *et al.*. Dielectronic Satellite Spectrum of Heliumlike Iron (Fe XXV). *Phys. Rev. Lett.* **43**, 129 (1979).
- [162] M. Bitter, *et al.*. Measurements of the intercombination and forbidden lines from the spectra of helium-like ions in tokamaks and electron beam ion traps. *Can. J. Phys.* **86**, 291 (2008).
- [163] J. Seely, U. Feldman. High-resolution observations of x-ray transitions in Fe XXV-XXIII. *J. Phys.: At. Mol. Phys.* **18**, L797 (1985).
- [164] P. Beiersdorfer, *et al.*. High-resolution measurements, line identification, and spectral modeling of the  $K\alpha$  transitions in Fe XVIII-Fe XXV. *Astrophys. J.* **409**, 846 (1993).
- [165] V. Mäkel. Spektroskopische Untersuchung dielektronischer Resonanzen von hochgeladenen Ionen. Master's thesis. Universität Heidelberg (2006).
- [166] H. Hou, G. Jiang, F. Hu, L. Hao. Relativistic configuration interaction calculations for the  $K\alpha$  and  $K\beta$  X-ray satellites of iron. *At. Data Nucl. Data Tables* **95**, 125 (2009).

# **Erklärung**

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

Heidelberg, den 26. April 2010

Katharina Kubiček

